

Universidad de Guadalajara

Centro Universitario de los Valles

TESIS

Para obtener el título de Doctor en Ciencias Físico Matemáticas con Orientación
en Procesamiento Digital de Señales



**Construcción, Modelado y Adquisición de Señales de un Proceso de Adsorción por
Oscilación de Presión para Producir Bio-etanol**

Presentado por:

M. en C. Erasmo Misael Rentería Vargas

Director de tesis

Dr. Jesse Yoe Rumbo Morales

Codirector de tesis

Dr. Felipe de Jesús Sorcia Vázquez

Ameca, Jalisco, 20 de marzo de 2024



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Valles

División de Estudios Científicos y Tecnológicos

Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías

Améca, Jalisco a 08 de marzo del 2024

**Junta Académica del Programa
Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas
del Centro Universitario de los Valles**

PRESENTE

En mi carácter de director del trabajo recepcional titulado: *"Construcción , Modelado y Adquisición de Señales de un Proceso de Adsorción por Oscilación de Presión para Producir Bio-etanol "* que presenta el alumno **Mtro. Erasmo Misael Rentería Vargas**, con código **221325066**, expongo que lo he revisado y que a mi juicio cumple con los requisitos metodológicos y de contenido, para que pueda ser sometido al examen recepcional correspondiente al Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas con Orientación en Procesamiento Digital de Señales.

Por lo antes expuesto, me permito emitir el presente oficio de liberación del trabajo recepcional, con la finalidad de que pueda llevarse a cabo la defensa de este.

Atentamente

"PIENSA Y TRABAJA"

"30 años de Autonomía de la Universidad de Guadalajara y su organización en Red"
Ameca, Jalisco, 08 de marzo de 2024

Dr. Jesse Yoe Rumbo Morales
Profesor-Investigador Asociado C
Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías

Carretera Guadalajara-Ameca Km.45.5, C.P. 46600. Apartado Postal. N° 200
Ameca, Jalisco, México.Tel. 01 [375] 75 80 500/148 Ext. 4_7336
www.cuvalles.udg.mx



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Valles

División de Estudios Científicos y Tecnológicos

Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías

Ameca, Jalisco a 08 de marzo del 2024

**Junta Académica del Programa
Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas
del Centro Universitario de los Valles**

PRESENTE

En mi carácter de director del trabajo recepcional titulado: "*Construcción , Modelado y Adquisición de Señales de un Proceso de Adsorción por Oscilación de Presión para Producir Bio-etanol* " que presenta el alumno **Mtro. Erasmo Misael Rentería Vargas**, con código **221325066**, expongo que lo he revisado y que a mi juicio cumple con los requisitos metodológicos y de contenido, para que pueda ser sometido al examen recepcional correspondiente al Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas con Orientación en Procesamiento Digital de Señales.

Por lo antes expuesto, me permito emitir el presente oficio de liberación del trabajo recepcional, con la finalidad de que pueda llevarse a cabo la defensa de este.

Atentamente

"PIENSA Y TRABAJA"

"30 años de Autonomía de la Universidad de Guadalajara y su organización en Red"

Ameca, Jalisco, 08 de marzo de 2024

Dr. Felipe de Jesús Sorcia Vázquez
Profesor-Investigador Asociado B
Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Valles

COORDINACIÓN DEL DOCTORADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

CUV/DCFM/115/2024

Dra. Suhey Ayala Ramírez
Coordinadora de Posgrados
CUVALLES
Presente

Por este medio se hace de su conocimiento que el trabajo de tesis titulado "**Construcción, modelado y adquisición de señales de un proceso de adsorción por oscilación de presión para producir bioetanol**", presentado por el alumno **Mtro. Erasmo Misael Rentería Vargas** con código **221325066**, para obtener el grado académico de Doctor en Ciencias Físico Matemáticas con orientación en Procesamiento Digital de Señales **SÍ CUMPLE** con los requerimientos establecidos en el Reglamento General de Posgrado, para su presentación del examen de grado, según consta en el acta **DCFM/02/2024** de sesión de la Junta Académica, celebrada el 8 de marzo de 2024.

Por tal motivo, le informamos que el examen de grado se efectuará el día **miércoles 20 de marzo de 2024** a las **10:00 hrs** en la **Sala de Posgrados del edificio CRECE del Centro Universitario de los Valles**. Al respecto le solicitamos atentamente la elaboración del acta correspondiente. Asimismo, le comunico sobre la designación del jurado de examen de grado.

Dr. José Antonio Cervantes Álvarez (Presidente)
Dr. Miguel de la Torre Gómora (Secretario)
Dr. Jesse Yoe Rumbo Morales (Director) (Vocal)
Dr. Felipe de Jesús Sorcia Vázquez (Vocal)
Dr. Gerardo Ortiz Torres (Vocal)

Le agradezco su atención y me pongo a sus órdenes para cualquier información adicional.

Atentamente:

"Piensa y Trabaja"

"30 años de la Autonomía de la Universidad de Guadalajara y de su organización en Red"
Ameca, Jalisco a 8 de marzo de 2024

Dr. Marciano Sanchez Tizapa

Coordinador del Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA
C. UNIVERSITARIO
DE LOS VALLES
Coordinación de Doctorado
en Ciencias Físico Matemáticas



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Valles

COORDINACIÓN DEL DOCTORADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

CUV/DCFM/112/2024

ASUNTO: Carta de revisión anti-plagio
de trabajos recepcionales

H. Miembros de la Junta Académica del
Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas
Presente

Por este medio, me permito hacer de su conocimiento que el trabajo recepcional titulado **Construcción, modelado, y adquisición de señales de un proceso de adsorción por oscilación de presión para producir etanol**, realizado por el Mtro. Erasmo Misael Rentería Vargas, con código **221325066** del Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas con Orientación en Procesamiento Digital de Señales, fue revisado de manera previa a su presentación y defensa ante el jurado correspondiente, a través de la herramienta anti-plagio denominada Turnitin.

Con base en la revisión realizada por el director del trabajo recepcional y el análisis del reporte de las similitudes encontradas por dicho software, no se identificaron elementos originales contenidos en alguna obra de terceros que se hagan pasar como propios por el autor del trabajo recepcional ¹.

Por ello, se considera que el trabajo recepcional presentado es resultado del esfuerzo individual de su autor y que este empleó las normas y protocolos de citación pertinentes en su desarrollo, por lo cual, se presume que no infringe derechos intelectuales de terceros.

Sin otro particular por el momento, me despido con un cordial saludo.

Atentamente:

"Piensa y Trabaja"

"30 años de la Autonomía de la Universidad de Guadalajara y de su organización en Red"

Ameca, Jalisco a 8 de marzo de 2024

Dr. Mareiano Sanchez Tizapa

Coordinador del Doctorado en Ciencias Físico Matemáticas



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA
C. UNIVERSITARIO
DE LOS VALLES
Coordinación de Doctorado
en Ciencias Físico Matemáticas

¹ Si bien el plagio como vulneración a los derechos intelectuales no se encuentra previsto en la legislación penal o en materia de propiedad intelectual, para efectos de su comprensión se recurre a la opinión doctrinista argentina Della Lipszyc, quién señala se refiere al plagio como "el apoderamiento para efectos de todos o de algunos elementos originales contenidos en la obra de otro autor presentándolo como propios". (Ref. Lipszyc Della, cit. pos. Timal López Sandra y Sánchez Espinoza, Francisco. El plagio en el contexto del derecho de autor. Revista "Tla-melaua" de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (online), 2017, vol. 11, n. 42, pp 48-66. Disponible en :http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S1870-69162017000200048&lng=es&nrm=iso)

Universidad de Guadalajara

Centro Universitario de los Valles

TESIS

Para obtener el título de Doctor en Ciencias Físico Matemáticas con Orientación
en Procesamiento Digital de Señales



**Construcción, Modelado y Adquisición de Señales de un Proceso de Adsorción por
Oscilación de Presión para Producir Bio-etanol**

Presentado por:

M. en C. Erasmo Misael Rentería Vargas

Director de tesis

Dr. Jesse Yoe Rumbo Morales

Codirector de tesis

Dr. Felipe de Jesús Sorcia Vázquez

Ameca, Jalisco, 20 de marzo de 2024

Dedicatoria

A mi familia, esposa e hijos :

A mis hermosos hijos Andrés Miguel y Juan José. Por ser mi mayor motivación, mi más grande orgullo y el impulso diariamente en mi vida para concluir este proyecto. Porque aprendieron a ser pacientes y ofrecerme una gran sonrisa y abrazo y un te amo papá. ¡Todo es para ustedes!

A mi esposa Carmen Elvira por su invaluable apoyo y acompañarme en mis proyectos personales y profesionales, porque eres el apoyo que diariamente necesito para soñar y lograr todas mis metas, porque siempre estás ahí emocionalmente y académicamente. Gracias por siempre decirme tu puedes amor. ¡Este logro es tuyo también, te amo!

A mi familia mis padres Feliciano Rentería y María Leticia, por su invaluable apoyo instrumental, emocional, material y moral a lo largo de mi vida, no tengo con que agradecer todo el cariño y cuidados para mí, mi esposa y mis hijos. Soy quien soy gracias a ustedes y a los valores depositados en mi persona. Mi hermano y amigo Oscar Alonso Rentería, mi compañero de vida que siempre busca la manera de brindarme su apoyo. Mis suegros Miguel Hernández que se, que desde el cielo estaría orgulloso de lo que estoy logrando (ahora no le deje para luego), Hilda Magaña que siempre busca la manera de apoyarnos y brindarme su cariño de una forma única, gracias por todo el apoyo, cariño y cuidados recibidos para poder concluir este proyecto.

Sin ustedes, no lo hubiera logrado, ¡Los amo familia!

Agradecimientos

A Dios por el don de la vida y las bendiciones derramadas a mi persona y familia. Por darme la fortaleza para no desistir y poner en mi camino a las personas indicadas.

A mi Director y mi Codirector de Tesis el Dr. Jesse Yoe Rumbo Morales, que, con sus conocimientos, tutoría, apoyo, invaluable paciencia y motivación constante, fue posible concluir este proyecto. Gracias por ser un gran profesional y gran ser humano, que deja huella en cada uno de los alumnos que hemos transitado por este doctorado. El Dr. Felipe de Jesús Sorcia Vázquez, por sus valiosas aportaciones y tutoría para que esta tesis fuera posible, por siempre tener respuesta a las dudas y palabras de aliento para continuar. ¡No existe forma alguna, para agradecerles todo el crecimiento profesional que obtuve!

A mis amigos y colegas sin mencionarlos de forma personal, a todos los que me apoyaron y me animaron a no desistir en este trayecto. Gracias por ser, estar, coincidir y permanecer en mi vida.

A mi Universidad de Guadalajara por permitirme encontrar a grandes maestros, colegas y seres humanos y porque se ha convertido en mi segunda casa.

A todas aquellas personas que creyeron en mí y me motivaron para seguir adelante. ¡Muchas gracias!

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por la beca otorgada para la realización de mis estudios de doctorado, gracias también a su financiamiento este proyecto ha podido realizarse, el cual lleva por nombre Construcción, Modelado y Adquisición de Señales de un Proceso de Adsorción por Oscilación de Presión para Producir Bio-etanol



Resumen

El proceso de adsorción por cambio de presión (PSA) es un método novedoso para la purificación y producción de bioetanol. En esta tesis se propone la implementación de un modelo riguroso altamente no lineal para simular la dinámica cíclica del PSA, logrando una pureza del 99 % wt (peso) de etanol, el cual cumple con los estándares internacionales para ser utilizado como combustible, algunos de los estándares son: la norma europea CEN EN 15376:2014 del Comité de europeo de normalización, exige que el etanol contenga un máximo de 0.24 % en volumen de agua. La norma estadounidense exige un contenido máximo de agua del 1 % en volumen, mientras que la ANP (agencia nacional de petróleo) de Brazil una resolución 36, 0.4 % en volumen. Por lo tanto, el contenido mínimo de etanol considerado es: 99.76 % en volumen, 99.39 % en moles, 99.0 % en volumen, 97.47 % en moles, 99.6 % en volumen, 98.98 % en moles. La contribución de este trabajo se centra en obtener un modelo identificado capaz de capturar la importante dinámica del proceso PSA (con un ajuste superior al 90 %) y que pueda ser utilizado para el diseño de controladores, ya que es muy complicado diseñar el control en sistemas altamente no lineales ya que son difíciles de predecir y modelar por no ser iguales en la suma de sus partes. Para este diseño, se asume un modelo que se representan con Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP). Como prueba de concepto, una comparación entre el modelo matemático Hammersetein-Wiener (HW) (sistemas dinámicos que utilizan uno o dos bloques estáticos no lineales en serie con un bloque lineal) y la red neuronal artificial (RNN-por sus siglas en inglés) mostró la relevancia del método propuesto, utilizando las mismas señales de entrada y salida. Entre las metodologías para identificar un sistema, en esta investigación se propone una RNN la cual ha sido comparada con un modelo HW. La RNN ha mostrado el mejor desempeño entre los modelos computados (HW vs RNN), usando varios procedimientos de prueba e índices de desempeño, por ejemplo, el FIT (ajuste) donde la RNN tiene un 84.51 % mientras que el modelo HW tiene un 75.8425 %.

Abstract

The pressure swing adsorption (PSA) process is a novel method for the purification and production of bioethanol. In this thesis, the implementation of a highly nonlinear rigorous model, represented with Partial Differential Equations (PDE), is proposed to simulate the cyclical dynamics of the PSA, achieving purity of 99 % wt (weight) of ethanol, which meets international standards for being used as fuel, some of the standards are: The European standard (CEN EN15376:2014) (Standardization Committee) requires that ethanol contain a maximum of 0.24 % in volume of water. The US standard requires a maximum water content of 1 % in volume, while the ANP of Brazil (national petroleum agency) a resolution 36, 0.4 % by volume. Therefore, the minimum ethanol content considered is 99.76 % by volume, 99.39 % mol, 99.0 % by volume, 97.47 % mol, 99.6 % by volume, and 98.98 % in moles. The contribution of this work focuses on obtaining an identified model capable of capturing the important dynamics of the PSA process (with an adjustment greater than 90 %, and is used for the design of controllers since it is very complicated to design control in highly nonlinear systems). As a proof of concept, a comparison between Hammerstein-Wiener (dynamic systems using one or two static blocks nonlinear in series with a linear block) and Artificial Neural-Networks showed the relevance of the proposed method, using the same input and output signals. The pressure swing adsorption (PSA) process is a novel method for the purification and production of bioethanol. A rigorous, highly unreliable model is implemented to simulate the cyclical dynamics of PSA, achieving a purity of 99 % wt ethanol, which complies with international standards for fuel use. The contribution of this work focuses on obtaining an identified model capable of capturing the important dynamics of the PSA process (with an adjustment greater than 90 % and that can be used for controller design, as it is very complicated to design the control in highly nonlinear systems models that are represented with partial differential equations (PDE). As a proof of concept, a comparison between Hammerstein-Wiener and Recursive Neural Network (RNN) showed the relevance of the proposed method, using the same input and output signs. Several methodologies exist to identify a system; an RNN is proposed and compared with a HW model in this research. The RNN has shown the best performance among the computed models (HW vs RNN), using various testing procedures and performance indices, for example, the FIT where the RNN has 84.51 % while the HW model has 75.8425 %.

Índice general

Índice de figuras	XI
Índice de tablas	XIII
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Antecedentes	5
1.2. Planteamiento del problema	7
1.3. Justificación	8
1.4. Objetivos	9
1.4.1. General	9
1.4.2. Particulares	9
1.5. Preguntas de investigación	9
1.6. Estructura de tesis	9
2. MARCO TEÓRICO	1
2.1. Adsorbentes para el azeótropo etanol-agua	2
2.2. Modo de adsorción por oscilación de presión	3
2.3. Redes neuronales artificiales	8
2.3.1. Función de activación	9
2.3.2. Redes neuronales multicapa realimentadas	9
2.3.3. Entrenamiento de redes neuronales	10
2.3.4. Algoritmos para la optimización	12
2.3.5. Métodos gradiente	13
2.3.6. Factor de aprendizaje η	13
3. ESTADO DEL ARTE	15
3.1. Zeolita utilizada para la mezcla etanol-agua	15
3.2. Modelado de ecuaciones diferenciales parciales aplicado a un proceso PSA.	16
3.3. Redes neuronales artificiales aplicadas al proceso PSA	20
4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL	23
4.1. Modelado de EDP para un proceso PSA	23

ÍNDICE GENERAL

4.2. Análisis de sensibilidad	27
4.2.1. Redes neuronales	27
4.2.2. RNN para identificación de PSA	27
4.2.3. Modelo matemático RNN	28
5. RESULTADOS	33
5.1. Resultado caso de estudio número uno.	33
5.2. Resultado caso de estudio número dos.	37
6. CONCLUSIONES Y DISCUSIONES	43
Bibliografía	45

Índice de figuras

1.1. Punto azeótropico en la mezcla etanol-agua [38].	2
1.2. Destilación azeotrópica.	3
1.3. Destilación extractiva.	4
1.4. Destilación de vacío [19].	5
1.5. Adsorción con tamices moleculares utilizando el metodo de adsorción por oscilación de presión [38].	6
1.6. Pervaporación [38].	7
2.1. Tamiz molecular [38].	2
2.2. Adsorción con tamices moleculares [38].	3
2.3. Modo de adsorción por oscilación de presión [38].	4
2.4. Etapa producción ejecutando el paso de adsorción [43].	5
2.5. Etapa regeneración ejecutando el paso de despresurización [43].	6
2.6. Etapa regeneración ejecutando el paso de purga [43].	7
2.7. Etapa regeneración ejecutando el paso de represurización [43].	7
2.8. Esquema de una neurona artificial [43].	8
2.9. Funciones de activación para neuronas artificiales. Copyright 2020 CENIDET [38].	10
2.10. Red neuronal artificial de varias capas realimentada con $p - q$ neuronas, n entradas y q y más salidas [38].	11
2.11. RNN multicapa realimentada con $p - q$ neuronas, n entradas y q salidas. Copyright 2020 CENIDET [11].	14
3.1. Isotermas de adsorción [43].	16
4.1. RNN propuesta para identificación de PSA.	28
5.1. Estructura del modelo de Hammerstein-Wiener.	33
5.2. Señal PRBS de 3 bits.	34
5.3. Salida de PRBS (pureza de etanol).	35
5.4. Comportamiento temporal del sistema real, modelo HW y modelo RNN.	35
5.5. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo HW. El ajuste es 75.84.	36

ÍNDICE DE FIGURAS

5.6. Distribución de la salida real del sistema y la salida generada por el modelo	
RNN. El ajuste es 84.51.	36
5.7. Prueba de intersección de pendientes para el modelo HW.	37
5.8. Esquema del proceso PSA.	38
5.9. Perfil de presión de un ciclo PSA.	39
5.10. Entrada prbs 5 bits.	39
5.11. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo	
RNN.	40
5.12. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo HW	41
5.13. Prueba de pendiente HW.	42
5.14. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo	
RNN.	42

Índice de tablas

3.1. Comparación de los valores termodinámicos y cinéticos de varios adsorbentes, a diferentes temperaturas de operación.	17
3.2. Trabajos reportados sobre operación de procesos PSA	18
3.3. Condiciones iniciales y de Frontera para el modelo [38] y [43]	19
4.1. Símbolos y letras.	30
4.2. Condiciones iniciales y de Frontera para el modelo.	31

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

El etanol es un combustible alternativo que puede ser usado en motores de ignición (motor de combustión interna), motores bivalente (motor de combustión que puede usar dos tipos de combustible) es decir, carburante o aditivo de oxigenante. Ejemplos de etanol incluye el E100 (100 % bio-etanol, E100 es etanol puro, es decir 95 % etanol, 4 % lubricante y 1 % colorante) requiere tecnología de combustión propia; el E85 (85 % bioetanol+15 % gasolina) es utilizado en los llamados vehículos FlexiFuel; el E5 (5 % bioetanol+95 % gasolina) no requiere modificación de los vehículos. Para que su uso sea posible, el bio-etanol necesita estar libre de agua (se conoce entonces como etanol anhidro). Existen varias alternativas para producir bioetanol, estas son la destilación extractiva con sales, la destilación azeotrópica, la destilación al vacío, la pervaporación y la adsorción (fenómeno donde átomos, iones o moléculas de gases, líquidos o sólidos disueltos son retenidos en una superficie de una sustancia sólida o líquida), con tamices moleculares. Actualmente, los procesos con tamices moleculares han desplazado a ciertas tecnologías (destilación azeotrópica y extractiva con sales), ya que tienen menores costos energéticos y de equipos [23]. Otra de las ventajas de este proceso es la obtención de purzas del 99 % de bio-etanol frente a procesos de pervaporación que consiguen alcanzar purzas cercanas al 97 % de etanol. Para que los procesos de pervaporación alcancen una pureza del 99 % del bio-etanol, necesitan equipos externos que involucran otros pasos de purificación. Para purificar el etanol y lograr las propiedades del etanol combustible, se ha utilizado el proceso de adsorción con tamices moleculares utilizando el método (PSA). El bio-etanol es producido mediante procesos de fermentación de biomasa, particularmente a partir de la fermentación de cualquier material biológico que contenga azúcares (carbohidratos, polisacáridos, etc), almidón (contenido en granos como maíz, trigo o cebada) o celulosa (de tallos, troncos, ramas o cáscaras de plantas). La transformación completa de esta materia prima en etanol anhidro se lleva a cabo en tres etapas: [23].

- ETAPA 1. Adecuación de las materias primas (biomasa) para preparar la alimentación al proceso de fermentación (normalmente la biomasa se convierte en una forma de azúcar).
- ETAPA 2. Fermentación de los materiales procedentes de la etapa 1, usando biocatalizadores (microorganismos como levaduras y bacterias). El producto es una mezcla

etanol-agua conteniendo entre 8 y 15 % de etanol.

- ETAPA 3. Procesamiento del producto de la fermentación para conseguir etanol anhidro mediante la etapa de deshidratación, esta consiste en purificar el etanol mediante la eliminación de la mayor parte de agua contenida en la fermentación. Para que el bio-etanol pueda ser usado como combustible en motores de ignición o motores bivalentes, el total de alcoholes según las normas ASTM D 4814 de Estados Unidos, ANP Resolución 36 de Brasil y PREN 15376 de la Unión Europea debe ser mínimo de 98.95, 99.6 y 99.76 % volumen de etanol, respectivamente.

La mezcla etanol-agua forma un azeótropo (ver Figura. 1.1) mínimo en una composición de 86 % mol. de etanol y 14 % mol. de agua, a 78.2 °C y presión atmosférica estándar. Esta propiedad hace que la mezcla no pueda ser separada por un proceso tradicional de destilación binaria.

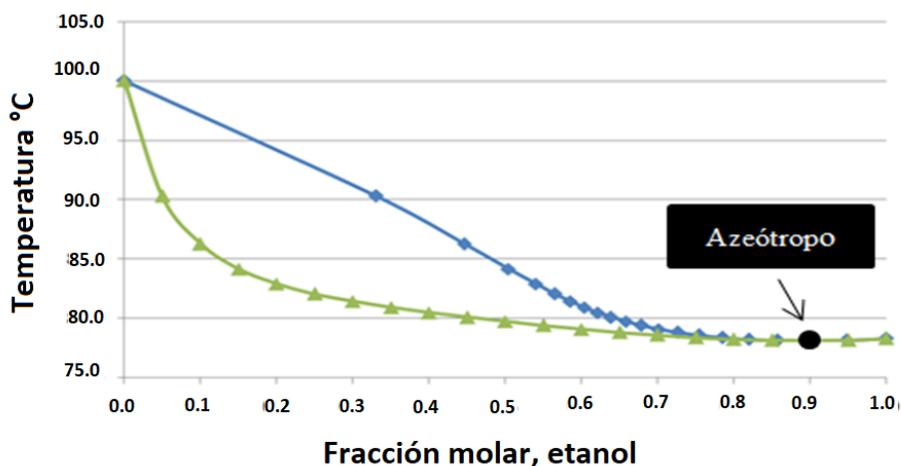


Figura 1.1. Punto azeotrópico en la mezcla etanol-agua [38].

Para purificar el bio-etanol hasta lograr las propiedades de bio-etanol carburante se ha recurrido a otras tecnologías de destilación o procesos de separación:

- Procesos de deshidratación química (que implican reacciones).
- Procesos de destilación azeotrópica: Homogénea y heterogénea (ver Figura. 1.2).
- Procesos de destilación extractiva (usando: solventes, sales, una combinación solvente-sal, o nuevos agentes separadores como líquidos iónicos [33], [25] y polímeros hiper-ramificados [19] (ver Figura. 1.3).
- Deshidratación al vacío (ver Figura. 1.4).
- Procesos de destilación con difusión o de destilación reactiva.

- Procesos de adsorción con tamices moleculares (ver Figura. 1.5).
- Pervaporación (separación con membranas) (ver Figura. 1.6).
- Otros procesos.

Cada uno de los procesos citados tiene un grado de desarrollo diferente y un impulso en la industria también desigual. El presente proyecto compromete por un lado, la selección de agentes de separación (zeolita) no tóxicos, comercialmente disponibles y de bajo costo; y por otro lado, la construcción de un PSA para establecer condiciones de operación óptimas y procedimientos de recuperación energéticamente convenientes. El modelado riguroso altamente no lineal de los procesos PSA para la separación gaseosa es un tema muy poco estudiado en la literatura. Balances de masa, energía y momento, así como ecuaciones constitutivas sobre el equilibrio y la cinética de adsorción, forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales [43]. En la mayoría de los casos, cuando las simplificaciones no son factibles, es necesario utilizar métodos numéricos para simular el flujo de gas a través de un lecho empacado para su separación. Dado que los fenómenos de adsorción dependen tanto del tiempo como del espacio, existen dos enfoques principales para resolver las ecuaciones EDP: discretizar las derivadas de tiempo y espacio y resolverlas simultáneamente o identificación de sistemas a través de entradas y salidas del proceso PSA [38].

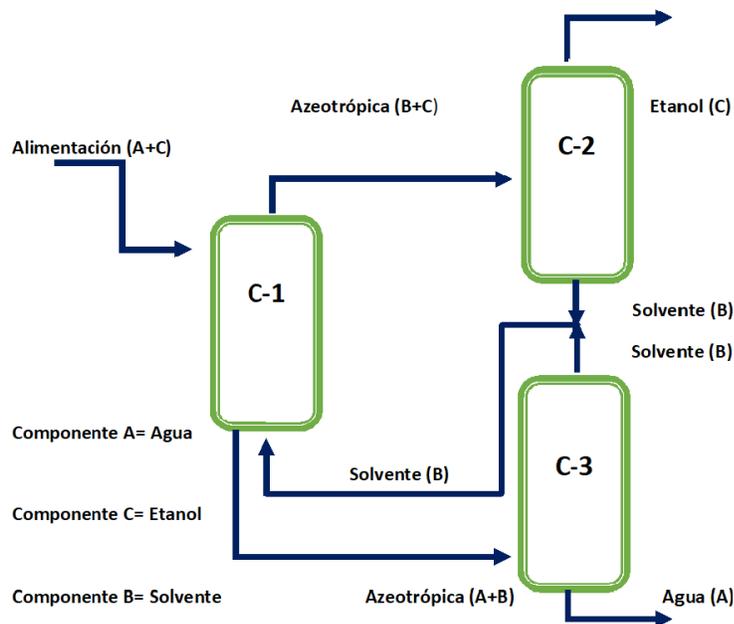


Figura 1.2. Destilación azeotrópica.

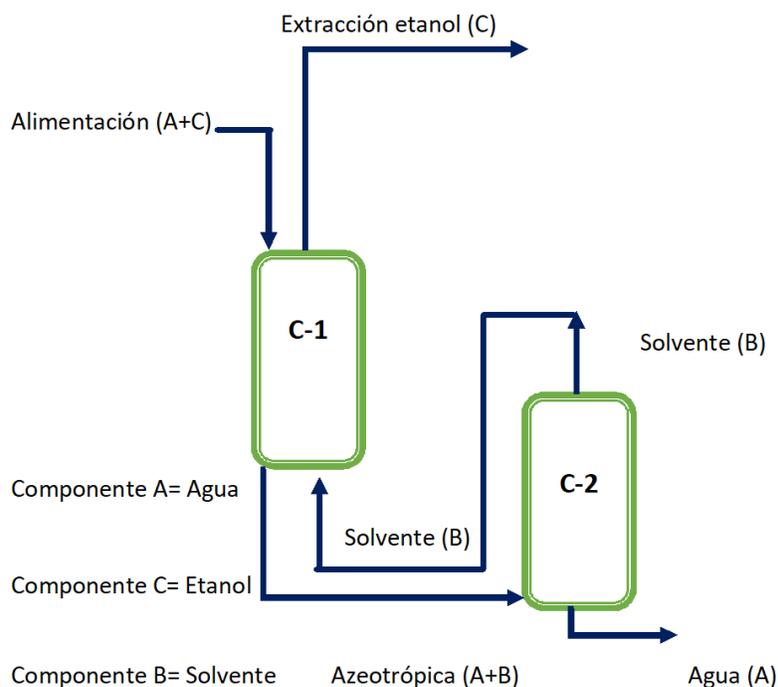


Figura 1.3. Destilación extractiva.

Se han utilizado varios métodos de optimización para mejorar el rendimiento del proceso de adsorción por oscilación de presión con el fin de mejorar su rendimiento. En [20] se menciona cómo se llevaron a cabo las rutinas de optimización del proceso de PSA para la purificación de hidrógeno en el software gPROMS (simulador que capturan el conocimiento profundo de los procesos en forma de modelos predictivos de alta fidelidad). En [46] se menciona cómo se ha utilizado el método de programación cuadrática secuencial para optimizar el ciclo de adsorción por oscilación de presión de vacío. Con base en los datos experimentales en [38] se menciona cómo se validó el modelo de adsorción por cambio de presión en la plataforma de software Aspen Plus ®/Aspen Dynamics ® y llevó a cabo un estudio paramétrico del sistema de purificación de bio-etanol. Se han utilizado modelos sustitutos de RNN para optimizar la separación de mezclas gaseosas N_2/O_2 y H_2/CO [21].

La tecnología de aprendizaje automático recibe una gran atención en todo el mundo. El aprendizaje automático es una parte importante de la inteligencia artificial. Existen varios métodos de aprendizaje automático, como la RNN, la regresión lineal bayesiana, el árbol de decisiones, etc. La RNN incluye la red neuronal de retroalimentación, que se caracteriza por enviar estímulos a capas anteriores, de tal manera que cada neurona tiene que calcular y recalcularse varias veces hasta que este sea estable. El aprendizaje profundo es una nueva área de investigación, que recibe cada vez más atención. Los modelos de aprendizaje

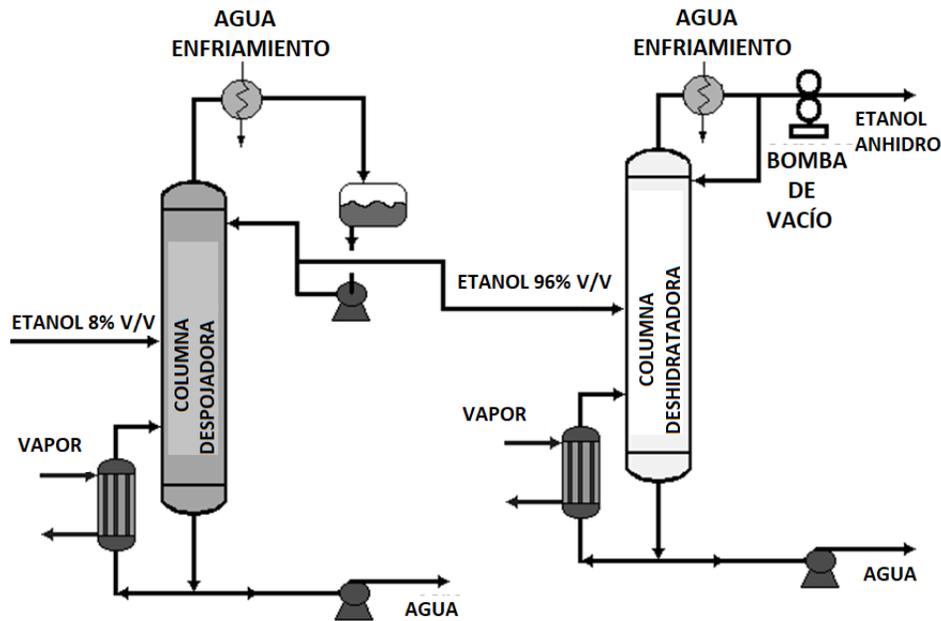


Figura 1.4. Destilación de vacío [19].

profundo donde se incluyen muchas capas ocultas incluyen la red neuronal convolucional.

El modelo de RNN se puede utilizar para la predicción y la optimización del rendimiento. En [36] estimaron el porcentaje en peso de hidrógeno de los hidruros metálicos basándose en el aprendizaje automático. Presentaron la clasificación de características de algunas variables y sus resultados sobre la importancia de las características mostraron que no es necesario conocer la fórmula de composición para predecir el valor del porcentaje en peso de hidrógeno.

1.1. Antecedentes

Entre los procesos con menor consumo de energía, la adsorción con tamices moleculares es interesante debido a que no se usan materiales tóxicos, ni solventes y es una de las tecnologías que se está imponiendo en la industria. El estudio de este proceso implica sin dudas la asimilación de tecnología actual de deshidratación de bio-etanol y presenta retos interesantes con relación a mejoras en la operación, los cuales pueden ser abordados con la automatización y en trabajos futuros con el control del proceso.

Para efectuar la presente investigación se revisaron algunos trabajos realizados como los de [43], [47], [55] quienes estudiaron el modelado y optimización del proceso PSA a partir de redes neuronales. En base a varios algoritmos óptimos desarrollados en el trabajo de [35] se utilizó Aspen Dynamics para simular y controlar una planta de destilación azeotrópica

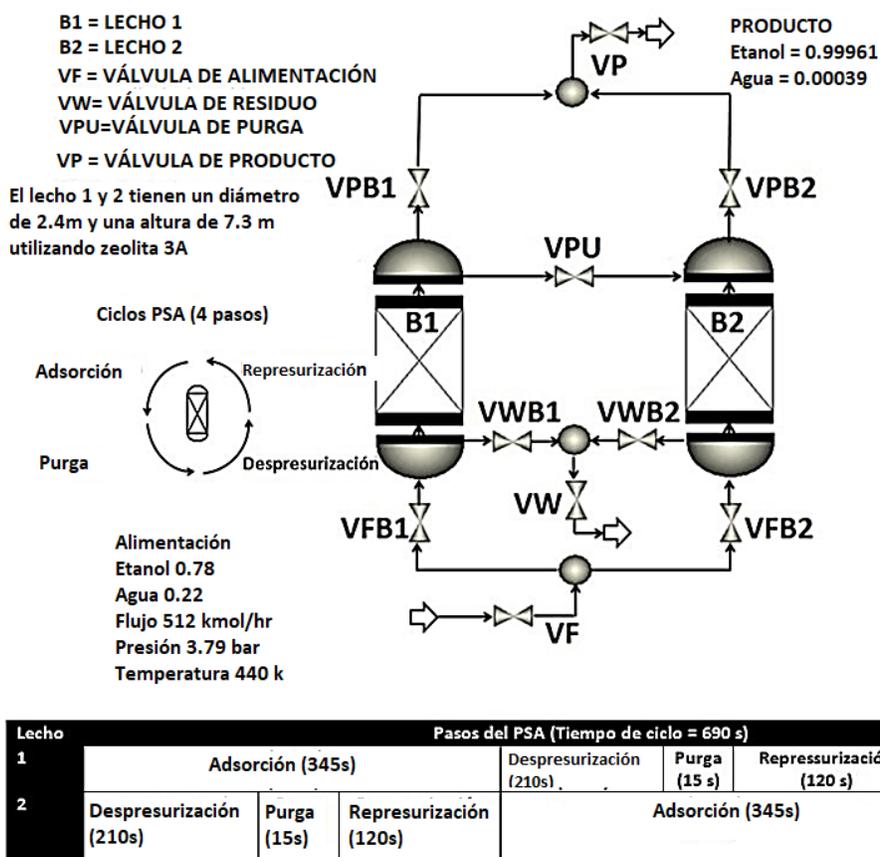


Figura 1.5. Adsorción con tamices moleculares utilizando el metodo de adsorción por oscilación de presión [38].

heterogénea. Aunque el objetivo de estos trabajos fue para diferentes mezclas, los objetivos operacionales y los problemas de configuración son muy similares a lo que presentan para logra la identificación de un modelo simplificado basado en redes neuronales. Por lo tanto, a partir de estos estudios es importante el análisis estático y dinámico del proceso es indispensable para tomar decisiones sobre la estructura del proceso, además, en todos los casos, se trata de procesos multivariables, no lineales y con interacciones. Así mismo estos modelos presentan complejidad en la solución analítica, sin embargo, existen software especializados en los cuales se realizan simulaciones de procesos especializados, por ejemplo la red neuronal artificial se utiliza en problemas de optimización [50], puede considerarse como un modelo sustituto para disminuir el tiempo de optimización [41]. En cuanto a los procesos integrados, el modelo RNN también presenta un buen rendimiento de predicción [51].

En [45] se muestra el comportamiento de isoterma de adsorción simulado y predicho por redes neuronales. En [28] se aplicó el modelo de red neuronal artificial para predecir el tiempo de penetración de la mezcla gaseosa en el lecho de capas de carbón activado y zeolita y encontrar la relación de capa óptima de carbón activado a la altura de la zeolita basado en una fórmula empírica para definir el número de neuronas en la capa oculta [57].

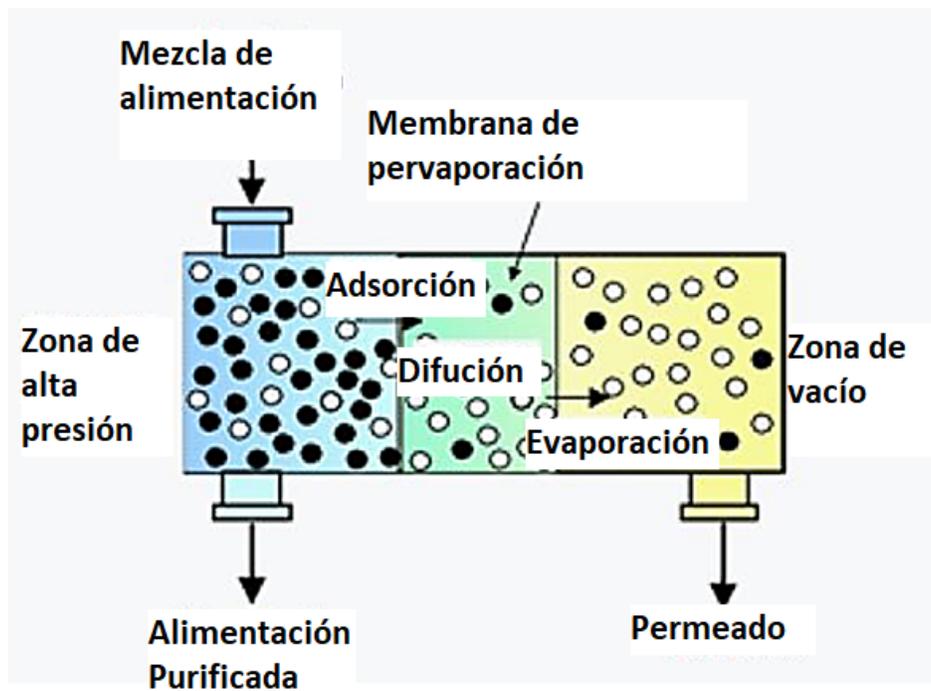


Figura 1.6. Pervaporación [38]

A partir de los desarrollos de RNN aplicados a procesos, en [47] se desarrolló un modelo RNN y encontró condiciones de operación óptimas del ciclo de adsorción por oscilación de presión de cuatro pasos basado en el modelo de red neuronal artificial entrenado y la función de optimización multiobjetivo en la plataforma Matlab. El modelo RNN combinado con el algoritmo del programa cuadrático de secuencia (SQP) se utilizó para la optimización multiobjetivo en [52].

Posteriormente en [14] desarrollaron un método de algoritmo genético basado en optimización multiobjetivo con RNN para un sistema de producción de hidrógeno. [55] logró los Frentes Pareto-Óptimos utilizando el algoritmo genético de clasificación no dominado-II del modelo sustituto basado en RNN para el proceso de PSA.

1.2. Planteamiento del problema

Existen sistemas altamente complejos con dinámicas no lineales, difíciles de modular y controlar con dificultad para modelar y controlar; algunas veces es necesario discretizar el sistema o proceso en subsistemas con el objetivo de generar un modelo que capture las dinámicas importantes del proceso real y poder diseñar controladores para cada parte del sistema. Algunos de estos controladores son diseñados mediante análisis del comportamiento físico

del sistema y mediante el uso del modelo matemático será capaz de cumplir con la tarea de caracterizar al sistema.

El problema está en la necesidad de obtener un modelo que describa el comportamiento de sistemas altamente complejos. En ocasiones el proceso de modelar matemáticamente es tardío, sensible y tedioso, y algunas veces la precisión del modelado no caracteriza el comportamiento real del sistema, también en otras circunstancias, no es posible medir todas las variables del sistema haciendo que los parámetros del sistema sean inmedibles ocasionando que todo el proceso de modelado se vea desperdiciado por su bajo rendimiento. Cabe destacar que existen modelos cuyo grado de precisión es elevado y son capaces de sustituir fielmente el comportamiento físico del sistema. Por otro lado, el segundo método de modelado de sistemas consiste en medir las señales de entrada y salida del sistema, suponer que el sistema es una caja negra o caja gris y proponer un modelo matemático que asemeje el comportamiento del sistema.

La problemática se centra en encontrar una regla de modificación sináptica que permita que una red neuronal conectada arbitrariamente desarrolle una estructura interna que sea apropiada para un dominio de tarea en particular con el objetivo de proporcionar un modelo sustituto exhaustivo en sus variables. La tarea se especifica dando el vector de estado deseado de las unidades de salida para cada vector de estado de las unidades de entrada [39].

1.3. Justificación

El método de adsorción por oscilación por presión, se ha convertido en una de las principales técnicas a nivel industrial para realizar de destilación del bio-etanol (destilación de tipo azeotrópica), esto debido a que el PSA puede alcanzar altos niveles de pureza llegando a valores hasta del 99.5 % en peso, además de reducir el consumo energético así como los costos de proceso. En cuanto a su estudio, este proceso se caracteriza por la ocurrencia simultánea de diferentes fenómenos entre los cuales podemos encontrar de tipo difusivos, termodinámicos, cinéticos y térmicos; el PSA se caracteriza principalmente por ser un proceso con varias etapas para su correcto funcionamiento, es decir trabaja en estado pseudo-estacionario. Para configurar estas etapas, se deben definir las condiciones de operación y la duración del ciclo. En cuanto al modelo matemático de este proceso, es conocido que se trata de un sistema complejo, en el cual se incluye variaciones de tipo temporales y espaciales, así como definir las condiciones de inicio y de finalización para cada una de las etapas. Con base a todo esta recopilación se mostró que no existen modelos y controladores adquiridos a partir de redes neuronales relacionado con el proceso PSA, por lo tanto es de gran importancia procesar los datos de la planta real para la optimización del proceso PSA.

1.4. Objetivos

1.4.1. General

Diseñar una estructura de redes neuronales para la optimización y control del proceso de adsorción por oscilación de presión para la producción de bio-etanol con una pureza del 99.5 %.

1.4.2. Particulares

1. Identificar un adsorbente comercial adecuado para aplicaciones de deshidratación de etanol y los datos experimentales de desempeño termodinámico.
2. Analizar y seleccionar en simulación las diferentes configuraciones del proceso PSA para definir los parámetros nominales adecuados y obtener un proceso óptimo.
3. Diseñar la PRBS en función del lazo de control primario para encontrar la señal de entrada más eficiente en el proceso.
4. Identificar un modelo por redes neuronales para otorgar una señal de salida preliminar y así compararla con la salida real.
5. Optimizar el proceso a partir de redes neuronales para vincular la dinámica de entrada y salida del sistema.

1.5. Preguntas de investigación

1. ¿ Se puede proponer una arquitectura de Red Neuronal Artificial que logre una mayor aproximación que el modelo Hammerstein-Wiener?
2. ¿La producción de bio-etanol puede ser estimada con parámetros de entrada y salida a partir de un modelo de Red Neuronal Artificial?

1.6. Estructura de tesis

Este trabajo de tesis está dividido de la siguiente manera: En el capítulo 1 se presenta la introducción, relacionado con todos los trabajos encontrados en la literatura, abarcando desde, modelado, redes neuronales y procesamiento de datos sobre el proceso PSA.

En la capítulo 2 se presenta el marco teórico relacionado con el proceso PSA y las redes neuronales. En el capítulo 3 se presenta el estado del arte abordando sobre el modelado del

proceso PSA representado por EDP, incluidas las especificaciones de adsorbentes y las isothermas de adsorción, también presentamos la metodología empleada para la generación del modelo sustituto RNN, incluida la técnica de muestreo y el algoritmo de poda para evitar el sobreajuste, así como el número ideal de muestras para obtener un modelo sustituto RNN adecuado y realizar diferentes procedimientos de estimación de errores. En el capítulo 4, se presentan el desarrollo, donde se muestra la RNN aplicada a un PSA para producción y purificación de etanol, así como el modelado de EDP para un proceso PSA, también se realizó el análisis de sensibilidad. Para el capítulo 5 abordamos los resultados obtenidos en los dos casos de estudio (columna de 3 y 7 metros). En capítulo 6 se muestra la conclusión.

Capítulo 2

MARCO TEÓRICO

La adsorción es un fenómeno físico de separación por el cual se transfieren átomos, iones o moléculas de una fase fluida (gaseosa, líquida o una solución conteniendo sólidos disueltos) hacia la superficie de un sólido (o tamiz molecular). La transferencia se lleva a cabo por medio de interacciones físicas y químicas de diferente tipo; por ello, la adsorción se considera como un fenómeno superficial. El sólido se conoce como adsorbente y el componente que se adhiere se llama adsorbato, este último debe ser poroso para que se disponga de un área de contacto o de adsorción muy grande [38].

Un tamiz molecular es un material de forma cilíndrica o esférica, está formado por aluminosilicatos metálicos hidratados cristalinos, carbones microporosos, arcillas o zeolitas que contienen diminutos poros que pueden tener un tamaño preciso y uniforme, o pueden tener diferentes dimensiones, en todo caso tienen una estructura interna tridimensional, en la figura 2.1 se muestran ejemplos de tamices moleculares. Las principales características que deben tener los tamices moleculares son una gran superficie de contacto (asociada a una elevada porosidad), alta selectividad para favorecer la retención de agua (en caso de aplicaciones de deshidratación) y una elevada capacidad de regeneración [9].

Las zeolitas son formadas por canales y cavidades regulares y uniformes de dimensiones moleculares (0.5 mm a 0.8mm o de 4 mm a 6 mm) que son medidas similares a los diámetros cinéticos de una gran cantidad de moléculas. En la Figura. 2.1 se puede observar que existen diferente diámetros las cuales tienen diferentes aplicaciones, algunas de ellas son utilizadas para separar compuestos de oxígeno, nitrógeno y otras son para CO_2 , metano e hidrógeno. En el área médica están involucrados en los mecanismos de desintoxicación y en capturar iones y moléculas en sus agujeros. Las zeolitas naturales tienen ventanas de tamaño limitado (“tamaño de poro”) y todas son hidrofílicas (tienen afinidad por el agua). La zeolita tiene un “tamaño de poro” uniforme, lo cual hace que se le denomine como un “tamiz molecular”.



Figura 2.1. Tamiz molecular [38].

2.1. Adsorbentes para el azeótropo etanol-agua

En particular, la deshidratación del etanol se lleva a cabo con zeolitas naturales o sintéticas que contienen poros con diámetros de 3 nm (nanómetros), ligeramente superiores al diámetro de la partícula de agua que es de 0.25 nm. La molécula de agua es adsorbida sobre la superficie de los poros de la zeolita por ser de un diámetro menor al de los poros del adsorbente y son retenidas sin crear un enlace fuerte, ver Figura. 2.2. En cambio, las moléculas de etanol que tienen un diámetro de 0.4 nm no pueden entrar en los poros de las zeolitas, por lo tanto, fluyen a lo largo del lecho empacado con material adsorbente, la zeolita puede adsorber agua hasta el 30 % de su propio peso [44].

Las propiedades de las zeolitas que deben tomarse en cuenta son:

1. Porosidad. Las principales características que deben tener estos materiales son una gran superficie de contacto (asociada a una gran porosidad).
2. Adsorción. Selectividad alta que favorezca la retención del agua (en caso de deshidratación) y una capacidad elevada de regeneración.
3. Resistencia. Deben de tener alta resistencia a elevadas temperaturas, ya que esto permite que la zeolita libere (molécula de agua) los sitios activos rápidamente.

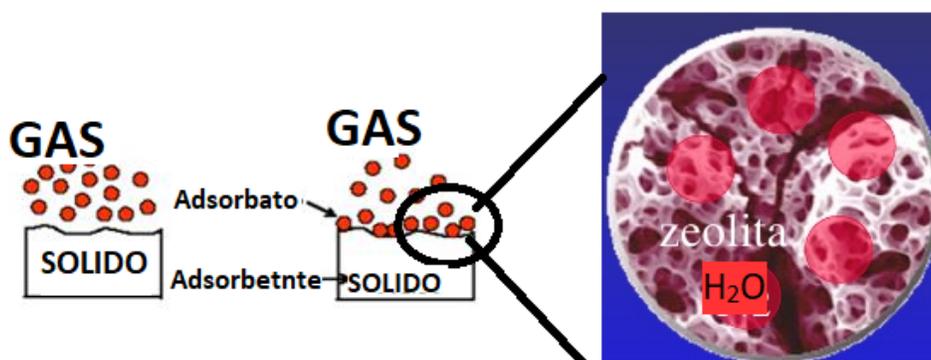


Figura 2.2. Adsorción con tamices moleculares [38].

2.2. Modo de adsorción por oscilación de presión

El proceso de adsorción se realiza en fase vapor o líquida usando dos o más columnas que contienen zeolitas (naturales o sintéticas), dos etapas generales forman un ciclo: la adsorción (producción de etanol anhidro) y desorción (regeneración, desorción o purificación del tamiz molecular), las cuales se realizan de manera cíclica en cada una de las columnas; es decir, mientras en una columna se lleva a cabo la adsorción, en la segunda se lleva a cabo la regeneración. Después de un tiempo, llamado tiempo de medio ciclo, las operaciones se invierten hasta completar un ciclo completo. Este cambio de operación en las columnas se repite cíclicamente [1], [42] [44].

En el modo PSA, la adsorción se lleva a cabo cambiando la presión por ejemplo, entre 200 y 500 kPa, ya que se ha observado que en estas condiciones, las zeolitas adsorben mayor cantidad de agua y llegan rápidamente a su punto de equilibrio. Por el contrario, para la etapa de desorción la columna de regeneración opera a una presión baja, por ejemplo, entre 40 y 13 kPa para regenerar el lecho de tal forma que este pueda ser usado nuevamente. En la Figura 2.3 se muestra el proceso de adsorción donde las flechas indican el sentido del flujo de la presión en cada lecho.

Pasos en un ciclo PSA completo

Un ciclo consta de dos etapas (producción y regeneración), las cuales se llevan a cabo en cuatro pasos: (1) adsorción, (2) despresurización, (3) purga y (4) represurización. Los pasos 2, 3 y 4 forman parte de la etapa de regeneración y la etapa de producción lo conforma el paso de adsorción. A continuación se detallan los pasos de un ciclo completo, asumiendo la configuración del ciclo reportada en el trabajo realizado por [43].

1. Etapa de producción (paso de adsorción).

Se considera un proceso formado por dos columnas de adsorción empacadas con zeolitas sintéticas tipo 3A. Con el fin de describir el funcionamiento de la planta se considera

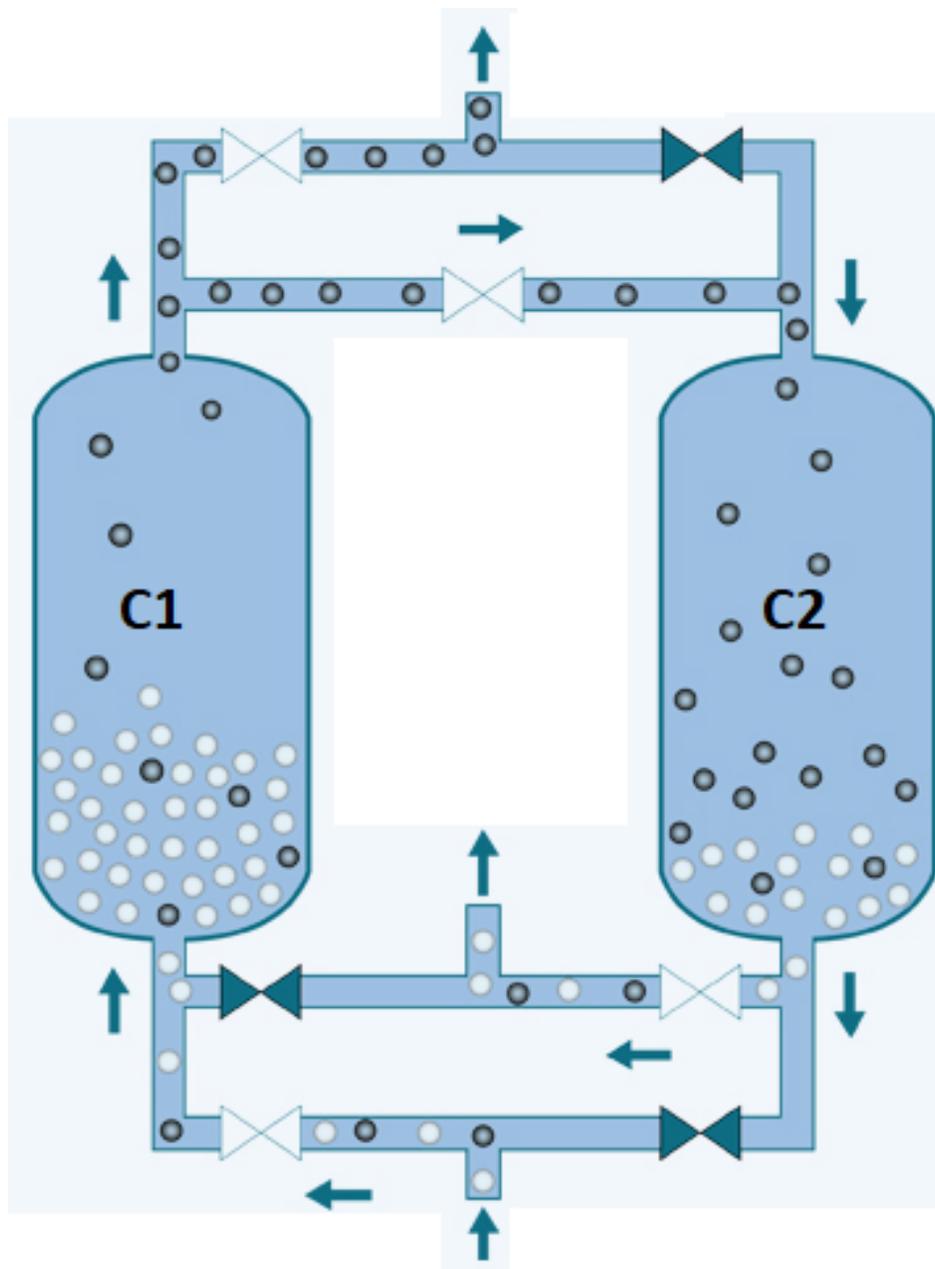


Figura 2.3. Modo de adsorción por oscilación de presión [38]

también que en la columna C1 se lleva a cabo la primera etapa de adsorción.

- C1 es alimentada desde la parte superior con una corriente conteniendo una mezcla de etanol-agua en fase vapor y con concentración cercana a la del azeótropo que forma la mezcla. La columna opera a una presión elevada para favorecer la adsorción (200 kPa). El flujo de vapor atraviesa el lecho empacado, el cual retiene

el agua y deja pasar el etanol como se muestra en la Figura. 2.4. De esta manera, el flujo de salida es cada vez más rica en etanol, mientras que el sólido que retiene las moléculas de agua en su superficie porosa se satura poco a poco. El tiempo que tarda esta etapa es el tiempo de adsorción (345 s para el ejemplo citado). El producto es etanol anhidro que sale por la parte inferior del lecho. Parte de la corriente de producto se usa para alimentar la columna C2 con el fin de presurizarla y purgar el lecho C2 que se encuentra saturado de moléculas de agua [44].

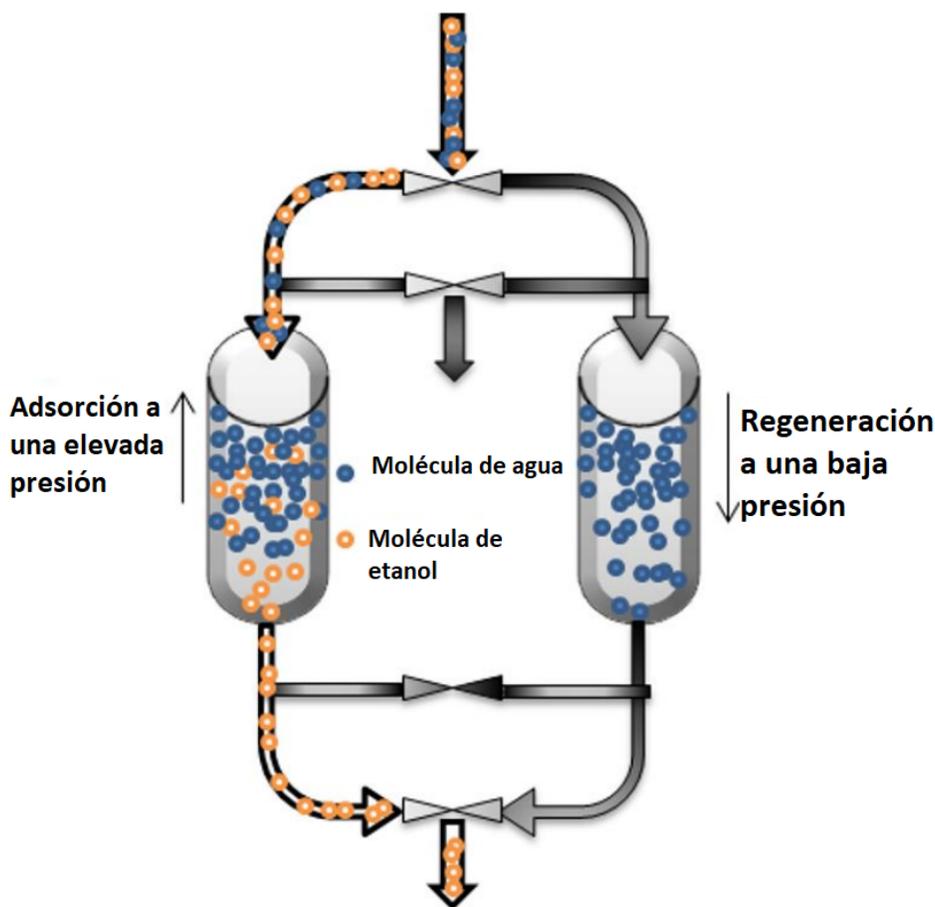


Figura 2.4. Etapa producción ejecutando el paso de adsorción [43].

2. Etapa de regeneración (pasos de despresurización, purga y represurización).

Se asume que al mismo tiempo en el lecho C2 se lleva a cabo la etapa de regeneración y que esta opera a presión baja para favorecer la desorción de agua (13.2 kPa). Las moléculas de agua adsorbidas por el tamiz molecular son eliminadas de los poros del sólido, después purgadas de la columna y finalmente, la columna es llevada al nivel de presión elevada. Al final de la etapa de regeneración, el lecho está listo para reiniciar la etapa de adsorción. En resumen, la etapa de regeneración se realiza en 3 pasos: despresurización, purga y represurización, los cuales se explican con más detalle a continuación:

- En este paso (despresurización) se reduce la presión en el lecho C2 para modificar el equilibrio de adsorción, de tal forma que sea posible retirar el agua que ha sido adsorbida previamente (aproximadamente llega a 13.2 kPa durante 211 s). La válvula en la parte inferior del lecho se cierra, evitando la alimentación de gas en la columna. El otro extremo de la columna, en cambio, permite el paso de la mezcla contenida en la columna hacia la salida. El flujo que sale pasa a través de una válvula colocada en la parte superior del lecho C2, por lo tanto el flujo de gas en la etapa de despresurización atraviesa la columna a contraflujo (en dirección contraria) con respecto al flujo de gas en la etapa de adsorción como se muestra en la Figura. 2.5

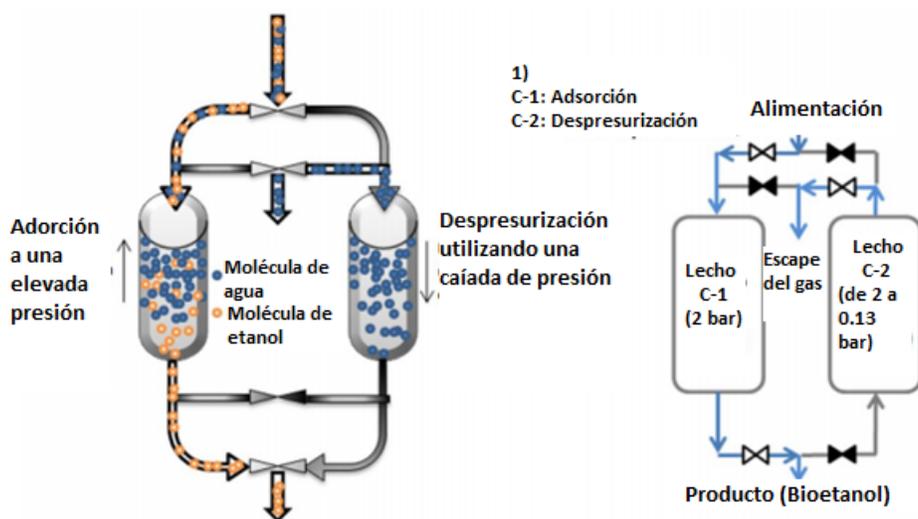


Figura 2.5. Etapa regeneración ejecutando el paso de despresurización [43].

- En este paso (purga) el agua desorbida del lecho empacado es purgada manteniendo baja la presión durante un tiempo corto. Se utiliza una porción de la corriente del producto (etanol puro) de la otra columna C1. Esta porción de producto atraviesa el lecho C2 y arrastra hacia la salida las moléculas de agua que han sido retiradas del lecho, liberando totalmente los sitios activos de los tamices moleculares como se observa en la Figura. 2.6. Con este paso termina la desorción. En resumen, las válvulas de la parte superior e inferior están abiertas para que parte del flujo del producto obtenido de C1 pase a través del lecho C2 y el agua sea purgada (eliminada) manteniendo una presión baja (13.2 kPa por un tiempo de 20 s) [38].
- En el paso de la represurización, el lecho C2 es presurizado para alcanzar las condiciones de adsorción de tal forma que sea posible reiniciar el ciclo. El paso inicia con el lecho (C2) a 13,2 kPa y para presurizarlo se hace pasar continuamente (desde la parte inferior del lecho) el flujo de producto, manteniendo cerrada la válvula en la salida del lecho, hasta alcanzar el nivel de presión alta (200 kPa en un tiempo

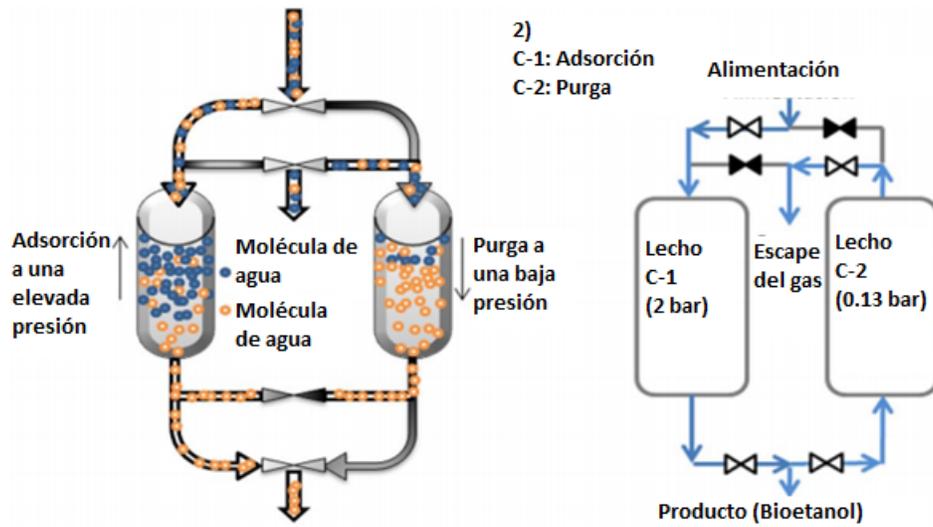


Figura 2.6. Etapa regeneración ejecutando el paso de purga [43].

de 114 segundos), requerido para finalizar la regeneración e iniciar nuevamente la adsorción. El flujo permite presurizar la columna se manipula con la válvula que se encuentra en la parte inferior de la misma, como se muestra en la Figura. [2.7] [5].

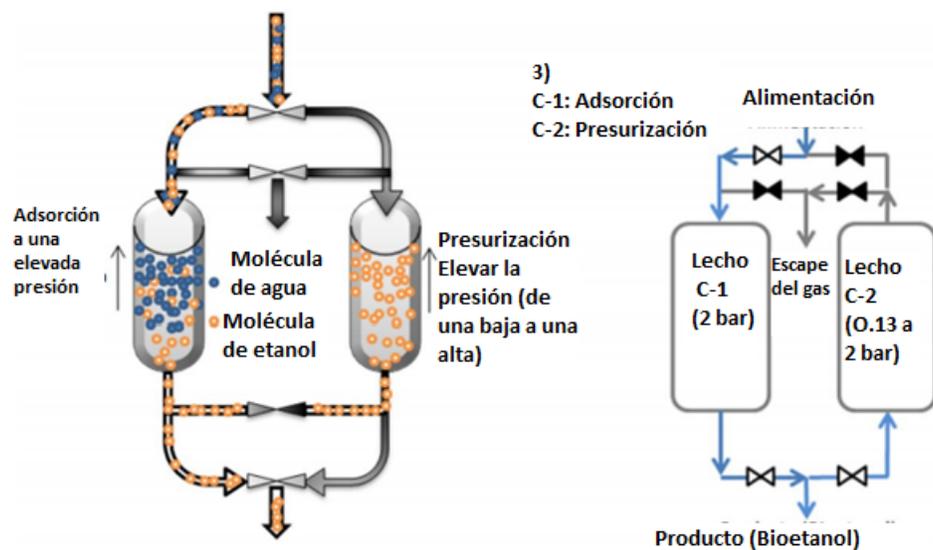


Figura 2.7. Etapa regeneración ejecutando el paso de represurización [43].

2.3. Redes neuronales artificiales

Las redes neuronales artificiales son una familia algorítmica perteneciente al machine learning que ha tomado una popularidad muy alta en los últimos años. Las redes neuronales como modelo comunicacional tiene mucho tiempo existiendo, pero con la mejora de la tecnología así como las técnicas de operación se han utilizado para realizar multitareas de mayor alcance y complejidad, tales como predicción bursátil, procesamiento de imágenes, reconocimiento de caracteres, análisis genético, etc. Como suele ocurrir con estos sistemas complejos con estructuras avanzadas, son basadas para su funcionamiento en la interacción de elementos más simples que trabajan de una forma sistemática y conjunta, finalmente a la unión de todos estos elementos le llamamos neurona.

Semejante a una neurona biológica, la artificial cuenta con conexiones que recibe estímulos independientes, consideradas como entradas, las cuales son desconocidas (x_1, x_2, \dots, x_n) como muestra la Figura. 2.8.

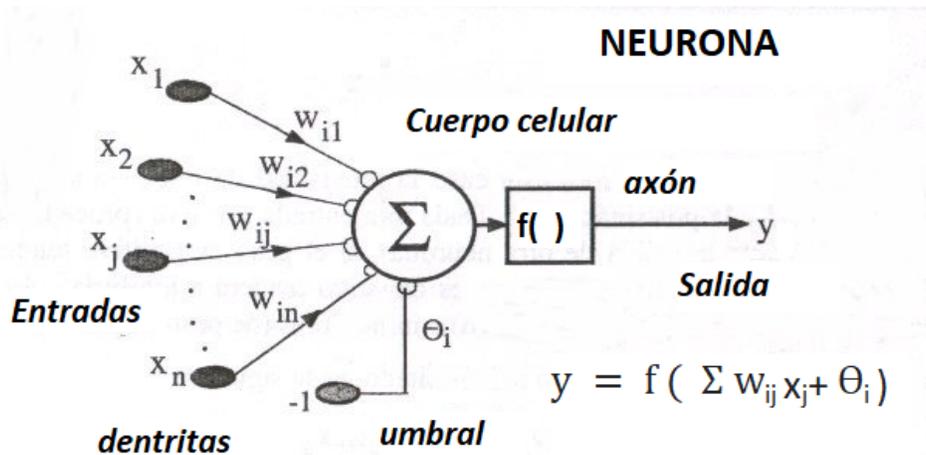


Figura 2.8. Esquema de una neurona artificial [43].

Con los datos de entrada, la neurona comienza a procesar la información, generando así un valor conocido como salida, y ponderada dada a la unión lineal de las entradas y los pesos a los cuales les llamamos pesos sinápticos dados por w_1, w_2, \dots, w_n . La Figura 2.8 se puede representar matemáticamente con la siguiente ecuación:

$$y = f \left(\sum_{j=1}^k W_{ij} X_j + \Theta_i \right), \quad (2.1)$$

donde las entradas están dadas por x , los parámetros de ponderación son w Θ , f es considerada una función y el valor considerado para la salida está dado por y el cual se entrega por la neurona. A continuación se muestran características de la red neuronal así como la capacidad que tiene para aproximar funciones no lineales y su proceso de adaptación.

2.3.1. Función de activación

En función a la señal de entrada, se produce una acción potencial generada por la neurona biológica que fue recibida a través de la sinapsis de forma previa, analógicamente las neuronas de tipo artificiales poseen funciones de activación la que nos permite realizar lo semejante a la neurona biológica. Buscando que la finalidad de la neurona artificial sea realizar un mapeo no lineal, definimos la función de activación tipo no lineal de clase uno, la cual está dada por, $f(v) \in$ esto es debido a que buscamos que tanto la función de activación como su primera derivada sean continuas.

La Figura. 2.9 muestra gráficas representando tres funciones de activación las cuales se mostraron en las ecuaciones (2.2), (2.3) y (2.4). A continuación se muestran algunas funciones de activación que se utilizan en las RNN:

1. Función tipo lineal: es aquella donde el argumento de entrada es igual al argumento de salida (ver Figura. 2.9a).

$$f(v) = v. \quad (2.2)$$

2. Función sigmoideal: se utiliza en las capas ocultas de una RNA, esto porque la derivada y la función son continuas. (ver Figura. 2.9b).

$$f(v) = \frac{1}{1 + e^{-2v}}. \quad (2.3)$$

3. Tangente hiperbólica: la función $\tanh(\cdot)$, es requerida cuando se buscan rangos diferente a la función sigmoideal ya que ésta tiene un centro en el origen y su codominio es $\Xi_v \in \{f(v) : -1 \leq f(v) \leq 1\}$ (ver Figura. 2.9c).

$$f(v) = \frac{1 - e^{-2v}}{1 + e^{-2v}} = \tanh(v). \quad (2.4)$$

2.3.2. Redes neuronales multicapa realimentadas

La arquitectura que más se utiliza en diferentes aplicaciones [18], [3], [12], [27], [30]. Es la red neuronal multicapa (red neuronal de retroalimentación), en estas arquitecturas, estas neuronas se organizan en secciones denominadas capas, esto es, son los nodos que se pueden encontrar en la capa de entrada la cual suministra información de los patrones que deseamos reproducir también conocidos como vectores de entrada, la información generada por lo anterior se tomará como entrada de la capa oculta primaria esta se genera mediante una ponderación que realizan los pesos sinápticos. A la generación de salidas de la primer capa oculta las tomaremos como entradas de la segunda capa y a su vez las salidas de estas serán las entradas de la tercera y así sucesivamente hasta que se llegue a la capa final que es la de

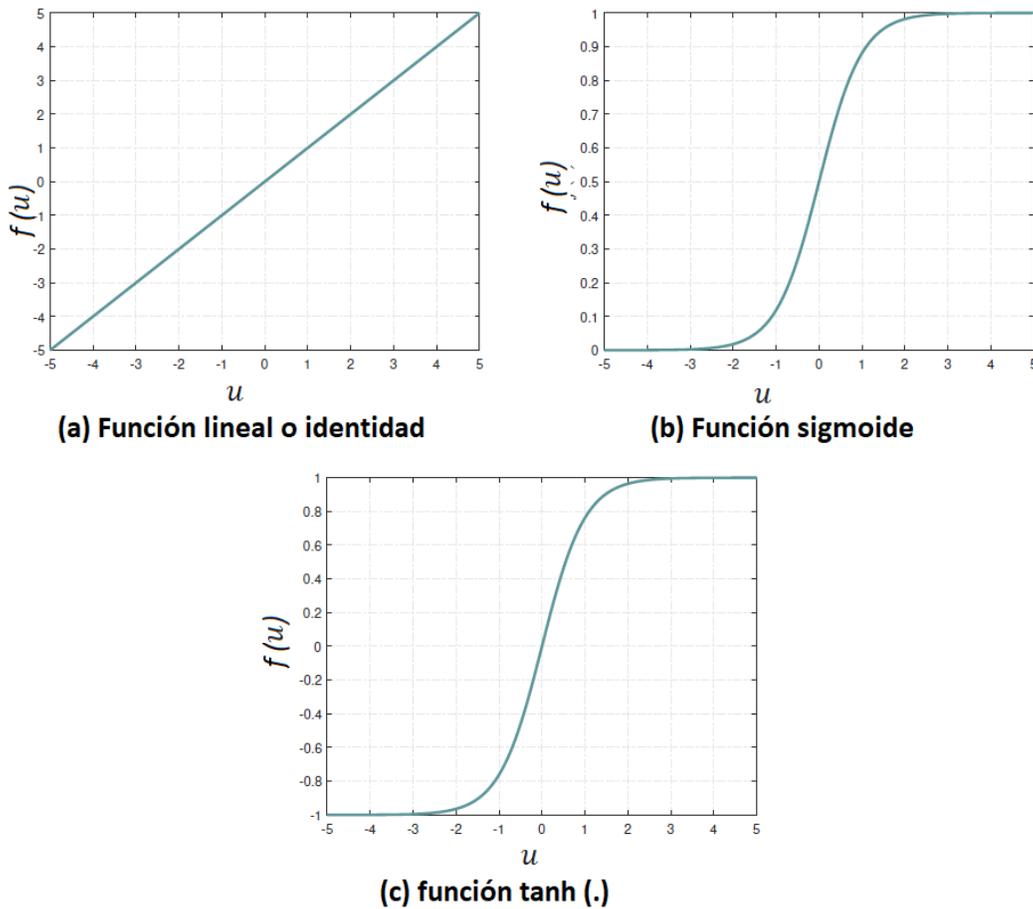


Figura 2.9. Funciones de activación para neuronas artificiales. Copyright 2020 CENIDET [38].

salida. La finalidad que tiene esta comunicación entre las capas es para que aprender un conocimiento de tipo jerarquizado [17]. La Figura. 2.10 muestra una RNN de dos capas ocultas con P neuronas en la primer capa oculta y Q neuronas en la siguiente capa oculta siendo esta una RNN multicapa realimentada de $P - Q$ neuronas, n entradas y q salidas.

La Figura. 2.10 se representa de forma matemática como la Ecuación (2.5)

$$y_i = f \left(\sum_{p=1}^P v_{ip} f \left(\sum_{j=1}^n w_{pj} x_j + \Theta_p \right) + i \right), i = 1, 2, \dots, Q. \quad (2.5)$$

2.3.3. Entrenamiento de redes neuronales

Algunas de las característica principales de mayor importancia de las redes neuronales artificiales se basan en la capacidad de aprender y adaptarse, así como de entrenarse todo esto

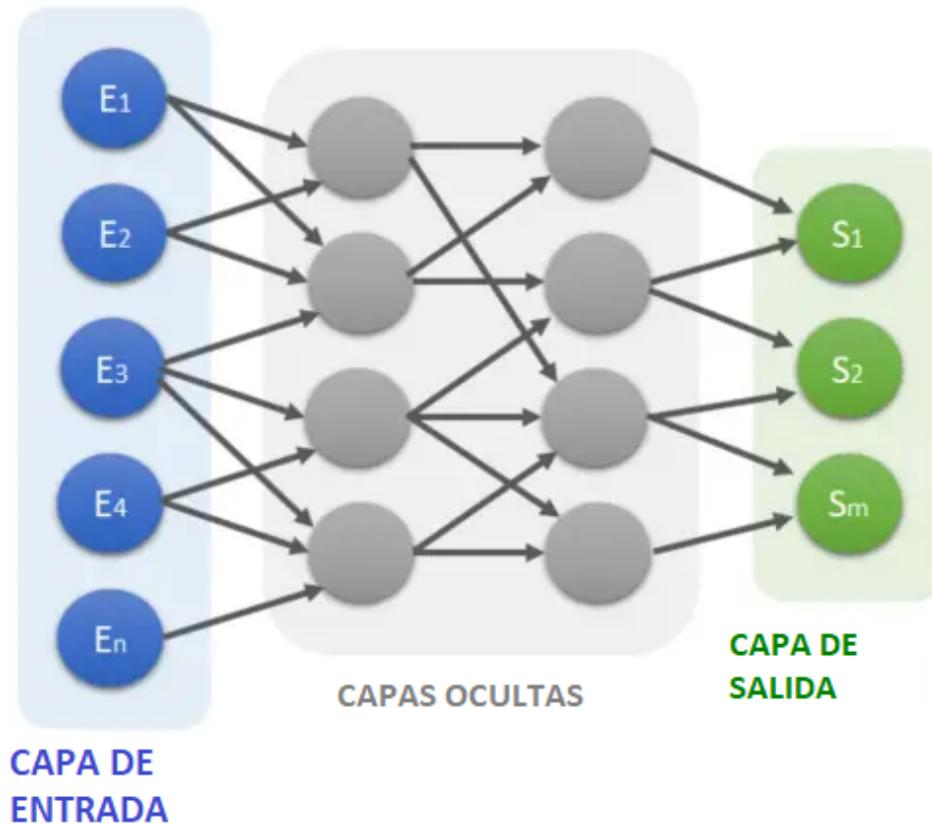


Figura 2.10. Red neuronal artificial de varias capas realimentada con $p-q$ neuronas, n entradas y q y más salidas [38].

realizado por un ajuste de los pesos sinápticos. Al proceso, donde los parámetros libres de la RNN son capaces de adaptarse mediante el proceso de simulación por entorno donde la red es implementada se le llama; aprendizaje neuronal [17]. El aprendizaje se puede realizar de dos formas diferentes:

- Entrenamiento tipo supervisado: En este entrenamiento, el entorno es representado por información de entrada y salida el cual, constituye al conjunto de entrenamiento. La red neuronal artificial es expuesta al conjunto de entrenamiento y sus parámetros (pesos sinápticos) son ajustados con base en una señal llamada error, es decir, la diferencia entre la salida dada por la RNN y la salida de valor deseado. El ajuste continúa iterativamente paso a paso esto con el fin de que la RNN responda lo más preciso al conjunto de datos de salida que se dio en el entrenamiento.
- Entrenamiento no supervisado: Éste entrenamiento es aprendido mediante la continua interacción del entorno con el fin de minimizar un índice de desempeño muestra por muestra. Minimizando la función objetivo implica que la RNN asigne un valor o característica por cada comparación realizada.

2.3.4. Algoritmos para la optimización

Si se considera una red neuronal artificial que cuente con capa de entrada para un vector constituido de información $x(n)$, M capas ocultas y al final, una capa de salida con las diversas mediciones obtenidas.

Los algoritmos para la optimización se utilizan para conocer los parámetros óptimos del sistema de tal manera que cumpla con el problema de optimización que se muestra en la siguientes Ecuaciones (2.6) and (2.7).

$$\epsilon(W^*, k) \leq \epsilon(W, k), \quad (2.6)$$

$$\epsilon(W, k) = \frac{1}{2}e^2(k). \quad (2.7)$$

Una forma diferente con la cual se puede expresar el problema para optimización diferente a la Ecuación (2.7), es mediante la siguiente minimización mostrada en la siguiente ecuación:

$$W^* = \min_W \epsilon(W, k), \quad (2.8)$$

donde W representa al vector de pesos sinápticos que conforma la RNA y $\epsilon(\cdot)$ se le conoce como función costo. La función costo $\epsilon(\cdot)$ debe ser continuamente diferenciable con respecto al parámetro que se desea optimizar y también debe tener un mínimo global [58].

Para garantizar que se cumpla el problema de optimización, la condición se muestra en la siguiente ecuación:

$$\nabla \epsilon(W^*) = 0, \quad (2.9)$$

donde ∇ es el operador de gradiente de $\epsilon(W)$ como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\nabla \epsilon(W) = \left[\frac{\partial \epsilon(W)}{\partial w_1}, \frac{\partial \epsilon(W)}{\partial w_2}, \dots, \frac{\partial \epsilon(W)}{\partial w_q} \right]^T. \quad (2.10)$$

Es importante mencionar que no todos los algoritmos de optimización son basados en métodos de tipo gradiente. Existen diferentes tipos de algoritmos que optimizan y garantizan lo expuesto en la Ecuación (2.8) por dar un ejemplo, algoritmo por enjambre de partículas, algoritmos genéticos, bayesianos, enjambre de hormigas, etc. [40], [8], [4], [6], [49].

La Ecuación (2.7) es conocida como función costo u objetivo la cual, es diferenciable con respecto a un parámetro desconocido W . La función $\epsilon(W, k)$ mapea cada elemento de W de tal manera que el desempeño sea medible con el fin de encontrar una solución óptima W^* que satisfaga la condición.

2.3.5. Métodos gradiente

Los métodos gradiente se basan en el ajustes sucesivos aplicados al vector de pesos sinápticos W donde el ajuste está dirigido de manera descendiente, esto quiere decir que está de manera opuesta al vector de gradiente $\nabla \varepsilon(W) = g$. Los algoritmos de descenso por gradiente se pueden representar por la siguiente ecuación:

$$W[k+1] = W[k] - \eta [R^{-1}] g[k], \quad (2.11)$$

donde η es una constante positiva llamada tamaño de paso o parámetro de aprendizaje, R modifica el método del algoritmo y $g[k]$ es el vector gradiente evaluado en el punto $W[k]$. Usando la definición de incremento $\Delta w = w[k+1] - w[k]$ y ajustando $R = 1$ se tiene que el algoritmo se convierte en una regla corrección-error.

$$\Delta w[k] = -\eta g[k]. \quad (2.12)$$

El método del gradiente descendente converge a una solución óptima W^* lentamente si el parámetro η es definido adecuadamente.

2.3.6. Factor de aprendizaje η

La convergencia del algoritmo de GD depende del valor de η dando como resultado la siguiente ecuación:

$$\eta[k] = \eta_0, \quad (2.13)$$

donde η_0 representa la constante para todo k tomando como consideración que para valores elevados de η_0 corremos riesgo que el algoritmo diverja, bajo esta lógica si η_0 es un valor pequeño, el algoritmo podría encontrar un mínimo global pero, en consecuencia, el tiempo de computo se ve aumentado considerablemente. En [37] se ha dado la propuesta un algoritmo llamado aproximación estocástica donde se considera que el coeficiente de aprendizaje cambie a través de k como se define en la Ecuación (2.14).

$$\eta[k] = \frac{c}{k}. \quad (2.14)$$

A pesar de que el método definido en la Ecuación (2.14) es eficiente, se corre el riesgo que la estimación del parámetro diverja para valores grandes de c y valores pequeños de k .

Por otro lado, en [10] se propone un algoritmo de búsqueda y convergencia utilizando la Ecuación (2.15).

$$\eta[k] = \frac{\eta_0}{1 + \frac{k}{\tau}}, \quad (2.15)$$

donde η_0 y τ se consideran constantes que fueron dadas por el diseñador. Debemos tener en cuenta que para los primeros valores de k , la constante de tiempo de búsqueda τ es más grande lo cual genera que $\eta[k] = \eta_0$. Si el número de interacciones k es más grande en comparación con la constante de tiempo de búsqueda τ , entonces el factor de aprendizaje $\eta[k]$ se aproxima a la Ecuación (2.14) donde $c = \tau\eta_0$ como es ilustrado en la Figura. 2.11 [17].

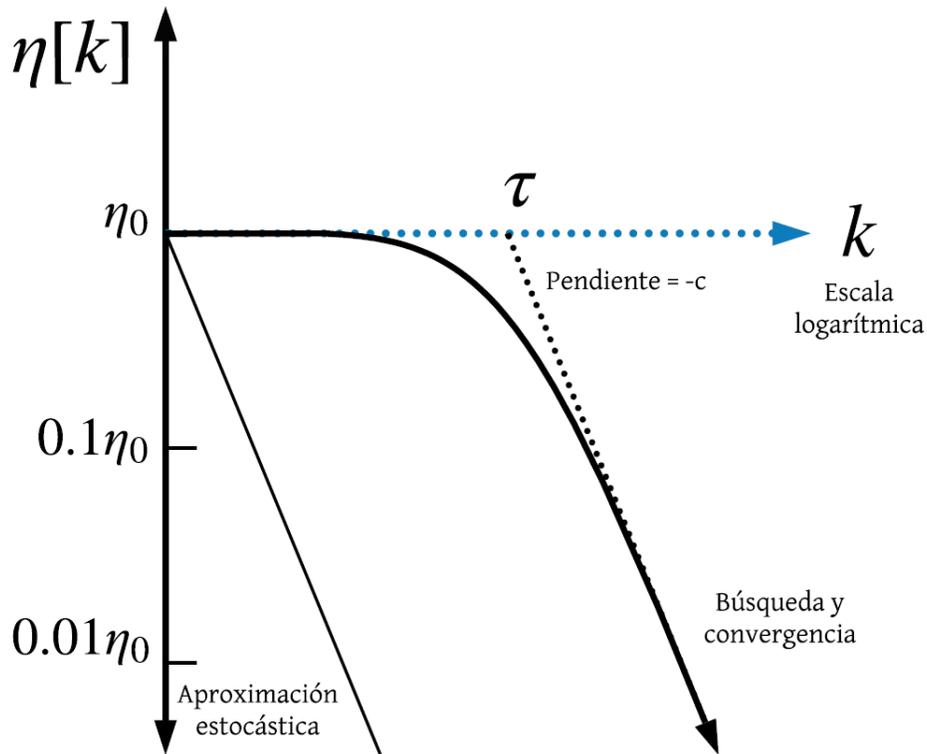


Figura 2.11. RNN multicapa realimentada con $p-q$ neuronas, n entradas y q salidas. Copyright 2020 CENIDET [17].

Capítulo 3

ESTADO DEL ARTE

Los temas que se investigaron sobre la simulación, identificación y control del proceso de adsorción por oscilación de presión y utilizando zeolitas sintéticas permitió determinar aspectos esenciales del diseño, construcción y control del proceso. En resumen, se hizo una revisión sobre: zeolitas naturales y sintéticas para la mezcla etanol-agua, modelado del proceso PSA y redes neuronales artificiales con aplicación aproximada al proceso PSA.

3.1. Zeolita utilizada para la mezcla etanol-agua

Existen 5 tipos de isothermas monomoleculares (monocapas) o isothermas polimoleculares (multicapas), ver Figura 3.1. Las isothermas más comunes son las de tipo I, II y III. Para poder describir las isothermas de adsorción que se obtienen experimentalmente se presentan diferentes modelos matemáticos. Cada modelo contempla una serie de consideraciones.

Dentro de la revisión de trabajos se encontró que la isoterma tipo I describe el comportamiento de la adsorción de las moléculas de etanol-agua, la cual se representa con el modelo de Langmuir. Este modelo presupone una temperatura constante, adsorción localizada (solo en sitios definidos activos), considera que la superficie es homogénea y que se forma una monocapa. Se asume además que cada sitio de adsorción puede adherir sólo una molécula de adsorbato, la energía de adsorción es la misma para todos los sitios de adsorción y no existe interacción entre las moléculas adsorbidas [35], [22], [13], [2].

La revisión en la literatura permitió hacer un concentrado de trabajos en los cuales se aplican diferentes adsorbentes, útiles para separar la mezcla etanol-agua. La información está contenida en una Tabla 3.1, que describe las características de equilibrio termodinámico y cinético, las cuales determinan la capacidad y rapidez con la que adsorben diferentes materiales. Los resultados se obtuvieron en función de la temperatura, ya que la capacidad de adsorción depende de manera importante de la presión. En la Tabla 3.1 se observa que a menor temperatura, la zeolita adsorbe mayor cantidad de agua Q es la capacidad máxima de adsorción y K

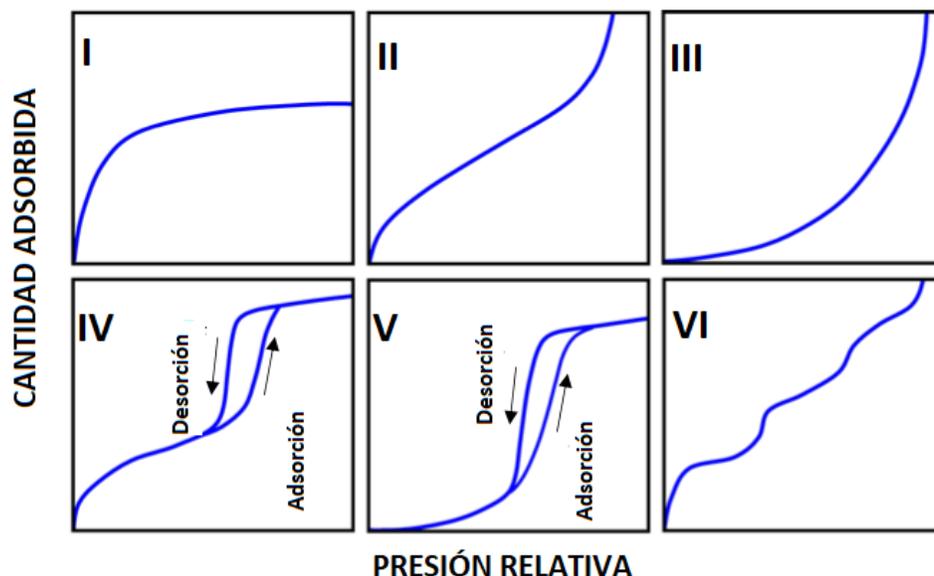


Figura 3.1. Isotermas de adsorción [43].

es la constante de Langmuir.

Se observa que las zeolitas naturales presentan desventajas sobre las zeolitas sintéticas, específicamente en comparación con las zeolitas 3A, ya que estas últimas adsorben mayor cantidad de agua. La zeolita 3A resultó con mejor desempeño para adsorber agua de un sistema binario. Por lo tanto, se sugiere usar zeolita 3A como adsorbente, pues tiene una alta capacidad de adsorción de agua.

3.2. Modelado de ecuaciones diferenciales parciales aplicado a un proceso PSA.

Se han reportado muy pocos trabajos sobre el proceso PSA para describir el comportamiento dinámico y la naturaleza no lineal, las cuales son empleadas en la separación de distintas mezclas gaseosas. Uno de estos trabajos es el reportado por [5], en el cual utilizó un modelo de parámetros lineales de seis EDP cuasilineales para la capa de adsorción de los lechos, y la precapa la despreció debido a que solo adsorbe humedad. Para el tanque del producto, utilizó tres ecuaciones diferenciales ordinarias.

Caso similar el presentado en [43] en donde emplearon un modelo matemático noisotérmico pero contemplando hasta 6 EDP, más detallado que el usado por blitzer, para el balance de masa de los componentes, balance de masa general, tasa de adsorción, balance de energía para la fase fluida, balance de energía para el tamiz, y el balance de energía para el muro.

Tabla 3.1. Comparación de los valores termodinámicos y cinéticos de varios adsorbentes, a diferentes temperaturas de operación.

Referencia	Zeolitas	Temperatura °C	Capacidad máxima de adsorción $Q (g_{gua}/g_{ads})$	Constante de langmuir K	Tiempo de adsorción
[7]	Harina de maíz (natural)	60	0.029	-	-
		91	0.025	-	300 min
[48]	ZSG-1 (Natural)	30	0.1046	-	-
		79	0.1241	-	-
		84	0.1499	-	-
		89	0.1511	-	-
		97	0.1529	-	80 min
[11]	zeolita NaA (Natural)	104.85	0.150	-	30 min
[32]	Clinoptilolita (Natural)	20	0.170	-	60 min
[16]	Philipsita	53.150	0.0432	0.76	57 min
	Philipsita 0.5M	53.150	0.0800	0.81	34 min
	Philipsita 0.75M	53.150	0.0770	0.83	35 min
	Philipsita 1M	53.150	0.1054	1.2	55 min
	Philipsita 2M (Natural)	53.150	0.1016	0.93	41 min
[26]	Heulandita	24	0.099	1.1866	-
	Silicalita	64.85	0.073	-	-
	(Natural)	24.85	0.105	-	-
[23]	Z. LTA-Na	24.85	0.150	0.563	52.8 min
	Z. K-LTA	24.85	0.130	0.999	45 min
	Z. LTA-Ca	24.85	0.094	0.996	33 min
	Z. FAU-Na (Natural)	24.85	0.166	0.403	60 min
[19]	Zeolita 4A	63	0.1030	-	57 min
	3A	25	0.249	0.317	40 min
	3A	40	0.238	0.153	30 min
	3A	50	0.220	0.090	22 min
	3A (Sintética)	60	0.200	0.052	20 min

La solución de dicho modelo se realizó mediante el método de líneas utilizando condiciones iniciales y de frontera.

Se han realizado investigaciones más a fondo en el cual se describe el desarrollo un modelo matemático noisotérmico y adiabático presentado por [22]. Este se basa en un sistema PSA. Dicho modelo considera que la mezcla a separar se comporta como gas ideal, y al igual que los dos modelos anteriores, consta de 6 EDP. La ecuación del balance de masa se aplica a ambas especies; el balance de energía térmica se calcula en una sola ecuación debido a que el sistema se considera en equilibrio térmico, las variaciones de presión son calculadas mediante la ecuación de Ergun, el modelo de fuerza lineal motriz (LDF) es utilizado para calcular la transferencia de masa, la dinámica de adsorción es calculada mediante la ecuación de Langmuir y por último la relación flujo-presión en los extremos del lecho es capturada mediante la ecuación de la válvula.

Las investigaciones han dando progreso a obtener un mejor modelado, por su parte en [53], emplearon un modelo matemático de 9 EDP para calcular los balances de energía, materia y momento, caída de la presión, transferencia de masa, las variables del flujo molar y el comportamiento de adsorción; teniendo en consideración que las leyes de gas ideal son aplicables a la mezcla, la variación radial en la concentración de gas es despreciable y la existencia de equilibrio térmico entre la fase sólida y gaseosa. En la Tabla 3.2 se reportan otros trabajos relacionados con el tipo de caso (experimental/simulado), cuantos ciclos utiliza, rangos de presión en los que trabaja y la composición de alimentación.

Tabla 3.2. Trabajos reportados sobre operación de procesos PSA

Referencia	Experimental /Simulado	Ciclos PSA	Oscilación de Presión (kPa)	Tiempo para regenerar el lecho (min)	Composición de alimentación de vapor (% peso de etanol)
[19]	Simulado	2 lechos 4 pasos	(205, 345) a 26	3 a 10 min	-
[9]	Simulado	2 lecho 4 pasos	(200, 240) a 40	6 min	93.54 %
[22]	Experimental	2 lecho 4 pasos	379.79 a 13.8	5 min	92 %
[43]	Experimental	2 lecho 4 pasos	100 a 0.5	15 min	-
[24]	Experimental	2 lecho 4 pasos	(120, 130) a 20	3 min	87 %
[29]	Simulado	3 lecho 4 pasos	(120, 130) a 20	6 min	87 %
[42]	Experimental	2 lecho 4 pasos	120 a 20	7 min	93.2 %
[34]	Simulado	2 lecho 4 pasos	448 a 10	-	92 %

Ecuación de Balance de masa por componente que se absorbe:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = D_{ax} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial z^2} - \frac{u \partial Y_i}{\epsilon \partial z} - \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon} \rho_s \frac{RT \partial q_i}{P \partial t} (1 - Y_i). \quad (3.1)$$

Ecuación de Balance de masa total:

$$\frac{1 \partial P}{P \partial t} - \frac{1 \partial T}{T \partial t} = - \frac{1 \partial u}{\epsilon \partial z} - \frac{1 u \partial P}{\epsilon P \partial t} + \frac{1 u \partial T}{\epsilon T \partial t} - \frac{(1 - \epsilon)}{\epsilon} \rho_s \frac{RT}{P} \sum_i^n \frac{\partial q_i}{\partial t}. \quad (3.2)$$

Ecuación de Velocidad LDF:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_{LDF} (q_i^* - q_i). \quad (3.3)$$

Ecuación de Balance de energía:

$$\left[\rho_g c_{pg} + \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \rho_s c_{ps} \right] \frac{\partial T}{\partial t} = K_{ef} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{u}{\epsilon} C_{pg} \rho_g \frac{\partial T}{\partial z} + Q \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon} \rho_s \frac{\partial q_i}{\partial t}. \quad (3.4)$$

Ecuación de Balance de momento:

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = \left(\frac{150 \times 10^{-5} \mu_g (1-\epsilon_i)^2}{(2r_p \psi)^2 \epsilon_i^3} v_g^2 + \frac{1.75 \times 10^{-5} M_w \rho_g (1-\epsilon_i)}{(2r_p \psi) \epsilon_i^3} v_g^2 \right). \quad (3.5)$$

Ecuación de Equilibrio Termodinámico:

$$q_i^* = q_i^s \frac{K(T) P_i}{1 + K(T) P_i}, \quad (3.6)$$

$$\ln \left(\frac{K}{K_0} \right) = \frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right). \quad (3.7)$$

La nomenclatura de las variables de estas ecuaciones están definidas en la Tabla [3.3](#).

Tabla 3.3. Condiciones iniciales y de Frontera para el modelo [\[38\]](#) y [\[43\]](#)

Pasos del ciclo	
I. Adsorción	
t = 0	$y = W = 0, T = T_F, P = P_F, y = Y^{(IV)} W = W^{(IV)}$ $T = T^{(IV)}, P = P^{(IV)}$
z = 0	$y = y_F, T = T_F, P = P_F, F = F_F$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
II. Despressurización	
t = 0	$y = y^{(I)}, W = W^{(I)}, T = T^{(I)}, P = P^{(I)}$
z = 0	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, F = F(\text{válvula})$
III. Purga	
t = 0	$y = y^{(II)}, W = W^{(II)}, T = T^{(II)}, P = P^{(II)}$
z = 0	$Y = Y_P, T = T_P, F = F_P$
z = L	$P = P_P, \frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
IV. Represurización	
t = 0	$y = y^{(III)}, W = W^{(III)}, T = T^{(III)}, P = P^{(III)}$
z = 0	$y = y_P, T = T_P, F = F(\text{válvula})$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$

La solución numérica del modelo matemático permite obtener los perfiles de temperatura,

presión, composición, velocidad del gas y carga de saturación del proceso PSA [43].

Para poder resolver este tipo de ecuaciones diferenciales se necesitan condiciones iniciales y de frontera en cada paso del proceso PSA, como ejemplo se muestran en la Tabla 3.3 las condiciones establecidas para el modelo de [43], en donde los números romanos indican la secuencia en cómo se deben de aplicar sucesivamente para cada paso del proceso.

3.3. Redes neuronales artificiales aplicadas al proceso PSA

Al modelo matemático que imita el funcionamiento del cerebro humano motivado por el hecho de que el cerebro es capaz de calcular y aprender patrones se le llama RNN[56]. Así como el cerebro, la RNN tiene la capacidad de completar acciones de tipo no lineal, así como cálculos en paralelo, etc, esto debido a las diversas arquitecturas de una RNN.

El modelo neuronal se constituye por diversas unidades de procesamiento las cuales les llamamos neuronas, encargadas principalmente de almacenar y juntar la información de los valores de entrada para producir una señal de salida. La neurona puede mapear no linealidades o mantener su comportamiento lineal mediante una expresión matemática llamada función de activación, como lo muestra la Ecuación (2.1) y la Figura. 2.8

La neurona biológica se comunica con otras neuronas mediante impulsos eléctricos, esta comunicación celular se le conoce como sinapsis. Los pesos sinápticos son optimizados mediante algoritmos de entrenamiento. Gracias a las vastas arquitecturas de RNN y a su sencilla implementación, las RNN son capaces de lidiar con diferentes tareas, es decir, sin importar la tarea o propósito, la RNN buscará adaptarse para completar el objetivo por el que fue implementada mediante la adaptación de sus pesos sinápticos con un proceso de entrenamiento [56] y [15].

Existen poco trabajos relacionados con la identificación y control de un proceso PSA utilizando redes neuronales por la alta complejidad que este requiere. Algunos se muestran a continuación: en [54] se construyó un modelo de red neuronal artificial para predecir el rendimiento del sistema de PSA y optimizar aún más los parámetros de funcionamiento del ciclo de PSA.

Los datos de rendimiento que obtuvieron del modelo de Aspen se utilizan para entrenar el modelo RNN. El modelo RNN entrenado tiene una buena capacidad para predecir el rendimiento de purificación de hidrógeno del ciclo de PSA con una precisión razonable y una velocidad considerable. Basado en el modelo RNN, realizaron una optimización para encontrar parámetros óptimos del ciclo de PSA.

Esta investigación que desarrollaron [54] muestra que es factible encontrar parámetros de operación óptimos del ciclo de PSA mediante el algoritmo de optimización basado en el modelo RNN que fue entrenado con los datos producidos a partir del modelo Aspen.

Por otro lado [41] analizaron la optimización directa del sistema de Ecuaciones Algebrai-

cas Diferenciales (EAD) que describen los fenómenos que lleva una cantidad de tiempo poco práctica. Posteriormente analizaron la idoneidad del uso de redes neuronales artificiales como modelo sustituto para predecir y optimizar el rendimiento del PSA. Utilizando el modelo sustituto RNN, el tiempo de optimización disminuyó de 15.7 horas a 50 segundos. Demostraron que el ciclo de PSA propuesto puede lograr una flujo de pureza de nitrógeno optimizado del 99.5 % a partir de un flujo de entrada del 85 % y un flujo de pureza del 50 % a partir de un flujo de entrada al 10 %.

Otros de los trabajos encontrados fue de [51], ellos desarrollaron una red neuronal artificial basada en modelos dinámicos para el proceso integrado para optimizar el rendimiento del proceso. Los conjuntos de datos sintéticos para la RNN se analizaron por descomposición de valor singular, y los modelos RNN para las unidades criogénicas, de membrana y PSA se entrenaron y probaron dentro de un error marginal ($<2\%$). Posteriormente, ellos validaron un modelo impulsado por procesos la integración de los modelos RNN con las ecuaciones algebraicas (compresor, HX y evaluación económica) mediante desviaciones mínimas de los datos de referencia. La optimización, formulada con base en el modelo impulsado por procesos, se llevó a cabo utilizando la evolución diferencial. El costo óptimo (2.045 / kg) de H_2 recuperado (99.99 %) fue económicamente comparable a los valores de referencia para la producción de H_2 a partir de gas natural. Además, se cubrió el costo de captura del 91 % de CO_2 con 98,6 % en volumen de CO_2 .

Así mismo, en [31] trabajaron en utilizar una única red neuronal para modelar y predecir una amplia gama de comportamientos de isotermas de adsorción estándar. Se generaron series de datos de isotermas a partir de las cuatro ecuaciones de isotermas más comunes (Langmuir, Freundlich, Sips y Toth) y los datos se ajustaron con una estructura de red neuronal única. Los resultados mostraron que una sola red neuronal con una capa oculta que tiene tres neuronas, incluida la neurona de sesgo, fue capaz de representar con mucha precisión los datos de la isoterma de adsorción en todos los casos. De manera similar, una red neuronal con cuatro neuronas ocultas, incluido el sesgo, pudo predecir con mucha precisión la dependencia de la temperatura de los datos de adsorción.

En [28] trabajaron en un modelo de red neuronal artificial para la predicción de curvas de avance en relación con un gas de componentes ternarios con un lecho adsorbente de dos capas apilado con Carbón Activado (AC) y zeolita, y concluyeron en una optimización mediante la red neuronal artificial. Los datos de rendimiento que adquirió el modelo de Aspen se utilizaron para entrenar el modelo de red neuronal artificial.

El modelo RNN entrenado tiene una gran competencia para predecir el rendimiento de purificación de hidrógeno del ciclo de PSA con una velocidad impresionante y una precisión racional. Sobre la base del modelo RNN, ellos implementaron una optimización para buscar parámetros de ciclo de PSA de primer rango. La optimización se concentra en el efecto del caudal de entrada, la presión y la relación de capa entre la altura del carbón activado y la altura de la zeolita. Además, el trabajo que desarrollaron muestra que los parámetros de operación óptimos del ciclo de PSA pueden obtenerse mediante el uso del modelo RNN y el algoritmo de optimización, el modelo RNN ha sido entrenado de acuerdo con los datos generados por

el modelo de adsorción de Aspen.

Por otra parte, en [52] trabajaron en predecir el rendimiento de purificación del proceso de seis pasos de dos lechos. Utilizaron dos modelos RNN combinados con el algoritmo del programa cuadrático de secuencia (SQP) para lograr la optimización multiobjetivo del rendimiento de purificación de hidrógeno. Según el análisis de los resultados de optimización, los modelos RNN son más adecuados para optimizar el rendimiento de purificación del hidrógeno que el modelo PNR (proteína no degradable en el rumen). Así mismo en [55] investigaron dos modelos sustitutos para optimizar el rendimiento del proceso utilizando redes neuronales artificiales, las cuales han sido bien entrenadas por las muestras, obtenidas de los modelos detallados utilizando la estrategia de muestreo de hipercubo latino.

Los resultados indican que las RNN podrían aproximar el rendimiento y el comportamiento dinámico del proceso de PSA con una precisión extremadamente alta. En su trabajo, también se ha propuesto un enfoque de optimización multiobjetivo robusto y rápido del proceso de PSA utilizando un algoritmo genético sobre la base de diferentes modelos sustitutos basados en RNN.

Capítulo 4

RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

Para encontrar el modelo PSA apropiado, es necesario identificar un modelo reducido que capte las dinámicas más relevantes del proceso real. Se realiza un análisis de sensibilidad para elegir los parámetros del modelo más adecuados, usando un PRBS como señal de entrada, con un número de bits entre 0 y 3, dependiendo del nivel de excitación deseado [7, 19, 23, 30, 36, 57].

El PRBS se inyecta en el riguroso modelo PSA para obtener un resultado simulado ideal. Las entradas y salidas se procesaron utilizando el identificador de Matlab para obtener un modelo reducido ya sea en espacio de estado, función de transferencia o un modelo Hammerstein-Wiener (HW) no lineal. El resultado es una aproximación a los datos de una planta real. El resultado es un aproximación a los datos de un plano real [21, 28, 34].

4.1. Modelado de EDP para un proceso PSA

En este punto se describen las ecuaciones utilizadas relacionadas con la naturaleza y dinámica del ciclo de operación del proceso PSA. El modelo matemático de este proceso de adsorción por cambio de presión incluye ecuaciones de balance de masa y energía, ecuaciones de balance de momento o correlaciones de caída de presión, cinética de adsorción y modelos termodinámicos de adsorción. La nomenclatura de las variables utilizadas se presentan en la Tabla 4.1.

Los supuestos del modelado PSA de las Ecuaciones. (4.1), (4.3), (4.4), (4.5), (4.7) son:

1. La fase gaseosa es convectiva con dispersión axial estimada.

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

2. El balance de componentes materiales incluye la convección, axial términos de dispersión, acumulación en fase gaseosa y transferencia de masa.
3. La presión de la fase gaseosa varía con el tiempo y la dirección axial.
4. No se producen reacciones.
5. Ecuación de estado del gas ideal para la fase de vapor.
6. Se caracteriza la conducción térmica axial para la fase sólida con un parámetro constante, pero la contribución radial no es cuantificada. La conducción térmica de la fase gaseosa es insignificante, definir la relación entre presión, temperatura y densidad molar.
7. La operación no es isotérmica y el sistema es adiabático.
8. La entalpía de la fase adsorbida es significativa y se estima. suponiendo capacidades caloríficas constantes.
9. El calor de adsorción y el coeficiente de transferencia de calor son constantes, los efectos de la temperatura, la presión, la carga local o la velocidad

■ Balance de masa total

La ecuación establecida para determinar la cantidad de molécula de agua absorbida en cada columna se presenta en Ecuación (4.1).

Esta ecuación describe la cantidad de soluto adsorbido en el sólido y este debe ser igual a la cantidad de soluto eliminado de la solución. Esto implica que el balance de materia tendrá en cuenta tanto la concentración como la carga del adsorbente.

$$-\epsilon_i E_{zi} \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2} + \frac{\partial(c_i v_g)}{\partial z} + \epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} + J_i = 0. \quad (4.1)$$

Donde:

$\frac{\partial(c_i v_g)}{\partial z}$ es la convección y define el transporte de masa causado por el movimiento macroscópico de un gas o vapor de etanol-agua. El fenómeno se presenta cuando el movimiento es impulsado por diferencias de densidad o temperatura, o forzada, cuando se aplica una fuerza externa.

$\epsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t}$ es la acumulación de materia implica la concentración de uno o más componentes ya sea agua o etanol derivado del gas de alimentación en la superficie de un sólido. El sólido se denomina adsorbente y las moléculas adsorbidas en la superficie del sólido, con mayor concentración que en la fase fluida, se conocen como adsorbato.

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

El flujo sobre la superficie sólida se define por la ecuación (4.2) y es una de las características más importantes de un adsorbente. Se define como la cantidad de adsorbato que puede retenerse en el adsorbente por unidad de masa o volumen.

$$J = -\rho \frac{\partial W_i}{\partial t} \quad (4.2)$$

■ Balance de energía

Para determinar y conocer los incrementos de temperatura en la cama, es necesario utilizar Ecuación. (4.3).

El balance de energía es un principio físico fundamental al igual que la conservación de masa, que es aplicado para determinar las cantidades de energía que es intercambiada y acumulada dentro de las columnas rellenas con zeolita tipo 3A.

La velocidad a la que el calor se transmite depende directamente de dos variables: la diferencia de temperatura entre el vapor (agua-etanol) y superficie de la zeolita tipo 3A para el intercambio de calor.

$$-k_{sa} \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} + C_{ps} \rho_s + \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} \sum_{i=1}^n (C_{pai} W_i) \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_s \sum_i^n (\Delta H_i \frac{\partial W_i}{\partial t}) - MTC_{ap}(T_g - T_s) = 0. \quad (4.3)$$

Donde:

$-k_{sa} \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2}$ es la conductividad térmica axial en el sólido que depende de la conductividad de la zeolita.

La conductividad térmica de la zeolita se define relacionando el flujo estacionario de energía térmica $-k_{sa}$ a lo largo de la columna empacada con zeolita tipo 3A, con un gradiente de temperatura.

$C_{ps} \rho_s + \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t}$ es la acumulación de energía en el sólido es el aumento de energía interna acumulada en el interior de la zeolita tipo 3A como resultado de la interacción con el vapor de la mezcla etanol-agua.

$\rho_s \sum_i^n (\Delta H_i \frac{\partial W_i}{\partial t})$ es el calor absorbido se define como la transferencia de energía entre dos cuerpos a distintas temperaturas, en este caso es la zeolita tipo 3A y la mezcla de vapor de etanol-agua. El que tiene menor temperatura absorbe el calor del que está a mayor temperatura. Cuando esto sucede, aumenta la energía térmica generando una reacción exotérmica y endotérmica logrando una elevada energía cinética.

$MTC_{ap}(T_g - T_s)$ es el coeficiente de transferencia de calor es una cifra calculada se puede utilizar para ver indirectamente lo que sucede dentro de las columnas empacadas con zeolita tipo 3A.

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

■ Isoterma de adsorción

Isoterma de adsorción (modelo termodinámico). Para determinar la isoterma de adsorción (sobre la superficie de un sólido), se utilizó la Ecuación (4.4) y la Ecuación (4.5), esto lo describe el modelo de Langmuir, que se caracteriza por los siguientes puntos:

- La superficie proporciona varios lugares para la adsorción y todos son equivalentes.
- Sólo se adsorbe una molécula en cada posición.
- Su adsorción es independiente de la ocupación de posiciones vecinas (las moléculas no interactúan entre sí).

$$W_i = \frac{IP_1 e^{ip_2/T_s} P_i}{1 + IP_3 e^{ip_4/t_s} P_i}. \quad (4.4)$$

■ Aproximación LDF

Su diseño para procesos de adsorción y para la obtención de datos dinámicos de lechos es sencillo y analítico. El modelo LDF trabaja por su desempeño en la separación de procesos de adsorción y para los niveles cíclicos del estado estacionario, además de requerir las propiedades cinéticas de la partícula y la columna estudiadas en [44].

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} = MTC_{si}(W_i^* - W_i), \quad (4.5)$$

donde:

$$MTC_{si} = \frac{\Omega D_{ei}}{r_p^2}. \quad (4.6)$$

Ω es el parámetro en la expresión de Glueckauf.

■ Caída de presión

La Ecuación (4.7) se utiliza para determinar las caídas de presión a través de los lechos en los sistemas de adsorción. Los datos se obtuvieron del trabajo reportado por [43]:

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = - \left(\frac{150 \times 10^{-3} (1 - \epsilon_i)^2}{(2r_p \Psi)^2 \epsilon_i^2} \mu v_g + 1.75 \times 10^{-5} M \rho_g \frac{(1 - \epsilon_i)}{2r_p \Psi \epsilon_i^3} v_g^2 \right). \quad (4.7)$$

El cálculo de cada uno de los parámetros mostrados en las ecuaciones (4.1), (4.3), (4.4), (4.5) y (4.7) se desarrollan en el trabajo presentado por [38] y [43].

La Tabla (4.2) presenta los valores para las condiciones iniciales y de contorno del modelo.

4.2. Análisis de sensibilidad

Para que el análisis de sensibilidad sea correcto, se requiere que las pruebas sean ejecutadas en el estado estable (CSS), se varían algunos parámetros de entrada y se observan los cambios en la salida. La simulación se realiza con parámetros nominales como referencia. El flujo sistemáticamente aumentó y disminuyó para ver el efecto en la pureza.

4.2.1. Redes neuronales

Las redes neuronales artificiales se han convertido en la familia más popular de algoritmos de aprendizaje automático en los últimos años. Ejemplos de aplicaciones de RNN incluyen caracteres y reconocimiento de voz, predicción de stock, generación de texto, traducción de idiomas, prevención de fraude, control de conducción, análisis genético, pronóstico de enfermedades, entre otros.

Como suele ser el caso en las estructuras avanzadas, la complejidad de estos sistemas emerge a través de la interacción de elementos más simples que trabajan juntos. En el caso de una RNN, cada uno de estos elementos se denomina neurona.

4.2.2. RNN para identificación de PSA

La estructura de la RNN (Red neuronal recurrente) propuesta se muestra en la Figura. [4.1](#) y está compuesta por tres capas para procesar las entradas y salidas del sistema real (proceso PSA).

De acuerdo a la Figura. [4.1](#), la señal de pureza de entrada se combina con la salida retardada $\hat{y}[k - n_a]$ para estimar $\hat{y}[k]$, donde n_a es un parámetro seleccionado por el usuario. Para empezar a entrenar los pesos sinápticos W_0 de la RNN se establece aleatoriamente, y una señal de salida preliminar $\hat{y}[k]$ se calcula y luego se compara con la señal de salida real $y[k]$ para estimar el error $e[k] = y[k] - \hat{y}[k]$. La señal de error, junto con las señales de entrada y salida procesadas proporcionan información al algoritmo de aprendizaje que, analizando la tendencia o comportamiento del error, ajusta nuevos valores de pesos sinápticos de tal forma que se cumpla el problema de optimización.

La RNN está compuesta por tres capas para procesar las entradas de la RNN que son entrada y salida del sistema real (proceso PSA). Esta capa de entrada, que está compuesta por dos neuronas, divide completamente la entrada y la salida para generalizar los modelos autorregresivos, es decir, si las funciones de activación fueran funciones identidad la estructura RNN sería un modelo autorregresivo con entrada exógena. Entonces, el RNN se compone de una capa oculta con dos neuronas para agregar más grados de libertad. Finalmente, en la capa de salida, la RNN propuesta está compuesta por una neurona que se encarga de vincular la dinámica de entrada y salida del sistema. Por lo tanto, la RNN está compuesta por cinco

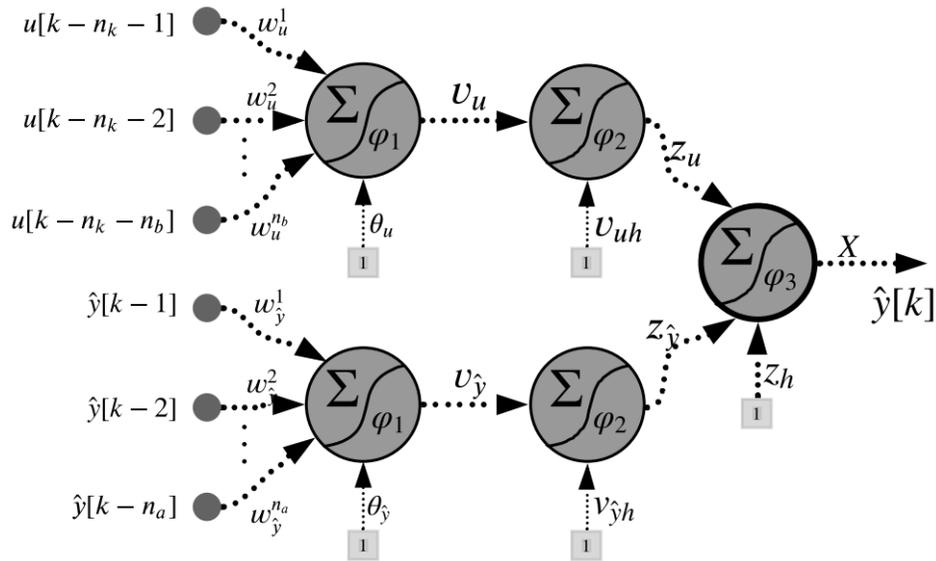


Figura 4.1. RNN propuesta para identificación de PSA.

neuronas en total, cada neurona se divide en dos neuronas para la capa de entrada, dos para la capa oculta y finalmente una neurona para la capa de salida, de ahí el nombre de RNN. Por lo tanto, el neuromodelo que representa la ecuación RNN propuesta se muestra en la Ecuación (4.8). Es una RNN que retroalimenta implícitamente, porque cuando se calcula el error, se hace con la salida previamente calculada. El retardo se utiliza para modelar la dinámica del sistema (proceso PSA).

4.2.3. Modelo matemático RNN

Para este trabajo de investigación, los pesos sinápticos se calculan con un algoritmo de aprendizaje basado en descenso de gradiente, como el algoritmo de gradiente descendente. Se utilizó un entrenamiento supervisado, el entorno está representado por un conjunto de información de entrada y salida que constituye el conjunto de entrenamiento. La RNN se expone al conjunto de entrenamiento y sus parámetros (pesos sinápticos) se ajustan en función de una señal de error, es decir, la diferencia entre la salida de la RNN y la salida deseada (ver Ecuación (4.8)).

$$\begin{aligned}
 \hat{y}[k] = & X \varphi_3(z_{\hat{y}} \varphi_2(v_{\hat{y}} \varphi_1 \left(\sum_{i=1}^{n_a} w_{\hat{y}}^i \hat{y}[k-i] + \theta_{\hat{y}} \right) \\
 & + v_{\hat{y}h}) + z_u \varphi_2(v_u \varphi_1 \left(\sum_{j=1}^{n_b} w_u^j u[k-n_k-j] + \theta_u \right), \\
 & + v_{uh}) + z_h)
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

donde $X, z_{\hat{y}}, v_{\hat{y}}, \theta_{\hat{y}}, v_{\hat{y}h}, z_u, v_u, \theta_u, v_{uh}, z_h \in \mathbb{R}$, $w_{\hat{y}} \in \mathbb{R}^{n_a}$, and $w_u \in \mathbb{R}^{n_b}$ representan el modelo de los pesos sinápticos conocidos, finalmente se representa la dinámica de entrada y salida del modelo para $\hat{y}[k]$ y $u[k]$ respectivamente.

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

Tabla 4.1. Símbolos y letras.

Letras	
a_p	Specific particle surface, ($m^2 m^{-3}$)
c_i	Molar concentration of the component i, ($kmol m^{-3}$)
C_{ps}	Specific heat capacity of adsorbent, ($MJ kmol^{-1} K^{-1}$)
D_{mi}	Molecular diffusivity i, ($m^2 s^{-1}$)
D_{ei}	Effective phase diffusivity adsorbed from component i, ($m^2 s^{-1}$)
ϵ_i	Interparticle voidage
ϵ_p	Intraparticle voidage
F	Flowrate, ($kmol h^{-1}$)
E_{zi}	Axial dispersion coefficient of component i, ($m^2 s^{-1}$)
C_{pai}	Specific heat capacity of the adsorbed phase, ($MJ kg^{-1} K^{-1}$)
H_s	Heat transfer coefficient of liquid / solid, ($(J s^{-1}) m^{-2} K^{-1}$)
h	Element size
i	Component index
J_i	Mass transfer rate, ($kmol m^{-3}(bed) s^{-1}$)
j	j^{th} collocation point
K	Langmuir isotherm equilibrium constant (Pa^{-1})
k	Iteration index
M	Molar weight, ($kg mol^{-1}$)
l	Element index
$IP_{1i}, IP_{2i}, IP_{3i}, IP_{4i}$	Isothermal parameters of component i
MTC_s	Mass transfer coefficient solid, (s^{-1})
k_{sa}	Axial effective thermal conductivity ($W m^{-1} K^{-1}$)
OCFE2	Orthogonal Collocation on Finite Elements
P	Pressure (Pa)
Q	Isosteric heat of adsorption ($J mol^{-1}$)
W_i	Adsorbed amount of the component i, ($kmol kg^{-1}$)
W_i^*	Adsorbed equilibrium amount of component i, ($kmol kg^{-1}$)
R	Universal gas constant ($J mol^{-1} K^{-1}$)
r_p	Adsorbent particle radius (m)
t	Time (s)
T_g	Gas temperature, (K)
T_s	Solid temperature, (K)
T	Temperature, (K)
u	Position in element
v_g	Surface gas velocity, ($m s^{-1}$)
x	Position in catalyst
y_i	Molar fraction of the gas component i
z	Coordinate of axial distance, (m)
Ω	Parameter in Glueckauf expression
Ψ	Particle shape factor
ρ	Gas phase molar density

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y
PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

Tabla 4.2. Condiciones iniciales y de Frontera para el modelo.

pasos del ciclo	
I. Adsorción	
t = 0	$y = W = 0, T = T_F, P = P_F, y = Y^{(IV)}W = W^{(IV)}$ $T = T^{(IV)}, P = P^{(IV)}$
z = 0	$y = y_F, T = T_F, P = P_F, F = F_F$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
II. Despresurización	
t = 0	$y = y^{(I)}, W = W^{(I)}, T = T^{(I)}, P = P^{(I)}$
z = 0	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0, F = F(\text{válvula})$
III. Purga	
t = 0	$y = y^{(II)}, W = W^{(II)}, T = T^{(II)}, P = P^{(II)}$
z = 0	$Y = Y_P, T = T_P, F = F_P$
z = L	$P = P_P, \frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$
IV. Represurización	
t = 0	$y = y^{(III)}, W = W^{(III)}, T = T^{(III)}, P = P^{(III)}$
z = 0	$y = y_P, T = T_P, F = F(\text{válvula})$
z = L	$\frac{\partial y}{\partial z} = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = 0$

CAPÍTULO 4. RNN APLICADA A UN PSA PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE BIOETANOL

Capítulo 5

RESULTADOS

Para este trabajo se realizaron dos casos de estudio, el primero fue la simulación con columnas de 3 metros aplicando el método HW y RNN, el segundo caso se efectuó de la misma manera sólo que se utilizaron columnas de 7 metros.

5.1. Resultado caso de estudio número uno.

Se ha propuesto la identificación un modelo de Hammerstein-Wiener para comparar el rendimiento de nuestro modelo con otras técnicas de identificación.

El modelo HW es una conexión en serie de bloques estáticos no lineales con un bloque dinámico lineal.

La identificación de sistemas es una metodología adecuada para su uso en diferentes áreas como modelado de sistemas electromecánicos, componentes de radiofrecuencia, audio, procesamiento de voz, control predictivo, etc. (ver Figura. 5.1).

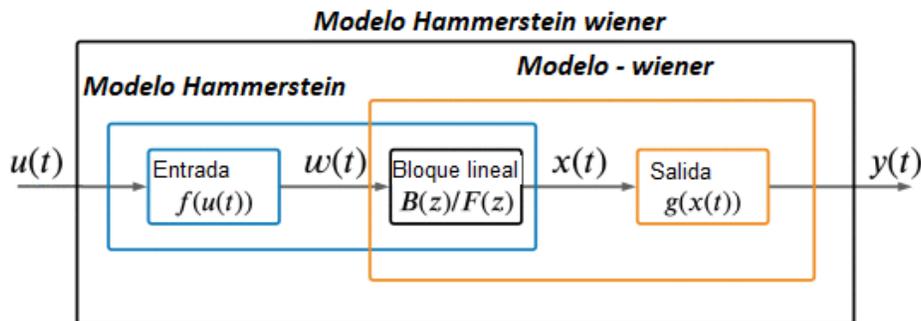


Figura 5.1. Estructura del modelo de Hammerstein-Wiener.

Se realizó una prueba donde al aumentar el flujo de alimentación permite que el modelo

alcanse un mejor rango de pureza, con estas señales tomadas de -1 % y +1 % (el aumento del flujo mejora la pureza) de esta manera obtenemos la señal PRBS. El flujo de alimentación no se puede aumentar mucho debido a las limitaciones físicas de la columna.

Los resultados obtenidos de los tamices PRBS (señal binaria pseudoaleatoria) se muestran en la Figura. 5.2

El resultado de la pureza del etanol con respecto a la identificación del sistema son las siguientes:

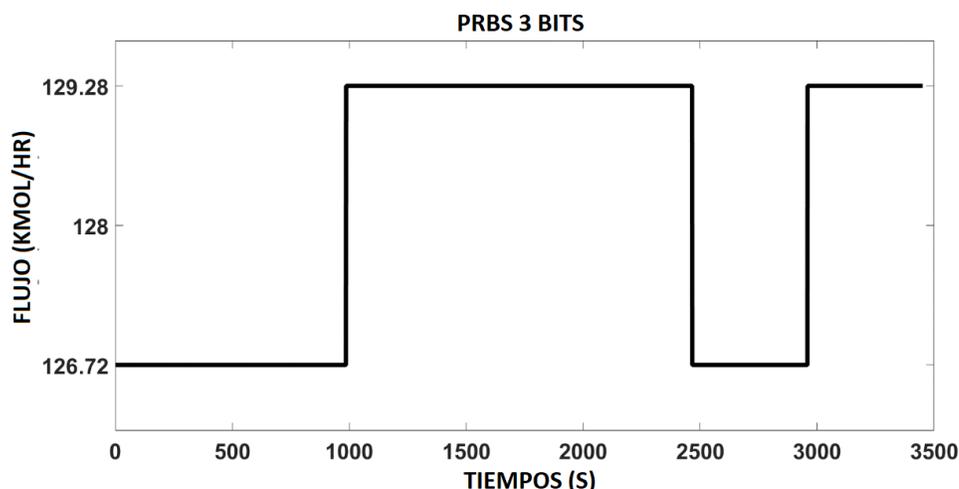


Figura 5.2. Señal PRBS de 3 bits.

Se construyó una PRBS de 3 bits, esto para garantizar una excitación rigurosa del modelo de PSA. Un PRBS por encima de 5 bits genera una mayor excitación y daría lugar a una mala identificación del sistema y si es inferior a 2 bits el sistema no está suficientemente excitado. La PRBS que se muestra en la Figuras. 5.2 son los datos de entrada que se inyectaron en el modelo PSA riguroso, lo que da como resultado los datos de salida que se muestran en la Figura. 5.3

Los datos de entrada y salida Figuras. 5.2 5.3 fueron introducidos en Matlab ToolBox para obtener un modelo reducido (Hammerstein-Wiener), este modelo identificado se puede ver en detalle con sus características en el trabajo reportado [38].

Se incluye una comparación de la distribución de cada sistema, en la Figura. 5.4 se muestra la distribución de cada estimación donde, el modelo RNN es superior al modelo HW debido a que la distribución del sistema real y el modelo RNN es casi lo mismo.

Una comparación de la distribución de cada sistema es incluido en el Figuras. 5.5 y 5.6 la distribución de cada estimación se muestra donde, el modelo RNN es superior que el modelo HW debido, la distribución del sistema real y el modelo RNN es casi el mismo. El RMSE calculado para el modelo HW es 9.4175 e -05 mientras que el modelo RNN ha obtenido 4.4490 e -07 que es más de mil veces el RMSE proporcionado por el modelo HW.

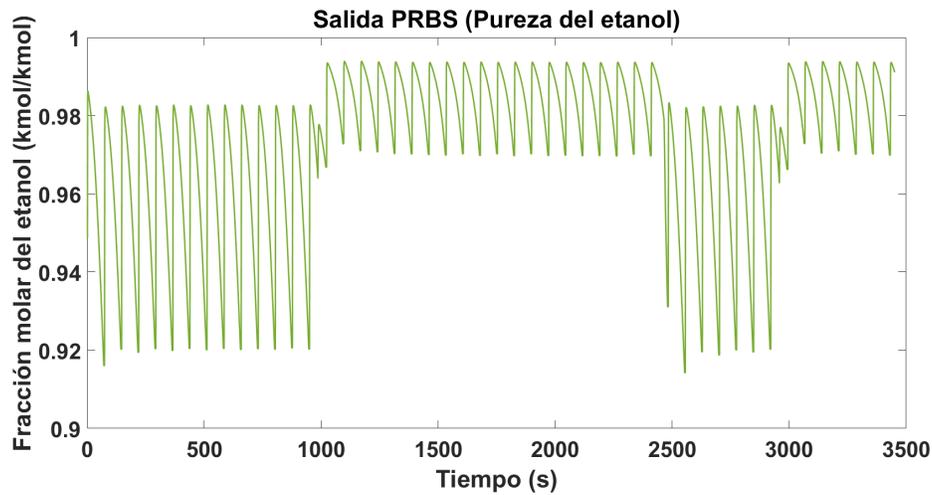


Figura 5.3. Salida de PRBS (pureza de etanol).

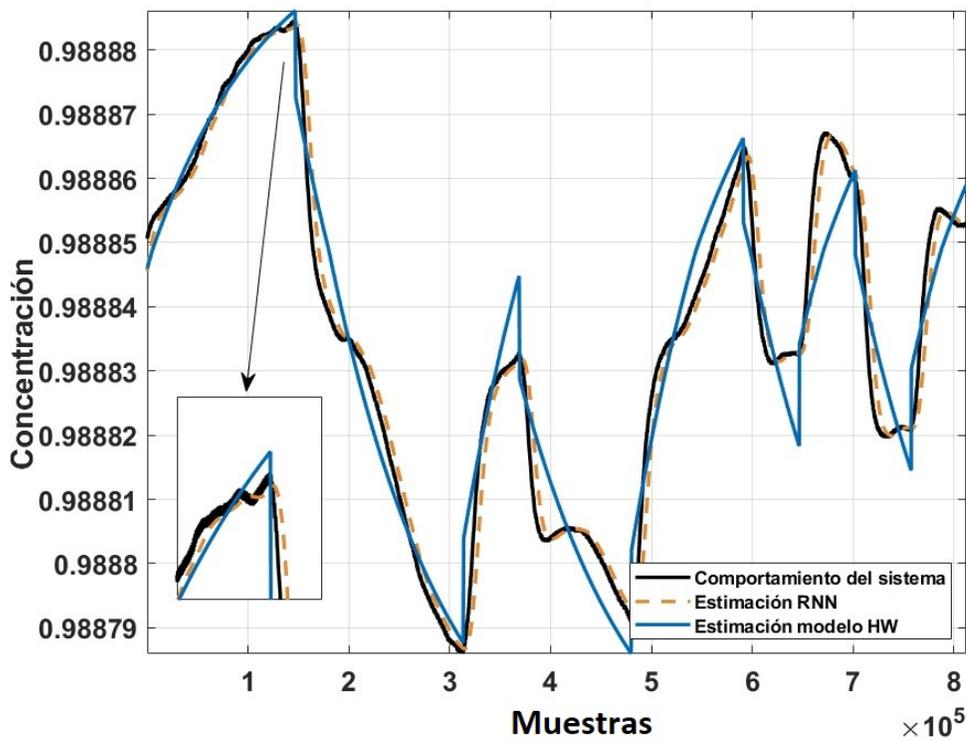


Figura 5.4. Comportamiento temporal del sistema real, modelo HW y modelo RNN.

Como se muestra en la Figura. 5.7, la pendiente entre la RNN y el sistema es $m = 0.9927$ y la intersección en $b = 0.0072$. Por el contrario, la pendiente calculada para el modelo HW es $m = 0.9988$ y se intercepta en $b = 0.0012$ lo cual es aceptable y competitivo con el modelo RNN. La norma del error en el RNN es 0.0037 y la del HW es 0.0058.

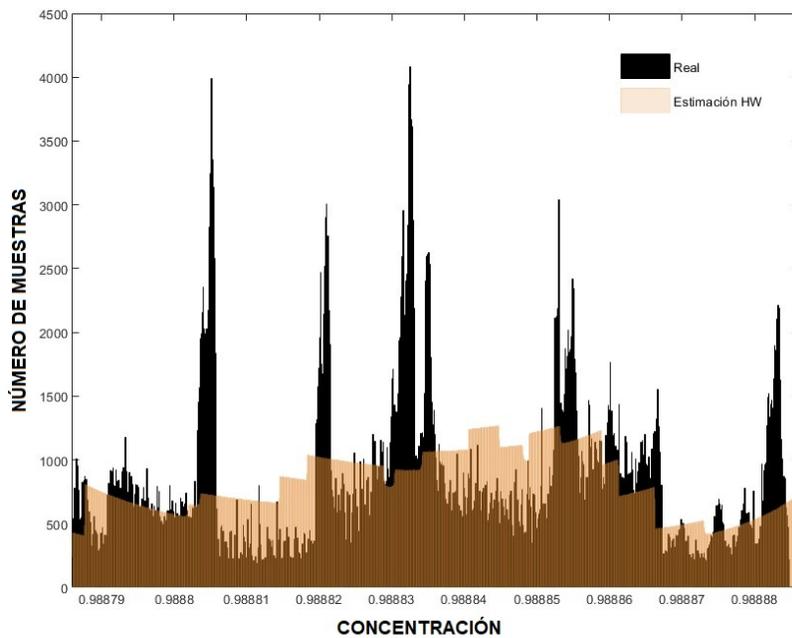


Figura 5.5. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo HW. El ajuste es 75.84.

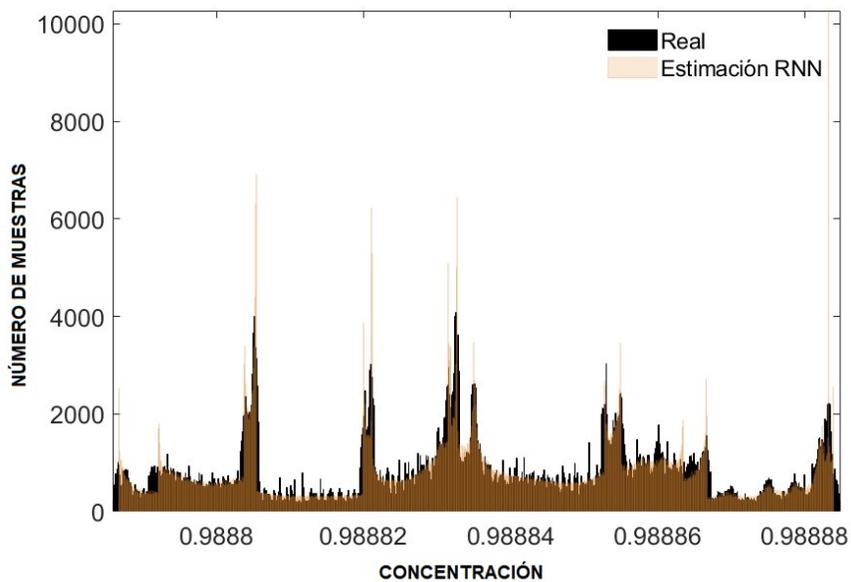


Figura 5.6. Distribución de la salida real del sistema y la salida generada por el modelo RNN. El ajuste es 84.51.

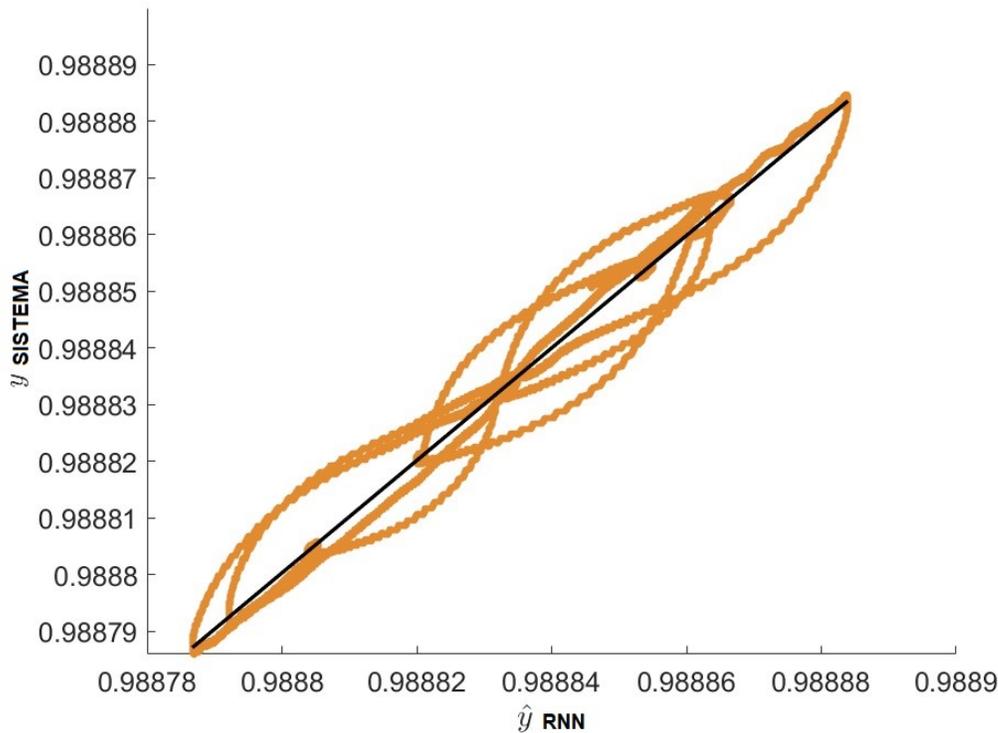


Figura 5.7. Prueba de intersección de pendientes para el modelo HW.

5.2. Resultado caso de estudio número dos.

Se realizaron las simulaciones con columnas de 7 metros de altura. Los perfiles del ciclo de presión con el tiempo reflejan el cambio de la dinámica del proceso de PSA y del producto obtenido de pureza del etanol, y los perfiles de temperatura con las condiciones de operación presentadas en la Figura. 5.8

Cada paso se lleva a cabo en un momento adecuado para cumplir con el objetivo operativo correspondiente.

La Figura. 5.8 muestra el diagrama de flujo del proceso PSA e indica los tiempos de cada paso para cada columna empacada. Asimismo, el diagrama de flujo incluye 10 válvulas que sirven para cambiar la dirección del flujo y mantener los flujos en los valores deseados a través de los lechos.

La presión de trabajo es de 379.212 kPa, ya que se observó que a mayor presión las zeolitas atraen más las moléculas de agua, y la presión para la etapa de regeneración es de 13.79 kPa, esto es con el fin de romper fácilmente el enlace débil que se ha formado entre las adsorbente-adsorbato. Por otro lado, la temperatura de producción debe mantenerse aproximadamente constante y por encima de 440 K. Un caudal de 512 kmol se alimenta con una composición

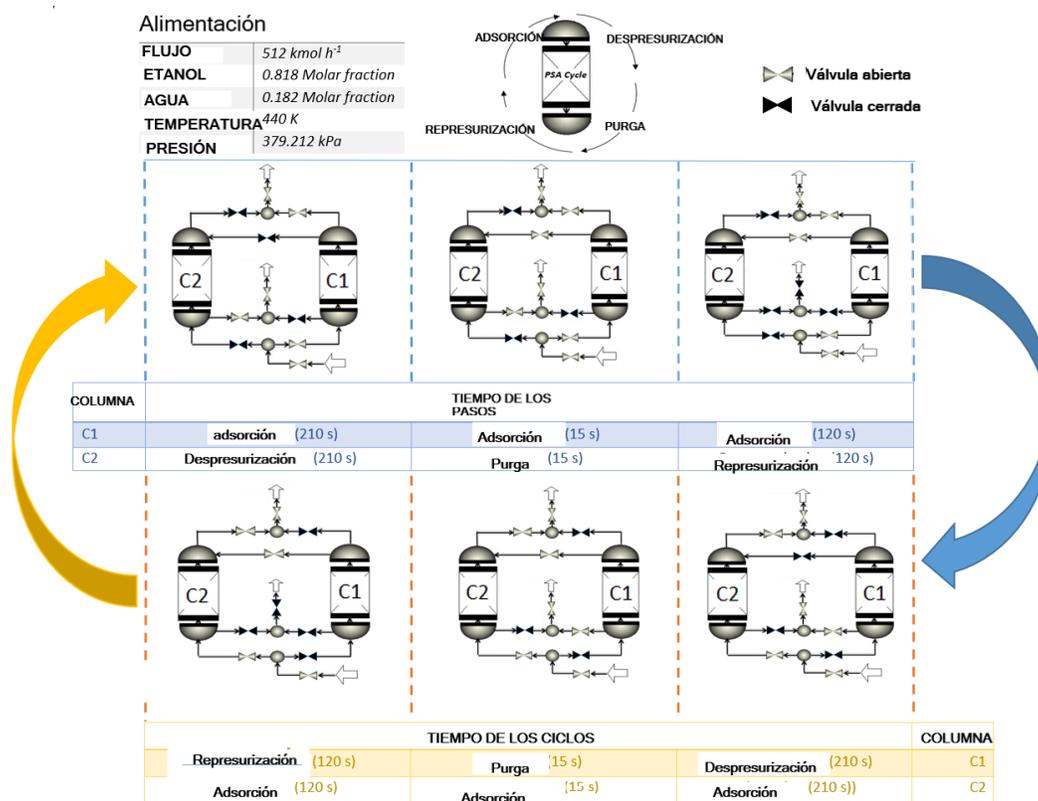


Figura 5.8. Esquema del proceso PSA.

de 0,182 fracción molar de agua (8 % en peso de agua) y 0,818 fracción molar de etanol (92 % en peso de etanol) cerca del punto azeotrópico.

En la Figura. 5.9 muestra el perfil de un ciclo de presión con una duración de 690 segundos, el ciclo consta de 4 pasos: adsorción, despresurización, purga y represurización. La presión de adsorción se realiza a 379kPa con una duración de 345 segundos, luego se realiza la despresurización alcanzando un valor cercano a 50kPa con una duración de 210 segundos, posteriormente se realiza la purga con una presión de vacío de 18kPa con una duración de 15 segundos y para finalizar la represurización se realiza en un tiempo de 120 segundos, con el fin de dejar el lecho listo para iniciar nuevamente la etapa de adsorción.

La PRBS construida en este caso fue de 5 bits, esto para garantizar una excitación rigurosa del modelo de PSA (ver Figura. 5.10)

El modelo riguroso PSA actúa como una planta virtual, con el objetivo de evaluar su rendimiento dinámico bajo diversas condiciones de operación y lograr la adquisición de datos de entrada y salida, que se utilizan para identificar un modelo reducido o simplificado capaz de capturar la dinámica importante del proceso de PSA. La identificación del sistema se basa en encontrar un modelo reducido que relaciona la variable de entrada (flujo de alimentación) y la variable de salida (pureza de etanol) con una buena aproximación a la del modelo riguroso

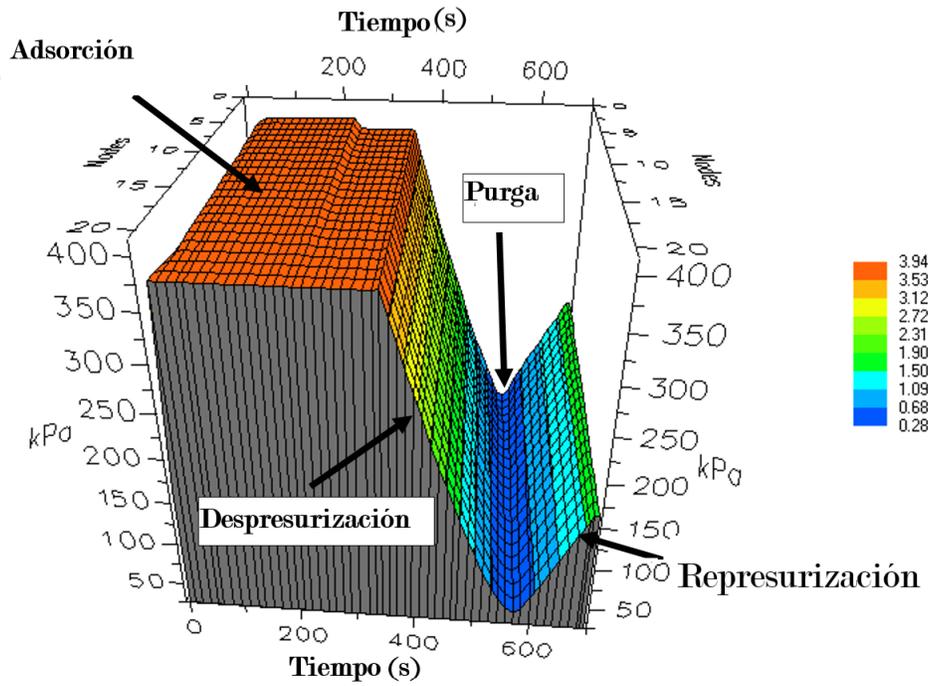


Figura 5.9. Perfil de presión de un ciclo PSA.

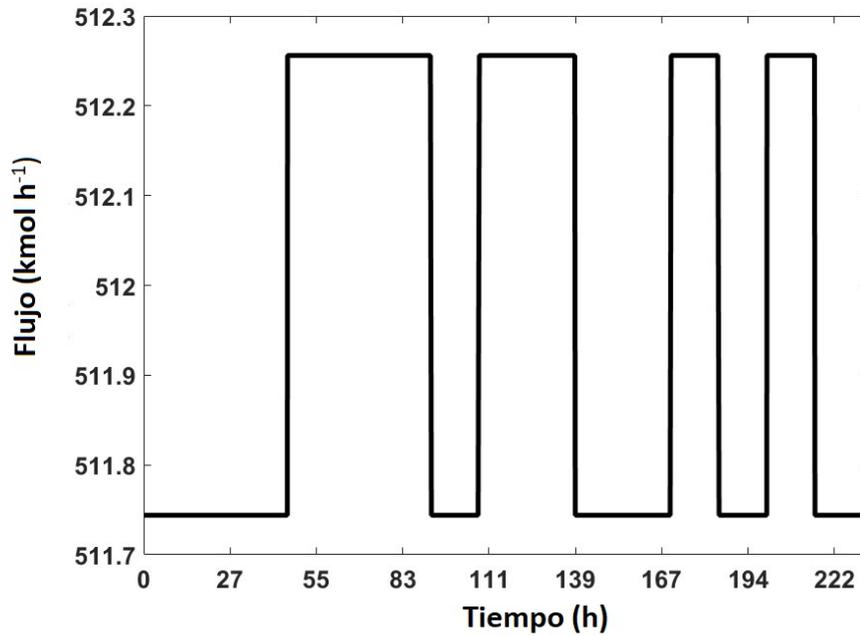


Figura 5.10. Entrada prbs 5 bits.

del PSA. En este trabajo, los datos de entrada se generaron a partir del valor nominal del flujo de alimentación. El desarrollo del conjunto de entrada fue del diseño de una PRBS de 5 bits con una variación de $\pm 0,5\%$ que incluye un tiempo para la pureza de etanol para converger en un CSS, esto se muestra en el tiempo de 0 a 49 h.

Estos datos fueron inyectados en el modelo riguroso PSA que da como resultado datos de salida, estas variaciones de señales que se inyectan en el riguroso modelo PSA excitan persistentemente el sistema, obteniendo variaciones en la pureza de etanol y cumplir con el objetivo de obtener una reducción y modelo menos complejo.

Estas señales se utilizan para identificar el modelo reducido. Los datos se definen como el vapor de entrada con una composición de 0,183 de agua y 0,818 de etanol en fracción molar y, el resultado es la pureza del etanol. La base de datos está compuesta por 799200 muestras, cada muestra se toma cada segundo.

El conjunto de datos se dividió en dos partes diferentes para estimar y validar los modelos, es decir, 399600 muestras para estimar el parámetros del modelo y 399600 muestras desconocidas para validar el modelo.

Se incluye una comparación de la distribución de cada sistema en las Figuras. 5.11 y 5.12 y se muestra la distribución de cada estimación donde, el modelo RNN es superior al modelo HW debido a que la distribución del sistema real y el modelo RNN es casi lo mismo. Para comparar numéricamente estas relaciones, se calcula el RMSE.

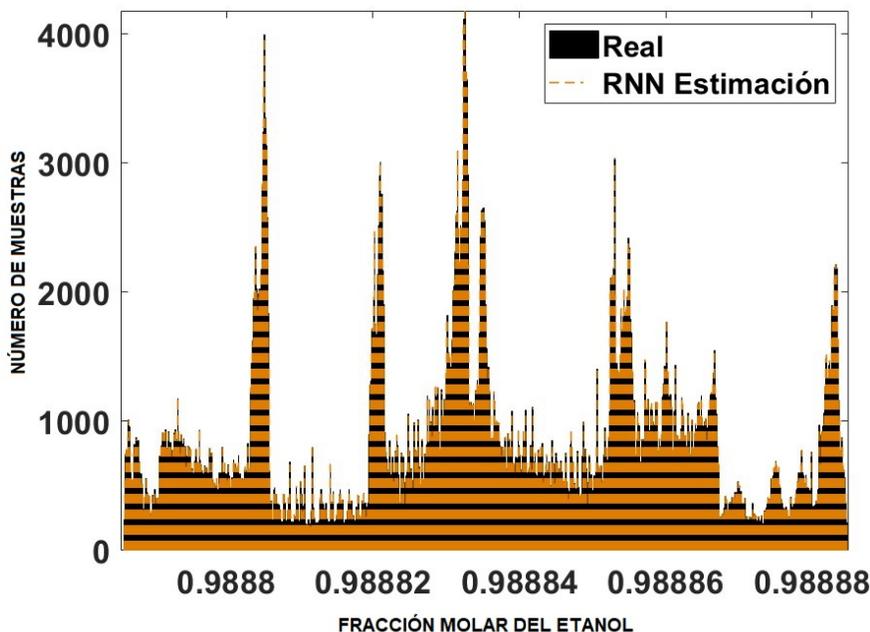


Figura 5.11. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo RNN.

El valor RMSE muestra la distancia media entre dos señales usando el error (que es una

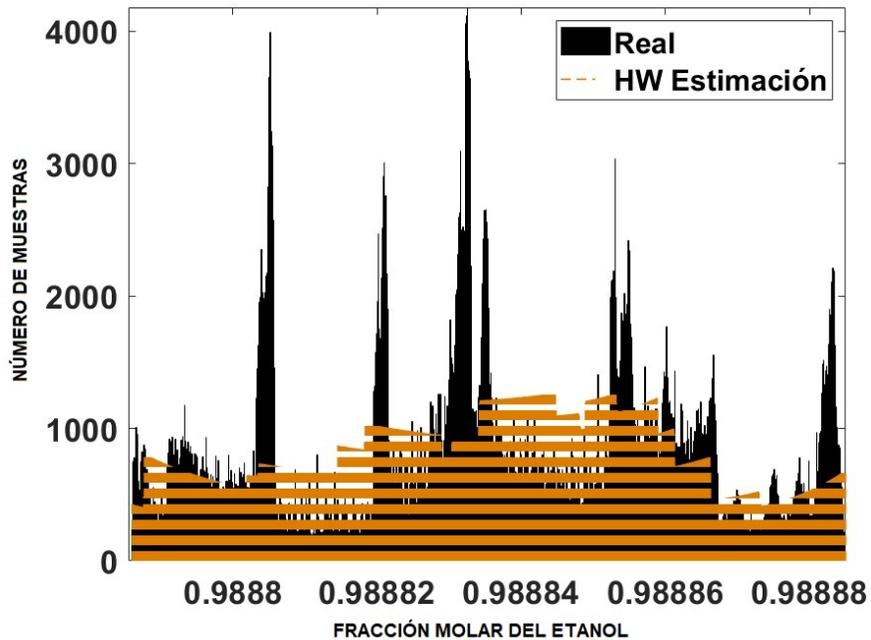


Figura 5.12. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo HW

comparación entre la señal real y la estimada), es decir, si ambas señales son similares, entonces el RMSE tiende a cero, en caso contrario el error puede tender al infinito. En este sentido, el RMSE calculado para el modelo HW es 6.4175×10^{-6} mientras que el modelo RNN ha obtenido 1.4490×10^{-9} que es más de mil veces el RMSE proporcionado por el modelo HW.

El FIT muestra cómo se relaciona una señal con otra, es decir, si la salida estimada es muy similar a la salida real del sistema, el FIT calculado sería cercano al 100%. En este sentido, el modelo HW ha obtenido un 75,8325 % mientras que el modelo RNN ha obtenido un 97,9985 %.

Finalmente, se realiza la prueba pendiente-intersección para incluir otra prueba estadística a nuestro sistema estimado como se muestra en las Figuras 5.13 y 5.14 idealmente, la pendiente debería ser igual a uno y la intersección igual a cero en la representación de una línea de intensidad que se ajuste a la comparación entre la señal de salida real y la señal estimada.

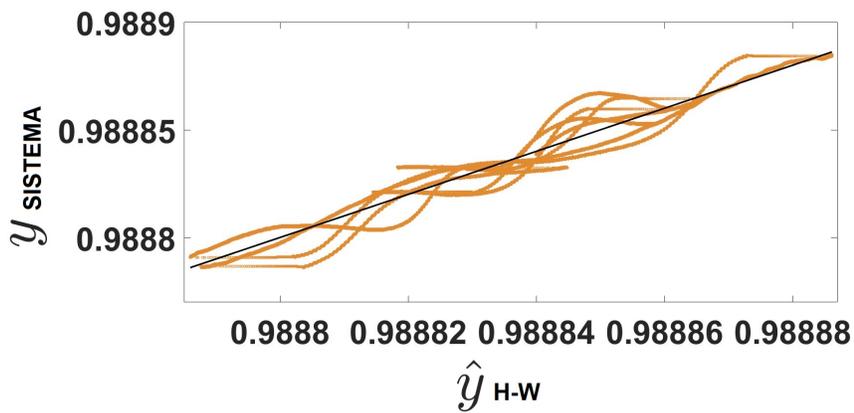


Figura 5.13. Prueba de pendiente HW.

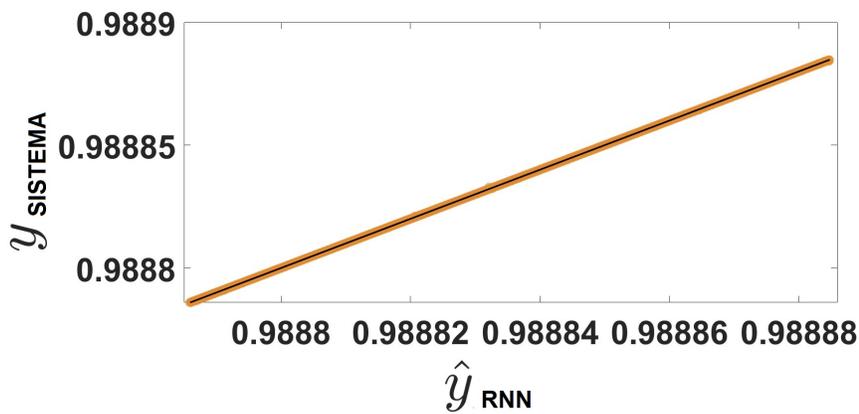


Figura 5.14. Distribución del sistema de salida real y la salida generada por el modelo RNN.

Capítulo 6

CONCLUSIONES Y DISCUSIONES

El procedimiento de identificación de sistemas es un método de modelado empírico para obtener o proponer un modelo que imite el comportamiento real de un sistema real. En este método, las señales de entrada y salida del sistema real son la única información necesaria para calcular el modelo.

Existen varias metodologías para identificar un sistema, en esta investigación se propone una RNN la cual ha sido comparada con un modelo HW.

La RNN ha mostrado el mejor desempeño entre los modelos computados (HW vs RNN), usando varios procedimientos de prueba e índices de desempeño, por ejemplo, la aproximación donde la RNN tiene un 84.51 % mientras que el modelo HW tiene un ajuste de 75.8425 %.

Los resultados obtenidos del diseño y desarrollo de la red neuronal artificial fueron satisfactorios y con gran aportación científica y tecnológica. Los resultados se han comparado con otras técnicas de identificación de sistemas como el modelo de Hammerstein-Wiener, que es un método muy utilizado para la identificación de plantas reales. Incluso con esta comparación, el modelo de red neuronal resultó muy eficiente. Existen pocos casos de estudios en la literatura sobre las redes neuronales artificiales aplicadas al proceso PSA, en particular para la producción de etanol, sin embargo, los análisis y desarrollos que se hicieron en esta tesis son más profundos que otros aportes científicos, ya que se aborda con datos experimentales, purificación de la mezcla etanol y agua, optimización en lograr rápidamente la pureza deseada y generar un algoritmo a través de una red neuronal artificial para predecir el comportamiento dinámico de la pureza de etanol con un costo computacional menor en comparación al modelo Hammerstein-Wiener y otros trabajos reportados.

En el caso particular de la prueba pendiente-intersección, el desempeño de ambos modelos es similar debido a la amplitud de salida del sistema; que no tiene grandes cambios a través del tiempo, es decir, las oscilaciones de salida de pureza de etanol están entre los 0,998879 y 0,98888.

En el mismo sentido, los RMSE en ambos métodos son similares debido a que la diferencia de la salida real y la salida estimada están cerca de la amplitud de las oscilaciones, aunque

este error es pequeño, la RNN ha mostrado un mejor desempeño que el modelo HW.

Por otro lado, si se compara el número de parámetros, el modelo RNN estima su salida con 19 parámetros para representar el comportamiento real del sistema mientras que el modelo HW requiere alrededor de 37 parámetros para estimar la salida real del sistema; esto no es una diferencia sustancial desde el punto de vista de la implementación pero sí lo es para la calidad de los modelos. La calidad de un modelo está fuertemente relacionada con el número de parámetros estimados, en este sentido, cuando el modelo tiene un número bajo de parámetros, la calidad es alta. Por lo tanto, con 19 parámetros, la eficiencia del modelo RNN es superior a la del modelo HW.

Finalmente, podemos concluir que es de gran importancia obtener un modelo identificado con RNN para diseñar controladores, ya que debido a que el modelo PSA es altamente no lineal, genera dificultades para el diseño de controladores. Otra contribución de este nuevo modelo identificado con RNN es que permite una mejor aproximación a los resultados de pureza del etanol que se pueden obtener en la planta real de PSA, por lo que este nuevo modelo puede ser utilizado para predecir el comportamiento dinámico y evitar una disminución en la pureza del etanol, permitiendo a la planta real para tener predicciones para ajustar sus parámetros y evitar estos problemas de pérdidas.

En resumen las aportaciones principales de este trabajo son:

1. Identificación del Modelo PSA a partir de redes neuronales Artificiales.
2. Optimización del proceso PSA a partir de una red neuronal. .

Como trabajos futuros, se pretende realizar un sistema de control automático con las características de nuestra RNN, el cual nos permita controlar de forma exacta la dinámica del proceso de producción de etanol en tiempo real.

Bibliografía

- [1] A. B. Raheem. Comparative Economic Investigation Options for Liquefied Petroleum Gas Production from Natural Gas Liquids. *American Journal of Chemical Engineering*, 3(2):55, 2015.
- [2] Mustafa Balat and Havva Balat. Progress in bioethanol processing. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34:551–573, 2008.
- [3] Pierre Baldi and Roman Vershynin. The capacity of feedforward neural networks. *Neural Networks*, 116:288–311, aug 2019.
- [4] A. Bate, M. Lindquist, I. R. Edwards, S. Olsson, R. Orre, A. Lansner, and R. M. De Freitas. A Bayesian neural network method for adverse drug reaction signal generation. *European Journal of Clinical Pharmacology*, 54(4):315–321, 1998.
- [5] Matthias Bitzer. Model-based nonlinear tracking control of pressure swing adsorption plants. In *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, volume 322, pages 403–418. Springer, Berlin, Heidelberg, nov 2005.
- [6] Jiejun Cai, Xiaoqian Ma, Lixiang Li, Yixian Yang, Haipeng Peng, and Xiangdong Wang. Chaotic ant swarm optimization to economic dispatch. *Electric Power Systems Research*, 77(10):1373–1380, aug 2007.
- [7] Hua Chang, Xi Gang Yuan, Hua Tian, and Ai Wu Zeng. Experimental study on the adsorption of water and ethanol by cornmeal for ethanol dehydration. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(11):3916–3921, may 2006.
- [8] Ioan Cristian Trelea. The particle swarm optimization algorithm: convergence analysis and parameter selection. Technical report, 2003.
- [9] Adilson Curi, Wilmer J.V. Granda, Hernani M. Lima, and Wilson T. Sousa. Las zeolitas y su aplicación en la descontaminación de efluentes mineros. *Informacion Tecnologica*, 17(6):111–118, 2006.
- [10] Christian Dalken, J. Chang, and John Moody. Learning Rate Schedules for Faster Stochastic Gradient Search. *Neural Networks for Signal Processing*, 1992.

BIBLIOGRAFÍA

- [11] José A. Delgado, María A. Uguina, José L. Sotelo, Vicente I. Águeda, Alvaro García, and Angel Roldán. Separation of ethanol-water liquid mixtures by adsorption on silicalite. *Chemical Engineering Journal*, 180:137–144, jan 2012.
- [12] Grzegorz Dudek. Generating Random Parameters in Feedforward Neural Networks with Random Hidden Nodes: Drawbacks of the Standard Method and How to Improve It. In *Communications in Computer and Information Science*, volume 1333, pages 598–606. Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, nov 2020.
- [13] I. I. El-Sharkawy, B. B. Saha, S. Koyama, J. He, K. C. Ng, and C. Yap. Experimental investigation on activated carbon-ethanol pair for solar powered adsorption cooling applications. *International Journal of Refrigeration*, 31(8):1407–1413, dec 2008.
- [14] Aida Farsi, Ibrahim Dincer, and Greg F. Naterer. Multi-objective optimization of an experimental integrated thermochemical cycle of hydrogen production with an artificial neural network. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(46):24355–24369, sep 2020.
- [15] Stephen Grossberg. *How Does a Brain Build a Cognitive Code?* pages 1–52. Springer, Dordrecht, 1982.
- [16] Jianyu Guan and Xijun Hu. Simulation and analysis of pressure swing adsorption: Ethanol drying process by the electrical analogue. *Separation and Purification Technology*, 31(1):31–35, apr 2003.
- [17] Simon Haykin, New York, Boston San, Francisco London, Toronto Sydney, Tokyo Singapore, Madrid Mexico, City Munich, Paris Cape, Town Hong, and Kong Montreal. *Neural Networks and Learning Machines Third Edition*. 2009.
- [18] Guang-Bin Huang, Chee Kheong Siew, Qin-Yu Zhu, and Chee-Kheong Siew. Extreme learning machine: A new learning scheme of feedforward neural networks No-reference IQA for blur image View project Sentence level sentiment analysis View project Extreme Learning Machine: A New Learning Scheme of Feedforward Neural Networks. 2004.
- [19] Hua Jiang Huang, Shri Ramaswamy, U. W. Tschirner, and B. V. Ramarao. A review of separation technologies in current and future biorefineries, aug 2008.
- [20] Qinglin Huang, Amir Malekian, and Mladen Eić. Optimization of PSA process for producing enriched hydrogen from plasma reactor gas. *Separation and Purification Technology*, 62(1):22–31, aug 2008.
- [21] Seppo Palosaari Jari Lewandowski, Norberto O. Lemcoff. Use of Neural Networks in the Simulation and Optimization o Pressure Swing Adsorption Processes. *Chemical Engineering & Technology*, 27(7):593–597, 1999.

- [22] Harish Khajuria and Efstratios N. Pistikopoulos. Dynamic modeling and explicit/multi-parametric MPC control of pressure swing adsorption systems. *Journal of Process Control*, 21(1):151–163, jan 2011.
- [23] Santosh Kumar, Neetu Singh, and Ram Prasad. Anhydrous ethanol: A renewable source of energy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14(7):1830–1844.
- [24] M. A. Latifi, D. Salhi, and D. Tondeur. Optimisation-based simulation of a pressure swing adsorption process. *Adsorption*, 14(4-5):567–573, oct 2008.
- [25] Qunsheng Li, Jiguo Zhang, Zhigang Lei, Jiqin Zhu, Jiujuan Zhu, and Xiaoqiao Huang. Selection of ionic liquids as entrainers for the separation of ethyl acetate and ethanol. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48(19):9006–9012, oct 2009.
- [26] Yujun Liu, Javier Delgado, and James A. Ritter. Comparison of Finite Difference Techniques for Simulating Pressure Swing Adsorption, 1998.
- [27] Hugo F. S. Lui and William R. Wolf. Construction of Reduced Order Models for Fluid Flows Using Deep Feedforward Neural Networks. *Journal of Fluid Mechanics*, 872:963–994, mar 2019.
- [28] Shuo Ma, Liang Tong, Feng Ye, Jinsheng Xiao, Pierre Bénard, and Richard Chahine. Hydrogen purification layered bed optimization based on artificial neural network prediction of breakthrough curves. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(11):5324–5333, feb 2019.
- [29] Jonathan Macron, Joseph Pierquin, olivier Roy, and Pierre Rouchon. *Purity Predictive Model-based Control of Oxygen Vacuum Swing Adsorption Process*. 2010.
- [30] D. Elusaí Millán-Ocampo, Arianna Parrales-Bahena, J. Gonzalo González-Rodríguez, Susana Silva-Martínez, Jesús Porcayo-Calderón, and J. Alfredo Hernández-Pérez. Modelling of behavior for inhibition corrosion of bronze using Artificial Neural Network (ANN). *Entropy*, 20(6):409, jun 2018.
- [31] Graham Morse, Rudy Jones, Jules Thibault, and F. Handan Tezel. Neural network modelling of adsorption isotherms. *Adsorption*, 17(2):303–309, apr 2011.
- [32] H. Peng, F. Couenne, and Y. Le Gorrec. Robust control of a pressure swing adsorption process. In *IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline)*, volume 44, pages 7310–7315. IFAC Secretariat, jan 2011.
- [33] A. B. Pereiro, J. M.M. Araújo, J. M.S.S. Esperança, I. M. Marrucho, and L. P.N. Rebelo. Ionic liquids in separations of azeotropic systems - A review, mar 2012.
- [34] Pit Pruksathorn and Tharapong Vitidsant. Production of pure ethanol from azeotropic solution by pressure swing adsorption. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 26(4):1106–1111, feb 2009.

- [35] Julián Andrés Quintero, Isabel Montoya, Óscar Julián, Sánchez 2, and Ariel Cardona. EVALUACIÓN DE LA DESHIDRATACIÓN DE ALCOHOL CARBURANTE MEDIANTE SIMULACIÓN DE PROCESOS EVALUATION OF FUEL ETHANOL DEHYDRATION THROUGH PROCESS SIMULATION. Technical Report 2, 2007.
- [36] Alireza Rahnama, Guilherme Zepon, and Seetharaman Sridhar. Machine learning based prediction of metal hydrides for hydrogen storage, part I: Prediction of hydrogen weight percent. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(14):7337–7344, mar 2019.
- [37] Herbert Robbins and Sutton Monro. A Stochastic Approximation Method. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(3):400–407, sep 1951.
- [38] Jesse Y. Rumbo Morales, Guadalupe López López, Víctor M. Alvarado Martínez, Felipe de J. Sorcia Vázquez, Jorge A. Brizuela Mendoza, and Mario Martínez García. Parametric study and control of a pressure swing adsorption process to separate the water-ethanol mixture under disturbances. *Separation and Purification Technology*, 236:116214, apr 2020.
- [39] David E. Rumelhart, Geoffrey E. Hinton, and Ronald J. Williams. Learning representations by back-propagating errors. *Nature*, 323(6088):533–536, 1986.
- [40] Amaresh Sahu, Sushanta Kumar Panigrahi, and Sabyasachi Pattnaik. Fast Convergence Particle Swarm Optimization for Functions Optimization. *Procedia Technology*, 4:319–324, jan 2012.
- [41] Hermes R. Sant Anna, Amaro G. Barreto, Frederico W. Tavares, and Maurício B. de Souza. Machine learning model and optimization of a PSA unit for methane-nitrogen separation. *Computers and Chemical Engineering*, 104:377–391, 2017.
- [42] Jun seong Jeong, Hyungjin Jeon, Kyung mo Ko, Bongwoo Chung, and Gi Wook Choi. Production of anhydrous ethanol using various PSA (Pressure Swing Adsorption) processes in pilot plant. *Renewable Energy*, 42:41–45, jun 2012.
- [43] Marian Simo, Christopher J. Brown, and Vladimir Hlavacek. Simulation of pressure swing adsorption in fuel ethanol production process. *Computers and Chemical Engineering*, 32(7):1635–1649, jul 2008.
- [44] Marian Simo, Siddharth Sivashanmugam, Christopher J. Brown, and Vladimir Hlavacek. Adsorption/desorption of water and ethanol on 3A zeolite in near-adiabatic fixed bed. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 48(20):9247–9260, oct 2009.
- [45] Clint Sutherland, Beverly S. Chitto, and Chintanapalli Venkobachar. Application of ANN Predictive Model for the Design of Batch Adsorbers - Equilibrium Simulation of Cr(VI) Adsorption onto Activated Carbon. *The Open Civil Engineering Journal*, 13(1):69–81, jul 2019.

- [46] Wei Tao, Shuo Ma, Jinsheng Xiao, Pierre Bénard, and Richard Chahine. Simulation and optimization for hydrogen purification performance of vacuum pressure swing adsorption. In *Energy Procedia*, volume 158, pages 1917–1923. Elsevier Ltd, 2019.
- [47] Liang Tong, Pierre Bénard, Yi Zong, Richard Chahine, Kun Liu, and Jinsheng Xiao. Artificial neural network based optimization of a six-step two-bed pressure swing adsorption system for hydrogen purification. *Energy and AI*, 5:100075, sep 2021.
- [48] Ana María Uyazán. Deshidratación del etanol. *Ingeniería e Investigación*, 2004.
- [49] Ehsan Valian, Shahram Mohanna, and Saeed Tavakoli. IMPROVED CUCKOO SEARCH ALGORITHM FOR FEEDFORWARD NEURAL NETWORK TRAINING. *International Journal of Artificial Intelligence & Applications (IJAIA)*, 2(3), 2011.
- [50] Gabriel Villarrubia, Juan F De Paz, Pablo Chamoso, and Fernando De La Prieta. Artificial neural networks used in optimization problems. *Neurocomputing*, 272:10–16, 2017.
- [51] Nguyen Dat Vo, Dong Hoon Oh, Jun Ho Kang, Min Oh, and Chang Ha Lee. Dynamic-model-based artificial neural network for H₂ recovery and CO₂ capture from hydrogen tail gas. *Applied Energy*, 273:115263, sep 2020.
- [52] Jinsheng Xiao, Chenglong Li, Liang Fang, Pascal Böwer, Michael Wark, Pierre Bénard, and Richard Chahine. Machine learning–based optimization for hydrogen purification performance of layered bed pressure swing adsorption. *International Journal of Energy Research*, 44(6):4475–4492, may 2020.
- [53] Se Il Yang, Do Young Choi, Seong Cheol Jang, Sung Hyun Kim, and Dae Ki Choi. Hydrogen separation by multi-bed pressure swing adsorption of synthesis gas. *Adsorption*, 14(4-5):583–590, oct 2008.
- [54] Feng Ye, Shuo Ma, Liang Tong, Jinsheng Xiao, Pierre Bénard, and Richard Chahine. Artificial neural network based optimization for hydrogen purification performance of pressure swing adsorption. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(11):5334–5344, feb 2019.
- [55] Xiuxin Yu, Yuanhui Shen, Zhongbo Guan, Donghui Zhang, Zhongli Tang, and Wenbin Li. Multi-objective optimization of ANN-based PSA model for hydrogen purification from steam-methane reforming gas. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(21):11740–11755, mar 2021.
- [56] Chiara Zecchin. Online Glucose Prediction in Type-1 Diabetes by Neural Network Models. jan 2014.
- [57] Yanjun Zhang, Ling Zhou, Zhongjun Hu, Ziwang Yu, Shuren Hao, Zhihong Lei, and Yangyang Xie. Prediction of layered thermal conductivity using artificial neural network

BIBLIOGRAFÍA

in order to have better design of ground source heat pump system. *Energies*, 11(7):1896, jul 2018.

- [58] Zhengyou Zhang. Parameter estimation techniques: A tutorial with application to conic fitting. *Image and Vision Computing*, 15(1):59–76, jan 1997.



UNIVERSIDAD DE
GUADALAJARA

Red Universitaria e Institución Benemérita de Jalisco

CUVALLES

Neural Network-Based Identification of a PSA Process for Production and Purification of Bioethanol

ERASMO MISAE L RENTERÍA-VARGAS¹, CARLOS JESÚS ZÚÑIGA AGUILAR¹,
JESSE YOE RUMBO MORALES¹, (Member, IEEE), FELIPE DE JESÚS SORCIA VÁZQUEZ¹,
MIGUEL DE-LA-TORRE¹, (Senior Member, IEEE), JOSÉ ANTONIO CERVANTES¹,
ESTELA SARMIENTO BUSTOS², AND MANUELA CALIXTO RODRÍGUEZ²

¹Computer Science and Engineering Department, University of Guadalajara, Ameca, Guadalajara 46600, Mexico

²Academic Division of Industrial Mechanics, Emiliano Zapata Technological University of the State of Morelos, Emiliano Zapata, Morelos 62760, Mexico

Corresponding author: Jesse Yoe Rumbo Morales (jesse.rumbo@academicos.udg.mx)

ABSTRACT The pressure swing adsorption (PSA) process, is a novel method for the purification and production of bioethanol. A highly non-linear rigorous model is implemented to simulate the cyclic dynamics of PSA, achieving purity of 99% wt of ethanol, which meets international standards to be used as fuel. The contribution of this work focuses on obtaining an identified model capable of capturing the important dynamics of the PSA process (with a fit above of 90%) and to be used for controller design purposes, since it is very complicated to design control in highly nonlinear models that are represented with partial differential equations (PDE). For proof of concept, a comparison between Hammersstein-Wiener and Artificial Neural-Networks showed the relevance of the proposed method, using the same input and output signals. Both identified models capture the important dynamics of the rigorous PSA model.

INDEX TERMS Artificial neural-networks, system identification, ethanol dehydration, pressure swing adsorption.

I. INTRODUCTION

Bioethanol is an alternative fuel that can be used in ignition engines and bivalent engines as a fuel or oxygen additive: E100 (100 % bioethanol) requires its own combustion technology; E85 (85 % bioethanol + 15 % gasoline) is used in the so-called FlexiFuel vehicles; the E5 (5 % bioethanol + 95 % gasoline) does not require modification of the vehicles. For its use to be possible, bioethanol needs to be free of water (it is then known as dehydrated ethanol). There are several alternatives to produce bioethanol, these are extractive distillation with salts, azeotropic distillation, vacuum distillation, pervaporation, and adsorption with molecular sieves. Currently, processes with molecular sieves have displaced certain technologies (azeotropic and extractive distillation with salts), since they have lower energy and equipment costs [1]. Another advantage of this process is obtaining purities of 99% ethanol compared to pervaporation processes that

manage to reach purities close to 97% of ethanol. So that pervaporation processes achieve purity of 99% of ethanol, they need external equipment that involves other purification steps. To purify ethanol and achieve the properties of fuel ethanol, the adsorption process with molecular sieves has been used using the PSA method [1]–[7]. The highly non-linear rigorous model of PSA processes for gas separation is a subject very little studied in the literature. Balances of mass, energy, and moment, as well as equations on equilibrium Thermodynamic and kinetic, form a system of partial differential equations (PDE) which describe the dynamic behavior of the PSA process [8]. In most cases, there are works in the literature that make simplifications on these PDE, however, they are not feasible, since they do not have a good approximation compared to the real results, generating a loss of information and data when making these considerations. For this reason, it is necessary to use numerical methods to simulate gas flow, temperature increases and pressure drops through a packed bed for purification and production of dehydrated ethanol. Since PSA model phenomena depend on both time

The associate editor coordinating the review of this manuscript and approving it for publication was Shuihua Wang¹.

Article

Simulation and State Feedback Control of a Pressure Swing Adsorption Process to Produce Hydrogen

Mario Martínez García ¹, Jesse Y. Rumbo Morales ¹, Gerardo Ortiz Torres ¹, Salvador A. Rodríguez Paredes ², Sebastián Vázquez Reyes ², Felipe de J. Sorcia Vázquez ^{1,*}, Alan F. Pérez Vidal ¹, Jorge S. Valdez Martínez ³, Ricardo Pérez Zúñiga ⁴ and Erasmo M. Rentería Vargas ¹

- ¹ Centro Universitario de los Valles, Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km 45.5, Ameca 46600, Mexico; mario.mgarcia@academicos.udg.mx (M.M.G.); jesse.rumbo@academicos.udg.mx (J.Y.R.M.); gerardo.ortiztorres@academicos.udg.mx (G.O.T.); alan.perez@academicos.udg.mx (A.F.P.V.); erasmo.renteria@academicos.udg.mx (E.M.R.V.)
 - ² Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de la ESIME U Azcapotzalco, Instituto Politécnico Nacional, Av. Luis Enrique Erro S/N, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, Alcaldía Gustavo A. Madero, Ciudad de México 07738, Mexico; sarodriguezp@ipn.mx (S.A.R.P.); svazquezr2010@alumno.ipn.mx (S.V.R.)
 - ³ División Académica de Mecánica Industrial, Universidad Tecnológica Emiliano Zapata del Estado de Morelos, Av. Universidad Tecnológica No. 1, Col. Palo Escrito, Emiliano Zapata 62760, Mexico; jorgevaldez@utez.edu.mx
 - ⁴ Sistema de Universidad Virtual de la Universidad de Guadalajara, Guadalajara 44430, Mexico; perezuniga@udgvirtual.udg.mx
- * Correspondence: felipe.sorcia@academicos.udg.mx



Citation: Martínez García, M.; Rumbo Morales, J.Y.; Torres, G.O.; Rodríguez Paredes, S.A.; Vázquez Reyes, S.; Sorcia Vázquez, F.d.J.; Pérez Vidal, A.F.; Valdez Martínez, J.S.; Pérez Zúñiga, R.; Rentería Vargas, E.M. Simulation and State Feedback Control of a Pressure Swing Adsorption Process to Produce Hydrogen. *Mathematics* **2022**, *10*, 1762. <https://doi.org/10.3390/math10101762>

Academic Editor: Svetlana V. Solodusha

Received: 7 May 2022

Accepted: 19 May 2022

Published: 21 May 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract: One of the separation processes used for the production and purification of hydrogen is molecular sieve adsorption using the Pressure Swing Adsorption (PSA) method. The process uses two beds containing activated carbon and a sequence of four steps (adsorption, depressurization, purge, and repressurization) for hydrogen production and purification. The initial composition is 0.11 CO, 0.61 H₂, and 0.28 CH₄ in molar fractions. The aim of this work is to bring the purity of hydrogen to 0.99 in molar fraction and implement controllers that can maintain the desired purity even in the presence of the disturbances that occur in the PSA process. The controller design (discrete PID and state feedback control) was based on the Hammerstein–Wiener model, which had an 80% fit over the rigorous PSA model. Both controllers were validated on a virtual plant of the PSA process, showing great performance and robustness against disturbances. The results obtained show that it is possible to follow the desired trajectory and attenuate double disturbances, while managing to maintain the purity of hydrogen at a value of 0.99 in molar fraction, which meets the international standards to be used as a biofuel.

Keywords: state feedback control; pressure swing adsorption; hydrogen purification; biogas

MSC: 03B70

1. Introduction

Biogas, an alternative and less-polluting fuel, is a resource that has great potential to replace fuels that have an impact on climate change, since it is a renewable product that can be obtained from alternative processes that use Third-Generation Biomass (3G). In general, biogas production is a decentralized and low-carbon energy option that can help mitigate and reduce climate impact. This clean energy can be generated from organic waste [1–4].

This biogas (biohydrogen) can be used as a fuel, but for this, it must have a low content of nitrogen, methane, CO, CO₂, and other elements. There are various processes that can purify and produce 99% biohydrogen, one of them being PSA [5–9].

Article

Experimental Validation of Fractional PID Controllers Applied to a Two-Tank System

Felipe de J. Sorcia-Vázquez ¹, Jesse Y. Rumbo-Morales ¹, Jorge A. Brizuela-Mendoza ², Gerardo Ortiz-Torres ¹, Estela Sarmiento-Bustos ^{3,*}, Alan F. Pérez-Vidal ¹, Erasmo M. Rentería-Vargas ¹, Miguel De-la-Torre ¹, and René Osorio-Sánchez ¹

- ¹ Computer Science and Engineering Department, University of Guadalajara, Ameca 46600, Mexico; felipe.sorcia@academicos.udg.mx (F.d.J.S.-V.); jesse.rumbo@academicos.udg.mx (J.Y.R.-M.); gerardo.ortiztorres@academicos.udg.mx (G.O.-T.); alan.perez@academicos.udg.mx (A.F.P.-V.); erasmo.renteria@academicos.udg.mx (E.M.R.-V.); miguel.dgomora@academicos.udg.mx (M.D.-I.-T.); rene.osorio@academicos.udg.mx (R.O.-S.)
- ² Exact Sciences and Methodologies Department, University of Guadalajara, Ciudad Guzmán 49000, Mexico; jorge.brizuela@cusur.udg.mx
- ³ Academic Division of Industrial Mechanics, Emiliano Zapata Technological University of the State of Morelos, Emiliano Zapata 62760, Mexico
- * Correspondence: estelasarmiento@utez.edu.mx

Abstract: An experimental validation of fractional-order PID (FOPID) controllers, which were applied to a two coupled tanks system, is presented in this article. Two FOPID controllers, a continuous FOPID (cFOPID) and a discrete FOPID (dFOPID), were implemented in real-time. The gains tuning process was accomplished by applying genetic algorithms while considering the cost function with respect to the tracking error and control effort. The gains optimization process was performed directly to the two-tanks non-linear model. The real-time implementation used a National Instruments PCIe-6321 card as a data acquisition system; for the interface, we used a Simulink Matlab and Simulink Desktop Real-Time Toolbox. The performance of the fractional controllers was compared with the performance of classical PID controllers.

Keywords: fractional PID control; coupled tanks system; real-time control

MSC: 93-05



Citation: Sorcia-Vázquez, F.d.J.; Rumbo-Morales, J.Y.; Brizuela-Mendoza, J.A.; Ortiz-Torres, G.; Sarmiento-Bustos, E.; Pérez-Vidal, A.F.; Rentería-Vargas, E.M.; De-la-Torre, M.; Osorio-Sánchez, R. Experimental Validation of Fractional PID Controllers Applied to a Two-Tank System. *Mathematics* **2023**, *11*, 2651. <https://doi.org/10.3390/math11122651>

Academic Editors: Ying Luo, Fudong Ge and Jorge Muñoz

Received: 19 April 2023

Revised: 30 May 2023

Accepted: 7 June 2023

Published: 10 June 2023



Copyright: © 2023 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

The research community has deeply studied the classical PID controller. These controllers have been applied to industrial processes, electromechanical systems, electric and electronic systems, and aeronautical and aerospace systems. The PID controller's success is focused on its simplicity and robustness. One important characteristic of this controller is that the integral term offers robustness against disturbances and parameter uncertainty. Several tuning methods are applied to these controllers, e.g., root locus, frequency, or graphical methods, which are relatively easy to implement. These facts make the controller attractive for implementing the regulation of almost any system or process. A weak characteristic of PID controllers is related to the derivative term. This term is sensitive to the noise originating that the resulting control signal is noisy. This fact negatively affects the performance of the closed-loop system. Different proposals of PID structures have been developed in place of classical PIDs, such as fuzzy PID controllers [1,2], adaptive PID controllers [3,4], sliding mode PID controllers [5,6], intelligent PID controllers [7,8], and generalized PI and PID controllers [9–11]. All of these developments try to improve the performance of classical PIDs and give better characteristics that classical PIDs lack.

Another variation of the classical PID controller is the fractional-order PID controller (FOPID). This variation is based on fractional calculus. During the last decades, fractional

Identification by Recurrent Neural Networks applied to a Pressure Swing Adsorption Process for Ethanol Purification

Publisher: IEEE

Cite This

PDF

Erasmus Misael Renteria-Vargas ; Carlos Jesús Zúñiga Aguilar ; Jesse Yoe Rumbo Morales ; Miguel De-La-Torre ; José Antonio Cervantes ; José ... All Authors

3 Cites in Papers

37 Full Text Views



- Abstract
- Document Sections
- II. Introduction
- III. The PSA Process
- IV. PSA Modeling
- V. Neural Networks
- VI. Results
- Show Full Outline
- Authors
- Figures
- References
- Citations
- Keywords
- Metrics

Abstract:
The pressure swing adsorption (PSA) process is employed for efficient separation of gas mixtures under pressure, and achieve different levels of purity. When used to produce biofuel, PSA parameters should be optimised to meet international standards of purity. PSA modeling relies on highly nonlinear partial differential equations (PDEs). The objective of this work is to propose a model that captures the dynamics of PSA represented by PDEs, using recurrent neural networks (RNN). The proposed RNN is composed of three layers to process the inputs and previous outputs of the real (or simulated) system. Results demonstrate that the proposed RNN presents a more stable approximation, reaching around 97% of purity, with a fit to the simulated purity curve of 84.51%, compared to the 75.84% obtained with Hammerstein-Wiener approach.

Published in: 2022 Signal Processing: Algorithms, Architectures, Arrangements, and Applications (SPA)

Date of Conference: 21-22 September 2022

INSPEC Accession Number: 22504905

Date Added to IEEE Xplore: 07 November 2022

DOI: 10.23919/SPA53010.2022.9927850

ISBN Information:

Publisher: IEEE

ISSN Information:

Conference Location: Poznan, Poland

II. Introduction

Bio-ethanol is an alternative fuel that can be used in ignition or bivalent engines, either as fuel or oxygenating additive. Examples of commercial products include E100 (100% bio-ethanol) that requires its own combustion technology; E85 (85 % bioethanol + 15 % gasoline) that is used in the so-called FlexiFuel vehicles; and E5 (5% bioethanol + 95 % gasoline) that does not require vehicle modification [1]–[4]. Bio-ethanol is produced through biomass fermentation processes, particularly from the fermentation of any biological material that contains sugars (carbohydrates, polysaccharides, etc), starch (contained in grains such as corn, wheat or barley) or cellulose (from stems, trunks, branches or shells of plants) [5]–[9]. The complete transformation of this raw material into anhydrous ethanol (e.g. water free ethanol, suitable to be used as fuel) follows the three stages described below. STAGE 1.

Adapt the raw materials (biomass) to prepare the feed for the fermentation process; usually the biomass is converted into a sugar.

Sign in to Continue Reading

Need Full-Text
access to IEEE Xplore for your organization?
[CONTACT IEEE TO SUBSCRIBE >](#)

More Like This

- Partial Differential Equation Driven Dynamic Graph Networks for Predicting Stream Water Temperature
2021 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM)
Published: 2021
- Exploration of data-driven methods for multiphysics electromagnetic partial differential equations
2020 IEEE MTT-S International Conference on Numerical Electromagnetic and Multiphysics Modeling and Optimization (NEMO)
Published: 2020

[Show More](#)

NATIONAL ELECTRICAL SAFETY CODE (NESC)
ONLINE SUBSCRIPTIONS AVAILABLE

2023 Code, Handbook, and Course Program Now Available in IEEE Xplore!

012

Article

Control for Bioethanol Production in a Pressure Swing Adsorption Process Using an Artificial Neural Network

Moises Ramos-Martinez ¹, Carlos Alberto Torres-Cantero ^{2,3}, Gerardo Ortiz-Torres ¹,
Felipe D. J. Sorcia-Vázquez ¹, Himer Avila-George ¹, Ricardo Eliú Lozoya-Ponce ^{4,*},
Rodolfo A. Vargas-Méndez ⁵, Erasmo M. Renteria-Vargas ¹ and Jesse Y. Rumbo-Morales ¹

- ¹ Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5 C.P., Ameca 46600, Jalisco, Mexico; moises.ramos@valles.udg.mx (M.R.-M.); gerardo.ortiztorres@academicos.udg.mx (G.O.-T.); felipe.sorcias@academicos.udg.mx (F.D.J.S.-V.); himer.avila@academicos.udg.mx (H.A.-G.); erasmo.renteria@academicos.udg.mx (E.M.R.-V.); jesse.rumbo@academicos.udg.mx (J.Y.R.-M.)
- ² Tecnológico Nacional de México Campus Colima, Av. Tecnológico # 1, Col. Liberación, Villa de Álvarez 28976, Colima, Mexico; cantero@ucol.mx
- ³ Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica de la Universidad de Colima, Carretera Colima-Coquimatlan Km 9, Valle de las Huertas, Coquimatlan 28400, Colima, Mexico
- ⁴ División de Estudios de Posgrado e Investigación, Tecnológico Nacional de México campus Chihuahua, Chihuahua 31310, Chih, Mexico
- ⁵ Department of Electronic Engineering, CENIDET, Cuernavaca 62490, Morelos, Mexico; rodolfo.vm@cenidet.tecnm.mx
- * Correspondence: ricardo.lp@chihuahua.tecnm.mx

Abstract: This paper introduces a new approach to controlling Pressure Swing Adsorption (PSA) using a neural network controller based on a Model Predictive Control (MPC) process. We use a Hammerstein–Wiener (HW) model representing the real PSA process data. Then, we design an MPC-controlled model based on the HW model to maintain the bioethanol purity near 99% molar fraction. This work proposes an Artificial Neural Network (ANN) that captures the dynamics of the PSA model controlled by the MPC strategy. Both controllers are validated using the HW model of the PSA process, showing great performance and robustness against disturbances. The results show that we can follow the desired trajectory and attenuate disturbances, achieving the purity of bioethanol at a molar fraction value of 0.99 using the ANN based on the MPC strategy with 94% of fit in the control signal and a 97% fit in the purity signal, so we can conclude that our ANN can be used to attenuate disturbances and maintain purity in the PSA process.

Keywords: artificial neural networks; pressure swing adsorption; model predictive control; bioethanol

MSC: 68T07



Citation: Ramos-Martinez, M.; Torres-Cantero, C.A.; Ortiz-Torres, G.; Sorcia-Vázquez, F.D.J.; Avila-George, H.; Lozoya-Ponce, R.E.; Vargas-Méndez, R.A.; Renteria-Vargas, E.M.; Rumbo-Morales, J.Y. Control for Bioethanol Production in a Pressure Swing Adsorption Process Using an Artificial Neural Network. *Mathematics* **2023**, *11*, 3967. <https://doi.org/10.3390/math11183967>

Academic Editor: Cristina I. Muresan

Received: 11 August 2023

Revised: 9 September 2023

Accepted: 13 September 2023

Published: 19 September 2023



Copyright: © 2023 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

In recent years, there has been a considerable increase in the production of a particular biofuel (bioethanol); the most prominent global producers are the United States (58.03 million liters), Brazil (27.61 million liters), and China (3.19 million liters). It is necessary to consider an increase in world bioethanol production due to the implementation of energy reforms that aim to mitigate the emissions of gases that generate the greenhouse effect [1,2]. For this reason, the study and development of technologies that increase this compound's octane number and considerably improve the combustion efficiency in automobile motors engines are of great importance.

Intending to produce more bioethanol, some necessary stages or processes (chemical pretreatments, enzymatic hydrolysis, fermentation, distillation, and adsorption) need to be considered to reach a purification of 99.5% wt of dehydrated ethanol (bioethanol) [3–6].