



Universidad Veracruzana
Universidad Veracruzana
Región Xalapa

Maestría en Ingeniería Química

Análisis fractal y multifractal de series de tiempo de procesos químicos y biológicos

Tesis para obtener el grado de Maestra en
Ingeniería Química

Presenta:

I.Q. Daianna Famela Domínguez Avalos

Director:

Dr. Víctor M. Rivera Arredondo

Asesor:

Dr. Eliseo Hernández Martínez

Jurado:

Dr. Miguel A. Morales Cabrera

Dra. Teresa Leal Ascencio

Abril de 2024

“Lis de Veracruz: Arte, Ciencia, Luz”



Universidad Veracruzana

Universidad Veracruzana
Región Xalapa

Maestría en Ingeniería Química

*Análisis fractal y multifractal a series de tiempo de
procesos químicos y biológicos*

Tesis para obtener el grado de Maestra en
Ingeniería Química

Presenta:
I.Q. Daianna Famela Domínguez Avalos

Director:
Dr. Víctor M. Rivera

Asesor:
Dr. Eliseo Hernández Martínez

Sinodales:
Dr. Miguel A. Morales Cabrera
Dra. Teresa Leal Ascencio

Agradecimientos

En primer lugar, le agradezco a Dios por ayudarme a terminar esta investigación, y por permitirme conocer excelentes profesores y amigos durante esta experiencia.

Le estoy muy agradecida al Dr. Eliseo Hernández por haberme guiado e introducido al estudio del tema de análisis fractal que para mí fue un tema tan interesante y que se ha convertido en los últimos años en una herramienta multidisciplinar importante utilizada por científicos, médicos, economistas, informáticos etc. De igual manera quisiera agradecerle por sus conocimientos impartidos durante la carrera que se convertirán en la base de mi carrera profesional.

Le doy las gracias Dr. Víctor Rivera por su dedicación y paciencia y correcciones precisas que me pudieron permitir la culminación de este proyecto.

Mi profundo agradecimiento a mi madre a la mujer que con su amor y apoyo incondicional me dio el impulso para seguir adelante. Gracias a ti, hoy veo convertirse en realidad una de mis metas.

A mi padre quisiera agradecerle por sus sabios consejos y experiencia que me ayudaron a superar los desafíos que se presentaron durante la investigación.

A mi hermano y demás familia en general por sus palabras de aliento y comprensión me brindaron motivación.

También agradezco a la Universidad Veracruzana, en especial a mis compañeros Adrián e Hiram y a todos mis maestros por retroalimentar mi trabajo con sugerencias y comentarios, así como los momentos de convivencia.

Índice

Agradecimientos	1
Índice	2
1. Introducción	
1.1 Antecedentes	7
1.2 Planteamiento del problema	11
1.3 Justificación	12
1.4 Hipótesis	13
1.5 Objetivos	13
2. Marco teórico	14
2.1 Técnicas de medición	14
2.2 Monitoreo indirecto de procesos	15
2.2.1 Enfoques basados en métodos estadísticos	16
2.2.2 Enfoques basados en inteligencia artificial	17
2.3 Concepto de fractal	19
2.3.1 Características de los objetos fractales	19
2.4 Multifractalidad	20
3. Metodología	23
3.1 Análisis de rango reescalado (R/S)	23
3.2 Análisis de fluctuaciones sin tendencia (DFA)	24
3.3 Metodología multifractal	26
3.3.1 Análisis multifractal a partir de R/S	26
3.3.2 Análisis multifractal a partir de DFA	27
3.3.3 Definición de parámetros multifractales	28
4. Tostado de café	31
4.1 Tostado de café	31
4.1 Series de tiempo	33
4.3 Análisis fractal	35
4.3.1 Análisis global	35
4.3.2 Análisis dinámico local	37
4.4 Análisis multifractal	43

5. Digestión anaerobia de vinaza tequilera	48
5.1 Introducción.....	48
5.2 Series de tiempo	50
5.2 Análisis fractal.....	51
5.2.1 Análisis global.....	¡Error! Marcador no definido.
5.2.3 Análisis dinámico	¡Error! Marcador no definido.
5.4 Análisis multifractal	55
6. Conclusiones y perspectivas	58
6.1 Tostado de café.....	58
6.2 Digestión anaerobia de vinazas de tequila	59
6.3 Perspectivas	59
Referencias	61

Índice de figuras

3.1 Espectro de singularidad con la definición de los parámetros multifractales	30
4.1 Equipo de adquisición de datos del tostador de café.....	33
4.2 Perfil de temperatura para las corridas de 10 y 20 minutos.....	35
4.3 Análisis global para la serie de tiempo de 20 min a) R/S y b) DFA.....	36
4.4 Análisis local dinámico para la serie de 20 min a) R/S b) DFA.....	39
4.5 Análisis dinámico escala-temporal para la serie de temperatura de 20 min.....	40
4.6 Comparación de la dimensión fractal (2-HA(t)) con la dimensión fractal de imágenes (H-im) de la serie de temperatura de 20 min para el sensor en a) tambor b) tolva y c) turbina.....	41
4.7 Comparación de la dimensión fractal (2-HA(t)) con la dimensión fractal de imágenes de la serie de temperatura de 60 min para el análisis a) R/S y b) DFA.....	42
4.8 Exponentes de Hurst en función de q de la serie de tiempo de temperatura de 20 min del a) tambor, b) tolva y c) turbina.....	45
4.9 Análisis multifractal basado en el DFA, de $\tau(q)$ como función de q para las tres series de tiempo de 20 min.....	46
4.10 Espectro de singularidad de la serie de tiempo de 20 min.....	47
5.1 Mediciones de pH de la digestión anaerobia del tequila.....	51
5.2 Análisis global identificando cuatro zonas de escalamiento a) R/S b) DFA.....	52
5.3 Análisis dinámico local de las cuatro zonas de escalamiento considerando 6 hrs. de muestreo a) R/S b) DFA.....	53
5.4 Variaciones del exponente de Hurst en escala y tiempo, $H(s,t)$	54
5.5 Comparación de datos experimentales y exponentes fractales a) HB – DQO b) HC - AGV d) HD – producción de gas.....	55
5.6 Análisis multifractal aplicado a la serie de pH de la DA de vinazas tequileras.....	56
5.7 Variaciones del exponente de Hurst con el parámetro q	57
5.8 Dimensión de la singularidad con respecto a la norma q	58

Índice de tablas

4.1 Exponentes de Hurst calculados con el análisis global de las series de tiempo de temperatura para los tres sensores de temperatura	37
4.2. Tiempo de cómputo para el análisis de imágenes y series de tiempo del experimento de 20 min.....	43
4.3 Índice multifractal R/S en tambor, tolva y turbina.....	45
4.4 Conjunto de parámetros multifractales.....	47

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Uno de los requerimientos actuales más importantes de la industria química es la implementación de sistemas de monitoreo y diagnóstico, que permiten entender el comportamiento, rendimiento y funcionamiento de los procesos químicos y biológicos. Además, se busca que sean de fácil implementación, baratos y que provean información efectiva a los sistemas de control. Sin embargo, no todos los dispositivos cuentan con las características necesarias para su eficiente implementación, por ejemplo, en el monitoreo de la concentración se requieren de equipos costosos, o bien técnicas analíticas de determinación, los cuales exigen tiempos largos en el laboratorio. Debido a esto, en las últimas décadas, se han desarrollado metodologías estadísticas para el monitoreo indirecto, que se basan en el análisis de las mediciones de fácil obtención, tales como la temperatura, pH, conductividad, entre otros. En particular, los métodos basados en la teoría fractal, también conocidos como de análisis fractal, destacan por ser flexibles, de fácil implementación y requieren relativamente pocos datos para su implementación, por lo que en la actualidad existen múltiples trabajos en diversos campos de la ciencia e ingeniería donde se ha implementado este tipo de metodologías. Dichas técnicas se caracterizan por analizar los datos a diferentes escalas de tiempo, lo que les permite identificar fenómenos intrínsecos adyacentes en los procesos que pueden ser correlacionadas con los cambios macroscópicos del proceso, y así usarse como seguimiento indirecto de variables físicas.

A pesar de las bondades de la aplicación del análisis fractal, en el campo de la ingeniería de procesos, hoy en día existen limitados trabajos reportados. Lo anterior es debido a diferentes factores como i) el análisis fractal no es una metodología de análisis estándar en el campo de la ingeniería de procesos, ii) la complejidad presente en las series de tiempo dada

por la interacción de múltiples fenómenos (i.e., físicos, químicos y/o biológicos), iii) la dificultad de realizar diseños experimentales amplios para disponer de información extensa para los análisis, entre otros. En ese sentido, en este trabajo se presenta un estudio sobre la aplicación del método para el análisis e interpretación de series de tiempo de procesos de ingeniería, con el propósito de establecer criterios para su aplicación, que permitan posteriormente extenderlos a diferentes casos de estudio. Para evaluar el alcance de la propuesta se consideraron dos casos de estudio: el tostado de café y la digestión anaeróbica de vinazas de tequila.

1.1 Antecedentes

Tradicionalmente, el monitoreo de la concentración de reactivos y productos se realiza a partir de la toma de muestras en intervalos periódicos de tiempo, y posteriormente se caracterizan mediante técnicas analíticas implementadas en el laboratorio o bien mediante el uso de equipos de resolución analítica como cromatografía, espectroscopia, resonancia magnética nuclear, entre otros (Chanda *et al.*, 2015), lo cual requiere de tiempos prolongados y inversiones económicas considerables. Esta situación ha motivado el desarrollo de metodologías alternativas, que sean más eficientes en tiempo y costos de implementación. Por ejemplo, en reacciones simples (de un paso de reacción) se han propuesto la generación de correlaciones entre la concentración y mediciones como la conductividad y el pH (Claros *et al.*, 2011). Sin embargo, en procesos donde se presentan múltiples reacciones se dificulta establecer correlaciones con tales mediciones. Otras alternativas se han dirigido al desarrollo de modelos matemáticos, mediante la descripción del proceso a partir de leyes de conservación y ecuaciones de primeros principios, logrando el seguimiento y predicción de variables clave del proceso (Bogaerts *et al.*, 2003). La principal limitación es que la construcción de un modelo matemático conlleva una cantidad importante de consideraciones que los hacen inexactos y solo son eficientes bajo las condiciones específicas en las que son validados.

Las técnicas de monitoreo de procesos más eficaces en la práctica se basan en modelos contruidos casi exclusivamente a partir de los datos del proceso (Chiang *et al.*, 2001). Lo que ha incrementado el interés en la generación de investigaciones basadas en el uso de datos que validan el seguimiento del proceso, en especial cuando se disponen

suficientemente accesibles y de bajo costo. Entre las técnicas más notables se encuentran los métodos estadísticos, de inteligencia artificial (IA) y métodos híbridos (Quin, 2012; Quiñones-Grueiro *et al.*, 2019; Nor *et al.*, 2019). Los métodos estadísticos incluyen el análisis de componentes principales (PCA, *principal component analysis*) (Jahirul *et al.*, 2021) que es una de las técnicas más populares empleadas para el monitoreo y puede facilitar el monitoreo del proceso proyectando los datos en un espacio de menor dimensión que caracteriza el estado del proceso. Estos métodos también incluyen a los mínimos cuadrados parciales (PLS, *partial least squares*) (Rief *et al.*, 2021) y a el control de procesos estadísticos multivariantes MSPM, *multivariate statistical process monitoring* (Wang *et al.*, 2018). Estas técnicas han mostrado gran buen desempeño en sistemas que presentan una relación lineal entre sus variables, mientras en sistemas complejos su desempeño se ve limitado.

Otra técnica novedosa es la de aplicación de redes neuronales las cuales se caracterizan por ser útiles para el estudio de sistemas altamente complejos y pueden ser adaptados a diferentes aplicaciones sin requerir de conocimiento previo de modelos matemáticos. En la ingeniería de procesos estas técnicas se han aplicado para la vigilancia del rendimiento, predicción de condiciones adecuadas de operación, identificación de situaciones no deseadas, predicción de variables clave, entre otras. Pero se requiere de una gran cantidad de datos adquiridos del proceso para el entrenamiento de la red, además de la necesidad de un pre-entrenamiento de las redes (Wu, & Zhao 2018; Yuan *et al.*, 2020; Wang *et al.*, 2020; Wang & Li 2020).

Como alternativa se encuentran las metodologías multiescala, donde la idea central es descomponer la serie de tiempo en pequeños intervalos de tiempo y analizar estadísticamente cada intervalo con el fin de identificar eventos que se conservan a distintas escalas temporales. Los patrones independientes identificados se pueden asociar a un parámetro estadístico (coeficiente/exponente de escalamiento) que generalmente está relacionado con los fenómenos independientes que componen al proceso estudiado. Particularmente, dicha información se obtiene de las fluctuaciones que expresan las series de tiempo (aparentemente aleatorias o también conocido como ruido de medición). Estas metodologías se han aplicado en diferentes disciplinas como economía, física, biología, química etc, donde se han identificado correlaciones entre índices multiescala y variables del proceso (Ramírez-Platas *et al.*, 2021; Zhang *et al.*, 2009; Álvarez-Ramírez *et al.*, 2011).

En el campo de la ingeniería de procesos, Sánchez-Ortiz *et al.* (2014) aplicaron la metodología de rango rescalado (R/S) en series de tiempo e imágenes obtenidas en el proceso de corrosión electroquímica del acero inoxidable AISI 304 (SS) expuesto a soluciones de ff. Ellos identificaron correlaciones entre los exponentes de escalamiento y el tipo de corrosión en los aceros expuestos a las soluciones corrosivas. Más adelante, Ramírez-Platas *et al.* (2020) propusieron el análisis fractal y multifractal del ruido electroquímico (EN) para la evaluación de la corrosión de dos tipos de acero en soluciones acuosas de monoetanolamina (MEA) con dióxido de carbono (CO₂) a diferentes temperaturas y concentración de MEA. Se aplicó el método de R/S a series de tiempo de potencial y corriente captadas durante el proceso de corrosión de ambos aceros. El análisis identificó tres regiones características que sugieren que las series de tiempo contienen información asociada a diferentes fenómenos físicos en el proceso de corrosión, que podrían estar relacionados con mecanismos de transporte y reacciones químicas. Los exponentes de Hurst calculados permitieron identificar correlaciones asociadas al tipo y grado de corrosión, así como información sobre los mecanismos de corrosión de ambos aceros evaluados. Los resultados mostraron que el proceso de corrosión no puede ser representado por una estructura monofractal, siendo el índice multifractal el que permite identificar mejores correlaciones del comportamiento oxidativo, ya que muestra claramente las condiciones en las que se promueve y/o inhibe la corrosión en ambos aceros.

Por otro lado, Campos-Domínguez *et al.* (2019) aplicaron la metodología de rango rescalado (R/S) en series de tiempo de temperatura adquiridas de un proceso de cristalización por enfriamiento en lotes. El método mostró que es posible identificar zonas relacionadas con los diferentes fenómenos que intervienen en el proceso. También a determinadas condiciones de enfriamiento, se pudo encontrar correlaciones entre los índices multiescala y el crecimiento de los cristales. Velázquez-Camilo *et al.* (2010) aplicaron el análisis DFA a series de tiempo e imágenes en la cristalización de caña de azúcar, encontrando patrones relacionados con fenómenos como el aumento de la ordenación en la fase cristalina, así como la posible aparición de mecanismos de nucleación secundaria y atrición. Los resultados muestran que los índices multiescala obtenidos a partir de las imágenes pueden utilizarse como indicadores para el seguimiento y evolución temporal de la distribución de tamaños y del crecimiento de los cristales. Sin embargo, el análisis multiescalar basado en imágenes

genera retrasos debido a su adquisición y procesamiento. A pesar de ello, el análisis multiescala puede ser una alternativa adecuada para el seguimiento indirecto de los procesos de cristalización. Más adelante, Moguel-Castañeda *et al.* (2021) a las series de tiempo de temperatura al proceso de cristalización de caña de azúcar por enfriamiento en diferentes condiciones de funcionamiento. Los resultados revelaron que las series de tiempo de temperatura presentan fluctuaciones de largo y corto alcance, demostrando que la cristalización del azúcar de caña tiene propiedades multifractales. La multifractalidad pudo relacionarse con la complejidad de la naturaleza del proceso, que puede atribuirse al número y tamaño de los cristales formados. Además, el análisis global mostró que esta complejidad está influenciada por el tamaño de la siembra y el perfil de enfriamiento. Asimismo, se observa una variación del espectro de singularidades con respecto al tiempo, lo que facilita la identificación de los fenómenos más importantes durante el proceso. Por último, el parámetro multifractal permitió visualizar una región de condiciones de operación en la que el proceso puede dar mejores rendimientos asociados a valores mayores (correlaciones positivas) y menores rendimientos en el caso de magnitudes menores (correlaciones negativas).

En equipos de cambio de presión, Niu *et al.* (2008) evaluaron un gasificador de flujo de dos quemadores, donde se midieron las señales de presión en dos posiciones axiales con sondas de acero inoxidable refrigeradas por agua. Aplicando el análisis DFA de las series de presión encontraron que las fluctuaciones reflejan características multifractales. La multifractalidad en la señal de presión en el gasificador es debido a que el proceso se realiza en etapas consecutivas tipo cascada. También Ghasemi *et al.* (2011), aplicaron la metodología DFA a series de tiempo de fluctuaciones de la presión en un lecho fluidizado. Se encontró que las fluctuaciones muestran un comportamiento multifractal, que también es frecuente en la turbulencia. La multifractalidad implica que la presión fluctúa de forma diferente en distintas escalas de tiempo.

En procesos de transformación química, Zenteno-Catemaxca *et al.* (2021) utilizaron la metodología R/S y DFA a series de tiempo de pH obtenidas en un reactor discontinuo para una reacción de saponificación evaluado a diferentes condiciones de temperatura y velocidad de agitación. Los resultados mostraron que el análisis multiescala permite identificar la influencia de los fenómenos de transporte de energía asociadas a las diferentes condiciones de operación. Así mismo, los exponentes multiescala calculados pueden

utilizarse como indicadores de la tasa de consumo del reactivo, independientemente de las condiciones evaluadas. Esto confirma que el análisis fractal multiescalar es capaz de identificar la interacción de los fenómenos intrínsecos en los procesos reactivos. Otras propuestas han considerado el uso de modelos matemáticos para el análisis de los procesos de transformación química. Por ejemplo, Ramírez-Castelan *et al.* (2016) utilizaron la metodología DFA para el estudio del problema de localización de sensores en configuraciones de control en cascada en reactores tubulares. La idea principal fue la introducción del análisis fractal de las series de tiempo de las temperaturas obtenidas de un reactor tubular forzado aleatorio con el fin de identificar las zonas más sensibles del reactor. El análisis fractal se realizó con dos métodos: el análisis de rango reescalado (R/S) y el análisis de fluctuación sin tendencia (DFA). Los resultados mostraron la eficacia del análisis fractal como alternativa a otros métodos más complicados para localizar sensores en reactores tubulares con fines de diseño de control.

En general, la metodología multiescala han mostrado un gran potencial como sistema de monitoreo indirecto en diversos casos de estudio, logrando identificar la presencia de fenómenos intrínsecos en los procesos. Entonces, puede ser usado como una herramienta adicional en el seguimiento de diferentes procesos. Sin embargo, a pesar de que se han mostrado el potencial de la metodología, su implementación en el área de ingeniería de procesos sigue siendo escasa para el monitoreo y diagnóstico de procesos. Por lo tanto, generar guías y criterios para su aplicación permitirá obtener mejores resultados para un diagnóstico y/o monitoreo sobre el desempeño de un proceso y se podrá realizar su implementación en tiempo real por parte de las industrias. En ese sentido, en este trabajo se propone la aplicación de diferentes metodologías multifractales en dos casos de estudio específicos que es el tostado de café y la digestión anaerobia de vinazas de tequila.

1.2 Planteamiento del problema

Debido a que la industria química requiere de productos de mayor calidad, económicos y de alto valor agregado, se han implementado técnicas novedosas de sistemas de monitoreo y sistemas de diagnóstico cada vez más sofisticadas, de alto costo, y que no siempre se encuentran al alcance de todas las industrias. Por otro lado, los métodos alternativos de monitoreo, por ejemplo, los métodos estadísticos, redes neuronales, aprendizaje profundo,

etc., requieren de una gran cantidad de datos que no siempre están accesibles cuando se requiere de tiempos de operación extensos.

En las últimas décadas se han desarrollado técnicas como las metodologías multiescala, fractal y multifractal, que son una alternativa más sencilla y fácil de llevar a cabo para el diagnóstico y el monitoreo de procesos para el análisis de variables que brindan información importante acerca de la dinámica y el comportamiento del proceso, mediante series de tiempo de fácil medición permitiendo dar un seguimiento continuo de lo que sucede durante el proceso en tiempo real y al mismo tiempo un posible diagnóstico. Pero a pesar de que se ha aplicado esta metodología en diferentes áreas y que se ha evaluado su potencial, a la fecha han sido poco abordadas en la ingeniería de procesos. Por lo que existe la necesidad de estandarizar y ampliar el conocimiento de este tipo de metodologías para su aplicación extensiva en el área de la ingeniería de procesos.

1.3 Justificación

A pesar de los avances que habido en cuanto a los sistemas de monitoreo en línea y diagnóstico implementados por parte de las industrias aún se presentan ciertos inconvenientes ya que muchas veces se necesita de equipos especializados, de alto costo o se necesita de muchos datos. Por lo que el desarrollo de la metodología multiescala puede ser una alternativa ante tales problemas, ya que es una metodología de fácil implementación y de bajo costo. El monitoreo en línea y diagnóstico a partir de mediciones de series de tiempo de variables secundarias de fácil medición puede contribuir a una mejor comprensión de la operación y control de los procesos. El desarrollo de este tipo de estudio también permitirá la obtención de información sobre los fenómenos que ocurren durante los procesos químicos y biológicos, y que pueden ayudar a comprender el proceso estudiado.

Además, la evaluación de las características multifractales puede proveer información que puede ayudar en la detección de situaciones no deseadas, toma inmediata de decisiones y el aprovechamiento adecuado de los recursos, lo cual se convertirá en beneficios económicos para las empresas productoras que trabajan a baja y media escala y podrán realizar el diagnóstico y el monitoreo indirecto de los procesos y posiblemente una futura implementación en tiempo real en sus industrias.

1.4 Hipótesis

A partir de datos de variables de fácil medición de series de tiempo de procesos químicos y biológicos complicados de diagnosticar y monitorear, se obtendrán parámetros estadísticos mediante el análisis fractal y multifractal que pueden ser correlacionados con fenómenos intrínsecos inmersos en dichos procesos, por lo que se podrá caracterizarlos y diagnosticarlos ayudando a entender más los procesos y que pueden ser usados como posibles sistemas de monitoreo indirecto.

1.5 Objetivos

Objetivo general:

- Evaluar la metodología fractal y multifractal a procesos químicos y biológicos aplicadas a series de tiempo.

Objetivos particulares:

- Aplicar el análisis multiescala a series de tiempo de los dos casos de estudio e identificar la presencia de patrones repetitivos.
- Identificar los posibles fenómenos adyacentes de los procesos a estudiar
- Realizar el diagnóstico y posible monitoreo indirecto mediante el contraste de los parámetros estadísticos frente a variables clave de procesos.

Capítulo 2

MARCO TEÓRICO

2.1 Técnicas de medición

El monitoreo sirve para dar seguimiento del estado de variables de un sistema, para observar una situación de cambios que se pueda producir con el tiempo, es decir, no interviene ninguna cuestión manual o automatizada sobre el control de las variables, es únicamente la visualización de los cambios en la instrumentación según las condiciones del sistema; este monitoreo puede realizarse con el personal y sus herramientas en mano, o bien con la intervención automática de los equipos de instrumentación integrados con dispositivos de transmisión a través de redes locales o remotas, que envíen información a un monitor o a un panel de administración de las variables. Para poder medir estas variables se han establecido técnicas de medición. En el cual se pueden clasificar como mediciones en línea y mediciones fuera de línea.

La medición es un proceso muy importante para cualquier industria y es fundamental para el desarrollo de la ciencia. Debido a ello y a lo largo de la historia, se han desarrollado diversos instrumentos y técnicas de medición para facilitar esta tarea. Por ejemplo, existen las mediciones fuera de línea (*off-line*), en donde las muestras químicas se toman del flujo del proceso (normalmente de forma manual) y se transfieren al laboratorio para su análisis mediante equipos analíticos. Este método se considera relativamente fiable para analizar sustancias químicas. Sin embargo, el proceso de transferencia de la muestra también introduce un retraso en las mediciones, durante el cual, los productos químicos pueden

degradarse (Wang y Chang, 2019). Sin embargo, este tipo de mediciones requieren de equipos caros o necesitan de calibración o mantenimiento adicional. Un ejemplo de mediciones de variables fuera de línea es la concentración, densidad y número de partículas.

Otro tipo de medición es la de medición en línea (*on-line*), y son instrumentos analíticos con sensores que se instalan en la planta, los cuales toman mediciones en puntos específicos del proceso en tiempo real. Algunos de estos instrumentos pueden ser de fácil adquisición y baratos dependiendo de la marca. Pero no todas las variables de interés para el ingeniero químico son posibles de medir en tiempo real. Por otro lado, debido a la limitación de la locación del instrumento, donde existe una alta temperatura o presión, el medidor en línea puede no ser el instrumento con la mayor exactitud y precisión (Wang y Chang, 2019). Unas de las variables más comunes que se miden en línea es la temperatura, presión, pH, flujo, etc. Debido a estas limitaciones, se han desarrollado técnicas de monitoreo indirecto en procesos químicos.

2.2 Monitoreo indirecto de procesos

En la literatura, se pueden encontrar tres estrategias principales para el monitoreo indirecto de los procesos químicos:

- Correlación con mediciones disponibles: consiste en encontrar una correlación directa de la variable a evaluar con variables en línea rápidas y medibles. Sin embargo, no siempre es posible establecer correlaciones con mediciones de fácil adquisición, sobre todo en aquellos procesos en los que se producen múltiples reacciones químicas que interactúan con los fenómenos de transporte (Zenteno-Catmaxca *et al.*, 2021).
- Técnicas basadas en modelos: utiliza un modelo matemático que representa el sistema, es decir, se hacen descripciones matemáticas precisas de los sistemas utilizando leyes físicas o fenomenológicas. En estos enfoques, se pueden distinguir los llamados sensores de *software*. Los sensores de software son modelos matemáticos que predicen las variables de calidad del producto que se miden con poca frecuencia utilizando entradas muestreadas con frecuencia, como la temperatura, la presión y el caudal. Este enfoque se ha aplicado ampliamente en las últimas tres décadas (Kadlec *et al.*, 2009). Las desventajas que presentan estos

modelos de procesos químicos es que suelen ser difíciles de obtener estos modelos y exigen amplios conocimientos y esfuerzos asociados a la derivación del modelo, así como a la gestión de las incertidumbres del mismo.

- Técnicas basadas en datos: realizan el diagnóstico y la supervisión del proceso mediante el análisis de los datos recogidos históricamente. Por lo que se prefieren los enfoques basados en datos cuando no se pueden obtener modelos del sistema y se dispone de datos de seguimiento suficientemente accesibles y de bajo costo (Zenteno-Catemaxca *et al.*, 2021). Existe una rama de la técnica basada en datos para el monitoreo de procesos que se puede dividir en métodos estadísticos, inteligencia artificial (AI, *Artificial intelligence*) y métodos híbridos. Otro de los enfoques basados en datos que ha sido ampliamente aceptado para el monitoreo y el diagnóstico de los procesos químicos es el de las metodologías multiescala.

2.2.1 Enfoques basados en métodos estadísticos

Los métodos estadísticos incluyen el análisis de componentes principales (PCA, *principal component analysis*), los mínimos cuadrados (PLS, *partial least squares*), y el control de procesos estadísticos multivariantes (MSPM, *multivariate statistical process monitoring*). El análisis de componentes principales (PCA), en estadística, es una técnica utilizada para describir un conjunto de datos en términos de nuevas variables («componentes») no correlacionadas. Los componentes se ordenan por la cantidad de varianza original que describen, por lo que la técnica es útil para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos. Técnicamente, el PCA busca la proyección según la cual los datos queden mejor representados en términos de mínimos cuadrados. Esta convierte un conjunto de observaciones de variables posiblemente correlacionadas en un conjunto de valores de variables sin correlación lineal llamadas componentes principales. Rahmer *et al.* (2022) propusieron el análisis y monitoreo de un proceso químico sostenido en los principios teóricos de un método factorial catalogado como análisis de componentes principales (PCA), cuyo objetivo final es representar las variables originales del sistema.

En cuanto a los mínimos cuadrados parciales (PLS) son un enfoque eficaz para el monitoreo estadístico multivariante de los procesos. Aunque funciona en muchas aplicaciones industriales, Zhou *et al.* (2010) revelaron que algunas propiedades del algoritmo PLS pueden dificultar la eficiencia general del esquema de monitoreo de

procesos, por lo que proponen un enfoque modificado del método existente del PLS, después se verifica la eficiencia del enfoque (Yin *et al.*, 2011).

El monitoreo estadístico multivariante de procesos (MSPM) es un enfoque basado en datos que se usa para monitorizar procesos complejos con estructuras de datos de alta dimensión, como los procesos biofarmacéuticos y químicos. Sin embargo, los índices convencionales de detección de fallos utilizados en el monitoreo estadístico de procesos no son sensibles a los fallos incipientes de pequeña magnitud. En 2022, Zhijiang *et al.* propusieron un nuevo algoritmo de monitoreo de procesos estadísticos multivariantes basado en la ortogonalización del subespacio, que supera las deficiencias de los mínimos cuadrados parciales y del análisis de correlación canónica, como la fuga de información relacionada con los KPI, la identificación del modelo, la selección de componentes y los problemas de hipótesis de procesos.

2.2.2 Enfoques basados en inteligencia artificial

Los enfoques basados en Inteligencia artificial AI incluyen la red neuronal artificial (ANN, *artificial neural network*), vectores de soporte regresión (SVR, *support vector regression*) y la lógica difusa (FL, *fuzzy logic*) (Quiñones-Grueiro *et al.*, 2019) y pueden analizar las series de tiempo de datos con un comportamiento dinámico no lineal y complejo. Las redes neuronales artificiales (ANNs), habitualmente denominadas simplemente redes neuronales (NNs) o, más sencillamente aún, redes neurales, son sistemas informáticos inspirados en las redes neuronales biológicas que constituyen el cerebro. Es un modelo computacional que consiste en un conjunto de unidades, llamadas neuronas artificiales, conectadas entre sí para transmitirse señales. La información de entrada atraviesa la red neuronal (donde se somete a diversas operaciones) produciendo unos valores de salida. Cada neurona está conectada con otras a través de unos enlaces. En estos enlaces el valor de salida de la neurona anterior es multiplicado por un valor de peso. Estos pesos en los enlaces pueden incrementar o inhibir el estado de activación de las neuronas adyacentes. Del mismo modo, a la salida de la neurona, puede existir una función limitadora o umbral, que modifica el valor resultado o impone un límite que no se debe sobrepasar antes de propagarse a otra neurona.

Las redes neuronales han sido una herramienta popular para el modelado y la clasificación de patrones para el monitoreo de los sistemas de procesos. Sin embargo, debido

al costo computacional causado por la alta dimensionalidad y las condiciones de funcionamiento frecuentemente cambiantes en los procesos por lotes, sus aplicaciones han sido difíciles. Zhou (2004) en sus estudios aborda este problema empleando un paso de preprocesamiento de datos basado en polinomios que reduce en gran medida la dimensionalidad del modelo de proceso de la red neuronal. Una crítica común de las redes neuronales, en particular en la robótica, es que requieren una gran diversidad de entrenamiento para el funcionamiento del mundo real.

El algoritmo de vectores de soporte regresión SVR produce un modelo que depende sólo de un subconjunto de ejemplos de entrenamiento, dado que la función empleada para construir el mismo no se preocupa por los puntos de entrenamiento que se encuentran más allá del margen. Mientras que en la regresión lineal se busca minimizar una función de error, generalmente el error cuadrático, en todos los puntos del conjunto de entrenamiento, en la SVR se define una zona en torno al hiperplano donde se ignora los errores. Shokry *et al.* (2015) investigaron el modelado basado en datos de procesos complejos no lineales, para los que no se dispone de un modelo de primer principio útil para el monitoreo y el control del proceso. Se utilizan tres técnicas diferentes: Kriging ordinario, redes neuronales artificiales y vectores de soporte regresión. Primero se utilizó un caso sencillo para ilustrar el problema, evaluar y validar el enfoque de modelización y comparar las técnicas de modelización. La metodología se aplicó a una planta piloto de foto-Fenton para modelar y predecir el progreso de la reacción. Los resultados mostraron una precisión prometedora incluso cuando se dispone de pocos puntos de entrenamiento. Alexandridis *et al.* (2002) propusieron una nueva metodología sistemática que combinaba redes neuronales, lógica difusa para modelar un proceso dinámico no lineal. La metodología se probó en la identificación de ciertas regiones operativas en un CSTR, que presentaba varios tipos de comportamiento no lineal, como ciclos límite y múltiples estados estables.

De igual manera se han aplicado métodos híbridos, que se construyen al combinar diferentes métodos, cuando se tienen datos más complejos para la supervisión, diagnóstico y la previsión de procesos (Russell *et al.*, 2000; Quin *et al.*, 2012). Las principales desventajas de estos enfoques basados en datos son el uso de conjuntos de datos multivariados, la falta de interpretabilidad fenomenológica, el esfuerzo significativo para su desarrollo (en términos de reducción de la dimensión de los datos, pasos de entrenamiento y arquitectura de selección del modelo) y el elevado costo computacional (Altan *et al.*, 2019). Debido a estas desventajas

se han desarrollado la metodología multiescala que se basa en los conceptos de fractal y multifractales, que se describen a continuación:

2.3 Concepto de fractal

Un fractal es un objeto geométrico cuya estructura básica, fragmentada o aparentemente irregular, se repite a diferentes escalas. Como ya se mencionó anteriormente, el término fue propuesto por el matemático Benoît Mandelbrot en 1975 y deriva del latín *fractus*, que significa quebrado o fracturado. Muchas estructuras naturales son de tipo fractal. En cuanto al término de geometría fractal Benoit define a un fractal como un conjunto de estructuras irregulares y complejas descritas a través de algoritmos matemáticos y computacionales; los cuales reemplazan a los puntos, rectas, circunferencias y demás figuras provenientes de la matemática tradicional. Estos objetos tienen como características fundamentales las propiedades de autosimilitud y la de convivir con extraños paisajes formados por dimensiones fraccionarias (Mandelbrot, 1975).

A un conjunto fractal se puede definir como un ente matemático, cuyas características pueden definirse rigurosamente (como figuras creadas), mientras que el fractal natural se representa a través de objetos naturales que tienen ciertas regularidades (por ejemplo, pueden ser nubes, estructura de árboles, costas, etc.). La propiedad matemática clave de un objeto genuinamente fractal es que su dimensión métrica fractal es un número racional mayor que su dimensión topológica (Mandelbrot, 1997).

2.3.1 Características de los objetos fractales

La naturaleza tiene una estructura fractal. Muchas estructuras biológicas son tan irregulares que no se pueden modelar por los objetos Euclidianos. Esto es, el círculo, rectángulo, cuadrado, triángulo, etcétera, no son adecuados para representarlos. Todos los fractales poseen esta propiedad interna de parecerse a sí mismos a diferentes magnificaciones. Esta propiedad recibe el nombre de autosimilitud. Dado que un fractal está compuesto de estructuras similares cada vez más finas, su longitud depende de la magnificación y resolución del instrumento de medición. Así pues, conforme aumente la resolución del instrumento de medida, va creciendo también la longitud de un fractal. Los fractales pueden presentar los siguientes tipos de autosimilitud:

- **Autosimilitud exacta:** Este es el tipo más restrictivo de autosimilitud: exige que el fractal parezca idéntico a diferentes escalas, como el copo de Koch.
- **Cuasiautosimilitud:** Exige que el fractal parezca aproximadamente idéntico a diferentes escalas. Los fractales de este tipo contienen copias menores y distorsionadas de sí mismos.
- **Autosimilitud estadística:** Es el tipo más débil de autosimilitud: se exige que el fractal tenga medidas numéricas o estadísticas que se preserven con el cambio de escala. Los fractales aleatorios son ejemplos de fractales de este tipo. Es decir, se repite un patrón de forma estocástica, de modo que las medidas numéricas o estadísticas se conservan en todas las escalas.
- **Autosimilaridad cualitativa:** como en una serie de tiempo. La herramienta teórica clave que se utiliza para evaluar la dinámica de un sistema es la noción de una serie de tiempo. Las series de tiempo permiten elaborar y verificar la evolución de modelos de sistemas complejos macroscópicos. La relación que se espera entre los valores de la serie de tiempo t y los valores en el tiempo $t + \tau$ es una correlación de las series. Los objetivos del análisis pueden ser diversos, destacando la predicción, control, simulación de procesos o la generación de nuevas teorías físicas o biológicas. Diversos métodos pueden ser utilizados para el análisis de series de tiempo como el cálculo de Rango reescalado.
- **Escala multifractal:** caracterizada por más de una dimensión fractal o regla de escala. Su análisis se usa para caracterizar sistemas dinámicos, procesos o construcciones geométricas, asignándoles una función llamada espectro multifractal o espectro de singularidad. De acuerdo con el análisis multifractal de ciertos sistemas o procesos multifractales, las estructuras se caracterizan a través de una gama de dimensiones fractales diferentes asociadas a una jerarquía de subconjuntos, cada uno de ellos de carácter fractal.

2.4 Multifractalidad

Un objeto multifractal tiene más de una tasa de escalamiento en el mismo objeto, es decir, unas partes del objeto se reducen (o aumentan) rápidamente y otras de forma más lenta (o rápida). La multifractalidad tiene una construcción más compleja que los ejemplos anteriores,

ya que, si un monofractal está completamente descrito gracias a su dimensión fractal, es decir, descrito por un solo exponente, en los multifractales es necesario especificar un espectro de exponentes para su completa caracterización, dado que tienen diferentes dimensiones fractales (Escudero, 2021). El análisis multifractal permite caracterizaciones más precisas de un proceso que involucra fractales, ya que es un hecho conocido que la dimensión fractal por sí misma no caracteriza una estructura fractal por completo, en el sentido de que dos conjuntos de la misma dimensión fractal pueden no ser (bi-Lipschitz) equivalentes.

Los conjuntos fractales son aquellos conjuntos formados por otros subconjuntos, a su vez igualmente fractales entrelazados, pero con diferente dimensión fractal. En ese caso, se necesita realizar un análisis multifractal de la serie de tiempo para tener una descripción completa de esta, obteniendo un espectro multifractal que revelará la existencia de monofractalidad o multifractalidad en la serie. La característica distintiva del modelo multifractal es el multiescalamiento de los retornos de los momentos de una distribución. Las leyes de potencia son interesantes por su invariancia de escala. En un proceso lineal, la función escalante se determina por un solo coeficiente (su pendiente), entonces se llama monofractal. Los procesos multifractales permiten funciones generales más cóncavas (Rendón, 2014).

Las series de tiempo multifractales también pueden llegar a presentar diferentes estructuras autosemejantes a intervalos temporales locales diferentes, y vienen descritas mediante un espectro de exponentes de escala. En general, no existe un proceso o fenómeno en el universo que exhiba la misma dimensión fractal que no es constante como en la ecuación 1, sino que, como ya se mencionó tiene un amplio rango de valores, que, en el límite, dan como resultado un espectro de dimensiones $D(\alpha)$, donde α se denomina exponente de singularidad o de Hölder (Falconer, 1997), tal que:

$$N(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-D(\alpha)} \quad (2.1)$$

En general, se pueden distinguir dos tipos diferentes de multifractalidad en las series de tiempo, i) multifractalidad debida a una función de densidad de probabilidad amplia para los valores de la serie temporal. En este caso, la multifractalidad no puede eliminarse cambiando las series, y ii) multifractalidad debida a diferentes correlaciones de largo alcance

(temporal) de las fluctuaciones pequeñas y grandes. En este caso, la función de densidad de probabilidad de los valores puede ser una distribución regular con momentos finitos, por ejemplo, una distribución gaussiana. La serie cambiada correspondiente mostrará un escalamiento no multifractal, ya que todas las correlaciones de largo alcance son destruidas por el procedimiento cambiado. Si ambos tipos de multifractalidad están presentes, la serie cambiada mostrará una multifractalidad más débil que la serie original (Kantelhard, *et al.* 2002).

Capítulo 3

METODOLOGÍA

En este capítulo, se presentan la metodología multiescala, fractal y multifractal, para series de tiempo que se aplicarán en los casos de estudio abordados en este trabajo.

3.1 Análisis de rango reescalado (R/S)

El análisis R/S fue desarrollado por el hidrólogo Edwin Hurst (1951) para distinguir las series de tiempo aleatorias de las correlacionadas a partir de las fluctuaciones de las series de tiempo, y posteriormente, Mandelbrot y Wallis, (1969) la ajustaron y validaron la metodología. El objetivo de este método es proporcionar una evaluación de cómo cambia la variabilidad aparente de una serie con la longitud del periodo de tiempo considerado, además es de fácil implementación. El rango reescalado de las series de tiempo se calcula dividiendo el rango de su serie de desviación acumulada ajustada a la media entre la desviación estándar de la propia serie de tiempo. La secuencia de pasos para calcular el estadístico R/S son las siguientes:

1. Tomando una serie de datos específica de tamaño N para una secuencia dada por $X_N = (x_1)$, se considera una subsecuencia $Y_{N_s} = y_i \subset x_i$ de tamaño N_s donde $N_s < N$.
2. Para cada submuestra se calcula la media como

$$\bar{y}_{N_s} = \frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^{N_s} y_k \quad (3.1)$$

3. Y se obtiene la subsecuencia integrada a partir de las sumas parciales:

$$z_i = \frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^i (y_k - \bar{y}_{N_s}) \quad (3.2)$$

4. Se estima el rango de variación:

$$R(N_s) = \max_{1 \leq i \leq N_s} \{Z_i\} - \min_{1 \leq i \leq N_s} \{Z_i\} \quad (3.3)$$

5. Para una escala dada N_s , la variación de rango reescalada viene dada por:

$$(R/S)_2 = R \left(\frac{N_s}{\sigma(N_s)} \right) \quad (3.4)$$

donde la desviación estándar se describe como:

$$\sigma(N_s) = \left[\frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^i (y_k - \bar{y}N_s)^2 \right]^{1/2} \quad (3.5)$$

Lo descrito anteriormente se resume en la ecuación siguiente:

$$(R/S)_2 = \frac{1}{\sigma(N_s)} \left[\max_{1 \leq i \leq N_s} \sum_{k=1}^i (y_k - \bar{y}N_s) - \min_{1 \leq i \leq N_s} \sum_{k=1}^i (y_k - \bar{y}N_s) \right] \quad (3.6)$$

Si el proceso estocástico asociado a la secuencia X_N exhibe un comportamiento escalar a lo largo de un determinado dominio de escala $N_s \in (N_{s_{min}}, N_{s_{max}})$, la estadística R/S sigue una ley de potencia de la forma:

$$(R/S)_2 = \gamma N_s^H \quad (3.7)$$

donde γ es una constante y H es el llamado exponente de escala de Hurst, que es una medida de calibración fractal de las autocorrelaciones de la secuencia. El exponente de Hurst se estima a partir de un gráfico $\log - \log (R/S)_2$ contra $N_s \in (N_{s_{min}}, N_{s_{max}})$, que da una línea recta con pendiente H . Si la serie de tiempo es generada por un paseo aleatorio (o un proceso de movimiento browniano) tiene el valor de $H = 0.5$. Muchos fenómenos físicos que tienen una serie de tiempo larga apta para el análisis presentan un exponente de Hurst superior a $H > 0.5$. Para valores de $H > 0.5$ la serie de datos tiene autocorrelaciones, por lo tanto, será persistente y presentará una memoria de largo plazo en todas las escalas de tiempo. Por otro lado, si $H < 0.5$ la serie de tiempo será antipersistente, esto indica un comportamiento oscilatorio. El estudio anterior proporciona información valiosa sobre el fenómeno, sin embargo, este procedimiento analiza la serie de manera global y no contempla los cambios del exponente en escalas de tiempo específicas.

3.2 Análisis de fluctuaciones sin tendencia (DFA)

El análisis DFA es un método para determinar la autoafinidad estadística de una señal. Es útil para analizar series de tiempo que parecen ser procesos de larga memoria. El exponente

obtenido es similar al exponente de Hurst, con la diferencia de que el DFA también puede aplicarse a señales cuyos estadísticos subyacentes (como la media y la varianza) o la dinámica son no estacionarios (cambian con el tiempo). Está relacionado con las medidas basadas en técnicas espectrales como la autocorrelación y la transformada de Fourier.

Peng *et al.* (1994) introdujeron el y representa una extensión del análisis de fluctuación (FA) que se ve afectado por las no estacionariedades. El análisis DFA se ha convertido en una técnica muy utilizada para determinar las propiedades de escala monofractal y permite detectar correlaciones de largo alcance contenidas en series de tiempo aparentemente no estacionarias; así mismo, el método a partir de un análisis de invariancia de escala es capaz de eliminar tendencias de diferentes ordenes que se puedan presentar en la señal analizada y que no están relacionadas con sus propiedades de correlación (Ignaccolo, *et al.*, 2010).

Este método es una modificación del FA (análisis de fluctuación), ya que, en ese caso, se elimina la tendencia de la serie en cada ventana en el tiempo. Es un método extensamente utilizado en el análisis de series de tiempo que permite caracterizar las propiedades multiescala de las fluctuaciones después de eliminar las no estacionalidades. Es decir, se elimina una tendencia polinómica de orden predefinido y se evalúan las fluctuaciones residuales en ventanas de tamaño variable. El resultado es un método estadísticamente robusto que proporciona las características multiescala de las fluctuaciones de la señal o píxeles de imágenes en los rangos de gran escala. El método DFA también da como resultado un exponente que refleja las propiedades de escalado (es decir, autosimilitud) y las correlaciones de largo alcance de la serie analizada, en el caso de que la serie posea el escalado correspondiente. Por lo tanto, el DFA es una técnica de análisis de fluctuaciones (variaciones) que permite calcular de forma directa el exponente de la señal temporal a estudiar (Martín, 2020). Para poder realizar el análisis se siguen los siguientes pasos:

1. Dada una serie de datos $y(i)$ para $i = 1, 2, \dots, N$, donde N es el número total de datos de la serie, se calcula la media

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y(j) \quad (3.8)$$

2. La serie integrada $x(i)$ para $i = 1, 2, \dots, N$, se obtiene como

$$x(i) = \sum_{j=1}^i [y(j) - \bar{y}] \quad (3.9)$$

3. La sucesión integrada x_i se divide en ventanas de igual tamaño s . Usando una interpolación de grado m en cada ventana denotada por $x_{m,i}(s)$ donde la curva de interpolación representa la tendencia de cada ventana.

4. Posteriormente, se calcula la sucesión de fluctuaciones

$$z_i(s) = x_i - x_{m,i}(s) \quad (3.10)$$

5. La función de fluctuación $F(s)$ se calcula como la desviación estándar de $z_i(s)$, tal que

$$F(s) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i(s)^2} \quad (3.11)$$

6. La misma secuencia se repite para un amplio rango de segmentos de longitud s . La función de fluctuación $F(s)$ sigue una ley de potencia de forma $F(s) = as^\alpha$, donde α es conocido como exponente de escalamiento y se interpreta como un parámetro de autoafinidad que representa las propiedades de correlación de largo alcance de la secuencia $y(i)$.

El exponente de escalamiento se obtiene a partir de un gráfico $\log(s)$ vs $\log(F(s))$ donde α es calculado como la pendiente $\log(F(s)) = \alpha \log(s) + \log(a)$ donde $\log(a)$ representa el punto de intersección. Si la serie de datos es un proceso completamente aleatorio, la pendiente será una línea recta con pendiente $\alpha = 0.5$. En cambio, si $\alpha > 0.5$ la serie de datos es persistente lo cual garantiza una memoria a largo plazo e implica que si la señal tiene un incremento positivo esto podrá seguir ocurriendo en el futuro y viceversa. Por el contrario, si el valor de $\alpha < 0.5$ las autocorrelaciones en la señal son antipersistentes, es decir que a un cambio positivo es probable que sea seguido de un cambio negativo y viceversa. Valores de $\alpha = 1$ y $\alpha = 1.5$ son correspondientes al denominado ruido rosa ($1/f$) y al movimiento Browniano respectivamente.

3.3 Multifractalidad

3.3.1 Análisis multifractal a partir de R/S

La multifractalidad es una herramienta útil para explicar muchos patrones observados en la naturaleza. En particular, el análisis multifractal permite investigar una mezcla de dimensiones fractales que caracterizan la complejidad inherente a algunas series de datos. Las ideas aportadas por Barabási y Vicsek, (1991) y Katsuragi y Honjo, (1999), el análisis

multifractal puede realizarse mediante el cálculo del rango reescalado por medio de la norma q de σ_s , es decir,

$$\sigma_{N_s, q} = \left[\frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^{N_s} (y_k - \bar{y}_{N_s})^q \right]^{\frac{1}{q}} \quad (3.12)$$

En este caso, la estadística R/S viene dada por:

$$(R/S)_q = \frac{\sigma(N_s)}{\sigma(N_{s,q})} (R/S)_2 \quad (3.13)$$

y se espera que el rango medio siga el comportamiento de escala:

$$(R/S)_q = a s^{Hq} \quad (3.14)$$

donde Hq es el exponente de Hurst q -ésimo. Los valores grandes de q magnifican las grandes fluctuaciones $y_k - \bar{y}_{N_s}$ de la media \bar{y}_{N_s} . Por otro lado, $q \rightarrow 0$ permiten una ponderación equilibrada de las desviaciones grandes y pequeñas de la media. Si Hq es constante para todo $q \in R$, la serie de tiempo es monofractal, lo que significa que la secuencia correspondiente fue producida por un solo fractal generador. De lo contrario, se dice que la secuencia es multifractal si tiene más de un generador fractal involucrado y quizás no linealidad. Las secuencias multifractales son más complejas que las monofractales, ya que la secuencia subyacente es producida por muchos generadores fractales.

Una dependencia no trivial de Hq en q indica que el proceso es multifractal. En general, la multifractalidad también indica la naturaleza no lineal de los mecanismos que generaron la serie. Para describir el grado de multifractalidad, se define un índice de multifractalidad como:

$$I_M = \max(H(q)) - \min(H(q)) \quad (3.15)$$

donde $H(q)$ es el valor H en función de q .

3.3.2 Análisis multifractal a partir de DFA

El método es una generalización del método DFA a series multifractales, que fue utilizado inicialmente por Kantelhardt *et al.* (2002), en el cual cambia los momentos de las fluctuaciones de la serie. Para poder aplicar la metodología MF-DFA partimos de la función de fluctuación (Ecu. 3.11) donde se calcula la media de todos los segmentos generados v para

obtener la función de fluctuación de orden (q -ésimo), donde q puede tomar cualquier valor excepto cero como:

$$F_q(s) = \left\{ \frac{1}{N_s} \sum_{v=1}^{N_s} [F^2(s, v)]^{\frac{q}{2}} \right\}^{\frac{1}{q}} \quad (3.16)$$

Si existe una indeterminación generada a $q = 0$ no se puede utilizar la Ecu. (3.17) directamente. Por lo tanto, se utiliza una media logarítmica, definida como:

$$F_0(s) = \exp \left\{ \frac{1}{2N_s} \sum_{v=1}^{N_s} \ln[F(s, v)] \right\} \quad (3.17)$$

El comportamiento de escala de la función de fluctuación se determina utilizando un gráfico logarítmico de $F_q(s)$ vs. s para cada valor de q , donde se obtiene un comportamiento de ley de potencia que varía según el orden de q , como se indica a continuación $F_q(s) \sim s^{H(q)}$ (Kantelhardt, 2002). Las Ecu. (3.16) y (3.17) se evalúan dentro de un rango de q , utilizando una relación entre la pendiente de la regresión lineal H (exponente de Hurst) y q que se define

$$\tau(q) = qH(q) - 1 \quad (3.18)$$

donde $\tau(q)$ es el exponente de escala multifractal. Para una señal monofractal, $\tau(q)$ es una línea recta de valores constantes. En cambio, para una señal multifractal, es una función no lineal. Otro enfoque para evaluar las características multifractales en las series de tiempo es a través de un espectro de singularidad $f(\alpha)$, que se puede obtener la transformada de Legendre según:

$$\alpha = \tau'(q) \quad (3.19)$$

$$f(\alpha) = q\alpha - \tau(q) \quad (3.20)$$

donde α es el exponente de singularidad de orden q o exponente de Hölder. $f(\alpha)$ representa la dimensión multifractal de la serie tiempo. Además, es posible relacionar α y $f(\alpha)$ con el exponente H como:

$$\alpha = H(q) + qH'(q) \quad (3.21)$$

$$f(\alpha) = q(\alpha - H(q)) + 1 \quad (3.22)$$

3.3.3 Definición de parámetros multifractales

En la Figura 3.1, se presenta un diagrama representativo del espectro de singularidad, en el que se pueden identificar diferentes parámetros multifractales.

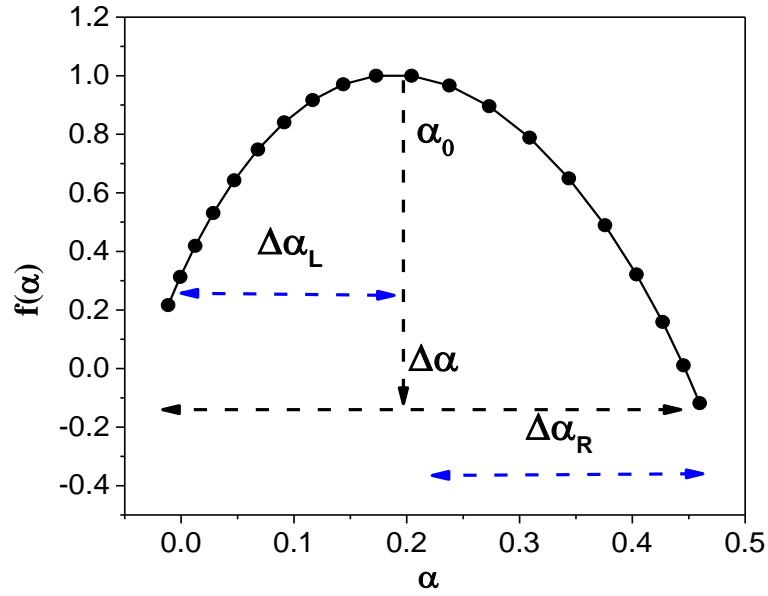


Figura 3.1 Esquema del espectro de singularidad con la definición de los parámetros multifractales.

Los parámetros multifractales son los siguientes:

- ❖ Espectro de singularidad: si el espectro de singularidad tiene una parábola invertida, el sistema tiene características multifractales: $\Delta\alpha$, A_α , y α_0 .
- ❖ Anchura del espectro de singularidad $\Delta\alpha = \alpha_{max} - \alpha_{min}$: el grado de complejidad del sistema se define por la longitud de la apertura del espectro de singularidad. Cuanto mayor sea la anchura de la parábola, mayor será la riqueza y el grado de multifractalidad de la serie de tiempo (Philippopoulos, 2019). Donde α_{max} y α_{min} corresponden a los extremos opuestos de los valores de α para diferentes órdenes de q . Para las señales monofractales, el espectro de singularidad converge a un único punto. Por tanto, el valor $\Delta\alpha$ se utiliza como parámetro para medir la complejidad de cada proceso, asociada al predominio de los fenómenos físicos presentes en las diferentes condiciones de funcionamiento (Lin, *et al.*, 2013).
- ❖ α_0 : es el mayor valor de los exponentes de Hölder en el espectro de singularidad y representa la dimensión más frecuente. Por lo tanto, es el comportamiento de escala dominante (Bishop, *et al.*, 2012).
- ❖ Coeficiente de asimetría A_α : la asimetría del espectro multifractal puede cuantificarse mediante $A_\alpha = \frac{\Delta\alpha_L - \Delta\alpha_R}{\Delta\alpha_L + \Delta\alpha_R}$,

donde $\alpha_L = \alpha_0 - \alpha_{min}$ y $\alpha_R = \alpha_{max} - \alpha_0$ son la longitud del lado izquierdo y derecho del espectro de la singularidad, respectivamente. Estas longitudes se obtienen utilizando como punto de referencia el valor que corresponde al valor máximo de $f(\alpha)$. Los valores de la asimetría se clasifican de tres maneras. La primera es cuando la parábola es simétrica $A_\alpha = 0$. Cuando $A_\alpha > 0$ el lado izquierdo de la parábola es más largo con respecto al lado derecho, entonces la multifractalidad se desarrolla por las fluctuaciones o correlaciones de largo alcance en la serie de tiempo. En cambio, $A_\alpha < 0$ la longitud de la punta derecha del espectro multifractal es mayor porque la organización temporal de la serie de tiempo se basa en correlaciones de corto alcance que son la fuente principal de ésta.

Capítulo 4

TOSTADO DE CAFÉ

En este capítulo se presentan el análisis multiescala aplicado a series de tiempo del proceso de tostado de café. Se describe como se obtuvieron los datos, la aplicación de los métodos multiescala y la discusión de resultados.

4.1 Tostado de café

El tostado de café es un proceso complejo en el que se producen múltiples reacciones químicas, como pirólisis, hidrólisis, polimerización, etc., lo que provoca cambios físicos en el grano de café como cambio de color y textura, aumento de volumen (Hernández *et al.*, 2008). Tradicionalmente, el maestro tostador es el encargado de definir el nivel de tostado a partir de criterios empíricos observados en los cambios físicos.

A diferencia de los cambios físicos, las reacciones químicas durante el tostado son mucho más difícil que identificar. Ambos cambio, físicos y químicos, permiten el monitoreo, el control y el diagnóstico del proceso de tostado es de gran importancia, ya que están directamente relacionados con la calidad del café. Sin embargo, el control del proceso de tostado actualmente se basa en la experiencia del maestro tostador, que utiliza indicadores subjetivos. Mientras que el monitoreo de la reacción se puede realizar a partir de equipo especializado como cromatografía de gases (GC) o cromatografía líquida de alto rendimiento (HPLC). Esto ha motivado el desarrollo de nuevos estudios y tecnologías que permitan mejorar el monitoreo en tiempo real y estandarizar el proceso con el propósito de mejorar la calidad del tostado de café y no tener variaciones entre lotes.

Desde el enfoque del análisis multiescala. Gabriel-Guzmán, *et al.*, (2017) propusieron el análisis R/S a imágenes de la superficie del grano de café que fueron tomadas durante el proceso de tostado en un lecho fluidizado. El estudio consideró diferentes cosechas de granos de café (2012-2013, 2013- 2014 y 2014-2015), donde se identificaron propiedades fractales en las imágenes a diferentes escalas espaciales. Específicamente, el exponente de Hurst mostró un comportamiento dinámico que corresponde a los cambios físicos del grano, por lo que sugieren que puede utilizarse para el monitoreo del grado del tostado de café. Así mismo, un análisis multifractal mostró que el exponente de Hurst exhibe variaciones no lineales a los cambios en la norma q , lo cual es indicativo de un comportamiento multifractal. Más adelante, Casillas (2017) analizó imágenes del tostado de café obtenidas de un tostador de tambor, encontrando que es posible identificar correlaciones útiles para el seguimiento del grado de tostado a través de los índices fractales. Recientemente, Hernández-Aguirre *et al.*, (2018), implementó el análisis de imágenes de la superficie del café usando la transformada de Fourier 2D, identificando una correlación directa entre el grado de tostado y exponentes de escalamiento resultantes del análisis de imágenes.

Los estudios reportados muestran que el análisis multiescala ofrece información sobre los cambios que sufre el grano de café en el proceso de tostado. A pesar de que los resultados son prometedores para el seguimiento del tostado de café, la recolección y procesamiento de las imágenes requiere de un tiempo de espera que limita el control del proceso en tiempo real. Para extender los resultados es posible evaluar series de tiempo registradas en el proceso de tostado en tiempo real. Variables como temperatura y/o presión son fáciles de medir y es posible obtenerlas al mismo tiempo que el proceso se realiza. Así mismo, el uso de diferentes metodologías multiescala permitiría identificar diferentes tipos de patrones que pueden ser correlacionados con los cambios físicos y químicos del proceso. En ese sentido, en este estudio se analizan series de tiempo de temperatura recolectadas en un tostador de tambor en tres diferentes posiciones del equipo. Se aplicaron métodos de análisis fractal y multifractal para caracterizar las series de tiempo y relacionarlas con el proceso de tostado.

4.2 Series de tiempo

Las mediciones de temperatura se realizaron usando tres sensores de temperatura (termopares tipo k) colocados en la cámara de tostado, en la tolva y en la salida del aire del tostador. El equipo de adquisición de datos se muestra en la Figura 4.1. Los sensores están conectados a un sistema CRIO-9075 de National Instruments que transmiten las señales obtenidas a una tarjeta de adquisición de datos NI9211 que se conectan a una computadora. Para la lectura de datos y almacenamiento fue de 10 datos de temperatura por segundo.

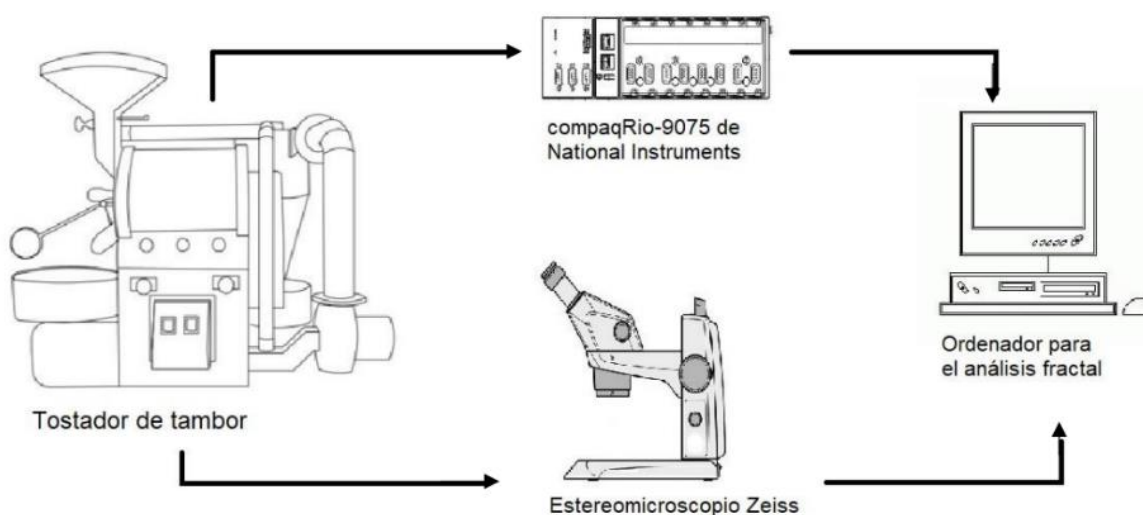


Figura 4. 1 Equipo de adquisición de datos del tostador de café

El café verde analizado es proveniente de Coatepec Veracruz. Para evaluar la capacidad de identificación de patrones del análisis multiescala, la operación del tostador se realizó siguiendo un perfil de temperatura llevando el grano de café de verde a tostado oscuro en 10, 20 y 60 minutos. Las corridas experimentales consideradas se describen a continuación:

- Corrida de 10 minutos, se hizo un precalentamiento del tostador a 230 °C, a esa temperatura se incorporó medio kg de café verde, tomando la primera muestra de 7 granos, antes de meter el grano al equipo (muestra 1), después pasando 1.5 min se tomó la segunda muestra, y así sucesivamente hasta llegar a un tostado oscuro.

- Corrida de 20 minutos, se estableció un precalentamiento del equipo de 190°C , y a esa temperatura se hizo la carga de medio kg de café verde, al igual que en el experimento anterior se tomó una muestra de grano sin tostar y las subsecuentes se tomaron cada 1.5 minutos.
- Corrida de 60 minutos, se trabajó con un precalentado de 180°C . Este experimento mantuvo constante la temperatura de 180°C durante todo el tostado, con el fin de lograr un tiempo prolongado de tostado.

En la Figura 4.2 se muestran las series de tiempo capturadas para las corridas de 10 y 20 min. Del lado izquierdo se muestran los perfiles de temperatura sin ningún tratamiento, mientras los gráficos del lado derecho muestran las fluctuaciones de temperatura, es decir, las series de tiempo eliminando la tendencia. El análisis multiescala se aplica a las fluctuaciones de temperatura.

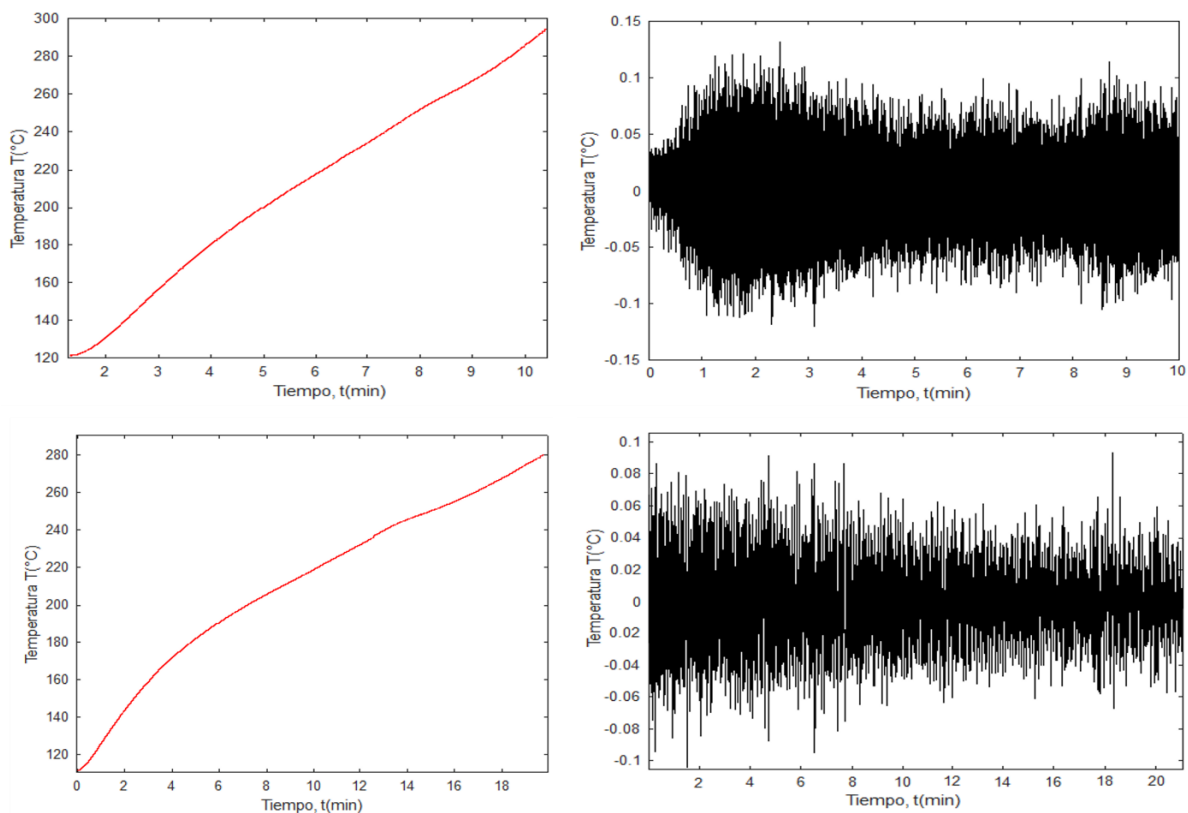


Figura 4. 2 Perfil de temperatura para las corridas de 10 y 20 minutos

4.3 Análisis fractal

La aplicación del análisis multiescala considera tres tipos de análisis global, dinámico y multifractal. El análisis global analiza todos los datos de la serie de tiempo con el propósito de identificar patrones característicos en diferentes escalas de tiempo, que permite identificar los fenómenos intrínsecos en la serie de tiempo.

Por otro lado, el análisis dinámico permite identificar cambios de las zonas características y su relación con el cambio de las variables físicas del proceso. Finalmente, el análisis multifractal permite resaltar los patrones y/o correlaciones entre los parámetros multiescala y las variables físicas del proceso. La aplicación de cada uno de los enfoques se describe a continuación.

4.3.1 Análisis global

Para implementar el análisis global se usaron los métodos R/S y DFA. Considerando la serie de temperatura del tambor para la corrida de 20 min, la Figura 4.3 muestra los parámetros estadísticos calculados ($R/S(s)$ y $F(s)$) como función de la escala, s , donde se observan dos regiones de escalamiento llamadas región A y B, en la cual se puede notar que la ley de potencia está definida por un exponente de escalamiento.

El valor obtenido del exponente de Hurst en la zona A usando el análisis R/S es $H_A = 0.62 \pm 0.005$, que indica que a escalas menores a 0.2 min, la serie de tiempo presenta correlaciones de largo alcance. Mientras que, en la región B se encuentra a escalas mayores de 0.2 min el exponente de Hurst es $H_B = 0.28 \pm 0.029$ que indica que la serie de tiempo muestra un comportamiento anticorrelacionado. Los valores de exponentes de Hurst para 10 y 60 min de las series de tiempo con los sensores en el tambor, la tolva y turbina, se muestran en la Tabla 4.1, donde se puede notar que en todos los casos se obtuvieron dos regiones que están divididas por las mismas escalas, i.e., la región A en escalas $s < 0.2\text{min}$ y la región B en escalas $s > 0.2\text{ min}$.

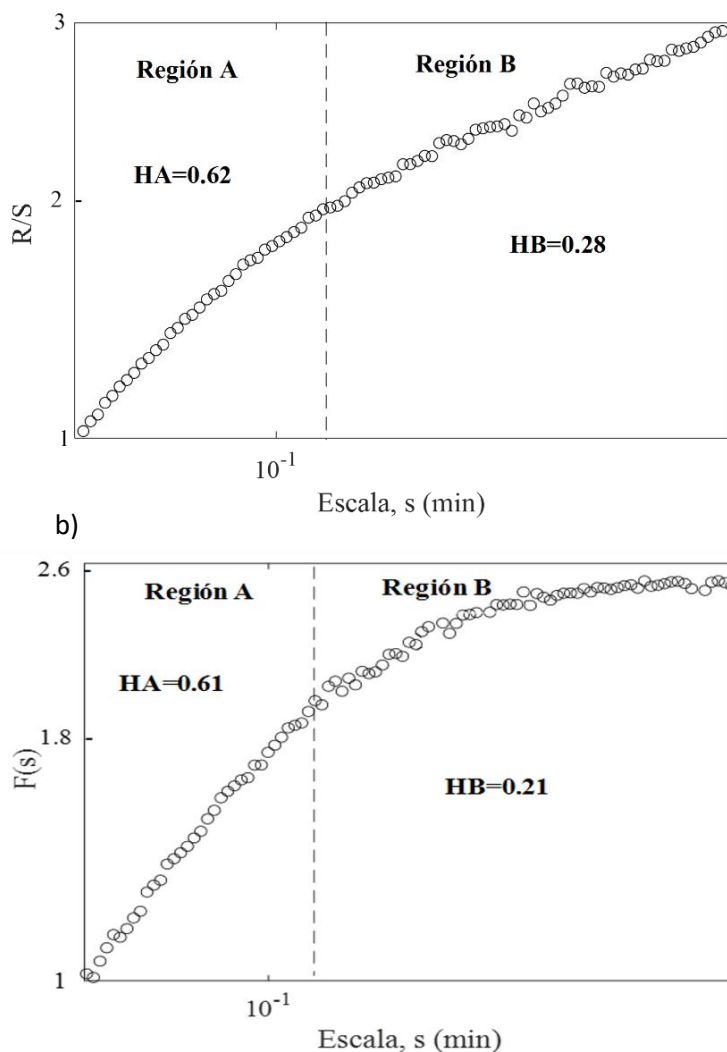


Figura 4.3 Análisis global para la serie de tiempo de 20 min a) R/S y b) DFA

Tabla 4.1 Exponentes de Hurst calculados con el análisis global de las series de tiempo de temperatura para los tres sensores de temperatura

Tiempo	EXPONENTE DE HURST TAMBOR			
	Zonas R/S		Zonas DFA	
	A	B	A	B
10 min	0.5527 ± 0.002	0.4734 ± 0.002	0.5491 ± 0.009	0.4377 ± 0.010
20 min	0.6212 ± 0.005	0.2804 ± 0.029	0.6125 ± 0.011	0.2152 ± 0.002
60 min	0.6644	0.2361	0.6415	0.2146

Tiempo	EXPONENTE DE HURST TOLVA			
	Zonas R/S		Zonas DFA	
	A	B	A	B
10 min	0.5635 ± 0.015	0.4683 ± 0.005	0.5673 ± 0.021	0.2429 ± 0.006
20 min	0.6253 ± 0.009	0.2554 ± 0.194	0.7226 ± 0.140	0.1303 ± 0.024
60 min	0.6746	0.2306	0.6682	0.1294

Tiempo	EXPONENTE DE HURST			
	TURBINA			
	Zonas R/S		Zonas DFA	
	A	B	A	B
10 min	0.5778 ±0.005	0.4653 ±0.061	0.5853 ±0.027	0.2354 ±0.014
20 min	0.6275 ±0.008	0.2805 ±0.005	0.6818 ±0.086	0.1412 ± 0.045
60 min	0.6846	0.1923	0.6748	0.1052

La diferencia entre los experimentos radica principalmente en el tiempo de operación, sin embargo, el perfil de temperatura fue ajustado para que el grado de tostado al final de cada operación sea aproximadamente el mismo. Entonces, la presencia de dos regiones características en la misma escala de tiempo sugiere que el proceso de tostado está dominado principalmente por dos fenómenos característicos independientemente del tiempo de operación. De hecho, se ha reportado que la duración del tostado y el perfil de temperatura tienen efectos importantes sobre la estructura porosa del grano de café (Wang, 2014). Tiempos prolongados y altas temperaturas favorecen al incremento del tamaño de poro, así como la formación de poros de mayor tamaño debido a la fusión de dos o más microporos (Pittia et al., 2011).

4.3.2 Análisis dinámico local

El análisis global permite encontrar escalas de tiempo características de uno o más fenómenos dentro de los procesos, sin embargo, bajo la presencia de cambios externos en el proceso, perturbaciones, patrones o ciclos y/o comportamientos repetitivos en el tiempo, este tipo de análisis no es suficiente para detectar esa clase comportamientos dinámicos. El análisis dinámico pretende identificar los cambios que sufre el grano durante la operación del tostador.

Para implementar el análisis dinámico se consideran subseries contiguas equivalentes a 2 minutos de operación del proceso para el caso de tostado de café de 10 min, 4 min para el tostado de café de 20 min y 12 min para el tostado de café de 60 min. En la Figura 4.4 se muestran las dos regiones de escalamiento para el tostado de café de 20 min aplicando R/S y

DFA para las series de tiempo capturadas en el tambor del tostador. De la misma forma que en el análisis global, las dos regiones de escalamiento pueden ser observadas, en la misma escala de tiempo se identifica el cambio de pendiente en todas las subseries analizadas.

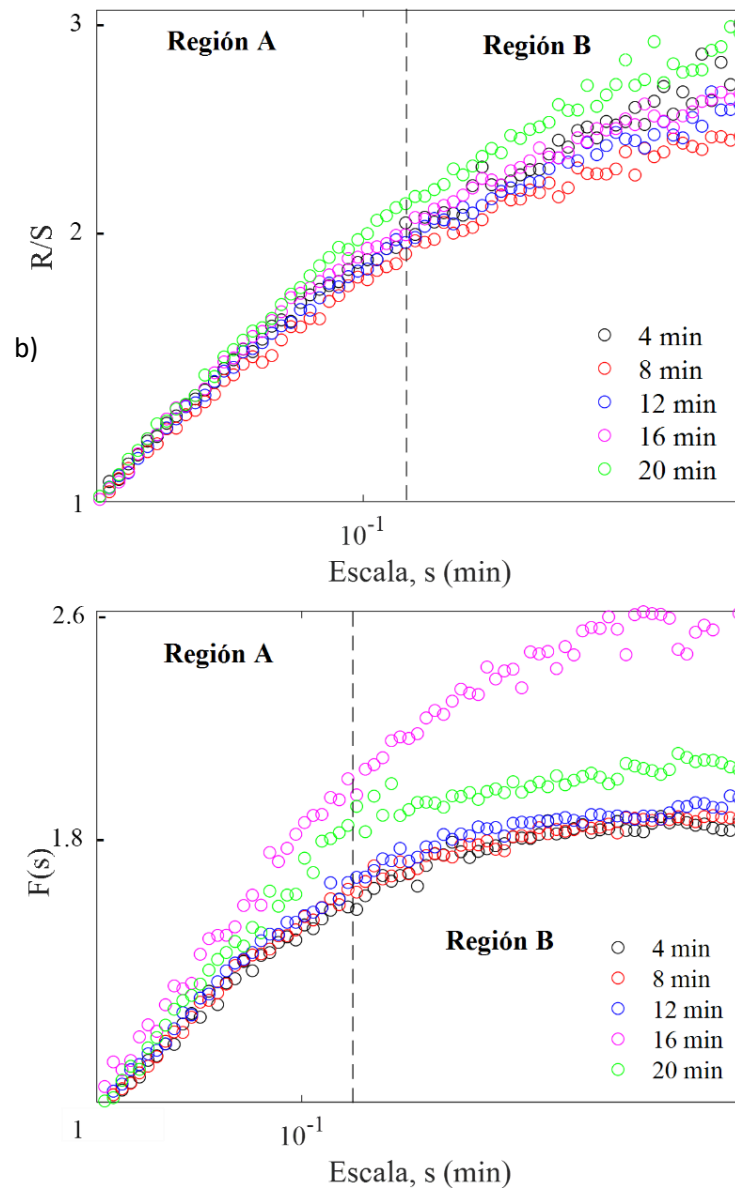


Figura 4.4 Análisis local dinámico para la serie de 20 min a) R/S b) DFA

Los cambios dinámicos que se puede observar sobre el valor del exponte de Hurst, donde para la región B muestra mayores cambios en los valores de los exponentes de escalamiento, lo que es evidencia de que el fenómeno en escalas mayores a 0.2 minutos exhibe mayor cambio a medida que se lleva el proceso de tostado de café. En ambas

metodologías se puede observar el mismo comportamiento, sin embargo, el análisis DFA muestra cambios más pronunciados, es decir, el análisis DFA es más sensible en los cambios dinámicos.

Para poder observar las variaciones del exponente multiescala con respecto al tamaño de escala y el tiempo, se realiza un análisis dinámico más detallado, considerando ventanas móviles de 1200 datos (2 minutos) con deslizamientos de 0.1 minutos. En la Figura 4.5 se muestran los cambios escala-temporales de los exponentes de escalamiento, en cual se siguen identificando las dos regiones características. Este resultado corrobora lo identificado en la Figura 4.4 y es posible observar con mayor detalle los cambios en el exponente de Hurst con respecto a los cambios de escala y tiempo.

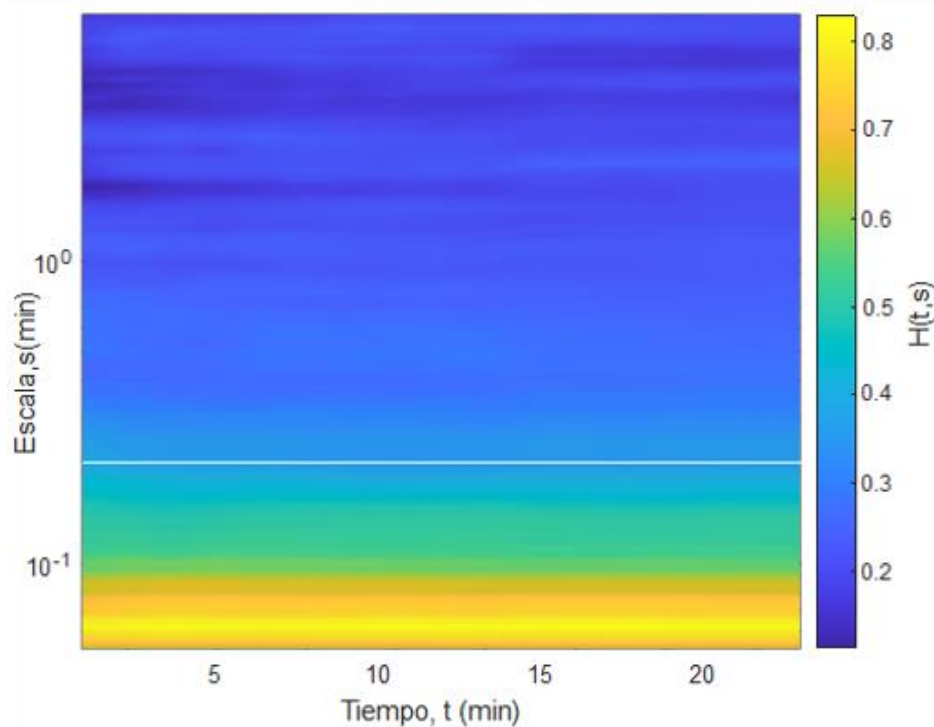


Figura 4.5 Análisis dinámico escala-temporal para la serie de temperatura de 20 min

Para obtener un índice que permita correlacionar los cambios dinámicos del proceso de tostado, se calcula su dimensión fractal a partir del análisis dinámico (Figura 4.5). Dicho índice se puede comparar con variables claves del tostado de café para un monitoreo indirecto. En este estudio, se compara la dimensión fractal de las series de tiempo de temperatura con índices fractales de análisis de imágenes de tostado café reportados por Hernández-Aguirre, (2018). En la Figura 4.6 se muestran las dimensiones fractales de la zona

A índice $(2-HA(t))$ de la serie de tiempo de 20 min, además en la figura se sobreponen los índices fractales de imágenes, donde es posible observar que los perfiles dinámicos muestran correspondencia.

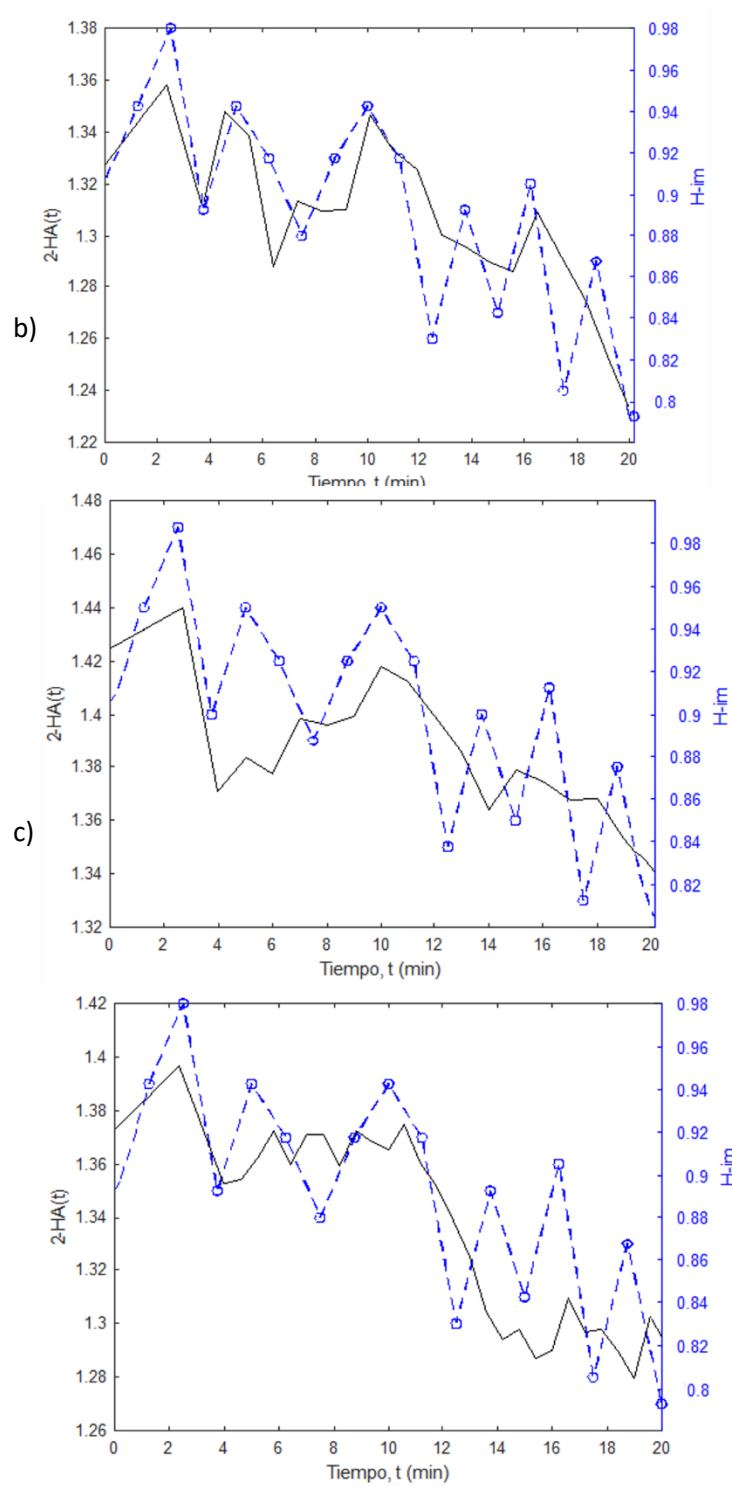


Figura 4.6 Comparación de la dimensión fractal $(2-HA(t))$ con la dimensión fractal de imágenes $(H-im)$ de la serie de temperatura de 20 min para el sensor en a) tambor b) tolva y c) turbina.

Esto sugiere que las mediciones de temperatura permiten, al igual que las imágenes del tostado de café, observar la evolución temporal del tostado en tres zonas diferentes del equipo de tostado. Lo anterior indica, que las dos regiones de escalamiento que se presentan en el análisis del proceso de tostado podrían estar relacionados a etapas importantes del proceso, estas etapas podrían ser el tostado endotérmico y el tostado exotérmico (Buffo y Cardelli-Freiri, 2004; Sunarharum et al., 2014). El primero asociado a cambios estructurales del grano de café y el segundo asociado a los cambios químicos.

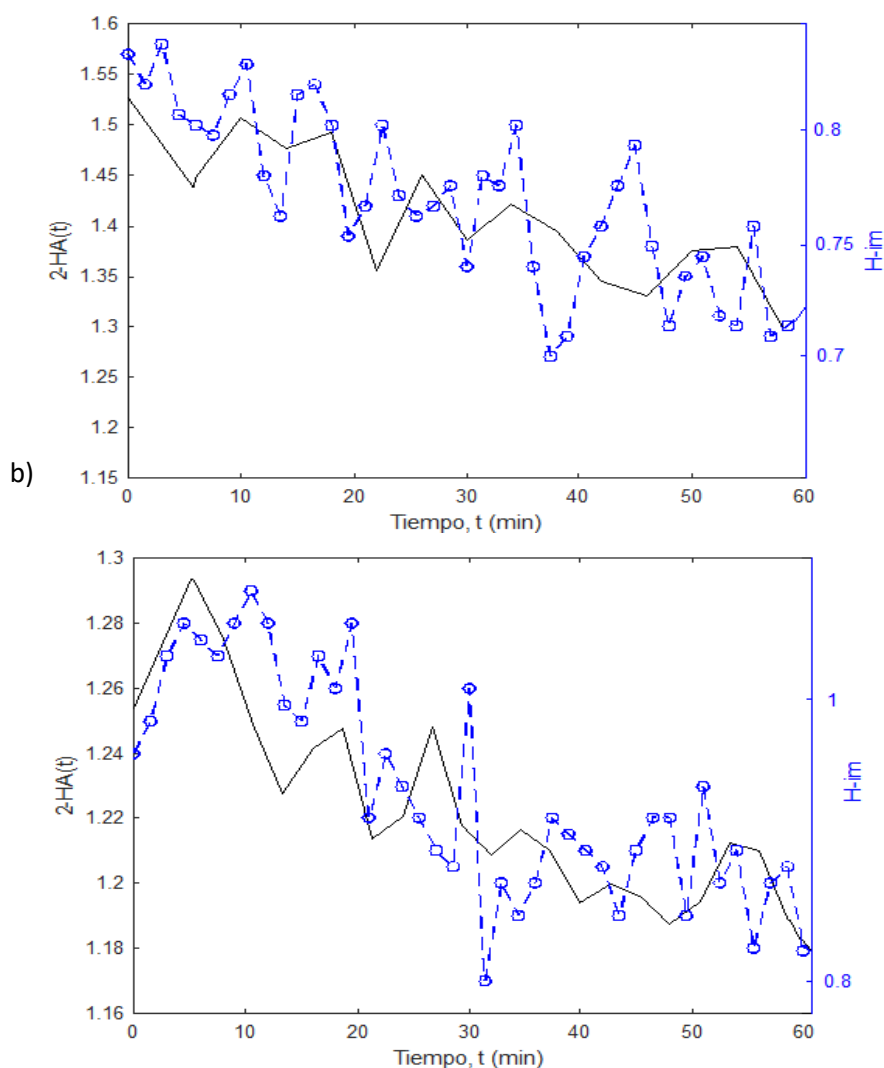


Figura 4.7 Comparación de la dimensión fractal ($2-HA(t)$) con la dimensión fractal de imágenes ($H-im$) de la serie de temperatura de 60 min para el análisis a) R/S y b) DFA

Los resultados para las series de tiempo de 10 y 60 min muestran resultados análogos a los obtenidos con la serie de 20 min. La Figura 4.7 muestra la comparación entre la

dimensión fractal obtenida con las series de tiempo y las obtenidas con las imágenes de grano de café.

Un aspecto importante es el tiempo de cómputo usado en el procesamiento de las series de tiempo, ya que esto influye directamente sobre la posibilidad de implementación en línea. En la Tabla 4.2 se muestran los tiempos usados en el análisis de imágenes y series de tiempo. Debido a que el análisis de imágenes realiza un análisis matricial en dos dimensiones, el tiempo de cómputo fue mayores que los usado en el análisis de series de tiempo.

Tabla 4.2. Tiempo de cómputo para el análisis de imágenes y series de tiempo del experimento a 20 min.

Tiempo	Análisis de Imagen		Tiempo	Análisis de series de tiempo	
	R/S	DFA		R/S	DFA
Segundos	80.873	2162.626	Segundos	2.084	5.932

Algunos comentarios sobre los resultados obtenidos con el análisis fractal son los siguientes:

- Con el análisis global se pudieron observar dos regiones de escalamiento en tambor tolva y turbina. Con valores en la región A mayores a 0.5, mostrando correlación de largo alcance y en la región B valores menores a 0.5 a una escala de tiempo mayor de 0.1 indicando un comportamiento anticorrelacionado, debido a que los fenómenos a esta característica escala de tiempo son recursivos.
- Mediante el análisis dinámico y local, de igual manera se obtuvieron las dos regiones de escalamiento, en las que se conservan en el tiempo en el tambor, tolva y turbina en 10, 20 y 60 min. Con este análisis, estas dos regiones pueden estar correlacionados a dos fenómenos subyacentes del tostado del café:
 - a) Endotérmica (zona A). En esta etapa, se debe por el secado de los granos verdes provocando así un cambio en la formación de los poros y de las microfisuras en la superficie, debido al aumento de la presión interna dentro del grano por la salida del vapor de agua, que conlleva también a un incremento de volumen del grano y pérdida de masa.
 - b) Exotérmica (zona B): Ocurren reacciones como reacciones la de Millard y de pirólisis. Estas reacciones producen grandes volúmenes de dióxido de carbono y

compuestos aromáticos, dejando muy poroso y formando microfisuras dentro del grano. (Illy, A. & Viani, R. (2005)).

- A los 60 minutos de tostado, es el tiempo y la temperatura que más favorece a la región A, es decir, se obtienen valores más altos del exponente de Hurst y a los 10 minutos a la región B muestra valores más altos, en ambas metodologías, tanto en el tambor, como en la tolva y turbina.
- Se pudo observar similitudes de las tendencias (imágenes-series de tiempo) multiescala mostrando buena correlación entre ellos, permitiendo el monitoreo en línea, para las tres partes del equipo.
- El análisis R/S de las series de tiempo mostró un mejor desempeño en tiempo de cómputo en comparación con el análisis DFA.

4.4 Análisis multifractal

El análisis fractal tradicional conduce a una medida estadística que representa a todo el conjunto de datos, es decir, genera una medida de su complejidad global y, por tanto, muestra las propiedades fractales del objeto en su conjunto. Por otro lado, el análisis multifractal explora las propiedades fractales de diferentes regiones locales dentro del objeto o conjunto de datos. El análisis multifractal puede revelar que los objetos o procesos tienen dimensiones fractales globales y locales diferentes y, por tanto, diferencias locales de complejidad. El análisis multifractal R/S se aplicó a las series de tiempo de temperatura para el tostado de café con la finalidad de asociar la multifractalidad con la complejidad del proceso. En general, la multifractalidad indica la naturaleza no lineal de los mecanismos que generaron la serie.

A partir de la metodología R/S podemos generar un gráfico de los cambios del exponente de Hurst en relación con el parámetro q , podremos identificar si las series de tiempo exhiben un comportamiento de tipo multifractal. Si esta variación es muy grande, entonces será aún más complejo el proceso a estudiar, ya que existen más fractales inmersos en la serie de tiempo. Por lo que el sistema no puede ser descrito mediante un solo exponente. Si el exponente de Hurst en función de q , fuera lineal y constante, entonces la serie de tiempo sería monofractal.

En la Figura 4.8 se muestra el análisis multifractal aplicado a la serie de temperatura de 20 minutos para el tambor, tolva y turbina. Se puede observar en la gráfica que la región A muestran una mayor curvatura que en la región B, es decir, existe más complejidad o multifractalidad en esa región.

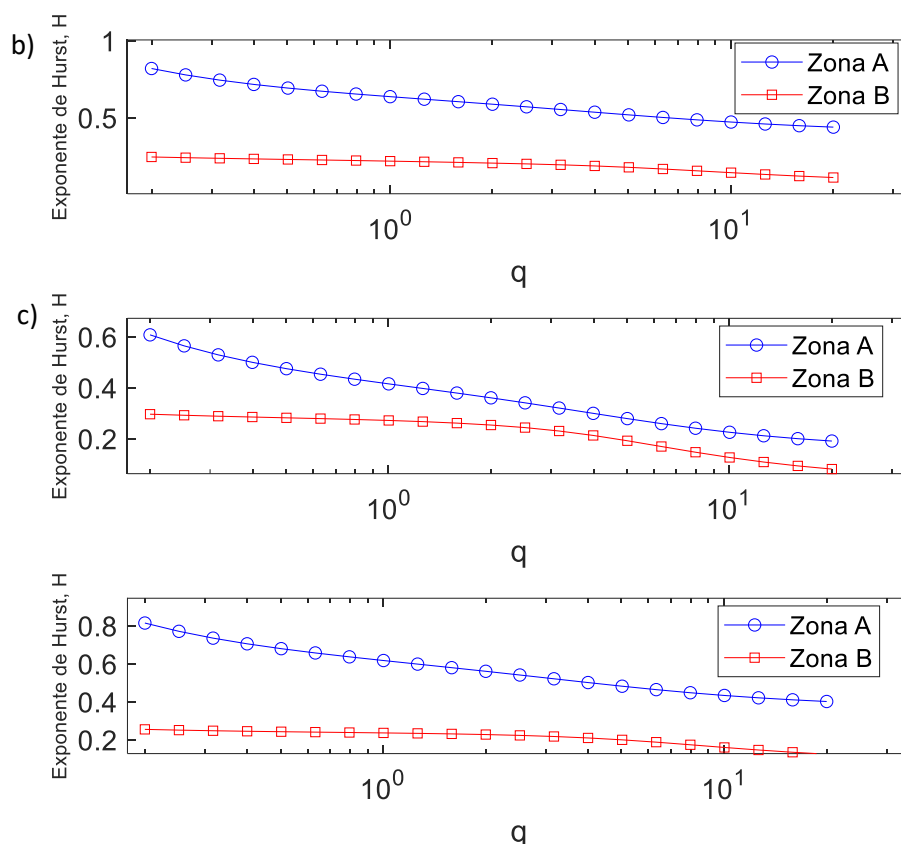


Figura 4.8 Exponentes de Hurst en función de q de la serie de tiempo de temperatura de 20 min del a) tambor, b) tolva y c) turbina.

Para determinar el grado de multifractalidad de cada región, se calcula el índice multifractal (IM). Para todas las series de tiempo analizadas, la Tabla 4.3 muestran los IM, donde se puede observar que los índices más altos en la región A es para 60 minutos y en la región B para 10 minutos de tostado, en las tres zonas del equipo. Entre más tiempo y baja temperatura se obtendrán valores más altos se obtendrán de la región A. Entre menos tiempo y temperatura altas se obtendrán valores altos de la región B. Esto nos indica que el tiempo de tostado y perfil de temperatura afectan las etapas endotérmicas y exotérmicas del tostado, respectivamente y esto se ve reflejado en el IM.

Tabla 4.3 Índice multifractal R/S en tambor, tolva y turbina

Tiempo	IM Tambor		IM Tolva		IM Turbina	
	Zona A	Zona B	Zona A	Zona B	Zona A	Zona B
10 min	0.293405 ± 0.008	0.26872 ± 0.046	0.4155 ± 0.006	0.266235 ± 0.002	0.399185 ± 0.009	0.247025 ± 0.013
20 min	0.33931 ± 0.006	0.20274333 ± 0.045	0.42999667 ± 0.023	0.13504667 ± 0.027	0.43358667 ± 0.006	0.13416667 ± 0.036
60 min	0.38123	0.14359	0.45288	0.13485	0.39175	0.12349

Usando el análisis multifractal basado en DFA (MF-DFA) se analizaron las series de temperatura de 10, 20 y 60 min. En la Figura 4.9 se observa la variación no lineal de $\tau(q)$ con q para la serie de 20 min en las tres regiones del equipo, donde se confirma el hecho de que la serie de tiempo es de naturaleza multifractal; es decir, tiene una propiedad de autosimilitud multiescala incorporada para las tres zonas del equipo. Esto se observa en las demás series de tiempo, una curva ligera y parecida los valores entre sí.

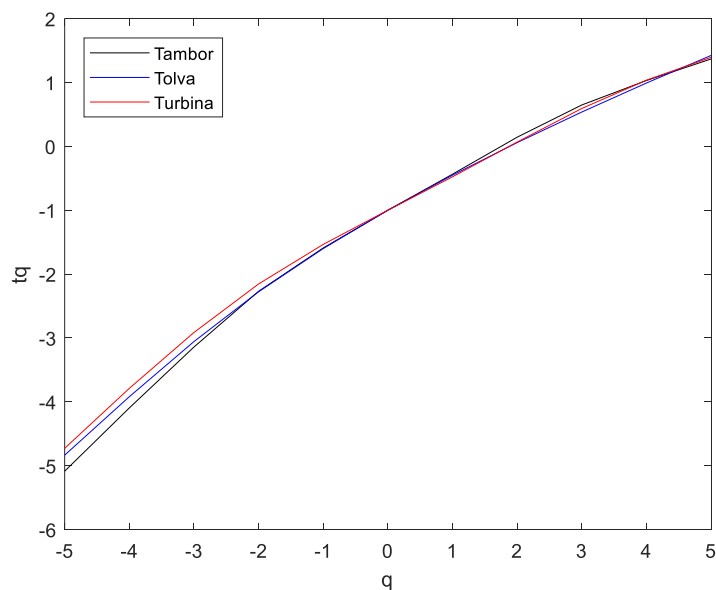


Figura 4.9 Análisis multifractal basado en el DFA, de $\tau(q)$ como función de q para las tres series de tiempo de 20 min.

En la Figura 4.10 se muestra la dependencia no lineal del parámetro tq como función de q reflejando así una h_q sera decreciente, así mismo se presenta el espectro de singularidad,

donde se pueden calcular los parámetros multifractales de la serie de tiempo. El cual el ancho de éstas nos indica la diferencia entre el máximo y el mínimo h_q .

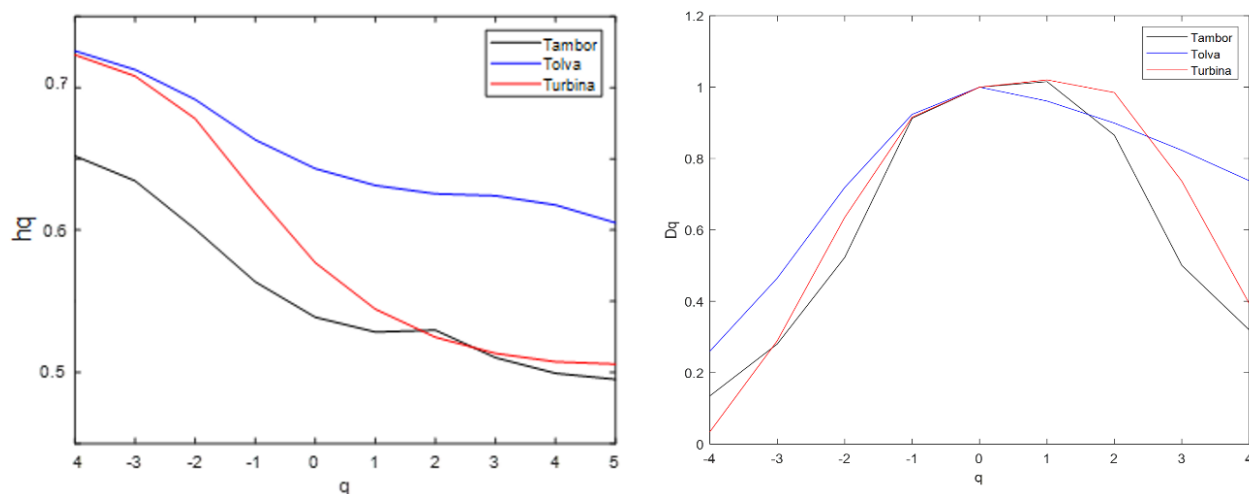


Figura 4.10 a) h_q decreciente y b) espectro de singularidad de la serie de tiempo de 20 min.

En la Tabla 4.4 se concentran los parámetros multifractales calculados para todas las series de tiempo. Se puede observar que, en todos los casos, el espectro de singularidad presenta una tendencia de parábola invertida con una anchura de parábola $\Delta \alpha > 0.05$, lo cual es típico en procesos que presentan características multifractales (Makowiec & Fulinski 2010). También se puede observar que el tostado de 10 minutos en la zona de tambor tiene el mayor valor de anchura $\Delta \alpha = 0.8118$, lo que indica una mayor multifractalidad. Esto se debe a que la temperatura es alta y sube rápidamente en corto tiempo, lo que aumenta las reacciones, en especial las de la etapa exotérmica, ya que, también a los 10 minutos la región B tiene mayores valores de IM mostrando una mayor multifractalidad. En cambio, el de 20 minutos es el que muestra menor anchura, por lo tanto, menor su multifractalidad. En este tiempo se muestran valores más bajos de IM en la región B y esto puede ser reflejado en la anchura.

En cuanto a la tolva y turbina se obtuvieron valores contrarios a los del tambor, valores altos en 20 minutos y valores bajos en 60 minutos. Cabe mencionar que, para el tambor se puede observar un truncamiento a la derecha debido a la nivelación de los exponentes de Hurst de orden q (H_q) para las q 's negativas. Es decir, El espectro multifractal tendrá una larga cola izquierda cuando las series de tiempo tengan una estructura multifractal

que es insensible a las fluctuaciones locales con pequeñas magnitudes. La tolva y la turbina presentaron casi el mismo lado y forma espectro. Mientras que el tambor un comportamiento contrario.

Tabla 4.4 Conjunto de parámetros multifractales

TIEMPO	TAMBOR			TOLVA			TURBINA		
	$\Delta \alpha$	$A \alpha$	α_0	$\Delta \alpha$	$A \alpha$	α_0	$\Delta \alpha$	$A \alpha$	α_0
10 min	0.8118 ± 0.072	-0.4856 ± 0.033	0.1218 ± 0.001	0.4378 ± 0.026	0.3751 ± 0.1146	0.66035 ± 0.028	0.4421 ± 0.022	0.2649 ± 0.1797	0.5992 ± 0.052
20 min	0.4803 ± 0.092	0.5576 ± 0.100	0.5416 ± 0.038	0.4840 ± 0.136	-0.1871 ± 0.431	0.6243 ± 0.119	0.5018 ± 0.5018	-0.4527 ± 0.163	0.4266 ± 0.213
60 min	0.6279	-0.5098	0.1341	0.2831	-0.4972	0.5432	0.2515	-0.4952	0.2427

El lado izquierdo más largo de la parábola es determinado por valores de q positivos. En caso contrario, el lado derecho más largo indica que la multifractalidad pronunciada opera sobre fluctuaciones a pequeña escala, mientras que la dinámica de las largas fluctuaciones es más pequeña y es determinado por q negativos. Esto quiere decir que las fluctuaciones más pequeñas que desarrollan una marcada jerarquía multifractal, mientras que las mayores se suprimen. En relación con los fenómenos naturales parece ser una categoría de distorsión mucho menos frecuente. En este estudio, en el tambor se mostraron alargamientos de lado derecho a los 10 minutos y 60 minutos. En el caso de la tolva y turbina a los 20 minutos. En cambio, la asimetría del lado izquierdo corresponde a una marcada multifractalidad en el nivel de las grandes fluctuaciones y a su supresión hacia la monofractalidad cuando se pasa a las pequeñas fluctuaciones.

Capítulo 5

DIGESTIÓN ANAEROBIA DE VINAZA TEQUILERA

5.1 Introducción

El tequila es una de las bebidas más famosas a nivel nacional y mundial. Se obtiene de la planta *Agave tequilana* Weber, mejor conocido como Agave azul. En 2021, se produjeron cerca de 527 millones de litros de tequila en México, el volumen más alto registrado en todo el periodo de estudio. Entre 2000 y 2020, la producción de tequila en el país aumentó en un 106% (Statista, 2021). La producción de tequila genera un residuo llamado vinaza, que se estima que por cada litro de tequila producido se generan en promedio 10 litros de vinazas, por lo que en el año 2021 se generaron 5270 millones de litros de vinazas aproximadamente. Un problema con respecto a la generación de vinazas es que una gran cantidad de éstas no recibe tratamiento adecuado o completo para cumplir con las características físicas, químicas y microbiológicas señaladas en las normativas vigentes, principalmente las vinazas producidas por pequeñas y medianas empresas que no tienen recursos financieros para el tratamiento de sus efluentes y terminan descargándolos clandestinamente a cuerpos de agua o en los suelos. Se estima que actualmente alrededor del 80% de estas vinazas son descargadas directamente a cuerpos de agua (ríos, arroyos, lagos, presas), sistemas municipales de alcantarillado o directamente al suelo.

Estudios recientes han mostrado que la DA es una tecnología adecuada para el tratamiento de vinazas de tequila debido a que permite tratar altas concentraciones de DQO, en bajos tiempos de retención hidráulica (López-López *et al*, 2010, Méndez-Acosta *et al*.,

2010). La DA es un bioproceso en el cual algunos microorganismos descomponen material biodegradable en este caso las vinazas de tequila en ausencia de oxígeno, donde el producto principal es el biogás entre los cuales el CO_2 y el CH_4 son los gases más abundantes y consta de 4 etapas principales: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. Debido a esta situación, DA no es un proceso fácil de monitorear porque se presentan múltiples reacciones, su cinética es compleja, tiene un comportamiento altamente no lineal, por lo que una manera de monitorear la DA es por medio de variables como demanda química de oxígeno (DQO), ácidos grasos volátiles (AGV) y la producción de biogás, para saber si hay un buen funcionamiento dentro del biorreactor. Los equipos para medir estas variables son caros y se necesitan sistemas de preacondicionamiento que requieren mucho tiempo para ser aplicados (Molina *et al.*, 2009; Olsson, 2012; Vanrolleghem, 1995). Aparte de que los equipos son caros para medir estas variables y los sensores no son precisos.

Por otro lado, las mediciones disponibles en línea presentan fluctuaciones complejas en torno a tendencias que varían en el tiempo, que normalmente se consideran ruido no correlacionado. En consecuencia, estas fluctuaciones no suelen tenerse en cuenta para el análisis del rendimiento del proceso. Sin embargo, estas complejas fluctuaciones podrían ser un indicio de la complejidad de la física que interviene en el proceso de DA. En particular, las señales de pH tomadas de los procesos de DA pueden reflejar la complejidad de las reacciones biológicas y proporcionar información relevante sobre el rendimiento del digestor. El rendimiento del digestor debido a que la DA es manejada principalmente por reacciones redox que implican la transferencia de electrones, por lo que esto relacionado con la actividad microbiana del proceso y consecuentemente podrían ser detectadas a través de mediciones de pH (Olsson, 2012; Chen *et al.*, 2008)

En los últimos años, los métodos multiescala basados en el análisis fractal han mostrado un gran potencial para inferir las variables clave del proceso. Méndez-Acosta *et al.* (2013) propuso el análisis R/S de las series de tiempo de pH obtenidas de un reactor anaerobio de flujo ascendente tipo lotes para la digestión anaeróbica de las vinazas del tequila, donde se observaron altas correlaciones entre los índices multiescala y las variables críticas del proceso (es decir, DQO, AGV y producción de biogás). Hernández-Martínez *et al.* (2014) en el que aplicaron el análisis multiescala en las series de tiempo de pH obtenidas del tratamiento anaerobio de tequila en biorreactores continuos (FBR y CSTR). Los resultados mostraron

que el análisis R/S podía estimar cualitativamente variables esenciales para la evolución del proceso como en el estudio anterior. A pesar de los estudios que se han realizado referente a la DA, aún no se ha aplicado el análisis multifractal a las series de tiempo de pH por lo que puede ser una manera obtener más información y mejorar el diagnóstico. Además, de disponer de otra metodología para su monitoreo, donde posiblemente puede ser más precisa y más rápidas que las metodologías previamente utilizadas.

5.2 Series de tiempo

Para el estudio se analizan series de tiempo de pH capturadas de un proceso de DA en AnSBR de volumen de 5.1 L. El pH del digestor se reguló a 8 mediante la adición de una solución de NaOH a través de un esquema de control *on/off* realizado por el dispositivo cRIO9004. Este dispositivo permite adquirir y almacenar 1 datos por cada dos segundos, dicha tasa de medición es suficiente para detectar pequeños cambios dinámicos de pH. El digestor fue operado en condiciones mesofílicas a 38 °C por 72 h, generando una serie de tiempo de 116055 datos. La Figura 5.1 muestra la serie de tiempo de pH obtenida.

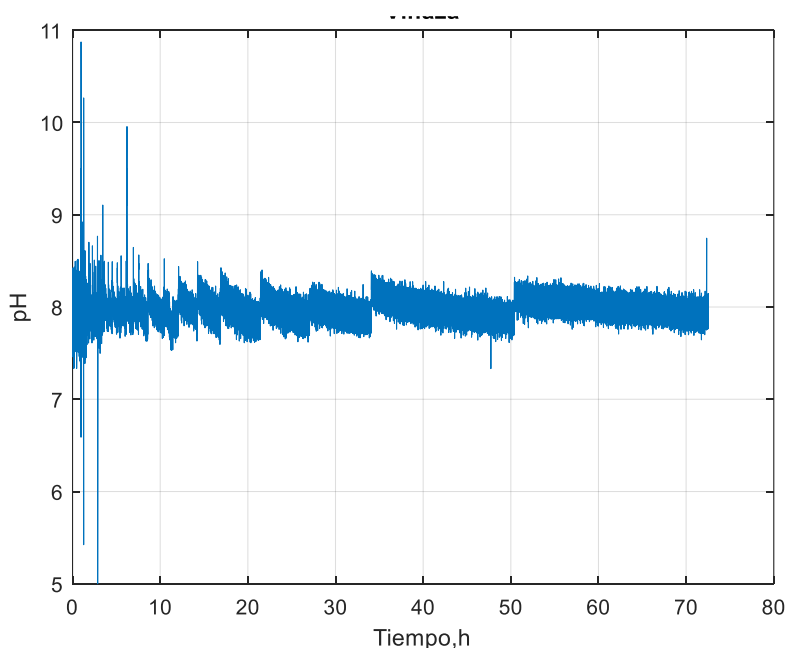


Figura 5.1 Mediciones de pH de la digestión anaerobia del tequila

Las mediciones DQO, AGV y producción de biogás se realizaron fuera de línea. La

DQO se obtuvo por medio de un colorimétrico de reflujo cerrado. La concentración total del AGV se midió con un HPLC Watters 600. Y para el caso de la producción de biogás obtuvo mediante cromatografía de gases usando un sistema AutoSystem XL de Perkin Elmer.

5.3 Análisis fractal

Previo al análisis multiescala se realizó la eliminación de la tendencia usando un promedio móvil para posteriormente aplicar la metodología R/S y DFA. El análisis global de los datos se muestra en la Figura 5.2.

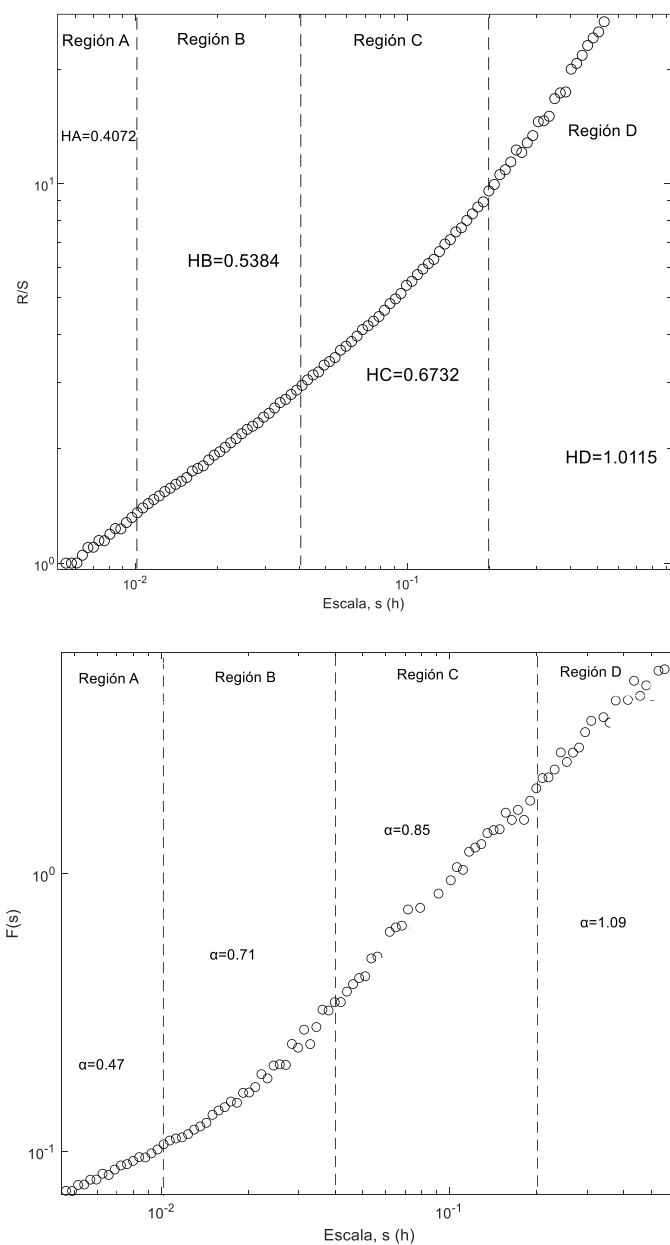


Figura 5.2 Análisis global identificando cuatro zonas de escalamiento a) R/S b) DFA

Con análisis global se pudieron identificar cuatro regiones de escalamiento: A, B, C y D, donde cada región es descrita por un exponente fractal. La región A se obtuvo un valor fractal de $H_A = 0.40$ lo que sugiere que en el intervalo de escalas menores a 0.01 h (10^{-2} h) no existe ninguna correlación de los fenómenos asociados a la digestión. Las regiones B y C se obtienen exponentes mayores a 0.5, lo que nos indica que existe correlaciones de largo alcance en el proceso. Los valores de los exponentes son 0.53 y 0.67 respectivamente, con escalas de tiempo en los intervalos 0.01-0.04 h y 0.04-0.1 h. En cuanto a la región D se observa una alta correlación mayor a 1. Mediante DFA hay un incremento del exponente fractal (región B $H_B = 0.71$ y región $H_C = 0.85$). La región D muestra un valor de $H_D = 1.09$ indicando fuertes correlaciones de largo alcance para escalas de tiempo mayores a 0.1 h. Es decir, el fenómeno que toma lugar a esta escala de tiempo está fuertemente correlacionado con los sucesos futuros.

Para observar si estas regiones se conservan en el tiempo, se hace el análisis dinámico local. Considerando subseries de 6 h, la Figura 5.3 muestra el análisis dinámico, que permite identificar como el exponente de Hurst depende de la operación temporal del proceso. Es decir, se observan los cambios dinámicos de los exponentes fractales de las cuatro regiones identificadas en la Figura 5.2. Se puede observar que el exponente de Hurst de la región A no muestra cambios visibles del exponente de escala con el tiempo, manteniéndose alrededor de $H_A = 0.5$. Las regiones B, C y D muestran una sensibilidad de moderada a alta de los exponentes de escala locales H_B , H_C y H_D con el tiempo. Estos resultados indican que las escalas de tiempo de las regiones B, C y D pueden ser utilizadas para detectar cambios dinámicos en el exponente de Hurst y, eventualmente, correlaciones con el comportamiento dinámico de las principales variables en el tratamiento anaeróbico de las vinazas de tequila.

La Figura 5.3 muestra las variaciones del exponente de Hurst con la escala y el tiempo, $H(s,t)$ mediante R/S. Se utilizaron ventanas de 6 horas (10800 datos) con deslizamientos de 900 datos (0.5 h). También se pudieron identificar las cuatro regiones y se conservan en el tiempo.

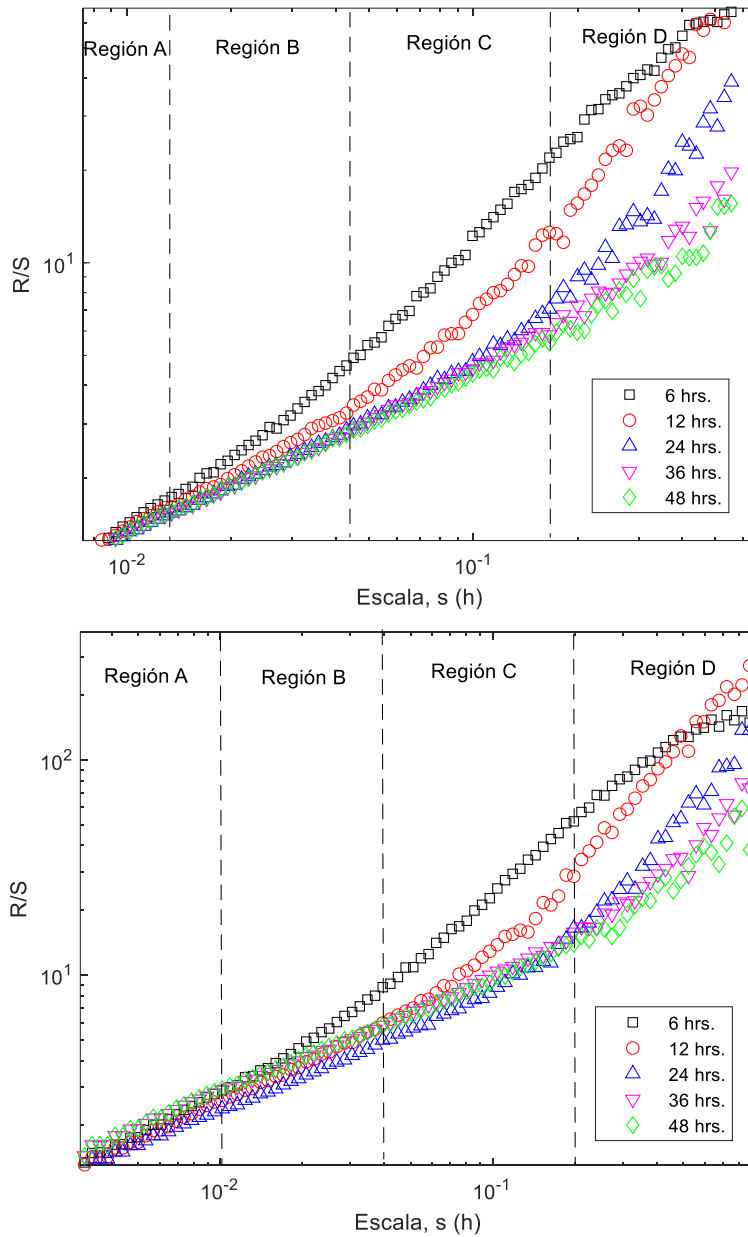


Figura 5.3 Análisis dinámico local de las cuatro zonas de escalamiento considerando 6 horas de muestreo a) R/S b) DFA

La Figura 5.4 se muestran los exponentes de Hurst promedio para cada región en su correspondiente banda de escala de tiempo. obtenidos con el análisis R/S, obteniendo exponentes locales en función del tiempo, $H_A(t)$, $H_B(t)$, $H_C(t)$ y $H_D(t)$. los exponentes de Hurst promedios locales $H_i(t)$, $i = A, B, C, D$ se pueden identificar dos zonas, la primera zona

presenta cambios transitorios del exponente de Hurst y la segunda zona un aparente estado estacionario, dichos comportamientos corresponden al que se presenta en las mediciones de la DQO, AGV y producción de biogás (Méndez-Acosta, et al., 2013). En la zona de aparente estado estacionario el exponente de Hurst promedio oscila alrededor de $H = 0.5$, esto indica que los fenómenos implicados en el proceso de tratamiento de vinazas del tequila se comportan aleatoriamente al final del experimento.

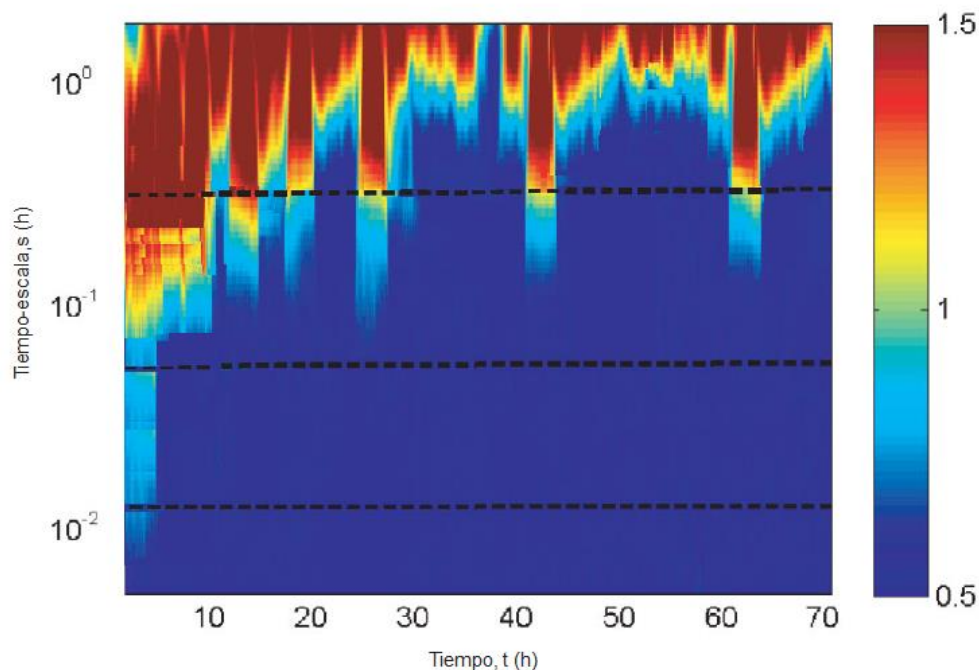


Figura 5.4 Variaciones del exponente de Hurst en escala y tiempo, $H(s;t)$

Si se sobreponen las mediciones de la DQO, AGV y producción de biogás (Méndez-Acosta, et al., 2013) con $HB(t)$, $HC(t)$ y $HD(t)$, se observa correlación entre el comportamiento dinámico de los exponentes locales de escala y tres de las principales variables del proceso de DA (i) degradación local de DQO-HB, (ii) concentración local de AGV-HC, y (iii) producción local de biogás-HD tal como se muestra en la Figura 5.5. El mismo comportamiento se puede encontrar mediante la aplicación del análisis DFA, encontrando la correlación entre el comportamiento dinámico de los exponentes de escalamiento y tres de las principales variables del proceso de DA.

En general, se ha mostrado que el análisis fractal puede utilizarse para monitorear en línea la evolución de las concentraciones de DQO y AGV totales y producción de biogás.

Esto es importante, ya que puede servir para propuestas de esquemas de monitoreo y control avanzados, pero poco costosos.

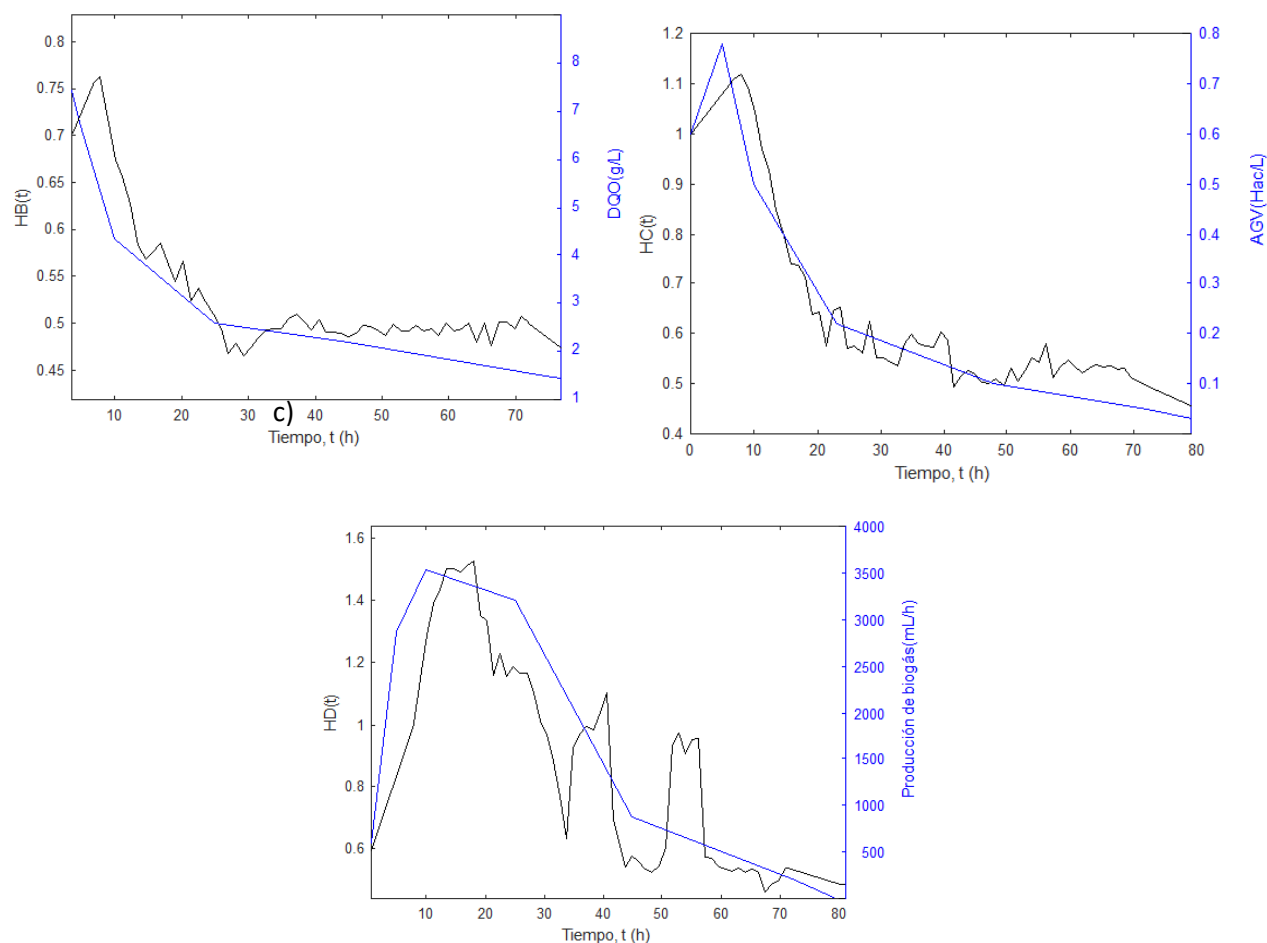


Figura 5.5 Comparación de datos experimentales y exponentes fractales a) HB – DQO b) HC -AGV c) HD – producción de gas por medio de R/S

5.4 Análisis multifractal

La digestión anaerobia es un proceso complejo que consta de 4 etapas, conducidos por un consorcio de microorganismos generando múltiples productos, por lo que el análisis multifractal podría identificar fenómenos no observados en el análisis fractal clásico. La Figura 5.6 muestra la aplicación del análisis multifractal, donde se observan las variaciones del exponente de Hurst con respecto a la norma q . El exponente de Hurst muestra un comportamiento no lineal en relación con la norma q , indicando la propiedad de características multifractales en las series de pH.

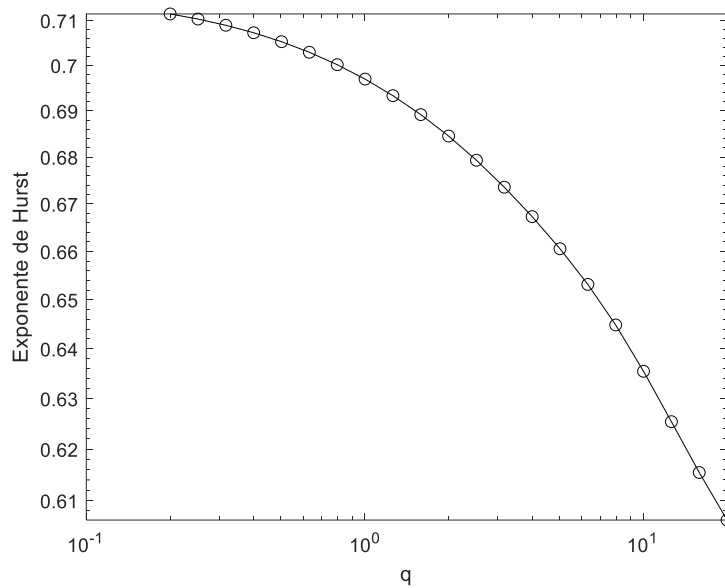


Figura 5.6 Análisis multifractal aplicado a la serie de pH de la DA de vinazas tequileras

Realizando el análisis multifractal considerando las cuatro regiones A, B, C y D por separado, la Figura 5.6 muestra al exponente de Hurst como función de norma q . Aparentemente, en las cuatro regiones hay presencia de multifractalidad, sin embargo, los cambios se pueden identificar en mayor medida en las zonas C y D, que son las de mayor escala de tiempo, además es donde se tiene la generación de productos que son característicos de la DA, formación de AGV y producción de metano.

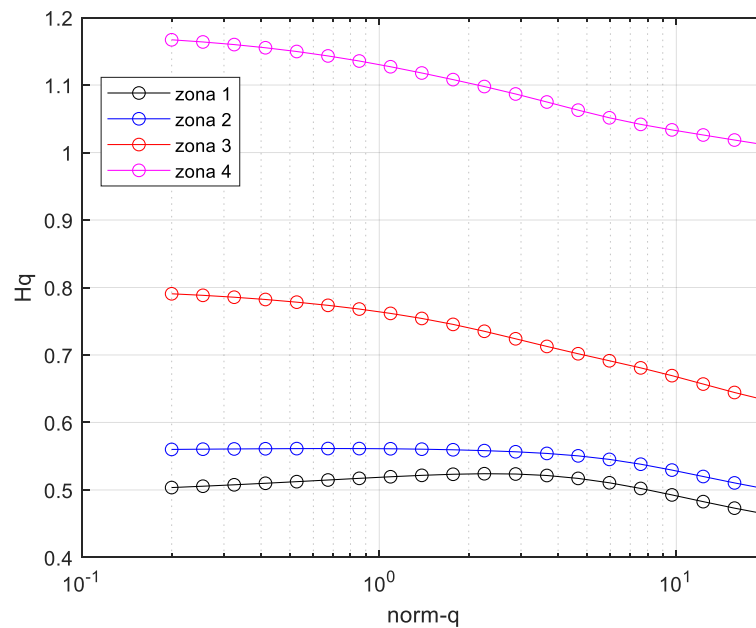


Figura 5.7 Variaciones del exponente de Hurst con el parámetro q

Para cuantificar el grado de multifractalidad se determina el índice multifractal, obteniendo lo siguiente para cada sección: zona A = 0.5980, zona B = 0.6198, zona C = 0.7560, zona D = 1.6200. El índice multifractal confirma que la zona D es la de mayor grado de multifractalidad, por lo tanto, la zona de más complejidad.

Aplicando el análisis multifractal DFA, se confirma que la serie de tiempo de pH exhibe varios tipos de exponentes que conforman la estructura multifractal del proceso. La Figura 5.8 se muestra el espectro de singularidad, donde la forma de parábola invertida es característica de los parámetros multifractales y se observa un alargamiento del lado izquierdo. Esto quiere decir que la asimetría del lado izquierdo corresponde a una marcada multifractalidad en el nivel de las grandes fluctuaciones y a su supresión hacia la monofractalidad cuando se pasa a las pequeñas fluctuaciones. Por lo que la serie de tiempo muestra una alta multifractalidad. En cuanto a los parámetros multifractales se tiene una anchura de 0.2652 y un alto coeficiente asimétrico de 0.8346.

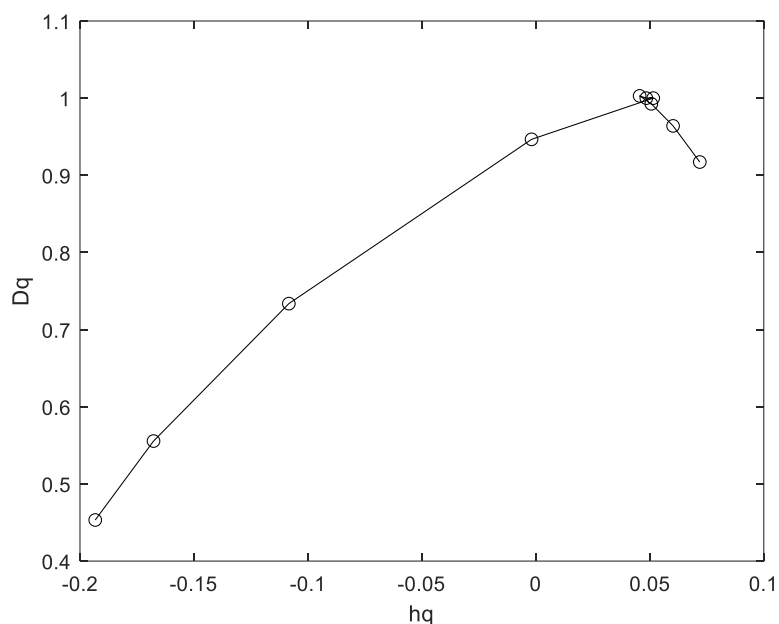


Figura 5.8 Espectro de la singularidad con respecto a la norma q

Capítulo 6

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

6.1 Tostado de café

El análisis de serie de tiempo de temperatura permitió encontrar dos fenómenos subyacentes, los cuales podrían estar asociados a la etapa de secado y reacción. La metodología R/S requiere menor tiempo de cómputo para el cálculo de la dimensión fractal, lo que permitiría que sea calculado en línea. Considerando que los métodos para monitorear el grano de café tostado son costosos y/o poco prácticos de implementar. El análisis de series de tiempo de temperatura mediante R/S podría usarse como una alternativa, fácil, económica y rápida de implementar. Para dar seguimiento al tostado de café, los termopares se pueden colocar en la tolva o turbina del equipo de tostado y, aun así, se podría obtener una buena correlación de las tendencias de la serie de tiempo con variables clave. Además, en la tolva y turbina los sensores podrían sufrir menos daño por el uso que en el tambor del tostador.

Los resultados del MF-DFA de las series de tiempo de la tolva y turbina fueron muy similares al del tambor sólo que a la inversa, lo que indica se puede obtener información similar independientemente de las zonas de medición. La zona que mayor índice multifractalidad fue la del tambor a los 60 minutos. Los valores de Hurst que se obtuvieron con R/S muestra un comportamiento similar al obtenido con el índice multifractal. Cuando q es igual a 2, los exponentes de Hurst $H(2)$ de los datos de la serie de tiempo fueron mayores a 0.5 lo que indica que la serie se caracterizó por una correlación de largo alcance que muestra la persistencia a largo.

Además, el ancho del espectro multifractal $\Delta\alpha$ se utilizó para medir el grado de multifractalidad. Por lo que, los resultados mostraron que complejidad del proceso se puede identificar a partir de las series de tiempo.

6.2 Digestión anaerobia de vinazas de tequila

Los resultados de las series de tiempo muestran que en la digestión anaerobia existen cuatro regiones y se pueden relacionar con las tres etapas principales en un proceso de digestión anaerobia y son independientes del tipo de sustrato, biomasa y condiciones de operación. El análisis escala- temporal de la serie de pH permitió dar seguimiento de las variables claves de DA permitiendo el monitoreo en línea la evolución de las concentraciones de DQO y AGV totales, así como la producción de biogás.

El análisis fractal del pH es una técnica económica que sólo se puede utilizar como indicador rápido de la dinámica y el rendimiento del proceso de la digestión anaerobia, mientras que las mediciones resultantes (fractales) podrían usarse para complementar determinaciones fuera de línea más precisas.

6.3 Perspectivas

Con los resultados que se obtuvieron se pueden proponer los siguientes estudios a futuro:

- Aplicar la metodología multiescala a volúmenes más grandes o industriales de los procesos para corroborar los resultados que se obtuvieron.
- Llevar a la práctica en tiempo real el análisis multiescala de las series de tiempo para dar seguimiento a las claves del proceso, conduciendo un mejor control y evitando pérdidas económicas.
- En cuanto al grado de tostado de café se hará el análisis fractal al instante al recibir la información al momento de la temperatura y así poder disponer de correlaciones entre un parámetro fractal y el grado de tostado, con el propósito de apoyar al maestro tostador.
- Utilizar los índices fractales obtenidos de las series de tiempo para desarrollar esquemas de control que permitan características de los procesos estudiados.
- Aplicar la metodología multiescala a modelos de reactores y tostadores diferentes para comparar resultados finales.

- Relacionar los índices fractales con las variables claves del proceso mediante el desarrollo de un análisis cuantitativo.
- La selección de las escalas de análisis N_{smin} y N_{smax} dependerá del sistema químico o biológico.
- Considerar la variación de algún tipo de agitación tanto en el tostado de café como en la digestión anaerobia para poder medir la influencia de este parámetro a la metodología fractal y multifractal.

REFERENCIAS

- Alexandridis, P.A., Siettos, I.C., Sarimveis, K.H., Boudouvis, G.A., Bafas, V.G., 2002. Modelling of Nonlinear Process dynamics using kohonen's neural networks, fuzzy systems and chebyshev series. *Computers & Chemical Engineering* 26, 479–486.
- Altan, A., Karasu, S., & Bekiros, S. (2019). Digital currency forecasting with chaotic meta-heuristic bio-inspired signal processing techniques. *Chaos, Solitons & Fractals*, 126, 325-336.
- Alvarez-Ramirez, J., Echeverria, J., & Rodriguez, E. (2011). Is the North Atlantic Oscillation modulated by solar and lunar cycles? Some evidences from Hurst autocorrelation analysis. *Advances in Space Research*, 47(4), 748-756.
- Alvarez-Ramirez, J., Rodriguez, E., y Ibarra-Valdez, C. (2018). Long-range correlations and asymmetry in the Bitcoin market. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 492, 948-955.
- Amaro, I. R., Demey, J. R., & Macchiavelli, R. (2004). Aplicación del análisis R/S de Hurst para estudiar las propiedades fractales de la precipitación en Venezuela. *Interciencia*, 29(11), 617-620.
- analysis of hemodynamic behavior: intraoperative instability and its pharmacological
- Barabási, A. L., & Vicsek, T. (1991). Multifractality of self-affine fractals. *Physical Review A*, 44(4), 2730.
- Bishop, S. M., Yarham, S. I., Navapurkar, V. U., Menon, D. K., & Ercole, A. (2012). Multifractal
- Bogaerts, P., & Wouwer, A. V. (2003). Software sensors for bioprocesses. *ISA transactions*, 42(4), 547-558.
- Buffo, R. A., y Cardelli-Freire, C. (2004). Coffee flavour: An overview. *Flavour and Fragrance Journal* 19, 99-104
- Campos-Domínguez, A., Velázquez-Camilo, O., & Hernandez-Martinez, E. (2016). Development of a SCADA system with rescaled range (R/S) analysis and image acquisition. In *Engineering Summit, II Cumbre Internacional de las Ingenierías (IE-Summit)*. 2016 IEEE International (pp. 1-6).
- Casillas, B. (2017). *Sistema de monitoreo indirecto del tostado de café (Coffea Arabica Linné) mediante análisis fractal de imágenes y series de tiempo*. Universidad Veracruzana, región Xalapa. Tesis de Licenciatura
- Chanda, A., Daly, A. M., Foley, D. A., LaPack, M. A., Mukherjee, S., Orr, J. D., ... & Ward, H. W. (2015). Industry perspectives on process analytical technology: tools and applications in API development. *Organic Process Research & Development*, 19(1), 63-83
- Chen, X., Lin, G., & Fu, Z. (2007). *Long-range correlations in daily relative humidity fluctuations: A new index to characterize the climate regions over China*. *Geophysical research letters*, 34(7).
- Chen, Z., Hu, K., Carpena, P., Bernaola-Galvan, P., Stanley, H. E., & Ivanov, P. C. (2005). Effect of nonlinear filters on detrended fluctuation analysis. *Physical Review E*, 71(1), 011104..
- Chiang, H.L., Russell, L.E., Braatz, D.R., 2001. *Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems*. Springer, London, Great Britain
- Claros, J., Serralta, J., Seco, A., Ferrer, J., & Aguado, D. (2011). Monitoring pH and ORP in a SHARON reactor. *Water Science and Technology*, 63(11), 2505-2512.
- compositional and sensory perspective. *Food Research International*, 62, 315-325.
- Escudero, S. (2021). *Análisis fractal de la precipitación de España*. Universidad Complutense. Facultad de ciencias matemáticas. Madrid.
- Falconer, K. J., & Falconer, K. J. (1997). *Techniques in fractal geometry* (Vol. 3). Chichester: Wiley.
- Gabriel-Guzmán, M., Rivera, V. M., Cocotle-Ronzón, Y., García-Díaz, S., & Hernandez-Martinez, E. (2017). Fractality in coffee bean surface for roasting process. *Chaos, Solitons & Fractals*, 99, 79-84.
- Ghasemi, F., van Ommen, J. R., & Sahimi, M. (2011). Analysis of pressure fluctuations in fluidized beds. I. Similarities with turbulent flow. *Chemical engineering science*, 66(12), 2627-2636.
- Hernández Aguirre, A. (2018). *Análisis multiescala en procesos químicos y biológicos* (Master's thesis, Universidad Autónoma Metropolitana (México). Unidad Azcapotzalco. Coordinación de Servicios de Información.).
- Hernández, J.A., Heyd, B., Trystram, G. (2008). Prediction of brightness and surface area kinetics during coffee roasting. *Journal Food Engineering*, 89, 156-63

- Hernández-Aguirre, A., Casillas-Rodriguez, B. C., Cocotle-Ronzon, Y., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, e. (2018). Monitoreo del tostado de café usando la transformada de fourier 2d de imágenes coffee roasting monitoring using 2d fourier transform.
- Hernández-Martínez, E., Puebla, H., Méndez-Acosta, H. O., & Alvarez-Ramírez, J. (2014). Fractality in pH time series of continuous anaerobic bioreactors for tequila vinasses treatment. *Chemical Engineering Science*, 109, 17-25.
- Hurst, H. E. (1951). Long-term storage capacity of reservoirs. *Transactions of the American society of civil engineers*, 116(1), 770-799.
- 18Sunarharum, W. B., Williams, D. J., y Smyth, H. E. (2014). Complexity of coffee flavor: A
- Ignaccolo, M., Latka, M., West, B. (2010). Detrended fluctuation analysis of scaling crossover effects. *Texas university*. Doi: 10.1209/0295-5075/90/10009
- Illy, A. & Viani, R. (2005). *Espresso Coffee. The science of quality*. Second edition. Elsevier Academic Press.
- Illy, A. y Viani, R. (2015). *Espresso Coffee: The Science of quality*. San Diego, California, USA: Elsevier Academic Press.
- Jahirul, M. I., Rasul, M. G., Brown, R. J., Senadeera, W., Hosen, M. A., Haque, R., ... & Mahlia, T. M. I. (2021). Investigation of correlation between chemical composition and properties of biodiesel using principal component analysis (PCA) and artificial neural network (ANN). *Renewable Energy*, 168, 632-646.
- Kadlec, P., Gabrys, B. (2009), *Data-driven Soft Sensors in the process industry*. Germany Enonik Degussa.
- Kantelhardt, J. W., Koscielny-Bunde, E., Rego, H. H., Havlin, S., & Bunde, A. (2001). Detecting long-range correlations with detrended fluctuation analysis. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 295(3-4), 441-454. Doi: [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(01\)00144-3](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(01)00144-3)
- Kantelhardt, J. W., Zschiegner, S. A., Koscielny-Bunde, E., Havlin, S., Bunde, A., & Stanley, H. E. (2002). *Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series*. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 316(1-4), 87-114. Doi: [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(02\)01383-3](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)01383-3)
- Katsuragi H y Honjo H.(1999). Multiaffinity and entropy spectrum of self-affine fractal profiles. *Phys Rev E* 1999;59(1):254
- López, J. L., Veleza, L., & López-Sauri, D. A. (2014). *Multifractal detrended analysis of the corrosion potential fluctuations during copper patina formation on its first stages in sea water*. *Int. J. Electrochem. Sci*, 9, 1637-1649.
- Lopez-Lopez, A., Davila-Vazquez, G., Leon-Becerril, E., Villegas-Garca, E. y Gallardo-Valdez, J. (2010). Tequila vinasses: Generation and full scale treatment processes. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 9, 109-116.
- Makowiec D., Rynkiewicz A., Wdowczyk-Szulc J., Zarczyńska-Buchowiecka M., Galaska R., Kryszewski S. (2011). Aging in autonomic control by multifractal studies of cardiac interbeat intervals in the VLF band. *Physiol. Meas.* 32, 1681–1699 10.1088/0967-3334/32/10/014
- Mandelbrot, B. B. (1983). *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman, New York).
- Mandelbrot, B. B., & Llosa, J. (1997). La geometría fractal de la naturaleza (p. 680). Barcelona: Tusquets.
- Mandelbrot, B. B., & Wallis, J. R. (1969). Computer experiments with fractional Gaussian noises: Part I, averages and variances. *Water resources research*, 5(1), 228-241.
- manipulation. *The Journal of the American Society of Anesthesiologists*, 117(4), 810-821.
- Martín, A. (2020). *Análisis de señales complejas: correlaciones de largo alcance y propiedades multifractales*. En: TEMat, 4 (2020), págs. 83-99. ISSN: 2530-9633. URL: <https://temat.es/articulo/2020-p83>.
- Mendez-Acosta, H. O., Hernandez-Martinez, E., J'auregui-J'auregui, J. a, Alvarez-Ramirez, J., y Puebla, H. (2013). Monitoring anaerobic sequential batch reactors via fractal analysis of pH time series. *Biotechnology and Bioengineering*, 110(8), 2131-2139
- Moguel-Castañeda, J. G., Romero-Bustamante, J. A., Velazquez-Camilo, O., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, E. (2021). *Diagnosis of the Cane Sugar Crystallization Process by Multifractal Analysis of Temperature Time Series*. *Chemical Engineering & Technology*, 44(11), 2064-2072.
- Molina F, Ruiz-Filippi G, Garcia C, Lema JM, Roca E. 2009. Pilot-scale validation of a new sensor for on-line analysis of volatile fatty acids and alkalinity in anaerobic wastewater treatment plants. *Environ Eng Sci* 23:641–649.
- Niu, M., Wang, F., Liang, Q., Yu, G., & Yu, Z. (2008). *Multifractal detrended fluctuation analysis of pressure fluctuation signals in an impinging entrained-flow gasifier*. *Chemical Engineering Journal*, 136(2-3), 364-372. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2007.04.022>
- Nor, N. M., Hassan, C. R. C., & Hussain, M. A. (2020). A review of data-driven fault detection and diagnosis methods: Applications in chemical process systems. *Reviews in Chemical Engineering*, 36(4), 513-553.

- Olsson G. 2012. ICA and me-A subjective review. *Water Res* 46:1585–1624
- Olsson, G., Nielsen, M., Yuan, Z., Lynggaard-Jensen, A., & Steyer, J. P. (2005). Instrumentation, control and automation in wastewater systems. IWA publishing.
- Philippopoulos, G., Meyer G., & Holger, K. (2019). *New J. Phys.* 21 033022.
- Quin, S. J. (2012). Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis. *Annual reviews in control*, 36(2), 220-234.
- Quiñones-Grueiro, M., Prieto-Moreno, A., Verde, C., & Llanes-Santiago, O. (2019). Data-driven monitoring of multimode continuous processes: A review. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 189, 56-71.
- Rahmer, B., Herrera, C. & Herrera, G. (2022). Principal component analysis applied to the statistical control of multivariate processes. Doi: 10.17081/invinno.10.1.4972
- Ramirez-Castelan, C. E., Moguel-Castañeda, J., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, E. (2016). A study of temperature sensor location based on fractal analysis for cascade control schemes in tubular reactors. *Chemical Engineering Science*, 141, 195-204. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.10.036>
- Ramírez-Platas, M., Morales-Cabrera, M. A., Rivera, V. M., Morales-Zarate, E., & Hernandez-Martinez, E. (2021). *Fractal and multifractal analysis of electrochemical noise to corrosion evaluation in A36 steel and AISI 304 stainless steel exposed to MEA-CO2 aqueous solutions. Chaos, Solitons & Fractals*, 145, 110802. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.110802>.
- Rendón, S. (2014). Modelos fractales y multifractales aplicados a sistemas complejos: mercados accionarios y de tipo de cambio. Universidad Autónoma de México. Maestría en finanzas bursátiles. México, D.F.
- Rendón, S. (2014). Modelos fractales y multifractales aplicados a sistemas complejos: mercados accionarios y de tipo de cambio. México. D.F. Universidad Autónoma de México
- Rief, V., Felske, C., Scharinger, A., Krumbügel, K., Stegmüller, S., Breitling-Utzmann, C. M., ... & Lachenmeier, D. W. (2021). Indirect nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopic determination of acrylamide in coffee using partial least squares (PLS) regression. *Beverages*, 7(2), 31.
- Russell, E., Chiang, L., & Braatz, R. (2000). Data-driven methods for fault detection and diagnosis in chemical processes, 2000.
- Shokry, A., Francesca, A., Patricia, V. (2015). Modeling and Simulation of Complex Nonlinear Dynamic Processes Using Data Based Models: Application to Photo-Fenton Process. Catalunya University, Spain. Doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63578-5.50027-X>.
- Statista (2021). <https://es.statista.com/estadisticas/1092130/produccion-tequila-mexico/#:~:text=En%202021%2C%20se%20produjeron%20cerca,pa%C3%ADs%20aument%C3%B3%20en%20un%20106%25>. Consultado el 15 de Mayo de 2021.
- Vanrolleghem PA. 1995. Sensors for anaerobic digestion: An overview. In *Proc. Int. Workshop on Monitoring and Control of Anaerobic Digestion processes*. pp. 1–7.
- Velázquez-Camilo, O., Bolaños-Reynoso, E., Rodríguez, E., & Alvarez-Ramirez, J. (2010). Fractal analysis of crystallization slurry images. *Journal of crystal growth*, 312(6), 842-850.
- Wang, L., Huang, Z., Wang, B., Ji, H., & Li, H. (2012). Flow pattern identification of gas–liquid two-phase flow based on capacitively coupled contactless conductivity detection. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 61(5), 1466-1475.
- Wang, Y., & Li, H. (2020). Industrial process time-series modeling based on adapted receptive field temporal convolution networks concerning multi-region operations. *Computers & Chemical Engineering*, 106877.
- Yin, S., Ding, S. X., Zhang, P., Hagahni, A., & Naik, A. (2011). Study on modifications of PLS approach for process monitoring. *IFAC Proceedings Volumes*, 44(1), 12389-12394.
- Yuan, X., Ou, C., Wang, Y., Yang, C., & Gui, W. (2020). A novel semi-supervised pre-training strategy for deep networks and its application for quality variable prediction in industrial processes. *Chemical Engineering Science*, 217, 115509.
- Zenteno-Catmaxca, R., Moguel-Castañeda, J. G., Rivera, V. M., Puebla, H., & Hernandez-Martinez, E. (2021). Monitoring a chemical reaction using pH measurements: An approach based on multiscale fractal analysis. *Chaos, Solitons & Fractals*, 152, 111336. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111336>.
- Zhang, W. H., & Li, X. (2009). Origin of pressure fluctuations in an internal-loop airlift reactor and its application in flow regime detection. *Chemical engineering science*, 64(5), 1009-1018.
- Zhijiang, L., Wang, Y. & Ma X. (2022). Analytical Solution to Partial Least Squares. Doi: 10.2139/ssrn.4659233

- Zhou, D., Li, G., & Qin, S. J. (2010). Total projection to latent structures for process monitoring. *AIChE Journal*, 56(1), 168-178.
- Zhou, Y. (2004). Data driven process monitoring based on neural networks and classification trees. Texas A&M University.

“Lis de Veracruz: Arte, Ciencia, Luz”

www.uv.mx