



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO**  
**INSTITUTO DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA**  
**MAESTRÍA EN AUTOMATIZACIÓN Y CONTROL**

**TESIS**

**ANÁLISIS Y REGULACIÓN DE UN BIORREACTOR PARA LA  
PRODUCCIÓN DE BIOETANOL VÍA UN ENFOQUE DE  
CONTROL ÓPTIMO.**

Para obtener el grado de  
Maestra en Ciencias en Automatización y Control

PRESENTA

Ing. Iraiz González Viveros

Director:

Dr. Pablo Antonio López Pérez

Codirector:

Dr. Omar Jacobo Santos Sánchez

Pachuca de Soto, Hgo., México 4 de junio de 2024





# Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

School of Engineering and Basic Sciences

Área Académica de Computación y Electrónica

Department of Electronics and Computer Science

Mineral de la Reforma Hidalgo, a 28 de mayo de 2024

Número de control: ICBI-AACyE/576/2024

Asunto: Autorización de impresión de tema de tesis

## MTRA. OJUKY DEL ROCÍO ISLAS MALDONADO DIRECTORA DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR DE LA UAEH

El Comité Tutorial del nombre del producto que indique el documento curricular del programa educativo de posgrado titulado **“ANÁLISIS Y REGULACIÓN DE UN BIORREACTOR PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL VÍA UN ENFOQUE DE CONTROL ÓPTIMO”**, realizado por la sustentante **Iraiz González Viveros** con número de cuenta 263785, perteneciente al programa de la Maestría en Ciencias en Automatización y Control, una vez que se ha revisado, analizado y evaluado el documento recepcional de acuerdo a lo estipulado en el artículo 110 del Reglamento de Estudios de Posgrado, tiene a bien extender la presente.

### AUTORIZACIÓN DE IMPRESIÓN

Por lo que el sustentante deberá cumplir con los requisitos del Reglamento de Estudios de Posgrado y con lo establecido en el proceso de grado vigente.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

**Dr. Pablo Antonio López Pérez**  
Director de Tesis

**Dr. Omar Jacobo Santos Sánchez**  
Codirector de Tesis

### Comité Tutorial

Dr. Hugo Romero Trejo	Presidente	UAEH	
Dr. Jesús Patricio Ordaz Oliver	Secretario	UAEH	
Dr. Pablo Antonio López Pérez	Vocal 1	UAEH	
Dr. Vicente Peña Caballero	Vocal 2	UG	
Dr. Omar Jacobo Santos Sánchez	Vocal 3	UAEH	
Dr. Omar Sandre Hernández	Suplente	UAEH	

Ciudad del Conocimiento, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184  
Teléfono: 52 (771) 71 720 00 Ext. 40052, 40053  
aacye\_icbi@uaeh.edu.mx, jesus\_ordaz@uaeh.edu.mx







Ing. Iraiz González Viveros

Análisis y regulación de un  
biorreactor para la  
producción de bioetanol vía  
un enfoque de control óptimo.



Gracias a

**CONACYT** por la beca de Maestría  
otorgada durante el periodo  
Agosto 2021 - Julio 2023, con CVU  
**1138479**

**CITIS-UAEH**, por la formación  
académica brindada durante el  
posgrado y el apoyo para la  
realización del presente trabajo.





# Agradecimientos

Dedico este trabajo a mis padres Atala y Cruz, por su amor incondicional, apoyo y sacrificio que hicieron para estar en mis buenos y malos momentos. A mis hermanas, Lulú, Yadira y Belén que estuvieron escuchando y apapachando cuando lo necesité. También dedico esta tesis a mi hija Hiromi, que ha sido el principal motor de mi vida, la niña que me impulsa en no darme por vencida cuando mis emociones ya no pueden más, la que me da un abrazo a pesar de mis errores como madre.

A mi familia, que con apoyo directo o indirecto estuvieron y están para cuando yo los necesito. A mi segunda madre, que ya no esta en este mundo también este trabajo es para ti, gracias Inocencia por darme la comprensión, resiliencia y catarsis que he logrado desde tu partida.

A mi abuelo, que ya no está conmigo, sé que estarías orgulloso de lo poco o mucho que he logrado.

A mi mentor el Dr. Pablo López, que estuvo guiando mis pasos en cada una de las situaciones que enfrentaba a diario, hoy puedo asegurar que usted es un leal servidor de sus estudiantes y se ganó mi más profundo respeto y admiración y sobretodo usted se volvió mi gran amigo.

A mi mentor y amigo el Dr. Omar Santos, que fue mi frente de batalla sin pedirlo, usted se volvió mi ángel de la guarda no tengo palabras para expresar mi total agradecimiento, gracias infinitas por tal humanidad y bondad que posee.

A mi mentor el Dr. Hugo Romero, que con sus sabios consejos y protección me dió paz y tranquilidad para continuar con mi estancia en la maestría.

A mis profesores y sinodales los doctores Patricio Ordaz, Dr. Omar Sandré y al Dr. Vicente Caballero, por su guía y conocimiento compartido.

A mis amigos y colegas, Nicolás, César, Gustavo, Manuel, Daniel, Rodrigo, Luis, Brian que estuvieron de una u otra forma y que fueron parte de mi camino. Este logro también es de ustedes.



# Notación

- $k_1$ : Parámetro de velocidad de reacción del sustrato y la biomasa.
- $k_2$ : Parámetro de velocidad de reacción de crecimiento de biomasa.
- $k_3$ : Parámetro del etanol.
- $k_4$ : Parámetro de velocidad de producción del etanol.
- $k_5$ : Parámetro de inhibición de biomasa sobre etanol.
- $k_6$ : Parámetro de la velocidad de producción del  $CO_2$ .
- $k_7$ : Parámetro de inhibición del  $CO_2$ .
- $S$ : Sustrato.
- $X$ : Biomasa.
- $E_t$ : Etanol.
- $CO_2$ : Dióxido de carbono.
- $S_0$ : Sustrato inicial.
- $J$ : Índice de desempeño.
- $L(\alpha)$ : Total del impacto ambiental causado por la alternativa ( $\alpha$ )
- $\delta_i$ : Referencia de normalización para la categoría de impacto  $i$ .
- $T_i$ : Punto de referencia para la categoría de impacto  $i$ .
- $L_i(\alpha)$ : Indicador de impacto resultante para la categoría  $i$  causada por la alternativa  $\alpha$ .
- $L_i^{TH}$ : Indicador del umbral de referencia de la categoría de impacto  $i$ .
- $\omega$ : Parámetro asociado a las liberaciones directas, ie.
- $\Gamma, \theta$ : Son factores de normalización y ponderación para los daños de las categorías  $d$ .

- $\psi$ : Parámetro asociado a las liberaciones directas, la producción de materias primas y la generación de energía.
- $PP_y$ : Costo de recuperación de  $y$  años.
- $\omega$ : Desviación estandar  $\pm 10 - 15 \%$ .
- $\zeta$ : Costos de inversión.
- $\beta$ : Costos de operación.
- $\gamma$ : Gasto energético.
- $\alpha_{1..8}$ : Parámetros de costos.
- $E_{tf}$ : Concentración de etanol.
- $F_{E_{tf}}$ : Flujo de entrada.

# Resumen

El desarrollo de este trabajo está basado en aplicación de estrategias de alimentación a la entrada de los reactores en operación lote, lote alimentado y continuo. Esto con el fin de encontrar las mayores concentraciones de etanol producidas en el fermentador.

Además, de desarrollaron estrategias en lazo abierto aplicando barridos de condiciones iniciales para el reactor en lote, simulaciones de diferentes tasas de dilución para el reactor en continuo y finalmente para el lote alimentado se desarrollaron nuevas estrategias de alimentación basadas en literatura, para encontrar las mejores condiciones de operación y desempeño en lazo abierto. Se implementaron algoritmos matemáticos de control óptimo para los reactores en operación lote alimentado y continuo, ya que, estos pueden mejorar la productividad de la concentración de etanol debido al diseño o de nuevas estrategias de alimentación basada en control óptimo.

Las estrategias encontradas en lazo abierto y lazo cerrado se consideran para hacer comparaciones entre ellas y determinar que estrategia permite encontrar una entrada de menor consumo de materia prima para producir la misma cantidad o superior de etanol en un menor tiempo. Estas estrategias son generadas por algoritmos basados en la teoría de control óptimo.

Los perfiles de flujo se compararon con indicadores económicos y KPIs para una mejor toma de decisión en cuanto a gastos energéticos, costos de producción del etanol y su inversión en la implementación para los bioreactores lote alimentado y continuo.



# Abstract

The development of this work is based on the application of feeding strategies at the inlet of the reactors in batch, fed batch and continuous operation. This in order to find the highest ethanol concentrations produced in the fermenter.

Open-loop strategies are developed by applying sweeps of initial conditions for the batch reactor, simulations of different dilution rates for the continuous reactor and finally for the fed batch, mathematical functions were developed based on literature, once the optimal ones in open loop were found. Mathematical optimal control algorithms were implemented for the fed-batch and continuous batch reactors, since, these can improve the productivity of ethanol concentration due to the ethanol feed inputs.

The strategies found in open loop and closed loop are considered to make comparisons between them and determine which strategy allows finding a lower feedstock consumption input to produce the same or higher amount of ethanol in a shorter time.

The flow profiles are compared with economic indicators and KPIs for better decision making in terms of energy expenditures, ethanol production costs and their investment in the implementation of the feed strategies developed throughout the work.





# Acrónimos

- **CAT**: Costo Anual Total
- **NC**: Número de condición
- **IP**: Intensificación de procesos
- **J**: Índice de desempeño
- **CP**: Costos de Producción
- **CC**: Costos de Capital
- **COCO**: Cape-Open to Cape-Open
- **MATLAB**: Matrix laboratory
- **CSTR**: Reactor Continuo Tanque Agitado
- **KPIs**: Indicadores Claves de Rendimiento



# Índice general

Agradecimientos . . . . .	V
Notacion . . . . .	VII
Resumen . . . . .	IX
Abstract . . . . .	XI
Resumen . . . . .	IX
Acronimos . . . . .	XIII
Índice general . . . . .	XV
Índice de figuras . . . . .	XIX
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Antecedentes . . . . .	2
1.2. Planteamiento del problema . . . . .	4
1.3. Justificación . . . . .	4
1.4. Objetivos . . . . .	5
1.4.1. Objetivo general . . . . .	5
1.4.2. Objetivos específicos . . . . .	5
1.5. Hipótesis . . . . .	5
<b>2. Teoría de control óptimo</b>	<b>7</b>
2.1. Control óptimo . . . . .	7
2.2. Sistemas Lineales . . . . .	7
2.2.1. Regulador Lineal Cuadrático Óptimo (LQR de sus siglas en inglés)	7
2.2.2. El problema del control óptimo de horizonte infinito. . . . .	8
2.3. Control óptimo de sistemas no lineales discreto . . . . .	12
2.3.1. Control subóptimo no lineal discreto . . . . .	12
<b>3. Caso de estudio: Producción de bioetanol</b>	<b>17</b>
3.1. Biorefinería . . . . .	17
3.2. Descripción de la planta de bioetanol . . . . .	18
3.3. Fermentador . . . . .	19

3.4.	Balance estequiométrico del bioetanol . . . . .	20
3.5.	Balance de materia . . . . .	20
3.6.	Operación de un biorreactor . . . . .	22
3.6.1.	Operación por lote . . . . .	22
3.6.2.	Operación en lote alimentado . . . . .	23
3.6.3.	Operación en continuo . . . . .	25
3.7.	Validación de los modelos experimentales . . . . .	26
<b>4.</b>	<b>Diseño de controladores óptimos</b>	<b>29</b>
4.0.1.	Regulador Cuadrático Lineal para el bioreactor operación en continuo	29
4.0.2.	Control No lineal de Horizonte Finito para el bioreactor operación en continuo . . . . .	32
4.0.3.	Modelo en tiempo discreto para el bioreactor operación en continuo	33
4.0.4.	Epítome del control subóptimo para el modelo en continuo . . . . .	34
4.0.5.	Regulador Cuadrático Lineal para el bioreactor operación en lote alimentado . . . . .	38
4.0.6.	Control No lineal de Horizonte Finito para el biorreactor operación en lote alimentado . . . . .	44
4.0.7.	Modelo en tiempo discreto para el bioreactor operación en lote alimentado . . . . .	44
4.0.8.	Epítome del control subóptimo para un biorreactor operación en lote alimentado . . . . .	45
<b>5.</b>	<b>Resultados de simulación</b>	<b>51</b>
5.1.	Intensificación de procesos (Lazo abierto) . . . . .	51
5.1.1.	Operación por lote . . . . .	51
5.1.2.	Operación en lote alimentado . . . . .	53
5.1.3.	Operación en continuo . . . . .	56
5.2.	Estrategias de control óptimo . . . . .	58
5.2.1.	LQR para el bioreactor en continuo . . . . .	58
5.2.2.	Control subóptimo para el bioreactor en continuo . . . . .	59
5.2.3.	LQR para el bioreactor en lote alimentado . . . . .	65
5.2.4.	Control subóptimo para el bioreactor en lote alimentado . . . . .	67
5.2.5.	Concentración de resultados . . . . .	73
<b>6.</b>	<b>Indicador económico</b>	<b>76</b>
6.0.1.	Restricciones con respecto al tiempo . . . . .	76
6.1.	Indicador de rendimiento (KPIs) . . . . .	77
6.1.1.	KPIs para el bioreactor en continuo . . . . .	78

---

6.1.2. KPIs para el bioreactor en lote alimentado . . . . .	80
6.2. Análisis de factibilidad económica . . . . .	81
6.2.1. Análisis de las ecuaciones de cálculos de costos . . . . .	81
<b>7. Conclusiones</b>	<b>86</b>
<b>8. Trabajo futuro</b>	<b>87</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>89</b>



# Índice de figuras

3.1. Clasificación del sustrato . . . . .	18
3.2. Diagrama de la planta del proceso para la producción del bioetanol . . . . .	19
3.3. Operación unitaria fermentación . . . . .	19
3.4. Esquema de un bioreactor . . . . .	21
5.1. Reactor operación por lote . . . . .	52
5.2. Barrido operación lote . . . . .	52
5.3. Reactor operación Lote alimentado . . . . .	53
5.4. Reactor operación Lote alimentado perfil de flujo 1 . . . . .	54
5.5. Reactor operación Lote alimentado perfil de flujo 2 . . . . .	55
5.6. Reactor operación Lote alimentado perfil de flujo 3 . . . . .	55
5.7. Reactor operación continuo . . . . .	56
5.8. Barrido operación continua . . . . .	57
5.9. Implementación del LQR biorreactor continuo . . . . .	58
5.10. Implementación del Subóptimo, biorreactor continuo $T = 24 h$ . . . . .	61
5.11. Implementación del Subóptimo, biorreactor continuo $T = 25 h$ . . . . .	61
5.12. Comparación de las estrategias de alimentación para el biorreactor continuo $T = 25 h$ . . . . .	62
5.13. Comparación de las estrategias de alimentación para el sustrato . . . . .	62
5.14. Comparación de las estrategias de alimentación para la biomasa . . . . .	62
5.15. Comparación de las estrategias de alimentación para el etanol . . . . .	63
5.16. Comparación de las estrategias de alimentación para el $CO_2$ . . . . .	63
5.17. Señal de error para el sustrato . . . . .	63
5.18. Señal de error para la biomasa . . . . .	64
5.19. Señal de error para el etanol . . . . .	64
5.20. Señal de error para el $CO_2$ . . . . .	64
5.21. Implementación del LQR biorreactor lote alimentado . . . . .	66
5.22. Comparación de estrategias de perfil en un tiempo de $29 h$ lote alimentado . . . . .	69
5.23. Comparación de estrategias de perfil en un tiempo de $30 h$ lote alimentado . . . . .	69

5.24. Comparación de las estrategias de alimentación para el bioreactor lote alimentado a 30 h. . . . .	70
5.25. Consumo del sustrato en 30 h. . . . .	70
5.26. Concentración alcanzada de la biomasa en 30 h. . . . .	71
5.27. Concentración alcanzada del etanol en 30 h. . . . .	71
5.28. Concentración alcanzada del CO <sub>2</sub> en 30 h. . . . .	71
5.29. Capacidad máxima de operación en 30 h. . . . .	72
5.30. Señal de error para el sustrato . . . . .	72
5.31. Señal de error para la biomasa . . . . .	72
5.32. Señal de error para el etanol . . . . .	73
5.33. Señal de error para el CO <sub>2</sub> . . . . .	73
6.1. Productividad del bioreactor en continuo operando a 25 h. . . . .	79
6.2. Comparación de la capacidad utilizada entre el lazo abierto y el controlador en un tiempo de 30 h. . . . .	79
6.3. Productividad para el bioreactor en lote alimentado con un tiempo de simulación 30 h. . . . .	80
6.4. Rendimiento máximo de conversión de glucosa 30 h. . . . .	81
6.5. Costos del bioreactor 25 h. . . . .	83
6.6. Comparación entre concentraciones y costos del bioreactor en lote alimentado a 30 h. . . . .	84



# Capítulo 1

## Introducción

La contaminación es cada vez más una constante preocupación para la sociedad debido a las altas emisiones de  $CO_2$  a la atmósfera. En la actualidad, se están desarrollando estrategias que reduzcan los gases de efecto invernadero con el fin de reducir la dependencia a los combustibles fósiles. Algunas estrategias son el uso de energías renovables y otras son la generación de biocombustibles. Sin embargo, esta última estrategia eleva su costo por hacer uso de materias primas de primera generación provocando mayor demanda de productos de primera necesidad, elevando el costo de estos mismos, crisis alimentaria por el desabasto de productos, mayor consumo de los recursos de la tierra incluyendo el agua, etc. [1]

Es por ello que este trabajo se enfoca en la aplicación de recursos de segunda generación como el mucílago del cacao, el cual se considera un recurso de menor precio en el mercado, disminuyendo la alta demanda de productos de primera generación y menor consumo de recursos de la tierra. Sin embargo, estos esfuerzos no son suficientes, ya que, los costos de producción siguen siendo mayores a los costos de producción de combustibles fósiles y/o combustibles de primera generación. Por consiguiente se buscan cada vez más estrategias que provoquen menores costos en la producción del mismo y dichas estrategias se basan en aplicar algoritmos de optimización que se llevan a efecto en dos operaciones diferentes de biorreactores [2].

## 1.1. Antecedentes

La contaminación actualmente es uno de los mayores problemas del mundo, por lo que, se buscan estrategias para disminuir dicha situación ante la demanda energética, de igual manera, se están creando estrategias basadas en energías renovables (biodiésel, bioetanol, biogás entre otras) estas energías prometen ayudar al aspecto ambiental [1].

Los especialistas hoy en día, para generar biocombustibles y co-productos trabajan con residuos agroindustriales y microorganismos ayudando de forma estratégica a reducir la contaminación y como consecuencia propicia una industria sostenible. Los residuos agroindustriales no afectan los recursos destinados al consumo alimentario, al contrario ya que en un inicio se disminuye el desperdicio de dichos residuos al darle un segundo aprovechamiento, y por otro lado, también no afecta ya que no es un recurso de primera generación. Por consiguiente disminuye favorablemente el impacto ambiental y las pérdidas financieras debido a su disposición final [3].

La biotecnología ofrece diversas opciones para la generación de energías renovables. Una de ellas es la producción de bioetanol, el cual se obtiene mediante la fermentación (anaerobia y aerobia). El bioetanol se usa como biocombustible para vehículos automotores. El bioprocesamiento que se pretende utilizar es mediante una fermentación usando la cepa *Saccharomyces cerevisiae* que es una levadura utilizada con más frecuencia a nivel industrial mientras que la cepa *Zymomonas mobilis* es la menos explotada a nivel industrial y esto debido a su comportamiento dinámico oscilatorio, dicha planta opera en condiciones no estériles, lo que obtiene una ventaja en el ahorro de energía [4].

La producción de biocombustibles de primera generación tiene desventajas en México, debido a que las materias primas que son utilizadas son de cultivos alimentarios como el maíz, caña de azúcar, etc. y esto genera un aumento en los precios debido a la escasez. Es por eso que, los combustibles de segunda generación son una solución, logrando sostenibilidad y menor impacto ambiental [5].

Sin embargo, en [6] el bioetanol no es el único biocombustible y por ello, uno de sus competidores es el biobutanol, que además, es uno de los más investigados en la actualidad. El butanol es un gran competidor ante el combustible fósil. No obstante, también se requiere que genere un mayor impacto, por lo que se hace uso de la optimización multiobjetivo, en donde, se espera que reduzca los costos y minimice el impacto ambiental y condiciones de controlabilidad. El butanol está hecho a base de lignias y residuos agrícolas, en donde, se aplican las técnicas mencionadas anteriormente y mostraron mejores resultados económicos y valores del indicador ECO99.

Ahora bien, en [7], se realiza una optimización multiobjetivo para un intercambiador de calor, esto con el fin de, obtener el equilibrio óptimo y minimización del aspecto ambiental y económico en dicho trabajo utilizan herramientas de Análisis del Ciclo de Vida ACV y el Costo Anual Total CAT.

Por otro lado, en [8], para una producción de bioetanol por medio de papel reciclado tiene parámetros no del todo accesibles por lo que se opta por trabajar dos modelos cinéticos no lineales con el fin de comparar y mejorar el rendimiento del proceso. La optimización de Marquardt-Levenberg y algoritmos genéticos, ambos rendimientos son evaluados mediante una simulación numérica y el valor óptimo de estos parámetros se obtiene mediante el algoritmo genético. Finalmente, demuestra que al ajustar los parámetros, la tasa de dilución en la producción y cambiar la operación por lotes al modelo de operación continua se obtiene mayor producción de bioetanol.

En [9], se plantea un modelo cinético no segregado para un proceso de fermentación del mucilago del cacao. Mediante este modelo se plantea un acoplamiento múltiple para describir la cinética del sustrato, consumo, biomasa, dióxido de carbono y etanol acoplado a un modelo no estructurado para la enzima y sus parámetros son calculados por la curva de mínimos cuadrados no lineales, utilizando el algoritmo de Marquardt-Levenberg. Por lo que, con sus resultados se llega a la conclusión que su modelo es robusto y puede ser considerado para fines de control y optimización.

En la cita [10] se desarrolla un modelo, el control y la optimización de un fermentador para la producción de etanol. Dicho modelo considera sus variables más importantes y proponen una estrategia de un sistema de control de dos niveles, en donde, el nivel bajo utiliza un controlador tipo SISO para su dinámica en lazo cerrado y para sus variables locales deseadas. Mientras que para su nivel alto se implementa un controlador óptimo MIMO y esto con el fin de maximizar la producción de bioetanol.

En la producción de bioetanol no solo es importante el control, sino también, el residuo agroindustrial uno de ellos es el cacao (*Theobroma cacao L.*). La planta de cacao es de origen americano [11] y uno de los productos con mayor demanda en el mercado internacional, sus exportaciones en grano representan por arriba del 71 % del volumen producido. La explotación cacaotera se aprovecha económicamente de la semilla y representa aproximadamente el 10 % del peso del fruto fresco. Los desechos generados están constituidos en su mayoría por la cáscara, que además, se considera un foco para la propagación de *Phytophthora spp*, causa principal de pérdidas económicas de la actividad cacaotera [12]. En [13] el trabajo se centra en utilizar métodos para optimizar los parámetros del modelo

cinético del mucílago del cacao, en el que se centra en utilizar el método de Marquardt-Levenberg y los algoritmos genéticos (AG). Los AG se utilizan para escalar el proceso de fermentación y la aplicabilidad de este modelo para predecir la calidad de la fermentación. Los resultados indican la conveniencia de esta técnica para su futura aplicación en el diseño y control de fermentaciones discontinuas.

## 1.2. Planteamiento del problema

Actualmente la industria energética está buscando minimizar el costo de producción de biocombustibles. Sin embargo, ante la problemática referente al medio ambiente, también se busca mitigar los gases de efecto invernadero y que de alguna forma maximice la producción de bioetanol. Este caso de estudio utiliza los residuos del procesamiento del cacao entre ellos el mucílago, en el que se pretende implementar algoritmos de control que permitan observar el comportamiento del indicador del Costo Anual Total de Producción (CAT), maximice la producción de bioetanol, incorporando control óptimo para una intensificación de procesos.

## 1.3. Justificación

Los diversos problemas que los procesos químicos/bioquímicos provocan a nivel industrial, tales como: la contaminación hacia el medio ambiente, la alta probabilidad de accidentes, los altos costos de operación y su ineficiencia a nivel operacional motivan a que actualmente, se busquen estrategias que puedan sobrellevar dichos problemas, tales como, la intensificación de procesos (IP) acopladas a las herramientas de control óptimo.

Por ende, se necesitan desarrollar nuevos conceptos de diseño en operaciones unitarias para aplicaciones múltiples en la industria química y bioquímica, principalmente en la producción de biocombustibles. Por lo tanto, se requiere una metodología que optimice conjuntamente, las tecnologías planteadas de la IP, con un diseño altamente eficaz, el cual involucre objetivos económicos y/o ambientales pero que de manera simultánea garantice que los diseños generados cumplan con un buen desempeño dinámico. En consecuencia, para poder realizar esto, es necesario investigar (desarrollar) las mejores estrategias de control. Las cuales se pueden abordar mediante la integración del diseño del proceso y optimización, tomando decisiones de diseño a priori que correspondan a la mejor estrate-

gia de control. De manera que, el análisis de las propiedades de control del sistema sea indispensable para poder caracterizar de forma adecuada las propiedades dinámicas del mismo y garantizar su estabilidad en la operación industrial. Por lo cual es necesario, brindar la información requerida de dichos análisis, para tener un escenario más completo de su operabilidad a nivel industrial.

## 1.4. Objetivos

### 1.4.1. Objetivo general

Analizar y controlar un biorreactor aplicando la intensificación de procesos y estrategias de control óptimo acopladas a un indicador económico para la producción de etanol.

### 1.4.2. Objetivos específicos

- Analizar el comportamiento cinético bajo diversas condiciones de operación de un bioreactor mediante intensificación de procesos para incrementar la concentración de etanol basado en un modelo matemático validado experimentalmente.
- Implementar diferentes estrategias de operación, basados en control óptimo (Regulador Lineal Cuadrático y horizonte finito) acoplado al indicador económico para la maximización de concentración de bioetanol minimizando los costos, vía un posible enfoque de planta sustentable.

## 1.5. Hipótesis

En un biorreactor continuo y lote alimentado es posible maximizar la concentración de bioetanol aplicando algoritmos de control óptimo acoplado a un indicador económico.



# Capítulo 2

## Teoría de control óptimo

### 2.1. Control óptimo

El control óptimo permite determinar el control que lleve al sistema hacia un objetivo que minimice un índice de desempeño tal que, permita evaluar en las funciones objetivos alcanzar las restricciones maximizando o minimizando los criterios de desempeño [14].

### 2.2. Sistemas Lineales

Un sistema se dice ser lineal si cumple con los principios de superposición y homogeneidad. Es decir las señales del sistema de control se muestran limitadas en intervalos de las variables del sistema y presentan una característica lineal, también se considera un sistema lineal si la salida sigue a los cambios provocados por la entrada [15].

#### 2.2.1. Regulador Lineal Cuadrático Óptimo (LQR de sus siglas en inglés)

El LQR se define como un algoritmo de la teoría del control óptimo que es propicio para encontrar controladores óptimos [14],[16],[17].

El sistema de control no lineal se representa de la siguiente forma:

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t)), x(t_0) = x_0, \quad (2.1)$$

donde  $x(t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $u(t) \in \mathbb{R}^m$  y  $f(.,.) \in \mathbb{R}^n$  satisface la condición de Lipschitz y el control  $u(.) \in \mathbb{U} \subset \mathbb{R}^m$

Una vez que se propone el control  $u \in \mathbb{U}$ , el sistema (2.1) determina la trayectoria con condición inicial  $x_0$  en el instante  $t_0$ .

A continuación se memora brevemente la teoría del control óptimo para sistemas no lineales y lineales.

### 2.2.2. El problema del control óptimo de horizonte infinito.

Se desea hallar un control  $u \in \mathbb{U}$ , tal que, en lazo cerrado del sistema (2.1), se haga una trayectoria que converja al origen en un tiempo mínimo o propiamente con el mínimo de energía y su convergencia sea lo más rápido posible. Dicho lo anterior se plantea como el problema del control óptimo. Por lo que, se establece un índice de desempeño, que penalice al estado del sistema y al control, también es llamado funcional de costo [14], [16], [17].

$$J^{u(\cdot)}(t_0, x_0) = \int_{t_0}^{\infty} L(x(t), u(t)) dt \quad (2.2)$$

donde  $L$  es una función escalar definida positiva.  $L$  penaliza al estado  $x(.)$  y de la energía  $u(.)$ . En caso de solo minimizar la energía  $L(x, u) = u^T u$ .

Si el control  $u^*$  minimiza la funcional de costo  $J^{u(\cdot)}(t_0, x_0)$  queda de la siguiente forma:

$$J^{u^*}(\cdot)(t_0, x_0) \leq J^{u(\cdot)}(t_0, x_0), \forall u(\cdot) \in \mathbb{U}$$

$u^*$  se denomina control óptimo. En 1975, Richard Bellman propuso la programación dinámica para resolver problemas de optimización para ecuaciones diferenciales con restricciones. El control óptimo con restricciones se interpretan como la ecuación de estado. El método consiste en reemplazar la ecuación (2.1) y (2.2) y contiene una minimización en el espacio  $\mathbb{U}$ , por la ecuación diferencial matricial en derivadas parciales, se llama ecuación Hamilton-Jacobi-Bellman:



$$0 = \min_{u \in \mathbb{U}} \{L(x, u) + \nabla_x V(x) \cdot f(x, u)\}, \quad t \in [t_0, \infty], \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (2.3)$$

donde  $\frac{dV(x)}{dt} = \nabla_x V(x) \cdot f(x, u)$ . La ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman satisface la función de Bellman  $V(x)$ , definida de la siguiente forma:

$$V(x_0) = \min_{u \in \mathbb{U}} J^u(\cdot)(t_0, x_0) \quad (2.4)$$

La función de Bellman (2.4) deberá satisfacer la ecuación (2.3) y será necesario que la función de  $V(\cdot)$  sea continuamente diferenciable a lo largo de las trayectorias de (2.1).

A continuación se explica brevemente la aplicación de las ecuaciones descritas anteriormente para resolver el problema de control óptimo de horizonte infinito en el caso de los sistemas lineales Problema del Regulador Cuadrático (LQR, Linear Quadratic Regulator de sus siglas en inglés). Cabe destacar que la optimización para la planta de bioetanol es un sistema no lineal.

Considerar el sistema lineal en la forma de representación espacio estado:

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) + B(t)u(t) \quad (2.5)$$

tal que  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  y  $x(t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $u(t) \in \mathbb{R}^m$  y defina un índice de desempeño cuadrático:

$$J = \int_{t_0}^{t_f} \{x^T(t)Qx(t) + u^T(t)Ru(t)\} dt \quad (2.6)$$

donde  $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$  y  $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$  son matrices semidefinida positiva y definida positiva respectivamente. El conjunto de controles admisibles  $\mathbb{U}$  y el sistema (2.5) se establece en lazo cerrado con  $u$ :

Sea  $u \in \mathbb{U}$ , tal que, es la función lineal del estado  $x(t)$ , dicho esto,  $u(t) = u(x(t))$ . Se supone que existen controles admisibles para el sistema (2.5) y que el índice de desempeño (2.6) alcanza un mínimo para:

$$u(x(t)) = u^*(x(t)) \quad (2.7)$$

ahora se busca una función  $V(x(t))$  definida positiva para que su derivada en todas las trayectorias del sistema (2.5) sea:

$$\frac{dV(x(t))}{dt} = -L^*(x(t), u^*(t)) \quad (2.8)$$

donde:

$$L^*(x(t), u^*(t)) = x^T(t)Qx(t) + u^{*T}(x(t))Ru^*(x(t))$$

se integra de 0 a  $\infty$  a ambos lados de (2.7) se obtiene:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} V(x(t)) - V(x_0) = - \int_0^{\infty} L^*(x(t, x_0), u^*(t)) dt$$

por lo que el sistema es estable ( $u^*$ ) es un control admisible, se tiene la siguiente ecuación:

$$V(x_0) = \int_0^{\infty} L^*(x(t, x_0), u^*(t)) dt$$

ahora se sabe que  $x(t, x_0)$  denota la solución al sistema (2.5) en lazo cerrado con (2.7). Si bien  $L^*(x(t, x_0), u^*(t))$  es definida positiva, por obviedad  $V(x(t))$  es una función Lyapunov para el sistema (2.5). La expresión (2.8) se puede observar que:

$$\frac{dV(x(t))}{dt} + L^*(x(t), u^*(t)) = 0 \quad (2.9)$$

reescribiendo queda de la siguiente forma:

$$\min_{u \in \mathbf{U}} \left( \frac{dV(x(t))}{dt} \Big|_{2.5} + x^T(t)Qx(t) + u^T(t)Ru(t) \right) = 0 \quad (2.10)$$

De forma que la ecuación (2.10) es conocida como la ecuación de Hamilton-Jacobi-Bellman para sistemas lineales y la función que satisface esta ecuación se llama función de Bellman para sistemas (2.5). Cuando se conoce la función de Bellman  $V(x(t))$ , su solución es (2.10) con respecto a  $u$ , ya que proporciona el control óptimo de  $u^*(t)$ .

La función de  $V(x(t))$  puede considerarse como una función de Lyapunov para el sistema (2.5) en lazo cerrado con  $u^*(t)$ . Desde luego para un sistema lineal  $u^*(t) = u^*(x(t))$ , con una función de Lyapunov en lazo cerrado se puede proponer en la Ecuación (2.11). Para los sistemas lineales, todo el procedimiento que se menciona a continuación ya está establecido. Sin embargo, para los sistemas no lineales, aún se mantiene como un área abierta de investigación.

$$V(x(t)) = x^T(t)Px(t) \quad (2.11)$$

donde  $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$  se define positiva y se calcula la derivada de  $V(x(t))$  en todas las trayectorias del sistema (2.5),

$$\left. \frac{dV(x(t))}{dt} \right|_{(2.5)} = 2x^T(t)P(Ax(t) + Bu(t)) \quad (2.12)$$

se sustituye la derivada (2.12) en (2.10) para tenerla de la forma:

$$\min_{u \in \mathbb{U}} (Ax^T PAx(t) + 2x^T(t)PBu(t) + (x^T(t)Qx(t) + u^T(t)Ru(t))) \quad (2.13)$$

De la ecuación (2.13), se desea encontrar la ley de control óptima  $u^*$ . Se puede observar que en (2.13) es una función cuadrática fuertemente convexa respecto a  $u$ , dado lo siguiente se garantiza la existencia de un mínimo global para (2.13). Por consiguiente en los resultados del cálculo de variaciones, la primera variación de la función que se quiere optimizar con respecto a  $u$  deberá ser cero.

$$\frac{\partial}{\partial u} (2Ax^T PAx(t) + 2x^T(t)PBu(t) + (x^T(t)Qx(t) + u^T(t)Ru(t))) = 0$$

por lo que:

$$2B^T Px(t) + 2Ru(t) = 0 \quad (2.14)$$

por consiguiente la ley de control óptima para el sistema (2.5) es:

$$u^*(t) = -R^{-1}B^T Px(t) \quad (2.15)$$

La expresión (2.15) se dice óptima dado que,

$$\frac{\partial^2}{\partial u^2} (2Ax^T PAx(t) + 2x^T(t)PBu(t) + (x^T(t)Qx(t) + u^T(t)Ru(t))) = 2R > 0$$

se da por hecho que la matriz  $R$  es estrictamente definida positiva y de acuerdo a la condición suficiente de la optimalidad  $u^*(t)$  dada (2.5) es óptimo.

Ahora se procede a formular la matriz  $P$  de la función de Bellman  $V(x(t))$ . Para conocerla es necesario realizar el cálculo de la derivada temporal de (2.12); Posteriormente evaluar las trayectorias del sistema (2.5) en lazo cerrado con la ley de control óptima (2.15):

$$\frac{dV(x(t))}{dt} = x(t)^T (A^T P + PA) x(t) + u^{*T}(t) B^T P x(t) + x(t)^T P B u^*(t) \quad (2.16)$$

sustituyendo las ecuaciones (2.15) y (2.16) en (2.12), se obtiene que para todo estado  $x(t)$

$$x(t)^T (A^T P + PA + Q - P B R^{-1} B^T P) x(t) = 0$$

se termina el procedimiento de la forma

$$A^T P + PA + Q - P B R^{-1} B^T P = 0 \quad (2.17)$$

La ecuación (2.17) se le llama ecuación algebraica de Riccati. Dadas las matrices  $Q$  semi-definida positiva y  $R$  estrictamente positiva. Esta ecuación puede resolver numéricamente con respecto a  $P$ , la que define al control óptimo  $u^*$ .

## 2.3. Control óptimo de sistemas no lineales discreto

Un sistema se dice no lineal sino satisface los principios de superposición y homogeneidad. Usualmente se puede encontrar en ecuaciones diferenciales con coeficientes de la función de la variable dependiente, multiplicación entre variables, exponentes en las variables y/o funciones senoidales en las variables dependientes [15].

El algoritmo que se describe en la sección 2.3.1 ha sido implementado para el caso libre de retardos en [18] y para el caso con retardado en [19], cabe mencionar que para este trabajo se utiliza el algoritmo libre de retardos.

### 2.3.1. Control subóptimo no lineal discreto

Se considera el sistema no lineal discreto afín

$$\bar{x}(k+1) = f_0(\bar{x}(k)) + f_1(\bar{x}(k))\bar{u}(k), \quad (2.18)$$

donde  $k = 0, 1, \dots, N$ ,  $(\bar{x}(k)) \in \mathbb{R}^n$ ,  $f_1(\bar{x}(k)) \in \mathbb{R}^{n \times m}$  y  $\bar{u}(k) \in \mathbb{R}^m$ . El enfoque de la programación dinámica es propuesta por [14], en donde define el siguiente índice de desempeño en la ecuación (2.19) misma que minimiza con respecto a la secuencia de controles

$\bar{u}(k)$  sujeto a las trayectorias del sistema (2.18).

$$J = \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{ \bar{x}^T(k) Q \bar{x}(k) + \bar{u}^T(k) R \bar{u}(k) \}, \quad (2.19)$$

donde  $H, Q \geq 0$  y  $R > 0$  son matrices simétricas,  $t_f = T_s N$  determina el horizonte y  $T_s$  es el periodo de muestreo. Como en el caso del Regulador Cuadrático Lineal las matrices  $H$  y  $Q$  penalizan la convergencia del estado y la matriz  $R$  penaliza la energía que será necesario para el sistema.

El enfoque de la programación dinámica inicia con la secuencia de controles que parten con horizonte  $t_f = T_s N$ , paso hacia atrás que está determinado por el índice de desempeño en tiempo discreto  $N$ :

$$J_{N,N}^* = \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N).$$

El término no depende de la ley de control  $\bar{u}(N)$ , y se determina como el óptimo de  $J$  en el tiempo discreto  $N$ . Ahora para calcular el siguiente paso se define de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} J_{N-1,N}^* &= \min_{\bar{u}(N-1)} \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N) + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \right\} \\ &= \min_{\bar{u}(N-1)} \left\{ J_{N,N}^* + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \right\}. \end{aligned}$$

El valor para el estado  $\bar{x}(N)$  se obtiene de la ecuación del sistema en espacio de estado (2.18) por lo tanto:

$$\begin{aligned} J_{N-1,N}^*(\bar{x}(N-1), \bar{u}(N-1)) &= \min_{\bar{u}(N-1)} \left\{ \frac{1}{2} [f_0(\bar{x}(N-1)) + f_1(\bar{x}(N-1)) \bar{u}(N-1)]^T H \right. \\ &\quad \times [f_0(\bar{x}(N-1)) + f_1(\bar{x}(N-1)) \bar{u}(N-1)] \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \right\}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

El valor mínimo de  $J_{N-1,N}$  se calcula de la siguiente manera

$$\bar{u}^*(N-1) = - [f_1^T(\bar{x}(N-1)) + H f_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1} f_1^T(\bar{x}(N-1)) H f_0(\bar{x}(N-1)), \quad (2.21)$$

La matriz  $R$  que es definida positiva garantiza  $[f_1^T(\bar{x}(N-1)) + Hf_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1}$  que exista un óptimo local (2.21)

$$\frac{\partial^2 J_{N-1,N}(\bar{x}(N-1), \bar{u}(N-1))}{\partial^2 \bar{u}(N-1)} = [f_1^T(\bar{x}(N-1)) + Hf_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1} \quad (2.22)$$

La existencia de un mínimo está garantizada, porque el lado derecho de la ecuación (2.20) es fuertemente convexo con respecto a  $\bar{u}(N-1)$ . Para el siguiente paso  $N-2$ , nótese que el valor de  $\bar{u}^*(N-1)$  es el óptimo en el paso  $N-1$ , y según con el principio de optimalidad de Bellman, este control genera el valor óptimo para  $\bar{x}(N-1)$ . Entonces para el paso  $N-2$ , tenemos que [18]

$$\begin{aligned} J_{N-2,N}^*(\bar{x}(N-2), \bar{u}(N-2)) = \min_{\bar{u}(N-1), \bar{u}(N-2)} & \left\{ \frac{1}{2}(\bar{x}(N))^T H \bar{x}(N) + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) \right. \\ & + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-2) Q \bar{x}(N-2) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \\ & \left. + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-2) R \bar{u}(N-2) \right\} \end{aligned} \quad (2.23)$$

El término que implica  $\bar{x}(N)$  depende del control  $\bar{u}(N-1)$  y el término  $\bar{x}(N-2)$ , ahora depende del control  $\bar{u}(N-3)$ , mientras que el término  $\bar{x}(N-1)$  depende del control  $\bar{u}(N-2)$ . Sin embargo, el control  $\bar{u}(N-1)$  que se encontró en el paso anterior es óptimo y  $\bar{x}(N-1)$  está dado por la ecuación de estados (2.18), se puede deducir que

$$\begin{aligned} J_{N-2,N}^*(\bar{x}(N-2), \bar{u}(N-2)) = \min_{\bar{u}(N-2)} & \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}(N)^T H \bar{x}(N) + \frac{1}{2} [f_0(\bar{x}(N-2)) + f_1(\bar{x}(N-2))] \right. \\ & \times \bar{u}(N-2)^T Q [f_0(\bar{x}(N-2)) + f_1(\bar{x}(N-2))] \bar{u}(N-2) \\ & + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-2) Q \bar{x}(N-2) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \\ & \left. + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-2) R \bar{u}(N-2) \right\}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

La solución de la ecuación de Riccati en tiempo discreto es un problema complejo y aquí se intenta evitar aplicando la ecuación (2.24) para obtener el control subóptimo  $\bar{u}(N-2)$ , que es muy similar al paso anterior, ahora bien la ecuación (2.24) es fuertemente convexa con respecto a  $\bar{u}(N-2)$  y garantiza la existencia de un mínimo. Sin embargo,  $\bar{u}^*(N-2)$  es solo una aproximación al óptimo de  $\bar{u}(N-2)$ , como se sabe la señal del control óptimo

$\bar{u}(N-2)$  se encuentra dando solución a la ecuación de Riccati para el caso discreto en sistemas no lineales, siendo esto un problema, porque no es sencillo. Entonces para encontrar el control subóptimo  $\bar{u}^*(N-2)$ , se obtiene

$$\bar{u}^*(N-2) = - [f_1^T(\bar{x}(N-2)) + Qf_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1} f_1^T(\bar{x}(N-1))Qf_0(\bar{x}(N-1)).$$

Los resultados anteriores pueden establecer las ecuaciones de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} J_{N-k,N}^*(\bar{x}(N-k), \bar{u}(N-k)) &= J_{N-k+1,N}^* + \{ \bar{x}^T(N-k)(Q\bar{x}(N-k) + \bar{u}^T(N-k) \\ &\quad R\bar{u}(N-k)) \}, \\ \bar{u}^*(N-k) &= - [f_1^T(\bar{x}(N-k)) + Qf_1(\bar{x}(N-k)) + R]^{-1} f_1^T(\bar{x}(N-k)) \\ &\quad Qf_0(\bar{x}(N-k)), \\ &\quad \text{para todo } k = 2, \dots, N. \end{aligned}$$

La secuencia que se obtiene garantiza que se alcanza un mínimo del índice de desempeño (2.19), ver ecuación (2.22). En el capítulo 4 se aplica para los bioreactores lote alimentado y continuo.





# Capítulo 3

## Caso de estudio: Producción de bioetanol

### 3.1. Biorefinería

Una biorefinería es una instalación industrial que incorpora equipos para la conversión de biomasa y procesos para la producción de combustibles, energía y productos químicos a partir de los residuos agroindustriales como el mucílago del cacao [20].

La Tabla 3.1 muestra una clasificación de biorefinerías.

Tabla 3.1: Ejemplos de la clasificación de biorefinería [21]

Biorefinería	Producción
Aceites de cultivos oleaginosos	Biodiésel, glicerina y alimentos.
Azúcares C6 y cultivos amiláceos	Bioetanol y alimento animal.
Gas de síntesis	Diésel, gasolina, nafta, metanol etc.
Ligninas usando maderas, azúcares C5 y C6	Etanol, electricidad, calor y fenoles.

Una de las fuentes de energía que poco se mencionan a nivel nacional y que ha demostrado su factibilidad en otras regiones del mundo, es la producción del bioetanol. Desde el punto de vista industrial, trabajar en la producción de dicho producto es fundamental, pues el etanol no sólo es una fuente de energía sino una materia prima importante en la industria (química, farmacéutica, agroalimentaria, etc) [4].

En el mundo existen aproximadamente 30 biorefinerías, algunas de ellas generan bio-combustibles y otras generan co-productos [22]. Cabe mencionar que en abril del 2014, comenzaron actividades al menos 25 refinerías en Estados Unidos, en las que cuatro ya están en la fase final, cuatro en demostración y las demás como planta piloto, la mayoría utiliza como componente principal el maíz, materia prima de primera generación. No obstante, Malasia desarrolla el proyecto de la biorefinería más grande del continente asiático, esto con el fin de atraer a países como Estados Unidos, Corea, Japón y Europa [23]. En nuestro país, en mayo 2020 se comenzó a operar en Sinaloa una biorefinería con residuos de la cáscara de camarón y arbusto silvestre para producir biocombustible (bioetanol y bioturbosina) [24].

Por otro lado, la biomasa es la energía resultante de la materia orgánica constituida de los seres vivos y sus excretas [25]. Existe una clasificación de las plantas de producción de combustibles con base a la materia prima, en la Figura 3.1 se muestra una descripción y se mencionan algunos ejemplos.

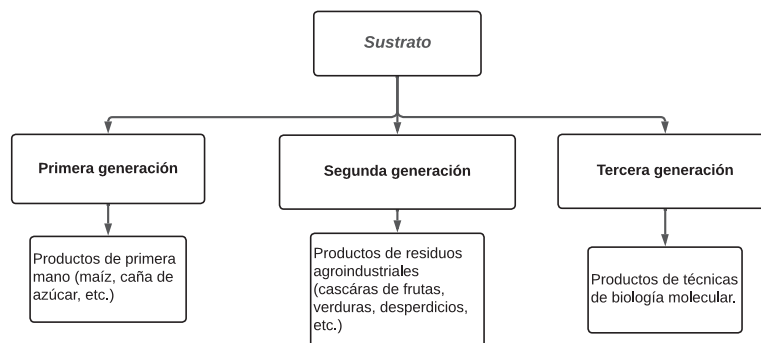


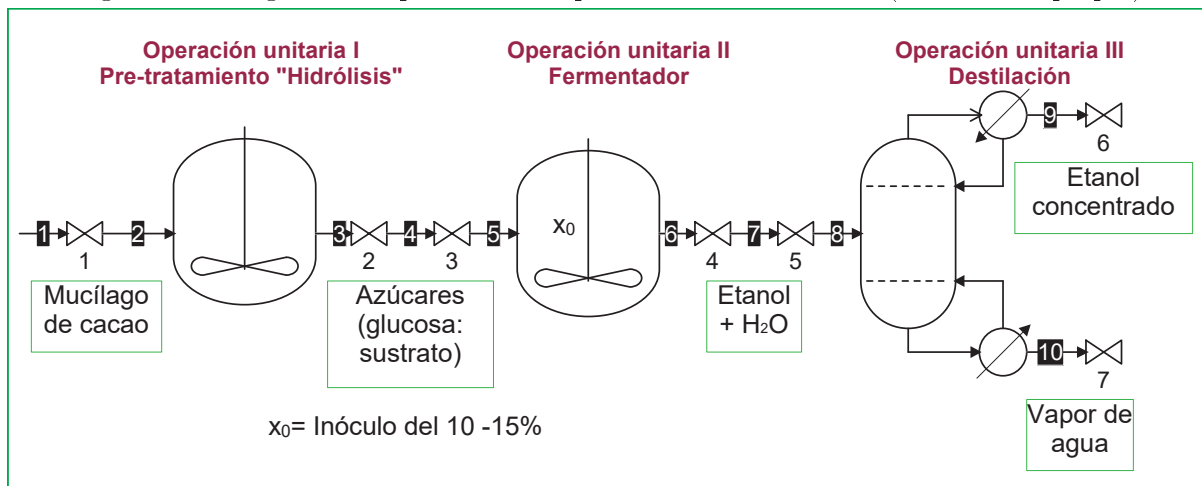
Figura 3.1: Clasificación de la materia prima (elaboración propia).

## 3.2. Descripción de la planta de bioetanol

Para entrar en contexto el diseño de la planta Figura 3.2 describe las operaciones unitarias involucradas en el proceso para la producción de bioetanol. El proceso inicia con el pretratamiento que consta básicamente en extraer la glucosa que aún prevalece del mucílago del cacao, dicha glucosa es la entrada del biorreactor en donde se realiza el proceso de fermentación, este proceso opera con un inóculo del 10 %, y al finalizar el proceso de la fermentación se obtienen las concentraciones de sustrato, biomasa, etanol,  $CO_2$  y  $H_2O$ . Una vez terminado este proceso pasa por una columna de destilación y aquí se realiza

una separación de los productos resultantes del fermentador.

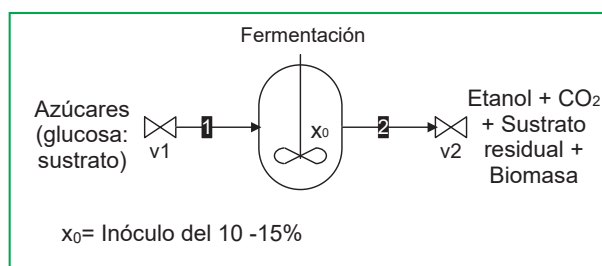
Figura 3.2: Diagrama del proceso de la producción de bioetanol (elaboración propia).



### 3.3. Fermentador

El caso de estudio que se aborda en el presente trabajo es la operación unitaria del fermentador. Dicha operación se basa en producir un catabólico oxidativo en un compuesto orgánico, es decir, el sustrato sufre cambios ya sean por reducción y/o oxidación y por consecuencia produce energía. La levadura *Saccharomyces cerevisiae* es la biomasa que se encarga de producir metabolitos a partir de los azúcares resultantes en la etapa final del pretratamiento y en presencia o ausencia de oxígeno produce el alcohol que para este caso es bioetanol [26].

Figura 3.3: Operación unitaria del fermentador para la producción de bioetanol (hecho en COCO-COFFEE)[27]



En la Figura 3.3 se muestra a la entrada del fermentador los azúcares (sustrato) extraído del residuo agroindustrial, el bioreactor opera con un inóculo del 10% que a su salida se encuentran las concentraciones causadas por la reacción entre el sustrato y la biomasa.

### 3.4. Balance estequiométrico del bioetanol

En esta sección se define el balance estequiométrico basandose en la bioquímica del proceso, para identificar las variables de estado implicadas en el bioreactor.

Bioquímica "Mecanismo de reacción".



Finalmente, se realiza el cálculo para que la ecuación (3.2) quede balanceada bioquímicamente entre reactivos y productos igualando ambos lados de la ecuación.



En (3.1) el  $E_t$  y  $CO_2$  son los metabolitos finales de la ruta metabólica del *S. cerevisiae* utilizando como fuente de carbono la glucosa. Por lo tanto, estas concentraciones de (3.2) se refiere a la generación de dos moléculas de etanol más dos de dióxido de carbono y también se establecen como las variables de estado del fermentador.

### 3.5. Balance de materia

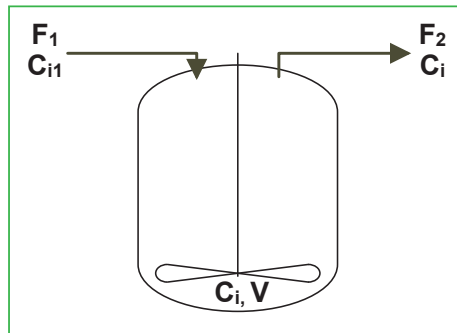
El modelo matemático fue diseñado con datos experimentales y está estrechamente relacionado con la ley de Lavoisier que establece "La materia no se crea ni se destruye, solo se transforma"[28]. Se ajusta el modelo para las diferentes operaciones del bioreactor y a su vez estudiar el comportamiento en cada uno de los modelos para aproximar una mejor respuesta, y encontrar una mayor producción de bioetanol.

Para describir el comportamiento de la planta se tendrá una correlación matemática entre el volumen y concentraciones de los reactivos, los cuales se pueden ver reflejados en las relaciones estequiométricas y balances de materia que determinan la conversión del sustrato y los rendimientos de los productos. Es decir, se hará un modelo matemático que describa el comportamiento dinámico del sistema.

Como se menciona anteriormente existe una reacción bioquímica en donde la biomasa *Saccharomyces cerevisiae*, convertirá una glucosa, a etanol y  $CO_2$ . Además el sistema cuenta con un flujo de alimentación  $D = \frac{F}{V}$  y parámetros que tienen influencia en el desempeño de la planta.

Las variables de estado describen el cambio que sufre el sistema con respecto al tiempo, el sustrato  $S$ , la biomasa  $X$ , etanol  $E_t$  y el dióxido de carbono  $CO_2$ . Para un sistema de cultivo, se puede plantear el balance de materia del biorreactor en la Figura (3.4).

Figura 3.4: Esquema de un bioreactor con indicación de los caudales y concentraciones a la entrada y salida. El agitador indica que el cultivo está perfectamente mezclado CSTR.



$$\underbrace{\frac{dVC_i}{dt}}_{\text{Velocidad de acumulación}} = \underbrace{\underbrace{F_1 C_{1i}}_{\text{Velocidad de ingreso}} - \underbrace{F_2 C_i}_{\text{Velocidad de salida}}}_{\text{Operación}} + \underbrace{\underbrace{V \mu_i}_{\text{Velocidad de formación}} - \underbrace{V \mu_{C_i}}_{\text{Velocidad de consumo}}}_{\text{Cinética de reacción}} \dots \quad (3.3)$$

donde  $V$  es el volumen del cultivo,  $F_1$  es el flujo de alimentación,  $F_2$  el de salida,  $C_{1i}$  la concentración del componente "i" en la alimentación, en donde "i" representa al sustrato, biomasa, productos y metabolitos y  $C_i$  la concentración en el flujo de salida. Los términos

$\mu_i$  y  $\mu_{C_i}$  se refieren a la velocidad formación y consumo del componente "i".

Suponiendo que la densidad del cultivo y de la alimentación son iguales resulta:

$$\frac{dVC_i}{dt} = (\mu_i - \mu_{C_i})V \quad (3.4)$$

Ahora procedemos a realizar los balances de materia para la operación en lote, lote alimentado y continuo en donde las variables son el sustrato, la biomasa, etanol y el dióxido de carbono  $S$ ,  $X$ ,  $E_t$  y  $CO_2$ , mientras que los parámetros cinéticos son  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_4$ ,  $k_5$ ,  $k_6$ ,  $k_7$ ,  $S_0$  y los exponentes  $n$  y  $m$ .

## 3.6. Operación de un biorreactor

Los biorreactores, tienen básicamente tres modos de operación para realizar las fermentaciones lote (Batch), lote alimentado (Fed-Batch) y continuo.

El modo de operación, es sinónimo del modo de operar del biorreactor o fermentador. Éste no solo influye en el diseño propio del reactor, también, en el modelo cinético de crecimiento del cultivo y en el proceso de producción [29].

### 3.6.1. Operación por lote

Lote (batch): sin alimentación; se coloca dentro del biorreactor la carga total de cada proceso (tanda o lote) de cultivo o fermentación y se deja que se lleve a cabo el proceso productivo o la fermentación por el tiempo que sea necesario; el cuál se denomina tiempo de retención.

El reactor por lotes opera en estado no estacionario, es decir, su composición cambia con respecto al tiempo. Algunas de sus ventajas es que un reactor pequeño puede producir un compuesto y después otro en un determinado tiempo, es decir, pueden trabajar en serie, también tiene desventajas como altos costos en la mano de obra, la calidad del producto es menos variable que un reactor continuo y se usa frecuentemente para reacciones homogéneas [30]. Para esta operación lo único que podemos optimizar son las condiciones iniciales.

La operación por lote debe tener las siguientes condiciones una un volumen constante y se sabe que dicho reactor no tiene flujos de entrada ni de salida, es por ello, que de acuerdo a la ecuación (3.3) únicamente quedan los términos que describen la cinética de reacción.

$$\frac{VdC_i}{dt} = V\mu_i - V\mu_{C_i}$$

al considerar el volumen constante, resulta la siguiente expresión matemática:

$$\frac{dC_i}{dt} = \mu_i - \mu_{C_i}$$

por ejemplo para el sustrato, biomasa, etanol y el dióxido de carbono y por Ley de Potencia se resume a las siguientes expresiones:

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 SX \quad (3.5)$$

$$\frac{dX}{dt} = k_2 SX - k_3 E_t \quad (3.6)$$

$$\frac{dE_t}{dt} = k_4 SX E_t^n - k_5 X \quad (3.7)$$

$$\frac{dCO_2}{dt} = k_6 SX CO_2^m - k_7 X \quad (3.8)$$

### 3.6.2. Operación en lote alimentado

El lote alimentado (fed-batch) tiene un flujo de entrada que alimenta al sistema de cultivo, es decir, el sustrato se va ingresando dosificadamente para que este pueda intensificar el proceso obteniendo un máximo de crecimiento y maximizando la producción del etanol, para este se considera que no hay flujo de salida y el volumen del reactor está en función del flujo de entrada, algunas de las desventajas es que los reactores que operan de forma discontinua toman más tiempo por inactividad, también se considera poco eficiente para el crecimiento de los productos y en la industria es el que más se emplea debido a las bondades de aplicación y optimización.

Ahora, se considera una salida de  $F_2$ , nula, por lo que,  $V$  aumentará con respecto al tiempo en función del caudal de entrada.

$$\frac{dV}{dt} = F \quad (3.9)$$

y en el balance másico se anula el término  $F_2 C_i$  quedando

$$\frac{d(VC_i)}{dt} = F_1 C_{1i} + V(\mu_i - \mu_{C_i}) \quad (3.10)$$

solo en esta operación se considera un volumen dependiente de la relación de una función del flujo

$$V = f(F)$$

con respecto a la expresión resultante (3.10) se realizan los balances de las concentraciones involucradas en el lote alimentado

$$\frac{dS}{dt} = -k_1SX + \frac{F}{V}(S_0 - S) \quad (3.11)$$

$$\frac{dX}{dt} = k_2SX - k_3E_t - \frac{F}{V}X \quad (3.12)$$

$$\frac{dE_t}{dt} = k_4SXE_t^n - k_5X - \frac{F}{V}E_t \quad (3.13)$$

$$\frac{dCO_2}{dt} = k_6SXC O_2^m - k_7X - \frac{F}{V}CO_2 \quad (3.14)$$

$$\frac{dV}{dt} = F \quad (3.15)$$

F queda definida como una estrategia de alimentación al bioreactor. Para este caso se evaluaron algunas estrategias ya reportadas en literatura y se consideró la siguiente expresión algebraica:

$$F = F_0 + \alpha * X * P \quad (3.16)$$

donde

$$F_0 = 0.0095$$

$$\alpha = 1$$

$$P = 0.02$$

(3.17)

cabe mencionar que para este caso el  $V$  permanece dentro del operador diferencial debido a que varía con respecto al tiempo, según (3.9). Por tal motivo, tiene una duración limitada a diferencia del continuo, ya que el volumen no puede incrementarse más del volumen útil que posee el biorreactor.



### 3.6.3. Operación en continuo

Se alimenta una línea de entrada y se drena una línea de salida o lavado; de manera que los flujos o caudales de ambas líneas sean iguales y la producción sea continua.

El reactor por operación en continuo, es un tanque que tiene una entrada y salida, siempre se mantiene funcionando mientras está encendido, cuenta con un agitador. Por lo tanto, siempre mantiene agitado el tanque y su mezclado es homogéneo en cualquier punto del tanque. Algunas de las ventajas son: el costo de operación es muy bajo, operan en estado estacionario, por lo tanto, no se requiere parar la producción, son adecuados para mezclas homogéneas y se controla mejor la temperatura. Sin embargo, algunas desventajas es que no se recomiendan en procesos que requieren elevadas temperaturas, tienen baja conversión por unidad de volumen, y son más utilizadas en fase gaseosa [31]. Para esta forma de operar lo único que se puede optimizar es la tasa de dilución  $D = \frac{F}{V}$

Se considerara el volumen constante, el flujo de entrada igual al de salida y por la ecuación (3.4)  $\mu_{C_{1i}}$  casi cero, la ecuación (3.3) queda de la siguiente forma:

$$\frac{VdC_i}{dt} = F(C_{1i} - C_i) + V(\mu_i - \mu_{C_i})$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{F}{V}(C_{1i} - C_i) + \mu_i - \mu_{C_i} \quad (3.18)$$

por lo tanto, los balances de materia para el sustrato, biomasa, etanol y  $CO_2$  con respecto a (3.18) se describen a continuación

$$\frac{dS}{dt} = -k_1SX + \frac{F}{V}(S_0 - S) \quad (3.19)$$

$$\frac{dX}{dt} = k_2SX - k_3E_t - \frac{F}{V}X \quad (3.20)$$

$$\frac{dE_t}{dt} = k_4SXE_t^n - k_5X - \frac{F}{V}E_t \quad (3.21)$$

$$\frac{dCO_2}{dt} = k_6SXC_{O_2}^m - k_7X - \frac{F}{V}CO_2 \quad (3.22)$$

## 3.7. Validación de los modelos experimentales

### Modelo cinético para la producción de etanol utilizando residuos del procesamiento del cacao

En esta sección se propone un modelo cinético no estructurado y no segregado para describir un proceso de fermentación por lote a partir de residuos agroindustriales derivados del cacao (jugo de mucílago de cacao) con la cepa control *Saccharomyces cerevisiae*. El modelo propuesto se basa en un mecanismo de reacción de acoplamiento múltiple en paralelo que describe la cinética de consumo de sustrato, biomasa,  $CO_2$  y producto. Los parámetros del modelo de optimización aplicando el enfoque de Marquardt-Levenberg (LMA) donde se minimiza la discrepancia entre las predicciones del modelo y los datos experimentales se muestran simulaciones numéricas donde las curvas calculadas se comparan con los datos experimentales (gráficos residuales). La efectividad del modelo se evaluó estadísticamente utilizando coeficientes de eficiencia adimensionales.

### Datos experimentales para la fermentación de etanol

Para la reactivación y fermentación de la cepa se utilizó un medio sintético mínimo modificado: glucosa,  $20gL^{-1}$  para reactivar y de  $40gL^{-1}$  a  $60gL^{-1}$  para la fermentación;  $MgSO_4$ ,  $7H_2O$ ,  $0.4gL^{-1}$ ,  $KH_2PO_4$ ,  $5gL^{-1}$ ;  $(NH_4)2SO$ ,  $4.2gL^{-1}$ ; extracto de levadura,  $1gL^{-1}$ , pH 4.5. La cepa se reactivó en un matraz de  $25^\circ C$  y  $200rpm$ .

### Fermentación

La fermentación se realizó con un inóculo al  $10\% \frac{V}{V}$  de *Saccharomyces cerevisiae*. En un matraz Erlenmeyer de  $2000mL$  con un medio estéril. La temperatura de incubación fue de  $30^\circ C$  una agitación de  $200rpm$ . Para los experimentos, los jugos de pulpa de cacao se ajustaron a  $40 \frac{g}{L}$  respectivamente de glucosa con azúcar reductor. Se tomaron muestras de  $2mL$  cada  $2h$  durante las primeras  $10h$  y posteriormente cada  $5h$  durante  $96h$ . El recuento de células viables se determinó mediante una cámara de Neubauer. Los azúcares reductores totales se estimaron mediante el método colorimétrico del ácido dinitrosalicílico (DNS) adaptado de trabajos anteriores [32]. La cantidad de azúcares reductores se calcularon mediante la ecuación de regresión, que consiste en una curva estándar con glucosa  $1 \frac{mg}{mL}$ . Las muestras se centrifugaron  $10000rpm$ ;  $10min$  a temperatura ambiente, se enfriaron  $4^\circ C$

y se filtraron ( $0.22\mu m$ ) antes de inyectarlas en la HPLC. El etanol se determinó mediante cromatografía usando sobrenadantes obtenidos por centrifugación de muestras de caldo de cultivo  $1.5mL$ . La curva estándar se obtuvo con etanol Sigma-Aldrich grado cromatografía líquida de alta resolución (HPLC). Se utilizó un cromatógrafo de gases Varian CP-3380 con un detector de ionización de llama equipado con una columna ZB-FFAP. Condiciones de funcionamiento: temperatura de  $300$  y  $200^{\circ}C$  en el detector de ionización de llama y en el inyector, respectivamente, y caudal de  $0.9mLmin^{-1}$  nitrógeno (99.99%) [33].



# Capítulo 4

## Diseño de controladores óptimos

En este capítulo, se presentan las diferentes estrategias de algoritmos óptimos propuestos para dar solución al problema de optimización dado en el planteamiento del problema.

El **problema del control óptimo** se resume en la subsección 2.2.2, en donde se explica que se desea hallar un control  $u \in \mathbb{U}$ , tal que, en lazo cerrado, se realice una trayectoria que converja al origen en tiempo mínimo y con el menor costo de energía, con una convergencia lo más rápido posible. Es por eso, que se implementan estrategias de control óptimo en tiempo finito.

### 4.0.1. Regulador Cuadrático Lineal para el bioreactor operación en continuo

Para aplicar el LQR es necesario tener un sistema lineal para obtener las matrices  $A$  y  $B$ , se procede a realizar la linealización de la operación continua ecuaciones (3.19)-(3.22) obteniendo su representación espacio estado.

$$\dot{x} = \begin{bmatrix} \dot{S} \\ \dot{X} \\ \dot{E}_t \\ \dot{CO}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 SX \\ k_2 SX - k_3 E_t \\ k_4 SX E_t^n - k_5 X \\ k_6 SX CO_2^m - k_7 X \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D(S_o - S) \\ -DX \\ -DE_t \\ -DCO_2 \end{bmatrix} u \quad (4.1)$$

Se procede a calcular los puntos de equilibrio mediante el método Newton-Raphson, debido a que las ecuaciones son simultáneas y hay presencia de exponenciales, entra en la clasificación de sistema no lineal.

$$x^* = \begin{bmatrix} S^* \\ X^* \\ E_t^* \\ CO_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.285 \\ 7.316 \\ 23.91 \\ 9.37 \end{bmatrix}$$

Una vez que se tienen los puntos de equilibrio se realiza un cambio de variable, dado que el punto de equilibrio  $\neq 0$  y se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \bar{X} &= X - X^* \\ \bar{S} &= S - S^* \\ \bar{E}_t &= E_t - E_t^* \\ \bar{CO}_2 &= CO_2 - CO_2^* \end{aligned}$$

Con la finalidad de obtener un modelo matemático lineal para el sistema no lineal, se considera que las variables solo tienen ligera desviación en alguna condición de operación, y se procede a expandir en series de Taylor alrededor del punto de operación [34] y se calculan las derivadas parciales:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{S}} f_1(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}} f_1(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_t} f_1(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{CO}_2} f_1(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}} f_2(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}} f_2(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_t} f_2(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{CO}_2} f_2(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}} f_3(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}} f_3(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_t} f_3(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{CO}_2} f_3(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}} f_4(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}} f_4(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_t} f_4(\bar{x}) & \frac{\partial}{\partial \bar{CO}_2} f_4(\bar{x}) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x} = x^* \\ \bar{u} = u^* \end{matrix}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{u}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{u}} f_1(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}} f_2(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}} f_3(\bar{x}) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}} f_4(\bar{x}) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x} = x^* \\ \bar{u} = u^* \end{matrix}$$

Los resultados de las derivadas parciales son:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{x}} = \begin{bmatrix} -k_1 \bar{X} + D & -k_1 \bar{S} & 0 & 0 \\ k_2 \bar{X} & k_2 \bar{S} - D & -k_3 & 0 \\ k_4 \bar{X} \bar{E}_t^n & k_4 \bar{S} \bar{E}_t^n - k_5 & nk_4 \bar{X} \bar{S} \bar{E}_t^{n-1} - D & 0 \\ k_6 \bar{X} \bar{CO}_2^m & k_6 \bar{S} \bar{CO}_2^m - k_7 & 0 & mk_6 \bar{X} \bar{S} \bar{CO}_2^{n-1} - D \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x} = x^* \\ \bar{u} = u^* \end{matrix}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{u}} = \begin{bmatrix} (S_o - S) \\ -X \\ -E_t \\ -CO_2 \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x} = x^* \\ \bar{u} = u^* \end{matrix}$$

Sustituyendo los valores en los puntos de equilibrio para que el sistema quede de la forma:

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad (4.2)$$

Se obtiene el sistema linealizado de la forma (4.21):

$$\dot{\bar{x}} = \begin{bmatrix} -0.3558 & -0.0643 & 0 & 0 \\ 0.0699 & 0.0023 & -0.0006 & 0 \\ 0.2434 & 0.0422 & -0.0088 & 0 \\ 0.0941 & 0.0156 & 0 & -0.0091 \end{bmatrix} \bar{x} + \begin{bmatrix} 38.7150 \\ -7.3160 \\ -23.9100 \\ -9.3700 \end{bmatrix} \bar{u}$$

Una vez realizada la linealización se procede a verificar la controlabilidad del sistema, se obtiene la matriz de controlabilidad  $\mathbb{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  y se verifica que sea de rango  $n$ :

$$\mathbb{C} = \begin{bmatrix} B : AB : \dots : A^{N-1}B \end{bmatrix}$$

La matriz de controlabilidad al ser sus columnas linealmente independientes, tiene un rango de 4; por lo tanto es localmente controlable.

$$\mathbb{C} = \begin{bmatrix} 38.7150 & -13.3047 & 4.5603 & -1.5629 \\ -7.3160 & 2.7015 & -0.9286 & 0.3183 \\ -23.9100 & 9.3247 & -3.2064 & 1.0990 \\ -9.3700 & 3.6151 & -1.2431 & 0.4261 \end{bmatrix}$$

El control  $u$  para el sistema, se obtiene con la aplicación de la ley de Control Regulador Cuadrático Lineal (2.15), donde el valor de  $R$  es definido positivo y este es dado por el usuario y  $P$  es una solución definida positiva de la ecuación algebraica de Riccati [35].

$$A^T P + PA - PBR^{-1}B^T P + Q = 0$$

donde:

$A$  es la matriz  $A$  del sistema

$B$  es la matriz  $B$  del sistema

y  $Q$  es una matriz definida positiva propuesta por el usuario.

$$K^* = R^{-1} B^T P.$$

$$K^* = [k_{11} \quad k_{22} \quad k_{33} \quad k_{44}]$$

Para la obtención de la matriz  $K^*$  se hace uso del programa MATLAB 2017, con la instrucción correspondiente al controlador Regulador Cuadrático Lineal.

$$[k \ s \ e] = lqr(A \ B \ Q \ R)$$

La matriz  $A$  y  $B$  son dadas por la linealización (4.21) se propone la matriz  $Q$

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{9}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{10} \end{bmatrix} \quad y \quad R = [10000]$$

Se obtienen las ganancias mediante el software MATLAB y se implementan en el sistema no lineal, se diseña un control por realimentación de estado tal que:

$$x(t) \rightarrow x_{ss} \quad \text{cuando} \quad t < \infty$$

donde  $x(t)$  son los estados del sistema que se pueden medir y  $x_{ss}$  es el valor de la referencia que propone el usuario y es constante.

$$e(t) = x(t) - x_{ss}$$

el valor  $e(t)$  representa el error y con el control se pretende tienda a cero.

Los resultados de la implementación en simulación se muestran en el capítulo 5

#### 4.0.2. Control No lineal de Horizonte Finito para el bioreactor operación en continuo

En esta sección se presenta la aplicación del control subóptimo mediante el enfoque de la programación dinámica, a un biorreactor operación continua para una planta de



bioetanol, cuyo modelo matemático tiene las siguientes variables de estado  $[S X E C]$  y su variable de entrada es  $D$ , correspondiente a la tasa de dilución  $D = \frac{F}{V}$ .

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -k_1SX + D(S_0 - S) \\ \frac{dX}{dt} &= k_2SX - k_3E - DX \\ \frac{dE}{dt} &= k_4SXE^n - k_5X - DE \\ \frac{dC}{dt} &= k_6SXC^m - k_7X - DC\end{aligned}\tag{4.3}$$

### 4.0.3. Modelo en tiempo discreto para el bioreactor operación en continuo

El modelo de la planta corresponde a un sistema no lineal, por lo que se discretiza aplicando el método de aproximación de Euler. El tiempo de muestreo es uniforme y es definido como  $T_s$  y  $t = kT_s$ , donde  $k = 0, 1, 2, \dots, N$ . La dinámica para el vector de estado del modelo está dada por (4.3) es aproximada como:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} S(t) \\ X(t) \\ E(t) \\ C(t) \end{bmatrix} \approx \frac{1}{T_s} \begin{bmatrix} S(k+1) - S(k) \\ X(k+1) - X(k) \\ E(k+1) - E(k) \\ C(k+1) - C(k) \end{bmatrix}\tag{4.4}$$

La discretización del modelo (4.3), es expresado de la siguiente forma:

$$\bar{x}(k+1) = f_0(\bar{x}(k)) + f_1(\bar{x}(k)\bar{u}(k))\tag{4.5}$$

donde

$$\bar{x}(k) = [S(k) \quad X(k) \quad E(k) \quad C(k)]^T\tag{4.6}$$

$$f_0(\bar{x}(k)) = \begin{bmatrix} S(k) + T_s(-k_1S(k)X(k)) \\ X(k) + T_s(k_2S(k)X(k) - k_3E(k)) \\ E(k) + T_s(k_4S(k)X(k)E^{0.09}(k) - k_5E(k)) \\ C(k) + T_s(k_6S(k)X(k)C^{0.07}(k) - k_7X(k)) \end{bmatrix}\tag{4.7}$$

y

$$f_1(\bar{u}(k)) = \begin{bmatrix} T_s(S_0 - S(k)) \\ -T_s(X(k)) \\ -T_s(E(k)) \\ -T_s(C(k)) \end{bmatrix} \quad \bar{u}(k) = [D(k)] \quad (4.8)$$

#### 4.0.4. Epítome del control subóptimo para el modelo en continuo

El control subóptimo que ajusta el estado discreto  $\bar{x}(k)$  del sistema discreto no lineal (4.5), se considera que el mapeo no lineal  $f_0(\cdot)$  está definido con respecto a los argumentos, observar que el origen es un punto constante de el sistema (4.5), esto determina que  $f_0(0) = 0$  cuando el vector de control  $\bar{u}(k) \in \mathbb{R}$  es igual a cero y  $k = 0, 1, \dots, N$ , para algunos  $N \in \mathbb{N}$ .

Se determina la siguiente definición para describir la controlabilidad en sistemas discretos.

**Controlabilidad.** El par  $x_0, x_1$  son controlables, si existe una secuencia de controles admisibles  $\bar{u}(k)$  tal que, el sistema definido por (4.5), es transferido de  $x_0$  a  $x_1$  en  $N$  pasos finitos.

El modelo de la planta operación en continuo es un sistema no lineal puesto que no cumple con los principios de superposición y homogeneidad, es por ello que, se linealiza para obtener la matriz de controlabilidad y esta debe poseer rango pleno para poder establecer que la planta sea localmente controlable.

El enfoque de la programación dinámica es propuesta por [14] en este caso de estudio el algoritmo se adapta para implementar el regulador a todo el estado de la cinética no lineal (4.5).

$$J = \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{ \bar{x}^T(k) Q \bar{x}(k) + \bar{u}^T(k) R \bar{u}(k) \} \quad (4.9)$$

En la ecuación (4.9) se define el índice de desempeño, el mismo minimiza con respecto a la secuencia de control  $\bar{u}(k)$  sujeto a las trayectorias del sistema (4.5).

donde  $H, Q \geq 0$  y  $R > 0$  son matrices simétricas,  $t_f = T_s N$  determina el horizonte y  $T_s$  es el periodo de muestreo. Como en el caso del Regulador Cuadrático Lineal las matrices

$H$  y  $Q$  penalizan la convergencia del estado y la matriz  $R$  penaliza la energía que será necesario para la planta.

El **problema** de la optimización se establece como: encontrar la secuencia de controles subóptimas  $\bar{u}(k)$  que minimice el índice de desempeño definido por (4.9) sujeto a las trayectorias de la planta (4.5).

La planta esta definida por las ecuaciones (4.5) y el índice de desempeño cuadrático (4.9). Ahora, se encuentra un mínimo local de acuerdo a la secuencia de controles subóptima  $\bar{u}(k)$ :

$$\begin{aligned}
u^*(k-N) = & E(k)q_{33}T_s \left[ \frac{E(k) - T_s(K_5X(k))}{q_{33}E^{0.09}(k)T_s^2 + q_{11}S_0^2T_s^2 - 2q_{11}S_0T_s^2S(k)} \right. \\
& \left. \frac{-E^{0.09}(k)K_4S(k)X(k)}{+q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k) + R} \right] - q_{11}T_s(S_0 - S(k)) \\
& \left[ \frac{S(k) - K_1T_sS(k)X(k)}{q_{33}E^{0.09}(k)T_s^2 + q_{11}S_0^2T_s^2 - 2q_{11}S_0T_s^2S(k) + q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k) + R} \right] \\
& + q_{44}T_sC(k) \left[ \frac{C(k) - T_s(K_7X(k))}{q_{33}E^{0.09}(k)T_s^2 + q_{11}S_0^2T_s^2 - 2q_{11}S_0T_s^2S(k) + q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k)} \right. \\
& \left. \frac{-K_6C(k)^{0.07}S(k)X(k)}{+q_{22}T_s^2X^2(k) + R} \right] + q_{22}T_sX(k) \left[ \frac{X(k) - T_s(E(k)K_3}{q_{33}E^{0.09}(k)T_s^2 + q_{11}S_0^2T_s^2 - 2q_{11}S_0T_s^2S(k)} \right. \\
& \left. \frac{-K_2S(k)X(k)}{+q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k) + R} \right] \quad (4.10)
\end{aligned}$$

donde  $K_1, K_2, K_3, K_4, K_5, K_6, K_7$  son parámetros del sistema y las matrices  $H, Q$  y  $R$  son definidas de la siguiente forma:

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{44} \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} q_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_{44} \end{bmatrix} \quad y \quad R = [\text{escalar}] \quad (4.11)$$

Las matrices  $H$  y  $Q$  son simétricas y semidefinidas positivas, mientras que la matriz  $R$  es definida estrictamente positiva.

La prueba se basa en el enfoque de la programación dinámica e inicia con la secuencia de controles que parten con horizonte  $tf = T_sN$ , paso hacia atrás que está determinado

por el índice de desempeño en tiempo discreto  $N$ :

$$J_{N,N}^* = \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N)$$

El primer paso se considera que el valor óptimo para el control  $\bar{u}^*(k)$  es igual a cero, dado que el índice de desempeño no depende de la ley de control  $\bar{u}(k)$ : de acuerdo al sistema (4.5),  $\bar{x}(N)$  depende únicamente del control  $\bar{u}(N-1)$ . Por lo tanto, el índice de desempeño  $J_{N,N}^*$  será el valor óptimo de  $J$  en el paso  $N$ . Sin embargo, para (4.9) se desarrolla desde  $N-1$  a  $N$  y ahora el desarrollo de la optimización con respecto al control  $\bar{u}(k)$  queda:

$$J_{N-1,N}^* = \min_{\bar{u}(N-1)} \left\{ J_{N,N}^* + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \right\} \quad (4.12)$$

En (4.5), el estado  $\bar{x}(N)$  depende del control  $\bar{u}(N-1)$ , por lo que, si se sustituye de lado derecho el sistema (4.9) queda expresada en la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} J_{N-1,N}^*(\bar{x}(N-1), \bar{u}(N-1)) &= \min_{\bar{u}(N-1)} \left\{ \frac{1}{2} [f_0(\bar{x}(N-1)) + f_1(\bar{u}(N-1))]^T \dots \right. \\ &\quad \dots \times H [f_0(\bar{x}(N-1)) + f_1(\bar{u}(N-1))] \\ &\quad \left. \dots + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) \right\} \end{aligned} \quad (4.13)$$

El índice de desempeño (4.13) ahora solo depende de valores en  $\bar{x}(N-1)$  y  $\bar{u}(N-1)$  y como  $\bar{x}(N-1)$  en este paso depende de  $\bar{u}(N-2)$  también se puede encontrar un mínimo con respecto a  $\bar{u}(N-1)$ . Es importante mencionar que el índice de desempeño en la expresión mostrada anteriormente denota que es fuertemente convexa y es necesario considerar las condiciones suficientes para garantizar un mínimo local.

$$\frac{\partial J_{N-1,N}}{\partial \bar{u}(N-1)} = 0, \quad (4.14)$$

Con la primera condición necesaria establecida en (4.14), se determina el siguiente control

$$\bar{u}^*(N-1) = - [f_1^T H f_1 + R]^{-1} f_1^T H f_0(\bar{x}(N-1)), \quad (4.15)$$

Se determina que existe la inversa para  $[f_1^T H f_1 + R]$ , dado que la matriz  $R$  es positiva. La segunda condición necesaria se define de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 J_{N-1,N}(\bar{x}(N-1), \bar{u}(N-1))}{\partial^2 \bar{u}(N-1)} > 0, \quad (4.16)$$

La ecuación (4.16) también la podemos indicar de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 J_{N-1,N}(\bar{x}(N-1), \bar{u}(N-1))}{\partial^2 \bar{u}(N-1)} = [f_1^T(\bar{x}(N-1)) + H f_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1} \quad (4.17)$$

Por lo tanto, la ecuación (4.15) se determina que es óptima localmente. Ahora, para calcular el instante  $N-2$ , el control  $\bar{u}^*(N-1)$  es el valor óptimo en el instante  $N-1$  y por la propuesta de optimalidad de Richard Bellman dicho control es óptimo para  $\bar{x}(N-1)$ . Dicho lo anterior, ahora el índice de desempeño queda expresado de la siguiente forma para el instante  $(N-2)$ .

$$\begin{aligned} J_{N-2,N}^*(\bar{x}(N-2), \bar{u}(N-2)) = & \min_{\bar{u}(N-1)\bar{u}(N-2)} \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N) + \dots \right. \\ & \dots + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-1) Q \bar{x}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-2) Q \bar{x}(N-2) + \dots \\ & \left. \dots + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-2) \right\}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

El cálculo del mínimo local en el instante  $\bar{u}(N-2)$  es necesario para sustituir del lado derecho de la ecuación de estado (4.5) en términos de  $\bar{x}(N-1)$  y  $\bar{u}(N-2)$ :

$$\begin{aligned} J_{N-2,N}^*(\bar{x}(N-2), \bar{u}(N-2)) = & \min_{\bar{u}(N-2)} \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}^T(N) H \bar{x}(N) + \right. \\ & \frac{1}{2} [f_0 \bar{x}(N-2) + f_1 \bar{u}(N-2)]^T Q [f_0(\bar{x}(N-2)) + f_1(\bar{u}(N-2))] + \\ & \left. + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-2) Q \bar{x}(N-2) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-1) R \bar{u}(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}^T(N-2) R \bar{u}(N-2) \right\}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

La ecuación (4.19) es fuertemente convexa por  $\bar{u}(N-2)$  garantizando un mínimo local. Por lo que, haciendo uso del control subóptimo y aplicano la condición necesaria número 1 en (4.14):

$$\bar{u}^*(N-2) = - [f_1^T Q f_1 + R]^{-1} f_1^T Q f_0(\bar{x}(N-2)).$$

Se procede a generalizar la ecuación de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} J_{N-k,N}^*(\bar{x}(N-k), \bar{u}(N-k)) = & J_{N-k+1,N}^* + \frac{1}{2} \bar{x}^T(N-k) Q \bar{x}(N-k) + \dots \\ & \dots + \bar{u}^T(N-k) R \bar{u}(N-k) \end{aligned}$$

$$\bar{u}^*(N-k) = - [f_1^T W f_1 + R]^{-1} f_1^T W f_0(\bar{x}(N-k))$$

donde  $W = H$   $k = 1$  y  $W = Q$  para  $k = 2, 3, \dots, N$

La segunda condición se establece:

$$\frac{\partial^2 J_{N-k,N}(\bar{x}(N-k), \bar{u}(N-k))}{\partial^2 \bar{u}(N-k)} = [f_1^T(\bar{x}(N-1)) + Hf_1(\bar{x}(N-1)) + R]^{-1}$$

Al cumplir las dos condiciones necesarias se observa que se satisfacen para todo tiempo discreto  $(N-k)$  y se garantiza la existencia de un mínimo para el índice de desempeño (4.9). Por lo que, al realizar la sustitución en las matrices (4.7), (4.8) y (4.11). Se obtiene el control de la forma  $\bar{u}^*(N-k)$  en (4.10).

**Observaciones:**

- Las matrices  $H, Q$  y  $R$  garantizan que el control opere con todo el estado.
- El controlador se construye con base al error de forma inversa, de tal forma que, queda expresado de la siguiente forma:

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} S_{error} = Ss_1(k) - SDes(k) \\ X_{error} = Xx_1(k) - XDes(k) \\ E_{error} = Ee_1(k) - EDes(k) \\ C_{error} = Cc_1(k) - CDes(k) \end{bmatrix}$$

donde las variables del proceso son  $Ss_1(k), Xx_1(k), Ee_1(k), Cc_1(k)$  y los valores de referencia son  $SDes(k), XDes(k), EDes(k), CDes(k)$ .

Este algoritmo es aplicado para controlar el estado de la planta discretizada del bioreactor operación continuo. Cabe mencionar que los parámetros y la planta fueron identificados de forma experimental. El controlador fue programado en software Matlab y Simulink y los resultados se muestran en el capítulo 5.

#### 4.0.5. Regulador Cuadrático Lineal para el bioreactor operación en lote alimentado

El LQR es un control lineal y para aplicarlo a la planta es necesario linealizar el modelo y obtener las matrices A y B, se procede a realizar la linealización de la operación lote alimentado ecuaciones (3.11)-(3.15) obteniendo su representación espacio estado.

$$\dot{x}_L = \begin{bmatrix} \dot{S}_L \\ \dot{X}_L \\ \dot{E}_{tL} \\ \dot{CO}_{2L} \\ \dot{V}_L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 S_L X_L \\ k_2 S_L X_L - k_3 E_{tL} \\ k_4 S_L X_L E_{tL}^n - k_5 X_L \\ k_6 S_L X_L CO_{2L}^m - k_7 X_L \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{F}{V_L} (S_o - S_L) \\ -\frac{F}{V_L} X_L \\ -\frac{F}{V_L} E_{tL} \\ -\frac{F}{V_L} CO_{2L} \\ F \end{bmatrix} u_L \quad (4.20)$$

El cálculo de los puntos de equilibrio se realiza mediante el método Newton-Raphson, debido a que las ecuaciones son simultáneas y hay presencia de exponenciales, por lo tanto, entra en la clasificación de sistema no lineal.

$$x_L^* = \begin{bmatrix} S_L^* \\ X_L^* \\ E_{tL}^* \\ CO_{2L}^* \\ V_L^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.022 \\ 14.02 \\ 56.41 \\ 10.95 \\ 1.3834 \end{bmatrix}$$

Una vez que se tienen los puntos de equilibrio se realiza un cambio de variable, dado que el punto de equilibrio  $\neq 0$  y se determina de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \bar{X}_L &= X_L - X_L^* \\ \bar{S}_L &= S_L - S_L^* \\ \bar{E}_{tL} &= E_{tL} - E_{tL}^* \\ \bar{CO}_{2L} &= CO_{2L} - CO_{2L}^* \\ \bar{V}_L &= V_L - V_L^* \end{aligned}$$

Con la finalidad de obtener un modelo matemático lineal para el sistema no lineal, se considera que las variables solo tienen ligera desviación en alguna condición de operación, y se procede a expandir en series de Taylor alrededor del punto de operación [34] y se calculan las derivadas parciales:

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{x}_L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_1(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_1(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_1(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_1(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_1(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_2(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_2(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_2(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_2(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_2(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_3(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_3(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_3(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_3(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_3(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_4(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_4(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_4(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_4(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_4(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_5(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_5(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_5(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_5(\bar{x}_L) & \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_5(\bar{x}_L) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x}_L = x_L^* \\ \bar{u}_L = u_L^* \end{matrix}$$

$$\frac{\partial f(x)}{\partial \bar{u}_L} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_1(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_2(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_3(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_4(\bar{x}_L) \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_5(\bar{x}_L) \end{bmatrix} \begin{matrix} \bar{x}_L = x_L^* \\ \bar{u}_L = u_L^* \end{matrix}$$

Los resultados de las derivadas parciales son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_1(\bar{x}_L) &= -k_1 \bar{X}_L - \frac{F}{\bar{V}_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_1(\bar{x}_L) &= -k_1 \bar{S}_L \\ \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_1(\bar{x}_L) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_1(\bar{x}_L) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_1(\bar{x}_L) &= -\frac{F}{\bar{V}_L^2} \bar{S}_L \\ \frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_2(\bar{x}_L) &= k_2 \bar{X}_L \\ \frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_2(\bar{x}_L) &= k_2 \bar{S}_L - \frac{F}{\bar{V}_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_2(\bar{x}_L) &= -K_3 \\ \frac{\partial}{\partial \bar{C}\bar{O}_{2L}} f_2(\bar{x}_L) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_2(\bar{x}_L) &= \frac{F}{\bar{V}_L^2} \bar{X}_L \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_3(\bar{x}_L) &= k_4 \bar{X}_L \bar{E}_{tL}^n \\
\frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_3(\bar{x}_L) &= k_4 \bar{S}_L \bar{E}_{tL}^n - k_5 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_3(\bar{x}_L) &= nk_4 \bar{X}_L \bar{S}_L \bar{E}_{tL}^{n-1} - \frac{F}{\bar{V}_L} \\
\frac{\partial}{\partial C\bar{O}_{2L}} f_3(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_3(\bar{x}_L) &= \frac{F}{\bar{V}_L^2} \bar{E}_{tL}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_4(\bar{x}_L) &= k_6 \bar{X}_L C\bar{O}_{2L}^m \\
\frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_4(\bar{x}_L) &= k_6 \bar{S}_L C\bar{O}_{2L}^m - k_7 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_4(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial C\bar{O}_{2L}} f_4(\bar{x}_L) &= mk_6 \bar{X}_L \bar{S}_L C\bar{O}_{2L}^{n-1} - \frac{F}{\bar{V}_L} \\
\frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_4(\bar{x}_L) &= \frac{F}{\bar{V}_L^2} C\bar{O}_{2L}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \bar{S}_L} f_5(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{X}_L} f_5(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{E}_{tL}} f_5(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial C\bar{O}_{2L}} f_5(\bar{x}_L) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial \bar{V}_L} f_5(\bar{x}_L) &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_1(\bar{x}_L) &= \frac{S_L}{V_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_2(\bar{x}_L) &= -\frac{X_L}{V_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_3(\bar{x}_L) &= -\frac{E_{tL}}{V_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_4(\bar{x}_L) &= -\frac{CO_{2L}}{V_L} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{u}_L} f_5(\bar{x}_L) &= 1\end{aligned}$$

Los valores se sustituyen en los puntos de equilibrio para que el sistema quede de la forma:

$$\dot{x} = Ax + Bu \quad (4.21)$$

El sistema linealizado toma la forma (4.21):

$$\dot{\bar{x}}_L = \begin{bmatrix} -0.3775 & -0.0266 & 0 & 0 & -0.3666 \\ 0.1339 & -0.0033 & -0.0006 & 0 & 0.1319 \\ 0.5666 & 0.0409 & -0.0120 & 0 & 0.5306 \\ 0.1079 & 0.0069 & 0 & -0.0123 & 0.1030 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \bar{x}_L + \begin{bmatrix} 28.1755 \\ -10.1345 \\ -40.7763 \\ -7.9153 \\ 1.0000 \end{bmatrix} \bar{u}_L$$

La linealización una vez terminada, el siguiente paso es verificar la controlabilidad del sistema, para ello se calcula la matriz de controlabilidad  $\mathbb{C} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  el rango tiene que ser completo, es decir rango  $n$ :

$$\mathbb{C} = \begin{bmatrix} B & AB & \dots & A^{N-1}B \end{bmatrix}$$

La matriz de controlabilidad al poseer sus columnas linealmente independientes, tiene un rango de 5; por lo tanto, es localmente controlable.

$$\mathbb{C} = \begin{bmatrix} 28.1755 & -10.7345 & 3.9474 & -1.4515 & 0.5337 \\ -10.1345 & 3.9597 & -1.4592 & 0.5366 & -0.1973 \\ -40.7763 & 16.5684 & -6.1185 & 2.2502 & -0.8274 \\ -7.9153 & 3.1709 & -1.1701 & 0.4303 & -0.1582 \\ 1.0000 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

El control  $u$  para el sistema, se obtiene con la aplicación de la ley de Control Regulador Cuadrático Lineal (2.15), donde el valor de  $R$  es definido positivo y este es dado por el usuario y  $P$  es una solución definida positiva de la ecuación algebraica de Riccati [35].

$$A^T P + PA - PBR^{-1}B^T P + Q = 0$$

donde:

$A$  es la matriz  $A$  del sistema

$B$  es la matriz  $B$  del sistema

y  $Q$  es una matriz definida positiva propuesta por el usuario.

$$K^* = R^{-1}B^T P.$$

$$K^* = [k_{11} \quad k_{22} \quad k_{33} \quad k_{44} \quad k_{55}]$$

El cálculo de la matriz  $K^*$  se realiza mediante el software MATLAB 2017, con la instrucción correspondiente al controlador Regulador Cuadrático Lineal.

$$[k \ s \ e] = lqr(A \ B \ Q \ R)$$

Las matrices  $A$  y  $B$  son dadas por la linealización (4.21) se propone la matriz  $Q$

$$Q = \begin{bmatrix} 4.3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 26 \end{bmatrix} \quad y \quad R = [100000]$$

Las ganancias se obtienen mediante el software MATLAB y se implementan en el sistema no lineal, se procede a diseñar un control por realimentación de estado tal que:

$$x(t) \rightarrow x_{ss} \quad \text{cuando} \quad t < \infty$$

donde  $x(t)$  son los estados del sistema que se pueden medir y  $x_{ss}$  es el valor de la referencia que propone el usuario y es constante.

$$e(t) = x(t) - x_{ss}$$

el valor de  $e(t)$  representa el error y con el control se pretende tienda a cero.

Los resultados de la implementación en simulación se muestran en el capítulo 5

#### 4.0.6. Control No lineal de Horizonte Finito para el biorreactor operación en lote alimentado

En la sección 4.0.2 su aplicación es para un biorreactor operación continuo. Ahora, se aplica el mismo algoritmo de control subóptimo pero en este caso para un biorreactor operación lote alimentado para la producción de bioetanol en donde su modelo matemático se expresa en (4.22)

$$\begin{aligned}
 \frac{dS}{dt} &= -K_{A1}SX + \frac{F}{V}(S_0 - S) \\
 \frac{dX}{dt} &= K_{A2}SX - K_{A3}E + \frac{F}{V}(X) \\
 \frac{dE}{dt} &= -K_{A4}SXE^n - K_{A5}X - \frac{F}{V}(E) \\
 \frac{dC}{dt} &= K_{A6}SX - C^m - K_{A7} - \frac{F}{V}(C) \\
 \frac{dV}{dt} &= F
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

donde las variables de estado son  $[S, X, E, C, V]$ , la variable de entrada es  $F$ , mientras que los parámetros son  $K_{A1}, K_{A2}, K_{A3}, K_{A4}, K_{A5}, K_{A6}, K_{A7}$ ,  $n = 0.1 \pm \sigma$  y  $m = 0.07 \pm \sigma$ .

#### 4.0.7. Modelo en tiempo discreto para el bioreactor operación en lote alimentado

El procedimiento que se realiza en la sección 4.0.3 para el bioreactor en continuo, también se aplica para el lote alimentado, en donde, se discretiza con la aproximación de Euler y el tiempo es definido como  $T_s$  y  $t = kT_s$ , la variable  $k = 0, 1, 2, \dots, N$ .

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} S(t) \\ X(t) \\ E(t) \\ C(t) \\ V(t) \end{bmatrix} \approx \frac{1}{T_s} \begin{bmatrix} S(k+1) - S(k) \\ X(k+1) - X(k) \\ E(k+1) - E(k) \\ C(k+1) - C(k) \\ V(k+1) - V(k) \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

La discretización del modelo (4.22), es expresado de la siguiente forma:

$$\bar{x}_A(k+1) = f_2(\bar{x}_A(k)) + f_3(\bar{x}_A(k)\bar{u}_A(k)) \quad (4.24)$$

donde

$$\bar{x}_A(k) = [S(k) \quad X(k) \quad E(k) \quad C(k) \quad V(k)]^T \quad (4.25)$$

$$f_2(\bar{x}_A(k)) = \begin{bmatrix} S(k) + T_s(-k_{A1}S(k)X(k)) \\ X(k) + T_s(k_{A2}S(k)X(k) - k_{A3}E(k)) \\ E(k) + T_s(k_{A4}S(k)X(k)E^{0.09}(k) - k_{A5}E(k)) \\ C(k) + T_s(k_{A6}S(k)X(k)C^{0.07}(k) - k_{A7}X(k)) \\ V(k) \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

y

$$f_3(\bar{u}_A(k)) = \begin{bmatrix} T_s \left( \frac{S_0 - S(k)}{V(k)} \right) \\ -T_s \left( \frac{X(k)}{V(k)} \right) \\ -T_s \left( \frac{E(k)}{V(k)} \right) \\ -T_s \left( \frac{C(k)}{V(k)} \right) \\ T_s \end{bmatrix} \quad \bar{u}_A(k) = [F(k)] \quad (4.27)$$

#### 4.0.8. Epítome del control subóptimo para un biorreactor operación en lote alimentado

En la subsección 4.0.4, se muestra el resumen del desarrollo del algoritmo subóptimo. Ahora, para este caso de estudio haremos el mismo desarrollo para un biorreactor lote alimentado, cabe mencionar que el mapeo es no lineal.

Se propone el siguiente índice de desempeño:

$$Ja = \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N) H_1 \bar{x}_A(N) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \{ \bar{x}_A^T(k) Q_1 \bar{x}_A(k) + \bar{u}_A^T(k) R_1 \bar{u}_A(k) \} \quad (4.28)$$

donde (4.28), mediante una secuencia de controles sujeto a las trayectorias del sistema (4.22)  $H_1, Q_1 \geq 0$  y  $R_1 > 0$  son matrices simétricas,  $t_f = T_s N$  determina el horizonte y  $T_s$  es el periodo de muestreo.

Se pretende encontrar la secuencia de controles que minimicen el índice de desempeño cuadrático (4.28), encontrando un mínimo local para el sistema (4.22).

$$\begin{aligned}
u_{Ali}^*(k-N) = & V(k)q_{44}T_s C(k) \left[ \frac{E(k) - T_s (K_{A5}X(k) - E^{0.09}(k)K_{A4}S(k))}{q_{55}V^2(k)T_s^2 + RV^2(k) + q_{33}E^2(k)T_s^2 + q_{11}S_0T_s^2S(k)} \right. \\
& \left. \frac{X(k)}{+q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k)} \right] - q_{55}V^3(k) \left[ \frac{S(k) - K_{A1}}{q_{55}V^2(k)T_s^2 + RV^2(k)} \right. \\
& \left. \frac{T_s S(k)X(k)}{+q_{33}E^2(k)T_s^2 + q_{11}S_0T_s^2S(k) + q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k)} \right] + V(k)q_{33}E(k) \times \\
& \left[ \frac{E(k) - T_s (K_{A5}X(k) - E^{0.09}(k)K_{A4}S(k))X(k)}{q_{55}V^2(k)T_s^2 + RV^2(k) + q_{33}E^2(k)T_s^2 + q_{11}S_0T_s^2S(k) + q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k)} \right] \\
& + V(k)q_{22}T_s X(k) \left[ \frac{C(k) - T_s (K_{A7}X(k))}{q_{55}V^2(k)T_s^2 + RV^2(k) + q_{33}E^2(k)T_s^2 + q_{11}S_0T_s^2S(k)} \right. \\
& \left. \frac{-K_{A6}C(k)^{0.07}S(k)X(k)}{+q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k)} \right] - V(k)q_{11}T_s (S_0 - S(k)) \left[ \frac{X(k) - T_s (E(k)K_{A3}}{q_{55}V^2(k)T_s^2} \right. \\
& \left. \frac{-K_{A2}S(k)X(k)}{+RV^2(k) + q_{33}E^2(k)T_s^2 + q_{11}S_0T_s^2S(k) + q_{44}C^2(k)T_s^2 + q_{11}T_s^2S^2(k) + q_{22}T_s^2X^2(k)} \right]
\end{aligned} \tag{4.29}$$

donde  $K_{A1}, K_{A2}, K_{A3}, K_{A4}, K_{A5}, K_{A6}, K_{A7}$  son parámetros del sistema y las matrices  $H_1, Q_1$  y  $R_1$  son definidas de la siguiente forma:

$$H_1 = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{55} \end{bmatrix}, \quad Q_1 = \begin{bmatrix} q_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & q_{55} \end{bmatrix} \quad y \quad R_1 = [\text{escalar}] \tag{4.30}$$

Las matrices  $H_1$  y  $Q_1$  son simétricas y semidefinidas positivas, mientras que la matriz  $R_1$  es definido positivo.

El desarrollo del algoritmo tiene como objetivo encontrar el valor óptimo para el primer paso y se considera que el control  $\bar{u}^*(k)_{Ali}$  es igual a cero, dado que el índice de desempeño

no depende de la ley de control  $\bar{u}_A(k)$  de acuerdo al sistema (4.24) dado que  $\bar{x}_A(N)$  depende únicamente del control  $\bar{u}_A(N-1)$ . Es por esto, que el índice de desempeño  $Ja_{N,N}^*$  es el valor óptimo de  $Ja$  en el paso  $N$ . Para (4.28) se desarrollan los pasos de  $N-1$  a  $N$  para el control  $\bar{u}_A(k)$ .

$$Ja_{N-1,N}^* = \min_{\bar{u}_A(N-1)} \left\{ J_{N,N}^* + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N-1) Q_1 \bar{x}_A(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}_1^T(N-1) R_1 \bar{u}_1(N-1) \right\} \quad (4.31)$$

En la ecuación (4.24), el estado  $\bar{x}_A(N)$  depende del control  $\bar{u}_A(N-1)$ , por lo que, si se sustituye de lado derecho el sistema (4.29) queda expresada en la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} Ja_{N-1,N}^*(\bar{x}_A(N-1), \bar{u}_A(N-1)) &= \min_{\bar{u}_A(N-1)} \left\{ \frac{1}{2} [f_2(\bar{x}_A(N-1)) + f_3(\bar{u}_A(N-1))]^T \dots \right. \\ &\quad \dots \times H_A [f_2(\bar{x}_A(N-1)) + f_3(\bar{u}_A(N-1))] \\ &\quad \dots + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N-1) Q_A \bar{x}_A(N-1) + \frac{1}{2} \bar{u}_A^T(N-1) \\ &\quad \left. \times R_A \bar{u}_A(N-1) \right\} \end{aligned} \quad (4.32)$$

El índice de desempeño (4.32) ahora solo depende de valores en  $\bar{x}_A(N-1)$  y  $\bar{u}_A(N-1)$  y como  $\bar{x}_A(N-1)$  depende de  $\bar{u}_A(N-2)$ , solo se puede encontrar un mínimo con respecto a  $\bar{u}_A(N-1)$ . Es importante mencionar que el índice de desempeño en la expresión mostrada anteriormente denota que es fuertemente convexa y es necesario considerar las condiciones suficientes para garantizar un mínimo local [35].

$$\frac{\partial Ja_{N-1,N}}{\partial \bar{u}_A(N-1)} = 0 \quad (4.33)$$

Con la primera condición necesaria establecida en (4.33), se determina el siguiente control

$$\bar{u}_A^*(N-1) = - [f_3^T H_1 f_3 + R_1]^{-1} f_3^T H_1 f_2(\bar{x}_A(N-1)) \quad (4.34)$$

Ahora, se determina que existe la inversa para  $[f_3^T H_1 f_3 + R_1]$ , dado que la matriz  $R_A$  es positiva. La segunda condición necesaria se define de la siguiente forma:

$$\frac{\partial^2 Ja_{N-1,N}(\bar{x}_A(N-1), \bar{u}_A(N-1))}{\partial^2 \bar{u}_A(N-1)} > 0 \quad (4.35)$$

La ecuación (4.35) también la podemos indicar de la siguiente forma

$$\frac{\partial^2 Ja_{N-1,N}(\bar{x}_A(N-1), \bar{u}_A(N-1))}{\partial^2 \bar{u}_A(N-1)} = [f_3^T H_1 f_3 + R_1] \quad (4.36)$$

Por lo tanto, la ecuación (4.34) se determina que es óptima localmente. Ahora, para calcular el instante  $N - 2$ , el control  $\bar{u}_A^*(N - 1)$  es el valor óptimo en el instante  $N - 1$  y por la propuesta de optimalidad de R. Bellman dicho control es óptimo para  $\bar{x}_A(N - 1)$ . Dicho lo anterior, ahora el índice de desempeño queda expresado de la siguiente forma para el instante  $(N - 2)$ :

$$\begin{aligned} Ja_{N-2,N}^*(\bar{x}_A(N - 2), \bar{u}_A(N - 2)) = & \min_{\bar{u}_A(N-1)\bar{u}_A(N-2)} \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N) H_1 \bar{x}_A(N) + \dots \right. \\ & \dots + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N - 1) Q_1 \bar{x}_A(N - 1) + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N - 2) Q_1 \bar{x}_A(N - 2) + \dots \\ & \left. \dots + \frac{1}{2} \bar{u}_A^T(N - 1) R_1 \bar{u}_A(N - 1) + \frac{1}{2} \bar{u}_A^T(N - 2) \right\}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

En el cálculo del mínimo local en el instante  $\bar{u}_A(N - 2)$  es necesario sustituir del lado derecho de la ecuación de estado (4.24) en términos de  $\bar{x}_A(N - 1)$  y  $\bar{u}_A(N - 2)$ :

$$\begin{aligned} Ja_{N-2,N}^*(\bar{x}_A(N - 2), \bar{u}_A(N - 2)) = & \min_{\bar{u}_A(N-2)} \left\{ \frac{1}{2} \bar{x}_A(N) H_1 \bar{x}_A(N) + \right. \\ & \frac{1}{2} [f_2 \bar{x}_A(N - 2) + f_3 \bar{u}_A(N - 2)]^T Q_1 [f_3(\bar{x}_A(N - 2)) + f_3(\bar{u}_A(N - 2))] + \\ & \left. + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N - 2) Q_1 \bar{x}_A(N - 2) + \frac{1}{2} \bar{u}_A^T(N - 1) R_1 \bar{u}_A(N - 1) + \frac{1}{2} \bar{u}_A^T(N - 2) R_1 \bar{u}_A(N - 2) \right\}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

La ecuación (4.38) es fuertemente convexa respecto a  $\bar{u}_A(N - 2)$  garantizando un mínimo local. Por lo que, haciendo uso del control subóptimo y aplicano la condición necesaria número 1 en (4.33):

$$\bar{u}_A^*(N - 2) = - [f_3^T Q_1 f_3 + R_1]^{-1} f_3^T Q_1 f_2 (\bar{x}_A(N - 2)).$$

Se procede a generalizar la ecuación de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} Ja_{N-k,N}^*(\bar{x}_A(N - k), \bar{u}_A(N - k)) = & Ja_{N-k+1,N}^* + \frac{1}{2} \bar{x}_A^T(N - k) Q_1 \bar{x}_A(N - k) \\ & \dots + \bar{u}_A^T(N - k) R_1 \bar{u}_A(N - k) \\ \bar{u}_A^*(N - k) = & - [f_3^T Z f_3 + R_1]^{-1} f_3^T Z f_3 (\bar{x}_A(N - k)) \\ & \text{donde } Z = H \text{ } k = 1 \text{ y } Z = Q_A \text{ para } k = 2, 3, \dots, N. \end{aligned}$$

Para la segunda condición se establece:



$$\frac{\partial^2 J_{a_{N-k,N}}(\bar{x}_A(N-k), \bar{u}_A(N-k))}{\partial^2 \bar{u}_A(N-k)} = [f_3^T H_1 f_3 + R_1]$$

Al cumplir las dos condiciones necesarias se observa que se satisfacen para todo tiempo discreto  $(N-k)$  y se garantiza la existencia de un mínimo para el índice de desempeño que establece el enfoque de la programación dinámica (4.9). Por lo que, al realizar la sustitución en las matrices (4.26), (4.27) y (5.7). Se obtiene el control de la forma  $\bar{u}_A^*(N-k)$  en (4.10).

### Observaciones:

- Las matrices  $H_1$ ,  $Q_1$  y  $R_1$  garantizan que el controlador sea una realimentación de estado.
- El controlador se construye con base al error, de tal forma que, queda expresado de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} S_{Aerror} & = & Ss_A(k) - SDes_A(k) \\ X_{Aerror} & = & Xx_A(k) - XDes_A(k) \\ E_{Aerror} & = & Ee_A(k) - EDes_A(k) \\ C_{Aerror} & = & Cc_A(k) - CDes_A(k) \\ V_{Aerror} & = & Ff_A(k) - FDes_A(k) \end{bmatrix}$$

donde las variables del proceso son  $Ss_A(k)$ ,  $Xx_A(k)$ ,  $Ee_A(k)$ ,  $Cc_A(k)$ , y  $Ff_A(k)$ , mientras que los valores de referencia son  $SDes_A(k)$ ,  $XDes_A(k)$ ,  $EDes_A(k)$ ,  $CDes_A(k)$  y  $FDes_A(k)$ .

Este algoritmo es aplicado para controlar el estado de la planta discretizada del bio-reactor operación en lote alimentado. Cabe mencionar que los parámetros y la planta fueron identificados de forma experimental. El controlador fue programado en software Matlab-Simulink y los resultados se muestran en el capítulo 5.



# Capítulo 5

## Resultados de simulación

### 5.1. Intensificación de procesos (Lazo abierto)

En esta sección se harán diversas simulaciones para encontrar los resultados que alcancen mayor concentración de etanol en lazo abierto para las diferentes operaciones.

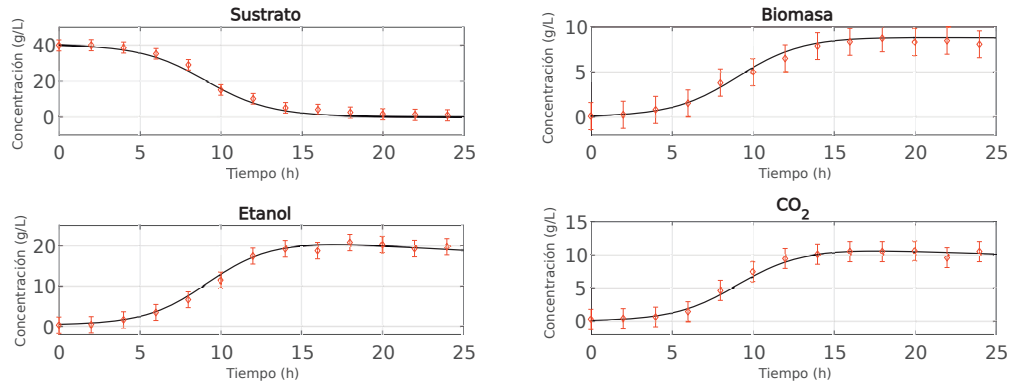
#### 5.1.1. Operación por lote

Las ecuaciones que describen el comportamiento de la planta son descritas de (3.5)-(3.8), sus condiciones iniciales son [40, 0.10, 0.49, 0.1] y con los parámetros siguientes.

$$\begin{aligned} k_1 &= \pm 0.055 & k_4 &= \pm 0.025000 & k_7 &= \pm 0.0095 \\ k_2 &= \pm 0.01226 & k_5 &= \pm 0.025500 & n &= .09 \\ k_3 &= \pm 0.00055 & k_6 &= \pm 0.014961 & m &= .03 \end{aligned}$$

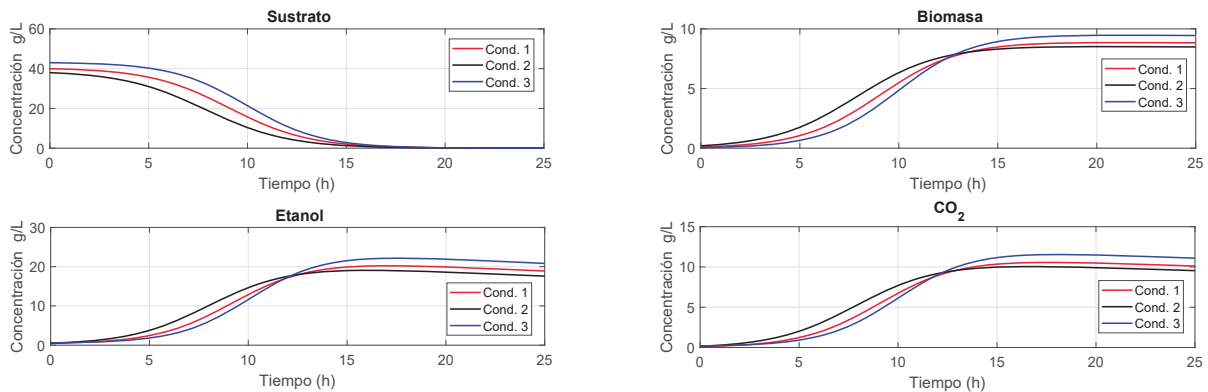
donde  $X$  es la biomasa en el tanque de fermentación y las  $k_1$   $k_2$   $k_3$   $k_4$   $k_5$   $k_6$  y  $k_7$  son constantes,  $S$  es el sustrato,  $E_t$  es el etanol y el  $CO_2$  es el dióxido de carbono.

Figura 5.1: Reactor operación por lote



En la Figura 5.1 se observa que cuando el sustrato se ha consumido, el crecimiento de la biomasa alcanza un máximo de  $8.834 \frac{g}{L}$ , el etanol una producción de  $18.8964 \frac{g}{L}$  y una generación de  $10.1103 \frac{g}{L}$  para el  $CO_2$ . También se puede observar que se agregaron barras de error a los datos experimentales para calcular la desviación estandar que hay en el modelado matemático. [13, 36, 37]

Figura 5.2: Condiciones óptimas de operación



En la Figura 5.2 se propusieron algunas condiciones iniciales, con el fin de obtener la mayor concentración de bioetanol. En la Tabla 5.1 se denotan los valores alcanzados para las diferentes condiciones iniciales.

Tabla 5.1: Condiciones iniciales y su comparación entre concentraciones.

Condiciones iniciales	Concentraciones g/L			
	Sustrato	Biomasa	Etanol	CO <sub>2</sub>
Cond. 1 [40, 0.10, 0.49, 0.1]	0.01639	8.8340	18.8964	10.1103
Cond. 2 [38, 0.20, 0.5, 0.15]	0.0120	8.4884	17.5944	9.5400
Cond. 3 [43, 0.05, 0.6, 0.2]	0.0162	9.4452	20.8249	11.0894

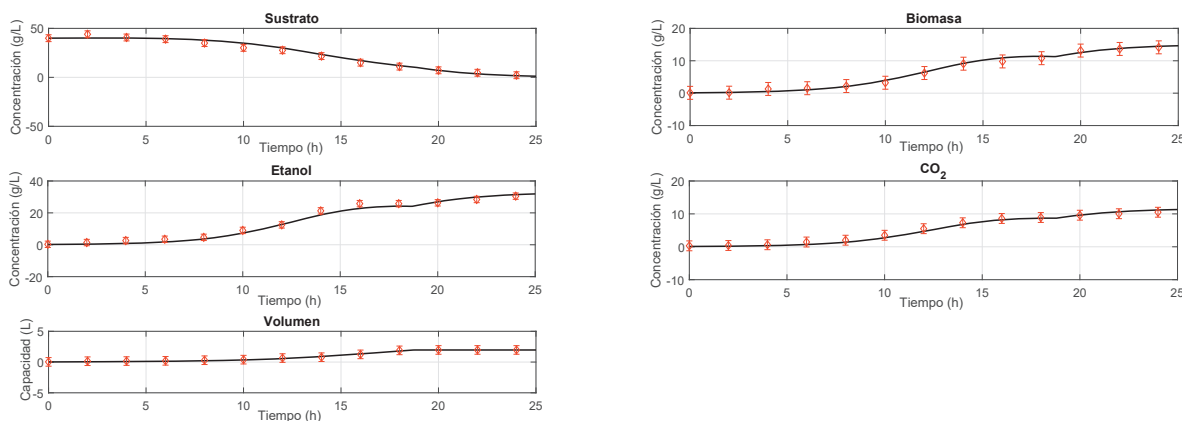
de acuerdo a la Tabla 5.1 se puede concluir que si se opera con las condiciones iniciales opción 3 se alcanza una mayor concentración de bioetanol.

### 5.1.2. Operación en lote alimentado

En las expresiones (3.11)-(3.15) se describen los comportamientos de las cinéticas de las concentraciones, los parámetros correspondientes se muestran a continuación y sus condiciones iniciales son [40, 0.11, 0.2, 0.1, 0.02], mientras que  $\omega$  se define como la desviación estandar del 10 y 15 %.

$$\begin{aligned}
 k_1 &= 0.0260 \pm \omega & k_4 &= .01600 \pm \omega & k_7 &= .00095 \pm \omega & F &= 0.018 \pm \omega \\
 k_2 &= .00955 \pm \omega & k_5 &= .00045 \pm \omega & n &= 0.09 \pm \omega \\
 k_3 &= .00055 \pm \omega & k_6 &= .00651 \pm \omega & m &= 0.07 \pm \omega
 \end{aligned}$$

Figura 5.3: Reactor operación Lote alimentado

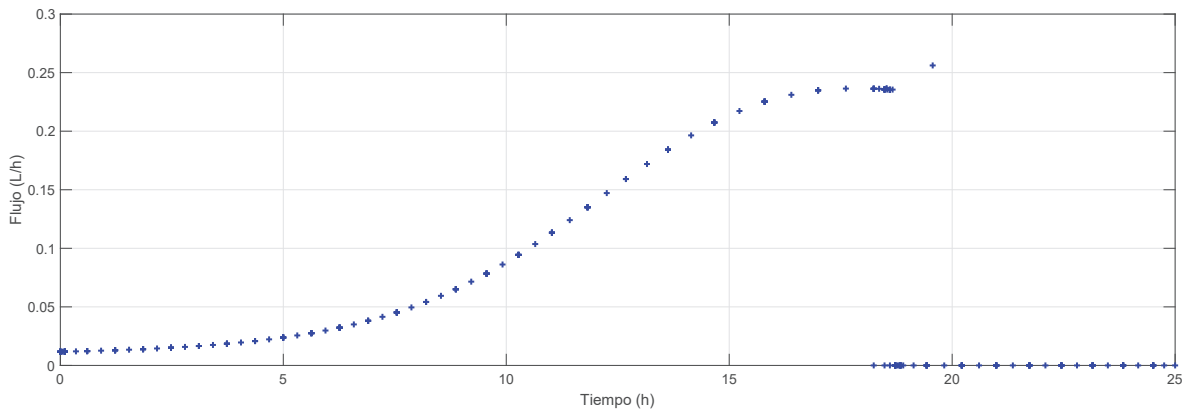


En la Figura 5.3 se aprecia que el sustrato una vez que se consume, la biomasa alcanza un máximo de  $14.64 \frac{g}{L}$ , el etanol una producción de  $31.88 \frac{g}{L}$  y una generación de  $11.32 \frac{g}{L}$  para el  $CO_2$ , por consecuencia a la operación de este equipo es necesario que se tengan restricciones para el buen funcionamiento una de ellas es no pasar la capacidad límite del volumen que es de  $2L$  y se agregaron las barras de error para generalizar cuan precisa es la medición.

$$\text{Perfil 1 } Fu = F_0 + 1.0 \times X \times F \quad (5.1)$$

De acuerdo a (5.1) se procede a graficar el perfil de flujo en la Figura 5.4, donde se percibe con respecto al tiempo en que momento se debe cerrar la válvula y con aproximadamente  $18h$ , se deja de alimentar al biorreactor dado que ya esta a su capacidad permitida de operación, caso contrario si se continuara alimentando el biorreactor tendría un derrame.

Figura 5.4: Perfil de flujo 1 lote alimentado



$$\text{Perfil 2 } Fu = 0.021 \times \exp(-k_1 \times S) \times \frac{F}{0.046} \quad (5.2)$$

$$\text{Perfil 3 } Fu = 0.21 \times \exp(-k_1 \times S) \times \frac{F}{0.046} \quad (5.3)$$

Se realiza un supuesto de los perfiles de flujo 2 y 3 descritas en las ecuaciones (5.2) y (5.3). A continuación se muestran las Figuras 5.5 y 5.6. En la Figura 5.5 se percibe que el flujo no alcanza la capacidad de volumen del biorreactor en  $25h$  y tampoco supera las concentraciones máximas de los biorreactores lote y continuo, mientras que para la Figura 5.6 se determina que con esa estrategia en el tiempo establecido de reacción no alcanza la concentración máxima de etanol. Estos resultados son comparados con literatura en

[38] y [37]. En la Tabla 5.2 se hace la comparación de los tres perfiles de flujo, con las diferentes concentraciones de las variables. Se determina que la mejor estrategia es el perfil 1, alcanzando la capacidad casi en su totalidad del biorreactor con una producción de bioetanol de  $31.8879 \frac{g}{L}$ .

Figura 5.5: Perfil de flujo 2 lote alimentado

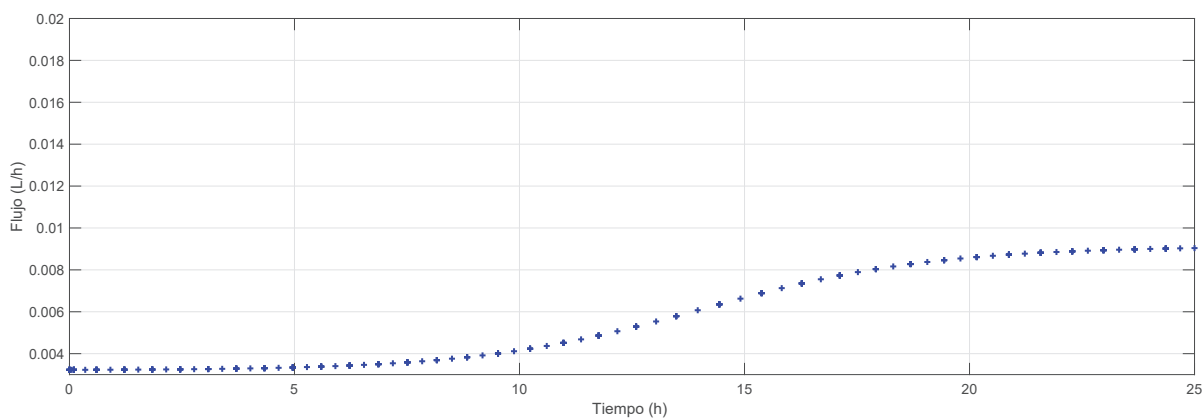


Figura 5.6: Perfil de flujo 3 lote alimentado

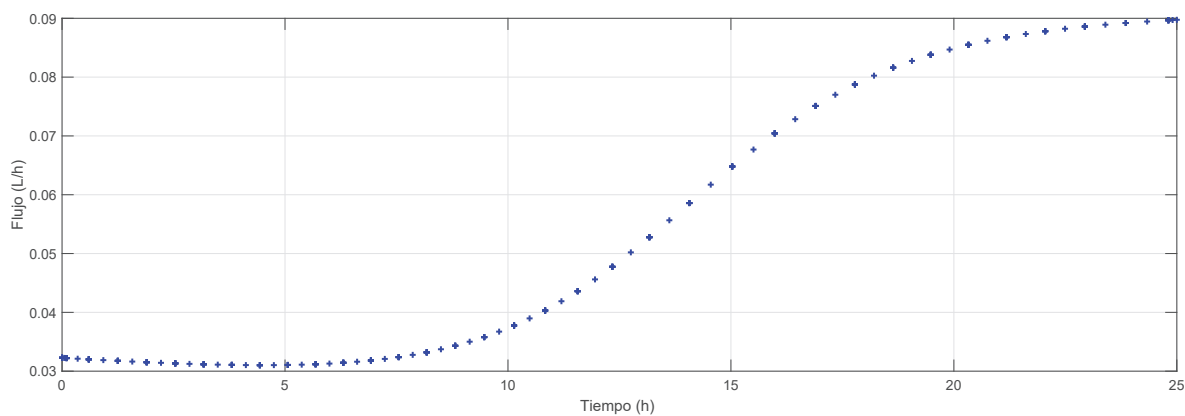


Tabla 5.2: Comparación de concentraciones de las diferentes estrategias de perfil

Perfil de	Concentraciones g/L					
	flujo	Sustrato	Biomasa	Etanol	CO <sub>2</sub>	Volumen (L)
Perfil 1	1.022	14.02	56.41	10.95	1.3834	
Perfil 2	0.3870	14.1669	29.8626	10.6770	0.1643	
Perfil 3	0.6608	11.7000	25.1330	8.9426	1.4120	

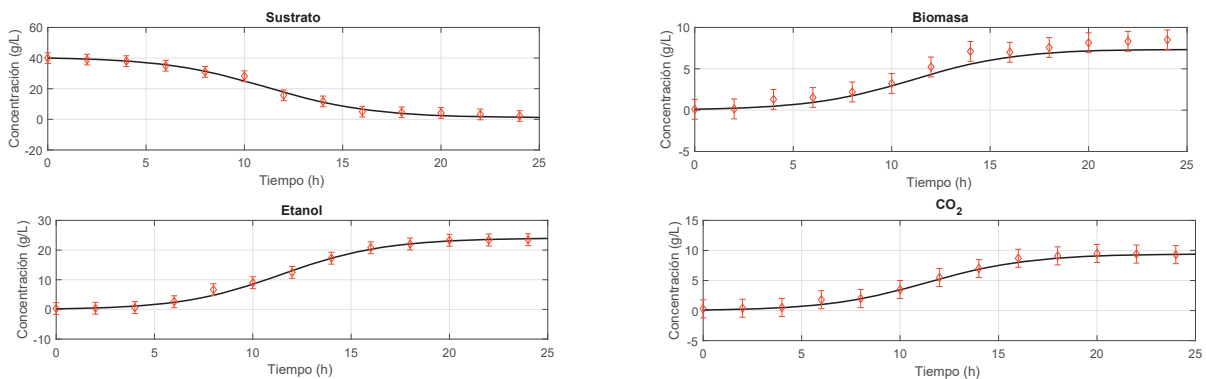
### 5.1.3. Operación en continuo

Las ecuaciones (3.19)-(3.22) modelan al sistema para el reactor operación continua, de acuerdo al modelado se puede decir que es un sistema no lineal y los respectivos parámetros se denotan a continuación, las condiciones iniciales de operación son  $[40, 0.11, 0.2, 0.1]$ , mientras que  $\omega$  se define como la desviación estandar del 10 y 15 %.

$$\begin{aligned}
 k_1 &= 0.0500 \pm \omega & k_4 &= 0.0250 \pm \omega & k_7 &= .00095 \pm \omega \\
 k_2 &= .00955 \pm \omega & k_5 &= .00055 \pm \omega & n &= 0.090 \pm \omega \\
 k_3 &= .00055 \pm \omega & k_6 &= 0.0110 \pm \omega & m &= 0.070 \pm \omega
 \end{aligned}$$

donde  $X$  es la biomasa en el tanque de fermentación,  $D = \frac{F}{V}$  es la tasa de dilución y las  $k_1 k_2 k_3 k_4 k_5 k_6$  y  $k_7$  son constantes,  $S$  es el sustrato,  $E_t$  es el etanol y el  $CO_2$  es el dióxido de carbono.

Figura 5.7: Reactor operación continuo

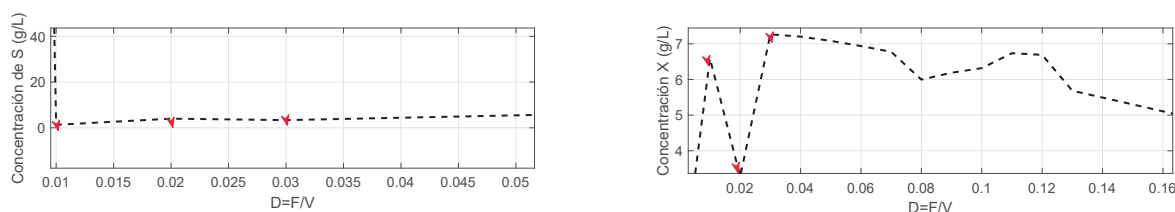




En la Figura 5.7 se observa que, cuando el sustrato se ha consumido, el crecimiento de la biomasa alcanza un máximo de  $7.3172 \frac{g}{L}$ , el etanol una producción de  $23.9113 \frac{g}{L}$  y una generación de  $9.3716 \frac{g}{L}$  para el  $CO_2$ . También se puede observar que se agregaron barras de error a los datos experimentales para calcular la desviación estandar que hay en el modelo matemático.

El recorrido que se hace en la simulación sirve para encontrar los flujos continuos que son factibles para operar en el bioreactor, de forma que, permite encontrar las máximas concentraciones de los productos, sin implementar una señal de control.

Figura 5.8: Flujos óptimos de operación



En la Figura 5.8 se tomaron las tasas de dilución con los valores más altos de biomasa ya que, se sabe que a mayor concentración de biomasa mayor es la producción de bioetanol. En la Tabla 5.3 se denotan los valores alcanzados para las diferentes concentraciones de las variables.

Tabla 5.3: Comparación entre concentraciones y las tasas de dilución

Tasa de dilución	Concentraciones $g/L$			
	Sustrato	Biomasa	Etanol	$CO_2$
Tasa 1 [0.01]	1.285	7.316	23.91	9.37
Tasa 2 [0.02]	2.3834	7.1049	23.3634	9.1436
Tasa 3 [0.03]	3.4975	6.8928	22.7698	8.9020

se concluye que a mayor tasa de dilución no siempre se aumentará la concentración de etanol; Además, se debe cumplir con las restricciones de operación entre ellas la capacidad del biorreactor.

## 5.2. Estrategias de control óptimo

### 5.2.1. LQR para el bioreactor en continuo

Como se describió en detalle en la subsección 4.0.1 ahora se procede a realizar las simulaciones del controlador con sus respectivas ganancias y matrices propuestas.

donde las matrices propuestas son:

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{9}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{10} \end{bmatrix} \quad y \quad R = [10000]$$

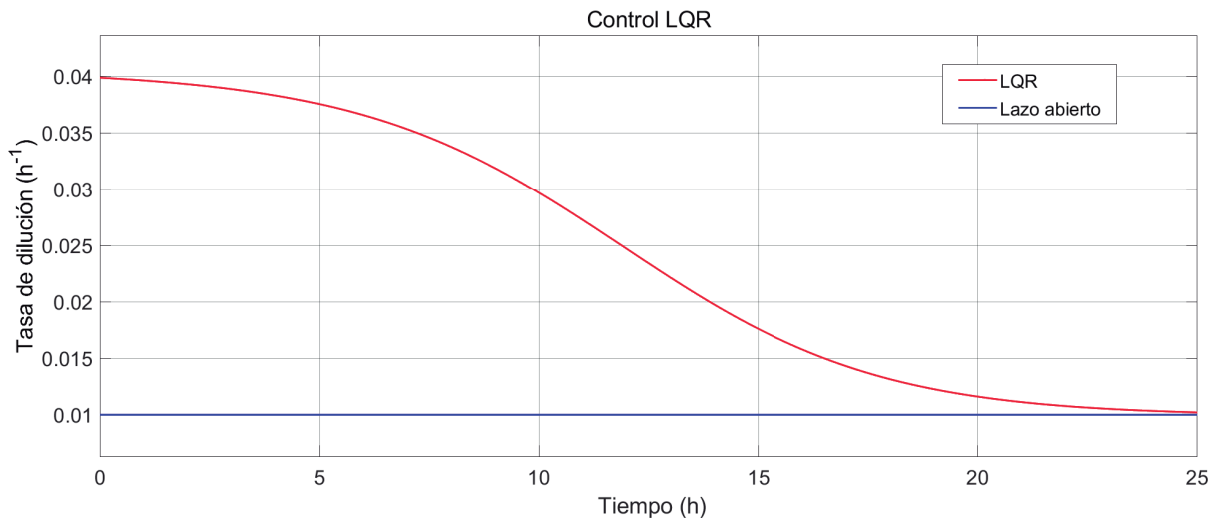
las ganancias dadas por el software MATLAB son las siguientes:

$$k = [0.0014 \quad 0.0001 \quad 0.0008 \quad 0.0005]$$

estas ganancias obtenidas se implementan en el sistema no lineal para verificar que las mismas permiten llegar al sistema a su punto de equilibrio en un tiempo menor, se diseña un control por realimentación de estado tal que:

En la Figura 5.9 se muestra el desempeño del controlador implementado en la planta no lineal operación continuo.

Figura 5.9: Implementación del LQR biorreactor en continuo



Ahora se procede a realizar los cálculos de los errores para verificar que el desempeño del controlador sea adecuado y satisfaga los objetivos planteados en la sección 1.4. Los errores son calculados de forma indirecta:

$$e = VP - SP \quad (5.4)$$

Se hace uso de (5.4) para obtener las concentraciones alcanzadas de la planta y se determinan en la siguiente tabla:

Tabla 5.4: Resultados de las estrategias de alimentación para la operación en continuo

Concentración	Estrategia $g/L$		Error
	IP	LQR	
Sustrato	1.285	1.517	0.232
Biomasa	7.316	7.261	0.055
Etanol	23.91	23.8	0.105
CO <sub>2</sub>	9.37	9.322	0.048

En la Tabla (5.4) se muestran las diferentes concentraciones alcanzadas con el control lineal, estas concentraciones no alcanzan al lazo abierto, es decir, los errores no convergen a cero, por lo tanto, se concluye que se debe utilizar otro controlador que permita mejorar el desempeño del mismo alcanzando una mayor concentración de etanol.

### 5.2.2. Control subóptimo para el bioreactor en continuo

Como se concluye en la subsección 5.2.1, el desempeño de este controlador no es el adecuado y se parte de la idea de ahora implementar un control no lineal. Dicha estrategia se espera pueda mejorar el desempeño del mismo, aplicando el desarrollo del algoritmo que se describe en 4.0.2.

El horizonte del índice de desempeño definido en (4.9), se fija en  $N = 25$ , por lo que, corresponde un tiempo de  $25 h$ , con un tiempo de muestreo de  $1 h$ . Se eligen los valores de las matrices  $H$ ,  $Q$  y  $R$ :

$$H = \begin{bmatrix} 0.023 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0015 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.00036 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.0023 \end{bmatrix}, Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{49}{25000} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{10000} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{8}{10000} \end{bmatrix} \text{ y } R = [10000] \quad (5.5)$$

Tabla 5.5: Resultados de las estrategias de alimentación con IP y lazo cerrado

Concentración	IP	Subóptimo $g/L$	
		$T = 24h$	$T = 25h$
Sustrato	1.285	1.289	1.21
Biomasa	7.316	7.477	7.478
Etanol	23.91	24.42	24.49
CO <sub>2</sub>	9.37	9.659	9.675

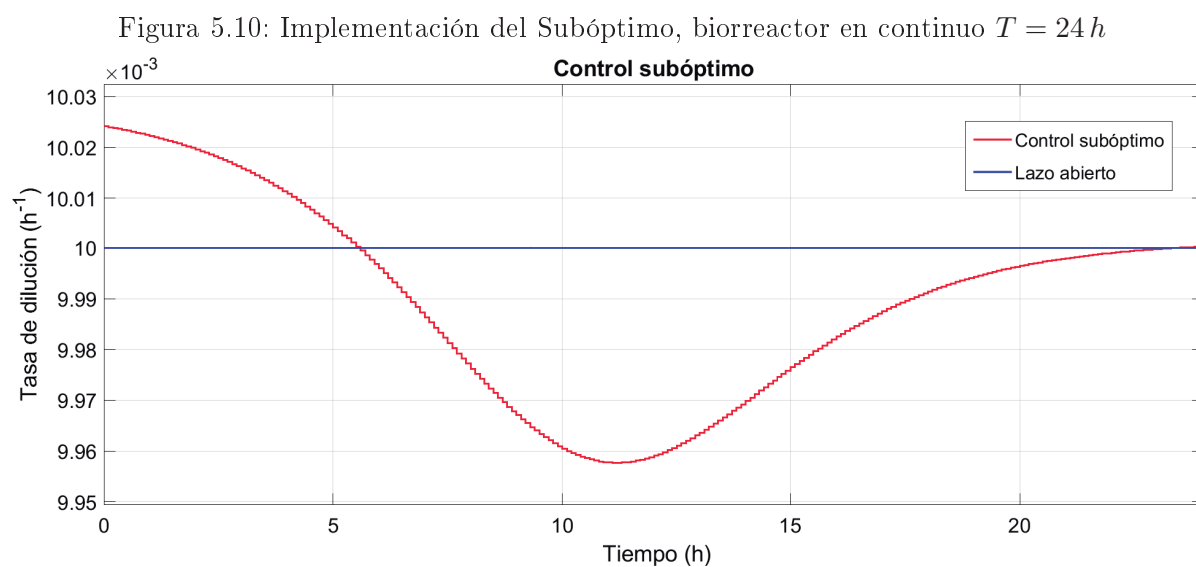
Ahora, se procede a realizar el cálculo de los errores en estado estacionario para el sistema de la forma (5.4). Se muestran los resultados en la Tabla 5.6

Tabla 5.6: Errores calculados de las estrategias de alimentación en lazo cerrado

Concentración	Subóptimo	
	$T = 24h$	$T = 25h$
Sustrato	0.0658	0.1447
Biomasa	0.0083	0.0091
Etanol	0.4247	0.4889
CO <sub>2</sub>	0.0785	0.0949

En la Tabla 5.5 se muestran las concentraciones alcanzadas con el controlador, de tal forma, que se puede visualizar que en un tiempo de  $24h$  el sistema alcanza los estacionarios y en  $25h$  la mayor concentración de etanol. Mientras que en la Tabla 5.6, se muestran los errores calculados.

En la Figura 5.10 se muestra la estrategia encontrada con el control subóptimo para un tiempo de simulación de  $24h$ .



Ahora, se muestra el desempeño del controlador con un tiempo de  $25 h$ , en este tiempo es cuando se alcanza una máxima concentración de bioetanol por debajo de la tasa de dilución utilizada en lazo abierto.

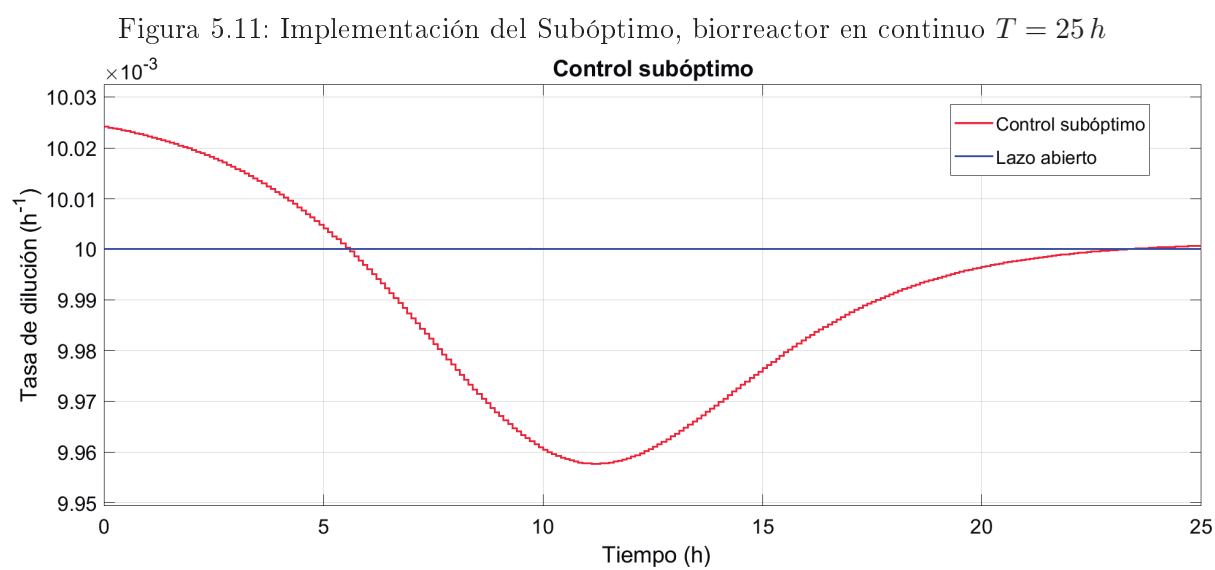
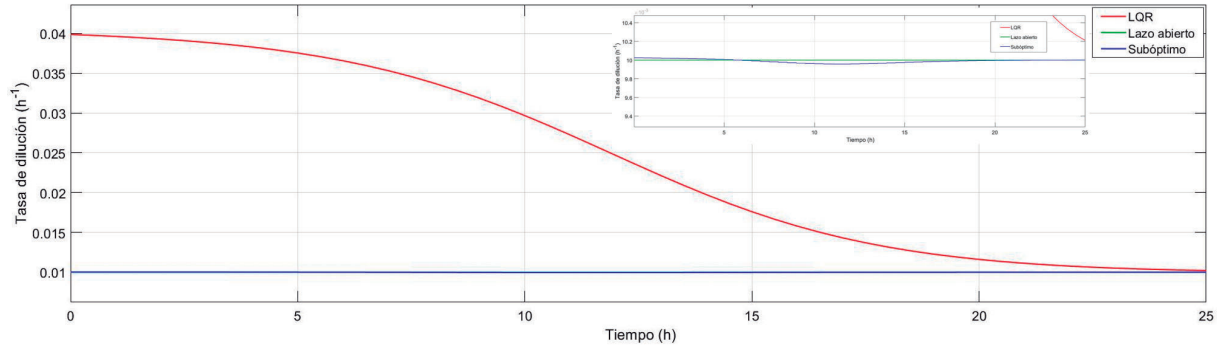


Figura 5.12: Comparación de las estrategias de alimentación para el biorreactor continuo  $T = 25$  h

Los resultados de las simulaciones se encuentran en las Figuras 5.13, 5.14, 5.15 y 5.16 se realiza la comparación gráfica de las estrategias de control óptimo y el lazo cerrado para el bioreactor continuo.

Figura 5.13: Comparación de las estrategias de alimentación para el sustrato

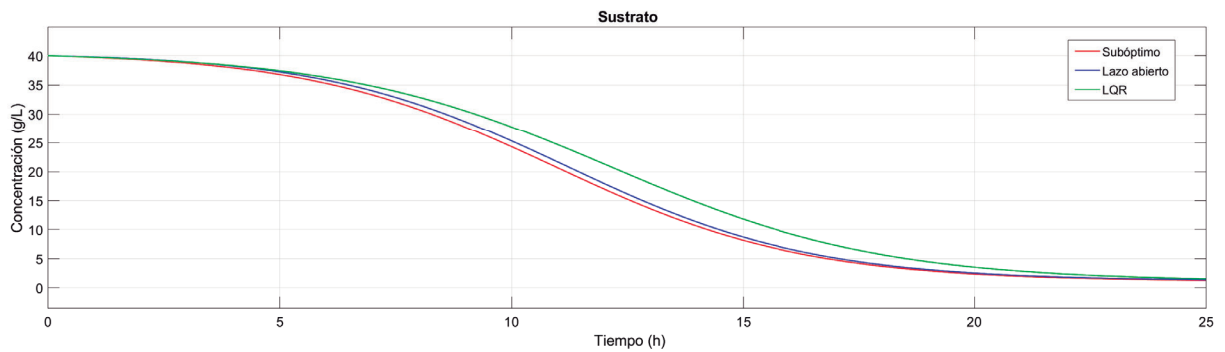


Figura 5.14: Comparación de las estrategias de alimentación para la biomasa

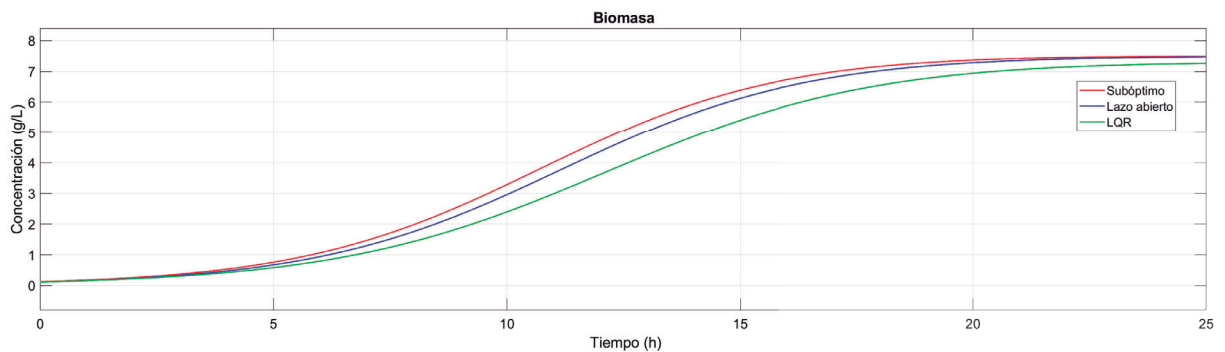
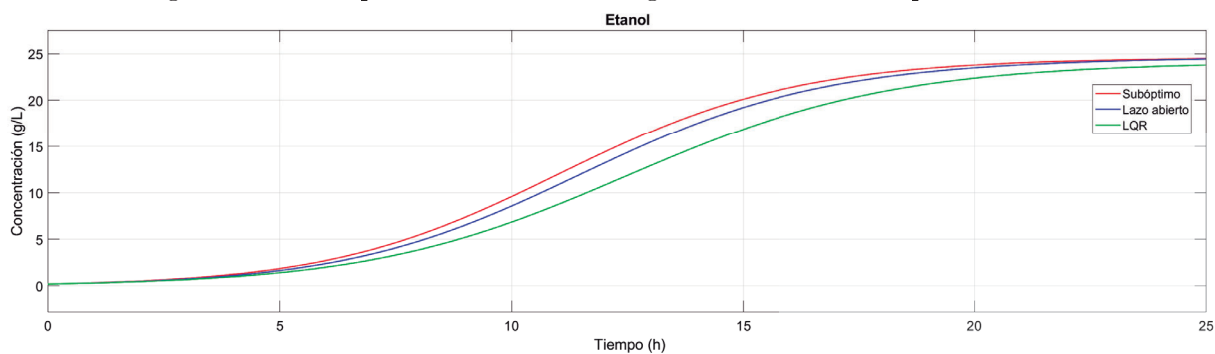
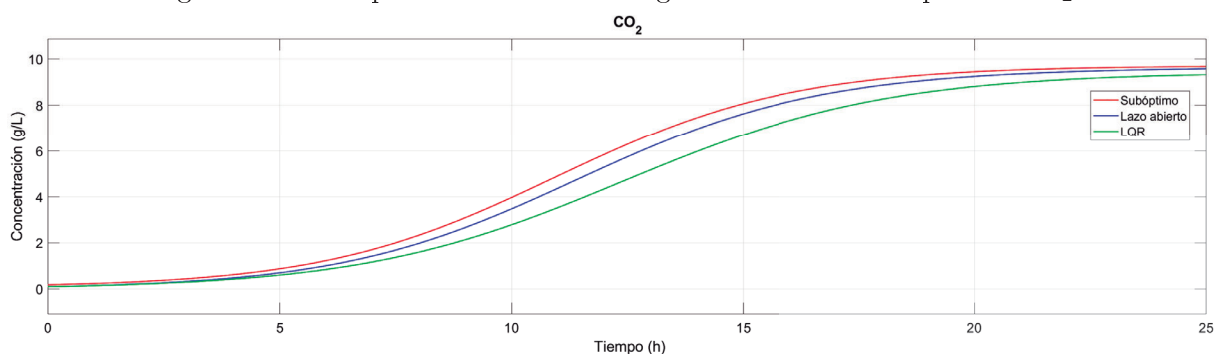


Figura 5.15: Comparación de las estrategias de alimentación para el etanol

Figura 5.16: Comparación de las estrategias de alimentación para el CO<sub>2</sub>

Los resultados de los errores se muestran en las Figuras 5.17, 5.18, 5.19 y 5.20, se logra percibir que los errores son pequeños, y se encuentran en las Tablas 5.4 y 5.5.

Figura 5.17: Señal de error para el sustrato

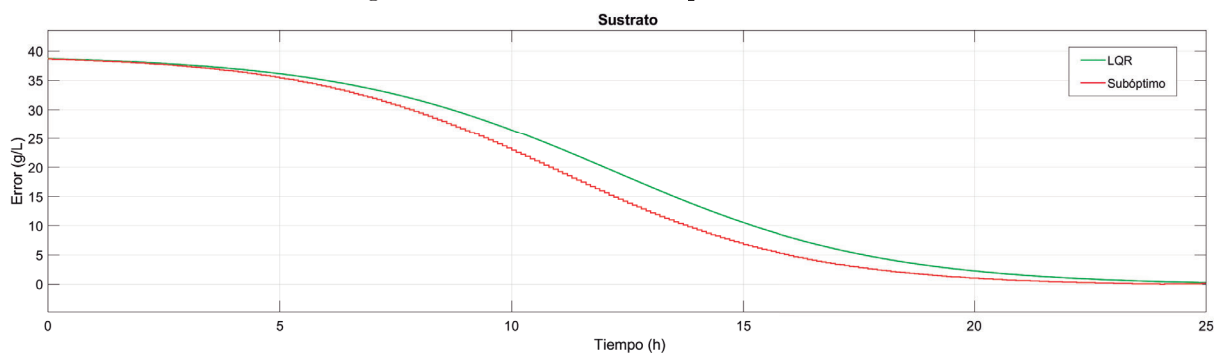


Figura 5.18: Señal de error para la biomasa

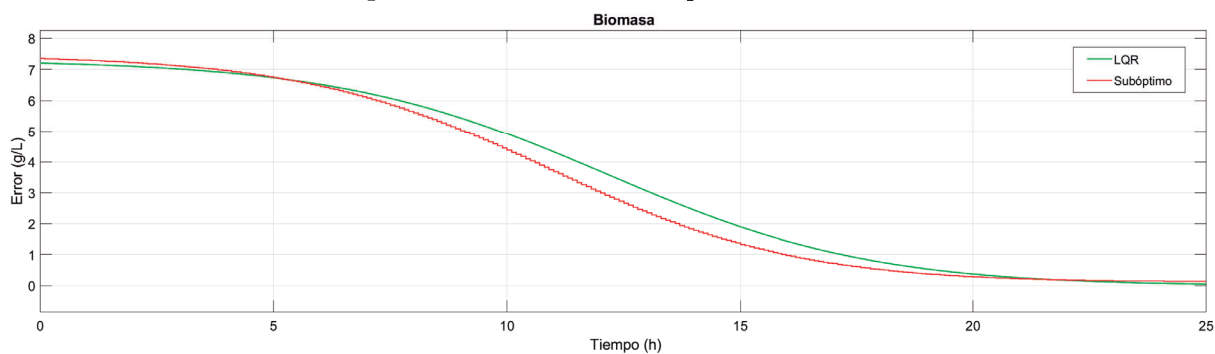
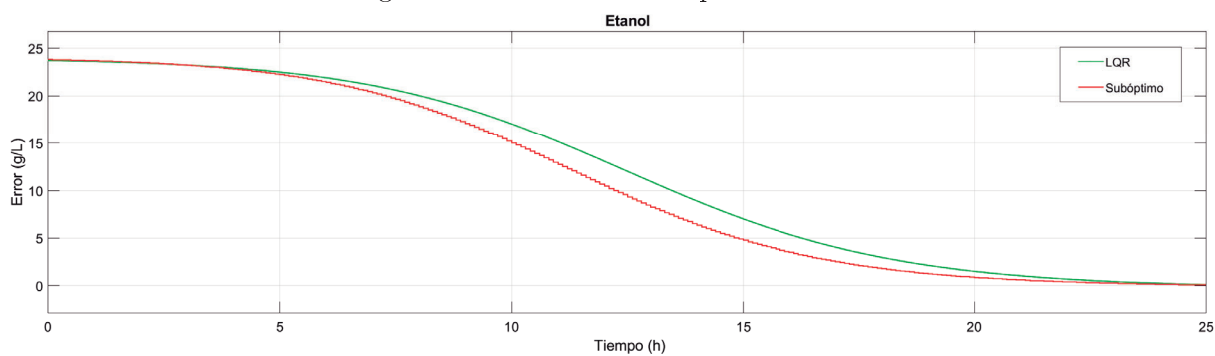
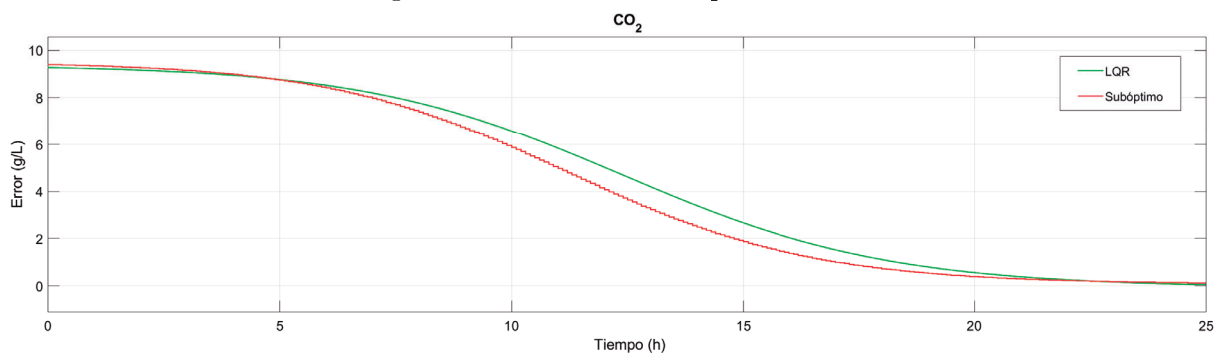


Figura 5.19: Señal de error para el etanol

Figura 5.20: Señal de error para el CO<sub>2</sub>

Se concluye que este controlador no lineal tiene mejor desempeño contra el control Regulador Cuadrático Lineal, debido a que este control opera con el sistema no lineal y



no se eliminan las no linealidades de la planta. Además, de propiciar un alcance de los estacionarios en una hora antes en comparación con el lazo abierto, de igual manera se visualiza la reducción de la cantidad de flujo para producir las mismas concentraciones que el lazo abierto.

### 5.2.3. LQR para el bioreactor en lote alimentado

Como se describe en la subsección 4.0.5 el desarrollo matemático del LQR. Ahora, se procede a realizar las simulaciones del controlador con sus respectivas ganancias y matrices propuestas.

donde las matrices propuestas son:

$$Q = \begin{bmatrix} 4.3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 26 \end{bmatrix} \quad y \quad R = [100000]$$

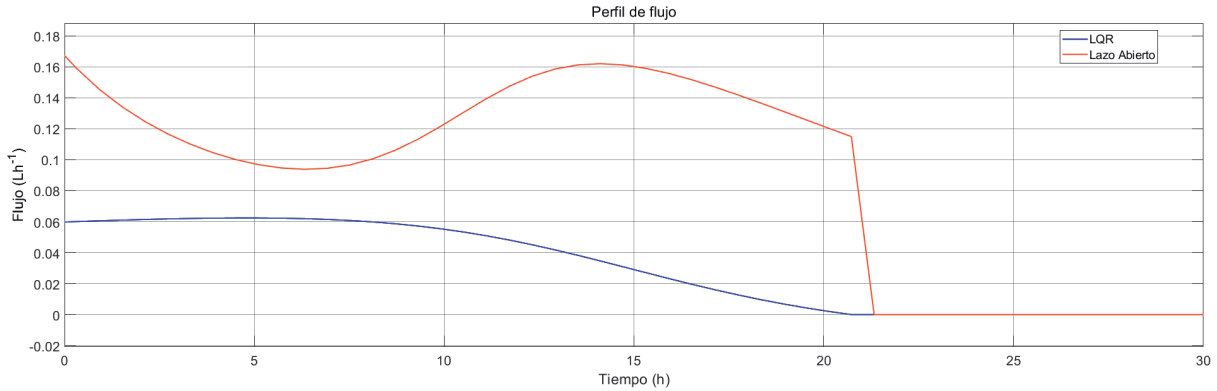
las ganancias dadas por el software MATLAB son las siguientes:

$$k = [0.0022 \quad 0.0002 \quad -0.000001 \quad 0.00002 \quad 0.0203]$$

estas ganancias se implementan en el sistema no lineal, en donde, se diseña el control por realimentación de estado para verificar que logran llegar al sistema a su punto de equilibrio en un tiempo menor.

En la Figura 5.21 se muestra el desempeño del controlador implementado en la planta no lineal operación lote alimentado.

Figura 5.21: Implementación del LQR biorreactor en lote alimentado



Ahora se procede a realizar los cálculos de los errores para verificar que el desempeño del controlador sea adecuado y satisfaga los objetivos planteados en la sección 1.4. Los errores son calculados de forma indirecta:

$$e = VP - SP \quad (5.6)$$

En la Tabla 5.7 se muestran las diferentes concentraciones alcanzadas con el control lineal, como se puede analizar este control permite alcanzar las concentraciones a lazo abierto inclusive superar en menor tiempo, es por ello que se realizan las simulaciones para dos tiempos diferentes con el fin de comparar concentraciones y nuevamente hacer una comparación con un control no lineal.

Tabla 5.7: Resultados de las estrategias de alimentación para la operación en lote alimentado

Concentración	LQR $g/L$		
	IP	29h	30h
Sustrato	1.022	0.2172	0.15
Biomasa	14.02	14.24	14.24
Etanol	56.41	56.57	56.68
CO <sub>2</sub>	10.95	10.98	10.99
Volumen	1.3834	1.019	1.019

La Tabla 5.8 muestra los diferentes errores calculados de la forma (5.6), en donde se puede analizar que los errores son mínimos, dando validez al controlador.

Tabla 5.8: Resultados de los errores calculados del controlador LQR para un bioreactor operación en lote alimentado

Concentración	Errores	
	29h	30h
Sustrato	0.872	0.8048
Biomasa	0.2084	0.2149
Etanol	0.2257	0.1219
CO <sub>2</sub>	0.1001	0.0937
Volumen	0.3614	0.3614

#### 5.2.4. Control subóptimo para el bioreactor en lote alimentado

Como se describió en la subsección (4.0.6) el desarrollo del algoritmo, ahora se implementa en simulación para el biorreactor lote alimentado, en donde, con el índice de desempeño definido en (4.28)  $N = 30$ , con un tiempo de  $30 h$ , con un tiempo de muestreo de  $1 h$ . Se proponen las matrices  $H_1$ ,  $Q_1$  y  $R_1$ :

$$H_1 = \begin{bmatrix} 80 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 100 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 50 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2000000 \end{bmatrix}, Q_1 = \begin{bmatrix} 42 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 12 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1199000 \end{bmatrix} \text{ y } R_1 = [10] \quad (5.7)$$

En la Tabla 5.9 se muestran los resultados de las concentraciones alcanzadas con distintos tiempos de simulación, esto permite hacer una comparación con el lazo abierto.

Tabla 5.9: Resultados de las estrategias de alimentación de IP y lazo cerrado

Concentración	IP	Subóptimo $g/L$	
		$T = 29h$	$T = 30h$
Sustrato	1.022	1.00	0.467
Biomasa	14.02	14.12	14.16
Etanol	56.41	56.69	57.01
CO <sub>2</sub>	10.95	9.397	11
Volumen	1.3834	1.895	1.895

En la Tabla 5.9 se muestran las diferentes concentraciones alcanzadas con el control no lineal, como se puede analizar este control permite alcanzar las concentraciones a lazo abierto inclusive superar en menor tiempo, es por ello que se realizan las simulaciones para dos tiempos diferentes con el fin de comparar concentraciones.

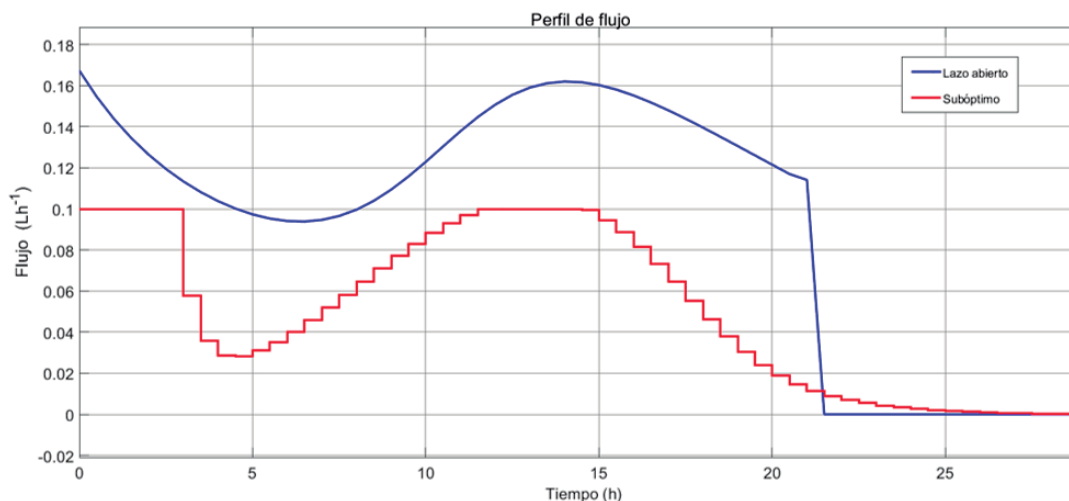
La Tabla 5.10 muestra los diferentes errores calculados de la forma (5.6), en donde se puede analizar que los errores son mínimos, dando validez al controlador.

Tabla 5.10: Resultados de los errores calculados del controlador subóptimo para un bioreactor operación en lote alimentado

Concentración	Errores	
	$29h$	$30h$
Sustrato	0.08	0.2687
Biomasa	0.06	0.0241
Etanol	0.05	0.3
CO <sub>2</sub>	0.03	0.0076
Volumen	0.004	0.004

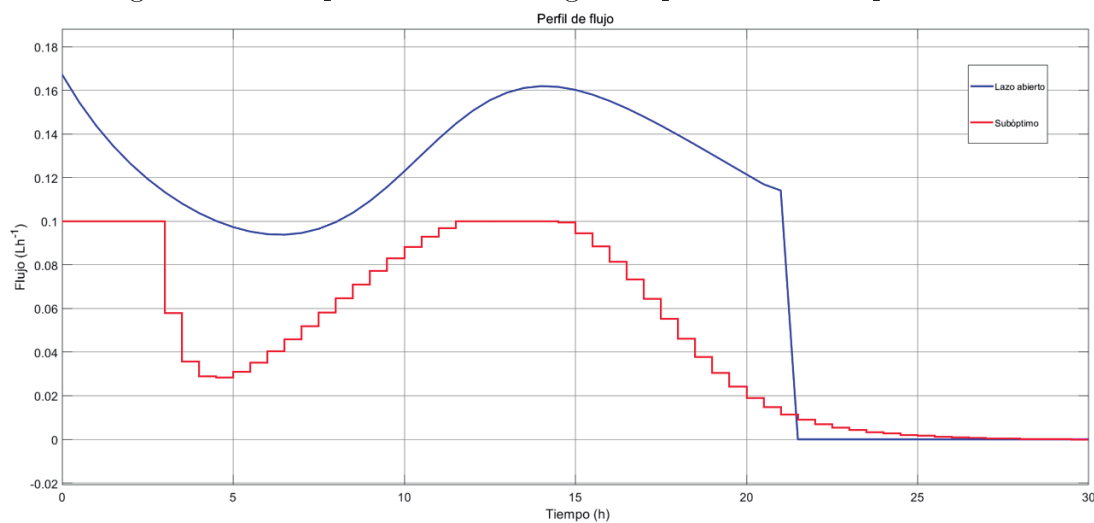
La Figura 5.22 describe la estrategia a lazo abierto en un tiempo de  $29h$ , contra el perfil de flujo dado por el control subóptimo, mismo que permite llegar una hora antes contra el lazo abierto alcanzando el estacionario del etanol.

Figura 5.22: Comparación de estrategias de perfil en un tiempo de 29 h.



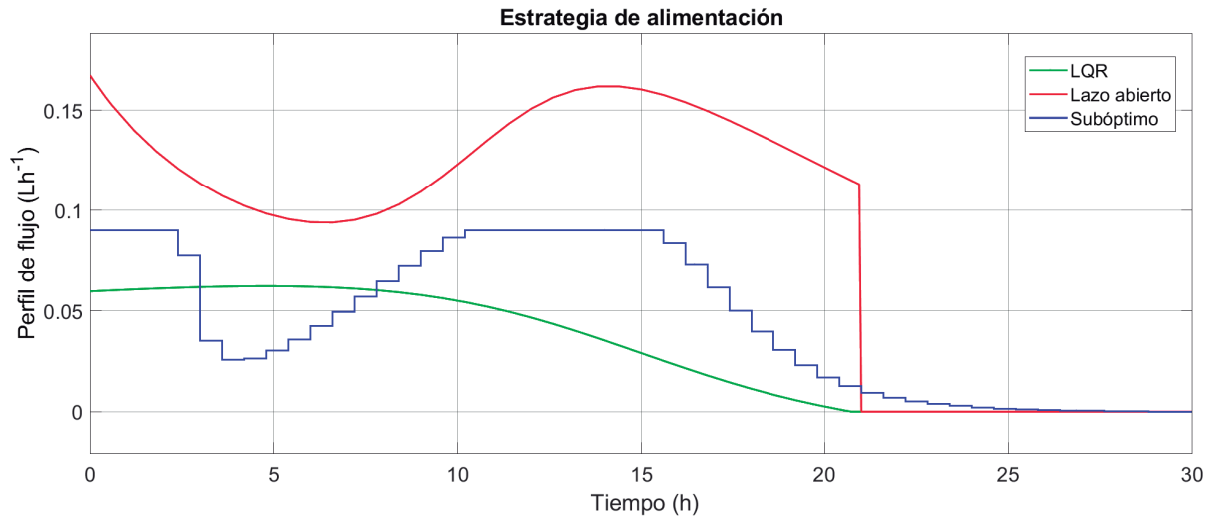
En la Figura 5.23 se muestra el desempeño del controlador en un tiempo de simulación de 30 h, comparado contra la estrategia encontrada a lazo abierto. También se visualiza que se requiere de una menor cantidad de flujo para superar el estacionario del etanol.

Figura 5.23: Comparación de estrategias de perfil en un tiempo de 30 h.



La Figura 5.24 muestra que el desempeño en estado transitorio del sustrato se minimiza comparado con el lazo abierto, alcanzando una concentración mínima de  $0.4213 \frac{g}{L}$ . Esto quiere decir que al minimizar la cantidad del sustrato propicia un mayor crecimiento de la *Saccharomyces cerevisiae*.

Figura 5.24: Comparación de las estrategias de alimentación para el bioreactor lote alimentado a 30 h.



Los resultados de las simulaciones se encuentran en las Figuras 5.25, 5.26, 5.27 y 5.28, se realiza la comparación gráfica de las estrategias de control óptimo y el lazo cerrado para el bioreactor continuo. Mientras que para la Figura 5.29 se muestra el desempeño del volumen de las tres estrategias, cabe mencionar que este no supera la capacidad máxima del bioreactor.

Figura 5.25: Consumo del sustrato en 30 h.

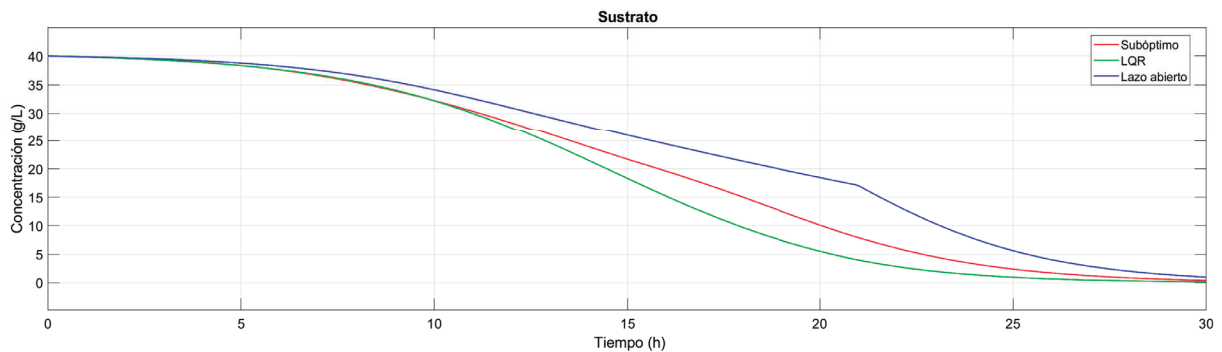


Figura 5.26: Concentración alcanzada de la biomasa en 30 h.

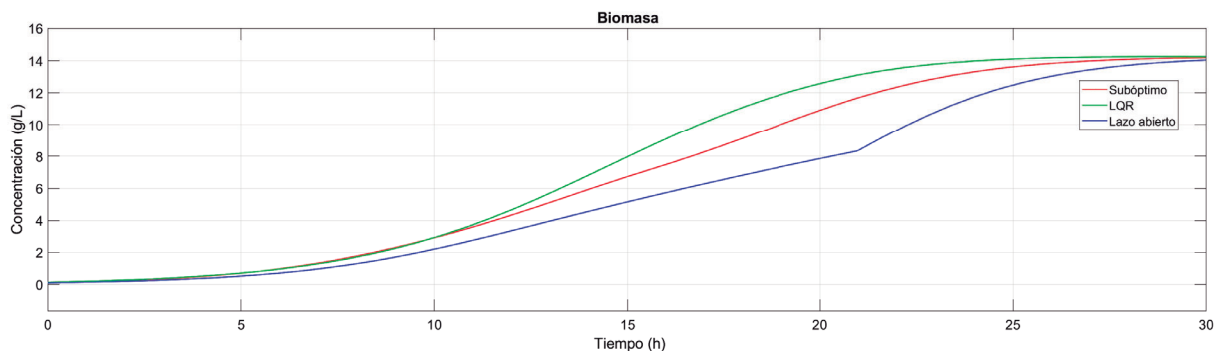


Figura 5.27: Concentración alcanzada del etanol en 30 h.

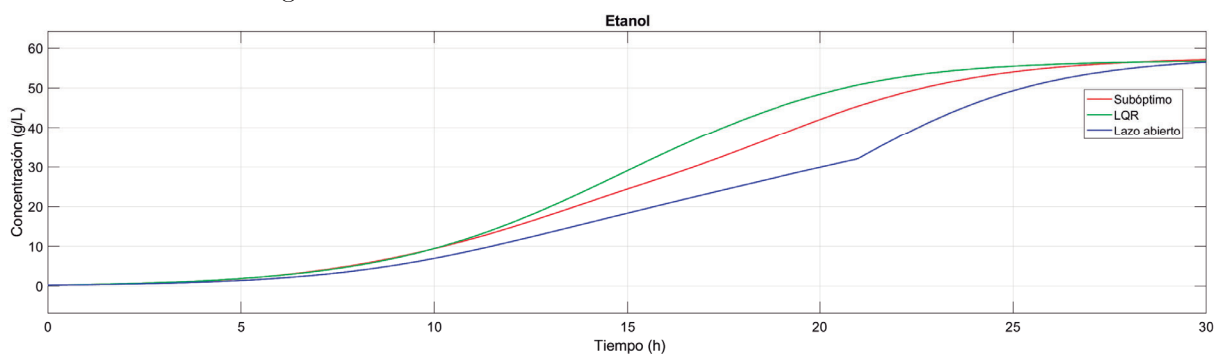
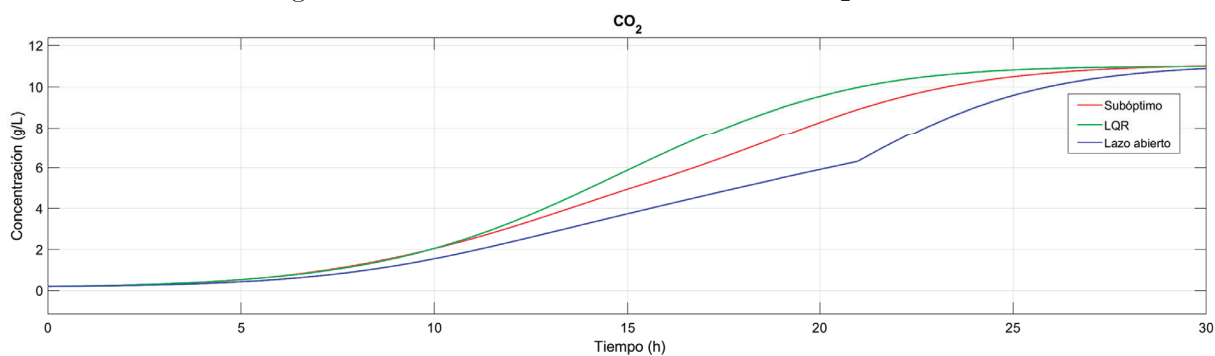
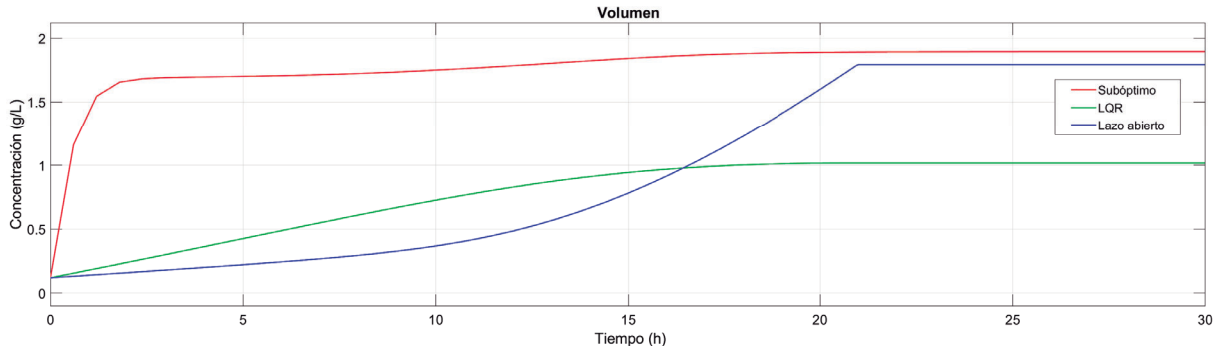
Figura 5.28: Concentración alcanzada del CO<sub>2</sub> en 30 h.

Figura 5.29: Capacidad máxima de operación en 30 h.



Los resultados de los errores se muestran en las Figuras 5.30, 5.31, 5.32 y 5.33, se logra percibir que los errores son pequeños, y se encuentran en las Tablas 5.8 y 5.10.

Figura 5.30: Señal de error para el sustrato

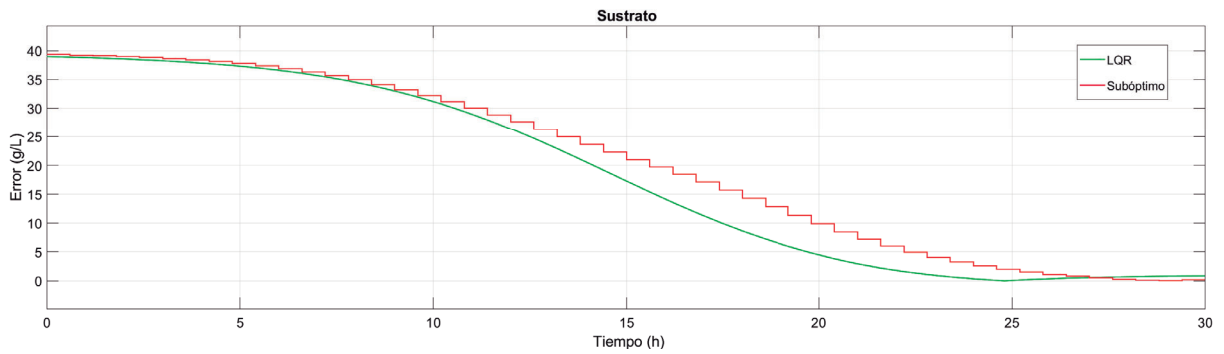


Figura 5.31: Señal de error para la biomasa

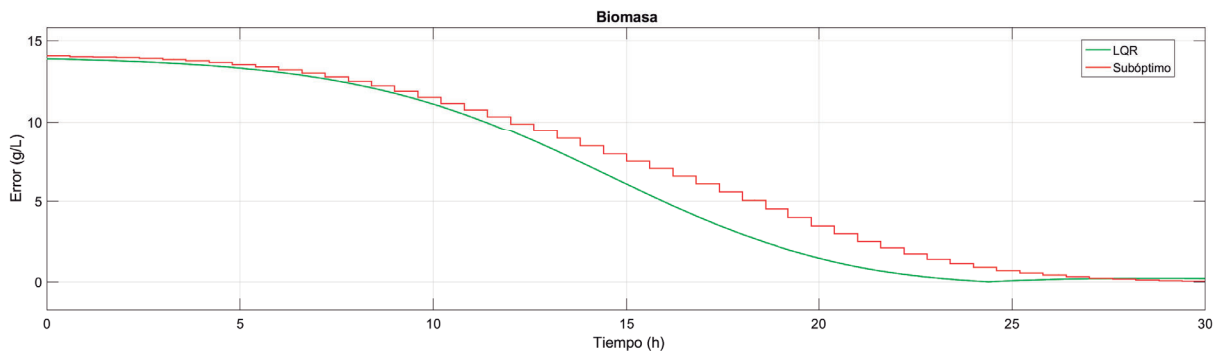
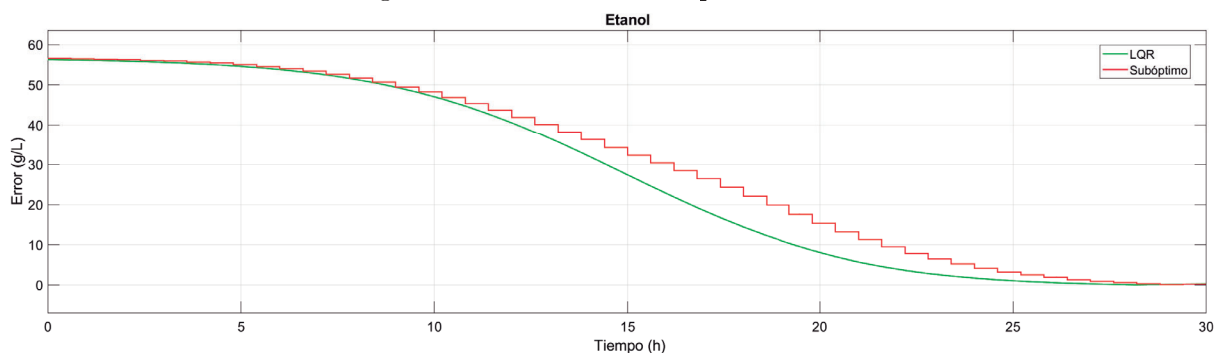
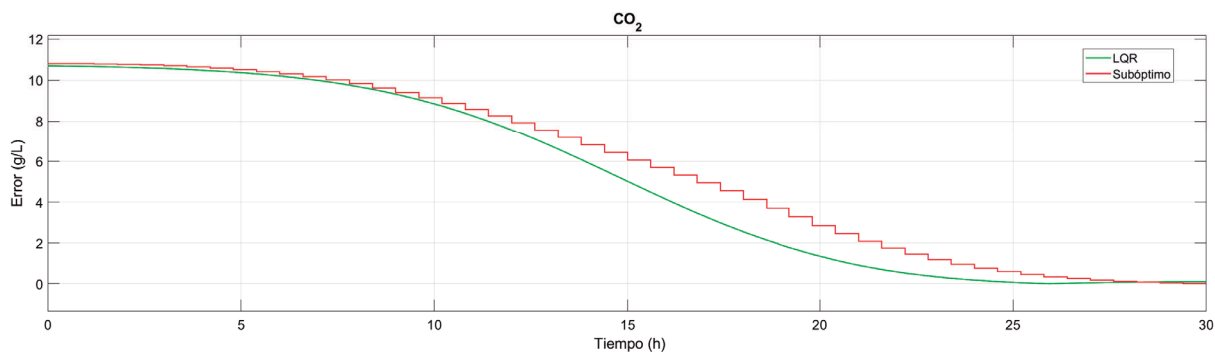




Figura 5.32: Señal de error para el etanol

Figura 5.33: Señal de error para el CO<sub>2</sub>

### 5.2.5. Concentración de resultados

La Tabla 5.11 se presenta el concentrado de los cálculos al aplicar las diferentes estrategias de optimización.

Tabla 5.11: Resultados de las mejores concentraciones aplicando diferentes estrategias de alimentación.

Estrategia IP	Concentraciones g/L			
	Sustrato	Biomasa	Etanol	CO <sub>2</sub>
Lote	0.0162	9.4452	20.8249	11.0894
Lote alimentado	1.022	14.02	56.41	10.95
Continuo	1.285	7.316	23.9113	9.3716
Control óptimo				
Control LQR: Continuo	1.517	7.261	23.8	9.322
Control subóptimo: Continuo	1.21	7.478	24.49	9.675
Control LQR: Lote alimentado	0.15	14.24	56.68	10.99
Control subóptimo: Lote alimentado	0.4213	14.18	57.04	11.01

La Tabla 5.12 muestra el calculo de la entrada de flujo en ciertos intervalos de tiempo para los biorreactores con operación en continuo y lote alimentado.

Tabla 5.12: Área bajo la curva de las estrategias de alimentación

Estrategia	Operación en continuo	
	24 h	25 h
Lazo abierto	–	2.4
LQR	–	60.7134
Subóptimo	2.3975	2.3975

Tabla 5.13: Área bajo la curva de las estrategias de alimentación para el lote alimentado

Estrategia	Operación en L. alimentado	
	29 h	30 h
Lazo abierto	–	4.8245
LQR	1.5256	1.5256
Subóptimo	2.7488	2.7488

De acuerdo al análisis de los datos que se registraron en la Tabla 5.11 se puede concluir

que para el bioreactor operando de forma continua tiene un mejor rendimiento con la implementación del control subóptimo puesto que el cálculo del área bajo la curva es menor con respecto al control lineal y el lazo abierto ver Tabla 5.12. Mientras que para el lote alimentado los algoritmos de control óptimo son factibles con respecto al lazo abierto. No obstante, el LQR muestra un área menor con respecto al algoritmo horizonte finito ver Tabla 5.13.

Sin embargo, la implementación de los controladores desarrollados en este capítulo no solo se infiere a una producción de etanol sino, también, a la válvula de control que regula el caudal y esto se traduce al consumo de energía en las Tablas 5.12 y 5.13 se puede denotar que hay un menor consumo de energía con la implementación del control óptimo. Además, se encontró que se alcanzan las concentraciones en una hora menos que a lazo abierto y con este dato se puede concluir que hay un menor consumo de energía.



# Capítulo 6

## Indicador económico

El bioetanol de segunda generación es considerado sostenible para el sector transporte, debido a que los recursos son considerablemente bajos para la materia prima y para disminuir el impacto en los recursos de primera generación. No obstante, no es suficiente para bajar los costos del mismo y es por ello que se buscan estrategias de optimización para la reducción del costo de producción.

Una de las operaciones que está involucrada en su mayoría, es la etapa de la fermentación. En ella se garantiza el aprovechamiento máximo de la glucosa para determinar que el fermentador está operado óptimamente y es necesario satisfacer los indicadores involucrados en el proceso como la productividad, el rendimiento y la concentración final del bioetanol; una vez que se satisfizo los indicadores se puede determinar un máximo rendimiento económico de la producción de la planta. Sin embargo, con las estrategias óptimas esto no se traduce como un esfuerzo trivial, por lo tanto, se hace uso de un enfoque de programación dinámica aplicando modelos matemáticos validados y parámetros inherentes asociados al metabolismo.

Para intensificar la biomasa también se hace uso de los KPI que son indicadores de productividad, concentración de bioetanol y rendimientos. Los KPI ayudan a facilitar la estimación de costos generales aplicando los óptimos de Pareto [39].

### 6.0.1. Restricciones con respecto al tiempo

Para el diseño de este modelo es necesario contar con las respectivas restricciones que van a permitir tener validez de forma experimental. Dicho lo anterior es necesario con-

siderar las variables de control y parámetros que describen el comportamiento dinámico del sistema.

## Restricciones de operación

Tabla 6.1: Restricciones implicadas en el sistema [40]

Definición	Intervalo
El volumen del reactor permite garantizar que se utilice al máximo la capacidad de trabajo y este es limitado a la capacidad del recipiente; cabe mencionar que se está trabajando con la escala de laboratorio (3 L) y se considera un volumen de espacio de cabeza de 1.0 L	$V_f = 2.0L$
El volumen del cultivo inicial o llamado inóculo permite la alimentación inicial para la estrategia de control, usualmente el rango que permite esto según la literatura es del 20 % y el 80 % del volumen para la operación.	$0.4L \leq v_0 \leq 1.6L$
La biomasa consume suficiente carbono para realizar el metabolismo, al mismo tiempo mitiga la inhibición del sustrato. La glucosa opera con máximo de $140 \frac{g}{L}$ en caso de superar este valor se producirá la inhibición.	$5 \frac{g}{L} \leq S_0 \leq 140 \frac{g}{L}$
La alimentación de corriente para el caudal volumétrico se ve limitado por la capacidad de bombeo del reactor 0 – 12V	$0.001 \frac{L}{h} \leq F_0 \leq 0.3 \frac{L}{h}$
El promedio de fermentación final puede variar y esto depende de los fenómenos metabólicos y el modo de operación del reactor.	$12h \leq t_f \leq 84h$
El intervalo del tiempo se ve restringido al tiempo necesario para asegurar la dinámica del proceso.	$1h \leq t_i \leq 60h \quad i \in [1, N]$

## 6.1. Indicador de rendimiento (KPIs)

En el rendimiento de la producción de bioetanol de la fermentación se cuantifican los siguientes índices. A continuación se describen las expresiones matemáticas de producción

y rendimientos [39].

$$Productividad = \frac{E(t_f) - E_0}{t_f} \quad (6.1)$$

donde  $E_0$  y  $E(t_f)$  son las concentraciones inicial y final y  $t_f$  es la concentración media  $t_f = \sum_{i=1}^N t_i$

$$Rendimiento = \frac{[E(t_f)]V(t_f) - E_0V_0}{G_0V_0 + \int_0^{t_f} \int Q_{in}G_{in}dt} \quad (6.2)$$

en (6.2) la expresión denota la eficiente cantidad de glucosa vertida en el bioreactor, mientras que en (6.3) refleja explícitamente el porcentaje del rendimiento máximo teórico y de glucosa convertida.

$$Rendimiento\% = \frac{Rendimiento}{Rendimiento_{max}} \quad (6.3)$$

### 6.1.1. KPIs para el bioreactor en continuo

En la Tabla 6.2 se muestran los cálculos realizados de la productividad para el bioreactor en continuo

Tabla 6.2: Productividad para el bioreactor en continuo

	<b>C. inicial</b>	<b>C. final</b>	<b>Productividad</b>
	<i>g/L</i>	<i>g/L</i>	<i>(g/L<sup>-1</sup>h<sup>-1</sup>)</i>
L. abierto	0.2	23.91	0.95
C. LQR	0.2	23.80	0.94
C. subóptimo	0.2	24.49	0.97

La tabla anterior denota que el bioreactor operando continuamente con la estrategia del control de horizonte finito tiene un mejor desempeño con respecto a la productividad del lazo abierto, mientras que el lazo abierto tiene un mejor desempeño contra el regulador cuadrático lineal. Esto significa que el control lineal no es el adecuado para esta operación.

La Figura 6.1 muestra cuantos  $g/L^{-1}h^{-1}$  produce el sistema operando en continuo a un tiempo de simulación de  $25h$ , también se grafican las concentraciones finales como iniciales de las estrategias de alimentación, esto con el fin de tener una percepción más clara sobre el desempeño que tienen los controladores. De igual manera, los rendimientos

que se muestran en la Tabla 6.3 permite cuantificar los rendimientos productivos mediante porcentajes y gráficas de Pareto ver Figuras 6.1 y 6.2

Figura 6.1: Productividad del bioreactor en continuo operando a 25 h.

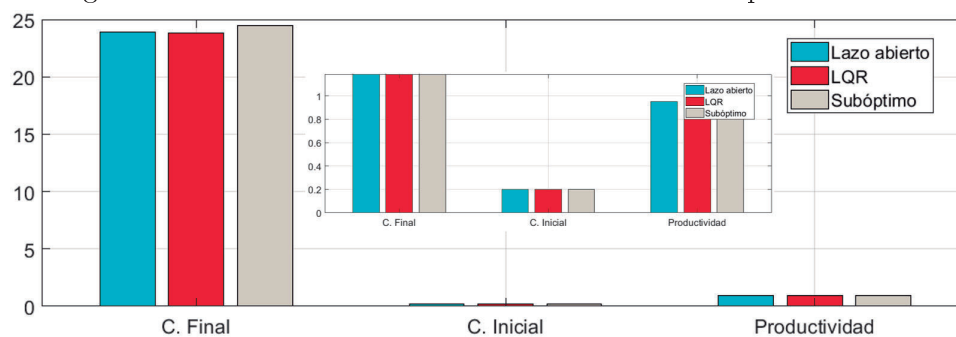


Figura 6.2: Comparación de la capacidad utilizada entre el lazo abierto y el controlador en un tiempo de 30 h.

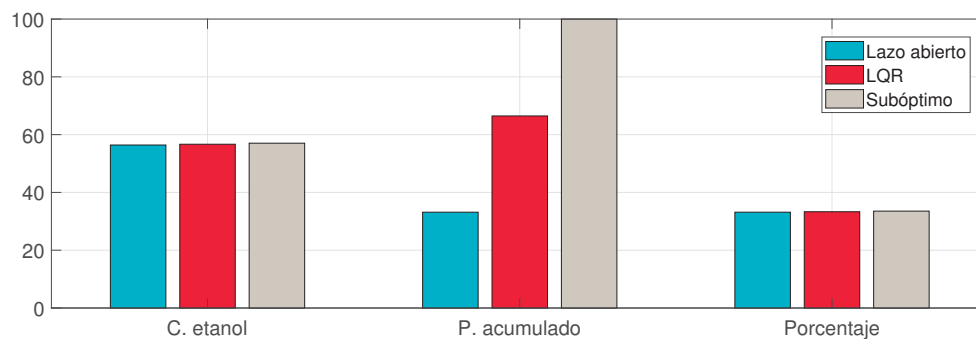


Tabla 6.3: Cálculo del rendimiento para el bioreactor en continuo

	Concentración Etanol $g/L$	Porcentaje %	Porcentaje A. %
L. abierto	23.91	33.12	33.12
C. LQR	23.80	32.96	66.08
C. subóptimo	33.92	33.53	100.00



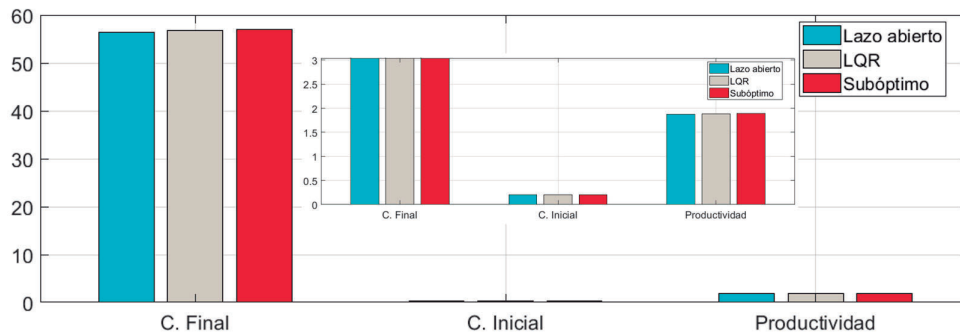
### 6.1.2. KPIs para el bioreactor en lote alimentado

El rendimiento de producción del bioetanol en el bioreactor en lote alimentado se concentra en la Tabla 6.4 desde luego es perceptible que muestre una producción más alta y esto es debido a que se puede manipular el flujo de acuerdo a la cinética de la levadura, ver Figura 6.4.

Tabla 6.4: Rendimiento para el bioreactor en lote alimentado

	Concentración Etanol $g/L$	Porcentaje %	Porcentaje A. %
L. abierto	56.41	33.16	33.16
C. LQR	56.68	33.32	66.47
C. subóptimo	57.04	33.53	100.00

Figura 6.3: Productividad para el bioreactor en lote alimentado con un tiempo de 30 h.

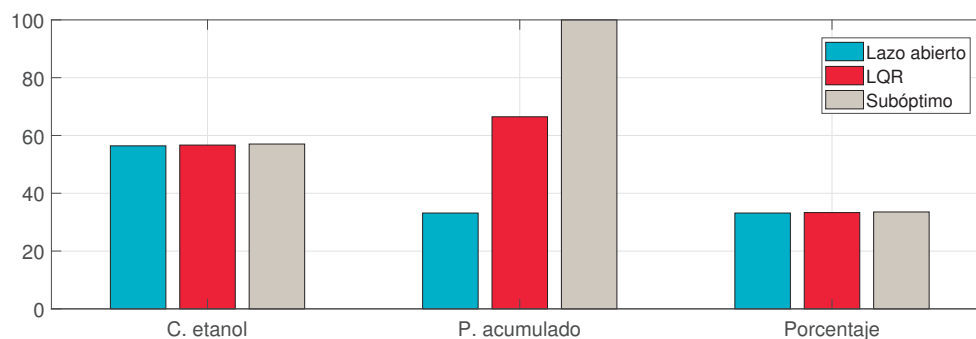


La Tabla 6.5 contiene los cálculos de los rendimientos para el bioreactor en lote alimentado, en donde los rendimientos son la cantidad estratégica de glucosa que se vierte al bioreactor y la cantidad de glucosa que se convierte en bioetanol ver Figura 6.4.

Tabla 6.5: Productividad para el bioreactor en lote alimentado

	C. inicial $g/L$	C. final $g/L$	Productividad $(g/L^{-1}h^{-1})$
L. abierto	0.2	56.41	1.87
C. LQR	0.2	56.68	1.88
C. subóptimo	0.2	57.04	1.89

Figura 6.4: Productividad del bioreactor en lote alimentado en un tiempo de 30 h.



## 6.2. Análisis de factibilidad económica

La integración de procesos, es una de las ventajas que ofrece la viabilidad de la producción de bioetanol, ya que, mejora la productividad y la implicación de usar materia prima de segunda generación genera por sí mismo la reducción de costos de operación. Sin embargo, es necesario realizar la viabilidad económica para este tipo de procesos integrados.

La metodología que se aplica en este Capítulo se puede verificar en [41] con objetivo para la determinación de los costos de producción de bioetanol, a través, del mucílago del cacao y en función a esta metodología obtener información sobre la sostenibilidad de la producción del bioetanol.

### 6.2.1. Análisis de las ecuaciones de cálculos de costos

Las variables  $\zeta$  es el costo de inversión de la destilación por kilogramo de etanol producido ( $USD/kg$ ), la variable  $\beta$  representa el costo operativo de la destilación por kilogramo de etanol producido ( $USD/kg$ ) y la variable  $\gamma$  es el gasto energético necesario para la destilación ( $MJ/kg$ ).

$$\zeta = \alpha_1 (F_{E_{tf}})^{\alpha_2} [E_{tf}]^{\alpha_3} (F_{E_{tf}})^{\alpha_4} \quad (6.4)$$

$$\beta = \alpha_5 [E_{tf}]^{\alpha_6} (F_{E_{tf}}) \quad (6.5)$$

$$\gamma = \alpha_7 [E_{tf}]^{\alpha_8} (F_{E_{tf}}) \quad (6.6)$$

Los parámetros del modelo de las ecuaciones (6.4)-(6.6), son ajustados mediante mínimos cuadrados [41], dichos parámetros  $\alpha$  ya tienen una conversión de etanol respecto al flujo que sale del fermentador. [41]

Tabla 6.6: Parámetros del modelo.

	<b>Valor</b>	<b>Unidades</b>
$\alpha_1$	0.1800	\$/kg
$\alpha_2$	0.2760	—
$\alpha_3$	0.5349	—
$\alpha_4$	0.0025	—
$\alpha_5$	0.0035	\$/kg
$\alpha_6$	0.8158	—
$\alpha_7$	0.4645	MJ/kg
$\alpha_8$	0.7133	—

El modelo propuesto en [41] considera las siguientes variables a optimizar como la concentración inicial de la fermentación, volumen inicial, flujo de alimentación, tiempo total requerido para la hidrólisis, tiempo del fermentador, entre otras.

Los resultados que se encontraron al aplicar los parámetros de la Tabla 6.6 y resolviendo las ecuaciones (6.4)-(6.6) se puede encontrar el comportamiento y valores similares a [41].

La Tabla 6.7 y la Figura 6.5 representan la comparación de costos de inversión y gastos operativos de las tres estrategias que se desarrollaron en este trabajo para el bioreactor en continuo, en donde se aplicó el cálculo del área bajo la curva para determinar el total de flujo que entra al fermentador a 25h

Figura 6.5: Costos del bioreactor a 25 h.

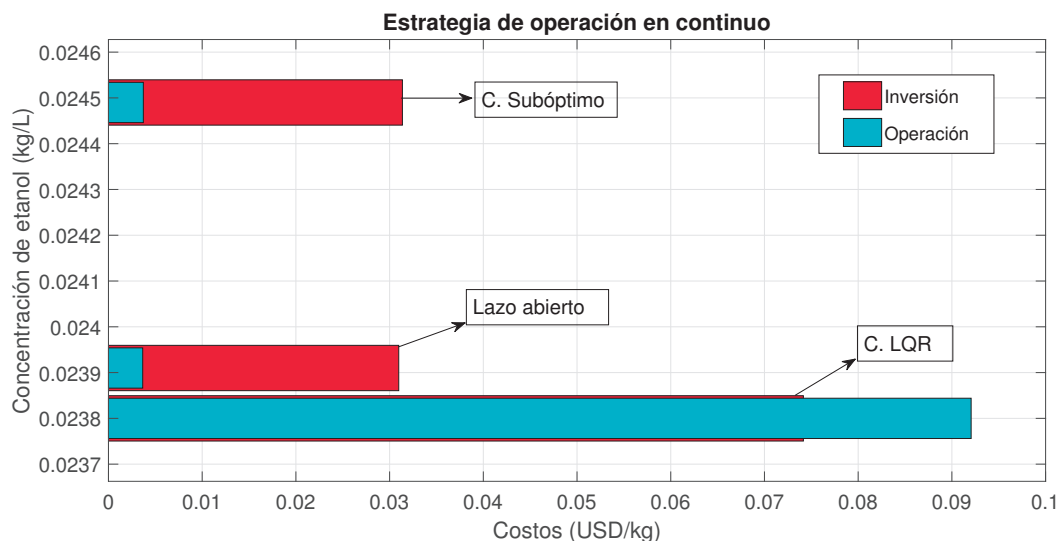


Tabla 6.7: Cálculo de los costos para el biorreactor en continuo

	Etanol (kg/L)	Costos (\$/kg)	
		<b>Inversión</b>	<b>Operación</b>
L. abierto	0.02391	0.0309751	0.003652636
C. LQR	0.0238	0.074153214	0.09205471
C. subóptimo	0.02449	0.031366794	0.00372088

Los cálculos de los costos para el bioreactor en lote alimentado se calculan con las ecuaciones (6.4)-(6.6) y los parámetros de la Tabla 6.6. La Tabla 6.8 concentra los resultados para las estrategias de alimentación y los costos de inversión y operación. En la Figura 6.6 se muestra la comparación entre las concentraciones y los costos. Cabe mencionar que estos resultados están dentro del rango de los costos calculados como de concentraciones en [41].

Figura 6.6: Comparación entre concentraciones y costos del bioreactor en lote alimentado a 30 h.

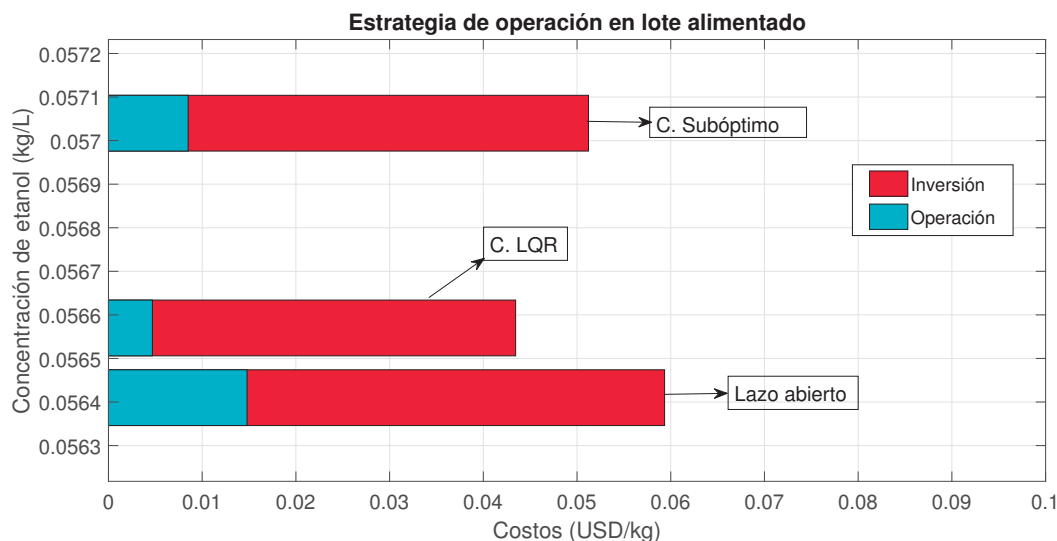
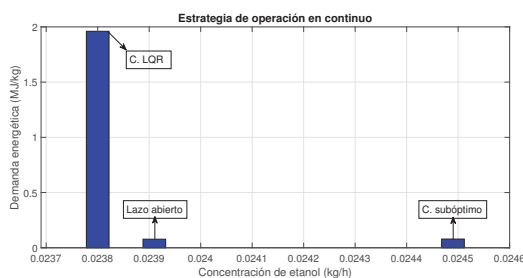


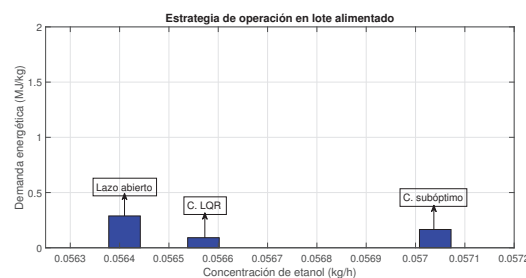
Tabla 6.8: Cálculo de los costos para el biorreactor en lote alimentado

	Etanol (kg/L)	Costos (\$/kg)	
		<b>Inversión</b>	<b>Operación</b>
L. abierto	0.05641	0.059343458	0.014789674
C. LQR	0.05657	0.043446573	0.004687599
C. subóptimo	0.05704	0.051223876	0.008503239

La crisis energética es uno de los temas más preocupantes en la actualidad, la política energética es más rigurosa con respecto a sus leyes y es por eso que ahora se busca que se minimice el uso de energía [42]. La ciencia busca mejorar estrategias que eficienten los procesos biotecnológicos mediante las válvulas de control [43] y en este capítulo se realizan los cálculos de los gastos energéticos para las tres estrategias de alimentación de la operación unitaria del fermentador contra las mejores concentraciones alcanzadas.



(a) Gasto energético para la operación en continuo



(b) Gasto energético para el lote alimentado

Tabla 6.9: Demanda energética para los dos bioreactores

	Etanol (kg/L)	Gasto energético (MJ/kg)
Continuo		
L. abierto	0.02391	0.077738789
C. LQR	0.0238	1.960119802
C. subóptimo	0.02449	0.078996897
Lote alimentado		
L. abierto	0.05641	0.288257314
C. LQR	0.05657	0.091336869
C. subóptimo	0.05704	0.165543339

Los resultados de la Tabla 6.9 y las Figuras 6.7a y 6.7b muestran que para el fermentador operando continuo tiene una mayor demanda energética produciendo una menor concentración de etanol, mientras que para el bioreactor en lote alimentado el LQR es una estrategia factible puesto que demanda menor energía con respecto a las otras dos estrategias produciendo ligeramente una menor concentración que el subóptimo. Mientras que los costos estimados de producción de etanol según [41] ascendieron a  $1,46USD/kg$ , pero con cierta optimización de parámetros operativos sensibles (recuperación, utilización de azúcar, costo de materia prima, biomasa a azúcares y recuperación de calor) el costo de producción podría reducirse a  $0.05USD/kg$  como lo muestran los resultados de la Tabla 6.9.

Los costos de producción se calcularon bajo las mejores estrategias de alimentación y una intensificación del proceso a partir de los residuos agroindustriales del mucílago de cacao, con el objetivo de disminuir parte de los requerimientos energéticos necesarios.

# Capítulo 7

## Conclusiones

Los modelos que se muestran en el trabajo fueron validados en su fase experimental. Dicho esto nos permitió realizar una intensificación de procesos para encontrar una estrategia con un mejor desempeño en simulación haciendo un barrido tanto en condiciones iniciales para el lote, tasas de dilución para el continuo y estrategias de alimentación para el lote alimentado, estas simulaciones se desarrollan en lazo abierto que son la base para realizar comparaciones con estrategias en lazo cerrado.

Los resultados de las estrategias de control óptimo implementadas en este trabajo, han mostrado buenos resultados de simulación, se encontraron óptimos que permiten mejorar las concentraciones en los diferentes sistemas estudiados. También es importante mencionar que no solo se mejoraron las concentraciones, sino, el tiempo de operación de la fermentación en lazo abierto contra el lazo cerrado. Los resultados demuestran que los controladores óptimos logran converger a los estacionarios  $1 h$  antes contra el lazo abierto, minimizando la concentración de sustrato y maximizando la producción de etanol. Es decir, como se minimiza el flujo de entrada se concluye que la válvula de control tendrá un menor consumo de energía, por lo tanto, la demanda energética es menor y propicia que se disminuya la contaminación por la generación de energía que demanda la industria del etanol.

La demanda energética para producir etanol también se puede observar desde el estado financiero es por ello que se desarrollaron cálculos económicos para calcular la demanda de energía para producir la cierta cantidad de etanol, de igual manera se muestran los resultados de los costos por producción e inversión, concluyendo la factibilidad del lote alimentado implementando una estrategia de control óptimo.





# Capítulo 8

## Trabajo futuro

Los planes que se tienen para la continuación de este trabajo de investigación son:

- Aplicar el algoritmo de Gradiente-Descendente al sistema no lineal para el bioreactor continuo y lote alimentado.
- Desarrollar el algoritmo de Control Integral para los sistemas no lineales de los bioreactores continuo y lote alimentado.
- Realizar la experimentación de los perfiles de flujo en la instrumentación ya realizada en el laboratorio de la ESAP.
- Redacción de un artículo para su eventual publicación.



# Bibliografía

- [1] IEA. World energy. <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2019>, 2019.
- [2] M. R Ladisch and J. A Svarczkopf. Ethanol production and the cost of fermentable sugars from biomass. *Bioresource Technology*, 36(1):83–95, 1991.
- [3] L. di Bitonto, H. E Reynel Ávila, D. I Mendoza Castillo, A. Bonilla Petriciolet, and C. Pastore. Residual mexican biomasses for bioenergy and fine chemical production: Correlation between composition and specific applications. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 11(2):619–631, 2021.
- [4] J. Vázquez Hernández and O. Dacosta. Fermentación alcohólica: Una opción para la producción de energía renovable a partir de desechos agrícolas. *Ingeniería, investigación y tecnología*, 8(4):249–259, 2007.
- [5] M. A Cisneros López, J. A García Salazar, J. S Mora Flores, M. A Martínez Damian, R. C García Sánchez, J. R Valdez Lazalde, M. Portillo Vázquez, et al. Economic evaluation with real options: second generation bioethanol biorefinery in veracruz, méxico. *Agricultura, Sociedad y Desarrollo*, 17(3):397–413, 2020.
- [6] E. Sánchez Ramírez, J. J Quiroz Ramírez, Hernández Salvador, J. G Segovia Hernández, and A. A Kiss. Optimal hybrid separations for intensified downstream processing of biobutanol. *Separation and purification technology*, 185:149–159, 2017.
- [7] V. C Onishi, M. ASS Ravagnani, L. Jiménez, and J. A Caballero. Multi-objective synthesis of work and heat exchange networks: Optimal balance between economic and environmental performance. *Energy Conversion and Management*, 140:192–202, 2017.

- 
- [8] P. A López Pérez, H. Puebla, H. I Velázquez Sánchez, and R. Aguilar López. Comparison tools for parametric identification of kinetic model for ethanol production using evolutionary optimization approach. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 14(6):1201–1209, 2016.
- [9] E. Alvarado Santos, R. Aguilar López, M. I Neria González, T. Romero Cortés, V. J Robles Olvera, and P. A López Pérez. A novel kinetic model for a cocoa waste fermentation to ethanol reaction and its experimental validation. *Preparative Biochemistry and Biotechnology*, pages 1–16, 2022.
- [10] M. A da Costa V. F. and J. E Normey Rico. Modeling, control and optimization of ethanol fermentation process. *IFAC Proceedings Volumes*, 44(1):10609–10614, 2011.
- [11] G. A Enríquez. *El cultivo del cacao*. Number 4. EUNED, 1983.
- [12] A. S López, H. I. S Ferreira, A. Llamosas C, and A.P Romeu. Present status of cacao by-products utilization in brazil. 1984.
- [13] P. A López Pérez, J. A Cuervo Parra, V. J Robles Olvera, G. Del C Rodriguez Jimenes, V. H Pérez España, and T. Romero Cortes. Development of a novel kinetic model for cocoa fermentation applying the evolutionary optimization approach. *International Journal of Food Engineering*, 14(5-6), 2018.
- [14] D. E Kirk. *Optimal control theory: an introduction*. Courier Corporation, 2004.
- [15] M. Pérez, A. Pérez, and E. Pérez. Introducción a los sistemas de control y modelo matemático para sistemas lineales invariantes en el tiempo. *Universidad Nacional de San Juan*, 2008.
- [16] N. F Santos Sánchez, R Salas Coronado, O. J Santos Sánchez, H. Romero, and E. Garrido Aranda. On the effects of the temperature control at the performance of a dehydration process: energy optimization and nutrients retention. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 86(9):3157–3171, 2016.
- [17] N. Cervantes Escorcía. Control clásico avanzado para un proceso de temperatura. 2017.
- [18] O. Santos Sánchez, O. García, H. Romero, S. Salazar, and R. Lozano. Finite horizon nonlinear optimal control for a quadrotor: Experimental results. *Optimal Control Applications and Methods*, 42(1):54–80, 2021.

- [19] O. Santos, L. Rodríguez Guerrero, and O. López Ortega. Experimental results of a control time delay system using optimal control. *Optimal Control Applications and Methods*, 33(1):100–113, 2012.
- [20] National Renewable Energy Laboratory. Bioreactor. <https://www.nrel.gov/biomass/>, 2018.
- [21] E. de Jong and G. Jungmeier. Biorefinery concepts in comparison to petrochemical refineries. In *Industrial biorefineries and white biotechnology*, pages 3–33. Elsevier, 2015.
- [22] Agencia Informativa Conacyt. Retos y oportunidades de la biorrefinería en México. <https://www.cienciamx.com/index.php/tecnologia/energia/15937-retos-oportunidades-biorrefineria-mexico>, 2017.
- [23] G. Gomez Millan. Desarrollo de biorrefinerías en el mundo (biorefineries development: a worldwide review). *Ciencia y desarrollo*, 1:13, 2015.
- [24] Universidad Autónoma de Sinaloa. Inicia la UAS la instalación de biorrefinería. <https://crnanuies.uas.edu.mx/index.php/inicio/noticias/102-sinaloauas/1369-inicia-la-uas-la-instalacion-de-biorrefineria>, 2018.
- [25] Secretaria del medio ambiente y recursos naturales. ¿qué es la energía de biomasa? <https://www.gob.mx/semarnat/articulos/que-es-la-energia-de-biomasa?idiom=es>, 2018.
- [26] I. A. López Cifuentes. Fermentación y destilación alcohólica. *Revista Ingeniería y Ciencia*, 2(14), 2019.
- [27] Jasper van Baten. Cape open to cape open simulation environment. <https://www.cocosimulator.org/index.html>, 2006.
- [28] A. Tamir and F. Ruiz Beviá. Ley de conservación de la materia. 2005.
- [29] J. A. Asenjo. *Bioreactor system design*. CRC Press, 1994.
- [30] Slideshare. Slideshare. <https://es.slideshare.net/magnusgabrielhuertafernandez/tipos-de-reactores-51745874>, 2015.

- [31] Bulmaro Noguera. Reactores intermitentes o reactores batch. <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2020/10/reactores-intermitentes-batch.html>, 2020.
- [32] M. A. M Dawood, M. G. A. E Taha, and H. E Ali. Production of bio-ethanol from potato starch wastes by *saccharomyces cerevisiae*. *Egyptian Journal of Applied Science*, 34(issue, 12):256–267, 2019.
- [33] J. E Becerril Bravo. *Optimización de metodologías analíticas para la determinación de contaminantes emergentes en aguas de abastecimiento y residuales*. PhD thesis, Universidade de Santiago de Compostela, 2012.
- [34] Katsuhiko O. *Ingeniería de control moderna*. Pearson Educación, 2010.
- [35] R. E Bellman and S. E Dreyfus. *Applied dynamic programming*, volume 2050. Princeton university press, 2015.
- [36] K. Alvarado, J. Bayona, J. Consuegra, D. Parada, N. Sepulveda, and G. Gelves. Use of operational training simulation in the study of ethanol operating conditions: A powerful tool for education and research performance improvement. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 1655, page 012093. IOP Publishing, 2020.
- [37] R. Aguilar López, E. Alvarado Santos, F. Thalasso, and P. A López Pérez. Monitoring ethanol fermentation in real time by a robust state observer for uncertainties. *Chemical Engineering & Technology*, 47(5):779–790, 2024.
- [38] E. Alvarado Santos, J. L Mata Machuca, P. A López Pérez, R. A Garrido Moctezuma, F. Pérez Guevara, and R. Aguilar López. Comparative analysis of a family of sliding mode observers under real-time conditions for the monitoring in the bioethanol production. *Fermentation*, 8(9):446, 2022.
- [39] K. Flevaris and C. Chatzidoukas. Optimal fed-batch bioreactor operating strategies for the microbial production of lignocellulosic bioethanol and exploration of their economic implications: A step forward towards sustainability and commercialization. *Journal of Cleaner Production*, 295:126384, 2021.
- [40] M. Á Navarro Amorós. Metodología para el diseño riguroso de procesos químicos. modelos híbridos: simulación optimización. 2013.

- 
- [41] V. H Grisales Díaz and M. J Willis. On the economic optimisation of ethanol production using corn stover feedstock: A new kinetic model, a green recovery system and a de-acetylation step. *Energy conversion and management*, 202:112200, 2019.
- [42] K. I Batouta, S. Aouhassi, and K. Mansouri. Energy efficiency in the manufacturing industry: A tertiary review and a conceptual knowledge-based framework. *Energy Reports*, 9:4635–4653, 2023.
- [43] L. Bremer, S. J den Nijs, and H. L. F de Groot. The energy efficiency gap and barriers to investments. *Available at SSRN 4513887*, 2023.





[Back to dashboard](#)

# 4552406 del pedido

Tesis\_lraiz\_Final\_1.pdf

4 jun. Plagiarism Check

[Descripción general](#)[Details](#)

## Riesgo alto de plagio

**Su calificación de similitud es 10%.** Es importante revisar estas similitudes para evitar cometer plagio, lo que podría llevar a reprobado un curso, un período de prueba académica o una reputación dañada.

[Ver informe de similitud](#)

