



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Estimación de dinámicas y control de un proceso de
digestión anaerobia mediante redes neuronales**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

BIÓLOGO

P R E S E N T A:

VÍCTOR ALEJANDRO REZA LÓPEZ



**DIRECTOR DE TESIS:
DR. IVAN VLADIMIR MEZA RUÍZ**

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Quisiera agradecer a mi tía Mónica y a mi hermana Adriana por su constante apoyo durante mi desarrollo personal y académico. También quiero agradecer a mi novia Helena por estar conmigo en buenos y malos momentos, así como su ayuda en las correcciones de este trabajo.

Adicionalmente, quiero agradecer al Instituto Politécnico Nacional y a la Universidad Nacional Autónoma de México por mi formación como ingeniero y biólogo, respectivamente. Además, agradezco al Departamento de Control Automático del Centro de Investigaciones y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, por mi desarrollo académico en la especialidad de Control Automático.

Por último, agradezco al Dr. Ivan Vladimir Meza Ruíz por su asesoría y apoyo en el desarrollo de este trabajo.

Resumen

Actualmente, la digestión anaerobia es un bioproceso con aplicaciones de gran interés económico, energético y ecosistémico a nivel mundial. Existen diversos enfoques físicos, químicos y biológicos para optimizar dicho proceso, destacando el control y monitoreo robusto ante las dinámicas desconocidas del sistema. Dicha dinámicas, asociadas a las tasas de reacción y a la transferencia líquido-gas del bioproceso, son consecuencia de diversos fenómenos ecológicos y evolutivos inherentes al sistema y deben ser estimadas para ser rechazada y por ende, garantizar la manipulación adecuada de alguna variable del proceso. Así, el presente trabajo busca estimar dichas dinámicas desconocidas utilizando redes neuronales recurrentes. Para ello, se utilizó el modelo de digestión anaerobia número dos para describir la dinámica del bioproceso. Después, se probó que el bioproceso en lazo cerrado con el controlador por rechazo activo de perturbaciones acoplado a una red neuronal recurrente, garantiza que las trayectorias solución del error de seguimiento son uniformemente últimamente acotadas. Por último, los resultados numéricos del entrenamiento de la red neuronal más la simulación del bioproceso en lazo abierto y cerrado tienen un buen comportamiento con el controlador-observador propuesto.

Abstract

Currently, anaerobic digestion is a bioprocess with applications of great economic, energetic, and ecosystem interest worldwide. Different physical, chemical, and biological perspectives are used for optimizing this bioprocess, where controlling and monitoring bioreactors against the system's unknown dynamics is highlighted. These dynamics, related to reaction rates and liquid-gas transfer rate, are consequences of the bioprocess's inherent ecological and evolutive phenomena and must be estimated in order to be rejected and, consequently, guarantee the adequate manipulation of any variable of interest in the bioprocess. Hence, this work estimates these unknown dynamics by applying a recurrent neural network. In the first place, the anaerobic digestion model number two describes the bioprocess dynamics. Later, it was proved that the bioprocess in the closed loop with the active disturbance rejection control coupled with the neural network guarantees that the trajectory solution of the error is uniformly ultimately bounded. Lastly, the numerical results, linked with the training of the neuronal network plus the bioprocess simulation in an open and closed loop, show a good performance of the control-based observer proposed.

Índice general

Introducción	1
Estado del arte	3
Motivación	5
Hipótesis	6
Objetivo	6
Estructura de la tesis	7
1. Modelado del proceso de digestión anaerobia	9
1.1. Conceptos preliminares	9
1.2. Introducción a la digestión anaerobia	10
1.2.1. Microbiología	12
1.2.2. Fases de la biorreacción	17
1.2.3. Condiciones de operación	20
1.3. Modelado del bioproceso	21
1.3.1. Caso general	21
1.3.2. Proceso de digestión anaerobia	25
1.3.3. Incertidumbres y perturbaciones del modelo	27
1.4. Enfoque evolutivo	29
2. Control por rechazo activo de perturbaciones	33
2.1. Conceptos preliminares	33
2.2. Control ADRC	43
2.2.1. Diferenciador de trayectorias	45
2.2.2. Observador de estados extendido	45
2.2.3. Algoritmo de control	51
2.3. Análisis de estabilidad en lazo cerrado	51
2.4. Comentarios adicionales	52
3. Redes neuronales recurrentes	55
3.1. Conceptos preliminares	55
3.2. Introducción a redes neuronales artificiales	57
3.2.1. Redes neuronales prealimentadas	59
3.2.2. Redes neuronales recurrentes	59
3.3. Técnicas de regulación para una RNN	63
3.4. Aplicación en la digestión anaerobia	65

4. Entrenamiento y simulación de la RNN	67
4.1. Metodología	67
4.2. Resultados numéricos	70
4.2.1. Entrenamiento de la red neuronal	70
4.2.2. Simulación del bioproceso	73
4.3. Discusión de los resultados	81
Conclusión	85
Trabajo a futuro	87
Bibliografía	89
A. Demostración del Teorema 2.3	97
B. Parámetros, entradas y condiciones iniciales para las simulaciones	99

Introducción

Actualmente, dos temas fundamentales en el futuro de la humanidad es el agua y el combustible. Por un lado, el agua potable es un recurso fundamental para los seres vivos que hoy en día escasea por el calentamiento global y a las malas prácticas de administración gubernamental (Esparza, 2014; Mosley, 2015). Peor aún, los pocos cuerpos de agua potable del planeta deben ser tratados porque son frecuentemente contaminados por diversas actividades antropocéntricas (Singh, Yadav, Pal, y Mishra, 2020). Entre los contaminantes reportados que deben ser removidos del agua, consecuencia del desecho doméstico y (agro)industrial, son desechos orgánicos, detergentes, residuos con altas concentraciones de nitratos y fosfatos, pesticidas, desechos radiactivos, antibióticos, diversos metales pesados, micro-plásticos, compuestos halogenados, plaguicidas, grasas y aceites (Aziz, Sengar, Basheer, Farooqi, y Isa, 2022; Gerardi, 2003; Jiménez, 2001; Madhav y cols., 2020; Singh y cols., 2020). Por otro lado, muchas actividades humanas dependen del uso de combustibles fósiles, un recurso no renovable y altamente demandado que sera escaso a finales del siglo (Abas, Kalair, y Khan, 2015). Aunado a lo anterior, diversos estudios demuestran que sus efectos han provocado la reducción de la esperanza de vida humana, el incremento en la temperatura del planeta, la reducción de la biodiversidad, así como el aumento de sequías (Barbir, Veziroğlu, y Plass Jr, 1990; Lelieveld y cols., 2019). Por ende, es necesario crear combustibles renovables de bajo impacto ambiental que pueda sustituir a los combustibles fósiles, como los biocombustibles (Abas y cols., 2015). Este último, a pesar de que preocupa su aplicación al poder comprometer el suministro mundial de alimentos (Pimentel y cols., 2008), actualmente se pueden emplear desechos orgánicos domésticos y (agro)industriales, así como de plantas y algas no comestibles, para la producción de diversos combustibles como bioetanol, biodiesel y biohidrógeno (Abideen y cols., 2014; Balagurusamy y Chandel, 2020; Henrich, Dahmen, Dinjus, y Sauer, 2015; Vasco-Correa, Khanal, Manandhar, y Shah, 2018; Zhang, Loh, y Zhang, 2019).

La digestión anaerobia es un bioproceso compuesto por un conjunto de reacciones químicas complejas mediadas por diversas bacterias y arqueas, que descomponen la materia orgánica en ausencia de oxígeno, produciendo biogas y una suspensión acuosa o lodo (Acosta y Abreu, 2005; Adekunle, Okolie, y cols., 2015). Cabe destacar que por sus múltiples aplicaciones, actualmente la digestión anaerobia es de gran interés económico, energético y ecosistémico a nivel mundial que puede resolver los problemas de tratamiento de aguas contaminadas y la producción de biocombustibles (Vasco-Correa y cols., 2018).

La principal aplicación de la digestión anaerobia es el tratamiento de aguas residuales y desechos sólidos, cuyo objetivo es disminuir la concentración de sustancias volátiles del lodo, a partir de la degradación de compuestos orgánicos y otras sustancias químicas provenientes de desechos municipales e industriales, como acetona, glicerol, ácidos orgánicos, formaldehído, aminoácidos, etcétera (Gerardi, 2003). Aunado a lo anterior, los derivados de la digestión anaerobia pueden ser usados para la producción de alcoholes, furanos y biofertilizantes, así como fuente de nutrientes para cultivos de algas o alimentación de peces (Vasco-Correa y cols., 2018). Más aún, este bioproceso es investigado para la producción de biogas, que puede ser usado en la producción de diversos químicos y/o combustible y cuyos efectos son menos nocivos en comparación a los combustibles fósiles (Vasco-Correa y cols., 2018). En México, la implementación de esta tecnología es relativamente reciente y su aplicación es exclusiva en el tratamiento de aguas residuales (Monroy, Famá, Meraz, Montoya, y Macarie, 1998). No obstante, debido al enorme potencial que tiene en el país, mediante diversas estrategias políticas nacionales e internacionales como el *Programa Especial de Cambio Climático* (PECC 2020-2024), el *Programa Sectorial del Medio Ambiente y Recursos Naturales* (PROMARNART 2019-2024), además de la *Red de Biodigestores para América Latina y el Caribe* (RedBioLAC), se espera incrementar su implementación a nivel doméstico y en gran escala para producir biogas (Balagurusamy y Chandel, 2020).

Para mejorar el rendimiento de este bioproceso, es necesario optimizar ciertos aspectos biológicos, químicos y físicos, como se muestra en la Fig.1. Así, un criterio para optimizar la digestión anaerobia es mejorar el desempeño de un biorreactor, es decir, el equipo que produce un ambiente de cultivo óptimo para los microorganismos. Más aún, los biorreactores continuos son los más usados en bioprocesos, porque consiste en la alimentación continua de nuevos reactivos al medio y al mismo tiempo son removidos productos, toxinas y células del cultivo (Yang y Sha, 2019). Además, estos reactores facilitan su escalamiento y a largo plazo pueden optimizar algún estado del bioproceso durante intervalos amplios de tiempo (Yang y Sha, 2019). Sin embargo, además del desarrollo tecnológico de estos equipos, es fundamental diseñar sistemas de monitoreo y control para optimizar las condiciones del biorreactor (Dochain, 2003; Shimizu, 1993), empleando la teoría de control se podría cumplir este propósito, una ciencia que estudia el comportamiento y propiedades de los sistemas dinámicos (Simutis y Lübbert, 2015).

Dado que los digestores anaerobios son costosos de implementar y presentan dinámicas extremadamente lentas por la proliferación de los microorganismos cultivados (Gerardi, 2003), se requiere modelar matemáticamente el bioproceso, es decir, describir matemáticamente los aspectos más importantes del fenómeno. Cabe destacar que diversos algoritmos de control requieren conocer el modelo matemático del sistema a manipular. No obstante, existen diversas problemáticas en el modelado y control de bioprocesos:

- Es difícil modelar e identificar ciertas dinámicas como las tasas de reacción, parámetros pseudo-estequiométricos, transferencia gas-líquido-sólido, temperatura o pH, porque presentan alta no linealidad, complejidad e incertidumbre (Bastin, 2013; Darvehei, Bahri, y Moheimani, 2018; Huang, Jiang, Wang, y Yang, 2017).
- Los actuadores asociados a las entradas pueden producir perturbaciones que modifiquen drásticamente la dinámica del bioproceso (Reza López, 2021).

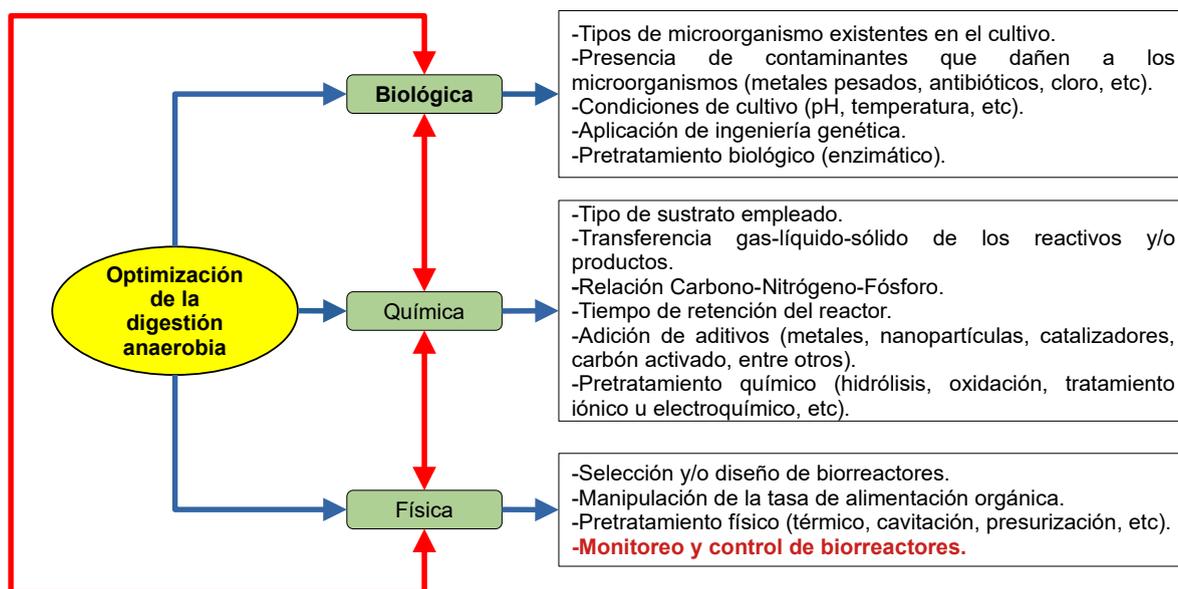


Fig 1: Diferentes perspectivas para optimizar la digestión anaerobia (Acosta y Abreu, 2005; Adekunle y cols., 2015; Vasco-Correa y cols., 2018; Zhang y cols., 2019). Las flechas rojas indican que las diferentes perspectivas están interrelacionadas.

- Los algoritmos de control pueden no ser robustos a mediciones discretas con ruido e incluso, pueden producir condiciones de lavado o tipo *batch* (Bastin, 2013).
- Muchas de las variables involucradas en el reactor no son medibles, como el nitrógeno total, oxígeno disuelto y fósforo total (Haimi, Mulas, Corona, y Vahala, 2013). Aun más, las pocas variables medibles del sistema dependen de sensores costosos, invasivos, sensibles al ruido y de constante mantenimiento (Lourenço, Lopes, Almeida, Sarraguça, y Pinheiro, 2012).

Por consecuencia, es necesario diseñar un algoritmo de control robusto ante las incertidumbres y/o perturbaciones existentes en el proceso de digestión anaerobia.

Estado del arte

Como se menciona en Guo y Zhao (2016), el desarrollo histórico de la teoría del control automático consta de tres fases importantes:

- Control clásico (1940-1960): Consiste en el control de sistemas de una sola entrada y una sola salida (SISO) en el dominio de la frecuencia.
- Control moderno (1960-1980): Consiste en el control de sistemas de múltiples entradas y múltiples salidas en el dominio del tiempo, con fuerte conocimiento del modelo matemático que describe a la planta a controlar.
- Control robusto (1980-Actualmente): Consiste en el control de sistemas sujetos a incertidumbres y/o perturbaciones.

Actualmente, existen diversas estrategias de control de biorreactores. Idealmente, utilizar control óptimo para estos dispositivos es deseable porque puede maximizar o minimizar algún reactivo o producto del sistema (Komives y Parker, 2003; Shimizu, 1993). El objetivo de este enfoque es optimizar la política de control previamente o en línea, a partir de minimizar una función de costo empleando técnicas como el principio del máximo de Pontryagin o el método de programación dinámica de Bellman (López, Pérez, y Femat, 2020; Shimizu, 1993). Sin embargo, como se menciona en Poznyak, Polyakov, y Azhmyakov (2014), se requiere un conocimiento exacto del modelo, no sometido a incertidumbres ni a perturbaciones externas, además todas las variables involucradas del sistema deben ser medibles, lo cuál nunca se cumple para un bioproceso.

Por otro lado, los algoritmos de control lineal como la realimentación de estado, el algoritmo proporcional integral derivativo (PID) y el control H_∞ , han sido ampliamente estudiados y son aplicables para el modelo linealizado de un bioproceso (Georgieva y Feyo de Azevedo, 1999; López y cols., 2020). Sin embargo, a pesar de ser autosintonizables, solo ofrecen resultados locales y por la complejidad, no linealidad y perturbaciones externas del bioproceso, se ha demostrado que el desempeño de estos controladores es deficiente en lazo cerrado (Hernjak y Doyle, 2003; López y cols., 2020; Satishkumar y Chidambaram, 1999; Schügerl y Bellgardt, 2012). Una estrategia alternativa consiste en emplear una linealización exacta o de entrada/salida para poder emplear algoritmos de control lineales (Lien y Wang, 1990; PRÖLL y Karim, 1994). No obstante, este proceso de linealización es sumamente sensible a incertidumbres y a perturbaciones del bioproceso.

Diversos algoritmos de control robusto no lineales se han desarrollado para bioprocesos, como modos deslizantes, *backstepping*, control por modelo predictivo no lineal, *gain scheduling*, control adaptable, entre otros (Fossas, Ros, y Fabregat, 2001; Mailleret, Bernard, y Steyer, 2004; López y cols., 2020; Tham, Ramachandran, y Hussain, 2003; Shimizu, 1993). Pero, como mencionan Simutis y Lübbert (2015), se requiere de personal especializado para diseñar, implementar y sintonizar dichas acciones de control. Un caso interesante de control no lineal que requiere poco conocimiento del modelo es el control por búsqueda del extremo, que consiste de una acción de control adaptable realimentada que minimiza una función de costo, tal que optimiza en tiempo real la planta en estado estacionario (Dochain, Perrier, y Guay, 2011; H.-H. Wang, Krstić, y Bastin, 1999). A pesar de que este enfoque ha sido empleado en bioprocesos, tiene las principales desventajas de que es difícil de sintonizar y su tiempo de convergencia puede ser sumamente lento (Guay, Dochain, y Perrier, 2004; Lara-Cisneros, Femat, y Dochain, 2014; Ramírez-Carmona, Moreno, y Vargas, 2018; H.-H. Wang y cols., 1999; H. Wang y cols., 2020).

Ahora, una estrategia alternativa diseñada para sistemas con incertidumbres y/o dinámicas desconocidas del modelo, así como perturbaciones externas de la planta, es el control por rechazo activo de perturbaciones (*Active Disturbance Rejection Control* o ADRC) propuesto por Han (2009), cuyas aplicaciones en bioprocesos son recientes en el tratamiento de aguas residuales y el cultivo de microalgas (Carreño-Zagarra, Guzmán, Moreno, y Villamizar, 2019; Garzón-Castro, Delgado-Aguilera, Cortés-Romero, Tello, y Mazzanti, 2018; Meng, Zhang, Qiao, y Han, 2016; Wei, Chen, Zuo, y Liu, 2020). El principal elemento del ADRC es la presencia de un observador de estados extendido, es decir, un algoritmo que estima las variables desconocidas, incluyendo las incertidumbres y perturbaciones del sistema, a partir de las pocas mediciones disponibles de la planta (Han, 2009).

A pesar que existen extensas revisiones sobre los observadores más usados en bioprocesos (Alcaraz-Gonzalez y Gonzalez-Alvarez, 2007; Ali, Hoang, Hussain, y Dochain, 2015; De Assis y Maciel Filho, 2000; Dochain, 2003), el empleo de técnicas de inteligencia artificial como redes neuronales artificiales (*Artificial Neural Networks* o ANN) resulta conveniente para sistemas altamente no lineales con incertidumbres y/o desconocimiento del modelo (Ali y cols., 2015). A las ANN también se les conoce como *deep learning*, cuyos primeros resultados buscaban emular el comportamiento sináptico de las neuronas humanas para el aprendizaje automático (Goodfellow, Bengio, y Courville, 2016). Así, como se describe en (Goodfellow y cols., 2016), el desarrollo histórico de *deep learning* es el siguiente:

1. 1940-1980: Basado en la cibernética, se desarrollaron teorías de aprendizaje a partir del estudio de fenómenos biológicos, tal que se desarrolló el perceptrón para el entrenamiento de una sola neurona.
2. 1980-2006: Enfoque del conexionismo y el desarrollo del *backpropagation*, junto con el aprendizaje de una red de máximo dos capas.
3. 2006-Actualmente: Desarrollo de redes neuronales profundas acopladas a diversas estrategias de optimización y regularización, para la reducción del costo computacional producido en el aprendizaje.

Con respecto a bioprocesos, las redes neuronales son empleadas para la estimación de modelos, parámetros o variables no medibles de la planta, así como su control (Ali y cols., 2015; Aynsley, Hofland, Morris, Montague, y Massimo, 1993; Baughman y Liu, 2014; Choi y Park, 2001; De Assis y Maciel Filho, 2000; Di Massimo, Willis, Montague, Tham, y Morris, 1991; Gadkar, Mehra, y Gomes, 2005; Karim y Rivera, 1992a; Komives y Parker, 2003). Sin embargo, se ha visto que el empleo de redes neuronales en bioprocesos con conocimiento parcial de su modelo, puede mejorar considerablemente el desempeño de los algoritmos de control y/u observación (Ascencio, Sbarbaro, y de Azevedo, 2004; Komives y Parker, 2003; Schubert, Simutis, Dors, Havlik, y Lübbert, 1994).

Motivación

Una estrategia para optimizar un proceso continuo de digestión anaerobia es manipular alguna variable importante del biorreactor asociado al bioproceso. Controlar dicho equipo, puede garantizar un objetivo deseado como minimizar la concentración de materia orgánica entrante, maximizar la producción de biogas, etcétera. Para cumplir este propósito, es necesario implementar el control por rechazo activo de perturbaciones, porque es un algoritmo que garantiza robustez ante las incertidumbres y/o desconocimiento del modelo, así como las posibles perturbaciones existentes en el bioproceso. Además, es factible probar que bajo ciertas condiciones ideales, el ADRC garantice un buen comportamiento en lazo cerrado con el proceso continuo de digestión anaerobia.

Para que el ADRC tenga un buen desempeño, es necesario diseñar un observador de estados que estime las dinámicas desconocidas asociadas a las incertidumbres y perturbaciones del sistema, como emplear una red neuronal. Aplicar dicha estrategia de aprendizaje es válida porque es útil para modelos altamente no lineales y desconocidos como los bioprocesos. Por otro lado, se ha visto que las redes neuronales son efectivas para estimar dinámicas desconocidas como tasas de reacción en un bioproceso (Ascencio y cols., 2004). Más aún, en Karim y Rivera (1992b) se mostró que las redes neuronales recurrentes son las más adecuadas para el aprendizaje en bioprocesos. Adicionalmente, las redes neuronales pueden ser efectivas para bioprocesos con ruido en la medición (Choi y Park, 2001).

Hipótesis

- ¿Existe un modelo que describa al proceso de digestión anaerobia y sea sencillo de analizar con un algoritmo de control?
- ¿Se puede justificar la presencia de las dinámicas desconocidas del modelo por procesos ecológicos y evolutivos?
- ¿Se puede probar que el bioproceso es susceptible de ser controlado?
- ¿Se puede probar que las dinámicas desconocidas del sistema pueden ser estimadas?
- ¿Se puede garantizar que la aplicación del algoritmo ADRC en el control de una variable clave del bioproceso siga una referencia deseada en condiciones ideales?
- ¿Se puede garantizar que la aplicación del algoritmo ADRC sea robusto ante las dinámicas desconocidas del sistema, es decir, sea poco sensible a las dinámicas no modeladas del bioproceso?
- ¿Se puede entrenar una red neuronal artificial que realice la tarea de regresión de las dinámicas desconocidas del sistema y a su vez, realice la filtración de ruido en la medición de la variable a manipular?
- ¿Se puede acoplar una red neuronal artificial como observador de estados extendido con el control ADRC?
- ¿La red neuronal entrenada tiene un buen desempeño para las tareas de regresión y ruido?
- ¿El controlador-observador propuesto tiene un buen desempeño en lazo abierto y cerrado con el bioproceso?

Objetivo

General: Diseñar un estimador de dinámicas desconocidas mediante redes neuronales artificiales, para realizar el control robusto de un proceso continuo de digestión anaerobia.

Particulares:

- Buscar en la literatura un modelo matemático que describa la dinámica de un proceso continuo de digestión anaerobia.
- Justificar la presencia de las dinámicas desconocidas del modelo.
- Probar las propiedades de controlabilidad y observabilidad del bioproceso.
- Probar teóricamente, bajo condiciones ideales, que el controlador por rechazo activo de perturbaciones garantice estabilidad en lazo cerrado con el bioproceso.
- Diseñar y entrenar una red neuronal recurrente para el aprendizaje de la dinámica desconocida del bioproceso y la filtración del ruido en la medición, a partir de la adquisición de múltiples ejemplos del bioproceso simulado en diferentes condiciones.
- Evaluar el desempeño de la red neuronal artificial diseñada.
- Evaluar el desempeño del controlador-observador propuesto mediante simulaciones numéricas.

Estructura de la tesis

En el Capítulo 1 se describirán los aspectos más importantes sobre un proceso continuo de digestión anaerobia, así como la descripción matemática del bioproceso. Adicionalmente, se dará un enfoque evolutivo sobre este bioproceso y se mencionará cómo este fenómeno afecta al sistema y justifica la presencia de dinámicas desconocidas en el modelo asociado.

Más tarde, en el Capítulo 2 se describirá la idea general de un sistema de control aplicado a bioprocesos. También, se definirá el control por rechazo activo de perturbaciones y cómo dicho algoritmo controla robustamente la dinámica del biorreactor. Para ello, se estudiarán las propiedades de controlabilidad y observabilidad del bioproceso. Además, se proporcionará una breve prueba teórica, bajo ciertas condiciones ideales, de que el controlador garantiza estabilidad en lazo cerrado del bioproceso.

Posteriormente, en el Capítulo 3 se mencionarán ciertos aspectos teóricos sobre redes neuronales recurrentes. Lo anterior tiene el fin de describir la estructura de la red neuronal a diseñar para la estimación de las dinámicas desconocidas del bioproceso y la filtración del ruido existente en la medición. También, se justificará como se puede acoplar la red neuronal a entrenar con el algoritmo de control como observador de estados.

Por último, en el Capítulo 4 se mostrarán los resultados experimentales del aprendizaje de la red neuronal diseñada, así como la simulación numérica de la dinámica del bioproceso en lazo cerrado con el controlador deseado acoplado a la red entrenada. Dicho sistema de control será comparado con la misma política de control pero con otro observador de estado extendido previamente aplicado en bioprocesos.

Capítulo 1

Modelado del proceso de digestión anaerobia

Para controlar el proceso continuo de digestión anaerobia es necesario tener una descripción matemática del fenómeno. Sin embargo, se requiere estudiar diversos aspectos biológicos, químicos y físicos para describir adecuadamente el bioproceso. Así, en este capítulo se describirá cualitativamente y matemáticamente un proceso continuo de digestión anaerobia. Para empezar, se mencionaran algunos conceptos fundamentales de bioprocesos, cuyas definiciones ayudarán a introducir el proceso de digestión anaerobia. Más tarde, se dará un breve resumen de la microbiología, etapas y condiciones de operación del bioproceso. Lo anterior tiene el fin de describir matemáticamente la digestión anaerobia, a partir de un modelo reportado en la literatura. Cabe destacar que este modelo es lo suficientemente complejo para incluir las dinámicas más importantes del bioproceso y a su vez, es sencillo para estudiar e implementar un algoritmo de control. Adicionalmente, se mencionarán las incertidumbres y perturbaciones asociadas al modelo. Por último, dado que se está estudiando un sistema biológico, se dará una breve discusión de las dinámicas eco-evolutivas involucradas en el bioproceso y como se reflejan en las incertidumbres del modelo de la digestión anaerobia.

1.1. Conceptos preliminares

Un bioproceso se define como un conjunto de etapas donde se transforman ciertos reactivos, a partir de seres vivos o sus componentes biológicos, en diferentes productos deseados (Doran, 1995). Todo bioproceso esta compuesto por las siguientes etapas (Moo-Young y Chisti, 1994):

1. Pretratamiento (*Upstream*): Los reactivos son previamente tratados para convertirlos en formas susceptibles para el proceso.
2. Biorreacción: Los reactivos tratados son transformados en algún producto intermedio a partir de reacciones biológicas mediadas por biocatalizadores, conformados por células o enzimas.
3. Purificación (*Downstream*): Los productos intermedios son tratados con diferentes métodos físicos y/o químicos para recuperar y purificar el producto deseado.

Note que la biorreacción es la etapa fundamental de cualquier bioproceso y está siempre asociada a un biorreactor, definido como un sistema donde ocurren reacciones químicas complejas mediadas por microorganismos o sus componentes biológicos como bacterias, arqueas, algas, hongos, protistas o las enzimas de dichos seres vivos, tal que se transforman los reactivos suministrados en los productos deseados (Doran, 1995). El objetivo principal de este equipo es producir un ambiente de cultivo adecuado para los microorganismos y sus reactivos, considerando el monitoreo y control de diversas variables como la temperatura, pH, concentración de nutrientes, intensidad lumínica, etcétera (Doran, 1995). Por otro lado, los biorreactores pueden clasificarse de acuerdo a los siguientes criterios:

- Con base en la movilidad del microorganismo: Suspendido u inmovilizado (Doran, 1995; Gerardi, 2003).
- Con base en la forma de agitación: Mecánico o con circulación de gas (Gupta y Sathiyamoorthy, 1998).
- Con base en la configuración: Reactor único o doble en serie (Gerardi, 2003).
- Con base en la geometría del reactor: Puede ser de tanque agitado, de tipo columna, de flujo ascendente o de lecho fluidizado, empacado o de goteo (Gupta y Sathiyamoorthy, 1998).
- Con base en la condición de operación: Es un proceso *batch* si no existe flujo de entrada ni salida; es un proceso *fed-batch* si el flujo de salida es nulo y el de entrada es nulo posterior a cierto tiempo; mientras que es un proceso continuo si el flujo de entrada y salida son iguales (Dochain, 2003; Doran, 1995).
- Con base en la presencia de oxígeno (O_2) en el cultivo. Por un lado, los reactores aerobios producen más biomasa con tiempos menores de retención, porque realizan respiración celular y nitrificación, consumiendo más rápido la materia orgánica (Gerardi, 2003). En contraste, los reactores anaerobios reducen el consumo de nutrientes, los costos de operación y la concentración de patógenos más los desechos sólidos por las diferentes rutas de fermentación metabólica (Gerardi, 2003).

1.2. Introducción a la digestión anaerobia

Para comenzar, la digestión anaerobia es un bioproceso cuyas etapas más importantes se muestran en la Fig.1.1. Note que previo al proceso de biorreacción, los reactivos del biorreactor, compuesto principalmente por materia orgánica y microorganismos, corresponden al pretratamiento de desechos sólidos municipales, a derivados de la agricultura o a desechos industriales como la alimenticia, farmacéutica, cervecera, etcétera (Gerardi, 2003; Vasco-Correa y cols., 2018).

Aunque existen diversos criterios del pretratamiento de desechos, en la Fig.1.1 se describen algunos de los pasos usados en el tratamiento de aguas residuales. Para iniciar, existen dos clarificadores cuyo propósito es remover continuamente los desechos sólidos depositados por sedimentación, que difieren en que los desechos del clarificador secundario han pasado por un proceso aerobio en el tanque de aireamiento (Gerardi, 2003).

Luego, los lodos de cada clarificador, denominado primario y secundario, difieren en que el lodo primario está compuesto principalmente por bacterias anaerobias, mientras que en el segundo está conformado por bacterias anaerobias facultativas (Gerardi, 2003). Además, se emplea un espesador que combina dichos lodos para incrementar la eficiencia del digester anaerobio. Más tarde, la materia orgánica tratada es suministrada a un bioreactor anaerobio para ser principalmente transformado en lodos digeridos y biogas¹ (Gerardi, 2003; Vasco-Correa y cols., 2018). Además de estos productos, se suele formar un sobrenadante compuesto por sólidos suspendidos, fuentes de nutrientes y compuestos orgánicos no digeridos (Gerardi, 2003). Aun más, puede formarse espuma e incluso escoria, es decir, materiales flotantes como grasa y materia vegetal con poca gravedad específica (Gerardi, 2003). Por último, algunos de los productos pueden pasar por un proceso de purificación. Por ejemplo, el biogas formado puede pasar por diversos procesos de condensación, secado, absorción química o física para separar el metano de los demás compuestos que componen el biogas (Ryckebosch, Drouillon, y Vervaeren, 2011).

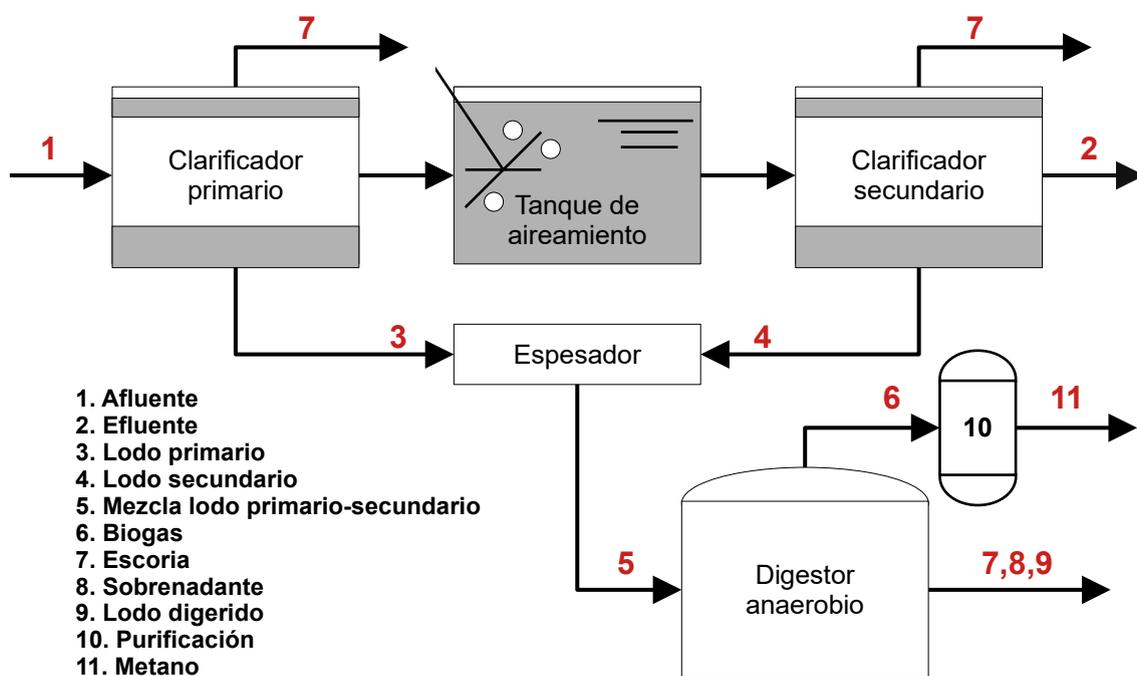


Fig 1.1: Etapas del bioproceso de digestión anaerobia (Gerardi, 2003).

Como se mencionó en la sección anterior, el aspecto más importante del bioproceso ocurre en el digester anaerobio. A continuación, se describirán los aspectos teóricos más importantes que definen la biorreacción de este bioproceso, así como ciertas condiciones de operación del sistema.

¹El biogas es una composición de diversos gases, estando en mayor concentración el metano (CH_4) y en proporciones considerables el dióxido de carbono (CO_2), más una concentración pequeña de hidrógeno (H_2), nitrógeno (N_2), óxido nitroso (N_2O), ácido sulfhídrico (H_2S) y amoniacó (NH_3) (Gerardi, 2003).

1.2.1. Microbiología

Previo a describir las fases de biorreacción de la digestión anaerobia, primero se describirá brevemente la diversidad microbiológica involucrada en la reacción. De acuerdo a Gerardi (2003); Brock, Madigan, Martinko, y Parker (2003), los microorganismos del proceso están conformados por bacterias y arqueas clasificadas con base a su diversidad metabólica, funcional (fisiología y ecología) y filogenética.

Clasificación con base a su respuesta metabólica al oxígeno

Para iniciar se encuentran los **aerobios estrictos**, es decir, grupos de microorganismos que degradan la materia orgánica a partir de la respiración celular usando como aceptor final de electrones el O_2 (Brock y cols., 2003). Los aerobios estrictos se encuentran en las diversas etapas del pretratamiento de los reactivos y ayudan a la degradación de la materia orgánica (Gerardi, 2003). Sin embargo, dichos microorganismos mueren en el digestor anaerobio por la ausencia de O_2 (Brock y cols., 2003; Gerardi, 2003). Luego, los **anaerobios facultativos** son microorganismos que pueden usar O_2 para la respiración o en su ausencia, otras moléculas transportadoras de electrones (Brock y cols., 2003). Son importantes en la degradación de materia orgánica compleja del digestor anaerobio en compuestos orgánicos más simples como ácidos, alcoholes, CO_2 e H_2 (Gerardi, 2003). Por último se encuentran los **anaerobios**, que son microorganismos incapaces de usar O_2 como aceptor final de electrones (Gerardi, 2003). Aunado a lo anterior, este grupo puede ser tolerante a la presencia de O_2 o no debido a que inhibe su actividad metabólica (Brock y cols., 2003). Cabe destacar que los microorganismos no tolerantes al O_2 se denominan **anaerobios estrictos** y generalmente suelen ser organismos carroñeros que dependen de diversas estrategias de fermentación para la adquisición de energía (Gerardi, 2003). Algunos ejemplos de especies de microorganismos clasificados en función de su respuesta al oxígeno se muestran en la Tabla 1.1.

Para determinar la supervivencia de los microorganismos descritos, se emplea el potencial de óxido-reducción (ORP), que es una medida de la cantidad de material reducido u oxidado, como nitrato (NO_3^-), nitrito (NO_2^-) y sulfato (SO_4^{-2}) (Gerardi, 2003), cuya interpretación se da en la Tabla 1.2. Cabe destacar que los digestores anaerobios deben operar con valores menores a -300 mV de ORP, porque implica que gran parte de la materia orgánica suministrada al reactor es digerida, además está asociado a la formación de metano, componente más importante del biogas y el más reducido de la biorreacción (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003).

Clasificación con base a su diversidad funcional

Por la enorme variedad de residuos orgánicos que ingresan a los digestores anaerobios, se requiere una gran diversidad de microorganismos con diferentes respuestas fisiológicas y ecológicas para degradar dichos compuestos bioquímicos. Por un lado, los **microorganismos hidrolíticos** presentan enzimas externas o exoenzimas cuya función es romper compuestos orgánicos complejos en sustancias más simples (Adekunle y cols., 2015), cuya función se muestra en la Tabla 1.3. Así, los microorganismos hidrolíticos se dividen en **sacarolíticos** (degradadores de polisacáridos), **proteolíticos** (degradadores de proteínas) y **lipolíticos** (degradadores de lípidos) (Adekunle y cols., 2015).

Tabla 1.1: Ejemplos de especies de microorganismos clasificados en función de su respuesta metabólica al O₂ (Achinas y cols., 2020; Acosta y Abreu, 2005; Aziz y cols., 2022; Gerardi, 2003; X. Wang y cols., 2022).

Respuesta al O ₂	Ejemplo
Aerobio	<i>Haliscomenobacter hydrossis</i>
	<i>Nitrobacter sp.</i>
	<i>Nitrosomonas sp.</i>
	<i>Sphaerotilus natans</i>
	<i>Zoogloea ramigera</i>
Anaerobio facultativo	<i>Bacillus sp.</i>
	<i>Cellulomonas sp.</i>
	<i>Enterobacter sp.</i>
	<i>Escherichia coli</i>
	<i>Erwinia sp.</i>
	<i>Flavobacterium sp.</i>
	<i>Lactobacillus sp.</i>
	<i>Pediococcus sp.</i>
	<i>Propionibacterium sp.</i>
	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>
	<i>Sarcina sp.</i>
	<i>Salmonella sp.</i>
	<i>Shewanella sp.</i>
	<i>Streptococcus sp.</i>
<i>Zymomonas sp.</i>	
Anaerobio estricto	<i>Acetoanaerobium sp.</i>
	<i>Acetobacterium sp.</i>
	<i>Bacteroides sp.</i>
	<i>Bifidobacterium sp.</i>
	<i>Butyrivibrio sp.</i>
	<i>Clostridium sp.</i>
	<i>Desulfovibrio sp.</i>
	<i>Desulfotomaculum sp.</i>
	<i>Geobacter sp.</i>
	<i>Methanotherix sp.</i>
	<i>Methanothermobacter sp.</i>
	<i>Methanococcus sp.</i>
	<i>Methanobacterium formicicum</i>
	<i>Methanobacterium thermoantotrophicum</i>
	<i>Methanobrevibacter arboriphilus</i>
	<i>Methanosarcina barkeri</i>
	<i>Pelotomaculum thermopropionicum</i>
<i>Peptostreptococcus sp.</i>	
<i>Thauera sp.</i>	
<i>Ruminococcus flavefaciens</i>	

Tabla 1.2: Interpretación del intervalo de valores de ORP con la actividad celular de un cultivo. Modificado de Gerardi (2003).

ORP (mV)	Metabolismo	Aceptor final de electrones	Producto
$(\infty, 50)$	Respiración	O_2	H_2O
$[50, -50)$	Desnitrificación	NO_3^- o NO_2^-	N_2 o N_2O
$[-50, -100)$	Fermentación	SO_4^{2-}	S_2^- o H_2S
$[-100, -300)$	Fermentación	Compuesto orgánico (CH_2O)	Ácidos orgánicos
$[-300, -\infty)$	Fermentación	CO_2	CH_4

Tabla 1.3: Ejemplos de exoenzimas importantes en la digestión anaerobia. Tomado de Adekunle y cols. (2015).

Exoenzima	Sustrato	Producto
Proteinasa	Proteínas	Aminoácidos
Celulasa	Celulosa	Monosacáridos como glucosa, xilosa y manosa
Amilasa	Almidón	Glucosa
Lipasa	Grasas	Ácidos grasos y glicerol
Pectinasa	Pectina	Monosacáridos como galactosa y arabinosa

Cabe destacar que algunos microorganismos hidrolíticos asociados al proceso son *Butyrivibrio sp.*, *Cellulomonas sp.*, *Clostridium sp.*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Ruminococcus flavefaciens* y *Streptococcus sp.* (Achinas y cols., 2020; Gerardi, 2003).

Luego, de acuerdo a la Tabla 1.2, a partir de los -50 mV es común que ocurra la fermentación en el reactor, siendo las más importantes aquellas mostradas en la Tabla 1.4. Si bien existe una gran diversidad de reacciones para la degradación de sustratos, a continuación se describirán los tres casos más importantes en la degradación de reactivos en digestores anaerobios.

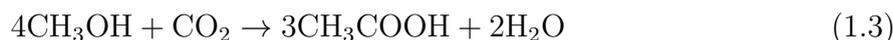
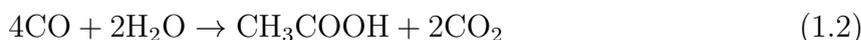
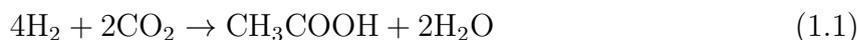
Las **bacterias formadoras de ácidos grasos** o **acidobacterias** son microorganismos que degradan compuestos orgánicos simples para sintetizar alcoholes, H_2 , CO_2 y ácidos grasos volátiles (VFA), es decir, compuestos de carbono de cadena corta acopladas al grupo ácido carboxílico $-COOH$ que puede evaporarse a presión atmosférica, como es el propionato, butirato y formato (Gerardi, 2003). Algunas especies conocidas de acidobacterias que hacen fermentaciones en el bioproceso son *Erwinia sp.*, *Sarcina sp.* y *Zymomonas sp.* (alcohólica); *Clostridium sp.* y *Butyrivibrio sp.* (butírica); *Bifidobacterium sp.*, *Pediococcus sp.* y *Streptococcus sp.* (láctica); *Bacteroides sp.*, *Clostridium sp.*, *Pelotomaculum thermopropionicum*, *Propionibacterium sp.*, y *Ruminococcus flavefaciens* (propionato); *Lactobacillus sp.* (butanodiol); además de *Enterobacter sp.*, *Escherichia coli*, *Erwinia sp.*, *Salmonella sp.* y *Shewanella sp.* (ácidos mixtos) (Gerardi, 2003).

Un grupo particular de las acidobacterias son las **bacterias formadoras de acetato** o **acetógenos**, que son microorganismos que degradan diversos ácidos y alcoholes en acetato (CH_2COOH) (Gerardi, 2003).

Tabla 1.4: Resumen de los posibles reactivos y productos asociados a diversas fermentaciones que ocurren en la digestión anaerobia (Gerardi, 2003).

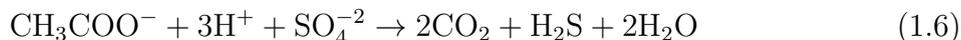
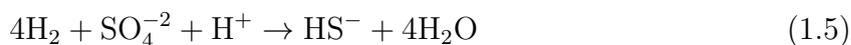
Fermentación	Reactivos	Productos
Alcohólica	Monosacárido	Etanol, CO ₂
Butírica	Monosacárido	Butirato
Láctica	Glucosa	Lactato, Etanol, Acetato, CO ₂
Propionato	Glucosa, Lactosa	Propionato, Acetato, CO ₂
Butanodiol	Glucosa	Butanodiol, CO ₂
Ácidos mixtos	Polisacáridos	Acetato, Formato, Lactato
		Succinato, Etanol, CO ₂ , H ₂
Acética	Monosacárido, Metanol	Acetato, CO ₂ , H ₂ O
	CO ₂ , H ₂ , CO, H ₂ O	
Metano	Acetato, H ₂ , CO ₂ , Metanol	Metano, CO ₂ , H ₂ O, Amoniaco
	Metilaminas, CO	

El crecimiento de estos microorganismos puede inhibirse ante la presencia excesiva de H₂ (Gerardi, 2003). Sin embargo, dado que el hidrógeno es un sustrato usado por diversos microorganismos del reactor, los acetógenos suelen establecer relaciones sintróficas² con otros microorganismos a través de la producción de acetato y consumo de H₂ (Acosta y Abreu, 2005; Adekunle y cols., 2015; Gerardi, 2003; Meegoda, Li, Patel, y Wang, 2018). Cabe destacar que la producción de acetato puede desarrollarse mediante otras fermentaciones y diversas reacciones químicas, como se muestra en la Tabla 1.4 y en las ecuaciones (1.1)-(1.4), respectivamente (Brock y cols., 2003; Gerardi, 2003). Además, el acetato es el VFA más importante y abundante del proceso de digestión anaerobia, teniendo una concentración de más del 70 % en los digestores anaerobios (Acosta y Abreu, 2005). Algunas de los acetógenos conocidos en el bioproceso son *Acetoanaerobium sp.*, *Acetobacterium sp.* y diversas especies del género *Clostridium* (Aziz y cols., 2022; Gerardi, 2003).



Por otro lado, las **bacterias reductoras de sulfato**, como las especies de la clase Thermodesulfobacteria, son microorganismos que obtienen energía a partir de la reducción del sulfato (SO₄²⁻) en ácido sulfhídrico (H₂S), a partir de la oxidación de H₂ o acetato, como se muestran en las reacciones químicas (1.5)-(1.6) (Gerardi, 2003). Cabe destacar que el ácido sulfhídrico tiene fuertes efectos inhibitorios en el crecimiento de acidobacterias y con los siguientes microorganismos (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003).

²Una relación sintrófica entre microorganismos es aquella en la que al menos el metabolismo de un microorganismo depende de la actividad metabólica de otro (Brock y cols., 2003; Gerardi, 2003).

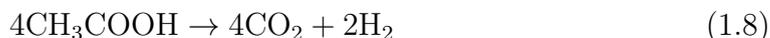


Las **arqueas formadoras de metano, metanoarqueas** o **metanógenos** son arqueas³ del reino Euryarchaeota y phylum Methanobacteriota que transforman diversos sustratos en CH₄ (Acosta y Abreu, 2005; Brock y cols., 2003; Gerardi, 2003). Se caracterizan por ser anaerobios estrictos tolerantes a altas concentración de sal, son altamente sensibles a diversos ácidos grasos por la composición de su pared celular y, se reproducen lentamente, entre 3 a 30 días, en zonas con alta descomposición orgánica como los digestores anaerobios (Brock y cols., 2003; Gerardi, 2003). Como se menciona en Gerardi (2003), las metanoarqueas pueden clasificarse con base a la síntesis de CH₄ en tres grupos:

- Metanógenos hidrogenotróficos: Son aquellos que usan H₂ para transformar CO₂ en CH₄, como se muestra en la reacción química (1.7). Este tipo de microorganismos, generalmente asociados al orden Methanobacteriales y Methanococcales (Brock y cols., 2003), mantienen una relación sintrófica con la acidobacterias porque reducen la concentración de H₂ en el medio de cultivo. Además, mantienen una relación de competencia con las bacterias formadoras de sulfato por el H₂.

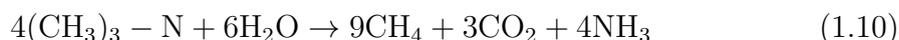


- Metanógenos acetotróficos: Son aquellos que utilizan la vía acetoclástica para formar CH₄, descrita por la reacción (1.8). Se caracterizan por reproducirse más lentamente que los metanógenos hidrogenotróficos y son mas sensibles a la acumulación de H₂.



Por ende, mantienen relaciones sintróficas con acidobacterias y metanógenos hidrogenotróficos. Más aún, al igual que los metanógenos hidrogenotróficos, mantienen una relación de competencia con las bacterias formadoras de sulfato por el acetato. Algunas especies ejemplo son *Methanococcus mazei* y *Methanosarcina bakerii* (Gerardi, 2003).

- Metanógenos metilotróficos: Son aquellos que usan sustratos con grupos metilo (-CH₃) como metanol (CH₃OH) o metilaminas ((CH₃)₃ - N) para formar CH₄, como se muestra en las reacciones químicas (1.9)-(1.10) y suelen pertenecer al orden Methanosarcinales (Brock y cols., 2003).



Por otro lado, las metanoarqueas también pueden clasificarse de acuerdo a la temperatura en que se desarrollan. Se dicen psicrófilos si se desarrollan entre 5 – 25 °C, por otro lado son mesófilos si crecen entre 30 – 35 °C y termófilos si son cultivados entre 50 – 60 °C (Brock y cols., 2003).

³El dominio *Archaea* es un grupo taxonómico de procariontes unicelulares caracterizados por la ausencia de ácido murámico, presentar una membrana celular con enlaces éteres lipídicos, así como las coenzimas M y las dependientes de níquel F₄₂₀ y F₄₃₀ (Brock y cols., 2003).

Clasificación con base a sus relaciones filogenéticas

Observe que algunas de las especies previamente mencionadas, junto con otras reportadas en la literatura, pueden clasificarse a partir de sus relaciones filogenéticas basadas en el análisis comparativo de la secuencia del gen 16SrRNA (Brock y cols., 2003). Estas relaciones filogenéticas constan de agrupar taxones⁴ de acuerdo a su ancestría común basado en sinapomorfías, es decir, de estados de carácter⁵ evolucionados directamente de estados anteriores presentes en dos o más taxones, surgido de su correspondiente taxón ancestral (Morrone, 2013). Así, la clasificación filogenética de algunas de las bacterias y arqueas que pueden conformar el bioproceso se muestran en la Tabla 1.5-1.6.

Nota 1.1. *Una descripción detallada de los taxones descritos en la Tabla 1.5-1.6 esta fuera del alcance de este trabajo. Sin embargo, para más información de Bacillota, Bacteriodota y Proteobacteria se recomienda consultar Brock y cols. (2003); para estudiar el sistema de clasificación de Actinobacteria y Thermodesulfobacteria se recomienda ver Nouioui y cols. (2018) y Waite y cols. (2020), respectivamente; mientras que para un análisis extenso sobre las metanoarqueas se recomienda revisar Balch, Fox, Magrum, Woese, y Wolfe (1979).*

1.2.2. Fases de la biorreacción

Posterior al pretratamiento de los reactivos, en la Fig.1.2 se muestran las fases principales del proceso de digestión anaerobia, descritas a continuación.

1. **Hidrólisis:** Se rompen los enlaces de polisacáridos, lípidos y proteínas para dividirlos en compuestos orgánicos más simples, a partir de la exoenzimas de microorganismos hidrolíticos conformados por bacterias anaerobias facultativas y anaerobias (Adekunle y cols., 2015; Meegoda y cols., 2018).
2. **Acidogénesis:** Las acidobacterias usan los productos generados en la hidrólisis para transformarlos en ácidos grasos, alcoholes, NH_3 , H_2 y CO_2 (Adekunle y cols., 2015; Meegoda y cols., 2018), a partir de los procesos de fermentación descritos en la Tabla 1.4. El componente más importante producido es el acetato y al conjunto de reacciones químicas mediadas por acetógenos que transforman ácidos grasos, alcoholes, H_2 y CO_2 en acetato es denominada **acetogénesis** (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003). Adicionalmente, en esta fase se considera la desnitrificación de fuentes de nitrato en N_2 y N_2O , así como la reducción de sulfato (Gerardi, 2003).
3. **Metanogénesis:** Los metanógenos hidrogenotróficos, acetotróficos y metilotróficos producen CH_4 , mediante el uso de acetato, H_2 y CO_2 , derivados de la acidogénesis y acetogénesis, más compuestos orgánicos con grupo metilo ($-\text{CH}_3$) derivados de la hidrólisis (Adekunle y cols., 2015; Gerardi, 2003).

⁴Es un grupo de cualquier rango del marco de clasificación biológica (Reino, Phylum, Clase, Orden, Familia, Género, Especie) que es suficientemente distinto como para ser reconocido como una categoría única y ser nombrado (Morrone, 2013).

⁵Es un atributo exhibido por un taxón específico (Morrone, 2013). Para microorganismos es común usar caracteres fisiológicos (metabolismo) y moleculares (ADN, ARN) (Brock y cols., 2003; Morrone, 2013).

Tabla 1.5: Clasificación de bacterias reportadas en la digestión anaerobia con base a sus relaciones filogenéticas usando la molécula 16SrRNA (Achinas y cols., 2020; Acosta y Abreu, 2005; Aziz y cols., 2022; Gerardi, 2003; X. Wang y cols., 2022).

Phylum	Clase	Especie	
Actinobacteria	Actinomycetia	<i>Cellulomonas sp.</i>	
		<i>Propionibacterium sp.</i>	
Bacillota	Clostridia	<i>Acetobacterium sp.</i>	
		<i>Acetoanaerobium sp.</i>	
		<i>Butyrivibrio sp.</i>	
		<i>Clostridium bifermentans</i>	
		<i>Clostridium ellobioporos</i>	
		<i>Clostridium histolyticum</i>	
		<i>Clostridium lochhadii</i>	
		<i>Clostridium perfringens</i>	
		<i>Clostridium porogenes</i>	
		<i>Clostridium tetanomorphium</i>	
		<i>Clostridium thermocellum</i>	
		<i>Clostridium stercorarium</i>	
		<i>Clostridium sporogenes</i>	
		<i>Desulfotomaculum sp.</i>	
		<i>Peptostreptococcus sp.</i>	
		<i>Pelotomaculum thermopropionicum</i>	
		<i>Ruminococcus albus</i>	
		<i>Ruminococcus flavefaciens</i>	
		Bacilli	<i>Sarcina sp.</i>
			<i>Bacillus sp.</i>
	<i>Lactobacillus sp.</i>		
	<i>Pediococcus sp.</i>		
Bacteroidota	Bacteroidia	<i>Streptococcus sp.</i>	
	Flavobacteriia	<i>Bacteroides ruminicola</i>	
Proteobacteria	Alphaproteobacteria	<i>Bacteroides succinogenes</i>	
	Betaproteobacteria	<i>Flavobacterium sp.</i>	
	Gammaproteobacteria	<i>Zymomonas sp.</i>	
		<i>Thauera sp.</i>	
		<i>Enterobacter sp.</i>	
		<i>Escherichia coli</i>	
<i>Erwinia sp.</i>			
<i>Salmonella sp.</i>			
<i>Shewanella sp.</i>			
Thermodesulfobacteria	Desulfomonilia	<i>Desulfomonile sp.</i>	
	Desulfuromonadia	<i>Geobacter sp.</i>	
	Desulfovibrionia	<i>Desulfrovibrio vulgaris</i>	
<i>Desulfrovibrio desulfuricans</i>			

Tabla 1.6: Clasificación de metanoarqueas reportadas en la digestión anaerobia con base a sus relaciones filogenéticas usando la molécula 16SrRNA (Achinas y cols., 2020; Acosta y Abreu, 2005; Aziz y cols., 2022; Gerardi, 2003; X. Wang y cols., 2022).

Clase	Orden	Especie
Methanomicrobia	Methanosarcinales	<i>Methanotherix sp.</i>
		<i>Methanosaeta sp.</i>
		<i>Methanomethylovorans sp.</i>
		<i>Methanolobus sp.</i>
		<i>Methanimicrococcus sp.</i>
		<i>Methanosarcina barkeri</i>
Methanobacteria	Methanobacteriales	<i>Methanothermobacter sp.</i>
		<i>Methanobacterium formicicum</i>
		<i>Methanobacterium thermoautotrophicum</i>
		<i>Methanobrevibacter arboriphilus</i>
Methanococci	Methanococcales	<i>Methanococcus mazei</i>
		<i>Methanococcus maripaludis</i>
		<i>Methanococcus frisius</i>

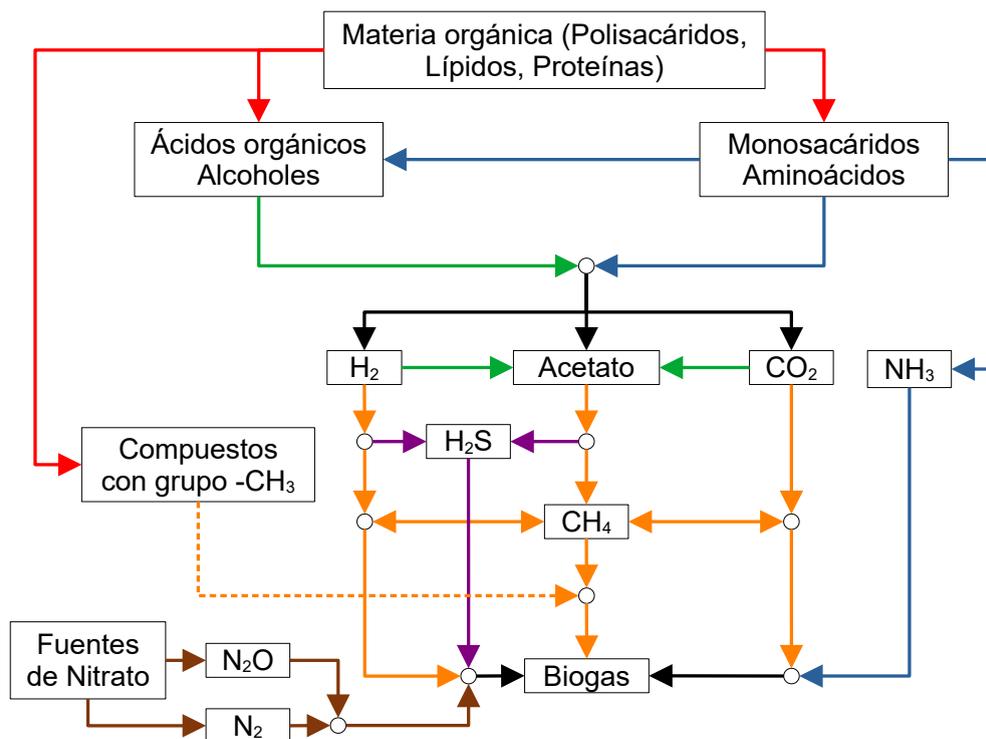


Fig 1.2: Esquema de biorreacción del proceso de digestión anaerobia, donde la materia orgánica y fuentes de nitrato son transformados en biomasa, biogas y lodo digestado. Las etapas involucran la hidrólisis (rojo), acidogénesis (azul), acetogénesis (verde) y metanogénesis (naranja), además de la desnitrificación (café) y reducción de sulfato (morado).

1.2.3. Condiciones de operación

Observe que existe una gran diversidad de microorganismos cultivados en un digestor anaerobio. Por ende, es necesario conocer bajo qué condiciones se debe operar el biorreactor para garantizar que la biorreacción ocurra adecuadamente. Las condiciones de operación más importantes se describen a continuación:

- La temperatura de los digestores puede mantenerse en dos rangos de operación. Por un lado, pueden operar entre los 50-60 °C para el cultivo de microorganismos termofílicos, cuya ventaja es incrementar la actividad metabólica y así mejorar la degradación de materia orgánica y destrucción de patógenos (Gerardi, 2003; Meegoda y cols., 2018). Sin embargo, debido al incremento de los costos de operación, la dificultad del control de temperatura y el incremento de la sensibilidad a toxinas, se suelen emplear digestores mesofílicos que operan entre los 32-35 °C (Gerardi, 2003; Meegoda y cols., 2018).
- La composición de la materia orgánica debe tener tanto macronutrientes como micronutrientes. Con respecto a los macronutrientes, se consideran compuestos orgánicos con carbono (C), nitrógeno (N) y fósforo (P) con una relación C : N : P de 100 : 1.75 : 0.25 (Acosta y Abreu, 2005). Luego, con respecto a los micronutrientes se debe suministrar cobalto, níquel, sulfato, hierro, molibdeno, tungsteno, selenio, calcio, magnesio, sodio y bario porque son cofactores de diversas enzimas, principalmente asociadas a la formación de acetato en metanoarqueas (Gerardi, 2003).
- Con respecto al pH, esta variable decrece por la producción de ácidos orgánicos generados por las acidobacterias y, se incrementa por el consumo de acetato por las metanoarqueas (Gerardi, 2003; Meegoda y cols., 2018). Así, es necesario controlar el pH de tal forma que esté entre 6.8 a 7.2 para que no exista inhibición enzimática en los microorganismos cultivados (Acosta y Abreu, 2005).
- Una alta alcalinidad implica evitar cambios bruscos de pH (Gerardi, 2003). El incremento de alcalinidad es consecuencia de la disociación de NH_3 y CO_2 , cuyo ión bicarbonato es la fuente de carbono de metanoarqueas (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003). Cabe destacar que la producción de ácidos orgánicos disminuye la alcalinidad (Acosta y Abreu, 2005). Así, se recomienda usar químicos como bicarbonato de sodio o potasio para incrementar la alcalinidad y el pH (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003).
- El pretratamiento de la materia orgánica debe reducir la concentración de toxinas que fluyen al digestor, como formaldehído, cianuro, hidrocarburos clorados y, compuestos de benceno y recalcitrantes (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003; Meegoda y cols., 2018). Más aún, el reactor debe evitar altas concentraciones de H_2S , fuentes de nitrógeno, metales pesados y ácidos grasos (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003). De lo contrario, pueden ocurrir cambios de pH, pérdida de alcalinidad e inhibición enzimática y de crecimiento de todos los microorganismos, especialmente para las metanoarqueas (Acosta y Abreu, 2005; Gerardi, 2003).

- Sin importar el mecanismo de mezclado usado, se debe garantizar homogeneidad de pH, alcalinidad, temperatura y nutrientes en el digestor, además deber ser lento para no producir lisis celular, especialmente en las metanoarqueas (Gerardi, 2003).

1.3. Modelado del bioproceso

Una vez descritos los aspectos más importantes de la digestión anaerobia, se puede desarrollar su respectivo modelo matemático. Previo a cumplir este objetivo, el modelado de biorreactores puede basarse en diferentes enfoques:

1. Basado en poblaciones: Se estudia la dinámica de los microorganismos y sus interacciones con los reactivos mediante la ecología de poblaciones (Murray, 2002; Otto y Day, 2011). Sin embargo, no puede describir las reacciones químicas no biológicas del proceso como pH, temperatura, tasa de dilución, alimentación de sustrato, entre otros.
2. Basado en materia: Se realiza un balance de materia del bioproceso, aunque es siempre inexacto por las múltiples y complejas reacciones (bio)químicas del sistema (Bastin, 2013).
3. Basado en reacciones: Los microorganismos, enzimas, sustratos externos e internos y productos son representados de forma cuantitativa por las reacciones (bio)químicas del sistema sin emplear relaciones estequiométricas (Bastin, 2013).

Como se vio en la sección pasada, existe una gran cantidad de reacciones (bio)químicas complejas involucradas en la digestión anaerobia. Esto es común en bioprocesos y es la causa principal por la que el enfoque de reacciones es el más usado para su modelado. A continuación, se describirá el modelo general de un bioproceso, posteriormente se proporcionará un modelo de la digestión anaerobia desarrollado en la literatura y por último, se describirán las incertidumbres y perturbaciones asociadas al modelo descrito.

1.3.1. Caso general

Como se mencionó, el enfoque de materia es inadecuado para el modelado de bioprocesos. Sin embargo, es sumamente intuitivo considerar este enfoque para comprender el modelo general de bioprocesos. Así, por el principio de conservación de materia, la concentración de cualquier componente cumple lo siguiente:

$$\text{Acumulado} = \text{Generado} - \text{Consumido} + \text{Entrada} - \text{Salida} \quad (1.11)$$

Observe que la ecuación (1.11) es también válida si se usa el enfoque de poblaciones, siempre que se considere el consumo y generación como muertes y nacimientos. Ahora, el resto de esta sección consistirá en describir matemáticamente cada parte de (1.11) con respecto a un bioproceso.

Para empezar, los componentes **generados o consumidos** dependen de las m reacciones (bio)químicas irreversibles que describen la transformación de los n reactivos y productos del sistema. Algunos componentes pueden ser catalizadores (componente que es reactivo y producto) o autocatalizadores (componente que es producto y catalizador) de cada reacción.

Para expresar matemáticamente la transformación de componentes, primero denotemos a $\xi_i(t)$ con $i \in \{1, \dots, n\}$ como la concentración del i -ésimo componente del sistema en el instante de tiempo t . Además sea $\varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t)$ con $j \in \{1, \dots, m\}$ la j -ésima tasa de reacción asociada a cada reacción (bio)química. Entonces:

$$\text{Transformación de } \xi_i(t) = \sum_{j=0}^m k_{ij}(t) \varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t) \quad (1.12)$$

donde $k_{ij}(t)$ es un coeficiente pseudo-estequiométrico que indica como se transforma $\xi_i(t)$, es decir, un valor positivo indica la generación de $\xi_i(t)$, mientras que un valor negativo indica el consumo de $\xi_i(t)$. Cabe destacar que el hecho de que $k_{ij}(t)$ cambie en el tiempo es una generalización, pero es común que sea un parámetro constante. Por otro lado, cada $\varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t)$ puede describir diversas reacciones del bioproceso, como tasas de crecimiento, mantenimiento y mortalidad de microorganismos. Dado que se asume que una reacción química toma lugar solo si todos los reactivos necesarios están presentes, esto lleva al concepto de tasa de reacción específica, definida como la tasa de reacción por unidad de cada reactivo. Una de las tasas de reacción más importantes es la tasa de crecimiento específica y dos de los modelos más usados para describirla son:

$$\mu(S(t)) = \mu_{\max} \frac{S(t)}{S(t) + K_s} \quad (1.13)$$

$$\mu(S(t)) = \mu_{\max} \frac{S(t)}{S(t) + K_s + \frac{S(t)^2}{K_i}} \quad (1.14)$$

donde⁶ $S(t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ es un nutriente consumido por el microorganismo asociado, mientras que $\mu_{\max}, K_s, K_i \in \mathbb{R}_{> 0}$ son coeficientes estequiométricos asociados a la tasa de crecimiento máxima, el coeficiente de saturación media y el coeficiente de inhibición. La ecuación (1.13) se denomina modelo de Monod y representa el efecto de saturación del consumo de $S(t)$, como se muestra en la Fig.1.3a. Mientras que la ecuación (1.14) se denomina modelo de Haldane y representa el efecto de saturación e inhibición del consumo de $S(t)$, como se muestra en la Fig.1.3b.

Por otro lado, los componentes **entran** al bioproceso a partir de la dilución del componente sólido o a partir de la transferencia de gas al medio líquido del cultivo, como se muestra en la Fig.1.4. Matemáticamente, esto queda expresado como:

$$\text{Entrada de } \xi_i(t) = D(t) \xi_i^{in}(t) + k_L a(f_{gi}(t)) (\xi_i^*(t) - \xi_i(t)) \quad (1.15)$$

donde $D(t)$ es la tasa de dilución, $\xi_i^{in}(t)$ es la concentración de alimentación del componente $\xi_i(t)$, $k_L a(f_{gi}(t))$ es un coeficiente de la transferencia del flujo de gas $f_{gi}(t)$ al cultivo líquido y $\xi_i^*(t)$ es la concentración de saturación del gas. Cabe mencionar que la tasa $D(t)$ depende de la dinámica del flujo de entrada y salida del biorreactor.

⁶Se denota a \mathbb{R} como el conjunto de los números reales, mientras que $\mathbb{R}_{\geq 0} = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geq 0\}$ y $\mathbb{R}_{> 0} = \{x \in \mathbb{R} \mid x > 0\}$ denotan el conjunto de números reales positivos y estrictamente positivos.

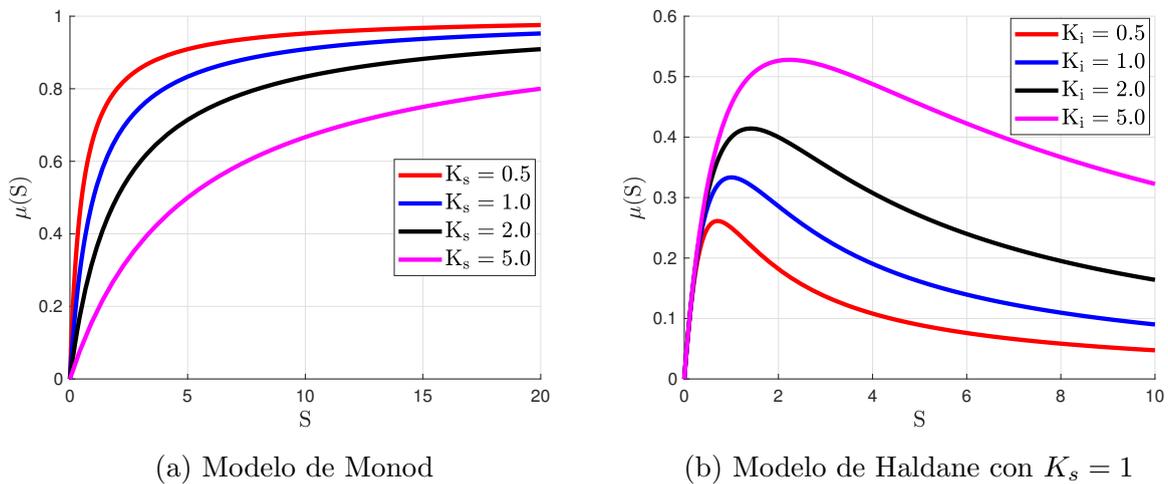


Fig 1.3: Dinámica de las tasas de crecimiento específica (1.13)-(1.14) con $\mu_{\max} = 1$.

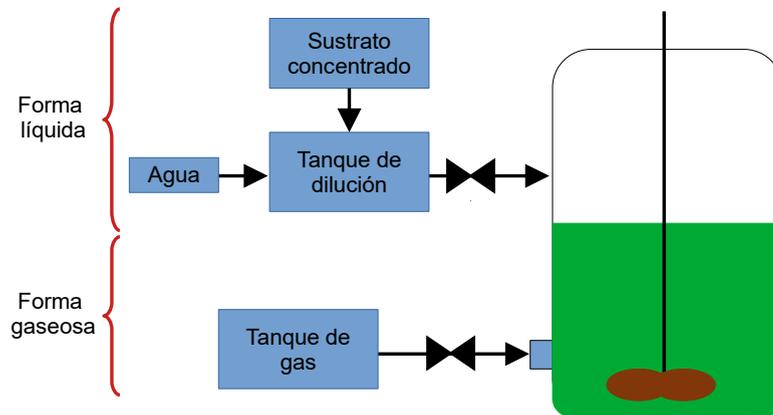


Fig 1.4: Formas de suministrar un componente $\xi_i(t)$ a un biorreactor. Modificado de Bastin (2013).

Como se mencionó en la Sección 1.1, un proceso continuo es aquel que tiene un flujo de entrada y salida iguales, así esta tasa puede expresarse como:

$$D(t) = \frac{f(t)}{V(t)} \tag{1.16}$$

donde $f(t)$ es el flujo de entrada y $V(t)$ es el volumen del reactor.

Luego, la dinámica de los componentes que **salen** del bioproceso pueden ser descritos de forma análoga a la entrada. Por un lado, si los flujos de entrada y salida son iguales, entonces cada vez que ingresa $\xi_i^{in}(t)$ para el componente $\xi_i(t)$ a su vez también es retirado por $D(t)\xi_i(t)$. Mientras que la transferencia líquido-gas ocurre siempre que $\xi_i(t)$ sea soluble a presión atmosférica, por tanto la transferencia de este componente esta descrito por:

$$q_i(\xi_i(t)) = \beta_i \xi_i \tag{1.17}$$

donde $\beta_i \in \mathbb{R}_{>0}$ es el coeficiente de transferencia líquido-gas definido por $q_i(\xi_i(t))$.

Por ende, la dinámica de salida de $\xi_i(t)$ esta descrita de la siguiente manera:

$$\text{Salida de } \xi_i(t) = D\xi_i(t) + q_i(\xi_i(t)) \quad (1.18)$$

Por último, la **acumulación** de $\xi_i(t)$ esta descrita por la suma de todos los elementos de la derecha de (1.11), es decir, tiene una razón de cambio en cada instante t . Esto puede expresarse como la derivada de $\xi_i(t)$ con respecto a t . Así, considerando las dinámicas (1.12), (1.15) y (1.18), se tiene que la dinámica de cada $\xi_i(t)$ es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\xi_1(t) &= \sum_{j=1}^m k_{1j}(t)\varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t) - D(t)\xi_1(t) - q_1(\xi_1(t)) + f_1(\xi_1^{in}(t), D(t), t) \\ &\quad \vdots \\ \frac{d}{dt}\xi_i(t) &= \sum_{j=1}^m k_{ij}(t)\varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t) - D(t)\xi_i(t) - q_i(\xi_i(t)) + f_i(\xi_i^{in}(t), D(t), t) \\ &\quad \vdots \\ \frac{d}{dt}\xi_n(t) &= \sum_{j=1}^m k_{nj}(t)\varphi_j(\xi_1(t), \dots, \xi_n(t), t) - D(t)\xi_n(t) - q_n(\xi_n(t)) + f_n(\xi_n^{in}(t), D(t), t) \end{aligned}$$

donde $f_i(\xi_i^{in}(t), D(t), t)$ es la transferencia de masa entrante a $\xi_i(t)$ y equivale a lo descrito en (1.15). Cabe destacar que este conjunto de ecuaciones diferenciales puede expresarse de forma vectorial, es decir, definiendo las matrices y vectores⁷:

$$\begin{aligned} \xi(t) &= \begin{bmatrix} \xi_1(t) \\ \vdots \\ \xi_n(t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n & \varphi(\xi(t), t) &= \begin{bmatrix} \varphi_1(\xi(t), t) \\ \vdots \\ \varphi_m(\xi(t), t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m \\ K(t) &= \begin{bmatrix} k_{11}(t) & \cdots & k_{1m}(t) \\ \vdots & & \vdots \\ k_{n1}(t) & \cdots & k_{nm}(t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m} & \xi^{in}(t) &= \begin{bmatrix} \xi_1^{in}(t) \\ \vdots \\ \xi_n^{in}(t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n \\ Q(\xi(t)) &= \begin{bmatrix} q_1(\xi(t)) \\ \vdots \\ q_n(\xi(t)) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n & F(\xi^{in}(t), D(t), t) &= \begin{bmatrix} f_1(\xi^{in}(t), D(t), t) \\ \vdots \\ f_n(\xi^{in}(t), D(t), t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n \end{aligned}$$

Finalmente se obtiene el modelo general para bioprocesos:

$$\frac{d}{dt}\xi(t) = K(t)\varphi(\xi(t), t) - D(t)\xi(t) - Q(\xi(t)) + F(\xi^{in}(t), D(t), t) \quad (1.19)$$

Por último, en la Fig.1.5 se muestra un resumen de la interpretación del modelo (1.19) a partir del balance de materia (1.11).

⁷Sea \mathbb{R}^n el conjunto vectorial de dimensión n cuyos elementos pertenecen a \mathbb{R} y $\mathbb{R}^{n \times m}$ el conjunto matricial de dimensión $n \times m$ donde cada elemento pertenece a \mathbb{R} .

$$\begin{array}{c}
 \text{Acumulado} \qquad \qquad \qquad \text{Salida} \qquad \qquad \qquad \text{Entrada} \\
 \underbrace{\frac{d}{dt}\xi(t)} = \underbrace{K(t)\varphi(\xi(t), t)}_{\substack{\text{Generado} \\ \text{Consumido}}} - \underbrace{D(t)\xi(t) - Q(\xi(t))}_{\text{Salida}} + \underbrace{F(\xi^{in}(t), D(t), t)}_{\text{Entrada}}
 \end{array}$$

Fig 1.5: Interpretación del modelo general de bioprocesos (1.19) mediante el principio de conservación de la materia.

Nota 1.2. *Note que cada elemento de $\xi(t)$, $\xi^{in}(t)$, $\varphi(\xi(t), t)$, $Q(\xi(t))$ y $F(\xi^{in}(t), D(t), t)$ es positivo. Dicha suposición es realista porque no se esperan valores negativos de ninguno de los elementos de dichos vectores. Por otro lado, $D(t)$ suele ser escalar y positivo, aunque en algunos casos puede representarse como una matriz de dimensión $n \times n$. Adicionalmente, para más detalles sobre el enfoque de reacción, así como el modelo general de bioprocesos y sus propiedades, se recomienda consultar (Bastin, 2013).*

1.3.2. Proceso de digestión anaerobia

Para empezar, en Batstone y cols. (2002) se desarrolló un modelo general de la dinámica del proceso de digestión anaerobia conocido como modelo de digestión anaerobia número uno (*Anaerobic Digestion Model 1* o ADM1). Este modelo describe las reacciones bioquímicas y físico-químicas de 32 reactivos y productos en 26 ecuaciones diferenciales más 8 ecuaciones algebraicas, tal que se incluye la hidrólisis de la materia orgánica, la acidogénesis de los compuestos orgánicos simples y la transformación de diversos VFA en acetato, la actividad metanogénica de metanógenos hidrogenotróficos y acetotróficos, así como la asociación y disociación de iones y la transferencia gas-líquido del digestor anaerobio. Es fácil ver que el modelo es sumamente complejo y poco atractivo para implementar un algoritmo de control. Así, una alternativa es usar el modelo de digestión anaerobia número dos (*Anaerobic Digestion Model 2* o ADM2) descrito en Bernard, Hadj-Sadok, Dochain, Genovesi, y Steyer (2001). Este consiste de 6 ecuaciones diferenciales más una ecuación algebraica, tal que describe la dinámica de la acidogénesis y metanogénesis, la transferencia gas-líquido, así como la disociación de los iones asociados a la alcalinidad y al carbono inorgánico total. Así, el modelo ADM2 tiene la siguiente forma⁸:

$$\dot{X}_1(t) = \mu_1(\xi(t))X_1(t) - \alpha D(t)X_1(t) \tag{1.20a}$$

$$\dot{X}_2(t) = \mu_2(\xi(t))X_2(t) - \alpha D(t)X_2(t) \tag{1.20b}$$

$$\dot{Z}(t) = D(t)(Z^{in}(t) - Z(t)) \tag{1.20c}$$

$$\dot{S}_1(t) = -k_1\mu_1(\xi(t))X_1(t) + D(t)(S_1^{in}(t) - S_1(t)) \tag{1.20d}$$

$$\dot{S}_2(t) = k_2\mu_1(\xi(t))X_1(t) - k_3\mu_2(\xi(t))X_2(t) + D(t)(S_2^{in}(t) - S_2(t)) \tag{1.20e}$$

$$\dot{C}(t) = k_4\mu_1(\xi(t))X_1(t) + k_5\mu_2(\xi(t))X_2(t) + D(t)(C^{in}(t) - C(t)) - q_C(\xi(t)) \tag{1.20f}$$

⁸Para cualquier función $x(t)$ diferenciable, $\frac{d}{dt}x(t) = \dot{x}(t)$.

$$q_M(\xi(t)) = k_6 \mu_2(\xi(t)) X_2(t) \quad (1.20g)$$

donde $X_1(t), X_2(t), Z(t), S_1(t), S_2(t), C(t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ son la concentración de acidobacterias y metanoarqueas, alcalinidad total, concentración de materia orgánica, VFA y carbono inorgánico total, respectivamente, además $k_i \in \mathbb{R}_{>0}$ con $i = \{1, \dots, 5\}$ son coeficientes pseudo-estequiométricos, $\alpha \in [0, 1]$ es la fracción de microorganismos suspendidos en el cultivo, $k_{La} \in \mathbb{R}_{>0}$ es la constante de transferencia líquido-gas, $Z^{in}(t), S_1^{in}(t), S_2^{in}(t), C^{in}(t)$ es la concentración de alimentación de $Z(t), S_1(t), S_2(t)$ y $C(t)$, respectivamente. Adicionalmente, $q_M(\xi(t))$ es la producción de metano, $q_C(\xi(t))$ es la transferencia líquido-gas de $C(t)$ y, $\mu_j(\xi(t))$ con $j = \{1, 2\}$ son las tasas de crecimiento específica de las acidobacterias y metanoarqueas, respectivamente.

A continuación se da una breve descripción de la interpretación del modelo ADM2:

- Las ecuaciones diferenciales (1.20a) y (1.20d) describen la fase de acidogénesis. Para este caso, la generación de $X_1(t)$ depende del consumo de $S_1(t)$, cuyas tasas de reacción son iguales y equivalen a la tasa de crecimiento específica $\mu_1(\xi(t))$, descrita por el modelo de Monod (1.21).

$$\mu_1(\xi(t)) = \mu_{1\max} \frac{S_1(t)}{S_1(t) + K_{s1}} \quad (1.21)$$

- Las ecuaciones diferenciales (1.20b) y (1.20e) describen la fase de metanogénesis. Aquí, la formación de $X_2(t)$ depende del consumo de $S_2(t)$, cuyo sustrato es suministrado por los desechos orgánicos que entran al digester anaerobio y por la actividad metabólica de $X_1(t)$. Cabe destacar que la transformación de $X_2(t)$ y $S_2(t)$ depende de la tasa de crecimiento específica $\mu_2(\xi(t))$ y dado que las metanoarqueas son sensibles a los cambios de pH por las altas concentraciones de VFA, dicha tasa de reacción es descrita con el modelo de Haldane (1.22) para considerar la inhibición de crecimiento causada por altas concentraciones de $S_2(t)$.

$$\mu_2(\xi(t)) = \mu_{2\max} \frac{S_2(t)}{S_2(t) + K_{s2} + \frac{S_2(t)^2}{K_i}} \quad (1.22)$$

- Además del $C(t)$ y $Z(t)$, otros reactivos suministrados son $S_1(t)$ y $S_2(t)$, que sirven como sustrato para los microorganismos.
- Como se muestra en la ecuación diferencial (1.20c), describir cuantitativamente $Z(t)$ ayuda a evaluar qué tan robusto es el sistema a los cambios de pH, producido por la disociación de $C(t)$ y $S_2(t)$.
- Como se mencionó en la Sección 1.1, los biorreactores pueden clasificarse de acuerdo a si el microorganismo esta suspendido en el cultivo o esta fijado a un soporte. El parámetro α tiene el propósito de modelar estas dos dinámicas, es decir, para $\alpha = 0$ se tiene un microorganismo completamente fijado y para $\alpha = 1$ se tiene un microorganismo completamente suspendido, mientras que para $0 < \alpha < 1$ se tiene un fragmento de microorganismo suspendido y otro fijado.

- La ecuación diferencial (1.20f) indica que $C(t)$ es producido a consecuencia de los procesos de acidogénesis y metanogénesis, así como la entrada de carbono inorgánico del afluente. Mientras que es retirado del medio de cultivo mediante la transferencia líquido-gas de $C(t)$ a CO_2 , descrita a continuación:

$$q_C(\xi(t)) = k_L a (C(t) + S_2(t) - Z(t) - K_H P_C(\xi(t))) \quad (1.23a)$$

$$P_C(\xi(t)) = \frac{\delta(\xi(t)) - \sqrt{\delta(\xi(t))^2 - 4K_H P_T (C(t) + S_2(t) - Z(t))}}{2K_H} \quad (1.23b)$$

$$\delta(\xi(t)) = C(t) + S_2(t) - Z(t) + K_H P_T + \frac{k_6}{k_L a} \mu_2(\xi(t)) X_2(t) \quad (1.23c)$$

donde $K_H, P_T, k_6 \in \mathbb{R}_{>0}$ son la constante de Henry de CO_2 , la presión total del reactor y un coeficiente pseudo-estequiométrico, respectivamente.

- Dado que el metano es poco soluble en agua, la transferencia gas-líquido es despreciable y así, siempre es expulsado en forma de gas, cuya generación depende de la actividad metabólica de $X_2(t)$, descrito en la ecuación algebraica (1.20g).
- Los productos del sistema son un lodo digerido compuesto por $X_1(t), X_2(t), Z(t), S_1(t), S_2(t)$ y $C(t)$, expulsado por la tasa de dilución $D(t)$, más la expulsión de CO_2 y metano, componentes principales del biogas.

Por último, observe que (1.20a)-(1.20f) pueden expresarse a partir del modelo general de bioprocesos (1.19) si⁹:

$$\begin{aligned} \xi(t) &= [X_1(t) \ X_2(t) \ Z(t) \ S_1(t) \ S_2(t) \ C(t)]^T \\ \xi^{in}(t) &= [0 \ 0 \ Z^{in}(t) \ S_1^{in}(t) \ S_2^{in}(t) \ C^{in}(t)]^T \\ Q(\xi(t)) &= [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ q_C(\xi(t))]^T \\ F(D(t), \xi^{in}(t), t) &= [0 \ 0 \ D(t)Z^{in}(t) \ D(t)S_1^{in}(t) \ D(t)S_2^{in}(t) \ D(t)C^{in}(t)]^T \\ K &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -k_1 & k_2 & k_4 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -k_3 & k_5 \end{bmatrix}^T \quad \varphi(\xi(t), t) = \begin{bmatrix} \mu_1(\xi(t))X_1 \\ \mu_2(\xi(t))X_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Con la única diferencia de que el término $D(t)\xi(t)$ de (1.20) es sustituida por $D(t)M_D\xi(t)$ con $M_D = \text{diag}(\alpha, \alpha, 1, 1, 1, 1)$ como una matriz diagonal.

1.3.3. Incertidumbres y perturbaciones del modelo

A pesar de que se tiene un modelo para el proceso continuo de digestión anaerobia, toda descripción matemática de un fenómeno es siempre inexacta con respecto al sistema modelado porque existen diversas dinámicas no conocidas, incertidumbres internas del modelo e incluso perturbaciones externas que pueden modificar drásticamente la dinámica del sistema. A continuación, se enunciarán varias incertidumbres y perturbaciones existentes tanto en el modelado general de bioprocesos que afectan a ADM2, así como ciertos problemas exclusivos de la digestión anaerobia:

⁹Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, entonces A^T denota su transpuesta.

- Existen varios modelos para describir $\varphi(\xi(t), t)$ e incluyen las dinámicas de múltiples factores como la interacción entre diversos sustratos, el efecto de pH y temperatura, salinidad, intensidad lumínica e inhibición y/o mortalidad causada por las toxinas del cultivo (Bastin, 2013; Darvehei y cols., 2018). Sin embargo, estos modelos no suelen ser útiles en condiciones reales de operación (Darvehei y cols., 2018). Aun más, son difíciles de modelar por su alta complejidad y no linealidad (Alcaraz-Gonzalez y Gonzalez-Alvarez, 2007; Bastin, 2013).
- Aunque cada elemento de $K(t)$ fuera constante, siempre tendrán incertidumbres porque su estimación es inexacta y dependen de las condiciones ambientales del reactor (Bastin, 2013; Dochain, 2003).
- Pueden existir perturbaciones aditivas y/o multiplicativas en $D(t)$ y $\xi^{in}(t)$, tal que pueden modificar drásticamente la dinámica del bioproceso (Reza López, 2021). La presencia de perturbaciones en $D(t)$ es consecuencia de las imperfecciones y dinámicas propias de los actuadores que la regulan (Reza López, 2021). Mientras que las perturbaciones de $\xi^{in}(t)$ son consecuencia de los cambios de concentración en los reactivos suministrados al reactor, como es el caso de la digestión anaerobia aplicada al tratamiento de aguas residuales (Alcaraz-Gonzalez y Gonzalez-Alvarez, 2007).
- La transferencia gas-líquido $Q(\xi(t))$ depende fuertemente de las condiciones físico-químicas del proceso, como temperatura y pH, tal que producen incertidumbres en los parámetros asociados como $k_L a$ y la concentración de saturación de gas (Bastin, 2013).
- No suelen ser consideradas las relaciones sinérgicas y antagónicas entre cada elemento de $\xi(t)$ (Bastin, 2013; Gerardi, 2003). Por ejemplo, en el modelo ADM2 no está descrito el efecto de competencia entre metanoarqueas y bacterias reductoras de sulfato, así como los efectos inhibitorios de diversas toxinas en el crecimiento de las acidobacterias y metanoarqueas.
- Ciertos tipos de configuraciones de biorreactores, o aquellos que tienen un mal mezclado, pueden provocar que el reactor tenga distribución espacio-temporal, por lo que el modelo general de bioprocesos (1.19) debe ser descrito con ecuaciones diferenciales parciales (Bastin, 2013).
- Muchos de los elementos de $\xi(t)$ no son medibles y en caso de serlo, dependen de sensores discontinuos, ruidosos, costosos e invasivos (Lourenço y cols., 2012).
- Pueden existir retardos en la medición, en las entradas o incluso en la dinámica de $\xi(t)$, tal que dificultan el monitoreo y control del bioproceso (Bastin, 2013; Dochain, 2003; Simutis y Lübbert, 2015).

- El hecho de que el modelo ADM2 sea relativamente simple¹⁰, provoca que ciertas dinámicas de la digestión anaerobia no sean descritas, como la dinámica del ácido sulfhídrico, los efectos de desnitrificación, la actividad metabólica de bacterias hidrolíticas, así como otros procesos fermentativos (Gerardi, 2003).

1.4. Enfoque evolutivo

Para concluir este capítulo, se dará una breve justificación de las incertidumbres existentes en el proceso de digestión anaerobia y su modelo asociado bajo un enfoque evolutivo. Para cualquier bioproceso, las causas de estas incertidumbres y perturbaciones son explicadas por las siguientes razones:

1. Dificultad en modelar las reacciones bioquímicas complejas del proceso.
2. Imperfección en los dispositivos acoplados al biorreactor, tal que producen cambios en las condiciones abióticas del cultivo.

Estas razones han sido ampliamente reportadas en la literatura (Alcaraz-Gonzalez y Gonzalez-Alvarez, 2007; Ali y cols., 2015; Ascencio y cols., 2004; Bastin, 2013; Carreño-Zagarra y cols., 2019; Darvehei y cols., 2018; Dochain, 2003; Dochain y cols., 2011; Garzón-Castro y cols., 2018; Guay y cols., 2004; Ramírez-Carmona y cols., 2018; Reza López, 2021; H.-H. Wang y cols., 1999; H. Wang y cols., 2020). Sin embargo, aunque el primer punto es una consecuencia de modelar un bioproceso con el enfoque de reacción, las incertidumbres y perturbaciones de su modelo no siempre son justificadas por cambios en las condiciones ambientales. El cultivo de dos poblaciones microbianas iguales en condiciones abióticas equivalentes pueden producir respuestas adaptativas diferentes debido al efecto de diversas fuerzas evolutivas (Elena y Lenski, 2003). Además, la digestión anaerobia esta conformada por una compleja comunidad microbiológica de diferentes especies y generalmente, la estructura de una comunidad microbiológica determina su función (O'Brien, Hodgson, y Buckling, 2013). Más aún, cambios evolutivos en organismos focales (genes, especies, poblaciones) pueden estar interrelacionados con cambios ecológicos (poblaciones, comunidades, ecosistemas) (Hendry, 2016).

Como se menciona en Hendry (2016), estos procesos se conocen como **dinámicas eco-evolutivas**, que definen la relación entre ecología y evolución que actúan en la misma escala contemporáneas de tiempo, cuyas interacciones son descritas a continuación:

- **Ecología a Evolución:** Cambios ecológicos permiten que la selección natural actúe sobre las mutaciones del genotipo¹¹ de los organismos focales, tal que algunas de ellas pueden resultar benéficas y producir adaptación e inducir cambios en su adecuación.

¹⁰En Hassam, Ficara, Leva, y Harmand (2015) se modificó el modelo ADM2 para establecer una relación con el modelo ADM1. Si bien puede utilizarse este modelo para realizar control y a su vez tener una mejor descripción del proceso de digestión anaerobia, por simplicidad se seguirá usando el modelo (1.20).

¹¹Como menciona Hendry (2016), es más adecuado considerar que la selección actúa sobre el fenotipo (conjunto de características físicas expresados por un organismo, como fisiología, morfología y conducta, que interactúan con el ecosistema) de un organismo por dos razones. La **primera** es porque la selección actúa directamente en el fenotipo porque el genotipo es afectado indirectamente por su asociación con el fenotipo al influir sobre su adecuación. La **segunda** es porque los efectos ecológicos producidos por un organismo son consecuencia de su fenotipo más que por su genotipo. Cabe mencionar que la **variabilidad fenotípica** de un organismo es consecuencia de su variabilidad genética y plasticidad fenotípica.

Por otro lado, para poblaciones pequeñas, la deriva génica puede actuar sobre las mutaciones del genotipo y modificar la adecuación de la población. Adicionalmente, el flujo génico también interactúa sobre las mutaciones del genotipo, tal que pueden restringir los efectos de la selección al mantener la estabilidad genotípica de los organismos focales. Los efectos del flujo génico puede reducirse por especiación ecológica causada por fenómenos geológicos y/o biológicos.

- **Evolución a Ecología:** Cambios evolutivos en el genotipo de los organismos focales producen cambios en su fenotipo que afectan la dinámica de sus poblaciones (tasas de natalidad/mortalidad, estabilidad), la estructura de su comunidad (número y diversidad de especies, longitud de la cadena trófica, resistencia a invasión) y a la función ecosistémica (biomasa, flujo de nutrientes) directamente o indirectamente.

Actualmente, se ha incrementado el estudio de las dinámicas eco-evolutivas en diversas comunidades microbiológicas, no necesariamente asociado a la digestión anaerobia, por diversas razones (Elena y Lenski, 2003; Prosser y Martiny, 2020). Estas comunidades son fáciles de cultivar, proliferan rápidamente en espacios pequeños, pueden ser almacenados para su posterior uso, son asexuales, además permiten estudiar directamente el proceso evolutivo y realizar experimentos para su estudio (Elena y Lenski, 2003).

Los resultados experimentales reflejan diversas dinámicas eco-evolutivas en comunidades microbiológicas. Para empezar, se ha visto que la microevolución de los organismos focales presenta lazos de realimentación con la estructura de su comunidad, modificando el ecosistema en el que viven (O'Brien y cols., 2013). Estos procesos microevolutivos son sumamente rápidos y ocurren en intervalos de tiempo variables, desde días hasta semanas (O'Brien y cols., 2013). Por otro lado, los cambios estructurales de una comunidad microbiológica son consecuencia de la coalescencia (combinación de diferentes organismos o comunidades biológicas) de diversas comunidades (Castledine, Sierocinski, Padfield, y Buckling, 2020). Se ha visto que las relaciones antagónicas fuertes entre individuos, como relación parásito-hospedero, presa-depredador y competencia intra/inter especie son fundamentales para modificar la estructura de la comunidad (O'Brien y cols., 2013). Incluso, relaciones mutualistas como las sintróficas también pueden causar cambios en la estructura de la comunidad (Castledine y cols., 2020).

Sin embargo, muchos de estos estudios han sido realizados en comunidades de dos especies y no existe prueba contundente de que los cambios evolutivos en los organismos focales de una comunidades con múltiples especies produzcan cambios en la estructura del ecosistema (O'Brien y cols., 2013). Esto se debe a que puede no existir especiación biológica entre los integrantes de la comunidad y por ende, el flujo génico reduzca el efecto de la selección divergente en la adaptación y adecuación de las comunidades (Hendry, 2016). Por otro lado, se ha visto un compromiso entre la adaptación biótica-abiótica, es decir, el incremento de la adaptación entre organismos focales a cambio de reducir la adaptación de estas a las condiciones ambientales y viceversa (O'Brien y cols., 2013). Este fenómeno incentiva la selección de organismos generalistas y especialistas de la comunidad (Elena y Lenski, 2003). La causa de esta dinámica ha sido poco estudiada, pero se teoriza que es consecuencia de antagonismo pleiotrópico¹² (Elena y Lenski, 2003).

¹²Mutación que produce efectos positivos a corto plazo pero efectos detrimentales a largo plazo (Elena y Lenski, 2003).

Observe que las dinámicas eco-evolutivas dependen de que la selección natural actúe indirectamente sobre las mutaciones existentes del genotipo. Los experimentos han mostrado que la adecuación se incrementa aceleradamente en las primeras generaciones y después sigue creciendo lentamente en condiciones ambientales constantes (Elena y Lenski, 2003). Esto se debe a que el potencial de adaptación genética nunca se acaba por el efecto que tienen las mutaciones benéficas en la población, la acción de la deriva génica (solo válido en poblaciones pequeñas) sobre las mutaciones de menor beneficio y el efecto de la interferencia clonal (Elena y Lenski, 2003). Sin embargo, las comunidades focales de mucho menor dimensión están principalmente sujetas a la deriva génica, tal que la fijación de mutaciones ocurre estocásticamente (Elena y Lenski, 2003). Aun más, dado que las mutaciones detrimentales son más comunes que las benéficas y a que el efecto de estas últimas tarda más en propagarse en poblaciones asexuales, existe una alta posibilidad de que la adecuación de estas poblaciones pequeñas se reduzca drásticamente (Elena y Lenski, 2003). Adicionalmente, se ha visto que la transferencia horizontal de genes puede reducir el efecto de la selección de forma similar al flujo génico (Rainey y Quistad, 2020).

El proceso de digestión anaerobia está influenciado por diversas dinámicas eco-evolutivas, cuyas pruebas se dan a continuación:

- Siempre existe una comunidad dominante en la coexistencia de diversas comunidades metanogénicas, consecuencia de diversos procesos coevolutivos entre las especies, tal que su adecuación en aislamiento es mayor (Sierocinski y cols., 2017).
- La coevolución de la bacteria reductora de sulfato *Desulfovibrio vulgaris* con el metanógeno *Methanococcus marisnigri* incrementa de forma considerable la producción de metano (Hillesland y Stahl, 2010).
- La acidobacteria *Pelotomaculum thermopropionicum* es un microorganismo que oxida propionato y forma relaciones simbióticas con metanoarqueas a través de la formación de flagelos que comunican con dichas bacterias, tal que no crece fácilmente en aislamiento (Kato y Watanabe, 2010).
- La formación de ácido húmico incrementa la actividad enzimática de microorganismos hidrolíticos y acidobacterias, pero reduce la actividad enzimática de metanoarqueas (X. Wang y cols., 2022).
- La presencia de antibióticos y genes asociados a su resistencia pueden crear microorganismos patógenos resistentes a antibióticos, así como modificar la estructura de comunidades metanogénicas, tal que elimina metanógenos acetotróficos a costa de la proliferación de metanógenos hidrogenotróficos (Aziz y cols., 2022).
- Como se menciona en Elena y Lenski (2003), el cultivo de microorganismos como *Escherichia coli* en biorreactores continuos y *batch*, muestra cambios en la regulación de sus genes más que mejoras en su actividad enzimática, por consecuencia, garantiza su supervivencia en medios con nutrientes limitados. Sin embargo, dicho microorganismo es un patógeno importante en la fase de acidogénesis y es responsable de la formación de malos olores en el bioproceso (Gerardi, 2003).

Por último, tanto las incertidumbres como las perturbaciones del bioproceso causadas por las dinámicas eco-evolutivas están descritas en dos términos del modelo general (1.19).

Por un lado, la transferencia líquido-gas $Q(\xi(t))$ porque los gases dependen fuertemente de actividades físico-químicas (Bastin, 2013), cambiantes en función de la estructura de la comunidad microbiológica y las condiciones de operación del biorreactor. Por otro lado, tanto la dinámica anterior como las tasas de reacción $\varphi(\xi(t), t)$ y la matriz de coeficientes pseudo-estequiométricos $K(t)$ están sujetas a incertidumbres por los lazos realimentados existentes entre la microevolución de los microorganismos focales con la estructura y función de su comunidad. Note que ésta debe ser la causa principal del interés de estimar las tasas de reacción, es decir, además de no existir sensores adecuados para su medición e involucrar dinámicas complejas y no lineales por las tasas de reacción, las dinámicas eco-evolutivas hacen un desafío obtener modelos adecuados sin incertidumbres y con estructuras perfectamente conocidas de las tasas de reacción.

Capítulo 2

Control por rechazo activo de perturbaciones

Una vez descrito el proceso continuo de digestión anaerobia mediante un modelo matemático, lo siguiente es diseñar e implementar un algoritmo de control para modificar la dinámica del sistema. Sin embargo, existen varios aspectos que no se han mencionado sobre el algoritmo de control, como la forma de diseñarlo, analizarlo e implementarlo en la dinámica del bioproceso, así cómo el algoritmo actúa sobre el sistema.

En este capítulo, primero se dará una breve introducción a la teoría de control a partir del estudio de los componentes de un sistema de control. Posteriormente, se introducirá el control por rechazo activo de perturbaciones y cómo su estructura puede incrementar su robustez ante las incertidumbres y perturbaciones del bioproceso. Más tarde, se realizará un análisis de estabilidad del ADRC en lazo cerrado con el bioproceso, tal que se garantizará estabilidad del error de seguimiento de trayectoria. Por último, se proporcionará una breve discusión sobre las limitaciones del algoritmo diseñado y cómo las redes neuronales artificiales pueden estimar las dinámicas desconocidas del bioproceso.

2.1. Conceptos preliminares

Como se mencionó en la introducción, el monitoreo y control del digestor optimiza el proceso de digestión anaerobia. Para ello, es necesario implementar un sistema de control, es decir, un conjunto de unidades funcionales interconectadas que producen un resultado deseado (William, 1991), cuya estructura general se muestra en la Fig. 2.1 y sus componentes principales se describen a continuación.

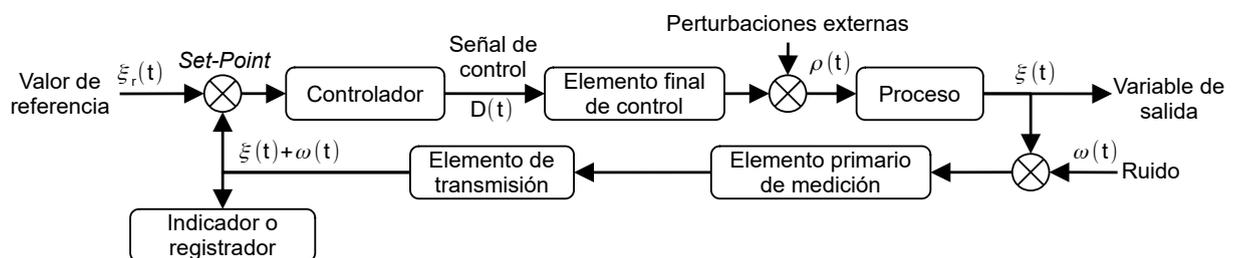


Fig 2.1: Estructura general de un sistema de control. Modificado de Solé (2005).

Para empezar, el **proceso** es un sistema dinámico susceptible de ser dirigido a un propósito determinado (Solé, 2005). Observe que en este caso corresponde al digestor anaerobio, cuya concentración de sus reactivos y productos, así como sus condiciones de operación, cambian con respecto al tiempo, generando un sistema dinámico. Idealmente, la mejor forma de estudiar las propiedades de una planta acoplada a un sistema de control es tenerla físicamente implementada. Sin embargo, como se describe en Gerardi (2003), en el caso de la digestión anaerobia existen ciertos impedimentos:

- Los costo de inversión, mantenimiento y operación de un digestor anaerobio son elevados.
- La implementación empírica de un sistema de control puede provocar resultados insatisfactorios en las reacciones químicas del sistema. Incluso, puede eliminar o remover a los microorganismos responsables de la reacción.
- Los tiempos de formación de biomasa de acidobacterias y en especial de metanoarqueas son extremadamente largos, por lo que el tiempo de ejecución de un sistema de control puede durar semanas.

Por estas razones, es necesario describir matemáticamente dicho bioproceso. Sin embargo, como se describirá en la siguiente sección, no siempre es indispensable conocer su modelo para implementar un algoritmo de control.

Luego, el hecho de que un proceso sea dirigido a un propósito deseado implica que debe existir al menos una variable que pueda manipular al sistema, denominada **entrada o variable de control** (Solé, 2005). En el caso de los bioprocesos, se puede considerar la tasa de dilución $D(t)$ o la concentración de alimentación ξ^{in} (Bastin, 2013; Schügerl y Bellgardt, 2012; Zhao y Skogestad, 1997). Mas aún, si una de estas variables manipula la concentración de microorganismos se denomina **turbidostato**, pero si manipula la concentración de uno de los reactivos se denomina **nutristato** (Zhao y Skogestad, 1997). Aunque se recomienda el empleo de ξ^{in} como variable de control (Zhao y Skogestad, 1997), en este trabajo se usará $D(t)$ puesto que es la entrada más usada y sencilla de aplicar en bioprocesos (Gaida, Wolf, y Bongards, 2017). Cabe destacar que estas variables de control ejecutan la misma función, es decir, modifican el balance de materia de un componente al permitir su entrada o salida del biorreactor. Para la tasa de dilución su efecto es aún más claro, dado que permite el ingreso de más reactivo y a su vez remueve dicho componente, como se muestra en la Fig. 2.2.

Nota 2.1. *El flujo de gas de un reactivo del biorreactor, como la concentración de CO_2 , también puede ser una variable de control. Sin embargo, no todos los reactivos pueden suministrarse en forma gaseosa, su dinámica es sumamente compleja y difícil de modelar, además es sensible a los cambios en las condiciones de operación (Bastin, 2013).*

Ahora, para lograr que el proceso alcance un propósito deseado, primero debe definirse cual es este propósito. Existen diversos problemas de control para sistemas dinámicos, pero uno de los más comunes es que la salida del sistema pueda seguir un **valor de referencia** deseado $\xi_r(t) = \xi_r$ (Nise y Romo, 2002). Por ejemplo, se podría desear maximizar la producción de metano a partir de optimizar la concentración de metanoarqueas en el reactor, como similarmente se ha hecho en Ramírez-Carmona y cols. (2018) y H.-H. Wang y cols. (1999).

$$\frac{d}{dt}\xi_i = \underbrace{\sum_{j=1}^m k_{ij}\varphi_j}_{\text{Generado Consumido}} + \underbrace{D\xi_i^{in}}_{\text{Entrada}} - \underbrace{D\xi_i}_{\text{Salida}} - \underbrace{q_i}_{\text{Salida Gas}}$$

Fig 2.2: Efecto de la tasa de dilución D , la concentración de alimentación ξ_i^{in} y la transferencia de materia gaseosa q_i sobre la dinámica de algún componente ξ_i del biorreactor.

Otras propuestas para la digestión anaerobia son la minimización de materia orgánica acumulada en el digestor para cumplir diversas normas de tratamiento de aguas residuales, maximizar la concentración de VFA o de la biomasa de alguno de los microorganismos involucrados, mantener la alcalinidad a un valor deseado para evitar cambios bruscos de pH, entre otros (Gerardi, 2003).

Así, el **objetivo de control** es que la tasa de dilución D manipule la dinámica de un reactivo o producto ξ_i tal que siga el valor de referencia deseado ξ_{ri} , robusto ante las incertidumbres y perturbaciones del proceso de digestión anaerobia, causadas por las dinámicas bióticas y abióticas descritas en la Secciones 1.3.3 y 1.4. Dicha tarea es ejecutada por el **controlador**, formada por una computadora o un microcontrolador asociado al **set-point**, que determina la diferencia entre el error del valor de referencia ξ_{ri} y la variable de salida ξ_i (Ogata, 2003; Solé, 2005). El hecho de que la salida sea comparada con respecto al valor de referencia y sea usada por la acción de control, denomina la estructura de la Fig. 2.1 como **sistema de control con realimentación**, donde la salida se denomina **señal de realimentación** y es generalmente **negativa** (Kuo, 1996; Ogata, 2003). Note que ξ_i debe ser medida mediante un **elemento primario de medición** y puede estar acoplado a un **elemento de transmisión**, cuya función es transformar la señal medida previamente en una señal adecuada para el controlador que, en este caso, corresponde a una señal eléctrica (Solé, 2005). Además, la señal medida ξ_i puede ser mostrada y registrada con un **indicador o registrador** empleando una computadora u otra interfase humano-máquina (Solé, 2005). Además, el controlador posee internamente un algoritmo que usa ξ_{ri} y ξ_i para enviar una señal de control al **elemento final de control**, que físicamente modifica la dinámica del sistema (Dorf, Bishop, Canto, Canto, y Dormido, 2005; Solé, 2005). Para el bioproceso, dicho componente es una servo-válvula que modifica el flujo de entrada f y, como se muestra en (1.16), altera la tasa de dilución D (Solé, 2005).

Nota 2.2. Cabe destacar que si ξ_{ri} es constante, el problema de control corresponde a un **seguimiento de referencia**, mientras que si ξ_{ri} varía en el tiempo, se tiene un problema de **seguimiento de trayectoria**.

Nota 2.3. Pueden parecer ajenos los conceptos de realimentación a un sistema biológico, pero la realimentación es sumamente común en diversos procesos biológicos.

Como se describe en Hill, Wyse, Anderson, y Anderson (2004), la regulación de glucosa en sangre es un ejemplo de realimentación negativa, mientras que la formación de potenciales de acción en la membrana plasmática y la inyección de oxitocina para la dilatación del cervix durante el parto son ejemplos de realimentación positiva. Sin embargo, a diferencia de un proceso biológico, no es común el empleo de la realimentación positiva en un sistema de control aplicada en ingeniería, como el control de un sistema mecánico u eléctrico.

Ahora, formalicemos matemáticamente cómo se cumple el objetivo de control. Dado que expresamos el modelo de digestión anaerobia (1.20) como el modelo general de bioprocesos (1.19), entonces la dinámica de un reactivo o producto del bioproceso es:

$$\dot{\xi}_i = \sum_{j=1}^m k_{ij}\varphi_j + D(\xi_i^{in} - \xi_i) - q_i \quad (2.1)$$

donde $m = 2$ por la cantidad de tasas de reacción involucradas e $i = \{1, \dots, 6\}$ por la cantidad de reactivos y productos descritos en ξ , es decir, la concentración de acidobacterias, metanoarqueas, materia orgánica, ácidos grasos volátiles, alcalinidad total y carbono inorgánico total. Así, para que el proceso alcance el propósito deseado, un reactivo o producto ξ_i de la digestión anaerobia debe seguir el valor de referencia deseado ξ_{ri} , a partir de la variable de control D . No obstante, recuerde que las dinámicas eco-evolutivas causan el desconocimiento en las tasas de reacción, los coeficientes pseudo-estequiométricos y la tasa de transferencia líquido-gas. Por tanto, definiendo la **incertidumbre total**¹ del bioproceso $\phi_i = \sum_{j=1}^m k_{ij}\varphi_j - q_i$, entonces (2.1) se puede expresar como:

$$\dot{\xi}_i = D(\xi_i^{in} - \xi_i) + \phi_i \quad (2.2)$$

Más aún, la descripción de (2.2) puede mejorar si se cumple que:

- La tasa de dilución $D = u/(\xi_i^{in} - \xi_i)$ con $\xi_i^{in} - \xi_i \neq 0$ (para evitar el caso $u/0$), donde u es una entrada.
- La dinámica ϕ_i es continuamente diferenciable², denotando $\dot{\phi}_i = \alpha_i$.
- La variable de salida ξ_i se denota como y .

Entonces, el sistema (2.2) se expresa de la forma siguiente:

$$\dot{\xi}_i = u + \phi_i \quad (2.3a)$$

$$\dot{\phi}_i = \alpha_i \quad (2.3b)$$

$$y = \xi_i \quad (2.3c)$$

Dado que u es el algoritmo de control interno del controlador que va a diseñarse, se debe de conocer perfectamente ξ_i y ϕ_i . Estas dinámicas corresponden a las variables internas del sistema que representan su memoria y determinan, junto con su valor inicial en t_0 ($\xi_i(t_0)$ y $\phi(t_0)$), la entrada u y salida y , la dinámica futura del proceso (Khalil, 2002; Szidarovszky y Bahill, 2018).

¹Es la suma de las dinámicas desconocidas y las perturbaciones del modelo. En este caso, describe las dinámicas desconocidas del bioproceso, es decir, las tasas de reacción, los coeficientes pseudo-estequiométricos y la transferencias líquido gas del reactivo o producto a manipular.

²Una función $f(x)$ se denomina continuamente diferenciable si $f(x)$ y $\dot{f}(x)$ son continuas $\forall x \in \mathbb{R}$.

Lo anterior se conoce como **estado** y permite describir cualquier sistema dinámico en la teoría de control moderna. Por dar un ejemplo de su utilidad, suponga que ξ_i fuera la concentración de metanoarqueas con un valor inicial $\xi_i(t_0) \neq 0$, con t_0 el tiempo donde inicia el bioproceso y además, $u = \phi = \phi(t_0) = 0 \forall t \geq t_0$, entonces $\xi_i(t) = \xi_i(t_0) \forall t \geq t_0$, es decir, la concentración de metanoarqueas sería constante e igual a la inicial. Aunque este ejemplo no sea realista, muestra claramente como podemos conocer la dinámica interna de (2.3) a partir del estado y sus condiciones iniciales, más su entrada y salida. Formalmente, el estado se define a continuación (William, 1991).

Definición 2.1. Las variables de estado $x_i(t)$ con $i = \{1, \dots, n\}$ de un sistema consisten de un conjunto mínimo de parámetros que complementan el estado de un sistema de la forma siguiente: Si para cualquier tiempo inicial $t_0 \in \mathbb{R}_{>0}$, los valores iniciales de las variables de estado $x_i(t_0)$ son conocidas, entonces la salida $y(t_1)$ y los valores de $x_i(t_1)$ son determinados de forma única para cualquier $t_1 \in \mathbb{R}_{>0}$, $t_1 > t_0$, con una entrada $u(t)$ conocida y definida en $t \in [t_0, t_1]$.

Luego, aunque esté descrita la variable de control para el bioproceso, no se ha mencionado si siempre existe al menos una estrategia de control para u tal que ξ_i pueda seguir alguna ξ_{ri} propuesta. Para la digestión anaerobia, un contraejemplo es más que suficiente para mostrar que no siempre existe tal u . Por ejemplo, es imposible lograr que la concentración de metanoarqueas sea de 1 Kg/L en 10 s si la concentración inicial es de 1 g/L. Así, para determinar cuándo existe u se debe mostrar que el bioproceso cumple la propiedad de **controlabilidad**, descrita formalmente a continuación (Szidarovszky y Bahill, 2018).

Definición 2.2. Un sistema dinámico con condición inicial $x(t_0) = x_0$ se dice controlable al estado $x(t_1) = x_1$ con $t_1 > t_0$ si existe una entrada $u(t)$ tal que $x(t_1) = x_1$ (Fig. 2.3).

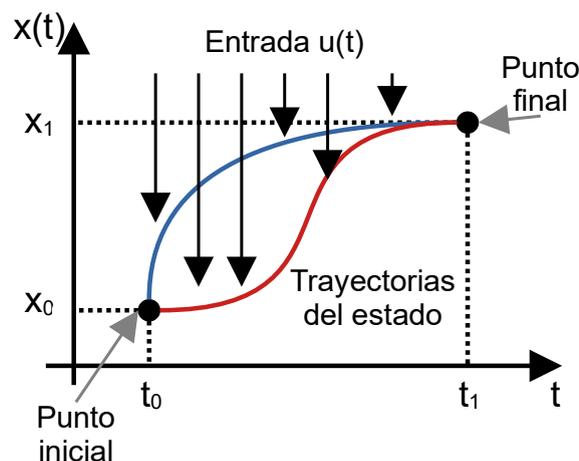


Fig 2.3: Concepto de controlabilidad. La gráfica indica que la existencia de un algoritmo de control no es única y por ende, pueden generarse diferentes trayectorias (azul y rojo) tal que $x(t_1) = x_1$. Modificado de Szidarovszky y Bahill (2018).

Para estudiar el concepto de controlabilidad, el sistema (2.3) se puede representar en variables de estado, es decir:

$$\dot{x} = Ax + Bu + N\alpha_i \quad (2.4a)$$

$$y = Cx \quad (2.4b)$$

donde $x = [x_1 \ x_2]^T = [\xi_i \ \phi_i]^T$ es el estado, además

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$C = [1 \ 0] \quad N = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Observe que (2.4) corresponde a un sistema lineal e invariante en el tiempo (LTI) con perturbación, es decir, cumple el principio de superposición³, las matrices A , B , C y N son constantes, además $N\alpha_i$ describe las perturbaciones e incertidumbres del sistema. Por lo tanto, el siguiente teorema describe condiciones necesarias y suficientes para concluir si un sistema LTI sin perturbación ($\alpha_i = 0$) satisface la propiedad de controlabilidad.

Teorema 2.1. *Un sistema LTI de orden q es controlable si y solo si la matriz*

$$C = [B \ AB \ \dots \ A^{q-1}B]$$

es de rango completo, es decir, $\text{rank}(C) = q$.

Demostración. Vea Teorema 5.4 de Szidarovszky y Bahill (2018). □

Así, el sistema (2.4) no es controlable dado que $\text{rank}(C) = 1$ pero $q = 2$. No obstante, como se describe en el Teorema 5.5 de (Szidarovszky y Bahill, 2018), se puede descomponer un sistema LTI en una parte controlable y no controlable. Por lo tanto, para el sistema (2.4), la parte controlable corresponde a ξ_i y la no controlable es ϕ_i . Observe que el objetivo de control es que ξ_i siga ξ_{ri} , pero no es de importancia que ϕ_i tenga un comportamiento en particular, por lo que el sistema de control sigue teniendo el mismo propósito.

Luego, dado que ϕ_i no es controlable, una propuesta de control para el sistema (2.4) sería que $u = u_0 - \phi_i$, así $\dot{\xi}_i = u_0$ con u_0 una estructura conocida. Sin embargo, ϕ_i representa las incertidumbres y perturbaciones del bioproceso causado por diversas dinámicas bióticas y abióticas. Peor aún, no existe un sensor que pueda medir dicha variable. Así, una cuestión importante es proponer un algoritmo que pueda estimar ϕ_i a partir de u , ξ_i y $\xi_i(t_0)$. Para saber si esto es posible, el sistema (2.4) debe satisfacer la propiedad de **observabilidad**, cuya definición se da a continuación (Szidarovszky y Bahill, 2018).

Definición 2.3. Un sistema dinámico con estado inicial x_0 se dice observable en un intervalo $[t_0, t_1]$ si las trayectorias de $u(t)$ y $y(t)$ en $t \in [t_0, t_1]$ son determinadas únicamente por x_0 (Fig. 2.4).

Luego, de forma similar al concepto de controlabilidad, el siguiente teorema describe condiciones necesarias y suficientes para concluir si un sistema LTI sin perturbación ($\alpha_i = 0$) satisface la propiedad de observabilidad.

³Una función lineal satisface el principio de superposición si $f(x + y) = f(x) + f(y)$ y $f(\alpha x) = \alpha f(x)$.

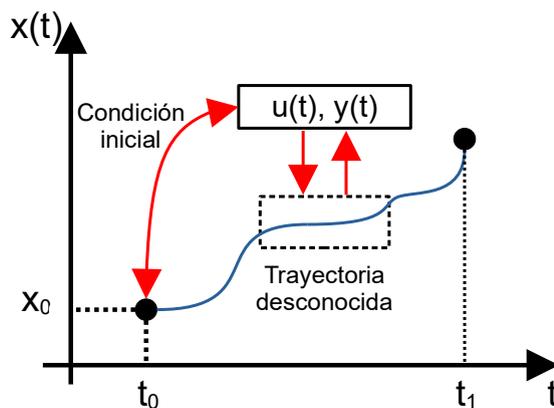


Fig 2.4: Concepto de observabilidad. Modificado de Szidarovszky y Bahill (2018).

Teorema 2.2. *Un sistema LTI de orden q es observable para cualquier $t_1 > t_0$ si y solo si la matriz*

$$\mathcal{O} = \begin{bmatrix} C \\ CA \\ \vdots \\ CA^{q-1} \end{bmatrix}$$

es de rango completo, es decir, $\text{rank}(\mathcal{O}) = q$.

Demostración. Vea Teorema 6.3 de Szidarovszky y Bahill (2018). □

Para el sistema (2.4), se concluye que el sistema es observable porque $\text{rank}(\mathcal{O}) = q = 2$. En la siguiente sección daremos una estructura para el observador de estados. Adicionalmente, la Fig. 2.5 muestra un esquema de los componentes de un sistema de control para el proceso de digestión anaerobia.

Por otro lado, un sistema de control realimentado también se denomina como **sistema de lazo cerrado**. No obstante, puede evitarse usar la señal de realimentación al sistema de control y denominarse como **sistema de lazo abierto**. Aunque implementar un sistema en lazo abierto resulta más sencillo y económico, requiere que el proceso sea perfectamente conocido y no sea perturbado por señales externas. Sin embargo, como se ha discutido, eso no es posible en bioprocesos ni mucho menos para cualquier tipo de sistema, por lo que las ventajas de aplicar un sistema en lazo cerrado son las siguientes:

- Reduce la diferencia entre la variable de salida ξ_i y la de referencia ξ_{ir} (Kuo, 1996; Nise y Romo, 2002; Ogata, 2003).
- Robustece al sistema de control ante perturbaciones externas, ruido en la medición e incertidumbres del proceso (Kuo, 1996; Nise y Romo, 2002; Ogata, 2003).
- Garantizar **estabilidad** en lazo cerrado (Kuo, 1996; Ogata, 2003).

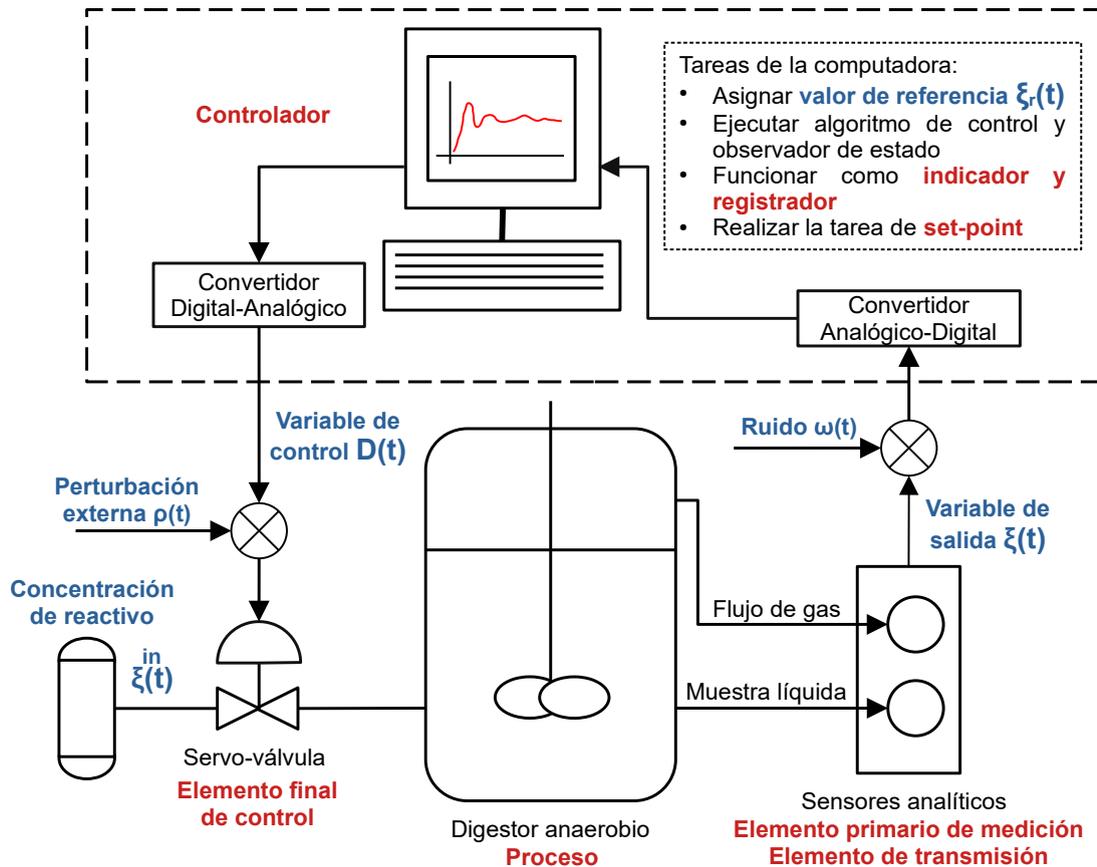


Fig 2.5: Estructura del sistema de control para el proceso continuo de digestión anaerobia. Los elementos marcados con rojo representan los componentes del sistema de control, mientras que los marcados en azul son las variables del bioproceso. Modificado de López y cols. (2020).

Este último objetivo es el más importante para muchos sistemas de control. Cuando se habla de estabilidad del sistema en lazo cerrado se pueden asumir diferentes enfoques. Para empezar, se puede estudiar simplemente si el sistema es estable o inestable, es decir, estudiar su **estabilidad absoluta**, o puede estudiarse el grado de estabilidad que tiene el proceso, denominado **estabilidad relativa** (Kuo, 1996). Previo a establecer criterios para estudiar la estabilidad de (2.4) debemos definir este concepto. Por un lado, si garantizamos que la variable de control $D(t)$ sea acotada, por ejemplo que sea constante, sería esperable que la variable de salida $\xi_i(t)$ también fuera acotada. Lo anterior tiene sentido dado que existen limitaciones físicas en el elemento final de control que acotan $D(t)$, además la concentración de los componentes del sistema, en especial los microorganismos, están sometidos a recursos y espacio limitado por el biorreactor, por consecuencia, $\xi_i(t)$ tiene que ser acotado. Esto lleva al concepto de **estabilidad entrada acotada-salida acotada (BIBO)**, es decir, para condiciones iniciales nulas, una entrada acotada siempre produce una salida acotada (Kuo, 1996; Szidarovszky y Bahill, 2018). La anterior definición es un ejemplo de **estabilidad extrínseca** porque depende de la entrada y salida del sistema y puede estudiarse empleando enfoques clásicos como el criterio de Routh-Hurwitz, diagramas de Bode, el criterio de Nyquist o el lugar de las raíces (William, 1991).

Por otro lado, recuerde que (2.4) es un sistema LTI en variables de estado y con perturbaciones, por lo que considerar su **estabilidad intrínseca** a partir del análisis de su estado es más conveniente. Para ilustrar este enfoque, suponga que cada trayectoria solución de (2.4) puede representarse en cada instante de tiempo como la posición de algunas de las esferas en la Fig. 2.6, donde las posiciones marcadas A-G se denominan **puntos de equilibrio** de un sistema dinámico. Ahora, considere la esfera de color púrpura ubicada en el punto A. Note que se mantiene en dicho equilibrio siempre que no existan perturbaciones externas. Lo anterior contrasta con la esfera de color naranja ubicada en F, que a pesar de estar en una posición similar a la esfera púrpura, debido a la presencia de perturbaciones externas puede desplazarse hacia el punto E o G. Así, A y F se denominan **puntos de equilibrio inestables** y difieren con respecto los otros puntos de la gráfica. Para la esfera verde, ubicada cerca del punto B, se puede mantener entre B, C y D siempre que las perturbaciones externas sean relativamente pequeñas y de poca magnitud, de lo contrario pueden desplazar esta esfera a un nuevo punto de equilibrio, en este caso E. Por lo tanto, B, C y D se denominan **puntos neutrales de equilibrio**.

Luego, observe que la esfera de color azul empieza al final de la gráfica. No obstante, la esfera rápidamente rueda hacia el punto G y lo pasa ligeramente hacia la izquierda para nuevamente dirigirse hacia el punto G, pasando con menor intensidad hacia la derecha. Observe que este desplazamiento entre izquierda a derecha de G se mantiene cada vez con menor intensidad hasta que eventualmente converge a dicho punto. Así, E y G se denominan **puntos de equilibrio estables**. Cabe destacar que este resultado sería el mismo si consideramos la esfera de color naranja en F desplazada hacia la izquierda o si la esfera azul se encuentra en otra ubicación cercana a G. Esto último nos permite visualizar que dependiendo de donde este ubicada una esfera, es decir, las condiciones iniciales de una trayectoria solución de un sistema dinámico, puede terminar en diferentes puntos de equilibrio, por lo que cada punto tiene **estabilidad local**.

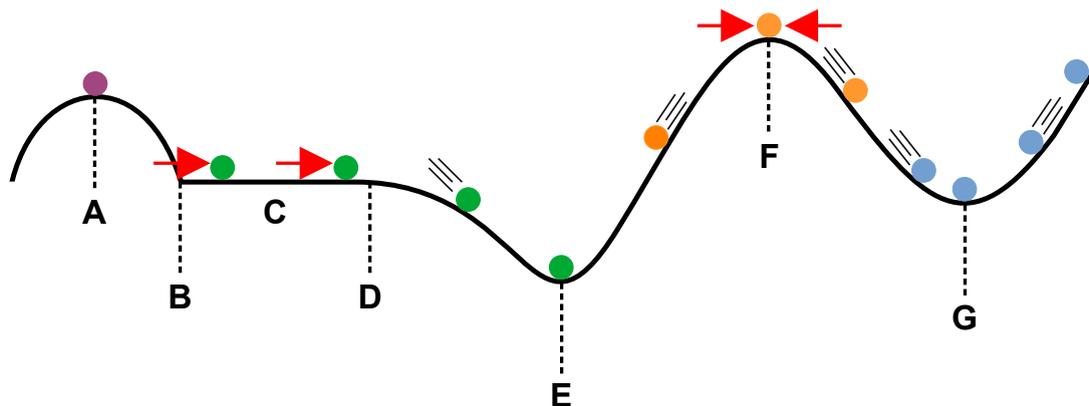


Fig 2.6: Superficie de rodamiento para diferentes esferas en distintos puntos de equilibrio y ante perturbaciones externas (flechas rojas). Modificado de William (1991).

Así, a continuación se da la definición y método para obtener los puntos de equilibrio de un sistema dinámico no lineal (Khalil, 2002).

Definición 2.4. Sea $\dot{x} = f(x)$ un sistema dinámico no lineal con el estado $x \in \mathbb{R}^n$. Se dice que $x_e \in \mathbb{R}^n$ es un punto de equilibrio de dicho sistema si $f(x_e) = 0$.

Ahora, como se menciona en Bastin (2013), los puntos de equilibrio ξ_e del modelo general de bioprocesos consisten en encontrarlos con valores constantes de K , $D(t)$, Q y F (\bar{K} , \bar{D} , \bar{Q} y \bar{F} , respectivamente), tal que:

$$\bar{K}\varphi(\xi_e, t) - \bar{D}\xi_e - \bar{Q} + \bar{F} = 0 \quad (2.5)$$

Sin embargo:

- Puede no existir solución analítica de (2.5).
- Pueden existir múltiples puntos de equilibrio como consecuencia de la acción autocatalítica de los microorganismos.
- Pueden existir condiciones de lavado o *wash-out*, es decir:

$$\begin{aligned} \xi_{ie} &= 0 && \text{Biomasa, productos y sustratos internos} \\ \xi_{ie} &= \frac{\bar{f}_i}{\bar{D} + \bar{\beta}_i} && \text{Sustratos externos} \end{aligned}$$

donde \bar{f}_i es el flujo neto en la entrada y $\bar{\beta}_i$ es la tasa de transferencia gas-líquido neto. Lo anterior implica que la biomasa es completamente removida del sistema, por lo que no puede ocurrir la biorreacción. Esta condición puede ocurrir a consecuencia de \bar{D} y \bar{f}_i , o en el caso de que \bar{D} sea mayor a la tasa de crecimiento máxima del microorganismo.

Una vez encontrados los puntos de equilibrio de un sistema, se puede definir si estos son estables en el sentido de Lyapunov, como se describe a continuación (Khalil, 2002).

Definición 2.5. Sea $\dot{x} = f(x, t)$ un sistema dinámico no lineal de orden n . Se dice que un punto de equilibrio x_e de este sistema es **estable en el sentido de Lyapunov** si, para cada $\varepsilon > 0$, existe $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ tal que:

$$\|x(0)\| < \delta \rightarrow \|x(t)\| < \varepsilon, \quad \forall t \geq 0$$

Para cerrar esta sección, aunque en Bernard y cols. (2001) se da una discusión detallada de los puntos de equilibrio de la digestión anaerobia, recuerde que las dinámicas bióticas y abióticas producen el desconocimiento de la estructura de ϕ_i . Así, no pueden conocerse los puntos de equilibrio del bioproceso. No obstante, su estabilidad se puede estudiar si el comportamiento de sus trayectorias solución están acotadas de alguna forma y, como se describe a continuación, pueden estar acotadas por una cota última.

Definición 2.6. Se dice que las trayectorias solución de $\dot{x} = f(x, t)$ son **uniformemente últimamente acotadas (UUB)** con cota última b si existen constantes positivas b, c , independientes de $t_0 \geq 0$, y para cualquier $a \in (0, c)$, se tiene $T = T(a, b) \geq 0$, independiente de t_0 , tal que

$$\|x(t_0)\| \leq a \rightarrow \|x(t)\| \leq b, \quad \forall t \geq t_0 + T \quad (2.6)$$

Más aún, si (2.6) se mantiene para cualquier valor arbitrario de a , entonces las trayectorias solución del sistema $\dot{x} = f(x, t)$ son globalmente UUB.

2.2. Control ADRC

Debido a la dificultad de modelar un bioproceso, como es el caso de la digestión anaerobia, una primera aproximación consistiría en emplear un algoritmo de control que no requiera conocer el modelo del proceso, como es el control PID. Este algoritmo es el más usado a nivel industrial porque es un controlador basado en el error de seguimiento que no requiere usar un modelo matemático del sistema (Guo y Zhao, 2016), cuya estructura es (López y cols., 2020):

$$u(t) = K_p e(t) + K_i \int_{t_0}^t e(\tau) d\tau + K_d \dot{e}(t) \quad (2.7)$$

donde $K_p, K_i, K_d \in \mathbb{R}_{>0}$ corresponden a las ganancias proporcional, integral y derivativa, mientras que $e(t)$ es el error de seguimiento de la variable deseada.

Nota 2.4. Como se muestra en la Fig. 2.7, el error de seguimiento puede analizarse en el dominio del tiempo. En la **respuesta transitoria**, la dinámica del error tiende a cero cuando el tiempo se hace muy grande (Kuo, 1996). Además, puede existir un máximo valor de la señal que sobrepasa la respuesta en estado estable, denominada **sobre-elongación** (Nise y Romo, 2002). En la **respuesta en estado estable**, el error se mantiene dentro de un rango de valores cercanos al origen porque puede existir una diferencia entre la variable de salida y la de referencia, denominado **error en estado estacionario** (Dorf y cols., 2005; Kuo, 1996). Cabe mencionar que el tiempo donde se alcanza dicha fase se denomina **tiempo de asentamiento** (Dorf y cols., 2005).

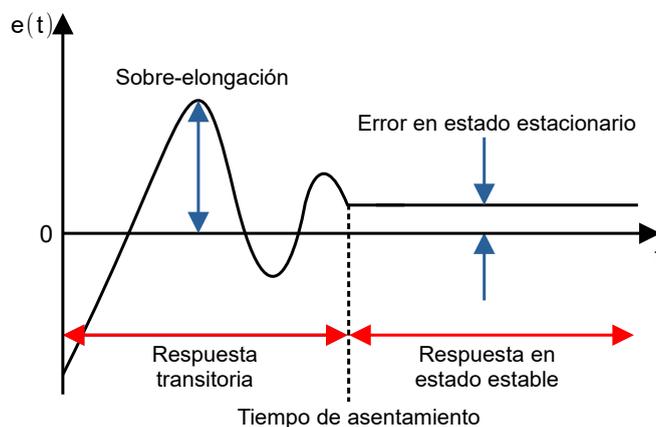


Fig 2.7: Análisis en el dominio del tiempo de $e(t)$. Modificado de (Dorf y cols., 2005).

Explícitamente, el algoritmo PID modifica el error $e(t)$ a partir de la modificación de las ganancias K_p , K_i y K_d , denominado **sintonización**. Así, como se menciona en López y cols. (2020), cada ganancia esta asociada a un tipo de acción en particular ejecutada por el controlador, cuyas funciones son:

- La acción **proporcional** ($K_p e(t)$) atenúa el error en estado estacionario y reduce el tiempo de asentamiento. Sin embargo, no puede eliminar el error en estado estacionario y para valores grandes de K_p puede causar mayores sobre-elongaciones tal que el sistema puede ser inestable.

- La acción **integral** ($K_i \int e(\tau) d\tau$) elimina el error en estado estacionario, pero para valores grandes de K_i puede incrementar el tiempo de asentamiento y las sobre-elongaciones.
- La acción **derivativa** ($K_d \dot{e}(t)$) reduce las sobre-elongaciones y puede mejorar la estabilidad para valores pequeños de K_d . No obstante, es altamente sensible al ruido en la medición.

Para mostrar las propiedades del control PID, suponga que se desea maximizar la concentración de metanoarqueas, tal que $\phi_i = -\frac{1}{a}\xi_i + \omega$ donde $a \in \mathbb{R}_{>0}$ es un parámetro conocido y $\omega \in \mathbb{R}$ es una constante desconocida. Así, de la ecuación (2.1) se tiene:

$$\ddot{\xi}_i + a\dot{\xi}_i = au + a\omega \quad (2.8)$$

Luego, definiendo $x_1 = \xi_i$ y $x_2 = \dot{\xi}_i$ como variables de estado, se puede expresar (2.8) como el sistema (2.4), tal que:

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -a \end{bmatrix} & B &= \begin{bmatrix} 0 \\ a \end{bmatrix} \\ N &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} & \alpha &= a\omega \end{aligned}$$

Observe que x_1 es la concentración de metanoarqueas, mientras que x_2 es su concentración acumulada en el reactor. Así, para $a = 5$, $\omega = 0.1$, $x(0) = [0.2 \ 0]^T$ y $x_r = [2 \ 0]^T$, el comportamiento del error y de la ley de control se muestra en la Fig. 2.8-2.10. Para diferentes valores de K_p , se observa que a mayor sea su valor, se reduce el error en estado estacionario y reduce el tiempo de asentamiento, pero puede provocar sobre-elongaciones. Luego, para diferentes valores de K_i , se observa que a mayor sea su valor, más se atenúa el error en estado estacionario pero incrementa las sobre-elongaciones. Además, para diferentes valores de K_d , se observa que a mayor sea su valor, se reduce la amplitud de las sobre-elongaciones y a su vez, incrementa el tiempo de asentamiento. En conclusión, a pesar de ser un ejemplo meramente ilustrativo, se observa que el algoritmo PID logró manipular la concentración de metanoarqueas, tal que se incrementó su concentración en el digestor anaerobio.

Ahora, como se describe en Han (2009); Zhao y Skogestad (1997), a pesar de la simplicidad del algoritmo PID, esta ley de control presenta diversas limitaciones que dificultan su empleo en bioprocesos:

- Es ineficiente si la variable de referencia es continua por partes, como se muestra en la Fig. 2.11. Aún a pesar de que la dinámica del error de seguimiento sea adecuada, a consecuencia de las discontinuidades de la variable de referencia en $t = 20$ y $t = 40$, existen valores sumamente grandes de la política de control, tal que el elemento final de control no puede seguir la señal generada por diversas limitaciones físicas.
- La acción integral puede causar sobre-elongaciones de mayor amplitud tal que pueden inestabilizar al proceso.
- La acción derivativa amplifica el ruido existente en la medición, como se muestra en la Fig. 2.12. Observe que tanto el error e_2 y la acción de control son corrompidas por el ruido en la medición, generando una señal de control que no puede ser implementada en el elemento final de control.

- Pueden existir limitaciones al emplear acciones de control lineal. Por un lado, observe que bajo ciertas condiciones en la sintonización de las ganancias, la presencia de ruido en la medición y el seguimiento de una referencia continua por partes genera acciones de control negativas, que físicamente no tienen sentido para un bioproceso. Por otro lado, se ha visto que los bioprocesos en lazo cerrado con controladores lineales son sumamente sensibles a la presencia de perturbaciones externas, por lo que reducen notablemente el buen desempeño del sistema en lazo cerrado.

En las últimas tres décadas se ha desarrollado el control ADRC que puede resolver varios de los problemas previamente descritos del algoritmo PID (Han, 2009). Dicho controlador es un algoritmo basado en modelo que estima la incertidumbre total, descrito como un estado adicional del sistema, tal que es rechazada por la ley de control (Sira-Ramírez, Luviano-Juárez, Ramírez-Neria, y Zurita-Bustamante, 2018). La estructura de dicho algoritmo se muestra en la Fig. 2.13, cuyos elementos se describirán a continuación.

2.2.1. Diferenciador de trayectorias

Esta unidad funcional consta de un sistema de ecuaciones diferenciales que transforman la variable de referencia $x_r(t)$ continua por partes en una señal continua $\zeta(t) \forall t$. El empleo del diferenciador de trayectorias evita que la acción de control tome valores sumamente grandes a consecuencia de una $x_r(t)$ continua por partes, como la mostrada en la Fig. 2.11c. Sin embargo, para mantener la simplicidad del presente trabajo, no se implementará el diferenciador de trayectorias en el bioproceso en lazo cerrado.

2.2.2. Observador de estados extendido

Note que ϕ_i es la incertidumbre total de ξ_i y así, se considera un estado adicional del proceso. Luego, dado que en la sección anterior se mostró que el sistema es observable, entonces se puede diseñar un observador de estados extendido tal que estime ϕ_i . Existen diversas estructuras del observador de estados extendido (Guo y Zhao, 2016), como el observador proporcional integral generalizado (*Generalized Proportional Integral Observer* o GPIO), cuya estructura es (Garzón-Castro y cols., 2018; Sira-Ramírez y cols., 2018):

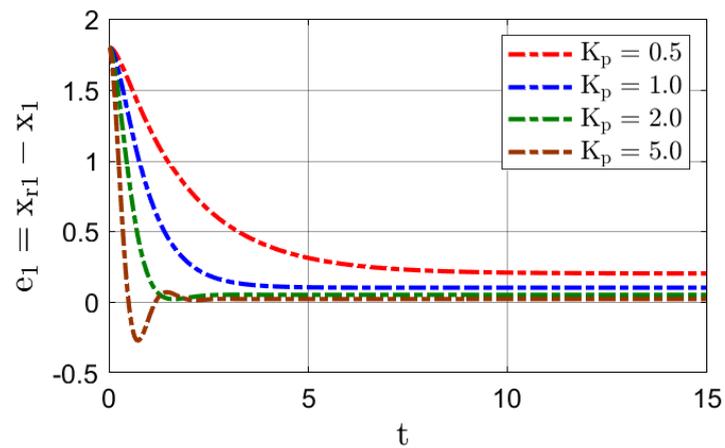
$$\dot{\hat{x}}(t) = A_e \hat{x}(t) + f(x, D) + L(y - C_e \hat{x}(t)) \quad (2.9)$$

donde $L \in \mathbb{R}^{m+1}$ es la ganancia del observador, $y \in \mathbb{R}$ es la salida, \hat{x} es el estimado del estado x , además⁴

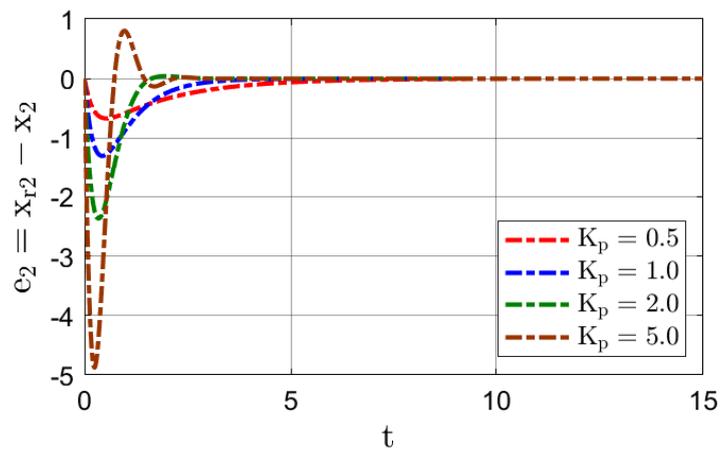
$$A_e = \begin{bmatrix} 0_{(n+m-1) \times 1} & I_{(n+m-1) \times (n+m-1)} \\ 0 & 0_{1 \times (n+m-1)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+m) \times (n+m)} \quad f(x, D) = \begin{bmatrix} D(\xi_i^{in} + \xi_i) \\ 0_{(n+m-1) \times 1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+m) \times 1}$$

$$C_e = [1 \quad 0_{1 \times (n+m-1)}] \in \mathbb{R}^{1 \times (n+m)}$$

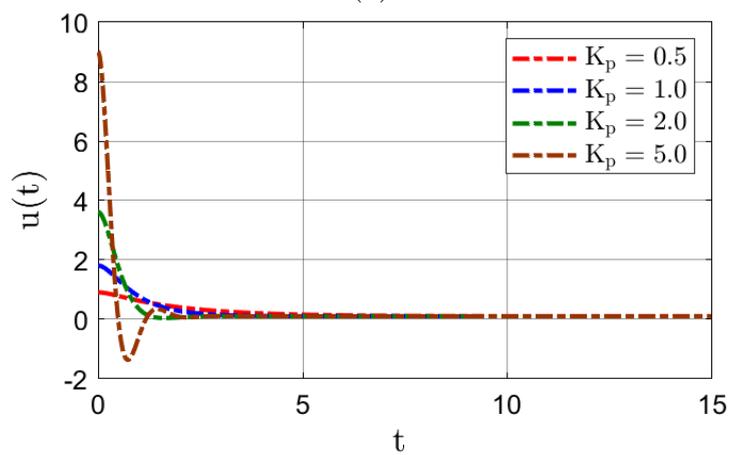
⁴ $I \in \mathbb{R}^{m \times m}$ es la matriz identidad.



(a)

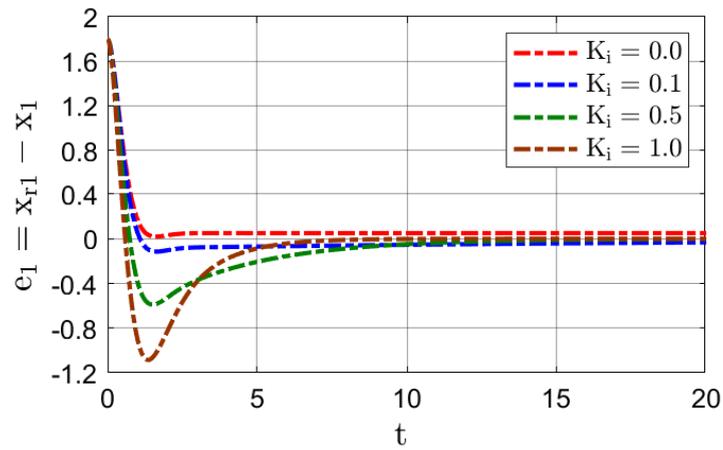


(b)

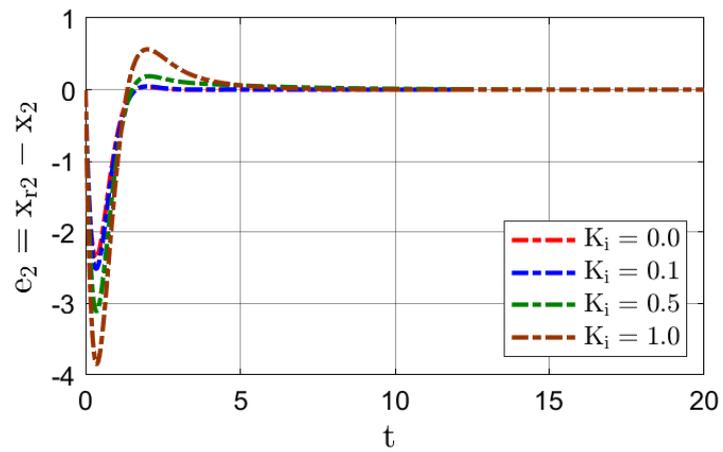


(c)

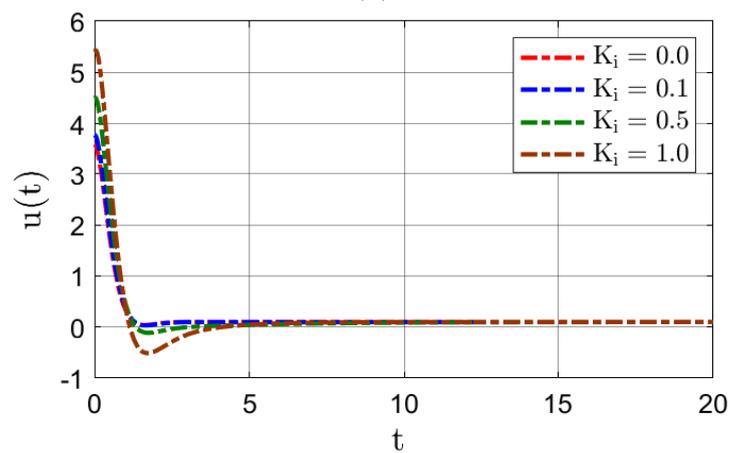
Fig 2.8: Dinámica de $e(t)$ y $u(t)$ del sistema (2.8) en lazo cerrado con (2.7) para diferentes valores de K_p y $K_i = K_d = 0$.



(a)

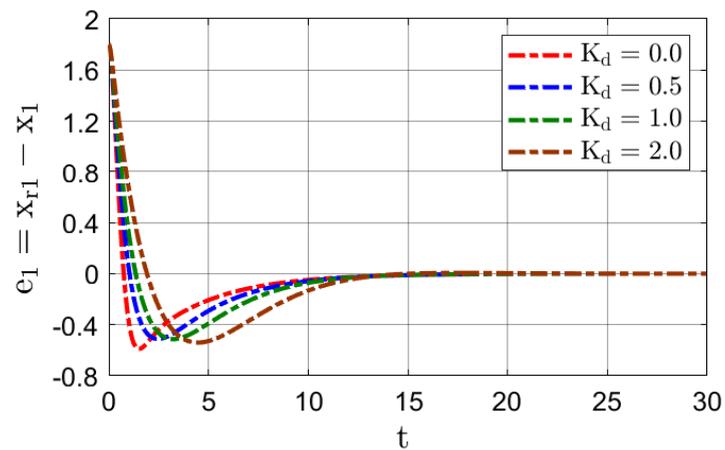


(b)

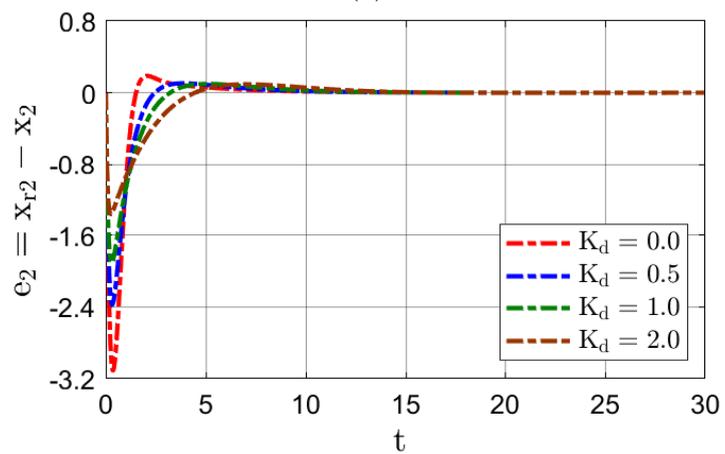


(c)

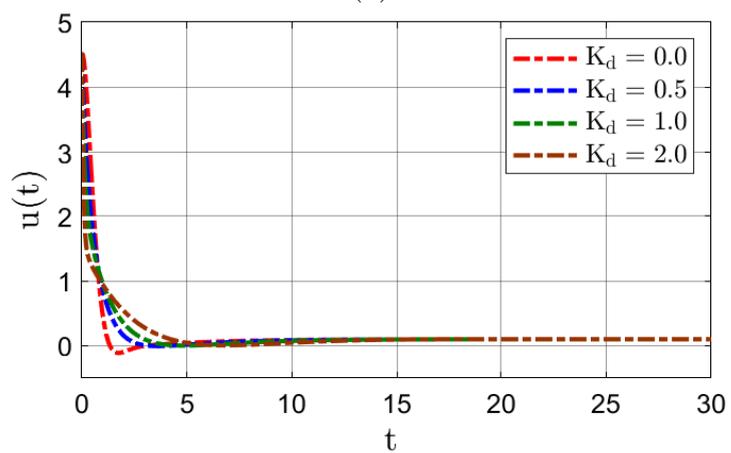
Fig 2.9: Dinámica de $e(t)$ y $u(t)$ del sistema (2.8) en lazo cerrado con (2.7) para diferentes valores de K_i con $K_p = 2$ y $K_d = 0$.



(a)

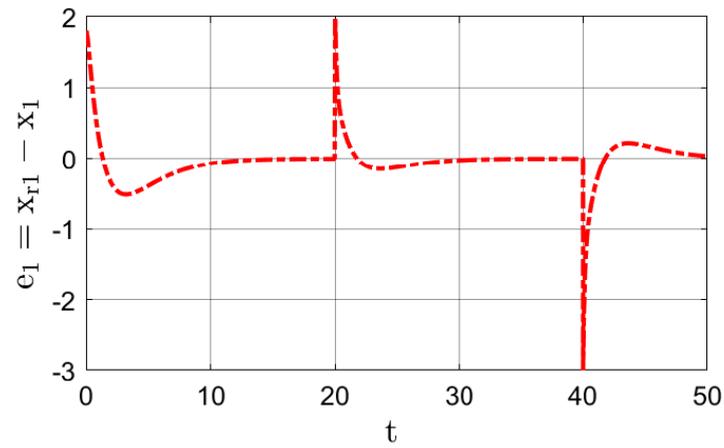


(b)

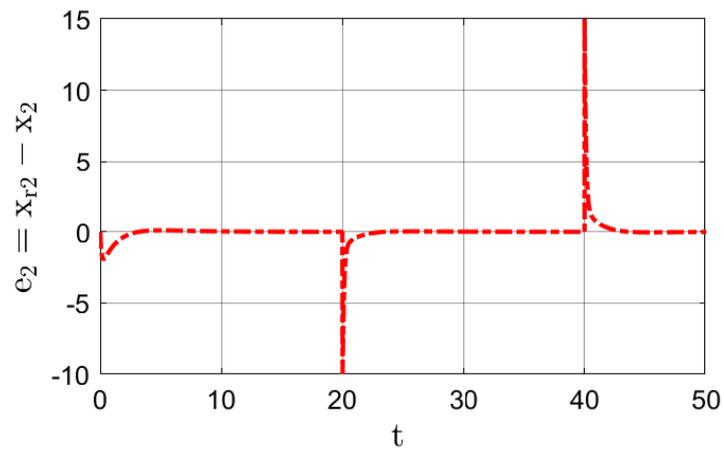


(c)

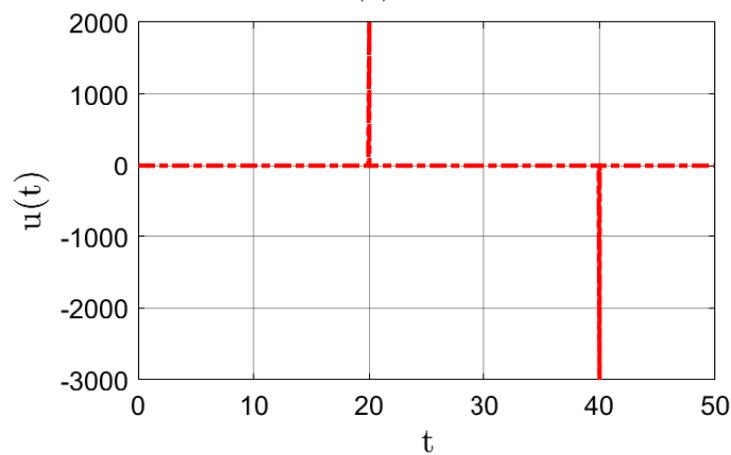
Fig 2.10: Dinámica de $e(t)$ y $u(t)$ del sistema (2.8) en lazo cerrado con (2.7) para diferentes valores de K_d con $K_p = 2$ y $K_i = 0.5$.



(a)

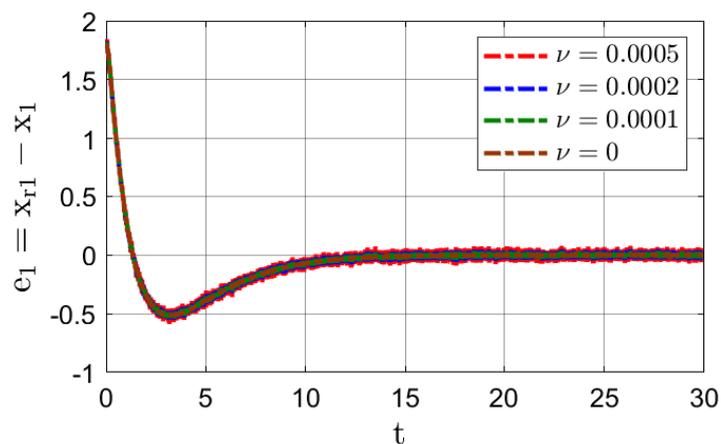


(b)

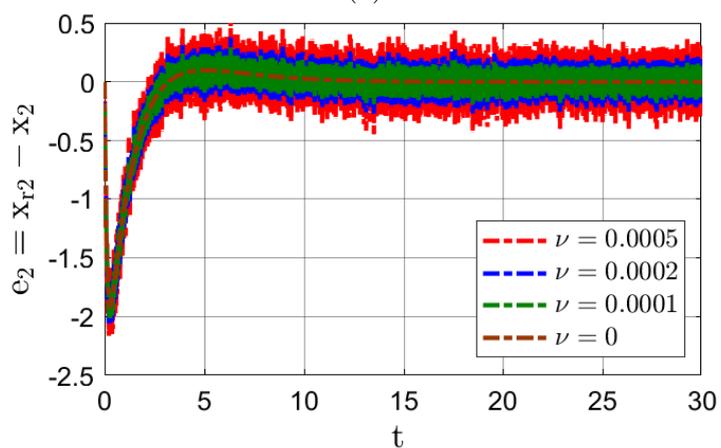


(c)

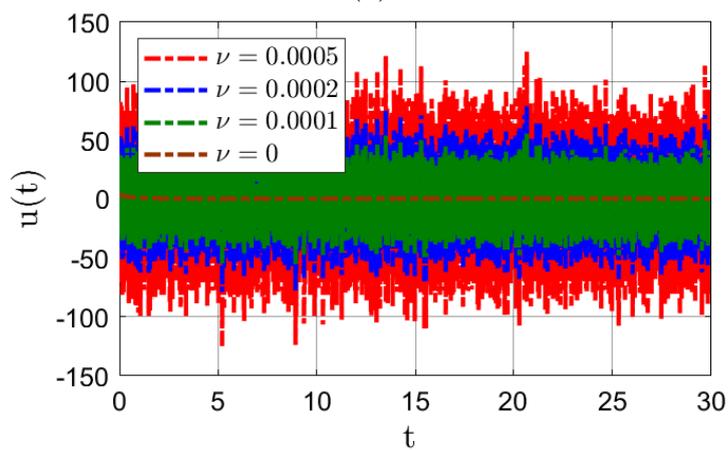
Fig 2.11: Dinámica de $e(t)$ y $u(t)$ del sistema (2.8) en lazo cerrado con (2.7) con $K_p = 2$, $K_i = 0.5$ y $K_d = 1$, para un valor de referencia $x_r(t)$ continua por partes.



(a)



(b)



(c)

Fig 2.12: Dinámica de $e(t)$ y $u(t)$ del sistema (2.8) en lazo cerrado con (2.7) con $K_p = 2$, $K_i = 0.5$ y $K_d = 1$, para una salida $x_1(t)$ corrompida con ruido Gaussiano de media cero y diferentes valores de su varianza ν .

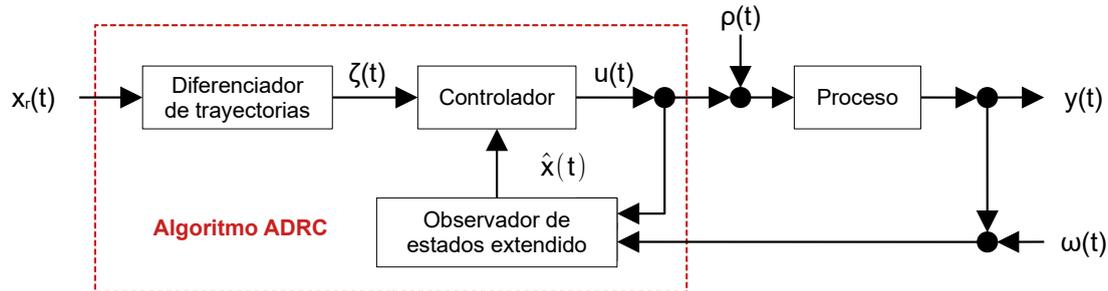


Fig 2.13: Estructura del algoritmo ADRC.

Para este caso, el estado del sistema es:

$$x(t) = \begin{bmatrix} \xi_i(t) \\ \phi_i(t) \\ \frac{d}{dt}\phi_i(t) \\ \vdots \\ \frac{d^{m-1}}{dt^{m-1}}\phi_i(t) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+m} \quad (2.10)$$

donde $n = 1$ es el orden del sistema y $m \in \mathbb{N}$ representa la m -ésima derivada de $\phi_i(t)$ tal que $\frac{d^m}{dt^m}\phi_i(t) \approx 0$. Cabe destacar que (2.9) es un observador estable de (2.2) (Garzón-Castro y cols., 2018; Sira-Ramírez y cols., 2018).

2.2.3. Algoritmo de control

Por último, el controlador utiliza el estimado de la incertidumbre total $\hat{\phi}$ para rechazar su dinámica en lazo cerrado. Así, teniendo en consideración lo descrito en la sección anterior, la tasa de dilución es:

$$D(t) = \frac{u(t) - \hat{\phi}_i}{\xi_i^{in} - \xi_i} \quad (2.11)$$

donde u es una acción de control que estabiliza al sistema en lazo cerrado. Observe que si bien la tasa de dilución tiene una dinámica no lineal por $\xi_i^{in} - \xi_i$, u tampoco tiene que ser lineal, como se discutirá en la Sección 2.4.

2.3. Análisis de estabilidad en lazo cerrado

En esta sección, se describirá un teorema que describe los resultados del análisis de estabilidad del bioproceso en lazo cerrado con el algoritmo ADRC. Para ello, suponga que el sistema dinámico (2.2) satisface las siguientes hipótesis.

Suposición 1. ξ_i es una función medible de forma continua no corrompida con ruido.

Suposición 2. ξ_{ri} es una función continuamente diferenciable, acotada y conocida. Más aún, $\dot{\xi}_{ri}$ es continua, acotada y conocida.

Suposición 3. La dinámica $\xi_i^{in} - \xi_i \neq 0 \forall t$. Además ξ_i^{in} es una función continua, acotada y conocida.

Suposición 4. Existe un estimado continuo, acotado y conocido de ϕ_i ($\hat{\phi}_i$), es decir, $\exists \sigma$ tal que $|\phi_i - \hat{\phi}_i| \leq \sigma$.

A continuación, el siguiente resultado muestra que el algoritmo ADRC garantiza que las trayectorias solución del error de seguimiento de la trayectoria $e_r(t) = \xi_{ri}(t) - \xi_i(t)$ son acotadas de acuerdo a la Definición 2.6.

Teorema 2.3. *Suponga que el sistema (2.2) satisface las Suposiciones (1)-(4). Si el bioproceso esta en lazo cerrado con la ley de control (2.11), tal que*

$$u = K_p(\xi_{ri} - \xi_i) + \dot{\xi}_{ri} \quad (2.12)$$

donde $K_p \in \mathbb{R}_{>0}$ es una ganancia proporcional, entonces las trayectorias solución del error de seguimiento de trayectoria $e_r = \xi_{ri}(t) - \xi_i(t)$ son globalmente UUB con cota última $b = \sigma/K_p$.

Demostración. Ver Apéndice A. □

2.4. Comentarios adicionales

Cerramos este capítulo con una breve discusión sobre las hipótesis y resultados de la sección anterior. Para empezar, las Suposiciones 2-3 son válidas por lo siguiente:

- Dado que ξ_{ri} es el valor de referencia, está debe de ser conocida. Además, para una referencia constante, entonces se satisface la Suposición 2.
- Suponga que no se cumple la Suposición 3, entonces $\xi^{in} - \xi_i = 0$ y sin importar la política de control usada, no se puede manipular la dinámica de ξ_i . Observe que lo anterior pasa si existen condiciones de lavado, lo cuál implicaría que la concentración de acidobacterias y metanoarqueas es nula en el digestor, por lo que no existiría biorreacción y no tendría más sentido controlar el bioproceso.

Ahora, note que la Suposición 1 no es realista. A pesar de que puedan existir sensores factibles para medir la concentración de biomasa (Kiviharju, Salonen, Moilanen, y Eerikäinen, 2008), así como de ciertos reactivos y productos basados en espectroscopia y quimiometría, suelen ser discontinuos y ruidosos (Lourenço y cols., 2012). Por un lado, dado que el proceso de digestión anaerobia puede durar semanas, el emplear sensores que miden cada cierto intervalo de segundos en el tiempo puede garantizar mediciones relativamente continuas. No obstante, algunos sustratos deben ser medidos fuera de línea, por lo que es necesario modificar el algoritmo de control mostrado. Una forma es discretizar el modelado del bioproceso utilizando diversos métodos como Euler hacia adelante. Sin embargo, como se describe en Arcaik y Nešić (2004), solo se puede garantizar estabilidad práctica semiglobal para el bioproceso. Por otro lado, note que podría aplicarse un filtro para atenuar el ruido en la medición, pero no existe garantía de que el sistema sea estable en lazo cerrado si se adiciona dicha unidad funcional. Los puntos anteriores indican que se debe mejorar la estructura del algoritmo ante mediciones discretas con ruido. Sin embargo, analizar un algoritmo bajo esta circunstancia es sumamente complejo a nivel teórico.

Así, en el Capítulo 4 simplemente se adicionará el efecto del ruido y mediciones discretas para mostrar si el algoritmo sigue teniendo un buen desempeño en lazo cerrado.

Luego, el algoritmo de control (2.12) puede producir señales que no puede seguir el elemento final de control, como valores negativos o sumamente grandes. Para evitar esto, se propone que el algoritmo proporcional tenga saturación, es decir:

$$u = \max(u_{\max}, \min(K_p(\xi_{ri} - \xi_i) + \dot{\xi}_{ri}, u_{\min})) \quad (2.13)$$

donde $u_{\max}, u_{\min} \in \mathbb{R}_{>0}$ son el valor máximo y mínimo de la acción de control u .

Por último, queda discutir la Suposición 4. Observe que para satisfacer esta hipótesis, es necesario implementar un observador de estados como el GPIO (2.9). Sin embargo, no es sencillo garantizar que un observador de estados acoplado al algoritmo de control sea estable en lazo cerrado. Para ello, se tendría que aplicar un resultado similar al principio de separación⁵. Una estrategia para resolver este problema es utilizar una red neuronal artificial en lugar de un observador de estados extendido, tal que para cierto tipo de entradas puede estimar la incertidumbre total ϕ_i , como describiremos en el siguiente capítulo.

⁵Para sistemas lineales, el principio de separación dice que el diseño de un algoritmo de control y observación puede realizarse de forma independiente, aunque ambos algoritmos se encuentren acoplados en lazo cerrado (Szidarovszky y Bahill, 2018).

Capítulo 3

Redes neuronales recurrentes

El *machine learning* es una rama de ciencias de la computación y la estadística que permite el aprendizaje de un conjunto de datos (Goodfellow y cols., 2016). Su objetivo es imitar el aprendizaje humano y es sumamente útil en conjuntos enormes de datos y/o complejos que deben ser analizados automáticamente por una computadora (Greener, Kandathil, Moffat, y Jones, 2022). Existen diferentes algoritmos de *machine learning*, destacando el *deep learning* por su entrenamiento efectivo y el desarrollo tecnológico de unidades gráficas de procesamiento (Jurtz y cols., 2017). Cabe destacar que los datos experimentales obtenidos en el estudio de un fenómeno biológico son factibles de ser implementados en *machine learning* (Greener y cols., 2022). Sin embargo, el estudio y diseño de estos algoritmos pueden ser desafiantes para el lector no especializado en el tópico (Greener y cols., 2022; Jurtz y cols., 2017; Lipton, Berkowitz, y Elkan, 2015), incluso pueden ser más complicados que los conceptos descritos del capítulo anterior.

Así, en este capítulo se darán conceptos preliminares sobre *machine learning* y *deep learning* que sean amenos para el lector. Una vez hecho lo anterior, se dará una breve descripción sobre las redes neuronales prealimentadas (FNN) y recurrentes (RNN), así como diversos criterios para mejorar su entrenamiento. Por último, se explicará porque es adecuado usar una RNN para estimar la incertidumbre total ϕ_i y efectuar la filtración del ruido en la medición de ξ_i en el proceso continuo de digestión anaerobia.

3.1. Conceptos preliminares

Con los avances tecnológicos recientes, es esperable que puedan automatizarse diversas tareas inteligentes. Para ello, la **inteligencia artificial** es un campo activo de investigación aplicado en automatizar tareas sencillas e intuitivas de resolver por el ser humano, pero sumamente difíciles de describir formalmente como en la teoría de control (Goodfellow y cols., 2016). Para cumplir este objetivo, es necesario diseñar algoritmos que puedan resolver el problema deseado y existen dos tipos de enfoques. Uno es intentar diseñar lenguajes formales que usen reglas de lógica inferencial, conocido como **knowledge base**, cuyo enfoque resultó ser ineficiente en la ejecución de tareas inteligentes (Goodfellow y cols., 2016). Contrario a lo anterior, se pueden estudiar e implementar algoritmos de *machine learning* que tengan la capacidad de **adquirir su propio conocimiento** a partir de la **identificación de patrones** en un conjunto de datos (Goodfellow y cols., 2016).

A continuación, basado en Goodfellow y cols. (2016); Greener y cols. (2022), se da una breve descripción del conjunto de pasos a seguir para la selección adecuada de un algoritmo de *machine learning* para un conjunto de datos biológicos.

a) Conocer el *dataset*

Se define ***dataset*** como una colección de ejemplos o datos puntuales (***data points***) con características (***features***) continuas o discretas, obtenidas a partir de la medición cuantitativa de un objeto. El *dataset* esta conformado por los datos que contienen las *features* definidas como entradas (***inputs***) y aquellas que tienen las cantidades que se desean predecir, definidas como salida (***outputs***). Así, las entradas y salidas del *dataset* están asociadas a un algoritmo de *machine learning* o **modelo** que las describa y a una tarea de aprendizaje (***learning task***), es decir, el objetivo específico que debe cumplir un modelo. Dicho aprendizaje puede ser **supervisado**, es decir, que el modelo se ajuste a un *dataset* categorizado, o puede ser **no supervisado**, es decir, que el modelo identifique patrones de un *dataset* no categorizado. Las tareas (***tasks***) que puede ejecutar un modelo son diversas y una revisión generalizada puede encontrarse en Goodfellow y cols. (2016), pero en este caso solo se hablará de dos tareas particulares. La primera es la **regresión**, que consiste en predecir un valor numérico a partir de una entrada dada. La segunda es **filtración de ruido**, que consiste en atenuar el ruido con comportamiento desconocido de una señal corrompida con dicho proceso. Esta etapa es fundamental porque permite clasificar el *dataset* en entradas y salidas, definir la tarea de aprendizaje que debe ejecutar el modelo, así como identificar ciertas limitaciones que puedan tener los ejemplos, como una cantidad insuficiente de datos o la presencia de errores experimentales como ruido.

b) Dividir el *dataset* en datos de entrenamiento, prueba y validación

Esencialmente, el modelo es una función matemática que utiliza las entradas para predecir las salidas o *features*, cuyo aprendizaje depende de los datos de entrenamiento (***training data***). Para cumplir este propósito, los modelos contienen **parámetros** ajustables cuyos valores se modifican para mejorar el desempeño del algoritmo. Para medir dicho desempeño, cada modelo esta asociado a una función de costo o pérdida (**loss or cost function**) que mide la diferencia entre la salida deseada y predicha del modelo. Así, el objetivo de ajustar un modelo en entrenamiento es identificar los patrones del *dataset* y mejorar sus propiedades de extrapolación evitando fenómenos de ***underfitting*** u ***overfitting***, como se muestra en la Figura 3.1. El *underfitting* es aquel modelo que produce pésimos resultados en el entrenamiento por no encontrar las relaciones entre los datos, consecuencia de una elección inadecuada del modelo, suposiciones incorrectas o incompletas del *dataset*, o la presencia de pocos parámetros ajustables. Mientras que el *overfitting* es aquel que produce excelentes resultados con los datos de entrenamiento pero tiene pobres propiedades de extrapolación, consecuencia de un modelo con demasiados parámetros o por el entrenamiento exhaustivo de datos. Para evitar dicho fenómeno, se utilizan datos de validación (***validation data***), que consiste de aproximadamente un 10% del *dataset* usado para el monitoreo del entrenamiento a través de la modificación de los **hiper-parámetros**, es decir, parámetros que modifican el comportamiento del modelo pero que no son ajustados por este como la tasa de aprendizaje.

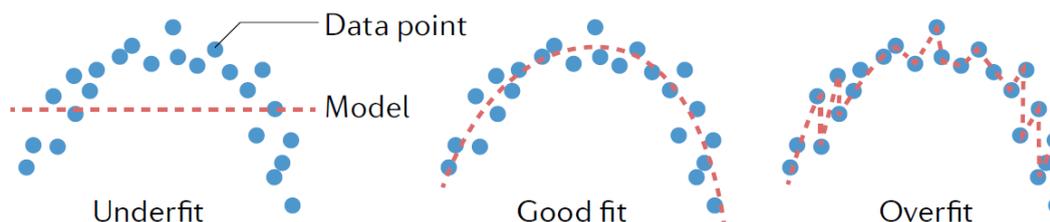


Fig 3.1: Fenómeno de *underfitting* y *overfitting* en el entrenamiento de un modelo. Tomado de (Greener y cols., 2022).

Por último, posterior al proceso de entrenamiento y validación del dataset, se utiliza 10 % del *dataset* para conformar los datos de prueba (*test data*), cuyo objetivo es evaluar el desempeño del modelo entrenado ante datos no observados.

c) Seleccionar un modelo adecuado para el *dataset*

Una vez que se reconozca la tarea de aprendizaje, se debe de escoger un modelo matemático adecuado para el reconocimiento de patrones del *dataset*. Para ello, se pueden considerar diversos criterios, como es la agrupación, relación espacial y/o temporal de los datos, la presencia de una cantidad fija de *features* disponibles, entre otros. Para la tarea de regresión, existen diversos algoritmos en *machine learning* como regresión lineal y logística, red elástica regularizada, máquinas de vectores de soporte, cadenas de Markov, redes neuronales prealimentadas y recurrentes, entre otras (Greener y cols., 2022; Jurtz y cols., 2017; Lipton y cols., 2015).

d) Asegurar la precisión del modelo con los datos de prueba

Por último, debe ejecutarse correctamente los pasos anteriores e implementar diversas técnicas de regularización (descritas en la Sección 3.3) para evitar fenómenos de *overfitting*, así como seleccionar adecuadamente una función de desempeño. Para la tarea de regresión, se puede emplear la mitad de la media del error cuadrático medio (HMSE), es decir:

$$Loss = \frac{1}{2S} \sum_{i=1}^S \sum_{j=1}^R (y_{ij} - \hat{y}_{ij})^2 \quad (3.1)$$

donde S es la longitud de la secuencia, R es el número de secuencias, y_{ij} es el dato de salida esperado y \hat{y}_{ij} es el dato de salida predicho por el modelo.

3.2. Introducción a redes neuronales artificiales

Las redes neuronales artificiales son un caso especial de *machine learning* cuyo comportamiento es similar a las conexiones sinápticas de las redes neuronales humanas. También se les conoce como *deep learning* y como se menciona en Goodfellow y cols. (2016), presentan ciertas ventajas con respecto a los modelos clásicos de *machine learning*:

- Tienen un buen desempeño cuando la dimensión del *dataset* es sumamente alta.

- No requiere conocer previamente la estructura del *dataset* porque puede aprender a identificar sus *features*.
- Aplicado en tareas sumamente complejas de inteligencia artificial, como reconocimiento de voz e imágenes, clasificación y regresión, etcétera.

Nota 3.1. *Una característica importante de las redes neuronales artificiales es que son **aproximadores universales de funciones**, es decir, cualquier proceso puede ser expresado como una función asociada a un conjunto de variables, tal que es modelado con cierto grado de precisión, determinado por el tamaño y complejidad del modelo (Greener y cols., 2022). Cabe destacar que aunque dicha propiedad no es matemáticamente rigurosa, los resultados empíricos obtenidos de la aplicación de redes neuronales justifica dicha propiedad (Goodfellow y cols., 2016).*

Luego, toda estructura de *deep learning* esta formada por una **neurona artificial**, también llamada **nodo o unidad**, que consiste de una expresión matemática que convierte una entrada en una salida de una forma particular, es decir:

$$z = \omega x + b \tag{3.2a}$$

$$y = \sigma(z) \tag{3.2b}$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ es la entrada, $y \in \mathbb{R}$ es la salida, $\omega \in \mathbb{R}^n$ es el parámetro de aprendizaje de x , $b \in \mathbb{R}$ es el bias, mientras que $\sigma(\cdot)$ es una función de activación no lineal (Greener y cols., 2022).

Nota 3.2. *El proceso de aprendizaje de cualquier red neuronal es consecuencia de la modificación de los pesos ω_i , tal que minimicen una función de desempeño asociada a la tarea a ejecutar, como es el caso de la función (3.1) para regresión (Greener y cols., 2022). Uno de los algoritmos más usados para este propósito es **backpropagation**, que consiste en usar de forma iterativa la regla de la cadena sobre la función de costo, tal que los pesos de la red son modificados por el **algoritmo de gradiente descendente** (Goodfellow y cols., 2016). Cabe destacar que por la inmensa cantidad de datos que puede manejar una red neuronal, se suele emplear una cantidad más pequeña de datos (**mini-batch size**) junto con el **algoritmo de gradiente estocástico descendente** para reducir considerablemente el costo computacional de la implementación del *backpropagation* en redes neuronales (Goodfellow y cols., 2016).*

Cada neurona artificial se encuentra interconectada de formas diferentes, simulando el comportamiento sináptico de una red neuronal biológica. Particularmente, cada nodo es arreglado en capas escondidas (**hidden layers**), que conectan la salida de una capa con la entrada de otra. Por lo anterior, es que a la redes neuronales se les conoce como *deep learning*, porque pueden existir como mínimo dos *hidden layers* en la red neuronal (Goodfellow y cols., 2016; Greener y cols., 2022). Cabe destacar que el arreglo de las unidades pueden genera diferentes **arquitecturas** para la red neuronal. A continuación, brevemente se describirán dos estructuras comúnmente usadas en *deep learning*¹.

¹Para más información sobre *deep learning*, redes neuronales recurrentes y prealimentadas, se recomienda consultar Goodfellow y cols. (2016); Lipton y cols. (2015); Yu, Si, Hu, y Zhang (2019).

3.2.1. Redes neuronales prealimentadas

Una FNN (*feedforward neural networks*) es una clase de red que carece de lazos de realimentación porque sus nodos son agrupados en capas (Lipton y cols., 2015), como se muestra en la Figura 3.2. Estas redes son principalmente usadas en tareas supervisadas como regresión y clasificación.

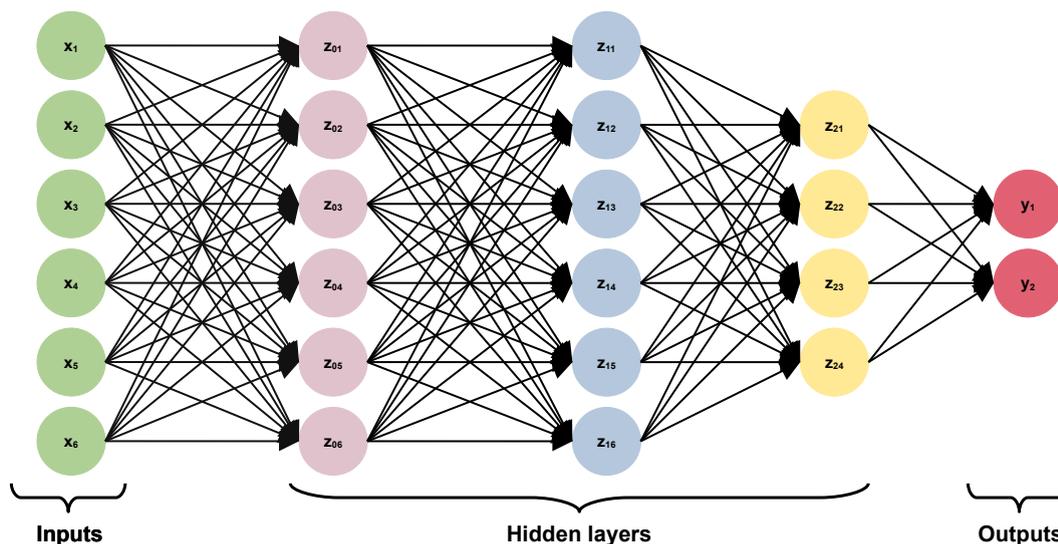


Fig 3.2: Estructura de una FNN.

3.2.2. Redes neuronales recurrentes

Una RNN (*recurrent neural network*) es una clase de red que permiten el paso selectivo de información en pasos secuenciales, de tal manera que permiten el procesamiento secuencial de un dato en cada secuencia de tiempo (Goodfellow y cols., 2016). Estructuralmente son similares a las FNN, pero presentan lazos de realimentación que permiten el procesamiento secuencial de datos (Lipton y cols., 2015), como se muestra en la Figura 3.3. Dichas redes son principalmente usadas en regresión y aunque se han mencionado diversas estrategias para realizar esta tarea, su aplicación presenta diversas ventajas frente a otros métodos:

- Se pueden manejar datos no independientes, es decir, datos secuenciales (Goodfellow y cols., 2016; Greener y cols., 2022; Lipton y cols., 2015).
- Pueden usarse cuando existe variabilidad en la dimensión de la entrada (Goodfellow y cols., 2016).
- La presencia de lazos realimentados permite estudiar la dependencia en el tiempo de los datos secuenciales (Greener y cols., 2022; Lipton y cols., 2015).
- Presenta las mismas ventajas de *deep learning* en comparación a los modelos clásicos de *machine learning* (Goodfellow y cols., 2016; Lipton y cols., 2015).

Aunque se puede evitar la explosión del gradiente seleccionando adecuadamente la función de activación, el problema de desvanecimiento requiere usar otro tipo de arquitecturas para el nodo recurrente. Lo anterior se debe a que una RNN simple tiene una **memoria a largo plazo** conformada por los pesos de entrenamiento, los cuáles cambian lentamente en el tiempo y así, codifican información general del *dataset* (Lipton y cols., 2015). También, tiene una **memoria a corto plazo** asociada a las funciones de activación y fluye de un nodo a otro (Lipton y cols., 2015). Por lo anterior, el empleo de un nodo recurrente que permita almacenar efectivamente la memoria del sistema puede mejorar el entrenamiento de la RNN y así, eliminar el problema del desvanecimiento del gradiente. Si bien existen diversos nodos para este propósito (Smagulova y James, 2019; Yu y cols., 2019), la más usada es la LSTM (*Long Short Term Memory*), que es un nodo recurrente que posee internamente una célula de memoria, es decir, una unidad computacional conformada por nodos simples conectados de forma particular e incluye nodos multiplicativos (Lipton y cols., 2015). Una ventaja importante de dicha unidad es que permite recordar información sobre periodos largos de tiempo, además de que permite modificar dicha información.

Como se describe en Lipton y cols. (2015), una LSTM esta conformada por los siguiente elementos:

- Compuerta de entrada (*Input gate*): Toma la decisión de cuando la información obtenida debe ser adicionada a la memoria de la LSTM.
- Compuerta de salida (*Output gate*): Toma la decisión de que parte de la memoria de la LSTM contribuye a la salida.
- Compuerta de olvido (*Forget gate*): Toma la decisión de que parte de la información deber ser removida de la memoria de la LSTM.

Nota 3.3. *Si bien existen diferentes estructuras de una LSTM, en este trabajo solo se considerará una LSTM con o sin compuerta de olvido, como se muestran en las Figuras 3.4c-3.4d, respectivamente. Cabe destacar que una revisión exhaustiva de sus respectivos modelos matemáticos puede consultarse en (Siami-Namini, Tavakoli, y Namin, 2019; Yu y cols., 2019).*

Para cerrar esta sección, una herramienta adicional que ha mejorado el desempeño de una RNN es la introducción de una arquitectura que permita usar la información futura y pasada para determinar la salida en cualquier punto de la secuencia. Dicha arquitectura, mostrada en la Figura 3.5 se denomina **red neuronal recurrente bidireccional** (BiRNN) y consta de dos capas escondidas con conexión a la entrada y salida (Smagulova y James, 2019). Estas dos capas se diferencian en que una tiene conexiones recurrentes en eventos pasados del tiempo mientras que la segunda tiene conexiones recurrentes en sentido contrario, tal que el paso de activación ocurre hacia atrás en el tiempo (Lipton y cols., 2015). Cabe destacar que esta arquitectura bidireccional puede ser implementada en una LSTM, siendo denominada **BiLSTM**, cuya estructura es claramente diferente a una LSTM, como se muestra en la Figura 3.6. Adicionalmente, se ha visto que el empleo de una BiLSTM genera mejores resultados con respecto a una LSTM para el entrenamiento secuencial de datos (Siami-Namini y cols., 2019).

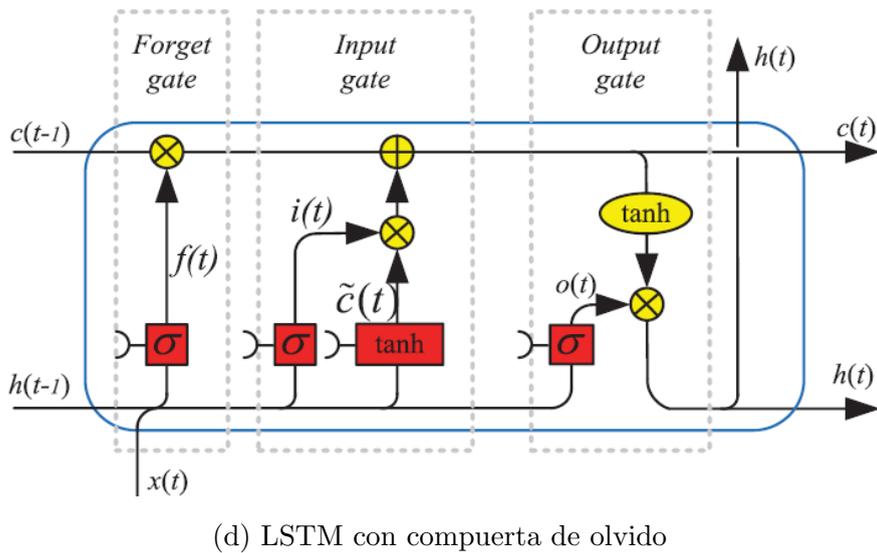
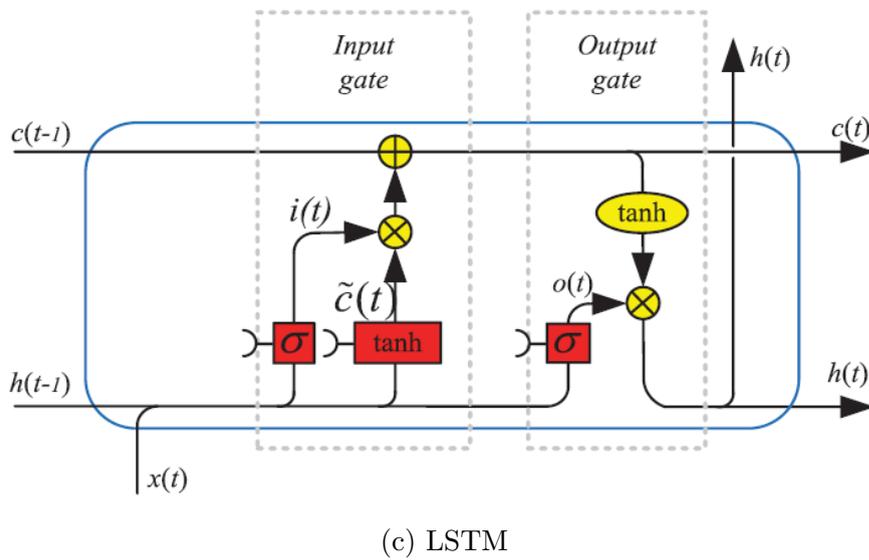
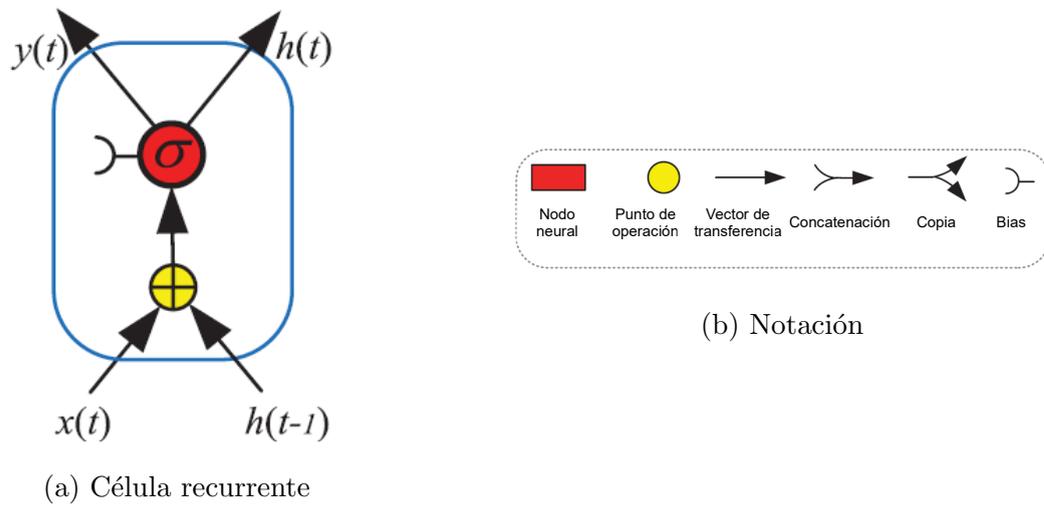


Fig 3.4: Estructura de una neurona artificial en RNN. Tomado de Yu y cols. (2019).

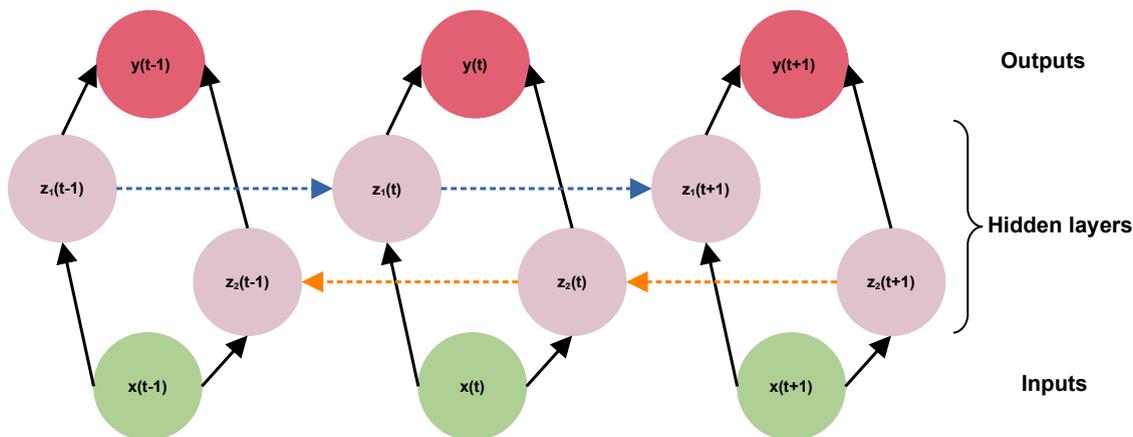


Fig 3.5: Estructura de una BiRNN. Las líneas azules son las conexiones recurrentes de eventos pasados de tiempo, mientras que las líneas naranjas son las conexiones recurrentes de eventos futuros de tiempo. Modificado de Lipton y cols. (2015).

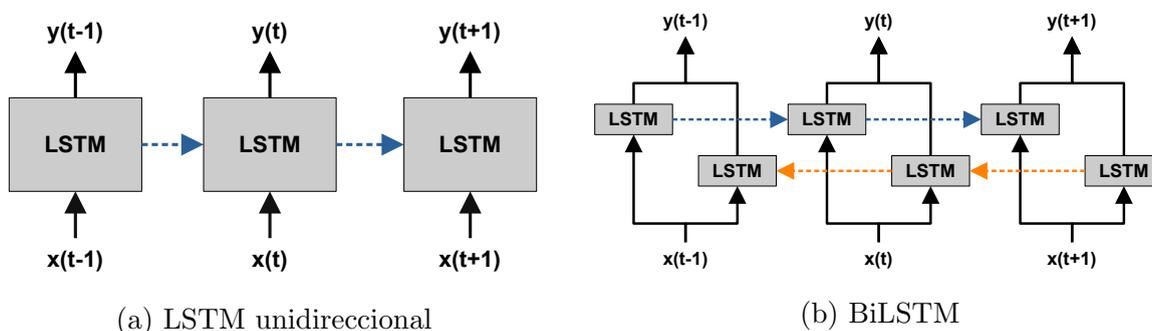


Fig 3.6: Estructura de una LSTM y BiLSTM. Las líneas azules son las conexiones recurrentes de eventos pasados de tiempo, mientras que las líneas naranjas son las conexiones recurrentes de eventos futuros de tiempo. Modificado de Smagulova y James (2019).

3.3. Técnicas de regulación para una RNN

Las técnicas de regulación son un conjunto de estrategias que buscan mejorar la propiedad de extrapolación del modelo evitando el fenómeno de *overfitting* (Jurtz y cols., 2017). Aunque en Goodfellow y cols. (2016) se da una descripción exhaustiva de dichas estrategias, a continuación solo se mencionarán algunas que son usadas en redes neuronales recurrentes, es decir:

- **Early stopping:** Es la acción de concluir el entrenamiento de una red neuronal antes de que la función de pérdida en el conjunto de validación comience a aumentar, incluso si la función de pérdida en el conjunto de entrenamiento siga disminuyendo (Greener y cols., 2022), como se muestra en la Figura 3.7.

- **Parameter sharing:** Consiste en compartir los parámetros de diferentes modelos. Aunque una ventaja es reducir la cantidad de parámetros almacenados en la memoria, como se vio en la sección anterior, puede producir la explosión o desvanecimiento del gradiente en una RNN.
- **Dropout:** Consiste en introducir ruido discreto durante el entrenamiento, tal que para cada entrada, la salida de cada unidad oculta se establece en cero con una cierta probabilidad preseleccionada (Jurtz y cols., 2017), como se muestra en la Figura 3.8.
- **Batch Normalization:** Consiste en calcular la media y desviación estándar de un *mini-batch* para que sea parametrizado, tal que incrementa la velocidad de convergencia pero también hace que la salida tenga un comportamiento estocástico.
- **Método de gradiente estocástico descendente adaptable:** Consiste en añadir una ley de adaptación que modifique la tasa de aprendizaje del algoritmo de gradiente estocástico descendente, como se hace en los algoritmos adaptables AdaGrad, RMSProp o ADAM.
- **Barajeo de datos para optimización:** Consiste en agrupar de forma aleatoria los datos de cada *mini-batch* del algoritmo de gradiente estocástico descendente para garantizar la independencia de los datos y así, mejorar el ajuste de los pesos.

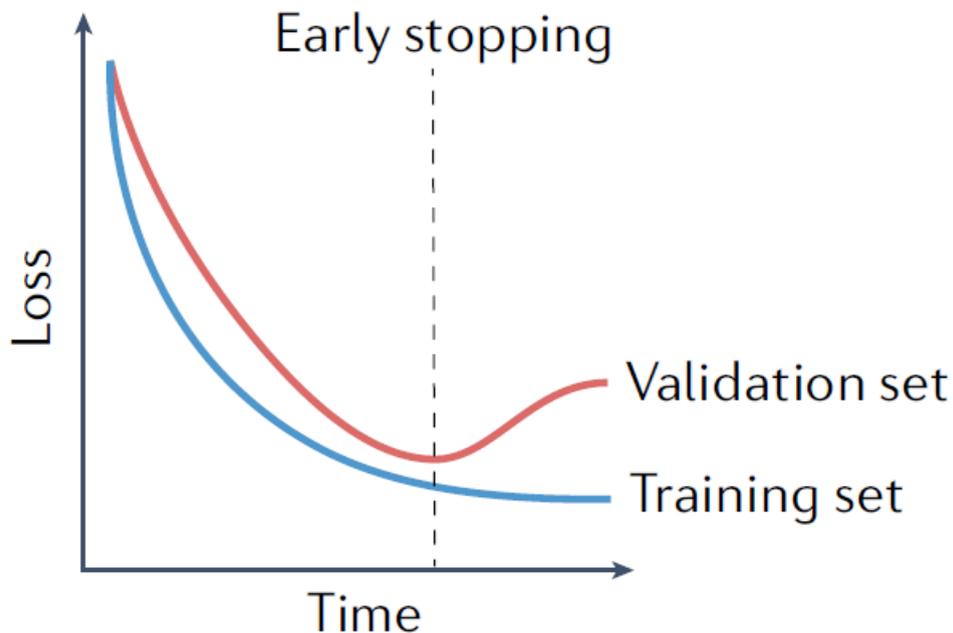
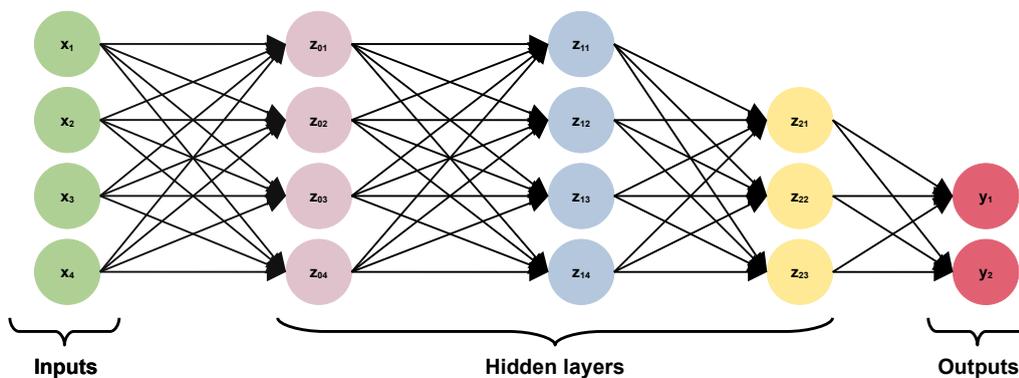
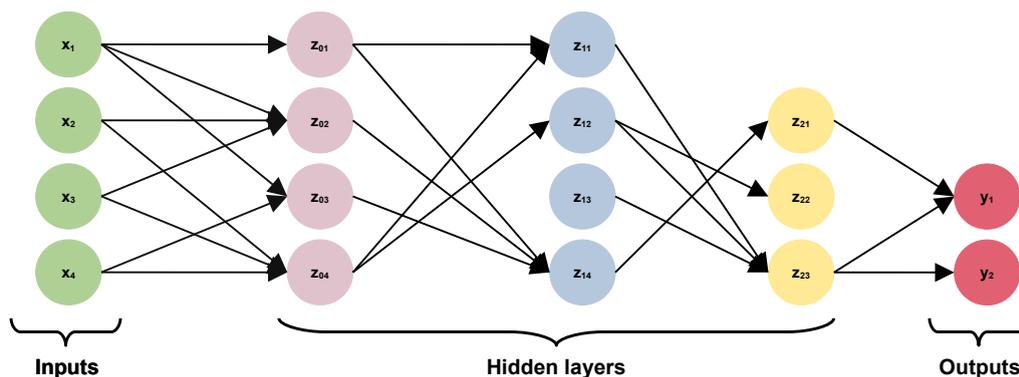


Fig 3.7: Efecto de la aplicación de *early stopping* en una red neuronal. Tomado de Greener y cols. (2022).



(a) Conexión normal



(b) Aplicación de *dropout*

Fig 3.8: Efecto de la aplicación del *dropout* en una red neuronal (Goodfellow y cols., 2016).

3.4. Aplicación en la digestión anaerobia

Cerramos este capítulo con una justificación del empleo de una RNN como observador de estados extendido con acción de filtración. Para empezar, se ha descrito al proceso de digestión anaerobia como un sistema dinámico en el tiempo. Así, tanto el estado ξ_i como su incertidumbre total ϕ_i son dinámicas descritas en una secuencia de eventos en el tiempo. Así, los datos asociados a estas variables corresponden a un conjunto de datos biológicos factibles de ser usados en una RNN. Luego, como se menciona en la Nota 3.1, cualquier red neuronal actúa como aproximador universal de funciones. Por consecuencia, el entrenamiento de una RNN a partir de los datos obtenidos del bioproceso permitirá aprender a generar la trayectoria de ϕ_i . Esto implica que se puede obtener un estimado que este cercano al valor real de la incertidumbre total, justificando la Suposición 4. Por último, en la Sección 2.4 se mencionó que los sensores de un bioproceso pueden ser ruidosos. Además, se indicó que una red neuronal puede ejecutar la tarea de filtración de ruido. Así, la RNN puede ser implementada para realizar la tarea de regresión de ϕ_i y a su vez, actuar como filtrador de ruido en la medición de ξ_i , denotando a la señal filtrada como ξ_{fi} . Cabe destacar que el *dataset* del sistema estaría conformado por al menos la medición ruidosa de ξ_i como entrada, mientras que ϕ_i y ξ_{fi} serán las salidas del modelo.

Capítulo 4

Entrenamiento y simulación de la RNN

En este punto ya han sido descritos los elementos del sistema de control del proceso de digestión anaerobia, incluyendo el modelo matemático del proceso, su respectivo algoritmo de control a implementar, así como la RNN usada como observador de estados extendido y filtrador de ruido. Así, en este capítulo primero se dará una breve descripción metodológica sobre como se obtuvieron los resultados numéricos del presente trabajo. Luego, se describirán los resultados numéricos asociados al entrenamiento de la RNN, así como la simulación del bioproceso acoplado a la RNN en lazo abierto y cerrado con el controlador ADRC, ante mediciones continuas y discretas corrompidas con ruido. Por último, se discutirán los resultados numéricos obtenidos en este trabajo.

4.1. Metodología

Para empezar, se usaron los valores de los parámetros descritos en Bernard y cols. (2001), definidos en un rango de incertidumbre (ver Apéndice B) para la adquisición de ejemplos del *dataset*. Así, se hicieron 5000 simulaciones con diferentes valores en las entradas, condiciones iniciales y salidas a partir del modelo (1.20), tal que en cada ejemplo los estados del bioproceso fueran reales positivos, además de que fueran medidos en intervalos discretos de tiempo y corrompidos con ruido Gaussiano de media nula con diferentes valores de varianza (entre 0 y 0.5). De cada ejemplo, se guardo el valor de los estados ideales (ξ) y corrompidos ($\xi + \omega$), la incertidumbre total (ϕ), la concentración de alimentación (ξ^{in}) y la tasa de dilución (D) en un archivo CSV. Posteriormente, para cada estado ξ_i se diseñó e implementó una red neuronal recurrente independiente de otros estados. El *dataset* fue agrupado aleatoriamente en un conjunto de entrenamiento (80%), validación (10%) y entrenamiento (10%). Además, cada conjunto de datos fue normalizado en función de su media y desviación estándar. Para incluir las dinámicas intermedias de los datos y reducir los costos computacionales, cada ejemplo del *dataset* fue dividido en tensores¹ ($x_i(t)$) de menores dimensiones, cuyas entradas son la medición del estado corrompido con ruido $\xi_i + \omega_i$, la concentración de alimentación ξ_i^{in} y la tasa de dilución D , mientras que las salidas del modelo son la incertidumbre total ϕ_i y el estado sin ruido ξ_i .

¹Es una matriz de números colocados en una cuadrícula regular con un número variable de dimensiones.

Luego, la estructura de la red neuronal recurrente utilizada se muestra en la Figura 4.1. Para comenzar, cada uno de los tensores $x_j(t)$ (nodos verdes) con $j \in \{1, \dots, n = 300\}$ fluyen a una BiLSTM con factor de olvido (nodos púrpuras) con profundidad $m = 100$. Después, los datos obtenidos son conectados de forma completa (*fully connected*) de tal forma que se reducen la cantidad de nodos intermedios a $o = 200$ (nodos amarillos). Más tarde, se emplea la técnica de regularización de dropout (nodos azules) a estos nuevos nodos y fluyen a la función de activación ReLU² (nodos rosas) para mejorar el agrupamiento de los datos. Luego, los nodos restantes son nuevamente conectados de forma completa, tal que resultan las salidas ξ_i y $\hat{\phi}_i$, respectivamente. Más tarde, se usan las salidas estimadas y las medidas del i -ésimo estado e incertidumbre total en la función de costo HMSE (3.1), para eventualmente sintonizar los pesos de la red neuronal usando los algoritmos descritos en la Nota 3.2. Aunado a lo anterior, se empleó el algoritmo ADAM como método de gradiente estocástico adaptable con una tasa de aprendizaje inicial de 0.001. Adicionalmente, el *mini-batch size* del proceso es de 32, el total de épocas (*epochs*) del modelo es de 12 donde cada época ejecuta un barajeo de los datos de entrada, además los eventos de validación ocurren cada 300 pasos. Por último, se usaron los datos de prueba para evaluar el desempeño de la red neuronal entrenada mediante el RMSE.

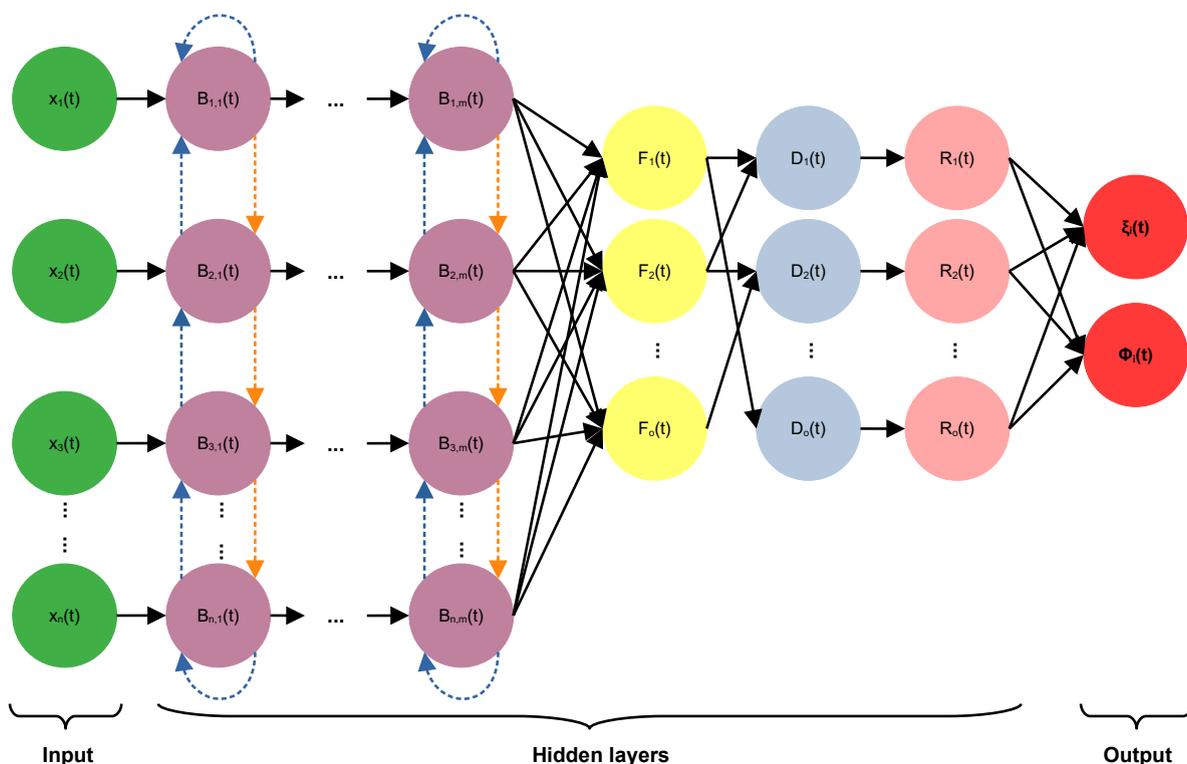


Fig 4.1: Topología de la red neuronal recurrente diseñada. Consultar detalles en el texto.

²La función ReLU esta descrita por el modelo $f(x) = \max(x, 0)$.

Más tarde, una vez entrenada la red neuronal recurrente, se realizó el monitoreo y control de la concentración de VFA en el digestor anaerobio ($\xi_i = S_2$). Para ello, se usó nuevamente el modelo (1.20) en lazo cerrado con el controlador (2.11) y (2.13) acoplado a la RNN entrenada, junto con los valores descritos del Apéndice B. Cabe mencionar que la estructura del control ADRC acoplado a la red neuronal se muestra en la Figura 4.2.

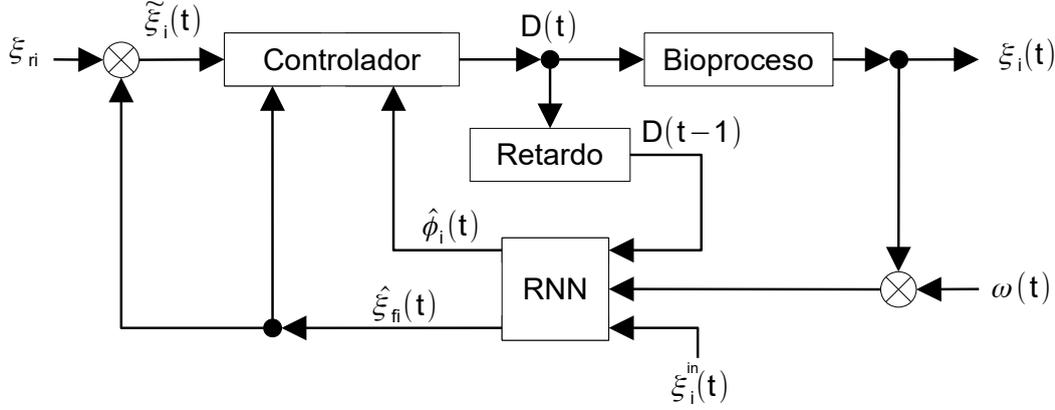


Fig 4.2: Topología del ADRC con la RNN entrenada.

Luego, se realizó los siguientes experimentos numéricos:

- Caso A: Mediciones continuas sin ruido, con $D = 0.5$ (sin rechazo de ϕ_i).
- Caso B: Mediciones muestreadas cada 0.5 d (equivalente a cada 12 h) corrompidas con ruido Gaussiano de media cero y varianza 0.5, con $D = 0.5$ (sin rechazo de ϕ_i).
- Caso C: Mediciones muestreadas cada 0.5 d (equivalente a cada 12 h) corrompidas con ruido Gaussiano de media cero y varianza 0.5, con rechazo activo de perturbaciones y el seguimiento de la trayectoria constante deseada $\xi_{ri} = 10$ mmol/L.

Por último, el desempeño de la RNN fue comparada con el observador GPI (2.9). Para corroborar esto, se adicionó un sistema de control nominal (mediciones continuas sin ruido con conocimiento exacto de la incertidumbre total) para calcular el RMSE de los estimados de ξ_i y ϕ_i , es decir:

$$\text{RMSE}(\xi_i, \hat{\xi}_i) = \left(\sum_{j=1}^T e_{\xi}^2 \right)^{1/2} \quad \text{RMSE}(\phi_i, \hat{\phi}_i) = \left(\sum_{j=1}^T e_{\phi}^2 \right)^{1/2} \quad (4.1)$$

donde $e_{\xi} = \xi_i - \hat{\xi}_i$ y $e_{\phi} = \phi_i - \hat{\phi}_i$ son los errores de estimación de ξ_i y ϕ_i , respectivamente, además T es la cantidad total de datos adquiridos. Mientras que la evaluación del desempeño del ADRC en lazo cerrado con dichos observadores de estado extendido, se efectuó con la integral del error absoluto (IAE) y la integral del error cuadrático (ISE), es decir:

$$\text{IAE} = \int |e_r(t)| dt \quad \text{ISE} = \int e_r(t)^2 dt \quad (4.2)$$

donde $e_r(t) = \xi_{ri} - \xi_i(t)$ es el error de seguimiento de trayectoria. Cabe destacar que la formación del *dataset*, el entrenamiento de la red neuronal artificial y las simulaciones del bioproceso fueron ejecutadas en MATLAB/Simulink (Versión 2022a), usando el método de integración Euler con paso de integración de 0.001 s.

4.2. Resultados numéricos

A continuación, se describen los resultados obtenidos en el entrenamiento de la red neuronal recurrente y en la simulación del proceso continuo de digestión anaerobia para los casos previamente descritos.

4.2.1. Entrenamiento de la red neuronal

El comportamiento de la función de costo o pérdida y del RMSE del proceso de entrenamiento y validación se muestran en las Figuras 4.3-4.4, respectivamente. Observe que en cada caso, los datos de entrenamiento y validación tienen tiempos de asentamiento cercanos a las 1000 iteraciones. Además, no ocurre el fenómeno de *underfitting* u *overfitting* en los procesos de entrenamiento y validación.

Luego, los valores finales de pérdida y del RMSE en el proceso de validación más los RMSE calculados con los datos de prueba se muestran en la Tabla 4.1. Note que los valores de pérdida y RMSE en la validación más pequeños corresponden a las concentraciones microbianas X_1 y X_2 . Lo anterior también se ve reflejado en el RMSE de prueba, lo que muestra que las redes entrenadas para cada caso tienen buenas propiedades de extrapolación de los datos y así, una buena capacidad de filtrar el ruido de su respectiva medición, así como una gran capacidad de regresión de la incertidumbre total ϕ_i . Luego, la estimación de C presenta los valores más grandes de pérdida y RMSE en la validación. Esto se ve reflejado en la filtración de ruido en la medición, aunque presenta un buen comportamiento para la estimación de ϕ_i , como se muestra en su RMSE de prueba. Posterior al estado C , la materia orgánica S_1 y los VFA S_2 son los siguientes estados con los mayores valores de validación en la función de costo y RMSE. Aun más, al igual que para C , el RMSE de prueba indica que las redes diseñadas para S_1 y S_2 tiene un mejor comportamiento para estimar ϕ_i en comparación a filtrar el ruido en la medición. Por último, la alcalinidad total tiene el valor más pequeño del RMSE de prueba en la filtración de ruido. Lo anterior se debe a que $\phi_i = 0$ para Z , lo que puede implicar que la red neuronal entrenada haya modificado sus pesos para ejecutar principalmente la tarea de filtración de ruido.

Estado	Valores finales en validación		RMSE en prueba	
	Pérdida	RMSE	ξ_i	ϕ_i
X_1	4.8233×10^{-5}	0.0097338	0.0068682	0.0065846
X_2	6.4288×10^{-5}	0.011109	0.0085042	0.007069
Z	0.00013867	0.016588	1.8429×10^{-7}	0.0096522
S_1	0.00060887	0.034705	0.023737	0.021178
S_2	0.00064434	0.035658	0.023702	0.015059
C	0.0011079	0.046774	0.032459	0.018928

Tabla 4.1: Valores obtenidos del proceso de entrenamiento, validación y prueba de la red neuronal recurrente para cada estado del proceso continuo de digestión anaerobia.

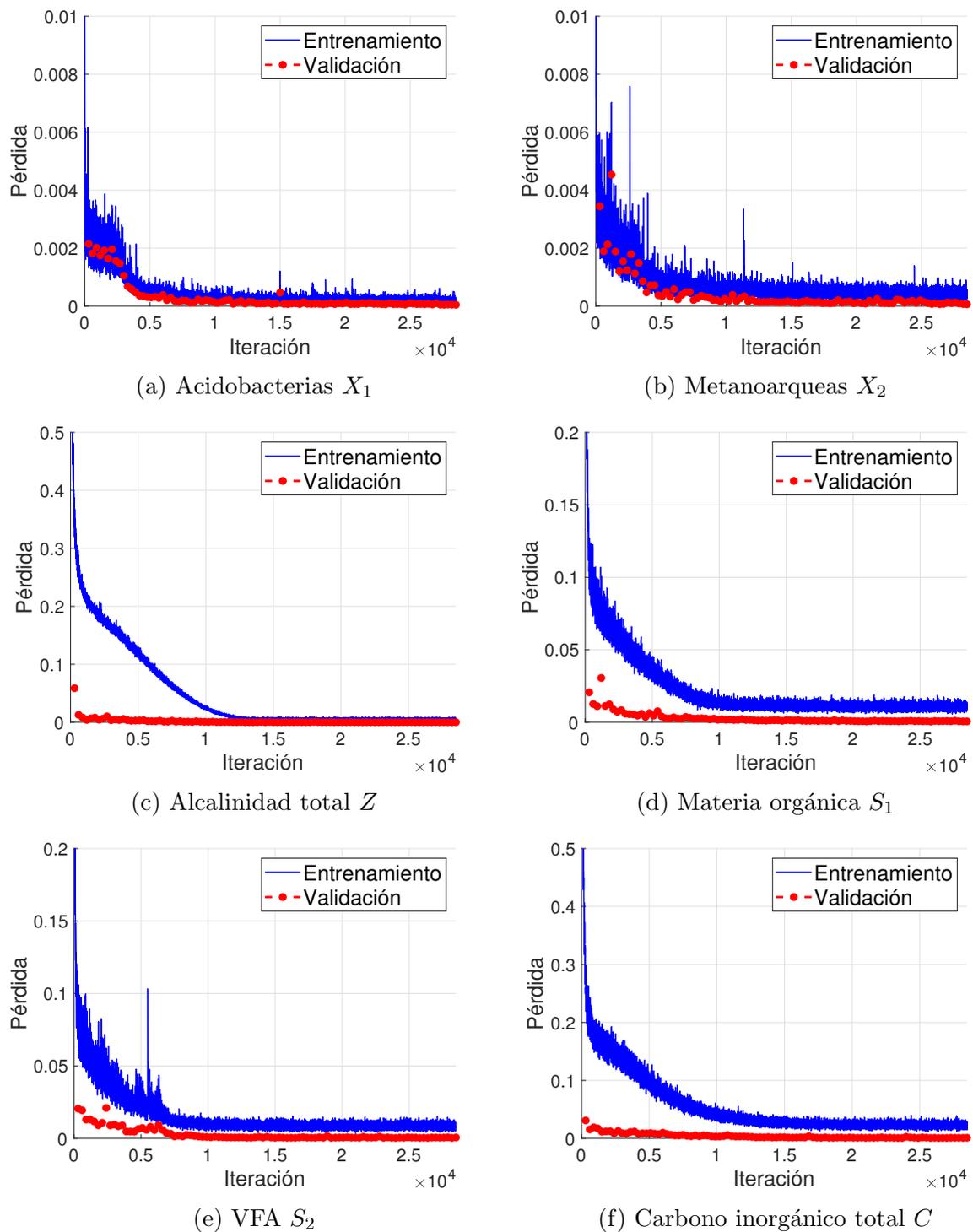


Fig 4.3: Gráficas de la función de costo o perdida durante el proceso de entrenamiento y validación de la red neuronal recurrente para cada estado del proceso continuo de digestión anaerobia.

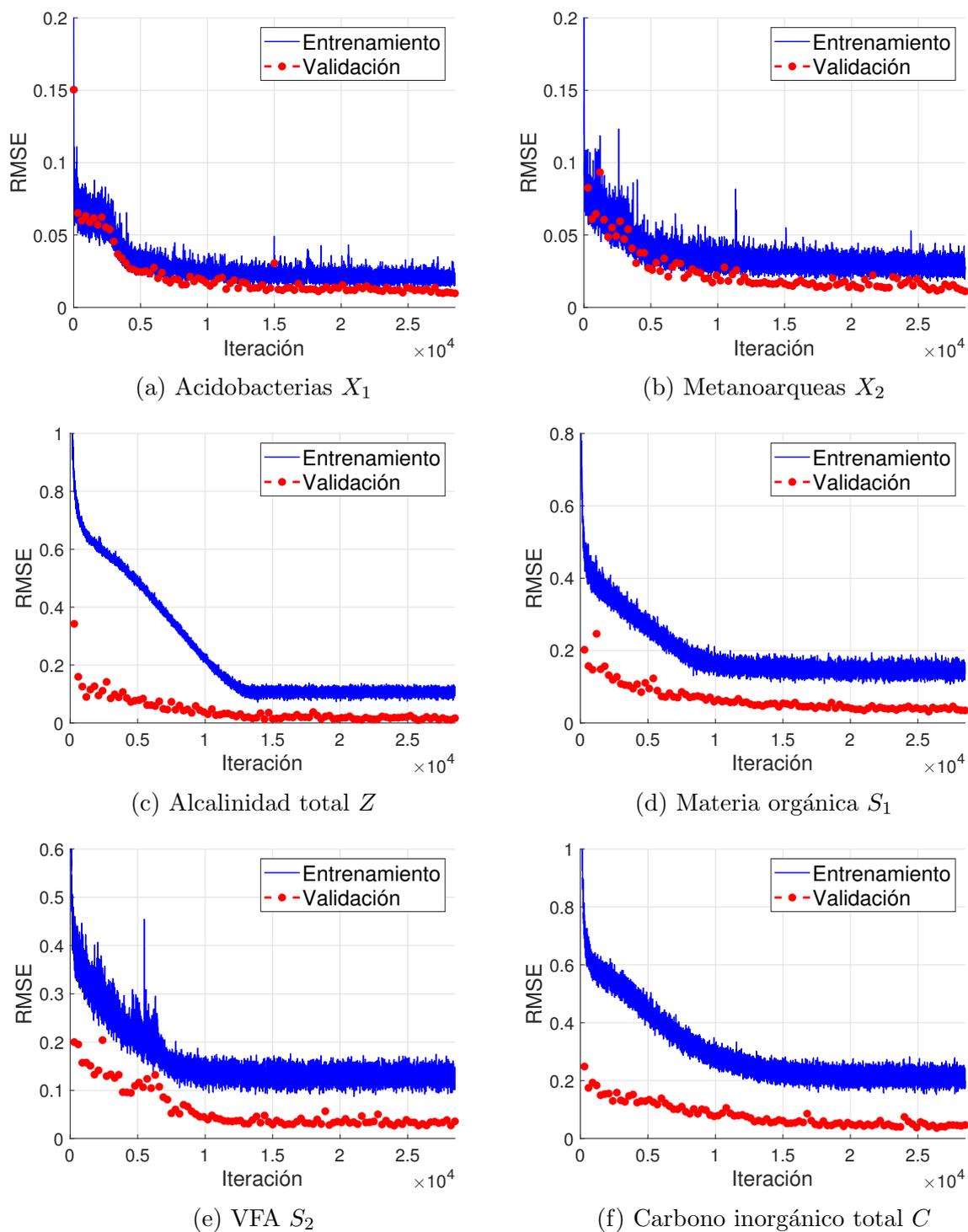


Fig 4.4: Gráficas del RMSE durante el proceso de entrenamiento y validación de la red neuronal recurrente para cada estado del proceso continuo de digestión anaerobia.

4.2.2. Simulación del bioproceso

Para iniciar, los resultados del proceso continuo de digestión anaerobia sin rechazo activo de la incertidumbre total ϕ_i se muestra en la Figura 4.5-4.6. Se muestra que esta decreciendo la concentración de acidobacterias, mientras que la concentración de metanoarqueas se esta incrementando. Por otro lado, se reduce de forma notable la concentración de materia orgánica por un breve intervalo de tiempo y después, se incrementa hasta llegar a un valor en estado estacionario de 5 g/L aproximadamente. Cabe mencionar que la estabilización de acidobacterias y materia orgánica ocurre casi al mismo tiempo. Ahora, se observa que la concentración de VFA se incrementa apreciablemente por un breve intervalo de tiempo y más tarde, decrece hasta alcanzar un valor en estado estacionario de 25 mmol/L aproximadamente. Luego, se observa que la alcalinidad total del proceso y la formación de metano se incrementan en el tiempo hasta estabilizarse con valores aproximados de 80 mmol/L y 55 mmol/(L · d), respectivamente. Adicionalmente, la concentración de carbono inorgánico total se reduce de forma notable en el digestor anaerobio por un breve intervalo de tiempo. Sin embargo, dicha concentración se empieza a estabilizar al mismo tiempo que la formación de metano, así como la concentración acumulada de metanoarqueas y VFA en el digestor, alcanzando un valor en estado estacionario de 65 mmol/L aproximadamente.

Luego, los resultados de la estimación de ξ_i y ϕ_i a partir de los observadores de estado extendido propuestos para el Caso 1 se muestra en las Figuras 4.7-4.8. Las gráficas indican que el GPIO se caracteriza por tener un tiempo de asentamiento, una sobre-elongación y un error en estado estacionario más pequeños en comparación a la RNN.

Después, los resultados de la estimación de ξ_i y ϕ_i usando los observadores propuestos para el Caso 2, se muestra en las Figuras 4.9-4.10. Las gráficas muestran que nuevamente el GPIO tiene un mejor tiempo de asentamiento, así como una menor sobre-elongación y error en estado estacionario con respecto a la RNN. Sin embargo, la red neuronal genera los estimados más suaves por la filtración del ruido.

Luego, los resultados de la dinámica del proceso en lazo cerrado con el controlador ADRC acoplado a los observadores deseados se muestran en las Figuras 4.11-4.15. Observe que en comparación al sistema en lazo abierto, la concentración acumulada de acidobacterias y metanoarqueas se ha incrementado, mientras que la concentración de materia orgánica, carbono inorgánico total y VFA, junto con la formación de metano, se han reducido. Además, la alcalinidad total se mantiene en un valor similar a los casos anteriores. Ahora, observe que el sistema en lazo cerrado con el GPIO genera estimados de ξ_i y ϕ_i con sobre-elongaciones y errores en estado estacionario más pequeños en comparación a la RNN. Más aún, se observa que el GPIO produce un mejor desempeño en el seguimiento del valor de referencia deseado ξ_{ri} en comparación a la red neuronal. No obstante, la RNN genera estimados más suaves de ξ_i y ϕ_i , incluso la señal de control para la tasa de dilución tiene trayectorias más suaves en comparación al controlador acoplado al GPIO. Cabe destacar que la señal de control es estrictamente positiva para ambos casos.

Por último, las Tablas 4.2-4.3 resumen el desempeño de los estimados de los observadores de estado extendido propuestos evaluados a partir del RMSE en diferentes intervalos de tiempo. De forma general, se puede concluir que el GPIO produce los mejores estimados de ξ_i y ϕ_i en comparación a la red neuronal recurrente, durante toda la simulación y en estado estacionario (posterior a 10 d).

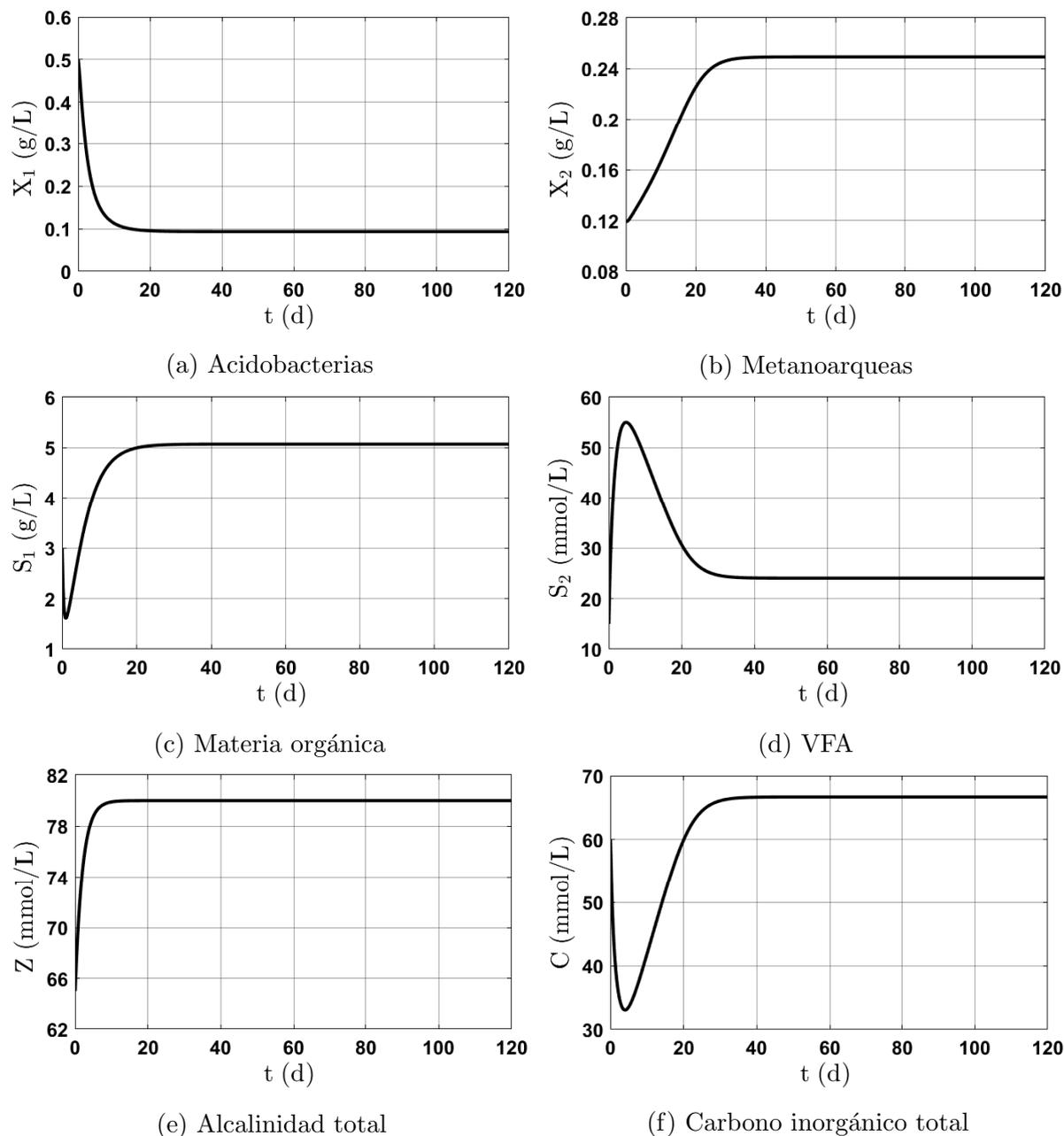


Fig 4.5: Dinámica de los estados del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para los Casos 1 y 2, es decir, sistemas sin rechazo de la incertidumbre total ϕ_i .

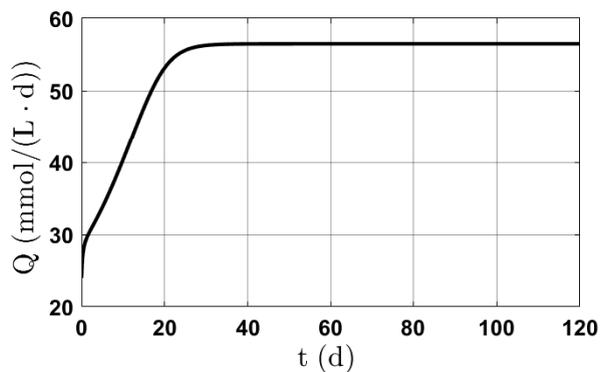
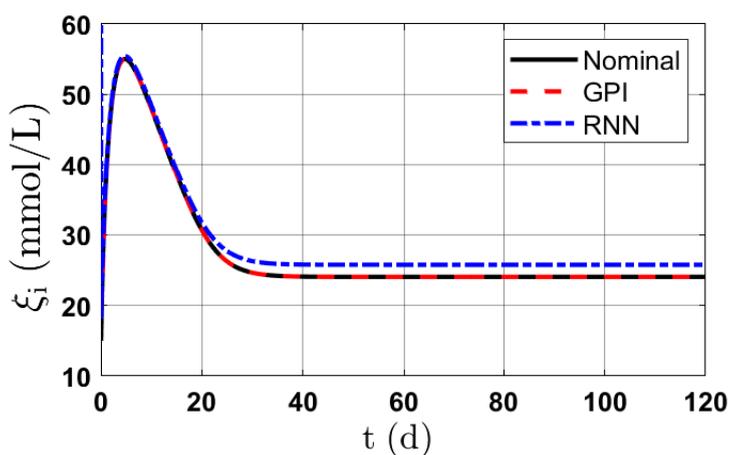
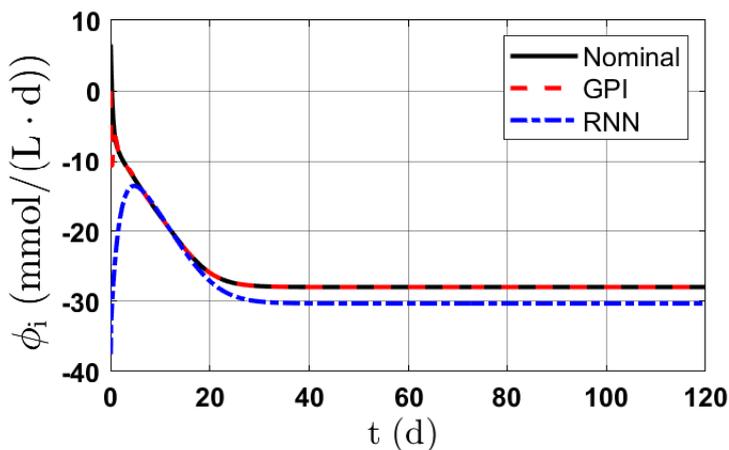


Fig 4.6: Dinámica del metano Q del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para los Casos 1 y 2, es decir, sistemas sin rechazo de la incertidumbre total ϕ_i .

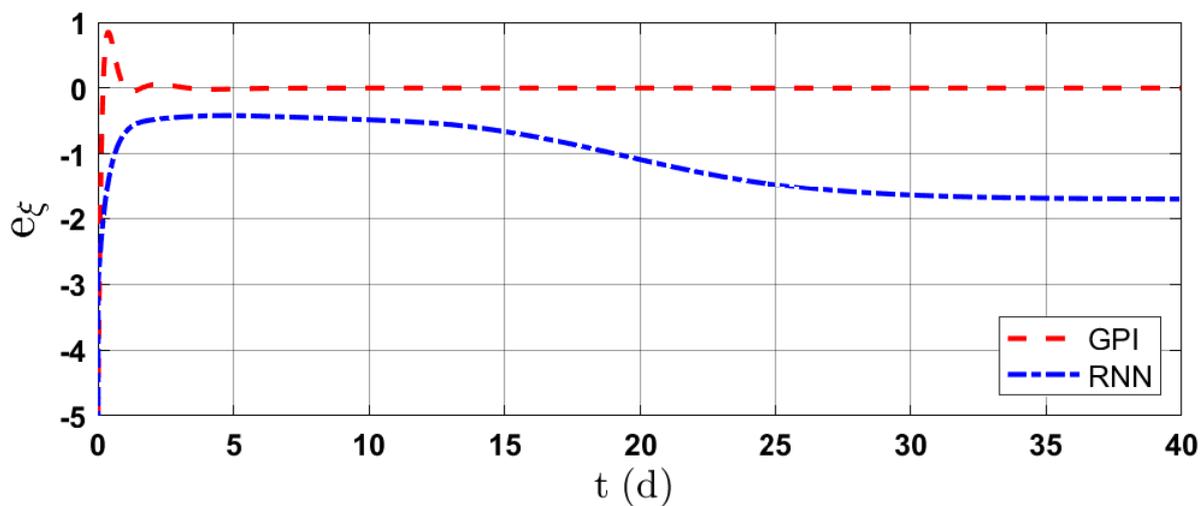


(a)

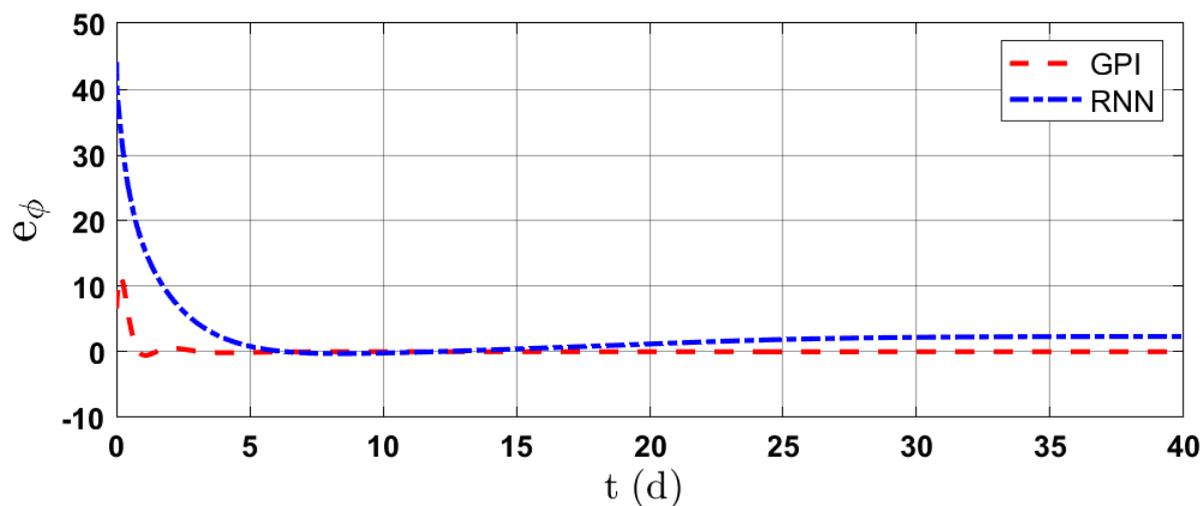


(b)

Fig 4.7: Dinámica de ξ_i y ϕ_i con sus respectivos estimados del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 1, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.



(a)



(b)

Fig 4.8: Dinámica de los errores de estimación de ξ_i y ϕ_i del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 1, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

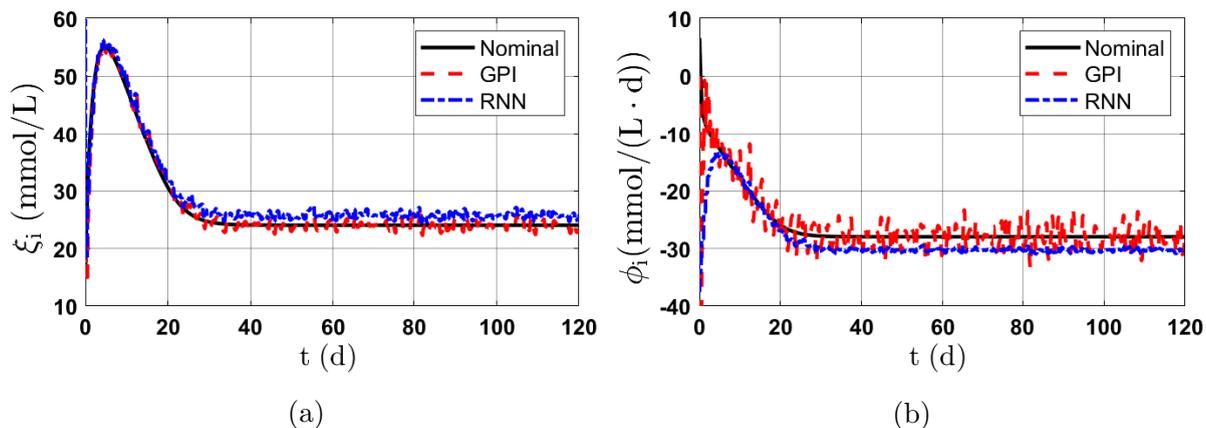


Fig 4.9: Dinámica de ξ_i y ϕ_i con sus respectivos estimados del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 2, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

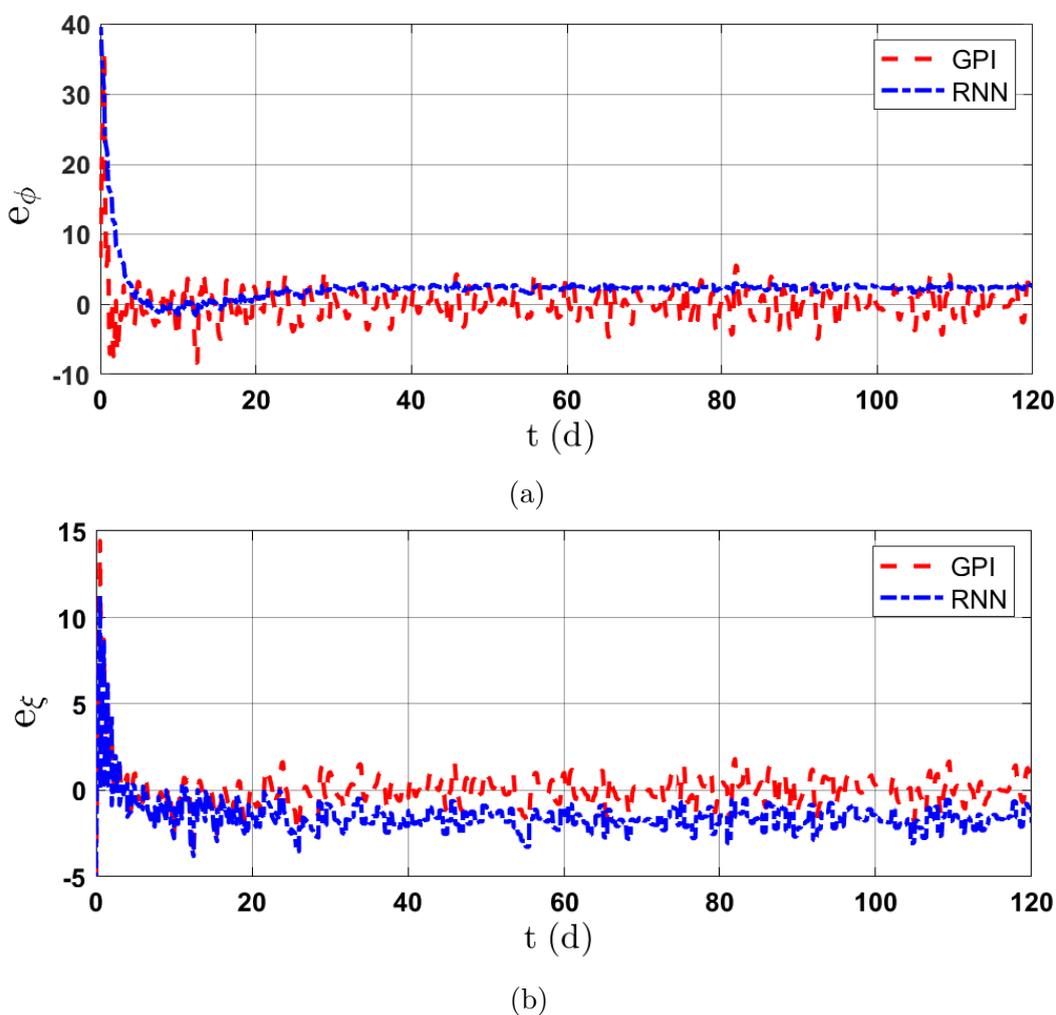


Fig 4.10: Dinámica de los errores de estimación de ξ_i y ϕ_i del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 2, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

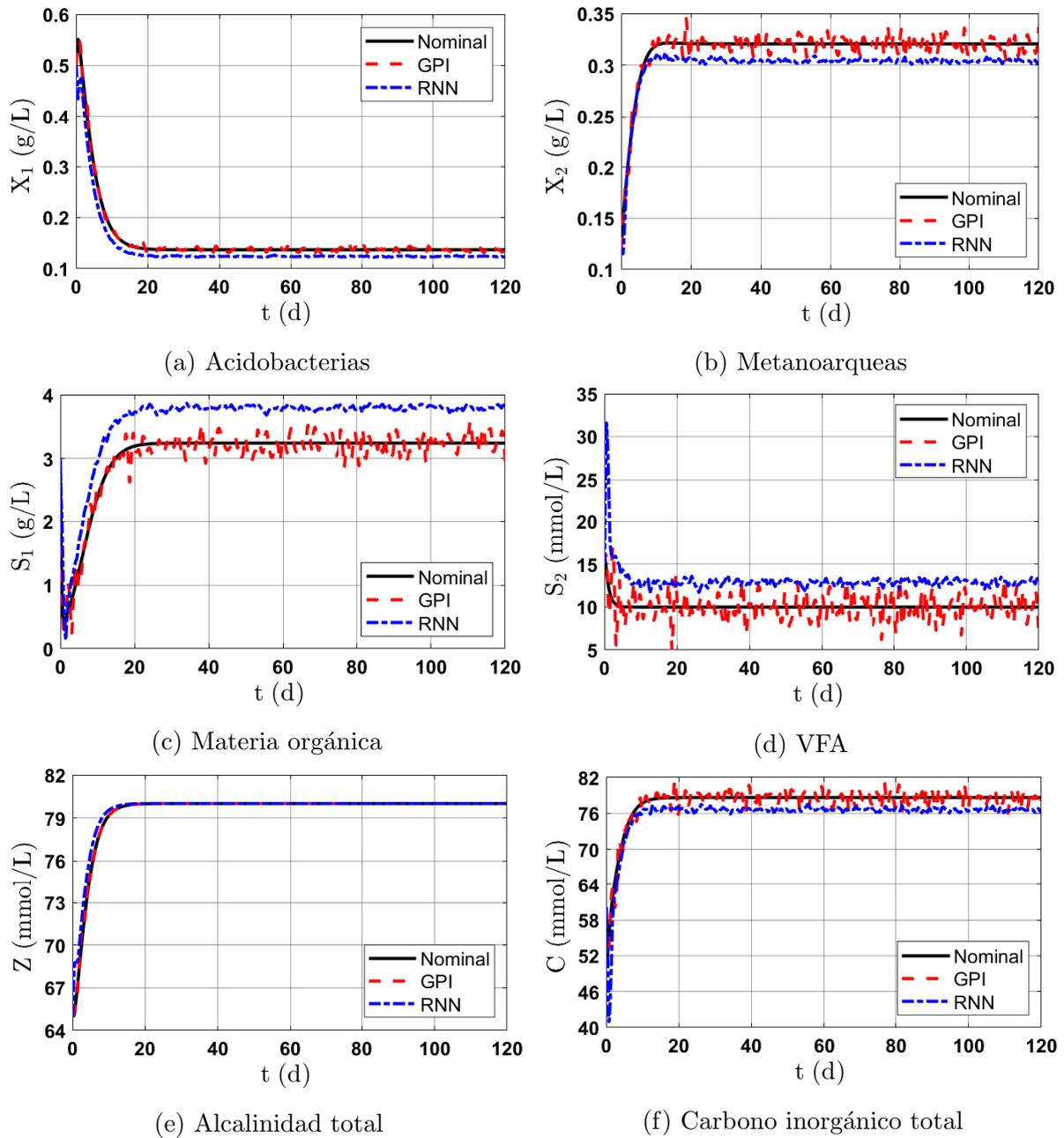


Fig 4.11: Dinámica de los estados del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 3, es decir, con el rechazo activo de la incertidumbre total ϕ_i usando el controlador (2.11) y (2.13) acoplado al observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

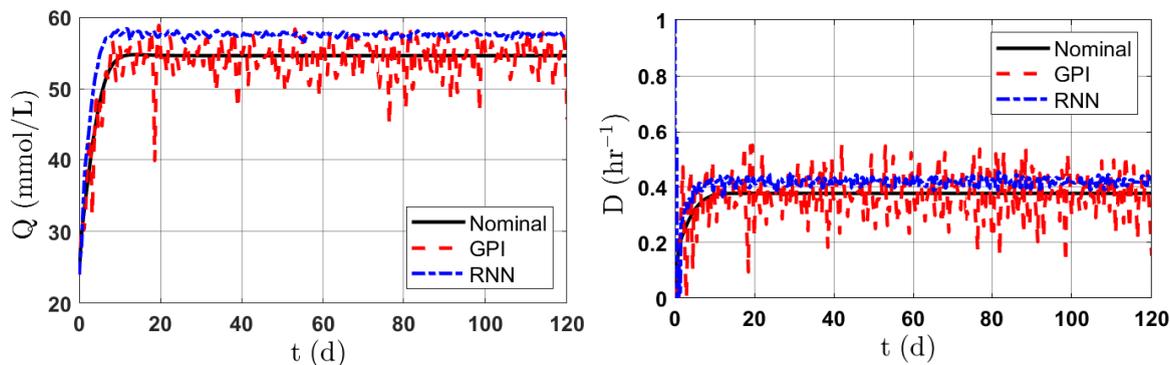


Fig 4.12: Dinámica del metano Q y la tasa de dilución D del proceso continuo de digestión anaerobia (1.20) para el Caso 3, usando el controlador (2.11) y (2.13) acoplado al observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

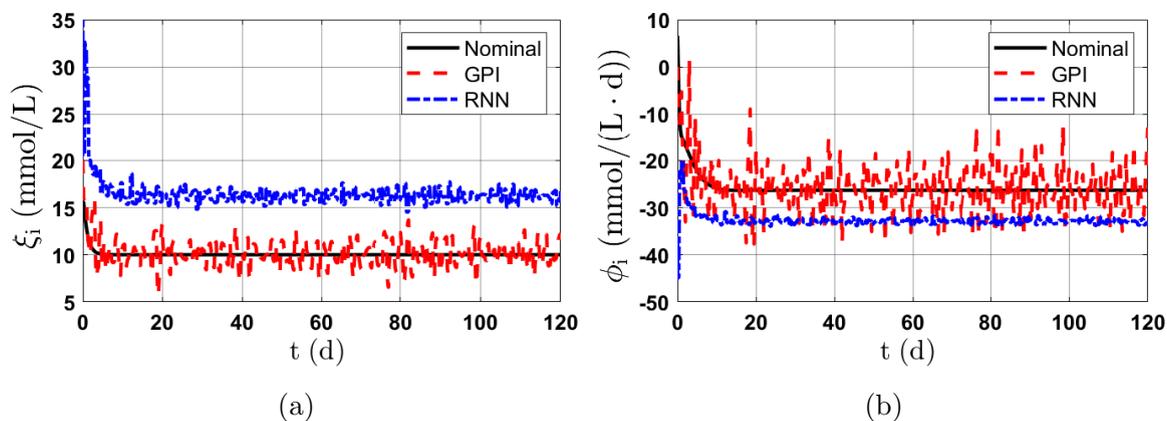


Fig 4.13: Dinámica del ξ_i , ϕ_i y sus estimados del bioproceso (1.20) para el Caso 3, usando el controlador (2.11) y (2.13) acoplado al observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

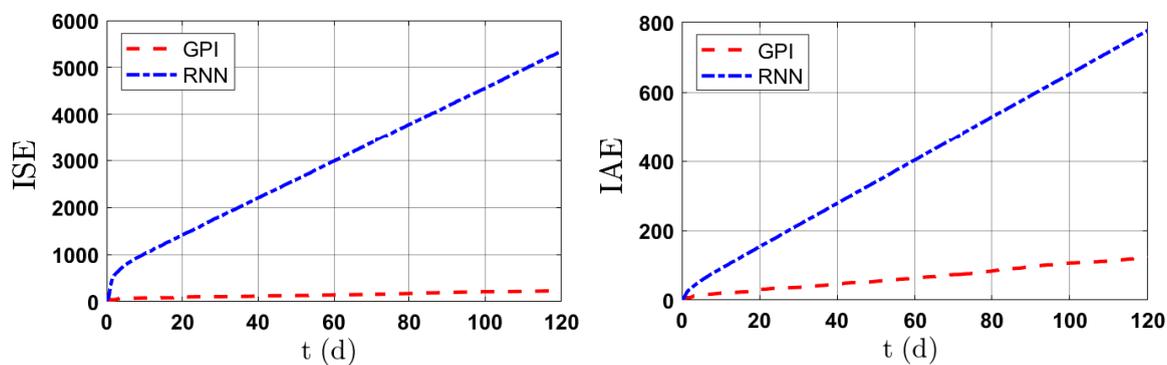
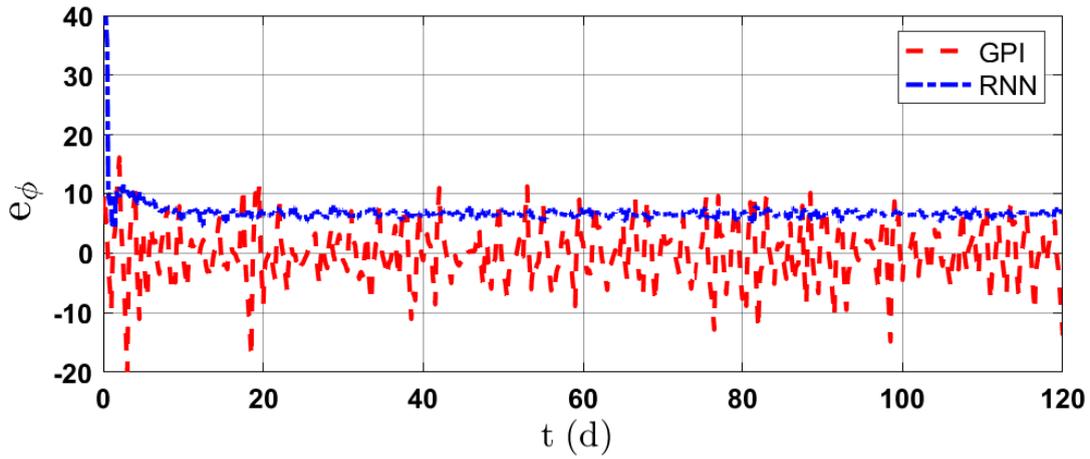
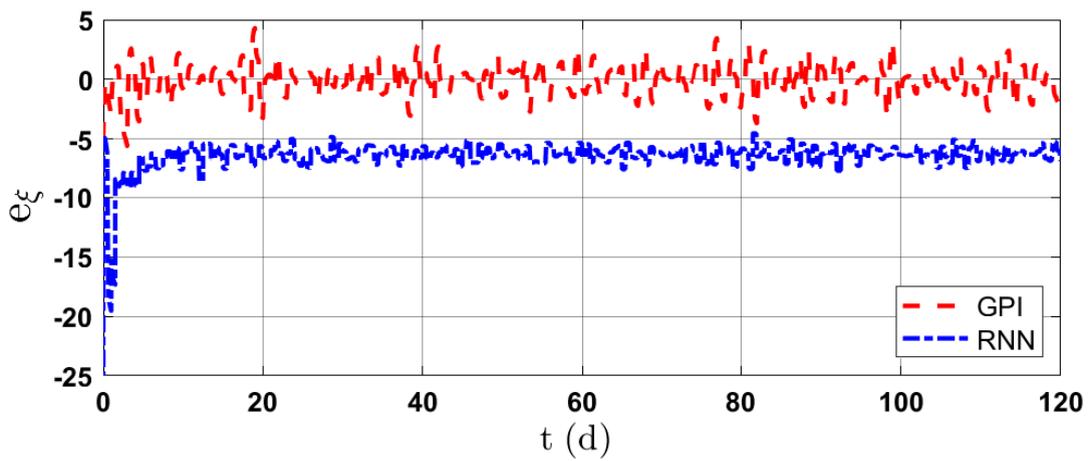


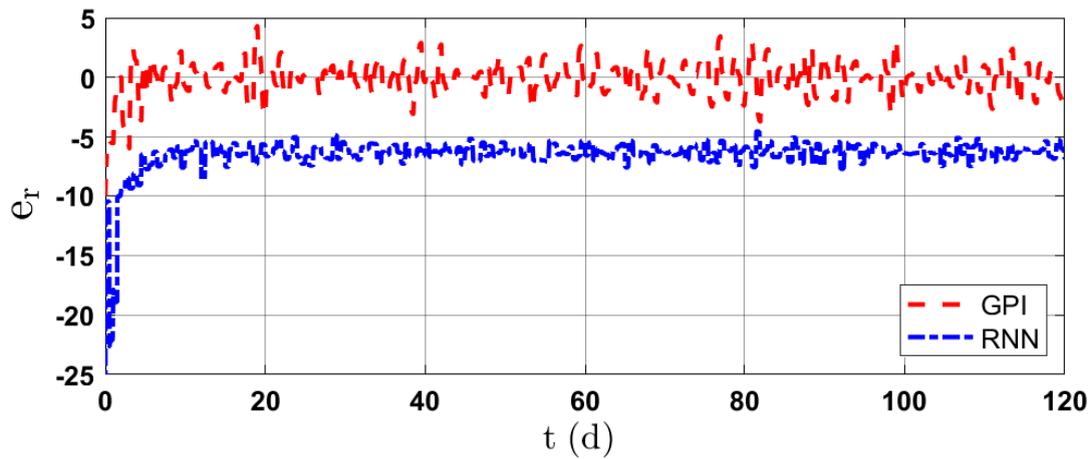
Fig 4.14: Índices de desempeño del controlador (2.11) y (2.13) acoplado al observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada, en lazo cerrado con el bioproceso (1.20).



(a)



(b)



(c)

Fig 4.15: Dinámica del error de estimación de ξ_i y ϕ_i más el error de seguimiento de trayectoria entre ξ_{ri} y ξ_i del proceso continuo de digestión anaerobia para el Caso 3, usando el controlador (2.11) y (2.13) acoplado al observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada.

Observador	RMSE					
	Caso 1		Caso 2		Caso 3	
	Total	$t > 10$	Total	$t > 10$	Total	$t > 10$
GPIO	0.105	0	1.085	0.578	1.261	0.811
RNN	1.636	1.206	1.881	1.276	6.5617	4.438

Tabla 4.2: Cálculo del RMSE de ξ_i de toda la simulación y posterior a 10 d, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada para los diferentes casos de simulación.

Observador	RMSE					
	Caso 1		Caso 2		Caso 3	
	Total	$t > 10$	Total	$t > 10$	Total	$t > 10$
GPIO	0.608	0	2.794	1.486	4.101	2.678
RNN	3.430	1.648	3.707	1.653	7.280	4.643

Tabla 4.3: Cálculo del RMSE de ϕ_i de toda la simulación y posterior a 10 d, usando el observador GPIO (2.9) y la RNN entrenada para los diferentes casos de simulación.

4.3. Discusión de los resultados

Un breve análisis del comportamiento del bioproceso en lazo abierto permitirá justificar el control de la concentración de ácidos grasos volátiles del biorreactor. Por un lado, el elevado incremento de la concentración de VFA se debe al ingreso de este sustrato al equipo y a la actividad metabólica de las acidobacterias. Aunque esto último parezca falso por su decrecimiento en lazo abierto, se nota que la concentración de materia orgánica y de acidobacterias se estabilizan al mismo tiempo, lo que implica que dicho sustrato es consumido en grandes cantidades por las acidobacterias. Sin embargo, la concentración de dichos microorganismos se reduce considerablemente por un intervalo corto de tiempo porque en dicho intervalo la tasa de dilución es más grande que la tasa de crecimiento de las acidobacterias. Independiente de lo anterior, el incremento de la concentración de ácidos grasos promueve la proliferación de metanoarqueas y a su vez, se ve reflejado en la producción de metano. Adicionalmente, la concentración de carbono inorgánico se reduce considerablemente por las altas concentraciones de VFA y metanoarqueas en el medio de cultivo. Lo anterior causa cambios en el rango óptimo de pH^3 (entre 6.8 a 7.2), como se muestra en la Figura 4.16. Por ende, la concentración de VFA afecta directamente las concentraciones de metanoarqueas y carbono inorgánico total, así como el valor de pH y la producción de metano. Así, es necesario diseñar un sistema de control que manipule la concentración de VFA a un valor deseado. Sin embargo, como se mencionó en el Capítulo 1, una elevada concentración de ácidos grasos como el acetato puede inhibir el crecimiento de las metanoarqueas, pudiendo causar su remoción del medio de cultivo. Así, la concentración de VFA debe ser razonablemente menor, tal que no eviten la proliferación de metanoarqueas en el digestor anaerobio.

³En la digestión anaerobia se define como $\text{pH} = -\log_{10} \left(K_b \frac{C-Z+S_2}{Z-S} \right)$ con $K_b = 6.5 \times 10^{-7}$ (Bernard y cols., 2001).

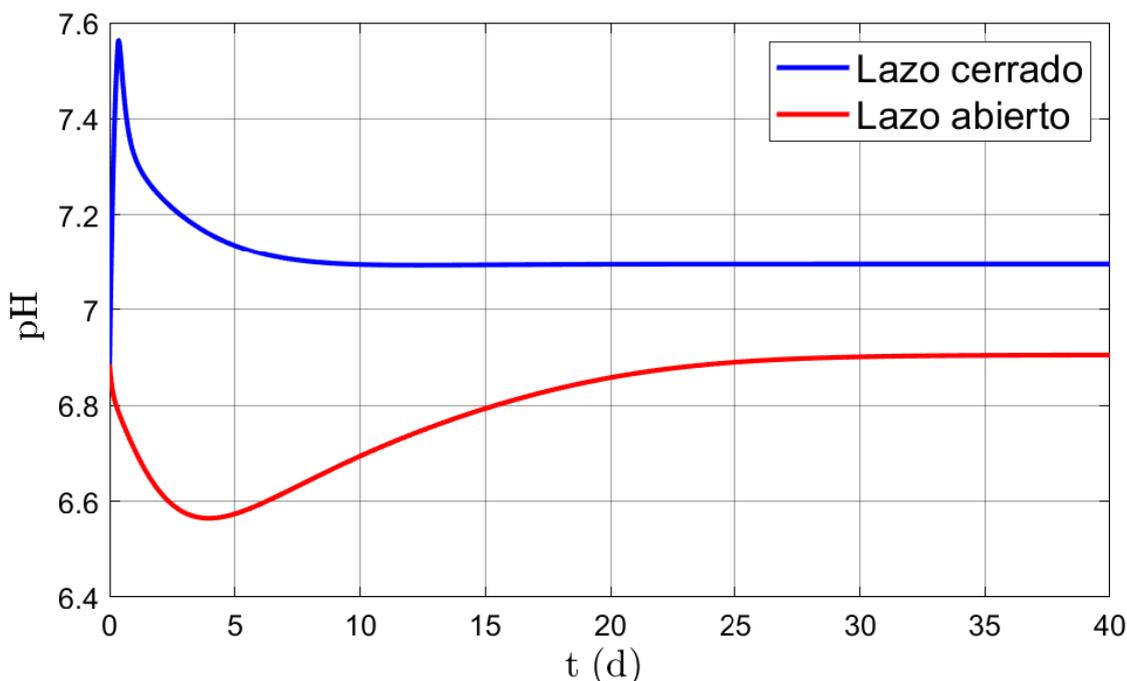


Fig 4.16: Dinámica del pH del proceso continuo de digestión anaerobia en lazo abierto y cerrado con el controlador (2.11) y (2.13) ante mediciones continuas sin ruido y con conocimiento exacto de la incertidumbre total del sistema.

Nota 4.1. Aunque el control de la concentración de ácidos grasos volátiles es importante en la digestión anaerobia (Acosta y Abreu, 2005; Gaida y cols., 2017), también existen otros objetivos de control como manipular la alcalinidad total para modificar el pH, reducir la concentración de materia orgánica para establecer relaciones sintróficas adecuadas entre las acidobacterias y metanoarqueas, maximizar la formación de metano formado por sus diversos intereses económicos y energéticos, así como modificar la concentración de hidrógeno que puede inhibir del crecimiento de acidobacterias y metanoarqueas, etcétera (Adekunle y cols., 2015; Gerardi, 2003; Gaida y cols., 2017).

Al aplicar el algoritmo ADRC en el bioproceso, se observa un incremento en la concentración de metanoarqueas y de carbono inorgánico total. Más aún, aunque el pH del medio de cultivo se incrementa contrario al caso anterior, observe que rápidamente vuelve al rango óptimo de pH en 3 días aproximadamente, en comparación al sistema en lazo abierto que tarda 15 días aproximadamente. Adicionalmente, observe que la política de control implementada reduce la concentración de materia orgánica e incluso, produce una mayor acumulación de acidobacterias en el digestor. Así, observe que la manipulación de los ácidos grasos ha generado diversos efectos directos e indirectos en el comportamiento de la digestión anaerobia. Cabe destacar que la alcalinidad total y la producción de metano no son afectados por el algoritmo de control implementado. Aunque parezca contradictorio que la producción de metano no se haya incrementado por el incremento de metanoarqueas, recuerde que su producción depende de la relación no lineal entre la concentración de metanoarqueas y ácidos grasos en la tasa de crecimiento de dicho microorganismo.

Luego, aunque el entrenamiento de la red neuronal recurrente hayan sido satisfactorios, las simulaciones con el bioproceso indican dos aspectos importantes. **Primero**, tiene un pobre desempeño en estimar la incertidumbre total del sistema en comparación al observador de estados extendido (2.9). Esto se debe a las siguientes razones:

1. Siempre genera elevados errores iniciales en la estimación, similar al fenómeno de sobrepico (*peaking phenomena*) en algoritmos de alta ganancia.
2. A pesar de su buen desempeño en la fase transitoria, la red neuronal siempre tiene un apreciable error en estado estacionario.
3. El entrenamiento e implementación de la red neuronal tiene altos costos computacionales.

Observe que la primer implicación no es de vital importancia por la estructura saturable de la acción de control. Por otro lado, la segunda observación ocurre porque en fase estacionaria tanto la variable medida como la incertidumbre total son constantes y por consecuencia, los datos carecen de un comportamiento secuencial en el tiempo. Con respecto a la tercer observación, resulta ser una fuerte limitante en comparación a la sencilla implementación del observador GPIO. **Segundo**, la red neuronal tiene un excelente desempeño como filtrador de ruido. Esto último causa que todos los estimados e incluso la política de control tenga acciones más suaves en comparación a las trayectorias generadas por el GPIO. Así, resulta físicamente factible implementar la red neuronal entrenada tal que el elemento final de control siga adecuadamente la acción de control generada por el ADRC, aunque con altos costos computacionales.

Por último, aunque es injusto comparar la red neuronal diseñada con el algoritmo GPIO porque este último no fue diseñado para ser robusto ante el ruido en la medición, previamente se había adicionado un filtro pasa-bajas⁴ en serie con el observador. Sin embargo, el efecto del este filtro no mejoro en lo absoluto la dinámica del algoritmo GPIO. Esto se debe a que el análisis y diseño de un filtro acoplado a un observador de estados suele ser complicado. Así, la tarea de filtración ejecutada por la red neuronal resulta más sencilla de diseñar en comparación a un filtro acoplado al observador de estados.

⁴La estructura de un filtro pasa-bajas es $\tau \dot{y}(t) + y(t) = x(t)$, donde τ es una constante positiva, $x(t)$ es la entrada a filtrar y $y(t)$ es la variable filtrada de $x(t)$.

Conclusión

Se diseñó una red neuronal recurrente acoplada al control por rechazo activo de perturbaciones para permitir el control robusto de un proceso de digestión anaerobia ante sus dinámicas desconocidas. Por un lado, el bioproceso fue descrito con el modelo de digestión anaerobia número dos, el cuál es sencillo para estudiar sus propiedades en lazo cerrado con el algoritmo de control-observación propuesto. Cabe destacar que las dinámicas desconocidas del sistema son causadas por las dinámicas eco-evolutivas inherentes al bioproceso y describen las dinámicas asociadas a las tasas de reacción y la transferencias líquido-gas. Por otro lado, el bioproceso cumple las propiedades de controlabilidad de una variable deseada y de observabilidad para las dinámicas desconocidas del sistema. Por consecuencia, el control por rechazo activo de perturbaciones garantiza que el sistema en lazo cerrado pueda seguir robustamente una referencia deseada ante la presencia de mediciones continuas sin ruido y de dinámicas desconocidas, es decir, que el error de seguimiento de referencia sea uniformemente últimamente acotado. Luego, la red neuronal recurrente entrenada puede realizar la tarea de regresión de las dinámicas desconocidas del modelo y a su vez, realizar la tarea de filtración de ruido en la medición. También, la red neuronal recurrente puede ser acoplada al control propuesto mediante la propiedad de aproximación universal. Cabe mencionar que la red neuronal diseñada tiene un buen desempeño en ejecutar las tareas de regresión y filtración. Por último, el controlador-observador propuesto tiene un buen desempeño en lazo cerrado con el bioproceso ante mediciones discretas con ruido.

Trabajo a futuro

Debido a los elevados costos computacionales más el comportamiento de las dinámicas desconocidas del sistema en estado estacionario, se debe plantear usar un observador de estados diferente a una red neuronal recurrente. Para ello, se pueden abordar otras estrategias de observación similares al observador proporcional-integral generalizado, como son observadores de alta ganancia o técnicas por modos deslizantes. También, se puede seguir con el enfoque de redes neuronales utilizando otras arquitecturas descritas en *deep learning*. No obstante, es recomendable usar el enfoque de redes neuronales para el diseño de filtros acoplados a observadores de estado extendido, tal que analíticamente se estudie el observador híbrido propuesto.

Por otro lado, la prueba teórica debe tener en consideración la presencia de mediciones discretas con ruido y la saturación de la política de control. Más aún, el análisis del controlador-observador propuesto acoplado al diferenciador de trayectorias es fundamental para extender los resultados al seguimiento de trayectorias continuas.

Además, aunque el presente trabajo ha estudiado el problema de control para un estado medible, este enfoque puede extenderse a otros problemas. Por ejemplo, al control de un estado no medible o al control de un estado medible más la observación de diversos estados no medibles del bioproceso.

Por último, es necesario estudiar el problema de optimización de la digestión anaerobia utilizando otros enfoques ajenos a la teoría de control. Por un lado, se deben diseñar digestores de bajo costo para su implementación en zonas rurales. También, se requiere un estudio exhaustivo sobre la materia orgánica más adecuada para la producción de biogas. Además, se requiere investigar métodos para modelar y eliminar los organismos focales de la comunidad microbiana que afectan el rendimiento del bioproceso, como las bacterias reductoras de sulfato.

Bibliografía

- Abas, N., Kalair, A., y Khan, N. (2015). Review of fossil fuels and future energy technologies. *Futures*, 69, 31–49.
- Abideen, Z., Hameed, A., Koyro, H.-W., Gul, B., Ansari, R., y Khan, M. A. (2014). Sustainable biofuel production from non-food sources-an overview. *Emirates Journal of Food and Agriculture*, 1057–1066.
- Achinas, S., Achinas, V., y Euverink, G. J. W. (2020). Microbiology and biochemistry of anaerobic digesters: an overview. *Bioreactors*, 17–26.
- Acosta, Y. L., y Abreu, M. C. O. (2005). La digestión anaerobia. aspectos teóricos. parte i. *ICIDCA. Sobre los Derivados de la Caña de Azúcar*, 39(1), 35–48.
- Adekunle, K. F., Okolie, J. A., y cols. (2015). A review of biochemical process of anaerobic digestion. *Advances in Bioscience and Biotechnology*, 6(03), 205.
- Alcaraz-Gonzalez, V., y Gonzalez-Alvarez, V. (2007). Robust nonlinear observers for bioprocesses: Application to wastewater treatment. En *Selected topics in dynamics and control of chemical and biological processes* (pp. 119–164). Springer.
- Ali, J. M., Hoang, N. H., Hussain, M. A., y Dochain, D. (2015). Review and classification of recent observers applied in chemical process systems. *Computers & Chemical Engineering*, 76, 27–41.
- Arcak, M., y Nešić, D. (2004). A framework for nonlinear sampled-data observer design via approximate discrete-time models and emulation. *Automatica*, 40(11), 1931–1938.
- Ascencio, P., Sbarbaro, D., y de Azevedo, S. F. (2004). An adaptive fuzzy hybrid state observer for bioprocesses. *IEEE Transactions on Fuzzy Systems*, 12(5), 641–651.
- Aynsley, M., Hofland, A., Morris, A., Montague, G., y Massimo, C. D. (1993). Artificial intelligence and the supervision of bioprocesses (real-time knowledge-based systems and neural networks). *Bioprocess Design and Control*, 1–27.
- Aziz, A., Sengar, A., Basheer, F., Farooqi, I. H., y Isa, M. H. (2022). Anaerobic digestion in the elimination of antibiotics and antibiotic-resistant genes from the environment—a comprehensive review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 10(1), 106423.
- Balagurusamy, N., y Chandel, A. K. (2020). *Biogas production*. Springer.

- Balch, W., Fox, G. E., Magrum, L. J., Woese, C. R., y Wolfe, R. (1979). Methanogens: reevaluation of a unique biological group. *Microbiological reviews*, 43(2), 260–296.
- Barbir, F., Veziroğlu, T., y Plass Jr, H. (1990). Environmental damage due to fossil fuels use. *International journal of hydrogen energy*, 15(10), 739–749.
- Bastin, G. (2013). *On-line estimation and adaptive control of bioreactors* (Vol. 1). Elsevier.
- Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlostathis, S., Rozzi, A., . . . Vavilin, V. (2002). The iwa anaerobic digestion model no 1 (adm1). *Water Science and technology*, 45(10), 65–73.
- Baughman, D. R., y Liu, Y. A. (2014). *Neural networks in bioprocessing and chemical engineering*. Academic press.
- Bernard, O., Hadj-Sadok, Z., Dochain, D., Genovesi, A., y Steyer, J.-P. (2001). Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and bioengineering*, 75(4), 424–438.
- Brock, T. D., Madigan, M. T., Martinko, J. M., y Parker, J. (2003). *Brock biology of microorganisms*. Upper Saddle River (NJ): Prentice-Hall, 2003.
- Carreño-Zagarra, J., Guzmán, J., Moreno, J., y Villamizar, R. (2019). Linear active disturbance rejection control for a raceway photobioreactor. *Control Engineering Practice*, 85, 271–279.
- Castledine, M., Sierocinski, P., Padfield, D., y Buckling, A. (2020). Community coalescence: an eco-evolutionary perspective. *Philosophical Transactions of the Royal Society B*, 375(1798), 20190252.
- Choi, D.-J., y Park, H. (2001). A hybrid artificial neural network as a software sensor for optimal control of a wastewater treatment process. *Water research*, 35(16), 3959–3967.
- Darvehei, P., Bahri, P. A., y Moheimani, N. R. (2018). Model development for the growth of microalgae: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 97, 233–258.
- De Assis, A. J., y Maciel Filho, R. (2000). Soft sensors development for on-line bioreactor state estimation. *Computers & Chemical Engineering*, 24(2-7), 1099–1103.
- Di Massimo, C., Willis, M., Montague, G., Tham, M., y Morris, A. (1991). Bioprocess model building using artificial neural networks. *Bioprocess Engineering*, 7(1), 77–82.
- Dochain, D. (2003). State and parameter estimation in chemical and biochemical processes: a tutorial. *Journal of process control*, 13(8), 801–818.
- Dochain, D., Perrier, M., y Guay, M. (2011). Extremum seeking control and its application to process and reaction systems: A survey. *Mathematics and Computers in Simulation*, 82(3), 369–380.
- Doran, P. M. (1995). *Bioprocess engineering principles*. Elsevier.

- Dorf, R. C., Bishop, R. H., Canto, S. D., Canto, R. D., y Dormido, S. (2005). *Sistemas de control moderno*. Pearson Educación.
- Elena, S. F., y Lenski, R. E. (2003). Evolution experiments with microorganisms: the dynamics and genetic bases of adaptation. *Nature Reviews Genetics*, *4*(6), 457–469.
- Esparza, M. (2014). Drought and water shortages in Mexico: current status and future prospects. *Secuencia*(89), 193–219.
- Fossas, E., Ros, R. M., y Fabregat, J. (2001). Sliding mode control in a bioreactor model. *Journal of mathematical chemistry*, *30*(2), 203–218.
- Gadkar, K. G., Mehra, S., y Gomes, J. (2005). On-line adaptation of neural networks for bioprocess control. *Computers & Chemical Engineering*, *29*(5), 1047–1057.
- Gaida, D., Wolf, C., y Bongards, M. (2017). Feed control of anaerobic digestion processes for renewable energy production: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *68*, 869–875.
- Garzón-Castro, C. L., Delgado-Aguilera, E., Cortés-Romero, J. A., Tello, E., y Mazzanti, G. (2018). Performance of an active disturbance rejection control on a simulated continuous microalgae photobioreactor. *Computers & Chemical Engineering*, *117*, 129–144.
- Georgieva, P., y Feyo de Azevedo, S. (1999). Robust control design of an activated sludge process. *International Journal of Robust and Nonlinear Control: IFAC-Affiliated Journal*, *9*(13), 949–967.
- Gerardi, M. H. (2003). *The microbiology of anaerobic digesters*. John Wiley & Sons.
- Goodfellow, I., Bengio, Y., y Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT press.
- Greener, J. G., Kandathil, S. M., Moffat, L., y Jones, D. T. (2022). A guide to machine learning for biologists. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, *23*(1), 40–55.
- Guay, M., Dochain, D., y Perrier, M. (2004). Adaptive extremum seeking control of continuous stirred tank bioreactors with unknown growth kinetics. *Automatica*, *40*(5), 881–888.
- Guo, B.-Z., y Zhao, Z.-L. (2016). *Active disturbance rejection control for nonlinear systems: An introduction*. John Wiley & Sons.
- Gupta, C. K., y Sathiyamoorthy, D. (1998). *Fluid bed technology in materials processing*. CRC press.
- Haddad, W. M., y Chellaboina, V. (2011). Nonlinear dynamical systems and control. En *Nonlinear dynamical systems and control*. Princeton university press.
- Haimi, H., Mulas, M., Corona, F., y Vahala, R. (2013). Data-derived soft-sensors for biological wastewater treatment plants: An overview. *Environmental Modelling & Software*, *47*, 88–107.

- Han, J. (2009). From pid to active disturbance rejection control. *IEEE transactions on Industrial Electronics*, 56(3), 900–906.
- Hassam, S., Ficara, E., Leva, A., y Harmand, J. (2015). A generic and systematic procedure to derive a simplified model from the anaerobic digestion model no. 1 (adm1). *Biochemical Engineering Journal*, 99, 193–203.
- Hendry, A. P. (2016). Eco-evolutionary dynamics. En *Eco-evolutionary dynamics*. Princeton university press.
- Henrich, E., Dahmen, N., Dinjus, E., y Sauer, J. (2015). The role of biomass in a future world without fossil fuels. *Chemie Ingenieur Technik*, 87(12), 1667–1685.
- Hernjak, N., y Doyle, F. J. (2003). Correlation of process nonlinearity with closed-loop disturbance rejection. *Industrial & engineering chemistry research*, 42(20), 4611–4619.
- Hill, R. W., Wyse, G. A., Anderson, M., y Anderson, M. (2004). *Animal physiology* (Vol. 2). Sinauer associates Massachusetts.
- Hillesland, K. L., y Stahl, D. A. (2010). Rapid evolution of stability and productivity at the origin of a microbial mutualism. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(5), 2124–2129.
- Huang, Q., Jiang, F., Wang, L., y Yang, C. (2017). Design of photobioreactors for mass cultivation of photosynthetic organisms. *Engineering*, 3(3), 318–329.
- Jiménez, B. E. (2001). *La contaminación ambiental en méxico*. Editorial Limusa.
- Jurtz, V. I., Johansen, A. R., Nielsen, M., Almagro Armenteros, J. J., Nielsen, H., Sønderby, C. K., ... Sønderby, S. K. (2017). An introduction to deep learning on biological sequence data: examples and solutions. *Bioinformatics*, 33(22), 3685–3690.
- Karim, M., y Rivera, S. (1992a). Artificial neural networks in bioprocess state estimation. *Modern biochemical engineering*, 1–33.
- Karim, M., y Rivera, S. (1992b). Comparison of feed-forward and recurrent neural networks for bioprocess state estimation. *Computers & chemical engineering*, 16, S369–S377.
- Kato, S., y Watanabe, K. (2010). Ecological and evolutionary interactions in syntrophic methanogenic consortia. *Microbes and environments*, 25(3), 145–151.
- Khalil, H. K. (2002). *Nonlinear systems* third edition.
- Kiviharju, K., Salonen, K., Moilanen, U., y Eerikäinen, T. (2008). Biomass measurement online: the performance of in situ measurements and software sensors. *Journal of industrial microbiology and biotechnology*, 35(7), 657–665.
- Komives, C., y Parker, R. S. (2003). Bioreactor state estimation and control. *Current Opinion in Biotechnology*, 14(5), 468–474.

- Kuo, B. C. (1996). *Sistemas de control automático*. Pearson Educación.
- Lara-Cisneros, G., Femat, R., y Dochain, D. (2014). An extremum seeking approach via variable-structure control for fed-batch bioreactors with uncertain growth rate. *Journal of Process Control*, 24(5), 663–671.
- Lelieveld, J., Klingmüller, K., Pozzer, A., Burnett, R., Haines, A., y Ramanathan, V. (2019). Effects of fossil fuel and total anthropogenic emission removal on public health and climate. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(15), 7192–7197.
- Lien, C.-Y., y Wang, T.-W. (1990). Application of feedback linearization to bioreactor control. En *1990 american control conference* (pp. 2161–2166).
- Lipton, Z. C., Berkowitz, J., y Elkan, C. (2015). A critical review of recurrent neural networks for sequence learning. *arXiv preprint arXiv:1506.00019*.
- López, R. A., Pérez, P. A. L., y Femat, R. (2020). *Control in bioprocessing: Modeling, estimation and the use of soft sensors*. John Wiley & Sons.
- Lourenço, N., Lopes, J., Almeida, C., Sarraguça, M., y Pinheiro, H. (2012). Bioreactor monitoring with spectroscopy and chemometrics: a review. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 404(4), 1211–1237.
- Madhav, S., Ahamad, A., Singh, A. K., Kushawaha, J., Chauhan, J. S., Sharma, S., y Singh, P. (2020). Water pollutants: sources and impact on the environment and human health. *Sensors in Water Pollutants Monitoring: Role of Material*, 43–62.
- Mailleret, L., Bernard, O., y Steyer, J.-P. (2004). Nonlinear adaptive control for bioreactors with unknown kinetics. *Automatica*, 40(8), 1379–1385.
- Meegoda, J. N., Li, B., Patel, K., y Wang, L. B. (2018). A review of the processes, parameters, and optimization of anaerobic digestion. *International journal of environmental research and public health*, 15(10), 2224.
- Meng, L., Zhang, X., Qiao, L., y Han, X. (2016). Active disturbance rejection control for activated sludge wastewater treatment processes. En *2016 5th international conference on sustainable energy and environment engineering (icsee 2016)* (pp. 650–655).
- Monroy, H. O., Famá, B. G., Meraz, R. M., Montoya, L. L., y Macarie, O. (1998). Digestión anaerobia en México: Estado de la tecnología. *Ingeniería y ciencias ambientales*, 10(39), 12–23.
- Moo-Young, M., y Chisti, Y. (1994). Biochemical engineering in biotechnology (technical report). *Pure and applied chemistry*, 66(1), 117–136.
- Morrone, J. J. (2013). Sistemática. *Fundamentos, métodos, aplicaciones*. Facultad de Ciencias, UNAM, Ciudad de México.
- Mosley, L. M. (2015). Drought impacts on the water quality of freshwater systems; review and integration. *Earth-Science Reviews*, 140, 203–214.

- Murray, J. D. (2002). *Mathematical biology: I. an introduction*. Springer.
- Nise, N. S., y Romo, J. H. (2002). *Sistemas de control para ingeniería*. Patria Cultural.
- Nouioui, I., Carro, L., García-López, M., Meier-Kolthoff, J. P., Woyke, T., Kyrpides, N. C., ... Göker, M. (2018). Genome-based taxonomic classification of the phylum actinobacteria. *Frontiers in microbiology*, 9, 2007.
- Ogata, K. (2003). *Ingeniería de control moderna*. Pearson Educación.
- Otto, S. P., y Day, T. (2011). A biologist's guide to mathematical modeling in ecology and evolution. En *A biologist's guide to mathematical modeling in ecology and evolution*. Princeton University Press.
- O'Brien, S., Hodgson, D. J., y Buckling, A. (2013). The interplay between microevolution and community structure in microbial populations. *Current opinion in biotechnology*, 24(4), 821–825.
- Pimentel, D., Marklein, A., Toth, M. A., Karpoff, M., Paul, G. S., McCormack, R., ... Krueger, T. (2008). Biofuel impacts on world food supply: use of fossil fuel, land and water resources. *Energies*, 1(2), 41–78.
- Poznyak, A., Polyakov, A., y Azhmyakov, V. (2014). *Attractive ellipsoids in robust control*. Springer.
- PRÖLL, T., y Karim, N. M. (1994). Nonlinear control of a bioreactor model using exact and i/o linearization. *International Journal of Control*, 60(4), 499–519.
- Prosser, J. I., y Martiny, J. B. (2020). *Conceptual challenges in microbial community ecology* (Vol. 375) (n.º 1798). The Royal Society.
- Rainey, P. B., y Quistad, S. D. (2020). Toward a dynamical understanding of microbial communities. *Philosophical Transactions of the Royal Society B*, 375(1798), 20190248.
- Ramírez-Carmona, U., Moreno, J. A., y Vargas, A. (2018). Fast extremum seeking for bioreactors using a variable structure control approach. En *2018 15th international workshop on variable structure systems (vss)* (pp. 337–342).
- Reza López, V. A. (2021). *Observadores robustos para un proceso continuo de biorremediación de metales pesados* (Tesis de Maestría). Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN.
- Ryckebosch, E., Drouillon, M., y Vervaeren, H. (2011). Techniques for transformation of biogas to biomethane. *Biomass and bioenergy*, 35(5), 1633–1645.
- Satishkumar, B., y Chidambaram, M. (1999). Control of unstable bioreactor using fuzzy tuned pi controller. *Bioprocess Engineering*, 20(2), 127–132.
- Schubert, J., Simutis, R., Dors, M., Havlik, I., y Lübbert, A. (1994). Bioprocess optimization and control: Application of hybrid modelling. *Journal of biotechnology*, 35(1), 51–68.

- Schügerl, K., y Bellgardt, K.-H. (2012). *Bioreaction engineering: modeling and control*. Springer Science & Business Media.
- Shimizu, K. (1993). An overview on the control system design of bioreactors. *Measurement and Control*, 65–84.
- Siami-Namini, S., Tavakoli, N., y Namin, A. S. (2019). The performance of lstm and bilstm in forecasting time series. En *2019 ieee international conference on big data (big data)* (pp. 3285–3292).
- Sierocinski, P., Milferstedt, K., Bayer, F., Großkopf, T., Alston, M., Bastkowski, S., . . . others (2017). A single community dominates structure and function of a mixture of multiple methanogenic communities. *Current Biology*, 27(21), 3390–3395.
- Simutis, R., y Lübbert, A. (2015). Bioreactor control improves bioprocess performance. *Biotechnology journal*, 10(8), 1115–1130.
- Singh, J., Yadav, P., Pal, A. K., y Mishra, V. (2020). Water pollutants: Origin and status. *Sensors in water pollutants monitoring: Role of material*, 5–20.
- Sira-Ramírez, H., Luviano-Juárez, A., Ramírez-Neria, M., y Zurita-Bustamante, E. W. (2018). *Active disturbance rejection control of dynamic systems: a flatness based approach*. Butterworth-Heinemann.
- Smagulova, K., y James, A. P. (2019). A survey on lstm memristive neural network architectures and applications. *The European Physical Journal Special Topics*, 228(10), 2313–2324.
- Solé, A. C. (2005). *Instrumentación industrial*. Marcombo.
- Szidarovszky, F., y Bahill, A. T. (2018). *Linear systems theory*. Routledge.
- Tham, H., Ramachandran, K., y Hussain, M. A. (2003). Sliding mode control for a continuous bioreactor. *Chemical and biochemical engineering quarterly*, 17(4), 267–275.
- Vasco-Correa, J., Khanal, S., Manandhar, A., y Shah, A. (2018). Anaerobic digestion for bioenergy production: Global status, environmental and techno-economic implications, and government policies. *Bioresource technology*, 247, 1015–1026.
- Waite, D. W., Chuvochina, M., Pelikan, C., Parks, D. H., Yilmaz, P., Wagner, M., . . . others (2020). Proposal to reclassify the proteobacterial classes deltaproteobacteria and oligoflexia, and the phylum thermodesulfobacteria into four phyla reflecting major functional capabilities. *International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology*, 70(11), 5972–6016.
- Wang, H., Hu, M., Tian, Y., Simeonov, I., Kabaivanova, L., y Christov, N. (2020). Kalman filter based newton extremum seeking control for maximum gases production rates of anaerobic digestion process. *Information Technology and Control*, 49(4), 455–463.

- Wang, H.-H., Krstić, M., y Bastin, G. (1999). Optimizing bioreactors by extremum seeking. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*, 13(8), 651–669.
- Wang, X., Lyu, T., Dong, R., y Wu, S. (2022). Revealing the link between evolution of electron transfer capacity of humic acid and key enzyme activities during anaerobic digestion. *Journal of Environmental Management*, 301, 113914.
- Wei, W., Chen, N., Zuo, M., y Liu, Z.-W. (2020). Disturbance rejection control for the dissolved oxygen in a wastewater treatment process. *Measurement and Control*, 53(5-6), 899–907.
- William, L. B. (1991). *Modern control theory*. Prentice Hall Englewood Cliffs.
- Yang, Y., y Sha, M. (2019). A beginner’s guide to bioprocess modes—batch, fed-batch, and continuous fermentation. *Enfield, CT: Eppendorf Inc.*
- Yu, Y., Si, X., Hu, C., y Zhang, J. (2019). A review of recurrent neural networks: Lstm cells and network architectures. *Neural computation*, 31(7), 1235–1270.
- Zhang, L., Loh, K.-C., y Zhang, J. (2019). Enhanced biogas production from anaerobic digestion of solid organic wastes: Current status and prospects. *Bioresource Technology Reports*, 5, 280–296.
- Zhao, Y., y Skogestad, S. (1997). Comparison of various control configurations for continuous bioreactors. *Industrial & engineering chemistry research*, 36(3), 697–705.

Apéndice A

Demostración del Teorema 2.3

Para demostrar que (2.11) garantiza que las trayectorias solución de (2.3) son UUB, se usará el método directo de Lyapunov (Khalil, 2002), que consiste en proponer una función candidata de Lyapunov que satisfaga ciertas condiciones para garantizar la estabilidad de un sistema dinámico. Para ello, a continuación se introducirá una definición importante para sistemas no lineales dependientes del tiempo.

Definición A.1. Una función continua $\omega : [0, a] \rightarrow [0, \infty)$ es de clase \mathcal{K} si es estrictamente creciente ($\omega(r) > 0$) y $\omega(0) = 0$. Se dice que es una función de clase \mathcal{K}_∞ si $a = \infty$ y $\omega(r) \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow \infty$.

El siguiente resultado enuncia formalmente condiciones suficientes de estabilidad UUB para un sistema no lineal dependiente del tiempo.

Teorema A.1. *Considere el sistema no lineal $\dot{x} = f(x, t)$. Asuma que existe una función continuamente diferenciable $V : \mathbb{R} \times \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$, funciones de clase \mathcal{K} $\omega_1(\cdot), \omega_2(\cdot)$, además de una función continua $\omega_3 : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\omega_3(x) > 0, \|x\| > 0$ tal que*

$$\omega_1(\|x\|) \leq V(t, x) \leq \omega_2(\|x\|), \quad x \in \mathcal{D}, \quad t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.1})$$

$$\dot{V}(t, x) \leq -\omega_3(x), \quad x \in \mathcal{D}, \quad \|x\| > \mu, \quad t \in \mathbb{R} \quad (\text{A.2})$$

donde $\mu > 0$ es tal que $\mathcal{B}_{\omega_1^{-1}(\eta)} \subset \mathcal{D}$ para algún $\eta > \omega_2(\mu)$. Entonces las trayectorias solución de $\dot{x} = f(x, t)$ son UUB con cota última $b = \omega_1^{-1}(\eta)$. Más aún, $\limsup_{t \rightarrow \infty} \|x(t)\| \leq \omega^{-1}(\omega_2(\mu))$. Si, adicionalmente, $\mathcal{D} = \mathbb{R}^n$ y $\omega_1(\cdot)$ es una función de clase \mathcal{K}_∞ , entonces las trayectorias solución de $\dot{x} = f(x, t)$ son globalmente UUB con cota última b .

Demostración. Ver Corolario 4.2 de Haddad y Chellaboina (2011). \square

A partir del teorema descrito, a continuación se demuestra que el error de seguimiento del bioproceso en lazo cerrado con el controlador ADRC es UUB.

Demostración del Teorema 2.3

Sustituyendo el algoritmo de control (2.11)-(2.12) en el sistema (2.2), se tiene:

$$\dot{\xi}_i = K_p(\xi_{ri} - \xi_i) + \dot{\xi}_{ri} + (\phi_i - \hat{\phi}_i) \quad (\text{A.3})$$

Derivando el error de seguimiento $e_r = \xi_{ri} - \xi$ con respecto a t :

$$\dot{e}_r = -K_p e_r - (\phi_i - \hat{\phi}_i) \quad (\text{A.4})$$

Luego, sea la función candidata de Lyapunov $V = \frac{1}{2}e_r^2$. Note que V es una función de clase K . Así, para las funciones de clase \mathcal{K} $\omega_1 = \omega_2 = V$ se satisface la desigualdad (A.1). Más aún, $\omega_1(e_r) \rightarrow \infty$ cuando $r \rightarrow \infty$ y dado que $e_r \in \mathbb{R}_{>0}$, entonces ω_1 es una función de clase \mathcal{K}_∞ . Ahora, derivando V con respecto a t , se tiene:

$$\dot{V} = -K_p e_r^2 - (\phi_i - \hat{\phi}_i) \quad (\text{A.5})$$

Por la Suposición 4, se concluye que

$$\dot{V} \leq -K_p e_r \left(e_r - \frac{\sigma}{K_p} \right) \quad (\text{A.6})$$

Así, $\dot{V} < 0$ si $e_r > \frac{\sigma}{K_p}$, por lo que se satisface (A.2). Aplicando el Teorema A.1, se concluye el resultado, donde la cota última es $b = \omega_1^{-1} \left(\omega_2 \left(\frac{\sigma}{K_p} \right) \right) = \frac{\sigma}{K_p}$.

Apéndice B

Parámetros, entradas y condiciones iniciales para las simulaciones

Parámetro	Valor	
	Entrenamiento	Simulación
k_1	31.605-52.675	42.15
k_2 (mmol/g)	87.375-145.625	116.5
k_3 (mmol/g)	201-335	268
k_4 (mmol/g)	37.95-63.25	50.6
k_5 (mmol/g)	257.7-429.5	343.6
k_6 (mmol/g)	339.75-566.25	453
K_H (mmol/(L · atm))	0.034	0.034
P_T (atm)	1	1
$\mu_{1\max}$ (d ⁻¹)	0.9-1.5	1.2
$\mu_{2\max}$ (d ⁻¹)	0.555-0.925	0.74
K_{s1} (mmol/L)	5.325-8.8750	7.1
K_{s2} (mmol/L)	6.96-11.6	9.28
K_i (mmol/L)	192-320	256
k_{La} (d ⁻¹)	14.85-24.75	19.8
α	1	1

Tabla B.1: Valores usados en los parámetros para el entrenamiento de la RNN y la simulación del proceso continuo de digestión anaerobia.

Entrada	Valor	
	Entrenamiento	Simulación
Z^{in} (mmol/L)	72-128	80
S_1^{in} (g/L)	8.1-14.4	9
S_2^{in} (mmol/L)	72-128	80
C^{in} (mmol/L)	180-320	200
D (hr ⁻¹)	0.45-0.8	-

Tabla B.2: Valores usados en las entradas para el entrenamiento de la RNN y la simulación del proceso continuo de digestión anaerobia.

Condición inicial	Valor	
	Entrenamiento	Simulación
X_1 (g/L)	0.375-0.625	0.5
X_2 (g/L)	0.09-0.15	0.12
Z (mmol/L)	61.75-68.25	65
S_1 (g/L)	2.25-3.75	3
S_2 (mmol/L)	11.25-18.75	15
C (mmol/L)	57-63	60
$\hat{\xi}_i$ (mmol/L)	-	20
$\hat{\phi}_i$ (mmol/(L · d))	-	0

Tabla B.3: Valores usados en las condiciones iniciales para el entrenamiento de la RNN y la simulación del proceso continuo de digestión anaerobia.