



ISSN: 2992-8532



SOAIQ

AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA

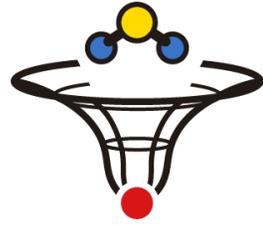
Vol. 1, No. 1

EVENTO VIRTUAL DEL 18 AL 20 DE MAYO DE 2022

MEMORIAS

II SIMPOSIO DE OPTIMIZACIÓN APLICADA A
LA INGENIERÍA QUÍMICA

II SOAIQ

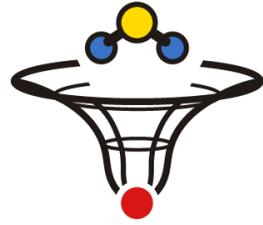


AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA

Vol. 1, No. 1

Memorias del II Simposio de Optimización Aplicada a la
Ingeniería Química

AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA, Vol. 1. No. 1, octubre 2022, es una publicación anual de la Academia Mexicana de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química A.C. Circuito Casco de Hacienda 21, Col. Tirio, C.P. 36259, Guanajuato, Guanajuato, México. Tel. 4736905805. Página electrónica de la publicación: <https://amoaiq.com/publicaciones/> y dirección electrónica: optimizacioniq@amoaiq.com. Editor responsable: Dr. Fernando Israel Gómez Castro. Certificado de Reserva de Derechos al Uso Exclusivo de Título No. 04-2022-080817362400-102, ISSN XXXX-XXXX, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsables de la última actualización de este número: Dr. Fernando Israel Gómez Castro, Dr. Juan Gabriel Segovia Hernández, Dra. Claudia Gutiérrez Antonio, Dr. Eduardo Sánchez Ramírez, Dr. José Ezequiel Santibañez Aguilar, Academia Mexicana de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química A.C. Circuito Casco de Hacienda 21, Col. Tirio, C.P. 36259, Guanajuato, Guanajuato, México. Fecha de última actualización: 25 de septiembre de 2022. Tamaño del archivo: 20.2 MB.



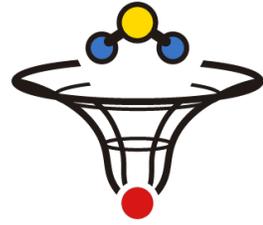
BIENVENIDA

La optimización es un área en constante evolución. El desarrollo de estrategias que permitan encontrar la mejor solución a una diversidad de problemas es una tarea que prevalece en los tiempos actuales, dada la creciente complejidad de los modelos que permiten representar los sistemas, así como la disponibilidad de mayor capacidad de cómputo. Las Ingenierías, y en lo particular la Ingeniería Química, no son una excepción. Ya sea que se representen con modelos mecánicos tradicionales o con modelos basados en datos, los sistemas que encontramos dentro de las distintas ramas de la Ingeniería Química son representados por modelos complejos, no lineales, en muchos casos de naturaleza mixta-entera, entre otras características que hacen necesario contar con estrategias adecuadas para su optimización, con la meta clara de alcanzar óptimos globales. Por otra parte, tópicos como la optimización multiobjetivo, la optimización bajo incertidumbre y la optimización dinámica continúan en desarrollo, permitiendo realizar análisis más detallados y, en algunos casos, más cercanos al comportamiento real de los sistemas.

Una de las áreas fundamentales en el desempeño del Ingeniero Químico está directamente asociada a los procesos químicos, los cuales han experimentado un avance considerable desde hace algunas décadas. La optimización se ha convertido en una herramienta muy utilizada en la industria, debido a la necesidad de hacer más eficientes los procesos ante los constantes cambios que sufren los diversos factores que influyen en la factibilidad de los procesos productivos; entre estos se incluyen el aumento de la demanda de productos, la fuerte competencia caracterizada por la elevada variabilidad de los precios, las restricciones de productos, los elevados costos de producción, la escasez de recursos naturales, entre otros. Así, es indispensable el estudio y consolidación de sofisticados métodos y estrategias de optimización, que buscan explotar el máximo potencial de los procesos. La mayoría de las empresas petroleras y petroquímicas utilizan herramientas de optimización, dada su elevada escala de producción, la gran cantidad de productos generados y su alto consumo de energía. Esto permite que pequeñas mejoras en la eficiencia de los procesos se traduzcan en mejoras significativas en cuanto a diversos objetivos propios de la industria. La obtención de mejores resultados depende, en gran medida, de tomar las decisiones correctas en el momento adecuado; por ello, las herramientas de optimización son indispensables.

La comunidad de Ingenieros Químicos, así como Ingenieros de ramas afines, que aplica o desarrolla metodologías de optimización para la solución de una gran variedad de problemas ha crecido de manera importante en las últimas décadas. Con esto en mente, surge la propuesta de generar un espacio donde los especialistas en optimización y sus aplicaciones a la Ingeniería Química y ramas afines, así como estudiantes que desarrollen proyectos en dichas áreas, puedan intercambiar ideas y generar colaboraciones, lo cual a su vez permita el crecimiento de esta área y la conformación de redes en México y Latinoamérica. De esta manera surge el Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química – SOAIQ.

En esta segunda edición del Simposio se recibieron un total de 42 trabajos, los cuales fueron clasificados en cuatro áreas principales: Optimización Determinística Aplicada, Optimización Estocástica Aplicada, Optimización Estadística Aplicada y Nuevas Técnicas de Optimización. Asimismo, se contará con la participación de expertos reconocidos internacionalmente, quienes compartirán temas de interés asociados a las distintas ramas de la optimización, así como sus perspectivas a futuro en el área. Adicionalmente, se llevará a cabo un curso impartido por asesores de AspenTech México, a quienes se agradece profundamente su participación en este evento. Finalmente, se contará con un panel de expertos quienes discutirán el impacto de la contingencia sanitaria ocasionada por el virus SARS-CoV-2 sobre las cadenas de suministro.



Este evento ha sido organizado con el objetivo de proveer a la comunidad un espacio para la interacción con los distintos grupos que trabajan áreas afines. En esta ocasión, con el fin de salvaguardar la seguridad de los participantes ante un escenario esperanzador, pero aún con incertidumbre, se decidió realizar el evento en modalidad virtual, aprovechando las herramientas tecnológicas disponibles. Sin embargo, esperamos en próximas ediciones estar en condiciones para recibir de manera presencial a los participantes. Nos resulta satisfactorio saber de la diversidad de instituciones de educación superior y centros de investigación, tanto nacionales como internacionales, que se han interesado en este evento. Esperamos que las actividades que se han preparado cumplan con su objetivo, y que sean del total agrado de quienes conforman esta comunidad. Sean todos bienvenidos.

Dr. Fernando Israel Gómez Castro

Presidente del Comité Organizador

Dr. Juan Gabriel Segovia Hernández

Presidente del Comité Técnico



CONSEJO DIRECTIVO 2021 - 2022

Fernando Israel Gómez Castro
Universidad de Guanajuato
Presidente
fgomez@ugto.mx

Juan Gabriel Segovia Hernández
Universidad de Guanajuato
Vicepresidente
gsegovia@ugto.mx

Claudia Gutiérrez Antonio
Universidad Autónoma de Querétaro
Secretaria
claudia.gutierrez@uaq.mx

Eduardo Sánchez Ramírez
Universidad de Guanajuato
Tesorero
eduardo.sanchez@ugto.mx

José Ezequiel Santibañez Aguilar
Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey
Vocal de Investigación
santibanez.ezequiel@tec.mx



COMITÉ ORGANIZADOR II SOAIQ

Fernando Israel Gómez Castro

Juan Gabriel Segovia Hernández

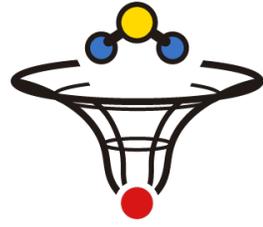
Claudia Gutiérrez Antonio

Eduardo Sánchez Ramírez

José Ezequiel Santibañez Aguilar

COLABORADORES

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (AMIDIQ, A.C.)



COMITÉ TÉCNICO II SOAIQ

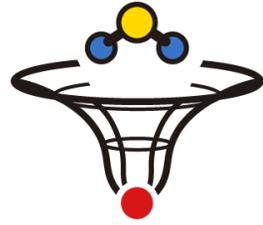
Juan Gabriel Segovia Hernández
Presidente

Adrián Bonilla Petriciolet
Alicia Román Martínez
Antioco López Molina
Claudia Gutiérrez Antonio Eduardo
Sánchez Ramírez Fabricio Nápoles
Rivera
Fernando Israel Gómez Castro José
Ezequiel Santibañez Aguilar José
María Ponce Ortega
Vicente Rico Ramírez



COMITÉ REVISOR II SOAIQ

Abraham Escobedo Moratilla
Ana Angélica Feregrino Pérez
Antonio Flores
Aurora del Carmen Munguía López
César Ramírez Márquez
Christian O. Díaz-Ovalle
Divanery Rodríguez Gómez
Dulce Celeste López Díaz
Francisco López Villarreal
Gabriel Contreras Zarazúa
Gerardo Geovanni Esquivel Patiño
Ilse María Hernández Romero
J. Carlos Cárdenas Guerra
Jaime David Ponce Rocha
Javier Tovar Facio
Jazmín Cortez González
Jorge Luis Tena García
José Ezequiel Santibañez Aguilar
Juan Ramón Lizárraga Morazán
Julián Cabrera Ruiz
Julio Armando de Lira Flores Luis
Fabián Fuentes Cortés
Luis Fernando Lira Barragán
Luis Germán Hernández Pérez Luis
Gerónimo Matallana Pérez Luis
Miguel Valenzuela Gómez
Mariano Martín
Oscar Andrés Prado Rubio
Pablo Tenoch Rodríguez González
Pascual Eduardo Murillo Alvarado
Ramón González Bravo
Ricardo Morales Rodríguez
Rodolfo Murrieta Dueñas
Salvador Hernández Castro
Sergio Iván Martínez Guido
Zeferino Gamiño Arroyo



ÍNDICE

OPTIMIZACIÓN DETERMINÍSTICA APLICADA	11
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA APLICADA.....	79
OPTIMIZACIÓN ESTADÍSTICA APLICADA	181
NUEVAS TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN	209



OPTIMIZACIÓN DETERMINÍSTICA APLICADA

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE
OPTIMIZACIÓN APPLICADA
A LA INGENIERÍA QUÍMICA

AMQAR

Configuración óptima de la red de producción de biodiésel sustentable a partir de aceite de larva de mosca soldado

Dulce María Aguilar-Murguía ^a, Claudia Gutiérrez-Antonio ^b, Sergio Iván Martínez-Guido ^{b*}, Manuel Toledano-Ayala ^b, Araceli Guadalupe Romero-Izquierdo ^b, Juan Fernando García-Trejo ^b

^aUniversidad Michoacana de San Nicolamoás de Hidalgo, Morelia 58030, México

^bUniversidad Autónoma de Querétaro, Santiago de Querétaro 76010, México

RESUMEN

En la última década se han propuesto alternativas de des-carbonización en el sector transporte, las cuales incluyen el uso de vehículos eléctricos, así como de biocombustibles en motores de combustión interna. Ambas alternativas contribuyen a la seguridad energética y la mitigación del cambio climático. Particularmente, el biodiésel ha resultado ser uno de los biocombustibles alternos de gran interés, dado que puede usarse en mezclas con su contraparte fósil. Sin embargo, todas las plantas de producción instaladas emplean como materias primas aceites animales y vegetales (comestibles y no comestibles); estos insumos impactan en el costo total de producción, que puede ser hasta 1.5 veces el costo del diésel convencional. Ante ello, Jung et al. (2022) proponen el uso de aceite de larva de mosca soldado negra, dado su alto contenido de grasa, velocidad reproductiva, y ciclos de vida cortos. Adicionalmente, estos insectos pueden alimentarse con residuos orgánicos, lo cual los convierte en una fuente de aceite de bajo impacto ambiental. Bajo este contexto, en el presente trabajo se propone el diseño y configuración de una cadena de suministro capaz de responder frente a la demanda de un combustible sustentable a nivel nacional. Para ello se formuló un modelo de optimización matemática que considera aspectos el suministro de residuos orgánicos (alimenticios principalmente), transporte, distribución, almacenamiento, así como localización de los nodos de producción. Como funciones objetivo se establecen la maximización de rendimiento y la minimización de emisiones. Los resultados muestran que es posible satisfacer el 24% de la demanda nacional de biodiésel en México en una mezcla B20, si los residuos alimenticios generados a nivel nacional son transformados mediante unidades revalorizadoras. Dichas unidades generan un rendimiento económico de \$3,370,043,427.49 MXN/año, y 18,030,295 toneladas CO₂/año.

Palabras clave: Cadena de suministro, optimización matemática, biocombustibles, economía circular.

INTRODUCCIÓN

A nivel global, la seguridad energética y la mitigación del cambio climático son los dos principales motores de la transformación del sistema energético actual. Bajo este contexto, la sustitución de combustibles fósiles consumidos por el sector transporte por fuentes alternas

como la solar, eólica, biomasa han recibido la mayor atención dada la creciente demanda y los problemas asociados a esta necesidad (Im-orb *et al.*, 2021).

Dentro de las soluciones propuestas los biocombustibles generados a partir de biomasa han destacado como soluciones energéticas alternas para el sector transporte. Concretamente el biodiésel, ha sido introducido como una alternativa con la que es posible reducir aproximadamente el 40% de las emisiones generadas por la quema del diésel convencional; así como una reducción del 78% de dióxido de carbono (CO₂) emitido (Syafiuddin *et al.*, 2020). De acuerdo con Marchini-Fonseca *et al.* (2019) el biodiésel es un biocombustible producido principalmente a partir de aceites vegetales o grasas animales, el cual puede ser usado en automotores con mínimas modificaciones. Este biocombustible se clasifica en 4 generaciones, sin embargo, hoy en día la mayor cantidad de biodiésel producido alrededor del mundo es de primera y segunda generación, lo que conlleva a altos costos de producción y competitividad con el uso de suelo.

Por otro lado, algunas investigaciones asociadas a la producción de biodiésel a partir de aceites no comestibles como los obtenidos a partir de *jatropha curcas*, microalgas y aceites residuales han sido foco de atención alrededor de mundo; sin embargo, de acuerdo con Nguyen *et al.* (2017) todas estas rutas presentan aún barreras técnicas, viabilidad económica, sustentabilidad, o la misma falta de promoción de una economía circular, en menor o mayor medida para cada materia prima estudiada. Antes estas inminentes desventajas presentadas por las materias primas en la producción de biodiésel, algunos autores han propuesto el uso de aceites generados por insectos, particularmente el aceite extraído a partir de larva de mosca soldado negra (*Hermitia illucens*). En este sentido, Surendra *et al.* (2016) y Nguye *et al.* (2018A) proponen que existen muchas ventajas vinculadas al uso de aceite de larva de mosca soldado negra (HL), debido a su alto contenido de grasa, alta velocidad reproductiva, y ciclos de vida cortos; aunado a la habilidad de consumir diversos tipos de componentes orgánicos en su mayoría de desecho o residuos sin ninguna aplicación de valorización, siendo esta su valiosa ventaja sostenible, frente a las otras materias primas.

Así mismo, Jung *et al.*, (2022), definen que el uso de aceite de HL no requiere del uso de tierras fértiles, no compite con otros procesos de producción alimenticia, no contribuye con la huella hídrica generada por otras materias primas (producción de algas o cultivos), además de que es posible generar altos volúmenes de aceite en espacios reproductivos pequeños, resultando en la generación de biomasa con un 35-40% de contenido de grasa a partir de la eliminación de diversos residuos (Feng *et al.*, 2018). Sin embargo, todos los estudios presentados hasta hoy se han enfocado solamente a la factibilidad en la producción, ninguno de estos a integrado un análisis en el sentido de una configuración de la cadena de suministro, evaluado aspectos de rentabilidad, factibilidad a un caso de estudio en particular, con el que se puede estimar la resiliencia del sistema a nivel general, así como de todas las posibles soluciones (configuraciones) de este tipo de alternativas.

Por ello en el presente trabajo se propone el análisis de la configuración óptima de la cadena de suministro de producción y distribución de biodiésel, mediante la integración de biorefinerías a base de aceite de larva de mosca soldado negra.

METODOLOGÍA

Para obtener la configuración óptima de la red de producción de biodiésel sustentable a partir de aceite de larva de mosca soldado, se diseñó una superestructura de la cadena de suministro para la producción de biodiésel a partir de larva de mosca soldado, considerando la recolección de la materia prima (residuos orgánicos), centros de acopio, distancias, localización de centros de biotransformación, así como líneas de distribución.

Posteriormente fue formulado un modelo matemático, integrando todas las ecuaciones que representan cada una de las etapas en la red de producción y distribución, generado con ello un estudio general del sistema real, mismo que fue codificado en GAMS. Los datos alimentados al modelo fueron obtenidos de parámetros actuales de México, siendo este el caso de estudio evaluado. El sistema evaluado consideró en primera estancia la biotransformación de los residuos orgánicos generados a nivel nacional a través de la integración de larvas de mosca soldado negra; posteriormente el aceite obtenido de dichos insectos es usado como materia prima para la producción de biodiésel de segunda generación. Una vez que se cuenta con el biodiésel producido, este es integrado a la cadena convencional de distribución como mezcla B20.

RESULTADOS

El modelo matemático propuesto fue codificado en la plataforma de GAMS®, este incluye 47,558 restricciones, 272,069 variables libres, y 192 variables discretas. El cual fue resuelto como Modelo Mixto Entero Lineal usando CPLEX como resolutor. Cada ensayo se corrió en una AMD® A10 con 2.60 GHz de CPU y 8 GB de RAM. El tiempo de resolución entre cada ejecución fue de 2.36 segundos.

Después de realizar los análisis con respecto a la maximización del rendimiento económico y minimizando el impacto ambiental, se obtuvieron los extremos del sistema (el máximo rendimiento y el mínimo impacto ambiental). Adicionalmente, se generaron dos escenarios más los cuales representan soluciones compromiso entre ambas funciones objetivo (véase Figura 1). Es posible observar en el diagrama Pareto obtenido que el escenario A es la solución con el más alto rendimiento económico alcanzado aproximadamente 90.86% superior al calculado en el escenario D. Sin embargo, el escenario D representa la solución ambientalmente más factible con 15,394,217 toneladas de CO₂/año aproximadamente 14.62% menos emisiones que las generadas en el escenario A. Cabe mencionar que los puntos B y C, no incrementan en gran medida la cantidad de emisiones producidas en el escenario D, sin embargo, sí se adquiere un mayor beneficio económico.

Particularmente, pese a que no es posible satisfacer el 100% de la demanda nacional de diésel convencional con la mezcla propuesta (B20), si es posible observar una disminución de generación de CO₂ en comparación con el uso de diésel convencional. En este sentido, la obtención de biodiésel puro para el escenario A es de 561,976 toneladas/año lo que en una mezcla B20 se traduce en 2,809,878 toneladas/año, valor que representa aproximadamente el 24% de la demanda total de diésel en México.

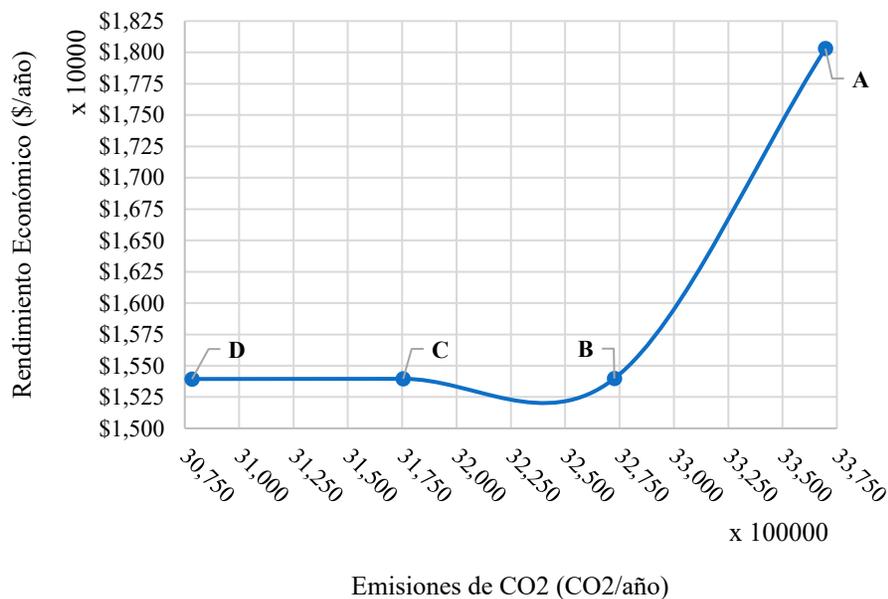


Figura 1. Curva Pareto ejemplificando las emisiones de CO₂ y el rendimiento económico obtenido por año.

Tabla 1. Análisis de los 4 escenarios establecidos

	Escenario			
	A	B	C	D
Rendimiento económico	\$3,369,730,683/año	\$3,272,605,738/año	\$3,175,480,793/año	\$3,078,355,849/año
Emisiones de CO₂	18,030,295 ton/año	15,397,449 ton/año	15,395,686 ton/año	15,394,217 ton/año
Plantas de Biotransformación	10	4	9	12
Biorefinerías	3	3	8	12

En términos ambientales la producción de biodiésel a partir de aceite de larva de mosca muestra que se generan aproximadamente 12 kg de CO₂ por cada tonelada de materia prima

producida (aceite de larva de mosca), valor que representa 83% menos emisiones que las que se generan por el uso del aceite residual de cocina para el mismo fin, y 98.8% menos emisiones que las generadas por el uso de aceite de ricino. Adicionalmente, el proceso total de producción de biodiésel a partir de aceite de larva de mosca, genera aproximadamente 562 kg de CO₂ por cada tonelada de biodiésel consumida, es decir 41.21% menos emisiones que el biodiésel quemado a partir de aceite residual de cocina, y 78% emisiones que el biodiésel quemado a partir de aceite de ricino, confirmando lo reportado por la literatura.

Comparando los costos totales de cada escenario se obtiene un incremento de 28.92% con respecto al escenario A, esto se explica de acuerdo a los costos que genera el aumento de instalaciones de plantas de biotransformación así como de plantas de producción de biodiésel, pues en el escenario A se tiene un total de 13 plantas (véase Tabla 1), de las cuales 10 son plantas de biotransformación y las restantes de producción de biodiésel, mientras que en el escenario B se obtiene un total de 7 plantas de las cuales 4 son plantas de biotransformación y las restantes de producción de biodiésel, mientras que en el escenario C se cuenta con 9 plantas de biotransformación y 9 plantas de producción de biodiésel y finalmente, el escenario que mayor plantas instala es el D, donde se obtiene un total de 24 plantas, de las cuales 12 son de biotransformación y 12 de producción de biodiésel.

Cabe destacar que en tanto las ventas, ganancias y generación de trabajos en cada uno de los escenarios se calculan considerando en primera instancia los residuos orgánicos y ya que en cada uno de los escenarios se emplean todos los residuos, el resultado en estos aspectos es indiferente a cada escenario. Es así que la variación en cada escenario recae en los costos propios de cada uno, estos valores rondan entre 15-19% del total de cada uno de los escenarios.

CONCLUSIONES

En el presente se plantea un panorama general sobre la revalorización de residuos orgánicos mediante herramientas biológicas, la aplicación de estas últimas puede generar no sólo beneficios económicos sino también sociales y ambientales. Cada uno de estos beneficios que son mostrados en cada una de las soluciones compromiso evaluadas y presentadas.

Es posible observar que es necesario invertir para poder lograr por un lado la revalorización de residuos que hoy en día son tirados en vertederos generando un problema ambiental más grave. Esta estrategia benéfica por partida doble ambientalmente, puesto que, aunado a evitar las emisiones por disposición en vertedero de dichos residuos, estos pueden generar productos que se integran a la generación de energéticos sustentables como lo es el caso de la producción de biodiésel.

Por otro lado, es posible identificar que las cadenas de suministro evaluadas de manera nacional, contribuyen al incremento de emisiones ambientales, por lo que proponer cadenas estatales, propicia a evitar el impacto ambiental.

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022.

Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar

© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

El modelo generado puede ser aplicado a diferentes casos de estudios, ya sean municipal, estatal o nacional, el cual puede ser una herramienta capaz de generar soluciones atractivas para los tomadores de decisiones.

Bibliografía

Feng, W., Qian, L., Wang, W., Wang, T., Deng, Z., Yang, F., Xiong, J., Wang, C. (2018). Exploring the potential of lipids from black soldier fly: New paradigm for biodiesel production (II) Extraction kinetics and thermodynamic. *Renewable Energy*. 119, 12-18. 10.1016/j.renene.2017.11.076

Im-orb, K., Arpornwichanop, A., & Simasatitkul, L. (2021). Process intensification approach for design and optimization of biodiesel production from palm fatty acid distillate. *Biotechnology Reports*, 30, e00622. <https://doi.org/10.1016/j.btre.2021.e00622>.

Jung, S., Jung, J.M., Tsang, Y.F., Bhatnagar, A., Chen, W.H., Lin, K.Y. A., Kwon, E.E. (2022). Biodiesel production from black soldier fly larvae derived from food waste by non-catalytic transesterification. *Energy*. 238, 121700. 10.1016/j.energy.2021.121700

Marchini-Fonseca, J., Teleken, J.G., de-Cinque-Almeida, V., da-Silva, C. (2019). Biodiesel from waste frying oils: Methods of production and purification. *Energy Conversion and Management*. 184, 205-218. 10.1016/j.enconman.2019.01.061

Nguyen, H. C., Liang, S. H., Doan, T. T., Su, C. H., & Yang, P. C. (2017). Lipase-catalyzed synthesis of biodiesel from black soldier fly (*Hermetica illucens*): Optimization by using response surface methodology. *Energy Conversion and Management*, 145, 335–342. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.05.010>

Nguyen, H. C., Liang, S. H., Li, S. Y., Su, C. H., Chien, C. C., Chen, Y. J., & Huong, D. T. M. (2018A). Direct transesterification of black soldier fly larvae (*Hermetia illucens*) for biodiesel production. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 85, 165–169. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2018.01.035>

Surendra K, Olivier R, Tomberlin JK, Jha R, Khanal SK. (2016). Bioconversion of organic wastes into biodiesel and animal feed via insect farming. *Renewable Energy*. 98, 197-202. 10.1016/j.renene.2016.03.022.

Syafiuddin, A., Chong, J.H., Yuniarto, A., Hadibarata, T. (2020). The current scenario and challenges of biodiesel production in Asian countries: A review. *Bioresources Technology Reports*. 12, 100608. 10.1016/j.biteb.2020.100608

Análisis de la Resiliencia en el Nexo Agua-Energía-Alimentos

Jesús Manuel Núñez-López ^a, José María Ponce-Ortega ^a.

^a Departamento de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Mich., 58060, México.

jesus_2392@hotmail.com

RESUMEN

Debido al consumo insostenible de recursos y al cambio climático, cada vez es más difícil mantener la seguridad del nexo agua-energía-alimentos, especialmente en regiones donde se cuenta con baja disponibilidad de estos recursos. Por lo tanto, la necesidad de diseñar sistemas más resilientes es clave para el desarrollo sostenible [1]. Cuantificar la resiliencia en sistemas integrados como el nexo agua-energía-alimentos es una forma útil de identificar áreas vulnerables del sistema [2] y, por lo tanto, tomar medidas correctivas para reducir la incidencia de interrupciones de los servicios básicos. Por lo tanto, este trabajo presenta un enfoque sistemático para evaluar la resiliencia del nexo agua-energía- alimentos en regiones áridas y semiáridas. A través del enfoque propuesto, es posible evaluar cómo las fallas del sistema provocadas por desastres naturales; como huracanes, bajas temperaturas y sequías afectan el suministro de agua, energía y alimentos. Se propone un índice de resiliencia, que involucra costos de penalización asociados a las fallas en el suministro de recursos del sistema. Para aplicar el enfoque propuesto, se evaluaron escenarios correspondientes a condiciones pasadas y proyecciones futuras para dos ciudades de México. Los resultados muestran que en los próximos años el nexo será vulnerable a eventos extremos si no cambian las condiciones para el manejo de los recursos. El enfoque propuesto permite estimar las pérdidas económicas asociadas a la existencia de desastres naturales, convirtiéndolo en una herramienta eficiente en la toma de decisiones para implementar estrategias y mejorar la seguridad del nexo agua-energía- alimentos.

Palabras clave: Resiliencia, Nexo agua-energía-alimento, Desastres naturales, Riesgo.

INTRODUCCIÓN

Actualmente, uno de los problemas más grande en el mundo es satisfacer las necesidades básicas para la vida cotidiana, como lo son el agua, la energía y los alimentos; esto principalmente debido a la urbanización, las limitaciones de los recursos, el manejo inadecuado de los mismos, la política, las estructuras gubernamentales, y el impacto que ha tenido el cambio climático. El nexo agua-energía-alimentos (WEFN) surge con el potencial de estudiar la relación entre el agua, la energía y los alimentos, y promover la seguridad y la eficiencia de los recursos para garantizar la sostenibilidad urbana y facilitar la adaptación al cambio climático. La seguridad del nexo agua-energía-alimentos se ha convertido en una gran preocupación debido a las incertidumbres futuras, ya que puede afectar potencialmente la productividad de los recursos [3]; por lo tanto, abordar el efecto que tienen los desastres naturales sobre el nexo agua-energía-alimentos es un desafío crucial para aquellas ciudades donde este nexo es de suma importancia. Recientemente, se ha incrementado la frecuencia en la ocurrencia de diferentes desastres naturales (heladas, sequías e inundaciones). Estos eventos han puesto en riesgo la producción y la

disponibilidad de los recursos; por lo tanto, la resiliencia es un factor crítico que debe incluirse en la evaluación del nexo para la sostenibilidad urbana.

El término resiliencia se ha empleado en varias áreas, pero en general, la resiliencia tiene como objetivo resistir y adaptarse a una perturbación y recuperar su estado normal [4]. En primera instancia, se evaluaba la resiliencia mediante métodos cualitativos, pero últimamente se ha prestado especial atención al desarrollo de métodos cuantitativos principalmente en el área de ingeniería de procesos [5]. La cuantificación de la resiliencia en los sistemas de optimización ha traído grandes beneficios ya que permite identificar los escenarios donde se pueden presentar algunas fallas que disminuyen el rendimiento del sistema y así poder tomar decisiones sobre cómo abordar el problema antes, durante o después del diseño del sistema. Esto muestra la importancia de implementar marcos de planificación resilientes en comparación con los métodos de planificación convencionales.

METODOLOGÍA

Para resolver el problema planteado se propuso la siguiente metodología, en donde se presenta un esquema general para el análisis de la resiliencia en sistemas de ingeniería de procesos:

1. **Definir los límites del sistema.** Entradas y salidas de cada unidad de operación que conforman al sistema deben ser incluidos.
2. **Desarrollar una matriz tri-dimensional.** Fijar periodos de tiempo (días, semanas, meses, años), los servicios funcionales del sistema (recursos, ej. Agua, energía, alimentos) y los posibles modos de falla que puedan afectar al sistema (ej. Errores aleatorios, errores de personal, desastres naturales).
3. **Formular una matriz bi-dimensional.** Asignando costos de penalización para cada uno de los servicios funcionales en cada uno de los periodos de tiempo seleccionado, así como también para cada posible modo de falla; lo cual permite reducir la matriz tri-dimensional a una matriz de 2×2 .
4. **Formular el modelo matemático.** Formular el modelo matemático, con sus respectivas funciones objetivo y restricciones.
5. **Recolectar información.** Para un caso de estudio representativo del problema a analizar.
6. **Codificar el modelo matemático.** Utilizar un software donde sea posible obtener una solución.
7. **Incluir las ecuaciones para el análisis de la resiliencia en el modelo matemático.** Incluir costos impuestos, índices de riesgo, índices de resiliencia.
8. **Maximizar la resiliencia del sistema.**

RESULTADOS

Se implementó la metodología propuesta para evaluar la resiliencia del nexo agua-energía-alimentos. En las **Figuras 1 y 2** se muestran las matrices tridimensionales para Hermosillo y Monterrey, respectivamente. Los servicios funcionales hacen referencia a la cantidad de agua (m^3), energía (MW), y alimentos (Ton) requeridos por las ciudades mostradas en los casos de estudio, los cuales son presentados en las matrices tri-dimensionales. Cinco diferentes años fueron seleccionados, correspondientes a años previos y a proyecciones futuras. Debido al aumento en la frecuencia de desastres naturales en los casos propuestos, se consideraron como posibles modos de falla:

huracanes, bajas temperaturas y sequías. Nótese que existe una variación en los servicios funcionales a través de cada año de estudio. Sin embargo, el valor del servicio funcional para cada modo de falla es el mismo, ya que se toma en consideración el valor máximo de servicio funcional que se encuentra en riesgo en cada periodo de tiempo.

Alimento	654,410	694,140	769,809	887,214	958,927	
	654,410	694,140	769,809	887,214	958,927	
	654,410	694,140	769,809	887,214	958,927	
Energía	63,512	71,924	89,054	93,507	98,183	
	63,512	71,924	89,054	93,507	98,183	
	63,512	71,924	89,054	93,507	98,183	
Agua	6,612,000	7,027,000	7,478,760	7,990,843	8,232,990	Huracán Baja Temp. Sequía
	6,612,000	7,027,000	7,478,760	7,990,843	8,232,990	
	6,612,000	7,027,000	7,478,760	7,990,843	8,232,990	
	2013	2015	2019	2025	2030	
Periodo de Tiempo						

Figura 1. Matriz tri-dimensional para el caso de estudio de Hermosillo

Alimento	1,195,117	1,275,160	1,406,085	1,579,804	1,760,536	
	1,195,117	1,275,160	1,406,085	1,579,804	1,760,536	
	1,195,117	1,275,160	1,406,085	1,579,804	1,760,536	
Energía	139,615	145,594	159,552	165,886	171,997	
	139,615	145,594	159,552	165,886	171,997	
	139,615	145,594	159,552	165,886	171,997	
Agua	2,067,300	2,069,000	2,149,000	2,236,688	2,366,724	Huracán Baja Temp. Sequía
	2,067,300	2,069,000	2,149,000	2,236,688	2,366,724	
	2,067,300	2,069,000	2,149,000	2,236,688	2,366,724	
	2013	2015	2019	2025	2030	
Periodo de Tiempo						

Figura 2. Matriz tri-dimensional para el caso de estudio de Monterrey

Posteriormente, cada uno de los servicios funcionales se multiplicó por su respectivo costo de penalización (**Tabla 1**) para construir las matrices bi-dimensionales para ambos casos (**Tablas 2 y 3**). Los valores de estos parámetros fueron reportados por diferentes organizaciones gubernamentales en México. En ambos casos puede observarse como los servicios funcionales varían a través de los años seleccionados, sin embargo, son los mismos para cada modo de falla. Debido a esto, se utilizó el índice de riesgo asociado a cada uno de los modos de falla. Los índices se calcularon en base a las metodologías establecidas por la CENEPRED. De acuerdo a las **Tablas 2 y 3**, se observa un incremento en la proyección a los costos impuestos del 41.52% y del 43.10%, para las ciudades de Hermosillo y Monterrey, respectivamente, del año 2019 al 2030. A pesar de que se espera un decremento en el costo energético en los próximos años, a consecuencia de que cada vez se utilizan más energías renovables (38.28% para ambas ciudades), la tendencia muestra un aumento en los costos del agua y de los alimentos, así como también en los requerimientos de los servicios funcionales por el incremento de la población. Se observa

un aumento del 22.33% en el costo de agua para la ciudad de Hermosillo, y del 20.40% para Monterrey, mientras que para el costo de los alimentos se espera un incremento del 15% para ambas ciudades.

Tabla 1. Costos de penalización para el nexo agua-energía-alimento en diferentes años

Año	Ciudad	Costo (\$US/unidad)		
		Agua (m ³)	Energía (MW)	Alimento (Ton)
2013	Hermosillo	1.378	47.0	289.0
	Monterrey	0.643	47.0	278.0
2015	Hermosillo	1.464	48.8	312.0
	Monterrey	0.724	48.8	289.5
2019	Hermosillo	1.836	47.8	340.5
	Monterrey	0.809	47.8	335.0
2025	Hermosillo	2.017	34.1	365.3
	Monterrey	0.891	34.1	357.8
2030	Hermosillo	2.246	29.5	391.1
	Monterrey	0.974	29.5	386.3

Tabla 2. Matriz bi-dimensional para Hermosillo

Hermosillo					
2013	2015	2019	2025	2030	
201,220,890	230,369,099	280,107,749	343,405,393	396,424,044	Sequía
201,220,890	230,369,099	280,107,749	343,405,393	396,424,044	Baja temp.
201,220,890	230,369,099	280,107,749	343,405,393	396,424,044	Huracán

Tabla 3. Matriz bi-dimensional para Monterrey

Monterrey					
2013	2015	2019	2025	2030	
340,133,705	377,761,763	480,403,602	572,902,791	687,474,157	Sequía
340,133,705	377,761,763	480,403,602	572,902,791	687,474,157	Baja temp.
340,133,705	377,761,763	480,403,602	572,902,791	687,474,157	Huracán

De acuerdo a la metodología con la que fueron calculados los índices, los niveles de riesgo no varían significativamente a través de los años, así como tampoco en las proyecciones a años futuros. Por lo tanto, el índice de riesgo para cada uno de los casos de estudio para cada posible falla es el mismo en todos los periodos de tiempo. Estos índices se muestran en las **Figuras 3 y 4**, donde MB es un riesgo muy bajo, B es un riesgo bajo, M es un riesgo medio, A es un riesgo alto y MA es un riesgo muy alto. Nótese que, aunque los índices de riesgo no varían a través de los años, es algo muy significativo porque este índice representa la probabilidad de ocurrencia de que algún modo de falla se presente en cada uno de los periodos de tiempo.

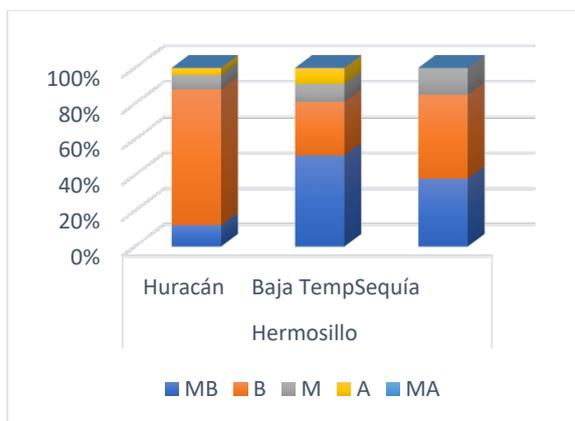


Figura 3. Índices de riesgo para Hermosillo

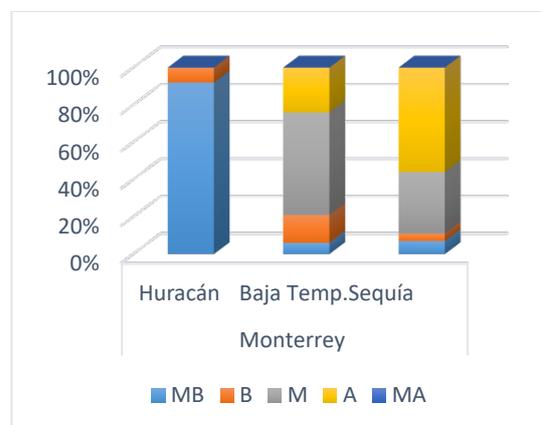


Figura 4. Índices de riesgo para Monterrey

Aunado a eso, los índices de resiliencia fueron calculados para cada caso de estudio. Como los índices de riesgo no varían a través de los años seleccionados, solo una matriz para cada caso fue calculada. Para ambos casos solo riesgo medio a muy alto fue considerado. En la **Tabla 4** podemos observar muchos valores de 1 para los índices de resiliencia del caso de Hermosillo, lo cual representa un escenario que puede reponerse completamente en caso de la ocurrencia de cualquier posible falla. Sin embargo, en caso de una sequía, existe un valor de 0.85 para un índice de resiliencia de riesgo medio (con una probabilidad del 15% de acuerdo a la **Figura 3**), lo cual nos indica que este fenómeno natural podría presentar importantes consecuencias en relación al nexo agua-energía- alimentos. Esto implica un costo impuesto de \$42,016,162 dólares para el año 2019 y un costo impuesto de 59,463,607 dólares para el año 2030, para poder satisfacer las necesidades de los recursos del nexo para la población. Similarmente, puedes observarse valores bajos en modos de falla para índices de riesgo bajo y muy bajo, debido a que son riesgos muy bajos, estos no han sido considerados.

Tabla 4. Índices de resiliencia para Hermosillo

	Hermosillo				
	MB	B	M	A	MA
Huracán	0.88	0.24	0.92	0.96	1.00
Baja temp.	0.49	0.70	0.90	0.91	1.00
Sequía	0.62	0.53	0.85	1.00	1.00

La **Tabla 5** muestra altos valores de resiliencia en caso de un huracán, lo cual nos dice que en esta ciudad no se presentaría ningún problema en caso de la ocurrencia de uno (probabilidad del 92% para un riesgo bajo). Sin embargo, en ambos en caso de que llegará a presentarse alguna baja temperatura o alguna sequía, existen valores debajo de 0.50, lo cual nos indica que estos fenómenos pueden alterar drásticamente la producción de energía o alimento, así como también la disponibilidad de agua en esta área. Además, Monterrey presenta una probabilidad del 55% para un riesgo medio en caso de escenarios con baja temperatura, y una probabilidad del 56% en riesgo alto en escenarios de sequía (**Figura 4**). El costo impuesto para Monterrey en 2019 en caso de que se presente una

baja temperatura es de \$264,221,981 dólares y, en caso de que exista una sequía de \$269,026,017 dólares. Mientras que la proyección para el año 2030 es de \$378,110,787 dólares en caso de baja temperatura y de \$384,985,528 dólares en casa de una sequía.

Tabla 5. Índices de resiliencia para Monterrey

	Monterrey				
	MB	B	M	A	MA
Huracán	0.08	0.92	1.00	1.00	1.00
Baja temp.	0.94	0.85	0.45	0.76	1.00
Sequía	0.93	0.96	0.67	0.44	1.00

CONCLUSIONES

En este trabajo, se presentó un enfoque sistematizado para analizar la resiliencia en la seguridad del nexo agua-energía, alimentos en áreas que presentan variaciones climáticas significativas a lo largo del año. Ambos casos de estudio presentan condiciones similares en cuanto al clima y la escasez de recursos, en ambas ciudades el problema principal se encuentra relacionado con la disponibilidad del agua. Por lo tanto, el factor más amenazante para la seguridad del nexo agua-energía alimentos es la intensificación de las sequías, producto de los cambios climáticos. Las ciudades analizadas son de gran importancia nacional; sin embargo, sus actuales sistemas de gestión y distribución de los recursos básico no son muy resilientes a las perturbaciones que puedan presentarse, ni al crecimiento que demanda la sociedad. El índice de resiliencia indica que en años futuros el nexo será vulnerable a eventos extremos, sí las condiciones no cambian; entonces, es esencial la implementación de acciones para mejorar la integración de los recursos. Además, la optimización de la gestión del agua en el sector agrícola es clave fundamental para disminuir el consumo de agua. En este sentido, diferentes tipos de riego podrían ayudar significativamente. Asimismo, se debe encontrar un equilibrio en la producción y el consumo de los alimentos para reducir sus desperdicios. Por otro lado, las energías renovables deben incluirse en el sector energético, para mejorar la seguridad y resiliencia del nexo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Moslehi S, Reddy T.A (2018). Sustainability of integrated energy systems: a performance-based resilience assessment methodology. *Appl Energy* 228:487-498. Hernández (Eds.), *Process Intensification: Design Methodologies* (pp. 277-325). De Gruyter.
- [2] Núñez-López J.M., Rubio-Castro E., Ponce-Ortega J.M. (2021). Involving resilience in optimizing the water-energy-food nexus at macroscopic level. *Proc Saf Environ Prot* 147:259-273.
- [3] Ribeiro, P.J.G., Pena Jardim Gonçalves, L.A. (2019). Urban resilience: A conceptual framework. *Sustain. Cities Soc.* 50, 101625. <https://doi.org/10.1016/J.SCS.2019.101625>
- [4] Ahmadi, S., Saboohi, Y., Vakili, A. (2021). Frameworks, quantitative indicators, characters, and modeling approaches to analysis of energy system resilience: A review. *Renew. Sustain. Energy Rev.* 144, 110988. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2021.110988>

Diseño y Optimización de una Cadena de Suministro Sustentable para la Producción de Furfural a partir de Residuos Agroindustriales

Gabriel Contreras Zarazúa^{a*}, Mariano Martin-Martin^b, José María Ponce Ortega^c, Juan Gabriel Segovia Hernández^c

Berenice Gómez-Almanza^a, Juan Luis Pérez-González^a, Rodrigo González-Gaona^{b,*}

^a*Conacyt, CIATEC A.C. Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitiva, Leon, Guanajuato, Mexico 37545.*

^b*Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Salamanca, Salamanca, España 37008*

^c*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolas de Hidalgo, Francisco J. Mújica SN, Morelia, Michoacán, México.*

^d*Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. gago_9014@hotmail.com*

RESUMEN

En este trabajo, se propone el modelado y optimización de una cadena de suministro para producción de furfural a partir de residuos lignocelulósicos de México. Este modelo matemático es escrito y optimizado en el software GAMS. Funciones objetivo económicas, de impacto ambiental y social fueron seleccionadas para evaluar la cadena de suministro. Los resultados de optimización indican, que la solución con el mejor equilibrio entre los objetivos consiste en una ganancia neta de 1000 millones de dólares por año, 19,000 empleos generados por años y 370 millones de eco puntos por año.

Palabras clave: Furfural, Cadena de suministro, Optimización determinística.

INTRODUCCIÓN

Actualmente, problemas como el cambio climático, contaminación y el agotamiento de recursos fósiles han forzado a la humanidad a buscar recursos renovables y a desarrollar tecnologías para su aprovechamiento. En ese sentido, los residuos lignocelulósicos generados de actividades agrícolas, parecen ser una alternativa interesante a recursos de origen fósil, debido a su gran disponibilidad. En el caso particular de México, se generan alrededor de 586 millones de residuos lignocelulósicos por año. Sin embargo, alrededor de solo el 5% de estos residuos son aprovechados. En años recientes se ha planteado que la producción de bioquímicos y combustibles a partir de residuos lignocelulósicos puede traer consigo importantes beneficios económicos, ambientales y sociales. En ese sentido, el furfural destaca como uno de los 30 químicos más importantes producidos a partir de biomasa., debido a su amplio número de aplicaciones y derivados. Algunas de las aplicaciones del furfural son; aceites lubricantes, producción de polímeros, pesticidas, medicamentos, entre otros (National Renewable Energy Laboratory (NREL), 2004). A pesar del potencial del furfural, algunos obstáculos, como la disponibilidad y estacionalidad de la biomasa, así como, su gran dispersión geográfica limita la producción a gran escala de este producto. Estos obstáculos pueden ser superados, mediante el diseño

y optimización simultánea de una cadena de suministro que considere estos parámetros. Una cadena de suministro correctamente diseñada y optimizada ofrece adaptabilidad para el suministro de materias primas a una biorrefinería y, al mismo tiempo, proporciona la capacidad de generar una programación y planificación operativa óptima para satisfacer la producción requerida (Santibañez-Aguilar et al., 2014).

Este trabajo propone el desarrollo y optimización de un modelo de cadena de suministro, para determinar la factibilidad de producir furfural a partir de desechos agrícolas en México a escala industrial. Se propone que la demanda de furfural sustituirá las importaciones de productos químicos necesarios para producir ácido tereftálico (AT), cual es utilizado en la fabricación de tereftalato de polietileno (PET), fibras de poliéster, resinas de moldeo, adhesivos. Con base en los criterios de sustentabilidad sugeridos por (García and You, 2015) se consideraron los aspectos económicos, ambientales y sociales como los indicadores más importantes para optimizar la cadena de suministro. El objetivo económico es la maximización del beneficio neto, mientras que los objetivos ambientales y sociales son la minimización del ecoindicador 99 y la maximización de los puestos de trabajo generados, respectivamente.

METODOLOGÍA

Este trabajo se propone el uso de los cuatro residuos lignocelulósicos más abundantes que se producen cada año en México. La selección de estas materias primas se realizó de acuerdo con los datos proporcionados por la Secretaría de Agricultura y desarrollo Rural (SAGARPA, 2019). Con base en los datos proporcionados por la SADER, los residuos lignocelulósicos más abundantes producidos cada año en México son: el rastrojo de maíz, la paja de trigo, el bagazo de sorgo y el bagazo de caña de azúcar. Para tomar en cuenta, la estacionalidad de la biomasa en cada sitio de cosecha, se realizó una planeación de inventario multi-periodo con un año como horizonte de tiempo. Este horizonte de tiempo se ha dividido en cuatro periodos de tiempo diferentes ($t \in T$), un periodo por cada estación del año. En la Figura 1 se muestra la superestructura considerada para la cadena de suministro. Con el objetivo de proporcionar una distribución más realista de la biomasa, se discretizó el territorio mexicano en 59 regiones diferentes. Esta discretización se realizó con base en los datos de población, donde las zonas con menos población tienen mayor disponibilidad de residuos lignocelulósicos, la disponibilidad de biomasa de cada zona se fijó de acuerdo con los datos proporcionados por la SAGARPA.

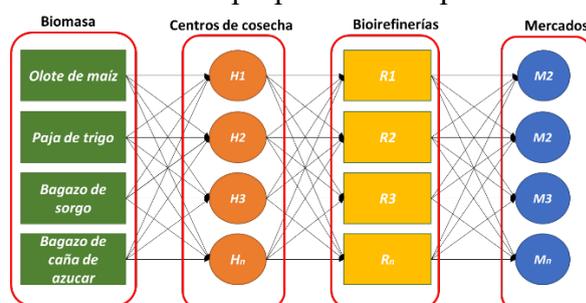


Figura 1. Super estructura para la cadena de suministro.

Para resolver el problema de forma más sencilla, se realizaron algunas suposiciones. El centroide de cada zona discretizada es el punto donde se encuentran todos los residuos agrícolas. Esta consideración puede hacerse más rigurosa, sólo aumentando las zonas de discretización, a fin de generar regiones más pequeñas. Adicionalmente, se considera que la biomasa se almacena en los centros de cosecha, lo que evita las pérdidas monetarias provocadas por el transporte de biomasa que no será utilizada debido a su degradación en las biorrefinerías. Finalmente, sólo se permite una biorrefinería por región, esto debido a que las biorrefinerías se caracterizan por el uso significativo de agua, esta suposición evita el uso excesivo de agua y al mismo tiempo, evita el agotamiento del total de la biomasa localizada en una región, evitando así la erosión del suelo. Las distancias de transporte y las ubicaciones de los centroides se calculan utilizando el método de la línea de rumbo, el cual, es un método común utilizado en la cartografía para estimar las distancias. Además, todos los parámetros requeridos por este método pueden obtenerse fácilmente de Google Maps.

MODELO MATEMÁTICO

En esta sección se presenta la formulación matemática de la cadena de suministro para la producción de furfural y las correspondientes funciones objetivo. El modelo matemático se formuló como un problema de programación lineal entera mixta (MILP).

Los balances de masa en los centros de cosecha pueden ser modelados usando la siguiente ecuación:

$$A_{i,j,t}^{RM} = A_{i,j,t-1}^{RM} (1 - \alpha_{j,t}) + b_{i,j,t}^{RM} - \sum_k S_{i,j,k}^{RM} \quad i, j \in J^{RM}, t \quad (1)$$

Donde, $A_{i,j,t}^{RM}$ y $A_{i,j,t-1}^{RM}$ son los niveles de inventario en los centros de cosecha, para un periodo tiempo específico. $\alpha_{j,t}$ representa el coeficiente de degradación de biomasa. $S_{i,j,t}^{RM}$ representa los envíos de biomasa j del centro de cosecha i a la biorrefinería k . Finalmente, $b_{i,j,t}^{RM}$ representa los residuos lignocelulósicos en el centro de cosecha i , este parámetro es calculado como se muestra a continuación:

$$b_{i,j,t}^{RM} \leq \varphi_{i,j,t} \quad i, j \in J^{RM}, t \quad (2)$$

Donde, $\varphi_{i,j,t}$ es la disponibilidad de residuos lignocelulósicos j en el centro de cosecha i en el periodo de tiempo t .

Los envíos de residuos lignocelulósicos del centro de cosecha a las plantas de producción de furfural (biorrefinerías), son restringidos de la siguiente manera:

$$\sum_{i,j,t} b_{i,j,t}^L \cdot y_{i,j,k} \leq \sum_t S_{i,j,k}^{RM} \leq \sum_t y_{i,j,k} \cdot b_{i,j,t}^U \quad i, j \in J^{RM}, k \quad (3)$$

Donde $b_{i,j,t}^L / b_{i,j,t}^U$ representan los límites inferiores/ superiores para los residuos lignocelulósicos del centro de cosecha. $y_{i,j,t}$ es la variable binaria para selección de un arco específico de envío $i \rightarrow k$ (envíos de centros de cosecha a biorrefinerías).

A fin de garantizar un continuo suministro de biomasa a las biorrefinerías de furfural, se ha planteado un inventario cíclico, donde los niveles de almacenamiento de biomasa se al inicio y final del año se mantienen constantes. Esto matemáticamente puede expresarse como sigue:

$$A_{i,j,t}^{RM} = A_{i,j,0}^{RM} - \sum_{t=1}^{T} \mathbb{E}^{RM}, t \quad (4)$$

Es importante mencionar que los balances de masa para las biorrefinerías fueron modelados de manera análoga.

Además, se han considerado tres criterios diferentes para evaluar el rendimiento de la cadena de suministro. Estos criterios son el beneficio neto, el impacto ambiental, que se calculan utilizando el Eco-indicador 99 y por último los puestos de trabajo generados en las diferentes actividades de la cadena de suministro, los puestos de trabajo generados se calculan utilizando la metodología Jobs and Economic Development Impact (JEDI), más información sobre estos objetivos se encuentra en (Santibañez-Aguilar et al., 2014). Matemáticamente, la función de los tres objetivos se puede expresar de la siguiente manera

$$\min Z = \{-\text{Profit}; EI99, -\text{Jobs}\} \quad (5)$$

Sujeto a :

$$\gamma^L \leq \sum_k S_{j,k,m,t}^P \leq \gamma^U \quad j \in J, \quad P, \quad m, t \quad (6)$$

La Ec.6 indica como los envíos ($S_{j,k,m,t}$) están restringidos entre el límite superior (γ^U) y el inferior (γ^L) respectivamente. Por último, este problema de optimización multiobjetivo se resolvió mediante el método ϵ - constraint, con el fin de encontrar el mejor equilibrio entre los 3 objetivos.

RESULTADOS

El modelo propuesto consta de 194, 207 ecuaciones, 16, 284 variables binarias y 282, 316 variables continuas. Este modelo fue resuelto utilizando un ordenador con un procesador AMD Ryzen 5-1600 @3.2GHz, y 16GB de RAM @2400MHz. Cada punto de Pareto se resolvió en un tiempo medio de 600s. El solver utilizado fue CPLEX con un gap relativo del 1%. La Figura 3 muestra los frentes de Pareto para todas las combinaciones de objetivos. La forma de estos gráficos puede explicarse fácilmente a partir de la ecuación 6. Tenga en cuenta que esta ecuación restringe la solución entre un límite inferior y superior de la demanda. El límite inferior representa la demanda requerida y el límite superior es la demanda mínima más un exceso del 10%. Por lo tanto, las líneas extremas de los frentes de Pareto corresponden a diferentes soluciones que operan entre los límites inferior y superior. La diferencia promedio entre las soluciones de los límites inferior y superior es de aproximadamente un 11%, lo que es de esperarse debido a que la diferencia entre los límites es del 10%.

Los puntos grandes de la Figura 2 corresponden a la solución que se considera tiene el mejor equilibrio entre los diferentes objetivos. Por lo tanto, se seleccionó este punto como la mejor solución de la cadena de suministro. En este punto, la cadena tiene alrededor del 75% de la máxima rentabilidad, también el EI99 está cerca de su límite inferior y los puestos de trabajo generados son 19500 puestos de trabajo, lo que significa casi el 50% del máximo de puestos de trabajo posibles. Es importante destacar que este número de empleos está asociado a diferentes actividades de la cadena de suministro, como la recolección y distribución de materias primas y productos, la fabricación en las diferentes plantas de furfural, etc. El inventario de biomasa para esta solución se muestra en la Figura 3a. Los resultados muestran, que sólo el rastrojo de maíz y la paja de trigo son necesarios para producir furfural debido al menor coste de procesamiento y transformación respecto al bagazo de sorgo y de caña de azúcar. Además, basados en la Figura 3a, la producción de furfural debe basarse principalmente en el rastrojo de maíz, ya que la disponibilidad de paja de trigo es menor, especialmente durante el periodo $t=1$ y $t=2$ (primavera y verano). Por esta razón, es necesario almacenar cantidades importantes de rastrojo de maíz para mantener una producción constante de furfural.

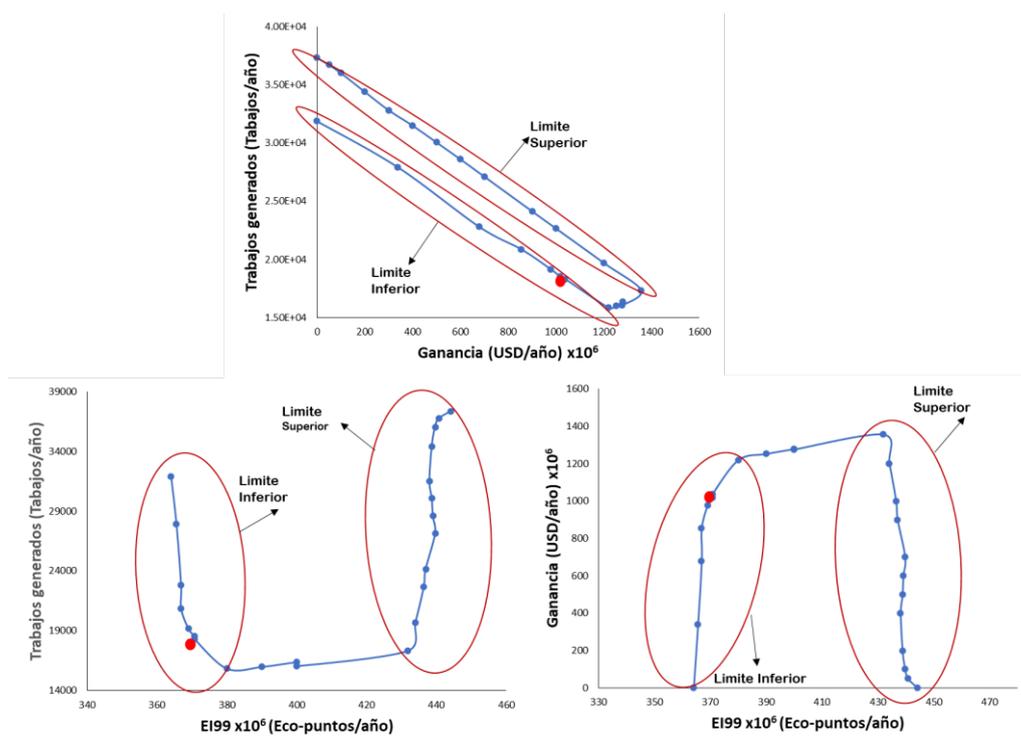


Figura 2. Frentes de Pareto para la cadena de suministro de Furfural.

La figura 3b ilustra los envíos de residuos lignocelulósicos a refinerías, durante cada periodo de tiempo. Los resultados muestran una clara relación entre la disponibilidad de biomasa y los envíos. Durante la primavera y el verano ($t=1$, $t=2$), cuando la disponibilidad de paja de trigo es baja, los envíos se basan principalmente en el rastrojo de maíz. Sin embargo, durante las estaciones de otoño e invierno ($t=3$, $t=4$) los envíos de residuos se basan en la paja de trigo. Estos resultados también indican que la mayoría de las plantas de furfural que utilizan rastrojo de maíz como materia prima estarán activas

durante las estaciones en las que el rastrojo de maíz es abundante, el mismo comportamiento ocurre con la paja de trigo.

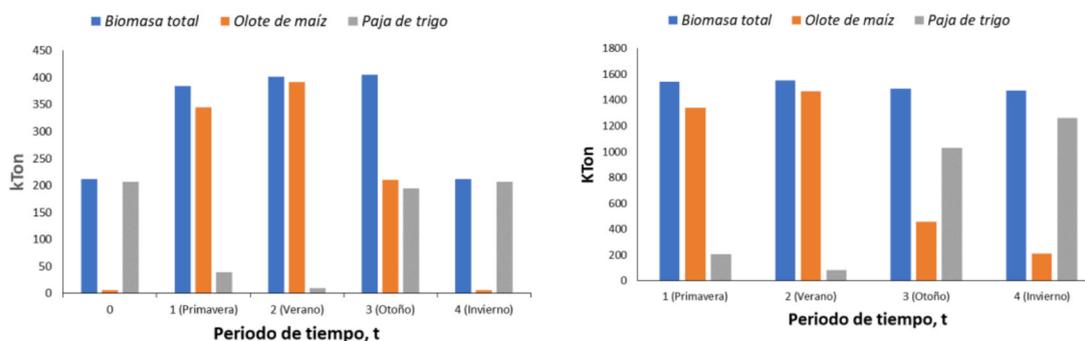


Figura 3. Niveles de inventario y envíos de biomasa para un año de horizonte de tiempo.

CONCLUSIONES

En este trabajo se propuso un modelo matemático de cadena de suministro para la producción de furfural. Este modelo matemático, se utiliza como herramienta para determinar la viabilidad de producir furfural a escala industrial utilizando como materia prima residuos agrícolas de México. Los aspectos económicos, ambientales y sociales, fueron considerados como índices para evaluar la solución de la cadena de suministro y mejorar la sostenibilidad de esta. En base a los resultados, la producción de furfural utilizando residuos agrícolas para sustituir productos químicos derivados del petróleo es factible. Los resultados mostraron importantes beneficios de hasta 1250 millones de USD/año. La solución óptima de SC consiste en una rentabilidad de 1056 millones de USD/año, 19300 puestos de trabajo generados y 370 millones de ecopuntos/año.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Garcia, D.J., You, F., 2015. Supply chain design and optimization: Challenges and opportunities. *Comput. Chem. Eng.* 81, 153–170. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.03.015>
- Ministry of Agriculture and Fishing, 2019. SAGARPA [WWW Document]. URL <http://infosiap.siap.gob.mx/gobmx/datosAbiertos.php>
- National Renewable Energy Laboratory (NREL), 2004. NREL [WWW Document]. URL <https://www.nrel.gov/docs/fy04osti/35523.pdf>
- Santibañez-Aguilar, J.E., González-Campos, J.B., Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M., El-Halwagi, M.M., 2014. Optimal planning and site selection for distributed multiproduct biorefineries involving economic, environmental and social objectives. *J. Clean. Prod.* 65, 270–294. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.08.004>

Integración energética de rutas óptimas de una biorrefinería lignocelulósica

Juan Carlos Montes -Cala^a, Jorge Chávez-Salas^a, Jaime David Ponce-Rocha^b, Fernando Israel Gómez-Castro^a, Ricardo Morales-Rodríguez^{a*}

^a *Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. ricardo.morales@ugto.mx*

^b *Dirección de Ingeniería y Construcción de Plantas, CIATEQ A. C., Querétaro, Querétaro, 76150, México.*

RESUMEN

El presente trabajo propone e implementa una metodología de síntesis óptima de procesos e integración energética basada en el análisis Pinch, aplicada a una biorrefinería lignocelulósica tomada de un caso estudio previo (Chávez, 2022). Las rutas de procesamiento del material lignocelulósico (bagazo de agave) que se analizan en este estudio, son las de la producción de furfural y ácido láctico; las cuales fueron obtenidas como óptimas, pero sin un análisis de integración de energía. En el análisis de integración energética se construye la red de intercambiador de calor con un $\Delta T_{min, \acute{o}ptimo}$ para cada proceso de obtención de los bioproductos.

La optimización del sistema energético de cada ruta de proceso, determina que el ahorro energético de la producción de furfural en servicios de calentamiento y enfriamiento es del 47%, 73% respectivamente. La ruta de producción de ácido láctico, presento un costo total anual de 32%, mayor que el costo total de producción de furfural, 18%. Finalmente, se determina que la mejor ruta de producción en ahorro energético y costos totales es la de furfural.

Palabras clave: biorrefinería; análisis pinch; optimización; integración energética; bagazo de agave.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la biomasa lignocelulósica, se procesa en una biorrefinería, que tiene una amplia gama de tecnologías capaces de separar los recursos de biomasa en sus componentes básicos que pueden convertirse en productos de valor agregado, biocombustibles y químicos.

Sin embargo, para que las biorrefinerías sean sustentables, es necesario realizar un ahorro energético. El diseño óptimo de una red de intercambiadores de calor es configurar un sistema de recuperación de calor, capaz de realizar las tareas prescritas a los costos anuales totales mínimos que están determinados principalmente por los costos de

servicios públicos y los costos de inversión. La tecnología pinch, es el primer método práctico completo para la síntesis de redes de intercambiadores de calor. En la tecnología pinch, la minimización del uso de energía se aborda desde un punto de vista termodinámico (Wilfried et al., 2020).

Chávez-Salas (2022), desarrollo una metodología sistemática para la toma de decisiones en la síntesis de una biorrefinería empleando optimización multiobjetivo. La síntesis del proceso considera diferentes opciones de rutas y productos a través de una superestructura, el cual incluye restricciones, parámetros, y criterios de desempeño. La investigación de Chávez-Salas (2022), se puede describir en una serie de pasos: el primer paso, propone e implementa una metodología sistemática para la síntesis óptima de biorrefinerías, basada en balances de masa, requerimientos de energía y costos de capital y operación como criterios de selección. En el segundo paso, desarrolla una superestructura de una biorrefinería en Aspen Plus, que contemple todas las configuraciones para la obtención de productos de alto valor y, cada una de las etapas del proceso de producción.

El tercer paso, evalúa el bagazo de agave como materia prima para la síntesis de topologías de proceso de producción de productos de alto valor. El cuarto paso, emplea un enfoque riguroso en el cálculo de las propiedades termodinámicas a través de ecuaciones de estado y modelos de solución que consideran las no idealidades de las mezclas involucradas, y finalmente el quinto paso, optimiza y selecciona la mejor configuración de una biorrefinería considerando diferentes rutas de procesamiento para obtener biocombustibles y productos químicos de alto valor.

En la presente investigación, seleccionamos del trabajo de Chávez-Salas (2022), las rutas óptimas producción de furfural y ácido láctico para diseñar la red de intercambio de calor de cada proceso en el punto pinch óptimo.

METODOLOGÍA

La figura 1, muestra el esquema de la metodología paso a paso de la presente investigación.

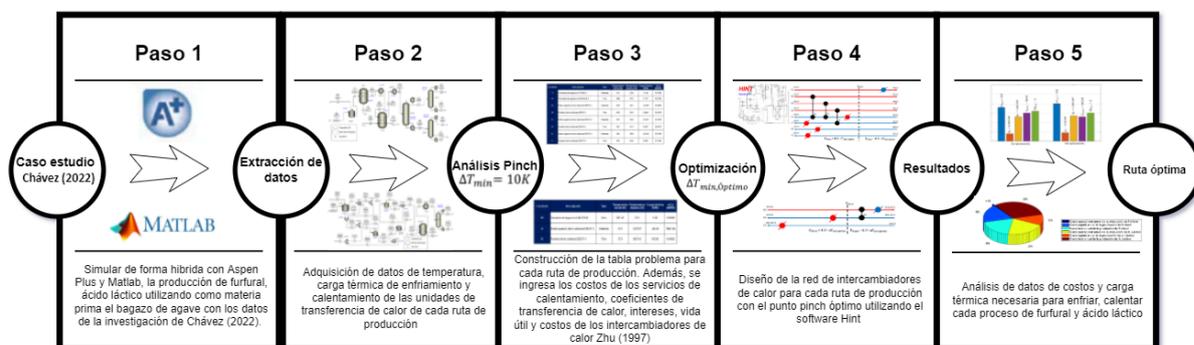


Figura 1. Metodología para determinar red de intercambiadores de calor óptima entre las rutas de producción de furfural y ácido láctico.

En el paso uno, se realiza la simulación de los dos procesos de producción de furfural y ácido láctico de forma híbrida con los softwares de Aspen Plus V10 y Matlab 2020a. En el paso dos, se extrae los datos de temperaturas de los fluidos calientes y fluidos fríos, también la carga necesaria para enfriar y calentar el proceso. El paso tres, se construye la tabla problema con los datos del paso 2, luego se utiliza el software Hint para determinar la carga necesaria de calentamiento y enfriamiento utilizando una diferencia de temperatura mínima de 10K ($\Delta T_{min} = 10K$). La tabla 1 y Tabla 2, muestran los datos de temperatura inicial, temperatura objetivo y carga térmica de las corrientes frías y calientes para los dos procesos de producción de furfural y ácido láctico.

Tabla 1. Tabla problema de la ruta de producción de furfural

Descripción	Temperatura inicial (K)	Temperatura objetivo (K)	Carga térmica (KW)
Corriente de ingreso al COND-1	313	298	-0.45
Corriente de ingreso al HEATER-1	298	410	1.147
Parte superior de la columna DEST-1	410	341	-0.425
Fondos de la columna DEST-1	410	433	0.622
Parte superior de la columna DEST-2	341	340	-0.237
Fondos de la columna DEST-2	341	373	0.237
Parte superior de la columna DEST-3	433	396	-0.542
Fondos de la columna DEST-3	433	435	0.551

Tabla 2. Tabla problema de la ruta de producción de ácido láctico

Descripción	Temperatura inicial (K)	Temperatura objetivo (K)	Carga térmica (KW)
Corriente de ingreso al HEATER	301.51	373	2.92
Parte superior de la columna DEST-1	373	372.97	-56.03
Fondos de la columna DEST-1	373	487.81	56.89

El paso cuatro, se ingresa los costos de utilidades de calentamiento ($110 \text{ \$/}(kW * \text{año})$) y enfriamiento ($10 \text{ \$/}(kW * \text{año})$), una vida útil de la planta de 5 años, una tasa de interés del préstamo del 15% y un factor de anualización del 0.298 para determinar la diferencia de temperatura mínima óptima ($\Delta T_{min, \text{óptima}}$) con relación a ahorro energético y costos totales anuales. La ecuación de costos de equipos de intercambio de calor es la siguiente (Wilfried et al., 2020):

$$\text{Costos del intercambiador de calor: } 0.295260 * (30800 + 750 A^{0.81}) \text{ \$/año (1)}$$

Los datos de costos, intereses, vida útil, utilidades, fueron obtenidos de Wilfried et al., (2020), las aproximaciones son superiores el 0.56%, comparados con soluciones que utilizan algoritmos de optimización de enjambre de partículas híbridas y algoritmo genético híbrido.

Finalmente, el paso cinco se determina los costos totales anuales del pinch sin optimizar ($C_{T, \text{pinch}}$), costos totales anuales optimizado ($C_{T, \text{óptimo}}$), carga térmica de enfriamiento necesaria en el pinch ($Q_{c, \text{pinh}}$), carga térmica de calentamiento necesaria en el pinch ($Q_{h, \text{pinh}}$), carga térmica de enfriamiento necesaria en el punto óptimo ($Q_{c, \text{óptimo}}$), carga térmica de calentamiento necesaria en el punto óptimo ($Q_{h, \text{óptimo}}$), los porcentaje de reducción de carga térmica de enfriamiento ($\%Reducción_{c, \text{óptimo}}$) y calentamiento ($\%Reducción_{h, \text{óptimo}}$), número de intercambiadores en la red, área de transferencia de calor en el punto pinch ($A_{T, \text{pinh}}$), , área de transferencia de calor en el punto pinch óptimo ($A_{T, \text{óptimo}}$).

RESULTADOS

La carga de calentamiento y enfriamiento en el proceso de producción de furfural antes de utilizar el método Pinch es de 2.55 kW, 1.65 kW respectivamente. La figura 2, muestra la comparación de la diferencia de temperatura mínima (ΔT_{min}) en el punto Pinch óptimo y no óptimo. En la figura 2, se observa que la carga de calentamiento (barra de color ámbar) y enfriamiento (barra de color zanahoria) en el Pinch no óptimo es de 1.302 kW y 0.398 kW, permitiendo calcular un porcentaje de reducción de carga térmica de calentamiento y enfriamiento de 47%, 73% respectivamente.

En la figura 3, se observa que los costos operacionales de red de intercambio de calor (barra de color zanahoria) en el punto pinch óptimo y no óptimo es de 153.33\$/año, 147.18 \$/año. Además, en la figura 3, los costos totales (barra de color púrpura) en el punto pinch óptimo y no óptimo para la ruta de producción de furfural es de 6033.57\$/año, 6759.88 \$/año respectivamente.

En la figura 4, los costos totales (barra de color púrpura) en el punto pinch óptimo y no óptimo para la ruta de producción de ácido láctico es de 10314.6 \$/año, 10261.2 \$/año respectivamente.

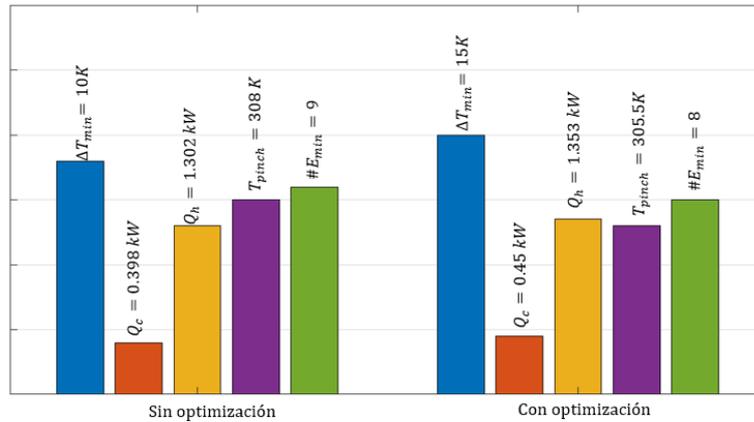


Figura 2. Comparación del $\Delta T_{min,pinch}$ y $\Delta T_{min,optim}$ con relación a las cargas de enfriamiento y calentamiento de la ruta de producción de furfural.

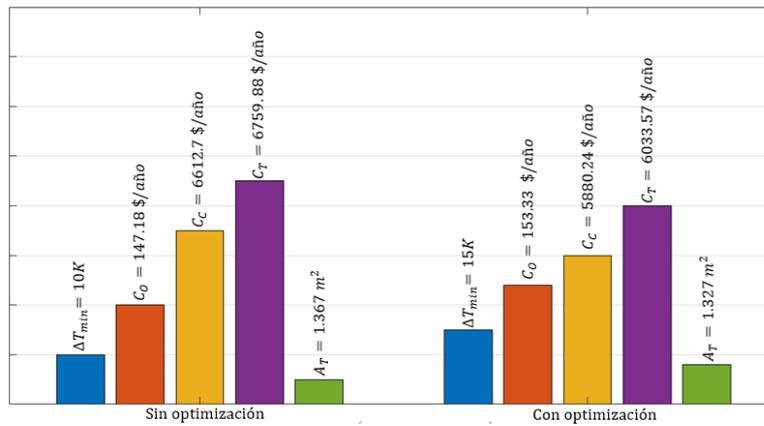


Figura 3. Comparación del $\Delta T_{min,pinch}$ y $\Delta T_{min,optim}$ con relación a los costos totales, operacionales, inversión de capital de la ruta de producción de furfural

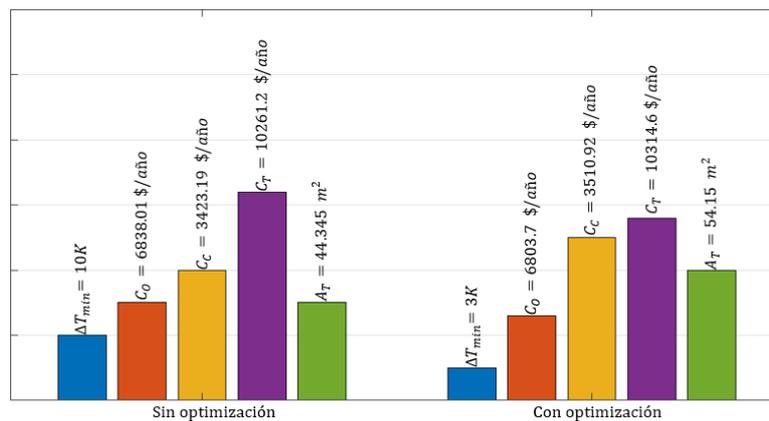


Figura 4. Comparación del $\Delta T_{min,pinch}$ y $\Delta T_{min,optim}$ con relación a los costos totales, operacionales, inversión de capital de la ruta de producción de ácido láctico

La figura 5, muestra el porcentaje de los costos totales anuales de la red de intercambio de calor de furfural 18% (color cian) y la red de intercambio de calor del proceso de ácido

láctico 32% (color borgoña). La figura 6, muestra la red de intercambiadores de calor optimizada de la ruta de furfural y ácido láctico con el análisis pinch.

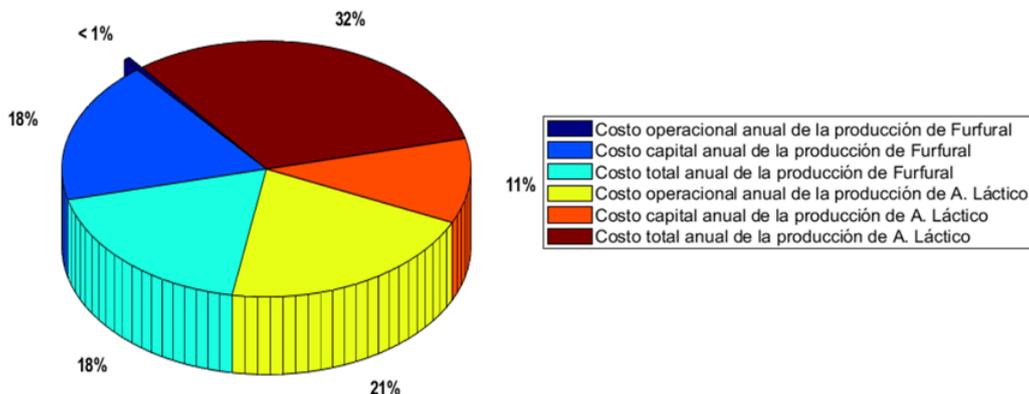


Figura 5. Porcentaje de costos operacionales, costo capital y costo total anual de red de intercambio de calor para los procesos de producción de furfural y ácido láctico.

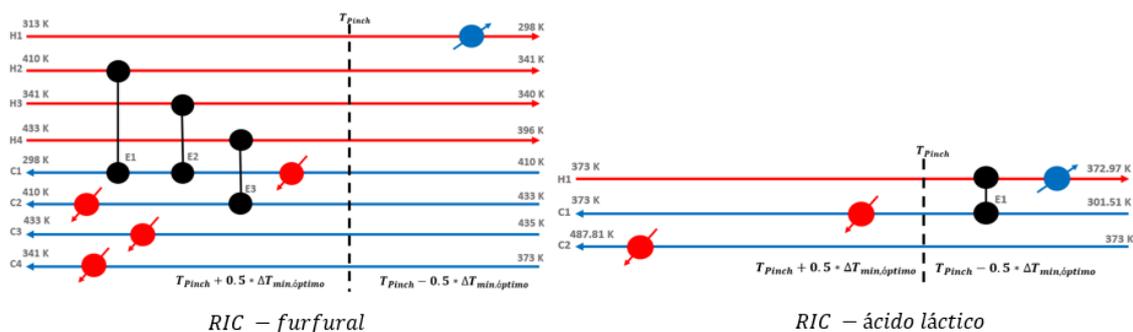


Figura 6. Diseño óptimo de la red de intercambio de calor (RIC) de las rutas de producción de furfural y ácido láctico utilizando el análisis pinch

CONCLUSIONES

El costo total anual de la producción de furfural a partir de bagazo de agave, fue menor que el costo total de producción de ácido láctico.

Se redujo el consumo energético de calentamiento y enfriamiento de los procesos de producción de furfural y ácido láctico optimizando el punto pinch de cada red de intercambiadores de calor.

La mejor ruta óptima en la síntesis de redes de intercambio de calor es la de producción de furfural.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Chávez-Salas, J. (2022). Síntesis y diseño óptimo de procesos sostenibles para la conversión de residuos agroindustriales en productos de alto valor. Tesis de maestría en Ingeniería Química (Integración de Procesos).

Wilfried, R, Xing, L. y Dezheng, C. (2020). Optimal design of heat exchanger networks. *Design and operation of heat exchangers and their networks*. (pp. 231-317).

PREDICCIÓN DE ALIANZAS ENTRE TOMADORES DE DECISIONES EN EL DISEÑO ÓPTIMO DE SISTEMAS ENERGÉTICOS COMUNITARIOS

Javier García-Martínez ^a, Luis Fabián Fuentes-Cortés ^{a*}

^a *Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México en Celaya, Antonio García Cubas Pte. 600, 38010, Celaya, Gto. México *luis_fuentes@iqcelaya.itc.mx*

RESUMEN

Este trabajo analiza la influencia de los tomadores de decisiones en el diseño de sistemas de generación distribuida en comunidades rurales. El entorno desarrollado considera el cálculo de soluciones óptimas en función de los intereses particulares de los diferentes participantes inmersos en un entorno de toma de decisiones multicriterio. La formación de alianzas entre los distintos responsables de la toma de decisiones para formar grupos de interesados se aborda mediante estrategias de *soft clustering*, mediante las cuales se identifican las alianzas y se proporcionan soluciones óptimas asociadas a cada grupo de partes interesadas. Para probar estas ideas, se aborda el diseño óptimo de un sistema de generación distribuida basado en biomasa y fuentes renovables en una comunidad indígena del centro-oeste de México. El modelo de optimización multiobjetivo considera el rendimiento económico del sistema, las emisiones de CO₂ y el empleo asociado al sistema energético. Los resultados muestran la influencia de los grupos de interés en el diseño final de los sistemas energéticos comunitarios.

Palabras clave: Optimización multiobjetivo, *fuzzy C-means*, ambiente multicriterio, sistemas energéticos comunitarios.

INTRODUCCIÓN

El acceso a energía confiable, asequible y sostenible es necesario para promover la equidad social y el crecimiento económico. La generación distribuida presenta una solución innovadora, económica y ambientalmente atractiva [1]. La planeación e implementación de energías distribuidas es un problema multiobjetivo en el cual existen conflictos de intereses entre tomadores de decisión, por lo que el problema se vuelve complejo y existe el riesgo de cancelación del proyecto si no se llega a un acuerdo. Por lo tanto, es importante definir soluciones que reduzcan la insatisfacción de los actores involucrados [2]. Diversos enfoques han sido desarrollados para abordar este problema [3, 4], sin embargo, ninguno de ellos toma en cuenta las potenciales alianzas entre tomadores de decisiones.

Se presenta un modelo de programación lineal multiobjetivo para el diseño óptimo de sistemas energéticos comunitarios que analiza las alianzas en ambientes de conflicto multicriterio. Se considera el Costo Total Anual (TAC), las Emisiones (CE) y los Empleos (JG) como objetivos de diseño. Se aplica una estrategia de coeficientes de peso para generar un conjunto de soluciones multicriterio. Posteriormente, un método de *clustering (Fuzzy C-means)* genera agrupaciones que representan las alianzas y sus soluciones

inherentes. El modelo es aplicado a un caso de estudio del municipio de Erongarícuaro, en Michoacán.

METODOLOGÍA

La propuesta tecnológica para abordar el problema de diseño está representada por la superestructura de la Figura 1. El sistema energético está conectado a la red y genera electricidad mediante unidades fotovoltaicas (PV), turbinas eólicas (WT) y unidades de combustión de madera (WC). Las tecnologías WT y PV dependen de la disponibilidad de fuentes de energía renovables, mientras que el WC se alimenta de residuos de madera. Como los sistemas FV y WT dependen de las condiciones climáticas la combinación con el WC permite una política de funcionamiento flexible. La electricidad producida se envía a las diferentes zonas de la comunidad para satisfacer las demandas. Cuando la energía producida supera la demanda, se vende a la red. Además, cuando la energía producida por el sistema no puede satisfacer la demanda, la electricidad necesaria se compra a la red local.

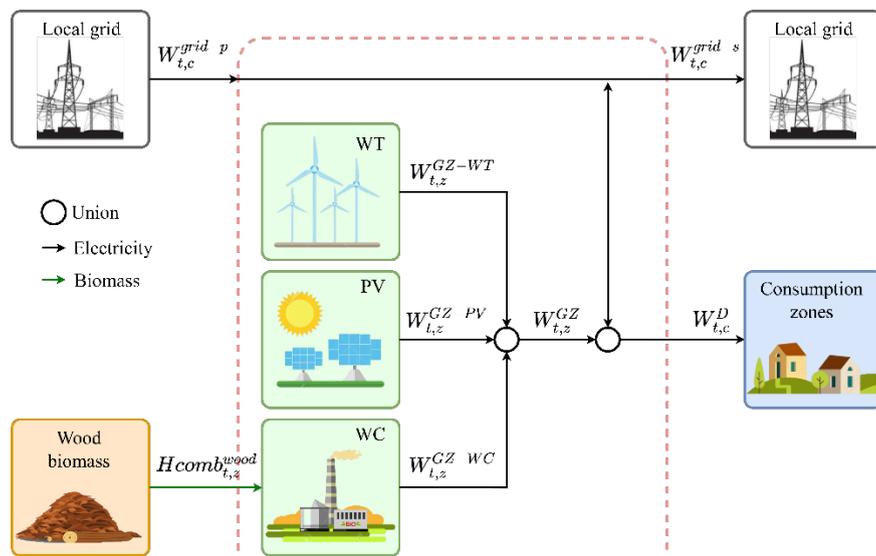


Figura 1. Superestructura propuesta.

El planteamiento del problema puede expresarse como sigue: Dada la temperatura ambiente, la irradiación solar, la velocidad del viento y los perfiles de demanda energética de una comunidad, se puede calcular el diseño óptimo, la política de funcionamiento y el esquema de compra de energía bajo diferentes funciones objetivo. Esto lleva a resolver un problema multi-objetivo utilizando el método de coeficientes de peso que genera un conjunto de soluciones óptimas bajo diferentes criterios. El método de *soft clustering* puede aplicarse al conjunto de soluciones multi-criterio para proponer alianzas entre las partes interesadas. A continuación, una solución compromiso se propone a partir de las alianzas utilizando un enfoque de *utopia tracking* modificado.

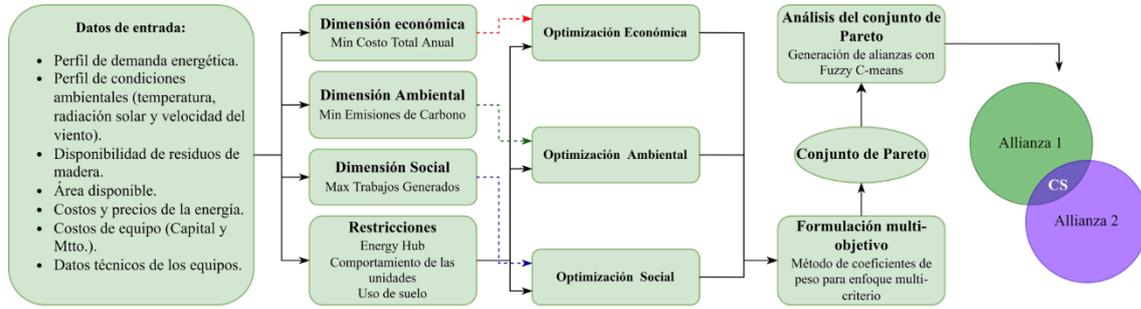


Figura 2. estrategia de optimización.

La estrategia de optimización se presenta en la Figura 2. Los datos conocidos son la demanda de electricidad, las condiciones ambientales (temperatura ambiente, irradiación solar, velocidad del viento) y el costo de los perfiles eléctricos. Otros parámetros que alimentan el modelo son los costos de los equipos y de la energía, la superficie disponible, los datos técnicos de los equipos, el uso del suelo emisiones, y factores de trabajo. El resultado es un modelo de programación lineal multiobjetivo multiperiodo. Las restricciones del modelo están definidas por los balances energéticos del sistema modelado con el concepto de *energy hub*, las ecuaciones de diseño de las unidades de generación y el uso del suelo. En la dimensión económica, la función objetivo es minimizar el Costo Anual Total (Ecuación 1), asociado a los costos de capital y operación y mantenimiento de las tecnologías y al esquema de compra-venta de energía. La dimensión medioambiental consiste en minimizar las Emisiones de Carbono (Ecuación 2), relacionadas con el proceso de generación de la electricidad en la red local y las nuevas unidades de WC. Por último, la dimensión social considera la maximización de los empleos directos generados (Ecuación 3) como resultado de la implantación del sistema energético.

$$TAC = CCost^{PV} + CCost^{WT} + CCost^{WC} + OMCost^{PV} + OMCost^{WT} + OMCost^{WC} + Cost^{wood} + Cost^{grid} - I^{grid} - I^{CZ} \quad (1)$$

$$CE = CE^{Grid} + CE^{WC} \quad (2)$$

$$JG = JG^{PV} + JG^{WT} + JG^{WC} \quad (3)$$

Los procesos de optimización individuales revelan la existencia de conflictos entre las funciones objetivo. Por lo tanto, se realiza un novedoso enfoque multicriterio basado en la generación de alianzas entre los tomadores de decisiones. En primer lugar, se obtienen las soluciones óptimas extremas (puntos Utopico y Nadir) mediante la optimización de las funciones objetivo como un problema mono-objetivo. Después, las funciones objetivo se escalan utilizando las soluciones de los problemas mono-objetivo [5]. A continuación, se aplica el método de coeficientes de peso (Ecuación 4) para calcular un conjunto de soluciones óptimas de Pareto vinculadas a criterios específicos para considerar las diferentes prioridades de los grupos de interés.

$$\min \Phi = \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot \phi_i \quad (4)$$

donde ω es el nivel de preferencia de los diferentes interesados sobre las funciones objetivo y ϕ las funciones objetivo escaladas. Los valores de ω expresan el peso de la función objetivo para la solución asociada al criterio específico. Como resultado del

proceso de optimización multicriterio, se crea un conjunto de soluciones óptimas de Pareto:

$$\Psi = \{f_{i,l}, \dots, f_{l,L}\} \quad (5)$$

El método de *soft clustering* (*Fuzzy c-means*) se aplica al conjunto de soluciones multicriterio para generar los *clusters* que representan las alianzas y sus soluciones inherentes. Desde un punto de vista matemático, el *Fuzzy C-means* resuelve el siguiente problema de optimización [6]:

$$\underset{c}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^c w_{ij}^m |f_i - c_j|^2 \quad (5)$$

$$w_{ij} = \left(\sum_{k=1}^c \left(\frac{|f_i - c_j|}{|f_i - c_k|} \right)^{\frac{2}{m-1}} \right)^{-1} \quad (6)$$

Donde c_j es el centro del cluster j , w_{ij} es el peso o indica el grado en que el elemento, f_i , pertenece al cluster c_j y $m \geq 1$ es un parámetro de difuminación. Por último, se obtiene una solución compromiso minimizando la distancia a la media de los centroides de los dos grupos.

$$CS = \sum_{l=1}^L (f_l - c_l^{mid})^2 \quad (7)$$

Además, con fines comparativos se incluye una función objetivo para minimizarla distancia al promedio de los resultados del problema multi-objetivo.

$$EQUITY = \sum_{l=1}^L (f_l - f_l^{average})^2 \quad (8)$$

El caso de estudio está definido por los parámetros climáticos (irradiación solar, temperatura ambiente y velocidad del viento) y la demanda eléctrica de Erongarícuaro, un municipio del Estado de Michoacán en México. El modelo ha sido implementado en JuMP en el lenguaje Julia y resuelto utilizando GLPK. El modelo consta de 1.925 restricciones y 2.510 variables.

RESULTADOS

El conflicto entre las funciones objetivo puede abordarse analizando las soluciones asociadas a la optimización individual de las funciones objetivo. La Tabla 1 muestra los resultados de la optimización. En el enfoque puramente económico, se obtiene el mejor TAC. Por otro lado, el enfoque puramente medioambiental alcanza el valor mínimo de CE, pero da lugar al peor resultado social del sistema. El mejor resultado para JG se obtiene en la solución social. Sin embargo, resulta el peor resultado en CE y en TAC. Los resultados del método multi-objetivo están representados por los criterios del 1 al 10 (véase la Tabla 1). Las soluciones en las que el objetivo medioambiental tiene una fuerte preferencia (con ponderaciones superiores a 0,5) tienden a obtener resultados cercanos a la optimización medioambiental. Los criterios 1, 7 y 8 tienen los mismos resultados que el objetivo medioambiental. En el caso del criterio 3, en condiciones equilibradas de las dimensiones social y ambiental, el objetivo social tiene una pequeña influencia en la

solución hacia un mejor resultado para JG. Los criterios 2 y 4 consideran las dimensiones económica y social con pesos equilibrados de TAC y JG, y pesos bajos para CE. Los valores de TAC y JG se acercan al UP, mientras que la solución de CE es la misma que la del NS. La solución para ambos casos es la misma y demuestra la flexibilidad entre estos objetivos, lo que permite obtener un buen rendimiento de TAC y JG con bajos sacrificios de ambos objetivos. Los criterios 9 y 10 tienen configuraciones similares del sistema energético como la dimensión social. Sin embargo, se obtienen resultados cercanos al UP para JG con una importante disminución del TAC (USD \$86,286 y USD \$75,390 respectivamente). Por último, los criterios 5 y 6 priorizan la dimensión económica con pesos de 0,6, obteniendo los resultados más cercanos a esta dimensión.

Tabla 1. Resultados.

Criterio	Coeficientes de peso			Valores de las funciones objetivo			Nivel de interés	
	ω TAC	ω CE	ω JG	TAC (\$)	CE (Ton CO ₂)	JG (jobs)	Alianza 1	Alianza 2
TAC	1	0	0	2,342,811	10,895	0.73		
CE	0	1	0	2,456,885	10,267	0.58		
JG	0	0	1	2,524,478	11,169	1.18		
1	0.5	0.5	0	2,456,836	10,267	0.58	0.998	0.002
2	0.5	0	0.5	2,391,838	11,169	1.06	0.165	0.835
3	0	0.5	0.5	2,464,113	10,287	0.61	0.988	0.012
4	0.4	0.2	0.4	2,391,838	11,169	1.06	0.165	0.835
5	0.6	0.3	0.1	2,342,811	10,895	0.73	0.037	0.963
6	0.6	0.1	0.3	2,345,285	10,928	0.77	0.031	0.969
7	0.1	0.6	0.3	2,456,836	10,267	0.58	0.998	0.002
8	0.3	0.6	0.1	2,456,836	10,267	0.58	0.998	0.002
9	0.3	0.1	0.6	2,438,191	11,169	1.17	0.960	0.040
10	0.1	0.3	0.6	2,449,088	11,169	1.18	0.998	0.002
UP				2,342,811	10,267	1.18		
NS				2,524,478	11,169	0.58		
A2				2,364,519	11,022	0.88		
A1				2,453,198	10,570	0.78		
Equity				2,419,367	10,759	0.83		
CS				2,408,859	10,796	0.79		

Tras la aplicación de la técnica de *clustering*, se obtienen los valores de los centroides y los pesos (véase la Tabla 1). La Alianza 1 presenta la proximidad con la dimensión ambiental. Los grupos de interés con preferencia por la dimensión medioambiental (Criterios 2, 3, 7, 8, 9 y 10) muestran un alto nivel de interés sobre el 96%, debido a la coincidencia con las preferencias económicas. Los resultados de la alianza 2 muestran la proximidad con la dimensión económica. Estos resultados satisfacen en gran medida los intereses de las partes interesadas de aquellos criterios con fuerte preferencia por la dimensión económica (criterios 5 y 6), lo que provoca un alto nivel de interés en la alianza, por encima del 96%. Los criterios 2 y 4 demuestran un nivel de interés del 83,5% en la

alianza 2, ya que sus intereses en las dimensiones económica y social están mejor cubiertos por esta alianza. En la Figura 3 se muestran de color rosa los criterios con mayor preferencia por la alianza 2 y en azul claro los que tienen preferencia con la alianza 1.

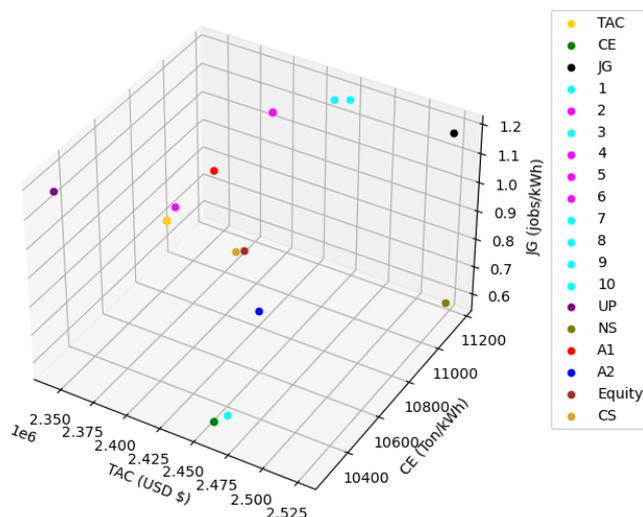


Figura 3. Frente de Pareto.

Las dos alianzas representan dos grupos polarizados con conflictos entre las dimensiones económica y ambiental, principalmente, por lo que se propone la obtención de una solución compromiso para mitigar los conflictos. Los resultados de la solución compromiso representan un buen resultado para la dimensión económica y un resultado medio para la dimensión medioambiental. Aunque la JG es la función objetivo más afectada, los 0,76 puestos de trabajo obtenidos son una solución favorable para la dimensión social, que representa el 64,3% del total de puestos de trabajo que se pueden generar en el mejor escenario. Puede observarse que la función *equity* obtiene resultados muy cercanos a la solución compromiso.

CONCLUSIONES

Los resultados muestran la influencia de los grupos de interés en el diseño final de los sistemas energéticos comunitarios. Mediante la generación de alianzas es posible obtener un diseño óptimo viable que considere los intereses de los participantes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] IEA (2020). Sdg7: Data and projections. Technical report, International Energy Agency, Paris.
- [2] Fuentes-Cortés LF, Ortega-Quintanilla M, Flores-Tlacuahuac A. (2019). Water–energy offgrid systems design using a dominant stakeholder approach. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 7(9):8554–78
- [3] Wu, Q.; Ren, H.; Gao, W.; Ren, J.; Lao, C. (2017). Profit allocation analysis among the distributed energy network participants based on Game-theory. *Energy*, 118, 783–794
- [4] Gonzalez-Bravo, R.; Fuentes-Cortés, L. F.; Ponce-Ortega, J. M. (2017). Defining priorities in the design of power and water distribution networks. *Energy*, 137, 1026–1040.
- [5] Zavala, V. M. and Flores-Tlacuahuac, A. (2012). Stability of multiobjective predictive control: A utopia-tracking approach. *Automatica*, 48(10):2627–2632.
- [6] Statistics, J. (2019). Clustering. fuzzy c-means.

Modelamiento del Equilibrio Vapor-Líquido-Líquido del Sistema Acetato de Vinilo + Ácido Acético + Agua

Jose Alfredo Paredes Ortiz ^{a,b,*}, Úrsula Fabiola Rodríguez Zúñiga ^a, Fernando Israel Gómez Castro ^b

a Universidad de Ingeniería y Tecnología, Departamento de Ingeniería Química, Jr. Medrano Silva 165, Barranco, Lima, Perú, 15063.

b Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, Guanajuato, Guanajuato, México, 36050.

* j.paredesortiz@ugto.mx

RESUMEN

Debido al desarrollo de nuevas tecnologías de intensificación de procesos aplicadas a procesos de purificación de acetato de vinilo donde se presentan equilibrios vapor-líquido-líquido es de interés industrial poder modelar adecuadamente estas interacciones. Se confirmó la validez de los datos de equilibrio líquido vapor (VLE) usando el método de Wisniak y para los datos de equilibrio líquido-líquido (LLE) se empleó el método de Bachman. La descripción de los sistemas se basó en el modelo Gamma-Phi empleando los modelos de Hayden O'Connell (HOC) y cuasiquímico universal (UNIQUAC) para el VLE; así como UNIQUAC para el LLE. El ajuste de datos a estos modelos para la representación del equilibrio de fases es una tarea compleja, particularmente para el caso de equilibrio líquido-líquido, existiendo una alta probabilidad de que la solución al problema de ajuste de parámetros quede estancada en un óptimo local. Debido a esto, en este trabajo se propone una estrategia para la determinación de los parámetros de interacción binaria del modelo UNIQUAC para ajustarse tanto el VLE como el LLE. El problema de optimización generado se resuelve empleando el algoritmo de optimización global BARON en el entorno GAMS.

Palabras clave: Equilibrio vapor-líquido-líquido, UNIQUAC, Hayden O'Connell (HOC), optimización global.

INTRODUCCIÓN

El acetato de vinilo es uno de los productos químicos de mayor producción en el mundo, utilizado principalmente en la producción de acetato de polivinilo y alcohol polivinílico. En la actualidad la ruta principal de síntesis del acetato de vinilo es por medio de la reacción de acetoxilación de etileno en presencia de oxígeno por medio de catalizadores de paladio (Motahari et al., 2012). Durante el proceso de síntesis de acetato de vinilo se genera la mezcla de acetato de vinilo, ácido acético y agua (AAA), esta mezcla en particular presenta dos fases líquidas.

A lo largo de los últimos años diversos autores han realizado investigaciones relacionadas a la mejora del proceso de síntesis de acetato de vinilo enfocado tanto en el área de diseño como en el área de control con particular énfasis en la purificación de la mezcla AAA. Luyben y Tyréus (1998) consideraron el diseño de un proceso con las operaciones de separación tradicionales como: destilación, extracción líquido-líquido y absorción. Las más recientes investigaciones y tendencias de autores como Li et al., 2022 y Xie et al., 2020 apuntan al uso de operaciones de separación intensificadas como: destilación extractiva o destilación azeotrópica.

El uso de tecnologías intensificadas para la separación de la mezcla AAA requiere poder modelar tanto el equilibrio líquido-líquido como el equilibrio líquido-vapor. Para las mezclas que presentan ácidos carboxílicos como el ácido acético interaccionando con otros compuestos en fase vapor se emplea el modelo HOC, adicional a este modelo se suelen emplear modelos NRTL o UNIQUAC para este tipo de mezclas (Hsieh et al., 2008).

Para poder representar adecuadamente el equilibrio tanto líquido-líquido como líquido-vapor es necesario determinar los coeficientes de interacción binaria del modelo UNIQUAC. Desafortunadamente, los coeficientes que describen el VLE predicen exactamente el LLE de manera muy imprecisa y viceversa. El problema de la correlación de parámetros para la descripción VLLE aún no se examina lo suficiente. Algunos autores proponen métodos de optimización global para poder resolver este problema (Wyczesany, 2014).

En el trabajo presentado aquí, los parámetros de interacción binaria del modelo UNIQUAC se ajustaron a los datos VLE y LLE.

METODOLOGÍA

En este artículo se empleó el modelo Gamma-Phi para modelar el equilibrio líquido-vapor.

$$\phi_i^V y_i P = x_i \gamma_i \phi_i^S P_i^S$$

Para los cálculos de la fase vapor se empleó el modelo HOC, utilizando la relación entre los coeficientes de fugacidad aparente y los coeficientes de fugacidad real, así como la verdadera fracción molar de la fase de vapor (George Hayden & O'Connell, 1975).

$$\phi_i^V y_i = z_i \phi_i^\#$$

Para el equilibrio líquido-líquido se empleó el modelo Gamma-Gamma.

$$x_i^I \gamma_i^I = x_i^{II} \gamma_i^{II}$$

Los parámetros de interacción binaria del modelo UNIQUAC fueron representados de con un parámetro independiente y otro dependiente de la temperatura.

$$\tau_{ij} = \exp \left(A + \frac{B}{T} \right)$$

Previo al proceso de optimización se realizó la validación de los datos de equilibrio líquido-vapor por el método de Wisniak (1993) para demostrar la consistencia termodinámica de los mismos. De igual forma se probó la validez de los resultados del equilibrio líquido-líquido por medio del método de Bachman (1940).

Los datos experimentales reportados por el Shanghai College Chemical Engineering., (1976) y Zhang et al., (2011) fueron empleados para el modelamiento y ajuste del equilibrio líquido-vapor, los datos reportados realizaron los experimentos de laboratorio a 1 atmósfera. Para la correlación del equilibrio líquido-líquido se usaron los valores reportados por Gao et al., (2017) a 1 atmósfera y 298.15 K.

Como función objetivo se empleó la relación de mínimos cuadrados:

$$FO = \sum_{i=1}^{N_{LLE}} \sum_{j=1}^{N_C} \sum_{k=1}^2 (x_{exp,k,j,i} - x_{k,j,i})^2 + \sum_{i=1}^{N_{VLE}} \sum_{j=1}^{N_C} (y_{exp,j,i} - y_{j,i})^2 + \sum_{i=1}^{N_{VLE}} (T_{exp,i} - T_i)^2$$

El modelo de optimización fue ejecutado por medio de la interfaz GAMS empleando el modelo de optimización Global BARON (Sahinidis, 1996) por medio del uso del servidor NEOS.

RESULTADOS

Por medio del método de Wisniak (1993) que emplea tanto las metodologías de áreas y puntos se demostró la validez de los datos reportados por Shanghai College Chemical Engineering., (1976) y Zhang et al., (2011).

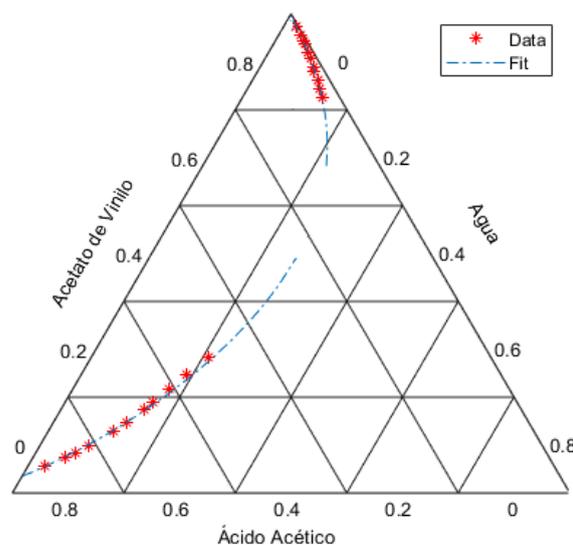


Figura 1. Diagrama de ternario de ELL de la mezcla AAA, comparación entre los resultados modelados y los datos experimentales.

Como se puede apreciar en la figura 1 por medio de la optimización se obtuvieron buenos resultados respecto al equilibrio líquido-líquido de la mezcla. El ajuste de la curva con el modelo es muy cercano al reportado por Gao et al., (2017).

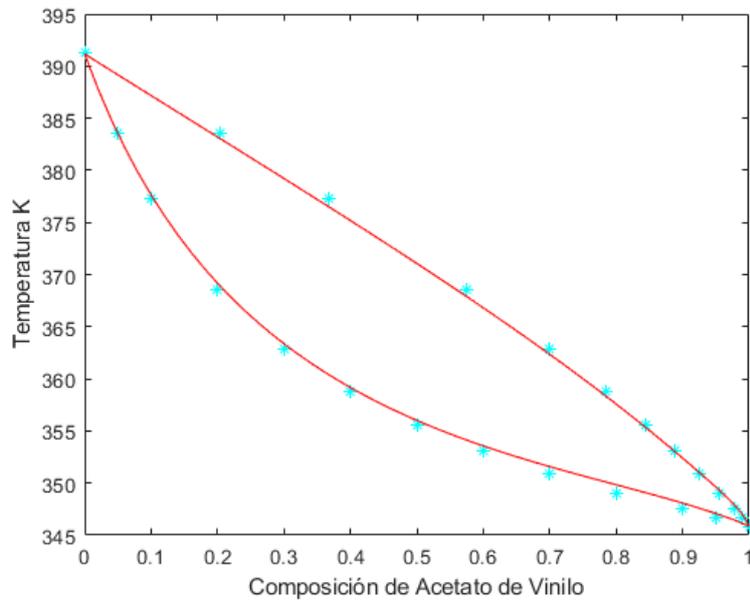


Figura 2. Diagrama VLE de la mezcla acetato de vinilo con ácido acético, comparación entre los resultados modelados (línea roja) y los datos experimentales (puntos cian).

Se obtuvo una buena correlación entre el modelo y los datos experimentales (figura 2) para la mezcla de acetato de vinilo con ácido acético obteniendo una buena predicción.

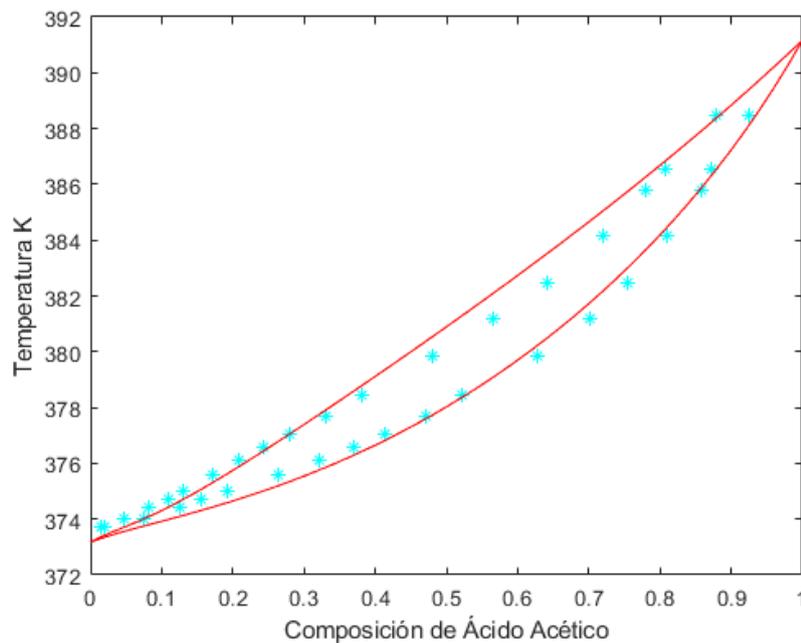


Figura 2. Diagrama VLE de la mezcla ácido acético y agua, comparación entre los resultados modelados (línea roja) y los datos experimentales (puntos cian).

La relación entre el modelo y los datos experimentales de la figura 3 es buena sin embargo las otras dos figuras presentan un mejor ajuste de los datos. A bajas composiciones de ácido acético suele tener una desviación mayor. A continuación, se detalla el error con respecto a los puntos experimentales.

Tabla 1. Errores con respecto a los datos experimentales del ELV del ácido acético y agua

Punto	ΔT	Δy_1	Δy_2
1	-0.331883755	-0.0017671596	0.0017671596
2	-0.262804979	0.00362337709	-0.00362337709
3	-0.313165289	0.000294883266	-0.000294883266
4	-0.376313096	-0.00804783133	0.00804783133
5	-0.360999822	-0.00875682417	0.00875682417
6	-0.368980255	-0.0072446601	0.0072446601
7	-0.309675196	-0.00693933892	0.00693933892
8	-0.278161241	-0.00963959632	0.00963959632
9	-0.227076092	-0.014288152	0.014288152
10	-0.0868437319	-0.0175513555	0.0175513555
11	-0.0488376683	-0.0236729446	0.0236729446
12	0.338801157	-0.0186867294	0.0186867294
13	0.515838486	-0.0186128176	0.0186128176
14	0.509831896	-0.0264671172	0.0264671172
15	0.268912219	-0.0290807875	0.0290807875
16	0.0368116125	-0.0192328742	0.0192328742
17	-0.173989468	-0.0241081746	0.0241081746
18	-0.302877741	-0.0101669043	0.0101669043

Una alternativa para poder aumentar la precisión del modelamiento sería incorporar un parámetro dependiente de la temperatura adicional al conjunto de parámetros de interacción binaria de UNIQUAC

CONCLUSIONES

Los resultados de la metodología empleada mostraron que la ecuación UNIQUAC puede describir el LLE y VLE de la mezcla ternaria acetato de vinilo, ácido acético y agua con una adecuada precisión si los parámetros de esta ecuación se ajustan simultáneamente a los datos de equilibrio trifásico y bifásico. Por otro lado, la precisión no es tan alta como en el caso en que el modelo UNIQUAC describe el VLE o LLE por separado, pero es solo un poco más baja, con una mayor desviación sobre todo en el VLE de ácido acético con agua.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bachman, I. (1940). Tie Lines in Ternary Liquid Systems. *Industrial and Engineering Chemistry - Analytical Edition*, 12(1), 38–39.
https://doi.org/10.1021/AC50141A013/ASSET/AC50141A013.FP.PNG_V03

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

Gao, J., Guan, D., Xu, D., Zhang, L., & Zhang, Z. (2017). Measurement and Modeling of Liquid-Liquid Equilibrium for the Systems Vinyl Acetate + Acetic Acid/Ethanol + Water at 298.15 and 308.15 K. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 62(4), 1240–1246. https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.6B00794/ASSET/IMAGES/MEDIUM/JE-2016-00794E_0009.GIF

George Hayden, J., & O'Connell, J. P. (1975). A Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 14(3), 209–216. https://doi.org/10.1021/I260055A003/SUPPL_FILE/I260055A003_SI_001.PDF

Hsieh, C. T., Ji, W. Y., Lin, H. mu, & Lee, M. J. (2008). Multiphase equilibria for mixtures containing water, acetic acid, propionic acid, methyl acetate and methyl propionate. *Fluid Phase Equilibria*, 271(1–2), 69–75. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2008.07.004>

Li, Z., Wang, K., Luo, X., & Xu, X. (2022). Optimization and simulation of vinyl acetate process based on Aspen Plus. <https://doi.org/10.1117/12.2628473>, 12164, 420–425. <https://doi.org/10.1117/12.2628473>

Luyben, M. L., & Tyréus, B. D. (1998). An industrial design/control study for the vinyl acetate monomer process. *Computers & Chemical Engineering*, 22(7–8), 867–877. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(98\)00030-1](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(98)00030-1)

Motahari, K., Atashi, H., Fazlollahi, F., Tabrizi, F. F., & Sarkari, M. (2012). A kinetic study of Pd–Au catalyzed synthesis of vinyl acetate from oxidation of ethylene and acetic acid in heterogeneous gas reaction. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18(1), 266–271. <https://doi.org/10.1016/J.JIEC.2011.11.036>

Sahinidis, N. v. (1996). BARON: A general purpose global optimization software package. *Journal of Global Optimization* 1996 8:2, 8(2), 201–205. <https://doi.org/10.1007/BF00138693>

Shanghai College Chemical Engineering. (1976). Study On The Vapor Liquid Equilibrium Data For Acetic Acid-Water-Vinyl Acetate Ternary System-I.The Mutually Miscible Liquid Phase Region. *Acta Chimica Sinica*, 34, 79–93.

Wisniak, J. (1993). A New Test for the Thermodynamic Consistency of Vapor-Liquid Equilibrium. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 32(7), 1531–1533. https://doi.org/10.1021/IE00019A030/ASSET/IE00019A030.FP.PNG_V03

Wyczesany, A. (2014). Calculation of vapor-liquid-liquid equilibria at atmospheric and high pressures. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53(6), 2509–2519. https://doi.org/10.1021/IE403418P/SUPPL_FILE/IE403418P_SI_001.PDF

Xie, Y. N., Meng, Z., & Li, F. (2020). Purification Process Design of Vinyl Acetate Based on Aspen Plus. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 545(1), 012026. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/545/1/012026>

Zhang, C., Wan, H., Xue, L., & Guan, G. (2011). Investigation on isobaric vapor liquid equilibrium for acetic acid + water + (n-propyl acetate or iso-butyl acetate). *Fluid Phase Equilibria*, 305(1), 68–75. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2011.03.006>

Marco coordinado de residuos agrícolas y bio-productos de alto valor agregado

Heriberto Alcocer-Garcia,^a Juan G. Segovia-Hernandez,^{a*} Eduardo Sanchez-Ramirez,^a
Ana Gabriela Romero-García,^a Yicheng Hu,^b and Victor M. Zavala,^b

^a*Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N, Guanajuato, GTO 36050, México*

^b*Universidad de Wisconsin-Madison, 1415 Engineering Dr, Madison, WI 53706, USA*

**gsegovia@ugto.mx*

RESUMEN

Este trabajo propone un marco coordinado para la gestión de la biomasa lignocelulósica a partir de residuos agrícolas de forma escalable mediante la organización del intercambio, distribución, transporte y transformación de biomasa en bio-productos de valor añadido, concretamente: Ácido levulínico y Furfural. Estos productos de alto valor agregado fueron seleccionados porque son precursores del metiltetrahydrofurano, que es un aditivo que se puede mezclar con gasolina y tiene una demanda de más de 20.000 kilo toneladas/año. El estado de Guanajuato fue tomado como caso de estudio, ya que es el segundo estado de México con mayor generación de residuos agrícolas. Este tipo de marco se inspira en los sistemas coordinados con los que operan actualmente las redes eléctricas en el mundo. Dentro del marco propuesto, los proveedores de biomasa, las tecnologías involucradas en el procesamiento y los proveedores de transporte participan en un sistema coordinado que es operado por un sistema independiente. El operador resuelve un problema de despacho que maximiza el bienestar social y equilibra la oferta y la demanda en un área geográfica específica, para esto, el operador obtiene todas las ubicaciones, los precios de diferentes biomasa y productos derivados. La coordinación permite la gestión de restricciones e interdependencias complejas derivadas del transporte y las transformaciones fisicoquímicas de la biomasa en bio-productos de valor añadido. Como resultado, el sistema coordinado ofrece precios y asignaciones de productos que cumplen con las propiedades económicas y de eficiencia de un mercado competitivo. A través del marco coordinado, se obtienen las rutas de transporte, ubicaciones y tecnologías involucradas para satisfacer la demanda. La producción de ácido levulínico fue de 330 Kt/año y 394 Kt/año de Furfural. Que representan el 3% de la demanda mundial de materias primas para el metiltetrahydrofurano. Por otro lado, el beneficio generado a los proveedores de biomasa supera los \$27 millones/año, lo que representaría un aumento en el bienestar social en la zona, específicamente a los agricultores. El marco permite identificar pautas del comportamiento del mercado considerando a todos los actores del mercado, con estas pautas es posible proponer acciones para poder proyectar un mercado más competitivo para todos los productos y que favorezca a todos los actores del mercado.

Palabras clave: Marco coordinado, Biomasa, Ácido levulínico, Furfural

INTRODUCCIÓN

El concepto de Biorrefinería se originó en la década de 1990 como resultado de la escasez de combustibles fósiles y las crecientes tendencias en el uso de biomasa como materia prima renovable para la producción de productos no alimentarios [1]. El mal manejo y disposición de los desechos agrícolas representa no solo un peligro para el medio ambiente, sino también una oportunidad económica perdida. Específicamente, existen varias tecnologías de procesamiento de biomasa para generar productos de valor agregado a partir de desechos orgánicos, como productos químicos básicos, combustibles y electricidad. Desafortunadamente, la viabilidad económica de las rutas de procesamiento de desechos depende en gran medida de la escala, los costos de transporte y la composición de los desechos agrícolas (que varían según los desechos. Además, los responsables de la toma de decisiones a menudo desconocen los usos potenciales de los flujos de desechos y, por lo tanto, su valor inherente. Otro obstáculo asociado con la gestión de residuos es la falta de alternativas rentables para recolectar y transportar grandes cantidades a largas distancias. En México, actualmente existen regulaciones gubernamentales e incentivos para el uso de biomasa, sin embargo, los incentivos no han podido superar los costos de producción y logística. Por lo tanto, no existe una red de gestión de residuos que garantice un mercado fuerte, crecimiento sostenido para los sectores urbano y agrícola. Otro aspecto importante es que en México los estudios sobre el aprovechamiento de la biomasa se han enfocado en su aprovechamiento para generar energía o biocombustibles, por ejemplo: Quiroz-Ramirez et.al (2017) [2] realiza una planeación óptima de biomasa para la producción de biobutanol y Santibañez-Aguilar et. .al (2019) [3] propone el modelo matemático para la planificación del uso de la biomasa para los sistemas de producción de energía, ambos trabajos dejando de lado el uso potencial de la biomasa como materia prima para productos de alto valor agregado como el ácido levulínico y el furfural. Este trabajo propone un marco coordinado para la gestión de biomasa lignocelulósica a partir de residuos agrícolas (rastros de maíz, paja de trigo y rastrojos de sorgo) de forma escalable organizando el intercambio, distribución, transporte y transformación de la biomasa en bioproductos de valor añadido, en concreto: Levulínico ácido y furfural. Estos productos de alto valor agregado fueron seleccionados por ser precursores del metiltetrahidrofurano, que es un aditivo que se puede mezclar con la gasolina y que según lo informado por Grand View Research (2015) tiene una demanda de más de 20.000 kilo toneladas. Se tomó como caso de estudio al estado de Guanajuato, el cual es el segundo estado de México con mayor generación de residuos agrícolas que aportan el 10.2 % de la generación nacional. En el marco propuesto, los proveedores de biomasa, las tecnologías involucradas en el procesamiento y los proveedores de transporte participan en un sistema coordinado que es resuelto por un operador de sistema independiente (ISO). El operador resuelve un problema de despacho que maximiza el bienestar social y equilibra la oferta y la demanda en un área geográfica determinada, para ello el operador obtiene todas las ubicaciones, los precios de las diferentes biomásas y productos derivados. La coordinación permite la gestión de restricciones e interdependencias complejas que surgen del transporte y las transformaciones fisicoquímicas de la biomasa en bio-productos de valor agregado.

METODOLOGÍA

Consideramos un sistema que comprende un conjunto de ubicaciones geográficas (nodos) N , productos P , proveedores S , consumidores D , proveedores de transporte L y proveedores de transformación (tecnología) T . Los productos comprenden diferentes tipos de flujos de residuos y productos derivados que ofrecen los proveedores de transporte. alternativas (por ejemplo, transporte, ferrocarril, oleoductos) para mover productos entre ubicaciones, y los proveedores de tecnología ofrecen alternativas para procesar productos para producir otros productos de mayor valor.

El sistema de gestión propuesto es operado por una ISO que recopila información de licitación de todos los participantes (costos, capacidades y factores de transformación) para obtener asignaciones óptimas de servicios de oferta, demanda, transporte y transformación de productos. La ISO determina estas asignaciones resolviendo un problema de despacho que encuentra rutas óptimas de transporte y transformación para desechos y productos derivados que maximizan el bienestar social y equilibran la oferta y la demanda de todos los productos en una región geográfica. Por razones que se harán evidentes, este problema de despacho puede verse como un problema de compensación del mercado. Los proveedores de transporte autorizados crean una red de transporte que conecta nodos en el sistema que realizan el intercambio de productos. Se espera que un sistema de gestión eficiente despeje proveedores y prestadores que ofrecen servicios a bajo costo y dará preferencia a los consumidores con mayores costos de licitación. El problema de compensación también tiene como objetivo encontrar precios que se utilicen para remunerar adecuadamente a los proveedores y proveedores para cubrir los costos de sus servicios y cobrar a los consumidores por el servicio prestado.

1.1. Formulación

Dada la información de licitación asociada a cada proveedor α^s , consumidor α^d , proveedor de transporte α^f , tecnología α^ξ y capacidad máxima de biomasa \bar{s} , demanda \bar{d} , proveedor de transporte \bar{f} , Procesando $\bar{\xi}$ la ISO resuelve el problema de compensación Eq. (1) para encontrar asignaciones. Estas asignaciones maximizan el bienestar social Eq. (1a) y satisfacer las leyes de conservación física Eq. (1b), y las restricciones de capacidad Eq. (1c)-(1f). Maximizar la función de bienestar social maximiza la demanda servida y minimiza los costos de suministro, transporte y transformación. Las leyes de conservación también se conocen como restricciones de equilibrio o restricciones de compensación del mercado. El primer término entre paréntesis es el flujo de entrada total para el producto p en nodo n (dado por los flujos de suministro y los flujos de transporte que ingresan al nodo). El segundo término entre paréntesis es el flujo de salida total del producto. p del nodo n (dado por los flujos de demanda y los flujos de transporte que salen del nodo). El tercer término es la tasa de generación/consumo del producto. p en todas las tecnologías ubicadas en el nodo n . En un trabajo publicado por Apoorva et al. (2019) [4] se describe la formulación completa del despacho y las propiedades fundamentales del marco de coordinación.

$$s. t. \left(\sum_{i \in \mathcal{S}_{n,p}} s_i + \sum_{\ell \in \mathcal{L}_{n,p}^{in}} f_\ell \right) - \left(\sum_{j \in \mathcal{D}_{n,p}} d_j + \sum_{p \in \mathcal{L}_{n,p}^{out}} f_{\ell \in \mathcal{L}_{n,p}} \right) + \sum_{t \in \mathcal{T}_n} \gamma_{t,p} \quad \xi_t \quad (1a)$$

$$= 0, (n, p) \in \mathcal{N} \times \mathcal{P}, (\pi_{n,p}) \quad (1b)$$

$$0 \leq s_i \leq \bar{s}_i, i \in \mathcal{S} \quad (1c)$$

$$0 \leq d_j \leq \bar{d}_j, j \in \mathcal{D} \quad (1d)$$

$$0 \leq f_\ell \leq \bar{f}_\ell, \ell \in \mathcal{L} \quad (1e)$$

$$0 \leq \xi_t \leq \bar{\xi}_t, t \in \mathcal{T} \quad (1f)$$

RESULTADOS

El problema de optimización incluye: 51 nodos, 1277 proveedores de biomasa y 8 productos diferentes (materias primas y productos derivados). Los 46 municipios del estado de Guanajuato y su producción agrícola para el periodo 2009-2018; Se consideraron cuatro lugares de instalación de las tecnologías de conversión y un único punto de demanda de los productos resultantes de la transformación. Para dar una idea de la complejidad logística involucrada, el problema de optimización es un problema de programación lineal que contiene más de 24801 variables de decisión y 4860 restricciones.

Para este caso de estudio se utilizó el 60% de la biomasa del estado de Guanajuato. Esto produciría alrededor de 434 Kt/año de ácido levulínico y 487 Kt/año de furfural. Sin embargo, mediante la implementación del marco coordinado se muestra, que al tener una disponibilidad del 60% de biomasa, la mejor solución encontrada solo utiliza el 80% de esta biomasa, esto ocurre porque el costo de procesamiento de la paja de trigo se ve afectado por la economía de escala. Si se considerara la paja de trigo, se debería proponer una tecnología más grande para el procesamiento. Por tanto, en este trabajo se obtuvo una producción de 330 Kt/año de ácido levulínico y 394 Kt/año de Furfural, lo que representa el 3,0% de la demanda mundial de materias primas para el MTHF.

La Tabla 1 muestra los precios a los que se liquida el mercado (precios de liquidación), estos precios se calculan de forma independiente para cada nodo presente en el problema. Como resultado, obtuvimos un rango de precios donde nuestro mercado aún existe y todos los actores del mercado se benefician. En este caso, los precios de liquidación de la paja de trigo son cero ya que no participan en el mercado. La Figura 1 muestra los flujos de transporte despachados en el Estado de Guanajuato para diferentes biomásas y productos derivados, en la Figura 1c no aparecen flujos porque la paja de trigo no participa en el mercado.

Tabla 1. Precios de compensación

Precios de compensación			
Producto	Precio teórico	Precio mínimo	Precio Máximo
Rastrojo de maíz	18.33	8.18	21.01
Paja de sorgo	14.96	5.24	17.61
Paja de trigo	16.66	0	0
Furfural	1700.00	1685.71	1700.00
Ácido levulínico	11023	11008.71	11023

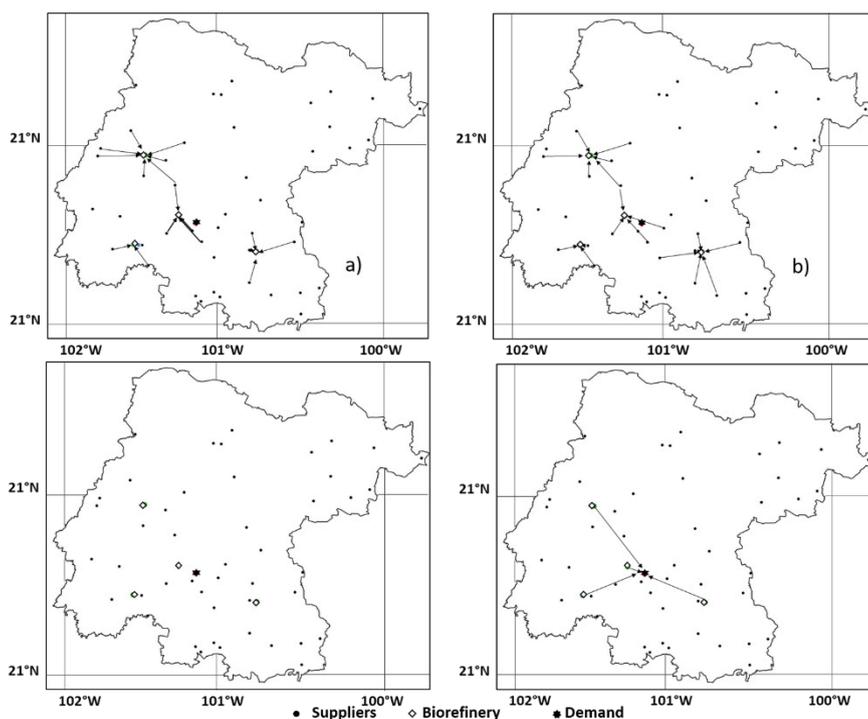


Figura 1. Flujos de transporte despejados en el Estado de Guanajuato para diferentes biomásas y productos derivados: A) Rastro de Maíz, B) Paja de Sorgo, C) Paja de Trigo y D) Productos Derivados.

En la Figura 1, no todos los proveedores están involucrados en el mercado, esto debido al costo del proceso y principalmente al costo del transporte. Los principales proveedores están en municipios cercanos a las biorrefinerías, en el centro y sur del estado de Guanajuato. La ganancia generada por la implementación del sistema coordinado es de $1.84E+03$ millones de USD/año, esta ganancia es grande debido al precio del ácido levulínico. Los ingresos totales son $4.49E+03$, estos ingresos están asociados a las ventas.

Si bien estos resultados son alentadores, también es importante mencionar que tiene un impacto directo en la región ya que el costo total de transporte es de 5.79 millones de USD/año, el costo total de abastecimiento es de 2.76E+01 millones de USD/año.

CONCLUSIONES

Presentamos un sistema coordinado para facilitar la gestión de residuos agrícolas de forma escalable coordinando el intercambio, transporte y transformación de biomasa en productos de valor añadido. El marco funciona como un mercado coordinado en el que los proveedores y consumidores de residuos, así como el transporte y la tecnología, prestan servicios de licitación a un operador de sistema independiente. Los precios de los residuos y productos derivados en diferentes puntos geográficos se obtienen resolviendo un problema de despacho que maximiza el bienestar social y equilibra los productos en toda la región. La coordinación le permite manejar interdependencias complejas entre productos y ubicaciones. Demostramos que el sistema ofrece precios y asignaciones que satisfacen las propiedades económicas y de eficiencia fundamentales que se esperan de un mercado competitivo. También mostramos que el sistema propuesto proporciona un marco sistemático para monetizar los impactos ambientales, los impactos en la salud y los beneficios de remediación. Además, los precios revelan el verdadero valor de los flujos de desechos y capturan variaciones espaciotemporales que ayudan a priorizar áreas y revelan la necesidad de inversión en tecnologías de procesamiento, transporte, reubicación de instalaciones y almacenamiento estacional. El marco geográfico propuesto es escalable en el sentido de que puede proporcionar un acceso abierto que fomente las transacciones entre muchos actores pequeños y grandes al permitir la coordinación con otras infraestructuras. Adicionalmente, este marco coordinado representa un valioso aporte a la visualización del mercado en México derivado del aprovechamiento de la biomasa para la obtención de componentes químicos básicos, como el ácido levulínico y el furfural, ya que a la fecha los esfuerzos realizados se han concentrado en la producción de energía y biocombustibles. Un marco coordinado será cada vez más necesario a medida que la población humana crezca y se movilice, y la disponibilidad de recursos se vuelva más incierta.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Popa, V. I., & Volf, I. (2018). Biomass as renewable raw material to obtain bioproducts of high-tech value. *Elsevier*.
2. Quiroz-Ramírez, J. J., Sánchez-Ramírez, E., & Segovia-Hernández, J. G. (2017). Planning of biobutanol production considering raw material availability: economic and environmental optimization. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 40, pp. 757-762). Elsevier.
3. Santibanez-Aguilar, J. E., Lozano-García, D. F., Lozano, F. J., & Flores-Tlacuahuac, A. (2019). Sequential use of geographic information system and mathematical programming for optimal planning for energy production systems from residual biomass. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(35), 15818-15837.

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

4. Sampat, A. M., Hu, Y., Sharara, M., Aguirre-Villegas, H., Ruiz-Mercado, G., Larson, R. A., y Zavala, V. M. (2019). Coordinated management of organic waste and derived products. *Computers & chemical engineering*, 128, 352-363.

Efecto del Costo de Bombeo en la Optimización del Layout: Análisis Basado en Criterios de Seguridad de Procesos

Antioco Lopez Molina ^{a,*}, Fernando I. Gomez Castro ^b, Carolina Conde Mejía ^a, Luis M. Valenzuela Gómez ^a

^a *Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Ingeniería Petroquímica, Carr. Libre Villahermosa-Comalcalco km. 27, Rivera Alta, Tabasco, México 86205. antioco.lopez@ujat.mx*

^b *Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, Guanajuato, México 36050*

RESUMEN

La ubicación de los equipos de proceso es un tema importante para la industria. Una mala distribución incide directamente en la seguridad y en la economía del proceso. En este trabajo se propone una optimización multiobjetivo para optimizar la distribución del *layout*, minimizando el costo anual y el riesgo de efecto dominó. El modelo de optimización minimiza el riesgo efecto dominó evaluando las consecuencias y la frecuencia de ocurrencia de accidentes debido a las explosiones. La función de costos considera la compra de equipos, tuberías, terreno, salvaguardas activas y pasivas, costo de explosión y el bombeo. El modelo resultante corresponde a un MINLP. Para la optimización multiobjetivo se usó el método de la restricción épsilon (ϵ -constraint). El modelo se resolvió usando GAMS[®]. El caso de estudio fue el proceso de producción de biodiesel usando etanol a condiciones supercríticas. El índice HPSI fue usado para identificar los equipos peligrosos. La metodología de árbol de fallas fue usada para estimar la frecuencia de accidentes. Se probó el modelo con y sin costo de bombeo para definir la influencia que tiene en la seguridad y la ubicación de los equipos. Encontrando que los costos de bombeo representan entre el 40-68% del costo anual, por lo que no considerar el costo de bombeo dentro de la optimización puede generar distribuciones seguras con mayores costos de operación. La optimización multiobjetivo permitió encontrar la mejor solución para este problema.

Palabras clave: *layout*, efecto dominó, biodiesel, ϵ -constraint, seguridad de procesos

INTRODUCCIÓN

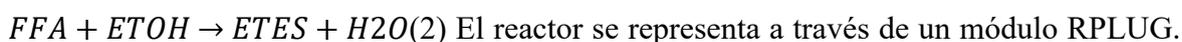
Construir una planta en un área grande aumenta la seguridad del proceso, evitando que un accidente desencadenar a otros y producir un efecto dominó. Sin embargo, este enfoque puede aumentar el costo de construcción, costo de terreno, costo de tubería y de bombeo. Por otra parte, varios trabajos enfocados a la optimización de la distribución de equipos de proceso, se han concentrado en minimizar el área ocupada para reducir estos costos; lo que implica que los equipos estén demasiado cercanos aumentando así el riesgo de accidente dominó. Aunque muchos autores solo han considerado el costo de tubería

en el modelado para la distribución óptima de equipos, el costo de energía por bombeo es la variable realmente importante que debe ser incluido dentro del modelo. Una revisión de las metodologías para la optimización del diseño de la planta con consideraciones de seguridad fue realizada por Jung (2015). Todos los modelos presentados han contribuido a la optimización del *layout* y en la prevención del efecto dominó; sin embargo, no han considerado el costo de bombeo, el cual es un factor importante para el diseño de una planta de procesos, pues este costo puede representar hasta el 70% del costo de operación de una planta, por lo que es necesario incorporarlo en el modelado.

METODOLOGÍA

Diseño del proceso

El caso de estudio fue la producción de biodiesel usando etanol a condiciones supercríticas. El proceso se simuló, diseñó y analizó en Aspen Plus V9.0. El caudal de aceite requerido para mantener la producción anual deseada se estima asumiendo que se obtienen los triglicéridos totales y los ácidos grasos libres. Solo se pierden trazas de los ésteres etílicos en el paso de purificación. Estos supuestos estiman las tasas de alimentación de aceite en 3.341 kg/h, para los niveles de producción de 30,000 t/a. La relación molar etanol/aceite se toma como 40; este es un valor reportado por Varma et al. (2010) sobre los cuales no se potencia la conversión a biodiesel. Ambas corrientes se acondicionan primero a 200 bar y 330°C. Luego, el aceite y el etanol ingresan a un reactor, donde ocurren dos tipos de reacciones: transesterificación (ecuación 1) y esterificación (ecuación 2).



La longitud y el diámetro del

reactor se manipulan para asegurar un rendimiento de biodiesel lo suficientemente alto como para permitir que la corriente de biodiesel salga del decantador satisfaciendo los estándares correspondientes de triglicéridos, agua, glicerol libre y glicerol total (Gómez-Castro et al., 2013). Todo el tramo de alta presión del proceso se representa a través del modelo RK-Aspen (Glisic et al., 2007; Gutiérrez Ortiz, 2020). Primero se usa una columna de destilación en la sección de baja presión para recuperar el exceso de etanol. El equilibrio de fase en esa sección se modela a través de UNIFAC-LL. Una primera visión del diseño de la columna se obtiene a través del módulo DSTWU. Luego, la columna se simula rigurosamente con el módulo RadFrac para recuperar etanol superior al 99,5% mol, con una pureza del 99,5% mol en el destilado. Una vez obtenida la pureza, se fija mediante una especificación de diseño.

Identificación de equipos peligrosos

En este trabajo, se ha utilizado el índice de corrientes de proceso peligrosas (HPSI) para identificar los flujos más peligrosos en el proceso. Se aplica el HPSI ya que puede evaluar procesos con mezclas acuosas inflamables o combustibles (López-Molina et al., 2020). El HPSI se define como:

$$HPSI = \left(\frac{I_P I_{MF} I_{\Delta HC} I_{FP}}{I_\rho} \right) \cdot W \quad (3)$$

Donde: I_P , I_{MF} , $I_{\Delta HC}$, I_{FP} y I_ρ son indicadores normalizados para presión, caudal molar, calor de combustión, punto de inflamación y densidad, respectivamente; W es un factor de escala. Los indicadores normalizados se definen como sigue:

$$I_i = \frac{\text{propiedad } i \text{ de cada corriente}}{\text{valor promedio de la propiedad } i \text{ de todo el proceso}} \quad (4)$$

Las simulaciones de proceso muestran directamente información sobre el caudal molar, la presión y la densidad de cada flujo. El calor de combustión de los componentes puros se obtiene de la base de datos del simulador y el calor de combustión de la mezcla se calcula mediante una regla de mezcla simple. El punto de inflamación de los componentes puros se obtiene de la base de datos de CAMEO CHEMICAL. Cuanto más elevado el valor del HPSI, más peligrosa es la corriente. La metodología detallada puede ser revisada en (López-Molina et al., 2020).

Optimización del layout

La siguiente formulación multiobjetivo da la optimización del diseño:

$$\min \mathbf{Z} = [Z_1 \quad Z_2] \quad (5) \text{ s.t.}$$

$$Z_1 = (\sum_i \sum_{j \neq i} C_{ij} D_{ij} + C_D + \sum_i \sum_{q \in q_i} P_{iq} U_{iq} + \sum_i \sum_{k \in k_i} P_{ik} Z_{ik} + CL) / 5 + \sum_i \sum_{j \neq i} PO_{ij} CB \quad (6)$$

$$Z_2 = FTD(C_D + C_{LOS}) \quad (7)$$

$$h(\mathbf{x}) = 0 \quad (8)$$

$$g(\mathbf{x}) \leq 0 \quad (9)$$

donde Z_1 es la función de costo, C_{ij} es el costo por conectar las unidades i y j , D_{ij} es la distancia entre las unidades, C_D es el costo del daño por escenario de explosión, P_{iq} es el costo por la adquisición e instalación del dispositivo de protección pasiva q en la unidad i , U_{iq} es una variable binaria que indica si las salvaguardias de protección q están o no instaladas en la unidad i , P_{ik} es el costo debido a la adquisición e instalación del dispositivo de protección activa k en la unidad i , Z_{ik} es una variable binaria que indica si el dispositivo de protección k está o no instalado en la unidad i , C_L es el costo del terreno, PO_{ij} es la potencia necesaria para mover el fluido del equipo i al equipo j , CB es el costo de la energía eléctrica por kWh. Para calcular PO_{ij} se usa la ecuación de Bernoulli, teniendo como consideración que no hay cambio de alturas, no se considera la pérdida de presión por instrumentos y diámetro constante, como material se considera tubería de acero al carbón. Por lo que el trabajo de la bomba se estima solo considerando la diferencia de presiones, entrada y salida, de los equipos y las pérdidas por fricción de la tubería. Por otro lado, Z_2 es la función de riesgo, FTD es la frecuencia dominó, C_D es el costo dominó y C_{LOS} es el costo asociado a pérdidas, estimado para 6 meses. La frecuencia dominó viene dada por (López-Molina et al., 2014):

$$TDF = f^{ex} \cdot PD^{ex} \quad (10)$$

donde f^{ex} es la frecuencia de explosión del equipo peligroso y PD^{ex} es la probabilidad de daño total debido a la explosión. $h(x)$ y $g(x)$ son las restricciones de igualdad y desigualdad asociadas con la orientación y ubicación del equipo, el área, la estimación de sobrepresión, la probabilidad de daño para escenarios de explosión y la restricción geométrica. Estas ecuaciones han sido reportadas por López-Molina et al. (2013). Todo el modelo MINLP se resuelve en el software GAMS[®], utilizando el resolutor DICOPT, en una laptop Dell intel i5 8th Gen, con 16 GB de RAM. Para resolver el problema de optimización multiobjetivo, se aplica el método de la restricción ϵ , manteniendo la función de costo y restringiendo la TDF dentro de los valores 1×10^{-9} y 1×10^{-3} . En el problema de optimización se consideran algunos dispositivos de protección activa y pasiva. Como posibles dispositivos de protección activa, se utilizan los siguientes: agua de refrigeración adicional (1), dispositivos de alivio de sobrepresión adicionales (2), dispositivos de alivio de incendios adicionales (3), segunda piel en el reactor (4), sistema de protección contra explosiones en el reactor (5), sistema de control duplicado con flujo entrelazado en el reactor (6), y sistema de parada de control duplicado en la torre de destilación (7). Como posibles salvaguardas pasivas, se considera el muro de sobrepresión (8). Estas medidas de seguridad sugieren seis configuraciones para dispositivos activos, combinando su efecto para reducir el riesgo en cada una de las unidades de proceso peligrosas. Las configuraciones para la toma de decisiones y sus costos fueron tomadas de la bibliografía (Patsiatzis et al., 2004)

RESULTADOS

La Figura 1 muestra el diagrama de proceso simulado en Aspen Plus V9.0, se puede observar en color rojo las corrientes que resultaron mas peligrosas al aplicar el HPSI, por lo que se define al reactor y a la columna de destilación como los equipos de mayor peligro. Las corrientes en rojo representan son las más peligrosas del proceso.

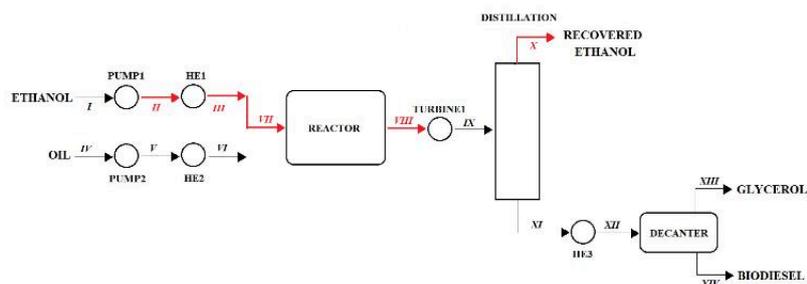


Figura 1. proceso para la producción de biodiésel con etanol supercrítico.

En relación a la optimización del *layout*, encontramos que el riesgo mínimo es costoso y el costo mínimo podría comprometer la seguridad de la planta, lo mejor sería buscar la solución más cercana al punto utópico. Por esta razón se construyó el frente de Pareto para la optimización multiobjetivo. Se ha desarrollado un frente de Pareto para cada una de las tres escalas de producción, consulte la Figura 2. Para una mejor visualización, la frecuencia del dominó se presenta con una escala logarítmica.

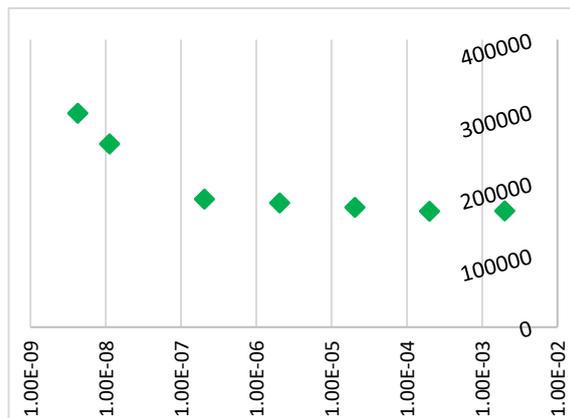


Figura 2. Frente Pareto Frecuencia total dominó (TDF) vs Costo anual

La frecuencia de efecto dominó de 4.23×10^{-9} representa la solución del mínimo riesgo, mientras que una frecuencia de 2.0×10^{-3} fue estimada para el mínimo costo. Se puede observar que conforme disminuye la frecuencia de accidente aumenta el costo anual, es debido que se incrementan las distancias de separación entre equipos aumentando el costo de bombeo. La solución más cercana al punto utópico se eligió utilizando el criterio de la distancia más corta al origen, la cual corresponde a una frecuencia de 2.04×10^{-7} . Aunque la decisión dependerá de quien realice el análisis, estos pueden preferir menores costos o menores riesgos. La distribución más segura, económica y cercana a la utopía para este caso de estudio se muestran en la Figura 3.

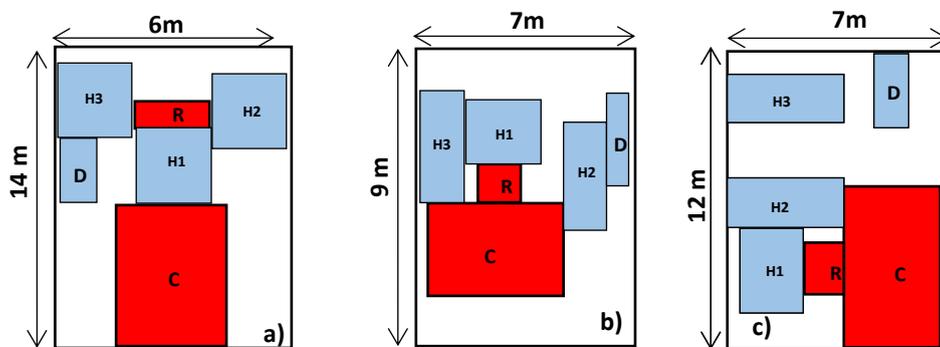


Figura 3. Distribuciones óptimas para a) mínimo riesgo, b) mínimo costo y c) mejor solución

En relación a las salvaguardas y el porcentaje del costo de bombeo con respecto al costo anual se muestra en la Tabla 1. Observando que la solución del mínimo costo y mejor solución son parecidas en costos sin mayor la mejor solución en solo 10%. En relación a las salvaguardas se observa que el mínimo riesgo elige una configuración k-6 tanto para el reactor (dispositivos 1,2,4,5,6) como para la columna (dispositivos 1,2,7), mientras que la mejor solución selecciona una configuración k-5 para ambos (dispositivos 1,3,5,6 para el reactor y 1,7 para la columna). Las distribuciones obtenidas sin considerar el costo de bombeo resultaron en áreas ocupadas mayores y menor frecuencia de accidente en el caso del mínimo riesgo (3.35×10^{-11}).

Tabla 1. Selección de salvaguardas y porcentaje del costo de bombeo

Escenario	FTD	Costo Total Anual (Millones)	Costo Bombeo	Dispositivos Activos	Dispositivos Pasivos
Min Riesgo	4.23E-09	297.72	69%	K-6	Q-1
Min. Costo	2.00E-03	161.86	46%	K-1	Q-1
Mejor Solución	2.04E-07	178.11	41%	K-5	Q-1

CONCLUSIONES

Se propuso un modelo MINLP para optimizar la ubicación de los equipos de proceso. La optimización se planteó de manera multiobjetivo, minimizando el costo de bombeo y el riesgo de efecto dominó. El costo de bombeo representa entre 40 al 68% de los gastos anuales; por ello, distribuciones compactas tienden a reducir este gasto. Con el modelo propuesto se puede obtener una distribución que reduzca los costos de operación con un aceptable valor de riesgo, esto último mediante la selección de las salvaguardas activas y pasivas. Incluir el costo de bombeo para optimización de *layout* permite obtener distribuciones más apegadas al contexto operacional.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, a la Universidad de Guanajuato y al Fondo PRODEP por el apoyo brindado para este trabajo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Gómez-Castro, F.I., Rico-Ramírez, V., Segovia-Hernández, J.G., Hernández-Castro, S., El-Halwagi, M.M., (2013). Simulation study on biodiesel production by reactive distillation with methanol at high pressure and temperature: impact on costs and pollutant emissions. *Computers and Chemical Engineering*, 52, 204- 215.
- Glisic, S., Montoya, O., Orlovic, A., Skala, D., (2007). Vapor-liquid equilibria of triglycerides-methanol mixtures and their influence on the biodiesel synthesis under supercritical conditions of methanol. *Journal of the Serbian Chemical Society*, 72, 13-27.
- Gutiérrez Ortiz, F.J., (2020). Techno-economic assessment of supercritical processes for biofuel production. *The Journal of Supercritical Fluids*, 160, 104788.
- Jung, Seungho. (2015). Facility siting and plant layout optimization for chemical process safety.
- López-Molina, A., Huerta-Martínez, A.A., Gómez-Castro, F.I., Conde-Mejía, C., (2020). A novel approach to identify hazards in non-conventional/intensified biofuels production processes. *Chem Eng Process*, 157, 108139.
- López-Molina, A., Vázquez-Román, R., Mannan, M. S., & Félix-Flores, M. G. (2013). An approach for domino effect reduction based on optimal layouts. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26, 887-894.
- López-Molina, A., Vázquez-Román, R., Quiroz-Pérez, E., (2014). A methodology based on fault tree analysis to assess the domino effect frequency. *ICHEME Hazards 24*, Edinburg, UK, 7-9.
- Patsiatzis, D.I., Knight, G., Papageorgiou, L.G., (2004). An MILP approach to safe process plan layout. *Chem. Eng. Res. Des.*, 82, 579-586.
- Varma, M.N., Deshpande, P.A., Madras, G., (2010). Synthesis of biodiesel in supercritical alcohols and supercritical carbon dioxide. *Fuel*, 89, 1641-1646.

Optimización de la seguridad del Nexo Energía-Agua-Alimentos mediante esquemas de justicia

Brenda Cansino-Loeza, Aurora del Carmen Munguía López, José María Ponce-Ortega*

Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mújica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, México, 58060.

jmponce@umich.mx

RESUMEN

La seguridad del nexo agua-energía-alimentos es un desafío global que está en constante riesgo debido a la globalización y mala gestión de los recursos. En este trabajo se presenta un modelo de optimización para cuantificar la seguridad de los recursos a través de indicadores relacionados con la disponibilidad, el acceso y la sustentabilidad del agua, la energía y los alimentos. El problema es analizado bajo diferentes esquemas de justicia (bienestar social, Rawlsian, Nash y Rawlsian-Nash) para maximizar la seguridad de los recursos y obtener el diseño óptimo del sistema. Para mostrar la aplicabilidad del modelo, se seleccionó como caso de estudio el estado de Sonora. Los resultados del caso de estudio muestran que con estos esquemas es posible aumentar en un 56%, 26% y 27% la seguridad de los sectores de agua, energía y alimentos respectivamente, y en un 27% la seguridad del nexo agua-energía-alimentos. El modelo propuesto se puede aplicar a cualquier región con los datos correspondientes.

Palabras clave: Nexo Energía-Agua-Alimentos; Optimización; Sustentabilidad; Seguridad; Esquemas de justicia.

INTRODUCCIÓN

El agua, la energía y los alimentos son recursos esenciales para satisfacer las necesidades humanas básicas y para el desarrollo económico. En los últimos años, la creciente demanda de recursos ha puesto en riesgo la seguridad hídrica, energética y alimentaria. El nexo energía-agua-alimentos surgió como un concepto integral que estudia las interconexiones entre los recursos energía, agua y alimentos para mejorar su seguridad y lograr la sostenibilidad de sistemas a largo plazo a través de la planificación y gestión de recursos. Recientemente, la seguridad de los recursos agua, energía y alimentos se ha estudiado ampliamente (Pahl-Wostl, 2019) y se han propuesto estrategias para mejorar la gestión de los recursos (Smith et al., 2020). Sin embargo, no se han desarrollado modelos de optimización en los que se cuantifique la seguridad del nexo energía-agua-alimentos para ayudar a los tomadores de decisiones en la planificación de sistemas integrales. La distribución de recursos es uno de los aspectos más importantes en la planificación. Comúnmente, la planificación está guiada por la maximización de las utilidades de las partes involucradas, sin embargo, esto puede conducir a soluciones múltiples e injustas

(Sampat y Zavala, 2019). En este sentido, se han desarrollado diferentes esquemas de justicia para la distribución de recursos (bienestar social, Rawlsian, Nash y Rawlsian- Nash) mediante los cuales se pueden generar soluciones únicas que capturen las escalas entre las partes interesadas. Sin embargo, estos esquemas no se han estudiado en sistemas que involucren la seguridad del nexo energía-agua-alimentos. Por lo tanto, en este trabajo se desarrolla un modelo matemático para el diseño y manejo óptimo de los recursos que permita mejorar la seguridad del nexo agua-energía-alimentos. En el modelo propuesto se cuantifica la seguridad de los recursos a través de indicadores relacionados con la disponibilidad, el acceso y la sostenibilidad del agua, la energía y los alimentos evaluando el sistema bajo diferentes esquemas de distribución para maximizar la seguridad de los recursos y obtener el diseño óptimo del sistema.

METODOLOGÍA

El modelo matemático se representa usando una superestructura general (Figura 1). Esta formulación se compone de balances de materia y restricciones para determinar la existencia de las tecnologías propuestas en la superestructura con el fin de integrar adecuadamente los recursos. Se incluyen índices de seguridad relacionados con el agua (I^{water}), la energía (I^{energy}) y los alimentos (I^{food}) y se basan en la disponibilidad ($I_{availability}$), accesibilidad ($I_{accessibility}$) y sustentabilidad ($I_{sustainability}$) de los recursos. El promedio de estos indicadores es igual al índice de seguridad del nexo agua-energía-alimentos (WEF) (I^{WEF}) que se maximiza de acuerdo con diferentes esquemas de distribución.

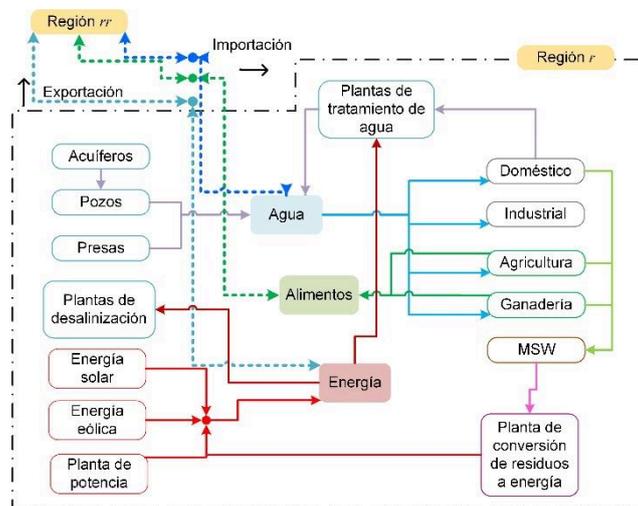


Figura 1. Superestructura general.

Funciones objetivo: Esquemas de distribución

Una forma útil de generar soluciones que puedan ayudar en la toma de decisiones y abordar una distribución de recursos es a través de la implementación de esquemas de distribución (bienestar social (SW), Rawlsian (RW), Rawlsian Nash (RW-N) y Nash (N)). El principal objetivo de este trabajo es maximizar el índice de seguridad del nexo agua-energía-alimentos bajo diferentes esquemas de distribución (Tabla 1). El esquema de bienestar social se basa en maximizar el beneficio total de todas las partes involucradas

en un sistema. En este trabajo, a través del enfoque de bienestar social, se maximizan los índices de seguridad asociados a los sectores agua, energía y alimentos para generar el máximo beneficio que es la seguridad del nexo agua-energía-alimentos (Ecuación 1). Sin embargo, se pueden encontrar múltiples asignaciones de recursos ya que las soluciones proporcionadas por este esquema pueden no ser únicas y, por lo tanto, este método genera ambigüedad. El principio de Rawls establece que la desigualdad debe tolerarse solo cuando mejora la situación de los menos aventajados (Hooker, 2010). El principio de Rawls se resuelve mediante un problema de optimización maximización-minimización, esto significa que maximiza las partes interesadas menos privilegiadas (índice de seguridad) para todos los escenarios (Ecuación 2). En este trabajo, el objetivo es maximizar el índice de seguridad para cada sector (agua, energía y alimentos), por lo tanto, transformamos el problema incluyendo una variable adicional (Θ) que ahora es un límite inferior para cada una de las variables individuales (índices), entonces el problema de optimización es ahora un problema de minimización con restricciones de desigualdad adicionales (Ecuaciones 3-4). De esta forma, el modelo puede maximizar la variable o índice menos aventajado. La expresión matemática del esquema de distribución de Nash es la maximización de la media geométrica de los objetivos de interés. Esto es equivalente a maximizar la suma de sus logaritmos, entonces, dado que la función logarítmica es estrictamente cóncava, tiene una solución óptima única. La asignación de Nash se obtiene maximizando la suma de los logaritmos de los índices de seguridad hídrica, energética y alimentaria (Ecuación 6). Finalmente, se incluye una combinación de esquemas de Rawlsian-Nash. El esquema de Rawlsian-Nash fue propuesto previamente por Munguía- Lopez et al. (2020) como una herramienta que combina los conceptos del esquema de Rawlsian y Nash (Ecuación 7-11).

Tabla 1. Ecuaciones representativas de los esquemas de distribución.

Bienestar social	Nash
$\phi^{sw} = I^{water} + I^{energy} + I^{food}$ (1)	$\phi^n = \ln (I^{water}) \ln (+I^{energy}) \ln ((6)^{food})$
Rawlsian	Rawlsian-Nash
$\phi^{rw} = \Theta$ (2)	$\phi^{rw n} = \Theta$ (7)
$- I^{water} \leq \Theta$ (3)	$-\ln (I^{water}) \leq \Theta$ (8)
$- I^{energy} \leq \Theta$ (4)	$-\ln (I^{energy}) \leq \Theta$ (9)
$- I^{food} \leq \Theta$ (5)	$-\ln (I^{food}) \leq \Theta$ (10)
	$-\left(\ln (I^{water}) + \ln (I^{energy}) + \ln (I^{food}) \right) \leq \Theta$ (11)

Caso de estudio

Para demostrar la aplicabilidad del modelo, el estado de Sonora fue seleccionado como caso de estudio debido a que es una de las entidades económicas más importantes de México. Sonora presenta una distribución desigual de recursos ya que la región norte del estado está cubierta por el desierto más caliente del país en la cual se presenta baja disponibilidad de agua. Por otra parte, la región sur es reconocida por su potencial producción agrícola. Sin embargo, en los últimos años se han presentado conflictos entre

los usuarios por el acceso del agua. Por ello, es importante estudiar las interconexiones entre los recursos para realizar una mejor planificación del nexo energía-agua-alimentos y mejorar la seguridad del mismo. En este trabajo, el estado de Sonora se ha dividido en 4 regiones; la región frontera (R1), la región centro (R2), la región centro-montaña (R3) y la región sur (R4).

RESULTADOS

El modelo matemático fue implementado en el software GAMS y corresponde a un Modelo de Programación Mixto Entero No Lineal (MINLP) el cual fue resuelto utilizando el *solver* LINDOGlobal. La Tabla 2 presenta los costos, el consumo de agua y la generación de emisiones del sistema bajo los diferentes esquemas de justicia:

Tabla 2. Aspectos económicos y ambientales del sistema bajo diferentes esquemas de distribución.

	Social welfare	Rawlsian	Nash	Rawlsian-Nash
AGUA (hm³)	6,135.56	6,135.56	5,363.63	5,363.35
COSTO (MMUSD)	1,913.64	1,699.77	1,660.53	1,141.26
GHGE (Ton CO₂)	12,332.00	9,603.00	9,753.00	9,923.00

Los resultados del índice de seguridad en agua, energía y alimentos para los esquemas SW, RW, N y RW-N se presentan en la Tabla 3, estos índices corresponden al estado de Sonora y son el promedio de los índices de seguridad de las regiones del estado. Por lo tanto, algunos índices de seguridad son mayores a 1, pero no significa que la seguridad de los sectores se haya logrado en su totalidad ya que algunos índices indican que en algunas regiones existen más recursos que los requeridos por la población. Por ejemplo, un valor mayor a uno para el índice de disponibilidad de energía significa que en la región se produce más energía que la energía demandada, por lo tanto, se podría exportar energía a otras regiones.

Tabla 3. Índice de seguridad del nexo energía-agua-alimentos bajo diferentes esquemas de distribución.

	Social welfare	Rawlsian	Nash	Rawlsian-Nash
I^{water}	0.953	0.953	0.849	0.834
I^{energy}	1.182	0.953	0.93	0.91
I^{food}	2.105	1.495	1.547	1.299
I^{WEF}	1.413	1.134	1.109	1.014
Agua				
$I^W_{Availability}$	1.086	1.086	0.774	0.777
$I^W_{Accessibility}$	1	1	1	0.95
$I^W_{Sustainability}$	0.774	0.774	0.774	0.777
Energía				
$I^E_{Availability}$	1.390	1.048	1.012	0.964
$I^E_{Accessibility}$	0.988	0.988	0.988	1
$I^E_{Sustainability}$	1.168	0.825	0.79	0.764
Alimentos				
$I^F_{Availability}$	4.631	2.969	3.3	2.375
$I^F_{Accessibility}$	1	0.951	0.988	0.951
$I^F_{Sustainability}$	0.685	0.564	0.354	0.57

Bienestar social. Los resultados obtenidos en el esquema SW presentan el Índice de Seguridad WEF más alto (1.413) en comparación con los demás esquemas. Los índices

de seguridad hídrica, energética y alimentaria fueron superiores a los demás esquemas. En el caso del sector hídrico, el índice de disponibilidad fue aproximadamente 24-26% mayor que en otros esquemas, esto se atribuye principalmente a que la producción de agua en R2 supera la demanda, la producción de electricidad en R2 es 3.3 veces la demanda de electricidad en la región, y se exporta a otras regiones para cubrir su demanda eléctrica. En este esquema, aunque la disponibilidad de electricidad supera la demanda de la región, el modelo determina que la electricidad se exportará a otras regiones con baja producción eléctrica en lugar de brindar total acceso a toda la población en R2.

Rawlsian. Los resultados del diseño del sistema para este esquema muestran un índice de seguridad WEF de 1.134, el cual es 20% menor al índice de seguridad WEF resultante del esquema SW debido a que en este esquema se produjo una menor cantidad de recursos.

Se logra la accesibilidad al agua para toda la población en las cuatro regiones, en el caso de la accesibilidad energética, el exceso de energía eléctrica producida en R2 se envía a otras regiones para aumentar su índice de accesibilidad. Respecto al sector alimentario, aunque el índice de disponibilidad muestra que la producción de alimentos es mayor que la demanda, no todos los alimentos producidos en la región alcanzan para cubrir los requerimientos nutricionales de la población, por lo que algunos tipos de alimentos deben importarse para satisfacer los macronutrientes requeridos por la población.

Rawlsian-Nash. En este esquema, el modelo no seleccionó nuevas plantas solares y eólicas. Esto provoca que el índice de seguridad energética sea el más bajo en comparación con los demás esquemas ya que se produce menor energía eléctrica, especialmente energía renovable que hace que el índice de sustentabilidad energética disminuya. Además, el agua en R2 no se produce en exceso como en los otros esquemas. La accesibilidad al agua y alimentos está cubierta para el 95% de la población en todas las regiones, por lo que la demanda de alimentos es menor que en los otros esquemas. El índice de seguridad WEF en este esquema es el más bajo de los esquemas de justicia abordados (1.014).

Nash. En este esquema, en el sector hídrico, se observa que R2 no produce más agua que la demanda en la región, por lo tanto, no existen importaciones internas de agua entre las regiones, y el índice de disponibilidad de agua es menor que los demás esquemas. A pesar de ello, el índice de accesibilidad al agua es igual a uno, lo que significa que la producción de agua es suficiente para cubrir los requerimientos hídricos de la población. Por otro lado, la accesibilidad alimentaria para toda la población no se logró en R1 y R4 y la sustentabilidad alimentaria presenta los índices más bajos de las regiones evaluadas debido a que se requiere importar alimentos para cubrir los requerimientos nutricionales de la población. El índice WEF para el esquema de Nash es igual a 1.109. Sin embargo, es importante mencionar que estos resultados corresponden a un modelo eficiente y único.

CONCLUSIONES

Estudiar las interconexiones de agua, energía y alimentos es esencial para el diseño de sistemas y la distribución de recursos para mejorar la seguridad del nexo agua-energía-

alimentos. Este trabajo presenta un modelo de optimización del nexo agua-energía-alimentos para maximizar la seguridad del nexo considerando diferentes esquemas de justicia para una mejor gestión de los recursos y el desempeño de los sectores. Como caso de estudio, se utilizaron regiones del estado de Sonora. Mediante la aplicación del enfoque propuesto, los resultados muestran un incremento en el índice de seguridad del sector agua del 6%, 56% del sector energía y 26% del sector alimentos. Esto da un incremento del 27% en el índice de seguridad WEF utilizando el esquema SW, que es el índice más alto entre los regímenes evaluados.

Este trabajo proporciona herramientas para los planificadores sociales y los gobiernos. Los métodos de distribución abordados pueden brindar soluciones eficientes y equitativas, y la selección del método de distribución para un sistema dependerá del criterio del tomador de decisiones. Por ejemplo, al aplicar el esquema de bienestar social, se maximizará la suma de los índices de seguridad. Sin embargo, este método podría proporcionar múltiples soluciones que den como resultado el mismo índice de seguridad de nexo. Además, el uso de este método podría conducir a la desigualdad entre la mejora de los sectores de agua, energía y alimentos, ya que no puede capturar tamaños de indicadores de seguridad. Para superar estas limitaciones, se pueden utilizar los enfoques de Rawlsian y Nash. El enfoque de Rawls será adecuado si el tomador de decisiones desea maximizar la seguridad del nexo maximizando la seguridad del sector más vulnerable. Por otro lado, el enfoque de Nash identificará una solución única donde los sectores evaluados se maximizarán juntos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero del Consejo Mexicano de Ciencia y Tecnología (CONACyT) a través del proyecto FORDECYT/12SE/2018/11/29-05 y del Consejo de Investigaciones Científicas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Munguía-López, A. del C., Núñez-López, J. M., Ponce-Ortega, J.M., (2020). Identifying fair solutions in the optimal design of integrated residential complexes. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 157, 108116.
- Pahl-Wostl, C., (2019). Governance of the water-energy-food security nexus: A multi-level coordination challenge. *Environ. Sci. Policy* 92, 356–367.
- Sampat, A.M., Zavala, V.M., (2019). Fairness measures for decision-making and conflict resolution. *Optim. Eng.* 2019 204 20, 1249–1272.
- Smith, G., Bayldon Block, L., Ajami, N., Pombo, A., Velasco-Aulcy, L., (2020). Trade-offs across the water-energy-food nexus: A triple bottom line sustainability assessment of desalination for agriculture in the San Quintín Valley, Mexico. *Environ. Sci. Policy* 114, 445–452.

OPTIMIZACIÓN DE LA CADENA DE SUMINISTRO PARA LA PRODUCCIÓN DE METANOL A PARTIR DE BIOMASA: DETERMINACIÓN DE MATERIA PRIMA Y UBICACIÓN DE BIORREFINERÍAS

Nereyda Vanessa Hernández-Camacho ^a, Fernando Israel Gómez-Castro ^{a, *}, José María Ponce-Ortega ^b, Mariano Martín ^c

^a *Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N, Guanajuato, Guanajuato, 36050, México. fgomez@ugto.mx*

^b *Facultad de Ingeniería Química, División de Estudios de Posgrado, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Múgica S/N, Morelia, Michoacán, 58060, México.*

^c *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Salamanca, Pza. Caídos 1-5, Salamanca, 37008, España.*

RESUMEN

La biomasa puede ser empleada como materia prima en la producción de diversos compuestos como puede ser el metanol, evitando con ello su producción tradicional mediante gas natural o carbón, la cual durante años han traído consecuencias negativas para el medio ambiente por las emisiones de CO₂. El estudio de la cadena de suministro de un producto químico requiere de un análisis de varias alternativas, lo cual puede ser abordado mediante el planteamiento de una superestructura en la cual incluyan las distintas etapas requeridas para el proceso de obtención, tal como la elección de materias primas y la ubicación de las biorrefinerías. El modelado de las superestructuras requiere de metodologías basadas en la lógica, entre las cuales se encuentra la programación disyuntiva generalizada (GDP). En el presente trabajo se desarrolla una superestructura para la cadena de suministro de producción de metanol. Dicha superestructura se modela con GDP y se relaja con la metodología del cascaron convexo. El modelo obtenido se resolvió en GAMS, obteniendo un costo mínimo de \$151,490.00 pesos para el procesamiento de 490 ton/ día, definiéndose el bagazo de caña y de trigo como las materias primas a utilizar, siendo originarias de Oaxaca, Guanajuato, Michoacán, Sonora y Veracruz; ubicándose las plantas de procesamiento en Nuevo León, Sonora, Veracruz, Yucatán y Aguascalientes.

Palabras clave: metanol, biomasa, cadena de suministro, programación disyuntiva generalizada.

INTRODUCCIÓN

El alto consumo de combustibles fósiles a nivel mundial ha provocado diversos problemas ambientales, entre los cuales se puede mencionar el cambio climático y el

agotamiento de recursos no renovables. Entre las alternativas al uso de fuentes fósiles para satisfacer los requerimientos energéticos de la actividad humana, es posible mencionar las fuentes renovables, tales como la biomasa. Se ha reportado que esta última fuente ha tenido un porcentaje de contribución del 10 al 14% a nivel mundial en la producción de energía (Shen y Yoshikawa, 2013). La biomasa, además de ser empleada como fuente energética, puede ser materia prima para la producción de diversos productos químicos; uno de estos es el metanol, cuya demanda mundial en 2018 fue de 91.55 millones de toneladas métricas (Maddren, 2019). Este compuesto químico es considerado como una de las materias primas más importantes (Dalena y col., 2018), debido a que se utiliza como la materia prima en la generación de productos como el formaldehído, ácido acético, combustibles, dimetil éter (DME), metacrilato de metilo (MMA), entre otros potenciales derivados (Alvarado, 2017; Dalena y col., 2018). La demanda del metanol continúa creciendo año con año, lo cual ha generado problemas ambientales, dado que las principales materias primas para su producción son el gas natural y el carbón. La opción de producir metanol mediante biomasa cuenta con beneficios como la reducción del consumo de energía en los procesos de producción, así como un impacto positivo en el tema de calentamiento global (Liu y col., 2020). En México el mayor productor de metanol es PEMEX, quien cuenta con una única planta de producción en Puebla, de la cual se ha reportado incumplimiento en la demanda por falta de gas natural como materia prima para producirlo (Caloca Moreno y Medina Estrada, 2016). Así, se tiene un área de oportunidad en la producción de metanol a partir de fuentes renovables.

Para la producción de metanol de una manera sustentable se deben considerar diversos aspectos que contribuirán a la adecuada ejecución de dicha producción. Este tipo de análisis puede realizarse por medio de la síntesis de superestructuras, lo cual permite diseñar y optimizar una cadena de suministro por medio de programación matemática. Dentro de la síntesis de superestructuras se debe primero postular la superestructura que englobe el conjunto de todas las alternativas factibles a considerar; se debe realizar la traducción de la superestructura a un modelo de programación matemática y, por último, determina la estructura óptima resolviendo el modelo de optimización matemática resultante (Udema y col., 1972). Las relaciones descritas por una superestructura se pueden codificar mediante modelos basados en la lógica; la programación disyuntiva generalizada (GDP) ofrece una manera intuitiva de expresar la relación entre diferentes alternativas de proceso, al mismo tiempo que captura la conexión entre cláusulas lógicas y la lógica algebraica (Mercarelli y col., 2020). Este tipo de metodología fue propuesto por Raman y Grossmann en 1994, como una alternativa de solución a los problemas de programación mixta entera (MIP). A su vez las ecuaciones desarrolladas para las disyunciones posteriormente deben relajarse, y para eso existen dos métodos de relajación: Big-M y Cascaron Convexo (CH) dónde el método de Big-M es más recomendado cuando se cuenta con disyunciones lineales o ecuaciones no tan complejas dando buenos resultados. Por el contrario, para disyunciones no lineales, o un requerimiento de mayor exactitud es más recomendado el cascaron convexo.

En el presente trabajo se desarrolló un modelo matemático para la optimización de la cadena de suministro de la producción de metanol con biomasa mexicana. Se elige el

metanol como componente de interés debido a su alta demanda, así como la actual dependencia en México de su producción mediante gas natural, la cual no ha sido sostenible, ocasionado limitaciones en su producción. Así pues, se requiere encontrar alternativas viables que permitan establecer una adecuada ruta de procesamiento que satisfaga de manera estable la demanda nacional empleando biomasa como materia prima para la generación de metanol. En este trabajo se presenta un análisis de diversas materias primas, las regiones de orígenes de éstas, así como las potenciales ubicaciones de las plantas, permitiendo con ello cumplir con la demanda requerida al contemplar más de un tipo de biomasa para la producción del metanol.

METODOLOGÍA

Para el desarrollo de este trabajo se realizó un análisis de los tipos de residuos en México que cuentan con mayor disponibilidad, haciendo uso del Atlas Nacional de Biomasa (ANBIO, 2012). Se seleccionaron las 12 materias primas con mayor presencia, determinando la disponibilidad por estados de cada una de ellas. Para cada tipo de biomasa se han considerado los estados en los cuales se produce en mayor cantidad, obteniendo con ello la selección de los estados a considerar como origen de las materias primas. Por otro lado, se analizaron todos los estados de la República Mexicana para la determinación de las zonas en las cuales es conveniente colocar una biorrefinería para la producción del metanol.

Para el modelado matemático mediante GDP se hizo uso de la teoría planteada por Raman y Grossmann (1994) para definir el planteamiento de cada una de las disyunciones.

$$\min Z = \sum_i c_i + f(x) \quad (1)$$

s. t.

$$g(x) \leq 0 \quad (2)$$

$$\left[\begin{array}{l} Y_i \\ h_i(x) \leq 0 \\ c_i = \gamma_i \end{array} \vee \begin{array}{l} \neg Y_i \\ [B^i x = 0] \\ c_i = 0 \end{array} \right] i \in D \quad (3)$$

$$\Omega(Y) = True \quad (4)$$

$$x \in R^n, c \geq 0, Y \in \{True, False\} \quad (5)$$

Para la relajación se utilizó el método de cascaron convexo (CH), que implica la desagregación de variables para la conversión de las disyunciones en restricciones asociadas a variables binarias. Al contar con el modelo completo, este se programó y resolvió en GAMS V37.1.0 para la minimización de los costos asociados a la cadena de suministro.

RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra en forma simplificada la superestructura desarrollada. Se han contemplado 12 tipos de materias primas: bagazo de caña, agave, café, maíz, sorgo y trigo; residuos de aserraderos, aceite vegetal y cerveza. Por otro lado, se consideraron los

residuos sólidos urbanos y residuos pecuarios, además del CO₂ de emisiones industriales. Se determino para la sección de materias primas trabajar con variables lógicas Y_i , para el caso del origen de la materia prima con variables lógicas U_j , y por último para la ubicación de la biorrefinería se consideran variables lógicas Z_k .

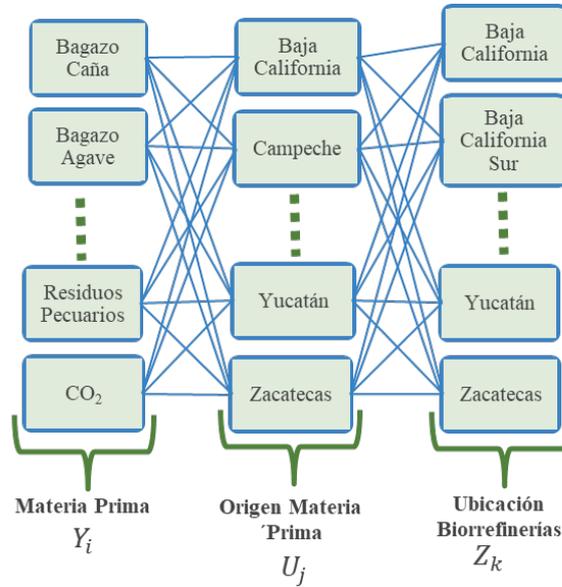


Figura 1. Representación de la superestructura desarrollada para la producción de metanol.

Las ecuaciones 6, 7 y 8 muestran las disyunciones generales que fueron utilizadas para el modelado de la superestructura. Por otra parte, la ecuación 9 representa la función objetivo para la minimización de costos.

$$\begin{array}{l} Y_i \qquad \qquad \neg Y_i \\ [x_i = \sum_j x_j] \vee [x_i = x_j = 0] \\ c_i = x_i A_i \qquad c_i = 0 \end{array} \quad (6)$$

$$\begin{array}{l} U_j \\ [x_j = \sum_k x_k] \vee [x_j = x_k = 0] \end{array} \quad (7)$$

$$\begin{array}{l} Z_k \qquad \qquad \neg Z_k \\ [\sum_k x_k = x_l] \vee [x_k = x_l = 0] \\ c_{zk} = x_k B_k \qquad c_{zk} = 0 \end{array} \quad (8)$$

$$CT = \sum_i C_{MP} + \sum_k C_t \quad (9)$$

Donde:

x_i, x_j, x_k, x_l = variables de flujo asociadas a materias primas, origen de materias primas y ubicación.

c_i = Costos total de materia prima.

A_i = Costo materia prima por tonelada. c_{zk} = Costo total de transporte.

$$B_k = D_{j,k} * C_{com}$$

$D_{j,k}$ = Distancia desde el origen a la planta de procesamiento.

C_{com} = Costo del combustible.

C_{MP} = Costos totales debido a materia prima. C_t = Costos totales debido al transporte.

Para el modelo se definió una cantidad entrante de materia prima de 490 ton/ día. El modelo se codificó y resolvió en el programa GAMS V37.1.0, siendo un modelo de programación mixta entera no lineal (MINLP), conformado por 1271 ecuaciones y 2268 variables, el cual fue resuelto con ayuda del *solver* Baron. El costo mínimo obtenido es de \$151,490.00 pesos para procesar 490 ton/día. La Figura 2 muestra la ruta óptima que se obtuvo mediante este modelado.

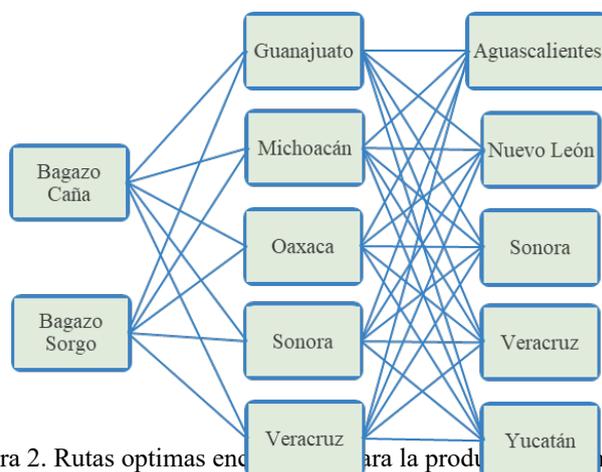


Figura 2. Rutas óptimas encontradas para la producción de metanol.

En la imagen es posible apreciar que se obtuvieron dos tipos distintos de biomasa como las materias primas para la producción de metanol: bagazo de caña y sorgo. Respecto a los estados de origen de la materia prima, se determinó que las opciones más viables son Guanajuato, Michoacán, Oaxaca, Sonora y Veracruz. Por último, se determinó que las plantas deben estar ubicadas en los estados de Aguascalientes, Nuevo León, Sonora, Veracruz y Yucatán. Así, la biomasa disponible en México puede contribuir a satisfacer la demanda de metanol en el país de una forma sustentable.

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha desarrollado una superestructura para el aprovechamiento de biomasa mexicana en la producción de metanol. La superestructura se representa matemáticamente por medio de GDP y se relaja, generando un modelo mixto entero, el cual se resolvió con el software GAMS. Se ha determinado la ruta óptima para el aprovechamiento de biomasa en términos del costo de biomasa y el costo de transporte,

estableciendo los tipos de materia prima con mayor potencial, así como potenciales localizaciones de las plantas.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo prestado por la Universidad de Guanajuato, la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo y la Universidad de Salamanca. N.V. Hernández-Camacho agradece a CONACYT por la beca otorgada para financiar sus estudios de Posgrado, así como a la Universidad de Salamanca por las facilidades para realizar una estancia de investigación en sus instalaciones.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alvarado, M. (2017). "Methanol Industry Overview". *Stanford University and IHS Markit*.
- Caloca Moreno, J., & Medina Estrada, R. (2016). Auditoria Financiera y de Cumplimiento: 16-6-90t9m-02-0476. *Auditoria Superior de la Federación (ASF) de la Cámara de Diputados*, 1-20. https://www.asf.gob.mx/Trans/Informes/IR2016b/Documentos/Auditorias/2016_0476_a.pdf
- Dalena, F., Senatore, A., Marino, A., Gordano, A., Basile, M., & Basile, A. (2018). "Methanol Production and Applications: An Overview". *Methanol*, 3-28.
- Liu, Y., Li, G., Chen, Z., Shen, Y., Zhang, H., Wang, S., Qi, J., Wang, Y., & Cao, J. (2020). Comprehensive analysis of environmental impacts and energy consumption of biomass-to-methanol and coal-to-methanol via life cycle assessment, *Energy*, 204, 1-9.
- Maddren, S. (2019). Asian Methanol- China and The Rest. 22th Asian Methanol Conference, *Methanol Market Services Asia (MMSA)*. <https://ma-foundation.com/wp-content/uploads/2019/12/Simon-Maddren-China-and-the-rest.pdf>
- Mercarelli, L., Chen, Q., Pagot, A., & Grossmann, I. (2020). "A review on superstructure optimization approaches in process system engineering". *Computers and Chemical Engineering*, 1-15.
- Raman, R. & Grossmann, I.E. (1994). Modelling and computational techniques for logic-based integer programming. *Computers & Chemical Engineering*, 18 (7), 563-578.
- Shen, Y., & Yoshikawa, K. (2013). Recent progress in catalytic tar elimination during biomass gasification or pyrolysis- A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 21, 371-392.
- Umeda, T., Hirai, A., & Ichikawa, A. (1972). "Synthesis of optimal processing system by an integrated approach", *Chemical Engineering Science*, 27, 795-804.

Integración de la producción de gas shale con plantas de potencia considerando aspectos económicos y ambientales

Victor Osvaldo Vega Muratalla^a y Luis Fernando Lira-Barragán^a

^a *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Mich., México, 58060. 1609763a@umich.mx*

RESUMEN

En este proyecto se presenta un enfoque de programación matemática para la integración de la producción de gas shale con una planta de potencia; considerando simultáneamente aspectos económicos y ambientales, teniendo en cuenta que una de las mayores problemáticas de la industria del gas shale son las altas cantidades de agua que demanda durante el proceso de fracturación hidráulica también conocido como fracking. En este sentido, el objetivo económico consiste en minimizar el costo total anual de extracción mientras que las metas ambientales son la minimización tanto del consumo del agua fresca utilizada para el fracking como de las emisiones de CO₂ por la planta de potencia, capturándolo y preparándolo a condiciones supercríticas (ScCO₂), para que finalmente sea almacenado y utilizado como fluido de fractura en los pozos de gas shale. La optimización determinística es aplicada en la plataforma GAMS donde se consideran todos los intercambios masicos posibles entre una planta de potencia y una zona de extracción de gas shale en cuanto a gas, agua y CO₂ se refiere. Todos estos aspectos mencionados se consideran en una superestructura que se modela matemáticamente y se aplica a un caso de estudio. Finalmente, para mostrar la aplicación del modelo desarrollado se propone un caso de estudio donde los objetivos económicos y ambientales se oponen, lo cual permite generar una curva Pareto para mostrar las diversas soluciones al ejemplo planteado.

Palabras clave: Gas Shale, Planta de Potencia, Fracturación Hidráulica.

INTRODUCCIÓN

Actualmente los aumentos en la concentración de los gases de efecto invernadero en la atmosfera son en gran medida los responsables del calentamiento global, particularmente las altas emisiones de CO₂ causadas por la gran mayoría de actividades desarrolladas por la sociedad. Entre los efectos que conlleva el calentamiento global está el aumento de la temperatura media de la tierra y las alteraciones en el ciclo hidrológico, siendo así como se relaciona el cambio climático con el sector de generación de energía eléctrica, particularmente con las plantas de potencia.

Las emisiones de CO₂ del sector energético representan cerca del 65% del total de los gases de efecto invernadero en la atmósfera causados por actividades humanas. Algunas

estimaciones sugieren que aproximadamente el 40% del total de emisiones de CO₂ son atribuidas al sector energético, el cual incluye actividades como la producción de combustible, gas natural y generación de electricidad para consumo industrial y doméstico.

Además, el sector eléctrico está dominado en gran medida por la combustión directa de combustibles, un proceso que conlleva grandes emisiones de CO₂, siendo este un subproducto de la combustión de los combustibles, como el resultado de la oxidación del carbono de los mismos (en condiciones perfectas de combustión, el contenido total de carbono de los combustibles se convertiría en CO₂) (Quadrelli y Sierra, 2007).

Ahora bien, es conocido que las emisiones de CO₂ en las plantas de potencia dependen del tipo de planta y del combustible que se utilice, por ejemplo, en una central eléctrica de ciclo combinado que utiliza gas natural como combustible presenta una de las menores tasas de emisiones que van de 0.34-0.37 Ton CO₂/h (Rubin y col., 2015).

En medio de las posibilidades de mitigación del CO₂, la captura y almacenamiento de carbono es actualmente considerada como la única tecnología capaz de minimizar de una manera significativa las emisiones de CO₂ que proceden de la combustión de combustibles fósiles, particularmente de las plantas de potencia. Actualmente, existen principalmente tres vías tecnológicas mediante las cuales se puede llevar a cabo la captura de CO₂ de las centrales eléctricas, las cuales son: oxi-combustión, precombustión y postcombustión.

Ahora, por su parte el gas shale es también conocido como gas de pizarra o gas de lutita y se trata de aquel gas natural que se encuentra atrapado en sedimentos de roca abundantes en esquisto y otros materiales orgánicos, mismo que se puede encontrar en profundidades desde mil hasta cinco mil metros.

El gas natural es una mezcla de gases compuesta primordialmente por metano; no obstante, habitualmente esta mezcla contiene otros hidrocarburos más pesados. Dependiendo de su origen se cataloga en gas asociado y gas no asociado, el primero se extrae junto con el petróleo crudo y tiene porciones de hidrocarburos más pesados que el metano mientras tanto que el gas no asociado está en depósitos que no contienen petróleo como lo es el gas shale.

México tiene un excelente potencial para desarrollar sus recursos de gas y petróleo de esquisto almacenados en lutitas de roca virgen depositadas en el mar y distribuidas a lo largo de la región terrestre del Golfo de México (EIA, 2015).

Para extraer el gas shale, el primer paso es la evaluación de los recursos, recopilando datos geológicos, geoquímicos y sísmicos existentes para ser analizados. El segundo paso es la perforación, misma que se hace verticalmente hasta alcanzar la capa de gas. El tercer paso es la fractura hidráulica, proceso que se lleva a cabo en sentido horizontal, en donde se va inyectado el fluido de fractura (aproximadamente 15,000 m³ por pozo) para

provocar la fractura de la roca. Este fluido consiste principalmente de agua mezclada con algún material de efecto apuntalante y distintos productos químicos. Habitualmente el material apuntalante inyectado en el fluido de fractura es arena que, junto con el agua y los elementos empleados para reducir la fricción favorecen la fisura de la roca liberando de esta forma el gas contenido en ella.

Ahora bien, cuando la temperatura y la presión del CO₂ es superior a sus puntos críticos, es decir, temperatura crítica ($T_c=31.05$ °C) y presión crítica ($P_c=7.38$ MPa) este alcanza su estado supercrítico (ScCO₂). El ScCO₂ tiene algunas propiedades únicas e interesantes, como lo son una baja viscosidad y una alta difusividad, propiedades que ayudan a que pueda ser utilizado como fluido de perforación y fracturación no acuoso, ideal para la explotación de gas y petróleo de esquisto (Zhou y col., 2019).

En comparación con los fluidos acuosos, las propiedades únicas del ScCO₂ presentan más ventajas para el desarrollo del gas de esquisto. En primer lugar, la rotura de roca con chorro de ScCO₂ tiene una baja presión de umbral y una alta tasa de penetración en comparación con el chorro de agua. Además, puede inducir fracturas más complicadas debido a su baja viscosidad, mejorar la recuperación de gas de esquisto al desplazar el metano adsorbido en la pizarra, reducir la huella de agua y a su vez, minimizar el impacto ambiental.

Por lo tanto, la principal idea de este trabajo es la captura y tratamiento de CO₂ para la utilización del ScCO₂ como fluido de fractura de los pozos de gas shale, reduciendo con esto los altos requerimientos de agua y la huella que tiene el CO₂ en el ambiente.

METODOLOGÍA

Teniendo como finalidad el conocer la factibilidad técnica, económica y ambiental de la implementación del ScCO₂ como fluido de fractura, se contempla la generación y modelamiento de una superestructura (véase Figura 1) que incluye todas las posibles soluciones al problema de interés, es decir, satisface la demanda de fluido de fractura para cada uno de los pozos mediante agua o ScCO₂ según sea el caso. Satisface también la demanda de gas natural de la central eléctrica presente en la superestructura mediante el gas shale producido en los pozos, así como también se tiene disponibilidad de un suministro externo. Por parte del agua, una vez terminado el proceso de fracturación, el porcentaje que retorna a la superficie es enviado a unidades de tratamiento para su posterior almacenamiento y disposición para ser rehusada en la fractura de otro pozo de gas shale o ser reutilizada para satisfacer la demanda de agua de la central eléctrica. En esta metodología se evalúan varios factores para cada caso presentado, tales como los costos de transporte, costos de operación, y costos de capital entre otros.

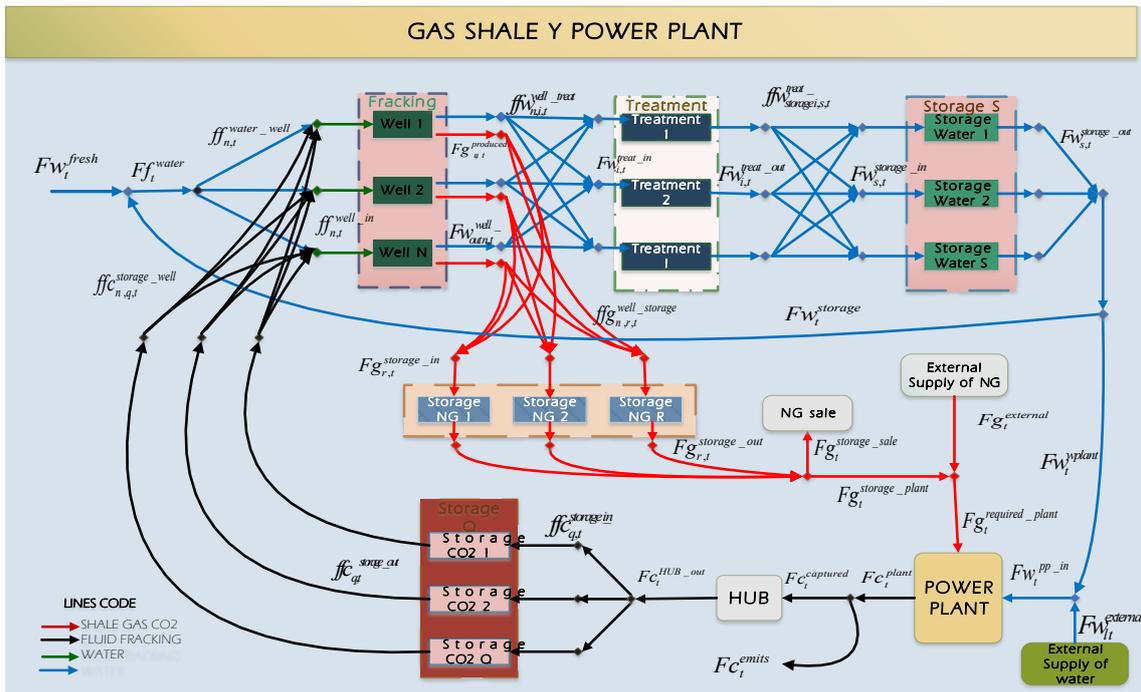


Figura 1. Superestructura propuesta

Con fin de mejorar la comprensión de la metodología se definen a continuación los conjuntos empleados y a su connotación:

n = Pozo

i = Unidad de tratamiento de agua.

q = Unidad de almacenamiento de CO₂.

r = Unidad de almacenamiento de gas shale. s = Unidad de almacenamiento de agua.

t = Periodo de tiempo.

Los objetivos económicos y ambientales se describen a continuación:

Por su parte, el costo total anual (TAC) está constituido por la suma de los costos totales de operación (TOC) más los costos totales de capital (TCC).

$$TAC = TOC + TCC$$

El CO₂ emitido al ambiente será igual a la suma del flujo emitido por la planta de potencia al ambiente para todo el horizonte del proyecto.

$$Tot_emit = H^{TIME} \sum_t F_q^{emits}$$

Costo total anual de extracción (ETAC)

Este costo consta únicamente de los costos relacionados con la extracción de gas shale, no se incluyen los costos generados para satisfacer las demandas de la planta de potencia, ni los costos de transporte que implican.

$$ETAC = TAC - Cost^{WP} - Cost^{NG} - Cost^{trans_NG_sto_pp} - Cost^{trans_NG_well_sto}$$

Finalmente, la función objetivo del modelo desarrollado consta de la minimización del ETAC, o en su caso, la minimización de las emisiones de CO₂ al ambiente.

RESULTADOS

Con intención de conocer el alcance del modelo desarrollado, es considerado el caso hipotético de la aplicación del modelo desarrollado en la región Norte de México, particularmente en la central eléctrica de ciclo combinado Escobedo (Noreste) ubicada en el estado de Nuevo León con una capacidad instalada de 878 MW misma que se encuentra relativamente cerca de dos de las mejores reservas de gas shale en el país, como lo son la reserva de Burgos y la reserva de Sabinas, teniendo en cuenta la fracturación de un total de 20 pozos en un horizonte de 52 semanas. Ahora bien, para enriquecer la discusión de resultados a continuación se detallan tres posibles soluciones (A, C y E) al caso de estudio presentado.

Se genero también una curva pareto (véase Figura 2) en donde se presenta una comparación directa entre el volumen del fluido de fractura ya sea agua, ScCO₂ o ambos (eje X) contra el costo total anual de extracción (eje Y) para cada una de las soluciones.

Comparando las soluciones de los extremos (A y E) es posible observar que el caso A únicamente presenta la mayor demanda de agua como fluido de fractura, pero el menor ETAC; por su parte, el caso E presenta una reducción del 100% de los requerimientos de agua, pero un aumento del 993.9% del ETAC con respecto al caso A. En cuanto al punto intermedio, el caso C, en este se presenta una reducción del 51% de los requerimientos de agua y un aumento del 531.5% del ETAC con respecto al caso A.

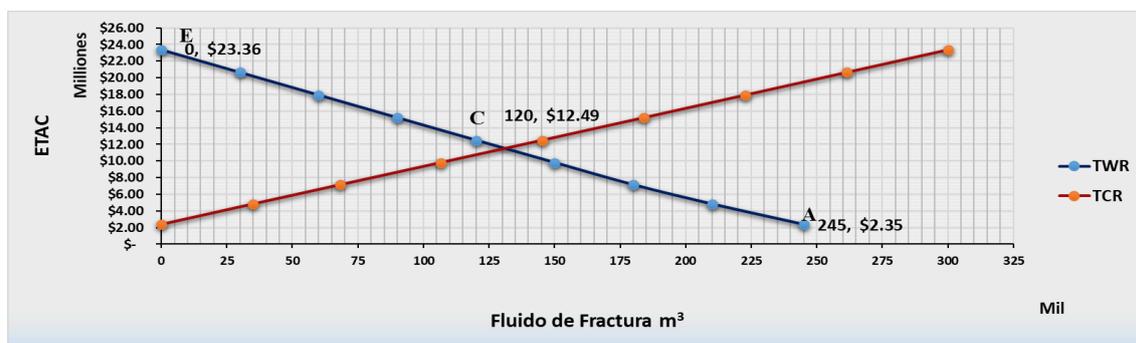


Figura 2. Fluido de Fractura Vs ETAC

En la Figura 3 se muestran los requerimientos de fluido de fractura, siendo los de color azul correspondientes al agua y los de color rojo correspondientes al ScCO₂. Es importante destacar que para el caso E, los requerimientos de fluido de fractura son superiores al caso A. Por su parte la Figura 4 muestra los requerimientos de fluido de fractura para el Caso C, en donde el agua aparece por última ocasión en la semana 43 mientras que el CO₂ comienza sus requerimientos en la semana 5.

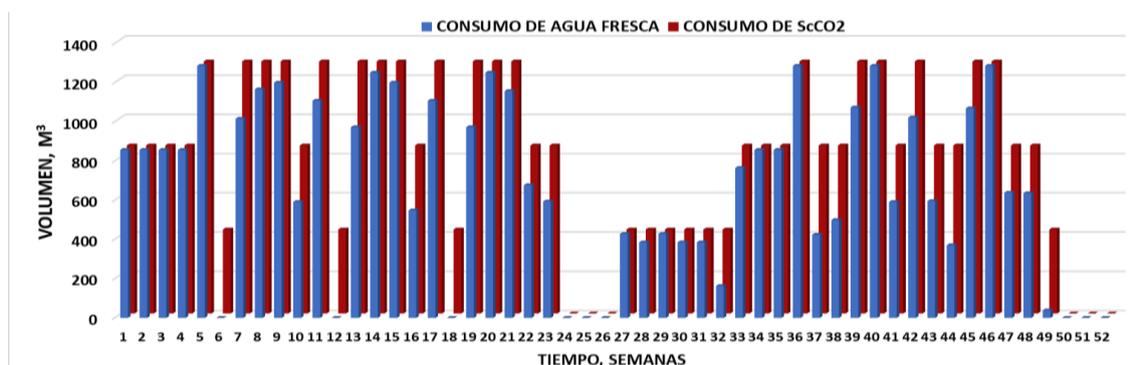


Figura 3. Requerimientos Caso A y Caso E.

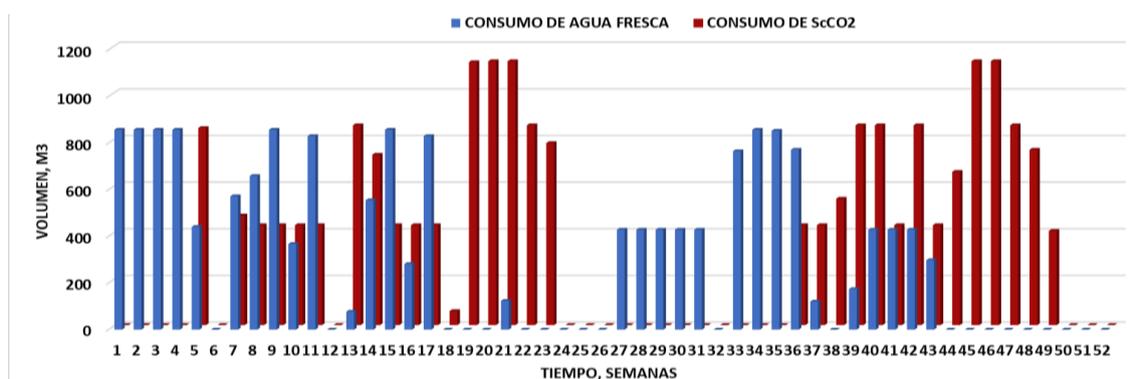


Figura 3. Requerimientos Caso C.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos del caso de estudio planteado muestran soluciones atractivas a largo plazo para cada uno de los puntos analizados. Además, se muestran resultados atractivos desde el punto de vista técnico para llevar a cabo la integración antes mencionada particularmente en México mismos que dependiendo del objetivo ya sea económico o ambiental pueden ser aplicados. Los resultados presentados pueden ser un marco de referencia para investigaciones futuras en el área del gas shale.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- EIA., 2015. Technically Recoverable Shale Oil and Shale Gas Resources: Mexico.
- Lira Barragán, L. F., Ponce Ortega, J. M., Serna González, M., y El Halwagi, M. M., 2016. "Optimal Reuse of flowback Wastewater in Hydraulic Fracturing Including Seasonal and Environmental Constraints". *AIChE*, 1634-1645.
- Quadrelli, R., y Sierra, P., 2007. The energy-climate challenge: Recent trends in CO₂ emissions from fuel combustion. Elsevier, 5938-5952.
- Rubin, E. S., Davison, J. E., y Herzog, H. J., 2015. The cost of CO₂ capture and storage. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 378-400.
- Zhou, J., Hu, N., Xian, X., Zhou, L., Tang, J., Kang, Y., y Wang, H., 2019. Supercritical CO₂ fracking for enhanced shale gas recovery and CO₂ sequestration: Results, status and future challenges. *Advances in Geo- Energy Research*, 3(2): 207:224.



OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA APLICADA

Optimización de un proceso sostenible para la captura de CO₂ mediante absorción reactiva.

Ana Gabriela Romero-García^{a,c}, Nelly Ramírez-Corona^b, Eduardo Sánchez-Ramírez^a, Heriberto Alcocer-García^a, Cataldo de Blasio^c, Juan Gabriel Segovia-Hernandez^{a*}

^a*Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050.*

^b*Departamento de Ingeniería Química, Alimentos y Ambiental, Universidad de las Américas Puebla. ExHda. Santa Catarina Mártir s/n, San Andrés Cholula, Puebla, 72820, México*

^c*Abo Akademi University, Faculty of Science and Engineering, Laboratory of Energy Technology, Rantakatu 2, 65100 Vaasa, Finland.*

**Email:gsegovia@ugto.mx*

RESUMEN

El calentamiento global es uno de los principales problemas ambientales que afectan al planeta. Las continuas emisiones de Dióxido de Carbono (CO₂) han generado una situación ambiental crítica a nivel mundial. Se tiene reportado que el 70% de las emisiones de CO₂ están relacionadas con la producción de electricidad. De modo que, si hay un aumento en la demanda energética se espera que aumenten las emisiones de CO₂. A nivel mundial se han buscado diferentes alternativas para reducir la huella ambiental relacionada con las emisiones de CO₂, destacando como alternativa la implementación de plantas de captura y almacenamiento de CO₂. En este trabajo se presenta la optimización estocástica multiobjetivo de una planta de captura de CO₂ acoplada a una central eléctrica. Teniendo como función objetivo minimizar del impacto ambiental (Ecoindicador 99), las propiedades de control (Número de condición), así como maximizar la economía del proceso (Retorno de la inversión). Para este estudio se consideraron los combustibles más utilizados en la producción de energía. Como resultado, se obtuvo que el diseño con el mejor desempeño en general es cuando se quema gas natural. Presentando el menor impacto ambiental con 22549.43 kEcopuntos y un retorno de inversión del 73.24%. Esto da como resultado un proceso sostenible con un menor impacto ambiental.

Palabras clave: Captura de CO₂, biogás, carbón, gas natural, gas asociado.

INTRODUCCIÓN

La producción de electricidad a partir de la quema de combustibles fósiles, es una de las principales fuentes de emisiones de CO₂. Por ello, es necesario desarrollar alternativas sustentables para la generación de energía, así como para mitigar las emisiones de CO₂. Debido a los problemas ambientales a nivel mundial, es necesario desarrollar nuevos procesos que empaten con los objetivos de desarrollo sostenible, química verde y

economía circular. Una alternativa para convertir la producción de energía eléctrica en un proceso sostenible, es la implementación de plantas de captura y almacenamiento de CO₂ (CCS). Destacando las tecnologías de captura poscombustión con absorción química utilizando como solvente una solución acuosa de monoetanolamina (MEA). La MEA es considerada como una buena opción de solvente debido a su gran capacidad para capturar CO₂ (Nagy, T. et al., 2013). Así mismo, debido a que sus propiedades son bien conocidas, que facilita el modelado de procesos. A pesar de su alta eficiencia, la MEA se considera altamente tóxica por lo que su aplicación conlleva un alto impacto ambiental. Sumado a esto, ningún estudio reporta un diseño completo que considere el impacto ambiental, la economía y la dinámica del proceso como indicadores de sostenibilidad.

En este trabajo se presenta una propuesta novedosa para la simulación de una planta de captura de CO₂ acoplada a una central eléctrica. Mostrando el diseño óptimo desde un punto de vista sustentable, considerando la optimización estocástica teniendo como función objetivo la minimización de las implicaciones ambientales de las plantas de captura utilizando MEA como solvente (Ecoindicator 99), la minimización del Número de Condición (CN) como un indicador de las propiedades de control del sistema, así como maximizar el retorno de la inversión (ROI) como un indicador económico. El análisis consideró los combustibles más utilizados para la producción de energía: biogás, carbón, gas natural y gas asociado. Todos los casos fueron estandarizados para recuperar al menos el 95% del CO₂ producido a una pureza del 99% molar.

METODOLOGÍA

El caso de estudio presenta una central eléctrica acoplada a un proceso de captura de CO₂ post-combustión (ver Figura 1) considerando los combustibles más utilizados para la producción de electricidad. La simulación se realizó en el software ASPEN PLUS.

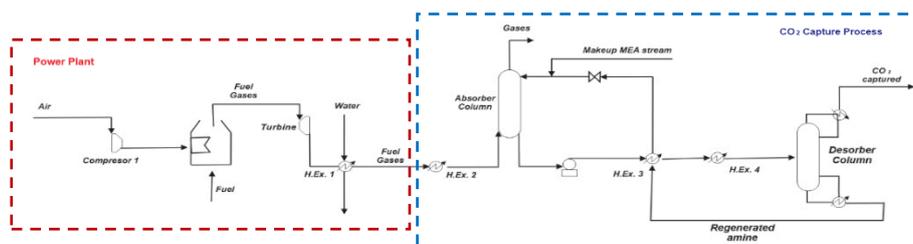


Figura 1. Esquema de una central acoplada a un proceso de captura de CO₂ post-combustión usando MEA 30wt% como solvente.

Para la central eléctrica se consideró un sistema de compresión de aire en una sola etapa ya que de acuerdo con Luyben (2013), es posible representar la producción de electricidad bajo un modelo simplificado como este. Asimismo, se considera un flujo de alimentación de combustible de 1000 kmol/h y una relación molar de combustible-aire de 1:30 para asegurar la combustión completa con todos los combustibles utilizados (Luyben, 2013). Para describir las propiedades termodinámicas en la combustión, se utilizó el método de Peng-Robinson (Hasan, M. et al., 2012). En este proceso, los principales aspectos de diseño a determinar son la cantidad de aire de alimentación y la presión de combustión óptima. La cantidad de aire utilizada para completar la combustión es muy importante, ya

que influye directamente en la captura pues la eficiencia depende de la composición de los gases de combustión. Para garantizar una alta eficiencia de captura, los gases de combustión deben tener un alto contenido de CO₂.

Para la captura de CO₂ se consideró una absorción química utilizando una solución acuosa de Monoetanolamina (MEA) al 30% en peso como solvente (Nagy, T. et al., 2013). La proporción de MEA al 30% en peso es importante ya que la es muy corrosiva en altas concentraciones. Para la captura de CO₂ se consideran dos columnas, una de absorción y otra de desorción. Durante la absorción, los gases de combustión entran por la parte inferior de la columna y la MEA por la parte superior. Generando una interacción entre las fases líquida y gaseosa, conduciendo al CO₂ a la fase líquida en la parte inferior de la columna. En la columna de desorción, es importante regenerar el disolvente y realizar la desorción del CO₂, la cual depende del rehervidor. El proceso de captura es complejo ya que incluye varias reacciones de disociación. Para modelar la absorción, se implementó el modelo termodinámico Electrolyte Non-Random Two Liquids para considerar la disociación de especies iónicas. Durante la captura, se deben considerar aspectos de diseño relacionados con la configuración y las condiciones operativas del proceso para reducir el consumo de energía y el uso de MEA. Para capturar la máxima cantidad de CO₂ de los gases de combustión obtenidos durante la combustión, es necesario manipular el flujo de destilado y la relación de reflujo. Todos los casos fueron estandarizados a recuperar al menos el 95% del CO₂ producido durante la combustión a una pureza de 99 % mol. Esto afecta directamente a los requisitos energéticos del proceso y, por tanto, influye directamente en los indicadores ambientales, económicos y de control.

Tabla 1. Variables de diseño para la optimización multiobjetivo

Proceso	Variables	Símbolo	Rango	Unidades
Combustión	Flujo de aire	Air	10 000-35 000	kmol/h
	Presión Compresor	P _{com1}	1 – 8	---
	Presión en Reactor	P _{react}	4.5 – 9	atm
	Presión en Turbina	P _{turbine}	1 - 8	atm
Absorbedor	Número de etapas	N _{abs}	4-99	---
	Etapas de alimentación	NF _{abs}	4-99	---
	Diámetro	D _{abs}	0.5 – 3.5	m
	Flujo de solvente	MEA	43000 – 44 000	kmol/h
Desorbedor	Número de etapas	N _{des}	4-99	---
	Etapas de alimentación	NF _{des}	4-99	---
	Diámetro	D _{des}	0.5 – 3.5	m
	Relación de reflujo	RR	0.1 - 75	---
	Carga térmica	Q	0.03 – 151. 38	GJ/h

El modelo propuesto, tiene un número significativo de variables discretas y continuas. Así mismo, debido al comportamiento electrolítico presente en la fase líquida representa un modelo altamente no lineal. De modo que, el modelo de captura de CO₂ es adecuado para optimizar. Las variables de diseño y el rango de operación, se eligieron mediante un análisis de sensibilidad del proceso. Las variables de diseño para el caso de estudio se muestran en la Tabla 1. Para la optimización multiobjetivo se empleó el método de Evolución Diferencial con Lista Tabú (DETL) propuesto por Srinivas y Rangaiah (2003).

Esta técnica funciona como un sistema combinado entre la evolución biológica del método de Evolución Diferencial y el método de búsqueda aleatoria de búsqueda Tabú. La función objetivo involucra tres ejes importantes a analizar: Retorno de la Inversión (ROI) como indicador de la economía del proceso derivado del acoplamiento de una planta de captura a una central eléctrica existente. Número de Condición (γ^*) como indicador del comportamiento dinámico del proceso considerando número de condición bajo para sistemas con buena controlabilidad y Eco-indicador 99 (EI99) para cuantificar el impacto ambiental derivado del acoplamiento del proceso de captura y el uso de MEA como solvente. Jiménez-González et al. (2011) reportan que estos ejes son necesarios en la optimización de un proceso para evaluar la química verde. Trabajos similares han sido reportados por Sánchez-Ramírez et al. (2017) y Contreras-Zarazúa et al. (2019) aplicando estos tres índices para columnas de destilación. La función objetivo se expresa en función de las variables descritas en la Tabla 1 como se muestra en la Ec. (1).

$$\text{Min} [-ROI, \gamma^*, EI99] = f(Air, P_{com1}, P_{reactor}, P_{turbine}, N_{i,j}, NF_{i,j}, D_{i,j}, MEA, RR, Q) \quad (1)$$

$$\text{Sujeto a: } \begin{aligned} y_{i,f} &\geq x_{i,f} \\ w_{i,f} &\geq u_{i,f} \end{aligned}$$

La función objetivo está restringida a recuperar al menos el 95% del CO₂ producido durante la combustión con una pureza del 99% mol. Donde $y_{i,f}$ representa el CO₂ recuperado en la columna del desorbedor y $x_{i,f}$ representa el 95% del CO₂ producido durante la combustión. Así mismo, $w_{i,f}$ representa la pureza alcanzada en la columna del desorbedor y $u_{i,f}$ representa la pureza esperada de al menos 99% mol. El proceso de optimización se realizó a través de una plataforma híbrida visual basic en una macro de Microsoft Excel. Donde inicialmente los valores del vector de entrada se eligen aleatoriamente y se envían a ASPEN PLUS. Se realiza la simulación del proceso y se registra ese dato como valor inicial en Excel. Luego, los datos del vector de salida se envían a Matlab donde, de acuerdo con la metodología presentada por Skogestad (2007), se obtiene el valor del número de condición. Posteriormente, los datos se envían a Excel para obtener el ROI y el EI99. Finalmente, se almacenan los resultados y se genera un nuevo vector. Los valores de los parámetros requeridos por el método DETL son: tamaño de la población: 120 individuos, número de generación: 1000, tamaño de la lista tabú: 60, radio tabú: 0,0001, fracciones cruzadas: 0,9, fracciones de mutación: 0,3.

RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos de la optimización. Para analizar las condiciones de operación de cada diseño es importante resaltar la composición de CO₂ presente en los gases de combustión obtenidos con cada combustible. Para Biogás, Carbón, Gas Natural y Gas Asociado se obtuvo una fracción molar de CO₂ de: 0,054, 0,124, 0,050 y 0,042 respectivamente. Es posible observar que los gases de combustión con mayor concentración de CO₂, son los que se obtiene de la quema de Carbón, Biogás y Gas Natural. Esta concentración afecta directamente los parámetros de operación como: requerimiento de solvente y carga térmica, los cuales impactan en los índices económicos y ambientales. En la Tabla 2 se muestra el impacto de algunos parámetros de diseño en

el desempeño del proceso. Para la absorción, al tener baja concentración de CO₂, la eficiencia en la captura se ve afectada. Para capturar mayor cantidad de CO₂, se debe aumentar la cantidad de solvente. Además, la relación de reflujo está directamente relacionada con los requisitos de energía. Cuanto mayor sea la relación de reflujo, aumentarán los requisitos de energía para la captura.

Tabla 2. Parámetros de diseño para el mejor escenario de captura de CO₂ para cada combustible

Variables	Biogás	Carbón	Gas Natural	Gas Asociado
Air [kmol/h]	17133.95	20519.78	19602.76	24221.83
P _{com1} [atm]	3.72	3.9	3.64	4.60
P _{react} [atm]	5.13	6.46	7.46	6.79
P _{turbine} [atm]	4.8	2.73	6.89	5.53
N _{abs}	39	34	29	33
NF _{abs}	3	3	3	3
D _{abs}	3.2	1.18	2.59	2.76
MEA [kmol/h]	43681	43258.06	43504.63	43509.26
N _{des}	33	24	24	22
NF _{des}	3	3	3	3
D _{des} [m]	2.36	1.33	2.04	1.45
RR	3.53	2.24	2.32	3.67
Q[GJ/h]	470.08	210.50	364.45	491.86
CO ₂ recuperado [ton/h]	67.57	32.72	65.84	70.40
Q/CO ₂ [GJ/ton]	6.9	6.4	5.5	6.9
CO ₂ Pureza [%mol]	0.99	0.99	0.99	0.99
ROI [%]	64.25	40.86	73.24	77.83
γ*	20.17	2.39	6.7	34.82
EI99 [kEcopoints]	28920.05	22615.53	22549.43	30369.51

Para el análisis de los índices de sustentabilidad se puede observar que el mejor ROI se tiene cuando se utilizan como combustible gas asociado y gas natural, esta tendencia está relacionada con la topología del proceso. Para estos dos combustibles, la configuración del proceso es más pequeña y teniendo un impacto directo en los costos de construcción. En el caso del gas natural, sus gases de combustión tienen una mayor concentración de CO₂, de modo que los requisitos de disolvente serán menores en comparación con el gas asociado. Así mismo, el menor impacto ambiental se presenta cuando se utiliza gas natural. Esto puede explicarse debido a que es el proceso de mayor recuperación de CO₂ disminuyendo la huella ambiental relacionada con las emisiones de CO₂. Asimismo, es el proceso que tiene menores requerimientos energéticos y usos de solventes; estos factores tienen un impacto significativo en la ponderación ambiental. Por otro lado, se puede observar que el proceso donde se utiliza carbón tiene un puntaje ambiental aproximado al obtenido con gas natural. Sin embargo, es el proceso en el que se tiene una menor recuperación de CO₂. En cuanto a las propiedades de control, se puede observar que los procesos donde se utiliza carbón y gas natural, son los que presentan mejores propiedades de control al presentar números de condición más bajos. Sin embargo, a través del proceso de optimización es posible obtener la mejor combinación de variables de diseño generando el diseño que cumpla con el menor impacto ambiental, el mayor retorno de la

inversión y las mejores propiedades de control para cada combustible estudiado. Los resultados obtenidos muestran que el proceso en el que se utiliza el gas natural a nivel global presenta un equilibrio en los tres objetivos de costos, propiedades ambientales y de control.

CONCLUSIONES

La implementación del proceso de captura de CO₂ en centrales eléctricas ha considerada la tecnología más madura para reducir las emisiones de gases de combustión asociadas a la producción de electricidad. A pesar de que las plantas de captura ayudan a reducir la huella ambiental de CO₂, es importante considerar el tipo de combustible que se utiliza para la producción de electricidad. Debido a la concentración de CO₂ contenida en los gases de combustión, habrá variaciones en las especificaciones de diseño del proceso de captura. De los resultados obtenidos se puede concluir que el tipo de combustible es una variable de alto peso durante el proceso de captura, impactando directamente en los requerimientos de solvente y energía. A medida que disminuye la concentración de CO₂, la eficiencia de captura de CO₂ disminuye, aumentando los requisitos de solvente y energía. Por otra parte, debido a las implicaciones ambientales que conlleva el uso de un solvente tan tóxico como lo es la MEA, existe una gran área de oportunidad en el estudio de nuevos solventes; como líquidos iónicos y solventes eutécticos profundos, para mejorar la eficiencia de captura de CO₂ y sustituir el uso de MEA como solvente principal para la captura de CO₂.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Contreras-Zarazúa G., Villicaña-García E., Cansino-Loeza B., Vázquez-Castillo J.A., Ponce-Ortega J. M., Segovia-Hernández J.G. 2019. Environmental impact and occupational hazard evaluation on intensified processes to produce diphenyl carbonate, *Computers & Chemical Engineering*, 122, 19-30.
- Hasan, M. F., Baliban, R. C., Elia, J. A., & Floudas, C. A. 2012. Modeling, simulation, and optimization of postcombustion CO₂ capture for variable feed concentration and flow rate. 1. Chemical absorption and membrane processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(48), 15642-15664.
- Jiménez-González C., Constable D. J. C. (2011). *Green Chemistry and Engineering: A practical Design Approach*. Wiley.
- Nagy, T., & Mizsey, P. 2013. Effect of fossil fuels on the parameters of CO₂ capture. *Environmental science & technology*, 47(15), 8948-8954.
- Luyben William L, L. William L. 2013. Chemical Process Engineering Principles of Combustion Turbines. *Energy & Fuels*, 27, 6316-6321. doi: 10.1021/ef401329s
- Sánchez-Ramírez, E., Quiroz-Ramírez, J. J., Hernández, S., Segovia-Hernández, J. G., & Kiss, A. A. (2017). Optimal hybrid separations for intensified downstream processing of biobutanol, 185, 149-159.
- Skogestad, S. y I. Postlethwaite. (2007). *Multivariable feedback control. Analysis and Design*. John Wiley and Sons.
- Srinivas M., Rangaiah G. P. (2007). Differential evolution with TL for solving nonlinear and mixed-integer nonlinear programming problems, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 46, 7126-7135.

Aplicación de Técnicas de Optimización Metaheurística al Problema de Diseño de un Intercambiador de Placas con Juntas

Oscar Daniel Lara-Montaña ^a, Fernando Israel Gómez-Castro ^{a,*}, Claudia Gutiérrez-Antonio ^b

^a *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato, Guanajuato, 36050, México. fgomez@ugto.mx*

^b *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Av. Cerro de las Campanas s/n, Col. Las Campanas, Querétaro, Querétaro, 76010, México*

RESUMEN

El diseño de equipo de procesamiento es una tarea indispensable dentro del área de estudio de la ingeniería química. La obtención del diseño óptimo no es una tarea trivial, tal como ocurre con los intercambiadores de calor de placas con juntas, ya que el modelo que describe el comportamiento termo-hidráulico está conformado por ecuaciones no lineales, no continuas y no convexas; además, el problema depende de variables discretas y continuas. En este trabajo, para resolver el problema mixto entero no lineal resultante se usan dos estrategias de optimización metaheurística: la evolución diferencial y el algoritmo Jaya. Se realiza un análisis estadístico en el que se concluye que la evolución diferencial es más efectiva para resolver el problema de optimización bajo análisis.

Palabras clave: intercambiador de placas, optimización metaheurística, diseño óptimo.

INTRODUCCIÓN

Los intercambiadores de calor son indispensables en las industrias de procesamiento. Existen diferentes tecnologías de equipos de transferencia de calor; de acuerdo con las propiedades fisicoquímicas de los fluidos involucrados debe elegirse alguna. Los intercambiadores de calor de tubos y coraza son los más utilizados, sobre todo en sistemas líquido-líquido. Sin embargo, en algunos casos el uso de un intercambiador de calor compacto es más conveniente; los intercambiadores de calor de placas con juntas (ICPJ) pueden clasificarse como compactos. Los ICPJ presentan características interesantes, tales como alta densidad de área, grandes coeficientes de transferencia de calor, facilidad de limpieza y mantenimiento, así como un área de transferencia de calor flexible.

Un ICPJ esencialmente consiste en un conjunto de placas metálicas delgadas rectangulares colocadas en un marco una tras otra, prensadas, y selladas mediante juntas. Las placas cuentan con un patrón de corrugado que provee de resistencia mecánica, incrementa el área de transferencia de calor, y aumenta los coeficientes convectivos de transferencia de calor (Wang y col., 2007).

En este trabajo se realiza la optimización de un caso de estudio de un ICPJ usando el costo total anual (CTA) como función objetivo. La optimización del diseño de este tipo de intercambiadores de calor no es una tarea trivial, dado que el modelo que predice el comportamiento de las variables termo-hidráulicas contiene ecuaciones no lineales, no convexas y no continuas. Además, el problema de optimización depende de variables discretas y continuas. Debido a dichas características se afronta el problema de optimización usando métodos metaheurísticos; en particular, se emplea la Evolución Diferencial (ED) y el Algoritmo Jaya (AJ). El primero es un método evolutivo que ha resultado ser muy eficiente en la solución de problemas complejos de optimización; mientras que el segundo es un algoritmo de optimización metaheurística libre de parámetros; esto último es una característica deseable, dado que la sintonización de parámetros representa en sí un sub-problema de optimización adicional.

METODOLOGÍA

El cálculo de las variables termo-hidráulicas se realizó en Python siguiendo el modelo dado por Kakaç y col. (2002). El área total de transferencia de calor se calcula con la ecuación 1, donde Q es la carga térmica, U_f es el coeficiente global de transferencia de calor, y ΔT_m es la diferencia de temperatura media logarítmica. El coeficiente global de transferencia de calor se obtiene con la ecuación 2, la cual considera el coeficiente convectivo de transferencia de calor en el lado frío y en el lado caliente, h_c y h_h , respectivamente, así como la conductividad térmica del material de fabricación de las placas corrugadas, k_w . También, se toman en cuenta los factores de ensuciamiento del lado caliente y frío, R_{fc} y R_{fh} , respectivamente.

$$A = \frac{Q}{U_f \Delta T_m} \quad (1)$$

$$\frac{1}{U_f} = \frac{1}{h_h} + \frac{1}{h_c} + \frac{t}{k_w} + R_{fh} + R_{fc} \quad (2)$$

Para el cálculo de h_h y h_c se emplea la ecuación (3), donde D_h es el diámetro hidráulico, G_c es la masa-velocidad del canal, c_p es el calor específico, μ es la viscosidad, μ_w es la viscosidad a la temperatura de la pared, y k es la conductividad térmica del fluido. C_h y n son valores dependientes del número de Reynolds (Kakaç et al., 2002).

$$\frac{h D_h}{k} = C_h \left(\frac{D_h G_c}{\mu} \right)^n \left(\frac{c_p \mu}{k} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.17} \quad (3)$$

El cálculo de la caída de presión en el intercambiador de calor se realiza a través de la ecuación (4), en la que L_{eff} es la longitud efectiva de la trayectoria del flujo de fluido entre los puertos de entrada y salida, f es el factor de fricción calculado con la ecuación (4), N_p es el número de pasos, ρ es la densidad del fluido, K_p y m son constantes que dependen del valor del número de Reynolds.

$$\Delta p_c = 4f \frac{L_{eff} N}{p D_h} \frac{G_c^2}{2\rho} \left(\frac{\mu_b}{\mu_w} \right)^{-0.17} \quad (4)$$

$$f = \frac{K_p}{Re^m} \quad (5)$$

Para obtener el mejor diseño del intercambiador de calor se utiliza el CTA, que es la suma del costo de operación anual, C_{op} , y el costo de capital anualizado, C_{ca} , calculados con las ecuaciones (6) y (7), respectivamente. E_c y E_h son la potencia de bombeo en watts requeridas en el lado frío y caliente, respectivamente. E_c es el costo de la energía en USD/kWh, H_r es el número de horas operativas por año, i es la tasa de interés, y n es el número de años a los que se realiza la proyección.

$$C_{ca} = 1350 + 180A^{0.68} \frac{i(i+1)^n}{(i+1)^n - 1} \quad (6)$$

$$C_{op} = \frac{(E_c + E_h) E_c H_r}{1000} \quad (7)$$

La obtención del mejor diseño de un ICPJ está determinado por la correcta selección de los valores de las variables de decisión. Se contemplan 8 variables de decisión, donde 6 son continuas y 2 son discretas. El caso de estudio consiste en una corriente caliente de metano con un flujo másico de 27.8 kg/s que entra a una temperatura de 95 °C y sale a 40 °C. El otro fluido es agua de enfriamiento con un flujo másico de 68.9 kg/s, entra a 25 °C y sale a 40 °C. La Tabla 1 muestra el conjunto de variables de decisión, así como los rangos de valores permisibles o los valores discretos permitidos.

Tabla 1. Límites de las variables de decisión.

Descripción	Variable	Límite inferior	Límite superior
Distancia horizontal entre los puertos	L_h	0.3 m	0.7 m
Distanciavertical entre los puertos	L_c	1.1 m	2 m
Diámetro del puerto	D_p	0.1 m	0.4 m
Espesor del plato	Pt	0.001 m	0.0003 m
Pitch del plato	P	0.0015 m	0.005 m
Factorde ampliación	Ef	1.15	1.25
Ángulo chevron	D	[30°, 45°, 50°, 60°, 65°]	
Número de platos	N_p	[2, 3, ..., 700]	

El diseño del intercambiador está limitado por algunas restricciones operativas. La caída de presión máxima en los lados frío y caliente no debe ser mayor a 70,000 Pa. La ecuación (8) muestra el problema de optimización. x representa al vector de variables de decisión, y ub y lb son los límites superiores e inferiores, respectivamente, para las variables de decisión. Se emplea una tasa de interés del 5%, un tiempo de vida del proyecto de 20 años,

el costo de la electricidad es 0.1 USD/kWh, 8,000 horas de operación anuales (Caputo y col., 2011) y los cálculos se realizan para el año 2021.

$$\begin{aligned} \min \quad & CTA(L_h, L_p, D_p, Pt, P, Ef, D, N_p) & (8) \\ \text{sujeto a:} \quad & \Delta p_{t,h} \leq 70,000 \text{ Pa} \\ & \Delta p_{c,h} \leq 70,000 \text{ Pa} \\ & lb_i \leq x_i \leq ub_i \end{aligned}$$

Se emplearon dos métodos de optimización metaheurística. Ambos están basados en poblaciones, lo cual implica generar múltiples soluciones por iteración. La ED es un método de optimización inspirado en la teoría de evolución, propuesta por Darwin, e incluye tres principales operadores: la selección, la mutación y el entrecruzamiento. En la mutación se crea un vector de variables de decisión mutante a partir de tres soluciones de la iteración anterior. En el entrecruzamiento se toma información del vector mutante y del vector de la iteración anterior, para generar un nuevo vector solución. A través de un proceso de selección se acepta el vector de variables de decisión que resultó del entrecruzamiento únicamente si es mejor que el vector de la iteración anterior, de no ser así se mantiene el vector de la iteración anterior (Storn, 1996).

La principal característica del AJ es que no incluye parámetros que deban ser ajustados en su estructura. Esta estrategia funciona bajo la premisa de que la mejor solución se debe encontrar en un espacio cercano a la mejor solución, y lejos del espacio cercano a la peor solución encontradas hasta la iteración que se esté desarrollando (Rao, 2016).

Ambos métodos fueron aplicados para resolver el problema de optimización empleando 50 individuos y 50 iteraciones. Además, se realizaron 30 experimentos para obtener información estadística y así determinar qué algoritmo de optimización resulta mejor para el problema de optimización en cuestión.

RESULTADOS

En la Tabla 2 se muestran los resultados obtenidos a partir de la realización de los 30 experimentos. Puede observarse que hay una diferencia significativa en cuanto al desempeño de los algoritmos al resolver el problema de optimización, siendo la ED más efectiva.

La ED genera una desviación estándar muy pequeña, de 2.12 USD/año, comparada con la producida por el AJ de 50.74 USD/año. El costo total anual promedio generado por la ED es muy cercano al valor mínimo. Un comportamiento similar se observa con el valor de la mediana, al menos la mitad de los experimentos convergen en un diseño muy cercano al mejor encontrado. La mediana obtenida con el AJ se aleja de la mejor solución, además, el AJ no es capaz de encontrar el mejor diseño del intercambiador de calor en ninguno de los experimentos. El CTA producido por el mejor diseño encontrado por la

ED es 2,221.19 USD/año, mientras que con el AJ el diseño encontrado tiene un costo total anual de ,2231.03 USD/año, una diferencia de poco más de 10 unidades.

Tabla 2. Resultados estadísticos.

	Promedio	Mediana	Desviación estándar	Mínimo
	USD/año	USD/año	USD/año	USD/año
ED	2,221.56	2,222.59	2.12	2,221.19
AJ	2,290.75	2,289.67	50.74	2,231.03

Los resultados para las variables de decisión involucradas en el diseño del ICPJ se presentan en la Tabla 3. Es interesante observar que el valor de la mayoría de las variables de decisión se encuentra en el límite; esto ocurre con las variables de decisión continuas. Únicamente el número de placas se encuentra entre los límites de las variables de decisión.

Tabla 3. Valores de las variables de decisión para el mejor diseño encontrado.

L_h	L_p	D_p	Pt	p	Ef	D	N_p
(m)	(m)	(m)	(m)	(m)	(m)	(°)	-
0.7	1.1	0.4	0.0003	0.005	1.15	65	47

La Figura 1 muestra el comportamiento del valor de la función objetivo a medida que transcurren las iteraciones para ambos algoritmos de optimización. Puede observarse que la ED converge más rápidamente, en comparación con el AJ. La ED encuentra la solución óptima en menos de 25 iteraciones, mientras que al AJ no es capaz de encontrar la mejor solución en 50 iteraciones, ya que permanece atrapado en un óptimo local.

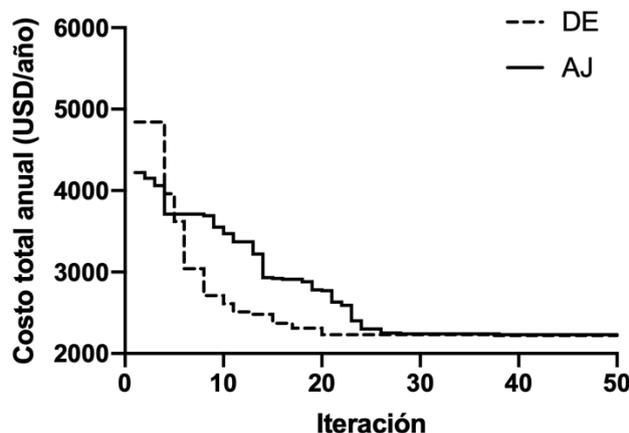


Figura 1. Comportamiento del valor de la función objetivo en el transcurso de las iteraciones.

CONCLUSIONES

El diseño óptimo de equipos para cumplir tareas específicas es una tarea fundamental en la ingeniería química. En este trabajo se determinó el diseño óptimo para un intercambiador de calor de placas con juntas para un sistema metanol-agua, respetando

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

algunas restricciones operativas, a partir del uso de estrategias de optimización metaheurística. Se obtuvo el valor para cada una de las variables de decisión.

Del análisis estadístico realizado se concluyó que para este tipo de intercambiadores de calor es más efectivo el uso de la ED, dado que se produce una menor desviación estándar. Además, en el conjunto de experimentos la ED encuentra una mejor solución que el AJ.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo de la Universidad de Guanajuato y la Universidad Autónoma de Querétaro, así como la beca otorgada por el CONACYT a O. D. Lara Montaña para apoyar sus estudios de posgrado.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Caputo, A.C., Pelagagge, P.M. y Salini P. (2011). Joint economic optimization of heat exchanger design and maintenance policy. *Applied Thermal Engineering*, 31, 1381-1892.

Kakaç S., Hongtan L. y Pramuanjaroenkij, A. (2002). *Heat Exchangers: Selection, Rating, and Thermal Design*. Second edition, CRC Press.

Rao, R.V. (2016). A simple and new optimization algorithm for solving constrained and unconstrained optimization problems. *International Journal of Industrial Engineering Computations*, 7, 19–34.

Storn, R. y Price, K. (1997). Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, 11, 307-359.

Wang, L., Sudén, B. y Manglik, R.M. (2007). *Plate Heat Exchangers: Design, Applications and Performance*, WIT Press.

Metodología para estimación robusta de parámetros en modelos matemáticos de procesos biotecnológicos

Julio César Sánchez-Rendón^a, Luis Gerónimo Matallana^b, Ricardo Morales-Rodríguez^c, Oscar Andrés Prado-Rubio^a.

^aGrupo de Investigación en Aplicación de Nuevas Tecnologías (GIANT), Universidad Nacional de Colombia, Sede Manizales, campus la Nubia. Km 9 vía al Aeropuerto La Nubia C.P 170003, Colombia.

^bGrupo de Investigación en Alimentos y Agroindustria, Universidad de Caldas, Calle 65, No. 26-10, C.P. 170002, Colombia

^cUniversidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Noria Alta S/N; C.P. 36050, México.

Correo de autor de contacto: oaprador@unal.edu.co.

RESUMEN

La biotecnología puede brindar soluciones a las problemáticas actuales a través de la generación de procesos industriales económicamente viables, ambientalmente sostenibles y socialmente responsables. Los modelos matemáticos que describen este tipo de procesos suelen presentar retos tales como no linealidad y falta de representación de los fenómenos involucrados, sobreparametrización, incertidumbre y falta de información en datos experimentales, problemas de optimización no convexos para su sintonización, entre otros, que pueden afectar negativamente la calidad del modelo matemático. En este trabajo se propone una metodología extendida usando métodos establecidos pero no usados en conjunto para la estimación robusta de parámetros en modelos matemáticos de procesos biotecnológicos que considera la limpieza de datos, identificabilidad estructural de los parámetros, idoneidad del diseño experimental, incertidumbre en datos experimentales, calidad descriptiva y calidad predictiva del modelo matemático. Como caso de estudio se utiliza la bioproducción de xilitol, producto objetivo en el espectro actualizado de productos de alto valor agregado.

Palabras clave: Estimación de parámetros, bioprocesos, identificabilidad estructural, identificabilidad práctica.

INTRODUCCIÓN

Los bioprocesos pueden ofrecer alternativas a los procesos industriales convencionales con ventajas como el aprovechamiento de residuos, menor uso de energía y mayor especificidad y eficiencia (enmarcados en economía circular) (Campbell *et al.*, 2017). Los bioprocesos pueden ser descritos por modelos matemáticos, que desde el punto de vista de la ingeniería de sistemas de proceso (PSE), son herramientas fundamentales en el diseño, control y optimización. Es común que estos modelos se enmarquen en la

categoría de “caja gris”, expresando la fenomenología del sistema en términos de relaciones basadas en primeros principios y parámetros cuyo valor debe ser estimado a partir de datos experimentales (Hangos & Cameron, 2001). Sin embargo, estos modelos presentan situaciones que deben ser abordadas de manera sistemática tales como no linealidad, sobreparametrización, incertidumbre en datos experimentales y falta de conocimiento sobre la fenomenología del sistema biológico. En este trabajo se evalúa una metodología sistemática para estimación robusta de parámetros en modelos matemáticos de bioprocesos usando métodos establecidos en la literatura pero no usados en conjunto, enfocada a mejorar la calidad descriptiva y predictiva del modelo mientras se incrementa la interpretabilidad de los parámetros.

METODOLOGÍA

Metodología para estimación de robusta de parámetros en modelos matemáticos de procesos biotecnológicos.

La metodología planteada en este trabajo se presenta en la Figura 1. Se parte de la formulación de modelo matemático y datos experimentales, los cuales son pretratados para eliminar puntos atípicos (método: mediana móvil y filtros de señal) y ruido aleatorio (método: ajuste con polinomio de Savitzky-Golay de 4to orden). Considerando el modelo matemático y características de los datos experimentales, se realiza el análisis de identificabilidad estructural (métodos: generadores de series, álgebra diferencial, geometría diferencial). En caso de que el modelo no sea estructuralmente identificable, se debe modificar el diseño experimental o el modelo matemático. En caso contrario, se plantea el problema de optimización para la identificación de los parámetros y se sintoniza el optimizador (método: IRACE). Una vez se obtienen los hiperparámetros del optimizador, se estiman los parámetros del modelo matemático. Lo anterior se realiza de forma separada ya que la sintonización no entrega el valor de los parámetros del modelo. Posteriormente, se procede con los análisis de validación mediante intervalos de confianza (en parámetros y predictor), indicadores de ajuste (SSE, MRSE, GoF, R^2 , entre otros) e índices de sensibilidad (método SCR) (Sánchez Rendón, 2021). Si la validación es satisfactoria el modelo matemático está listo para ser utilizado en aplicaciones prácticas, en caso contrario, se deberá modificar el modelo o el diseño experimental usando los resultados del modelamiento como se verá más adelante.

Caso de estudio: bioproducción de xilitol

El xilitol es un alcohol ampliamente utilizado como edulcorante y aditivo en productos dentales y farmacéuticos, además de tener el potencial de convertirse en una plataforma de base biotecnológica para la producción de compuestos químicos (Ur-Rehman et al., 2015). Los datos experimentales de bioproducción de xilitol utilizados en este trabajo fueron tomados de la investigación de Sirisansaneeyakul *et al.* (2013), quienes realizaron una serie de 22 experimentos en modalidad de semilotes repetidos. El modelo matemático que describe este bioproceso cuenta con 5 estados y 11 parámetros, además, considera fenómenos biológicos como inhibición de absorción de glucosa y xilosa,

transporte intra y extracelular y estequiometría de la reacción de xilosa a xilitol de forma no lineal (Tochampa et al., 2015, Hernández-Escoto *et al.*, 2016).

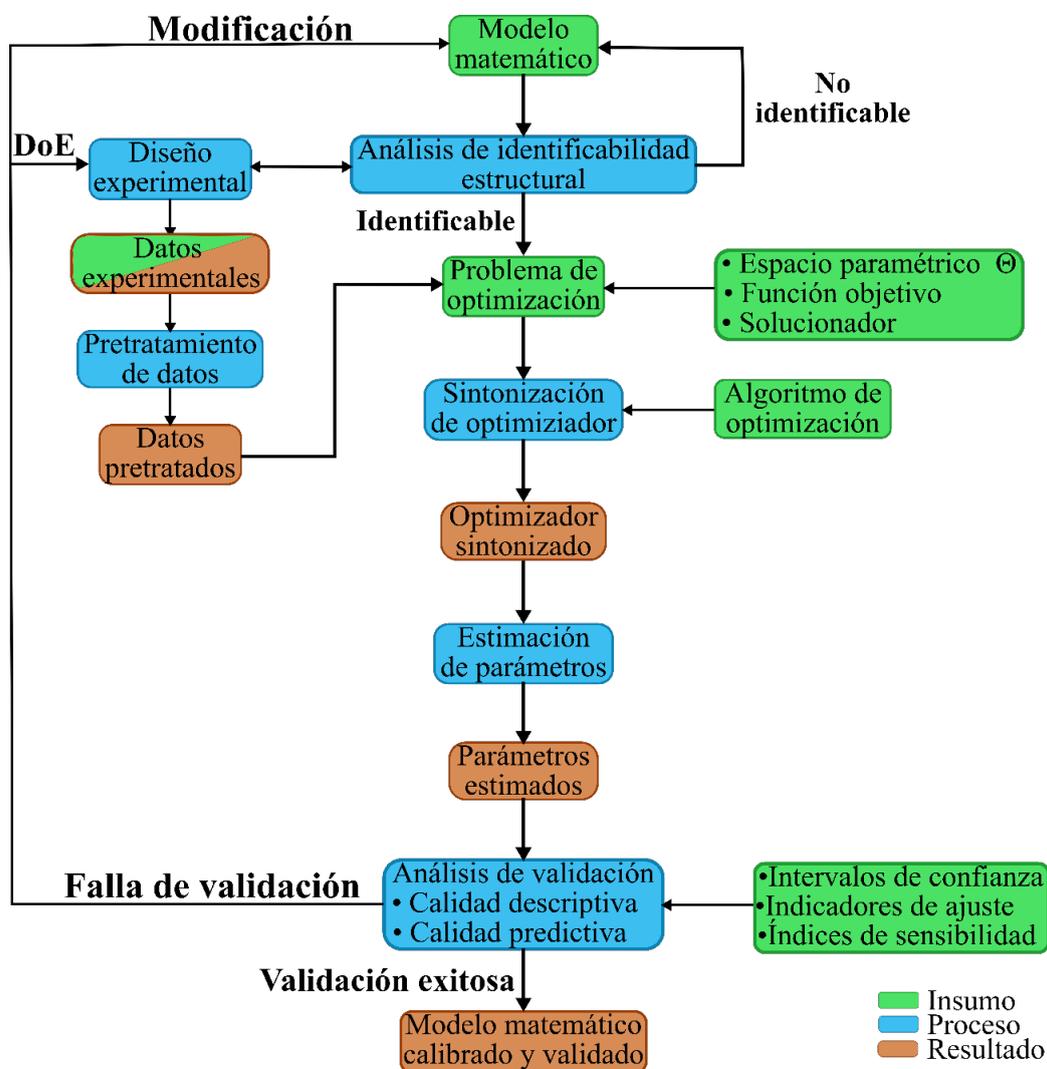


Figura 1. Metodología para estimación robusta de parámetros en modelos matemáticos de procesos biotecnológicos. DoE: diseño de experimentos.

RESULTADOS

Con respecto a la limpieza de datos experimentales, se encontraron y eliminaron puntos atípicos, así mismo, se eliminó ruido aleatorio en los 22 conjuntos de datos. La Tabla 1 presenta los resultados de identificabilidad estructural y práctica para los 11 parámetros del modelo matemático de bioproducción de xilitol. Dado que todos parámetros del modelo son estructuralmente localmente identificables, se confirma que los parámetros pueden ser estimados a partir de los datos experimentales (conjuntos de datos 1 a 9). Sin embargo, a nivel de identificabilidad práctica los parámetros exhiben diferente grado de precisión, específicamente $K_{i,glu}$ es prácticamente no identificable, μ_{glu}^{max} , K_r , $K_{S,xil}$ presentan alta incertidumbre, μ_{xit}^{max} y $K_{S,xit}$ presentan incertidumbre intermedia y finalmente,

$K_{S,glu}$, q_{glu}^{max} , q_{xil}^{max} , $K_{i,xil}$ y P_{xit} presentan la menor incertidumbre (intervalos de confianza inferiores al 1%). Estas diferencias se atribuyen a un diseño experimental no adecuado, puesto que solo se cuenta con un conjunto de datos con glucosa y xilosa en comparación con los 8 conjuntos de datos restantes donde solo se utiliza xilosa. Por tanto, hay dificultades para estimar los parámetros relacionados con glucosa. Lo anterior muestra que se requiere un nuevo diseño experimental que se enfoque en incrementar la identificabilidad de parámetros asociados a la glucosa.

Tabla 1. Tipo de identificabilidad y valor estimados por parámetro.

Parámetro	Tipo de identificabilidad	Estimado	Desviación estándar	Intervalo de confianza	Coefficiente de variación
μ_{glu}^{max}	Local	6.183×10^{-2}	3.23×10^{-2}	5.32×10^{-2}	52.28%
$K_{S,glu}$	Local	7.5586	2.15×10^{-3}	3.54×10^{-3}	0.03%
q_{glu}^{max}	Local	2.1546	1.69×10^{-2}	2.78×10^{-2}	0.78%
$K_{i,glu}$	Local	9.747×10^{-2}	0.48	0.798	497%
K_R	Local	1.452×10^{-2}	8.50×10^{-3}	1.39×10^{-2}	58.57%
μ_{xit}^{max}	Local	4.458×10^{-3}	1.37×10^{-3}	2.26×10^{-3}	30.89%
$K_{S,xil}$	Local	5.909×10^{-3}	2.64×10^{-3}	4.34×10^{-3}	44.69%
$K_{S,xit}$	Local	5.116×10^{-5}	1.21×10^{-5}	1.99×10^{-5}	23.69%
q_{xil}^{max}	Local	8.284×10^{-2}	$2 \cdot 10 \times 10^{-4}$	3.47×10^{-4}	0.25%
$K_{i,xil}$	Local	19.318	0.17	0.28	0.87%
P_{xit}	Local	7.823×10^{-11}	1.22×10^{-13}	2.02×10^{-13}	0.16%

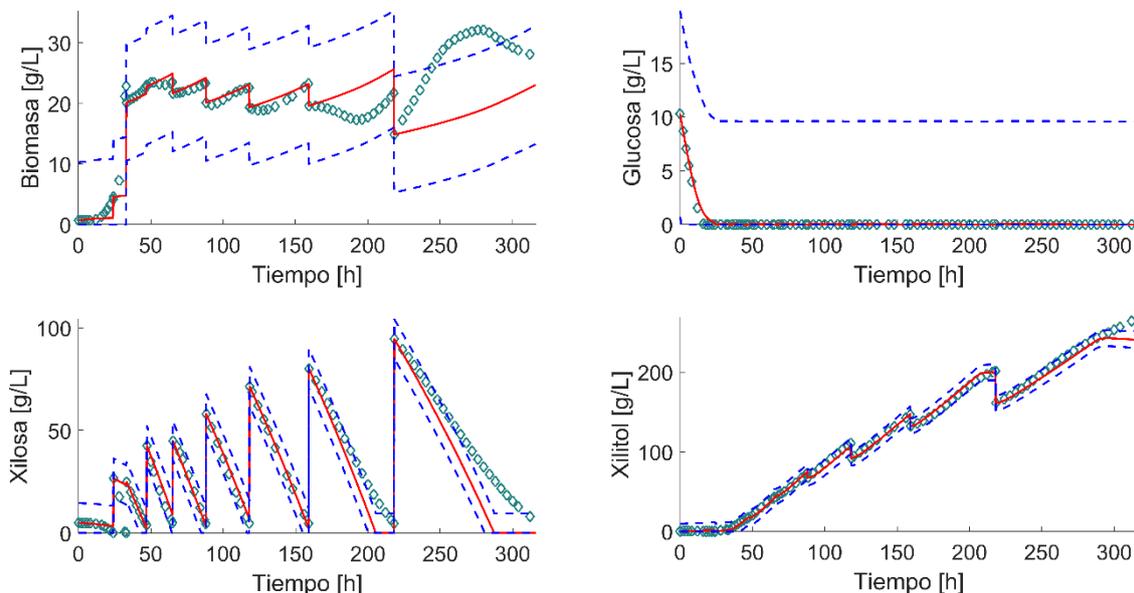


Figura 2. Intervalos de confianza del predictor para estimación (calidad descriptiva), — modelo, -- intervalo de confianza, \diamond dato experimental.

La Figura 2 presenta la calidad descriptiva del modelo matemático calibrado, el cual muestra un ajuste adecuado en todos los casos y una mayor precisión (intervalos de

confianza estrechos) en los estados de xilosa y xilitol. Lo anterior puede atribuirse a la mayor disponibilidad de información para estos estados (8 conjuntos de datos). Sin embargo, a partir de las 150 horas de fermentación se presentan diferencias entre la predicción del modelo y los datos experimentales, posiblemente debido a adaptación del microorganismo a altas concentraciones del sustrato xilosa.

La Figura 3 presenta la calidad predictiva del modelo matemático con los conjuntos de datos 10 a 22 (validación). En este caso el modelo exhibe una desviación sistemática con respecto a los datos experimentales, específicamente, el modelo predice un consumo acelerado de xilosa con una producción máxima y posterior consumo de xilitol.

Esto confirma la hipótesis de que el microorganismo sufrió una adaptación metabólica que hace de este sistema particular un sistema variante en el tiempo. En este sentido, se recalca que la metodología propuesta permite determinar si el diseño experimental es adecuado (identificabilidad estructural), si la cantidad de información es suficiente (calidad descriptiva) y si el modelo puede predecir el comportamiento del sistema correctamente (calidad predictiva).

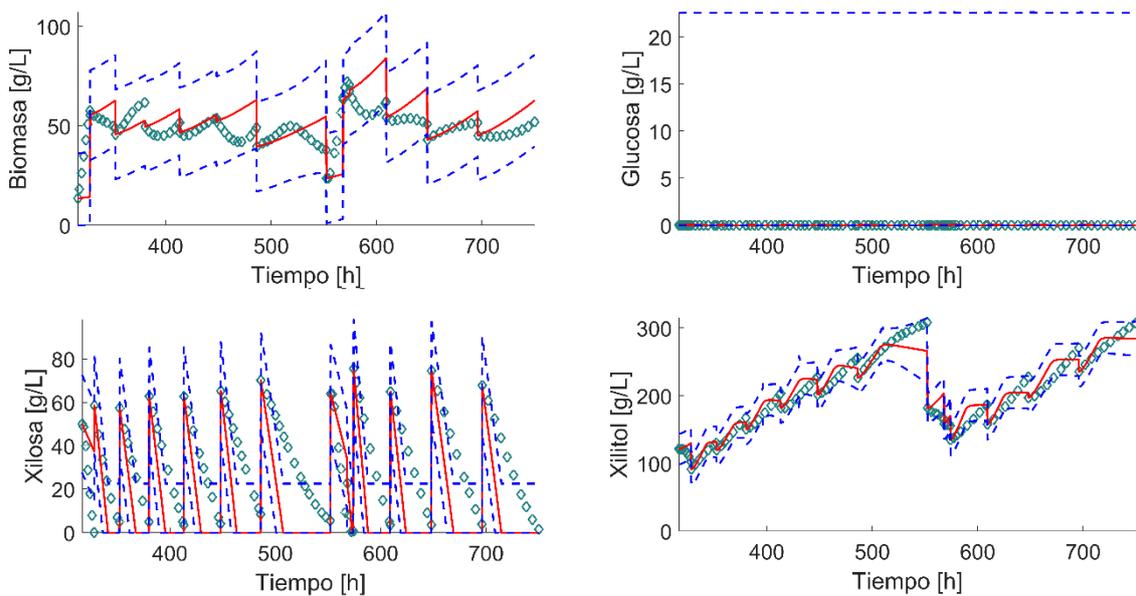


Figura 3. Intervalos de confianza del predictor para validación (calidad predictiva). — modelo, -- intervalo de confianza, \diamond dato experimental.

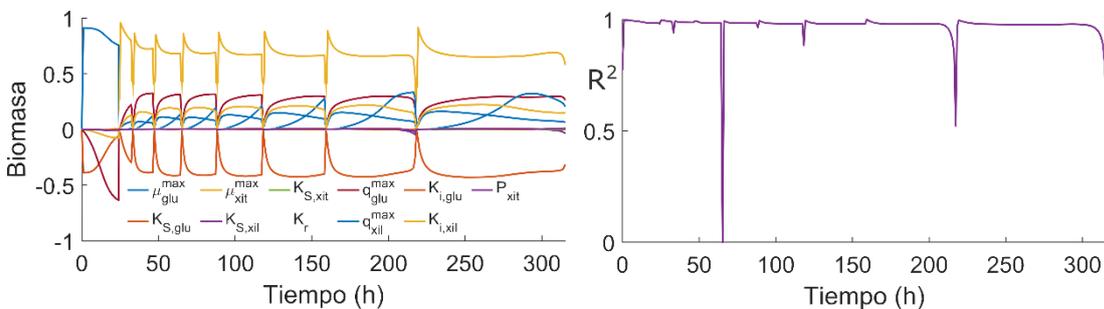


Figura 4. Análisis de sensibilidad por el método SRC. Derecha: perfiles dinámicos de sensibilidad para el estado biomasa en el conjunto de datos 1. Izquierda: perfil de valores R^2 .

La Figura 4 presenta el análisis de sensibilidad por el método SRC para el estado de biomasa. Se observa que diferentes parámetros del modelo de manera diferente en función del tiempo de fermentación. Lo anterior se explica por diferencias en los sustratos alimentados, con glucosa y xilosa antes de las 25 horas y solo xilosa posterior a este tiempo. Los perfiles indican una alta interacción de parámetros bajo alimentación de solo xilosa, lo que corrobora la importancia de un adecuado diseño experimental tanto en cantidad como en calidad de datos. En este caso particular, es posible afirmar que se podría mejorar la calibración del modelo si se realiza una mayor cantidad de experimentos con alimentación simultánea de glucosa y xilosa.

CONCLUSIONES

Los modelos matemáticos son una herramienta útil para el entendimiento de sistemas complejos y su posterior aplicación práctica, por tanto, verificar la calidad del modelo y la interpretabilidad de sus parámetros se convierte en una tarea fundamental. En este sentido, el presente trabajo propone una metodología para la estimación robusta de modelos matemáticos de procesos biotecnológicos validada con un caso de estudio de bioproducción de xilitol. Esta metodología usa métodos establecidos pero no usados en conjunto para el pretratamiento de datos experimentales, identificabilidad estructural, identificabilidad práctica y validación, con distinción entre calidad descriptiva y predictiva del modelo matemático. Como resultado, se indentificaron problemas de identificabilidad de los parámetros y se propuso una guía para nuevos experimentos. Por tanto, la metodología propuesta complementa a otras ya existentes para abordar sistemáticamente situaciones características de modelos de procesos biotecnológicos tales como no linealidad, sobreparametrización, problemas de optimización no convexos, incertidumbre en datos experimentales y sistemas variantes en el tiempo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Campbell, K., Xia, J., y Nielsen, J. (2017). The impact of systems biology on bioprocessing. *Trends in Biotechnology*, 35, 1156-1168.
- Hangos, K., & Cameron, I. (2001). Process Modeling and Model Analysis, *Process Systems Engineering*. De Academic Presss.
- Hernández-Escoto, H., Prado-Rubio, O. A., & Morales-Rodriguez, R. (2016). Model-based framework for enhanced and controlled operation of a fed-batch bioreactor: xylitol production. En Z. Kravanja y M. Bogataj (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering* (pp. 301-306). De Elsevier.
- Sánchez Rendón, J. (2021). Identificabilidad de modelos matemáticos en procesos biotecnológicos. Universidad Nacional de Colombia.
- Sirisansaneeyakul, S., Wannawilai, S., Chisti, Y., (2013). Repeated fed-batch production of xylitol by *Candida magnoliae* TISTR 5663. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 88, 1121–1129.
- Tochampa, W., Sirisansaneeyakul, S., Vanichsriratana, W., Srinophakun, P., Bakker, H.H.C., Wannawilai, S., Chisti, Y., (2015). Optimal Control of Feeding in Fed-Batch Production of Xylitol. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54, 1992-2000.
- Ur-Rehman, S., Mushtaq, Z., Zahoor, T., Jamil, A., Murtaza, M.A., (2015). Xylitol: A Review on Bioproduction, Application, Health Benefits, and Related Safety Issues. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 55, 1514-1528.

Distribución óptima de ganancias en la integración del calor entre plantas mediante un enfoque de optimización híbrido

Francisco Javier López-Flores,^{1} Luis Germán Hernández-Pérez,¹ Luis Fernando Lira-Barragán,¹ Eusiel Rubio-Castro² y José M. Ponce-Ortega¹*

¹ *Departamento de ingeniería química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Edificio VI, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Mich., México*

² *Facultad de ciencias químico biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Av. de las Américas S/N, Culiacán, Sinaloa 80010, México. fjlf560@gmail.com*

RESUMEN

En este trabajo se propone un nuevo enfoque para la integración de calor entre plantas y motores térmicos que, por primera vez, considera la asignación equitativa de recursos entre las diferentes plantas industriales implicadas. Para resolver el problema se utiliza un procedimiento de solución híbrido basado en la iteración entre la optimización metaheurística y la optimización determinista. Los motores térmicos (ciclos de vapor Rankine, Rankine orgánico y refrigeración por absorción) se modelan mediante un simulador de procesos y se optimizan utilizando un enlace entre MS Excel®-Visual Basic ®-Aspen Plus®. Utilizando el enfoque determinista, se propone un modelo matemático para determinar los ingresos individuales de las plantas industriales implicadas. Se propone la incorporación de los esquemas de Bienestar Social, Bienestar Rawlsiano y Nash para encontrar la asignación de ingresos más justa. Se muestra un caso de estudio con cuatro escenarios diferentes para evaluar el enfoque propuesto. Los resultados muestran diferentes soluciones para los motores térmicos, así como diferentes distribuciones de ingresos bajo los esquemas de asignación. Se encuentran las condiciones óptimas de operación para los motores térmicos. Además, se demuestra que para este caso de estudio el esquema Rawlsiano proporciona una asignación justa de ingresos y costos.

INTRODUCCIÓN

La integración energética permite recuperar el calor residual/excedente emitido por las plantas industriales. La integración energética es especialmente importante para la reducción de la energía desperdiciada, cuyos beneficios pueden ser desde el punto de vista económico y medioambiental. Además, se ha desarrollado un conjunto de técnicas que permiten la integración térmica simultánea de plantas industriales basadas en HEN y los motores térmicos. Sin embargo, el objetivo principal de la mayoría de los estudios relacionados a la integración de calor entre plantas maximizar la recuperación de calor al tiempo que se maximiza el beneficio económico global, sin tener en cuenta la distribución de los costos y beneficios entre las diferentes partes interesadas. Además, cada una de las plantas industriales participantes necesita diferentes recursos de servicios públicos, refrigeración y electricidad. Por lo tanto, si no se consigue una distribución justa de los costos y beneficios entre las diferentes partes interesadas, la red de intercambio de calor resultante de intercambio de calor resultante puede ser inaceptable o rechazada por las partes que no han obtenido resultados justos. Hasta ahora, la distribución de costos y beneficios en la integración de calor entre plantas sólo se ha abordado a través de la teoría de juegos [27e29]. Asimismo, este enfoque es secuencial, donde primero se minimizan los *TAC* y luego se realiza el reparto de costos entre diferentes partes interesadas. Además, los trabajos que han utilizado la teoría de juegos no consideran la integración térmica entre plantas con los motores térmicos.

Por otro lado, también se han reportado diferentes esquemas para la distribución/asignación de recursos entre varios actores (Bienestar Social, Bienestar Rawlsiano, y esquema de Nash). El enfoque de Bienestar Social se utiliza ampliamente en aplicaciones de

ingeniería y sistemas económicos para asignar utilidades entre los interesados. La solución de este enfoque puede ser injusta porque se puede conseguir el máximo beneficio económico, aunque algunas partes presenten grandes pérdidas económicas [31]. El esquema de justicia Rawlsiano proporciona el mayor beneficio a los miembros desfavorecidos de las partes interesadas, maximizando así la menor utilidad [32]. La asignación de Nash se obtiene maximizando el producto de las utilidades, lo que equivale a maximizar la suma de sus logaritmos, [33,34].

Por lo tanto, este trabajo presenta un enfoque de optimización para la asignación justa de costos y beneficios entre las plantas industriales implicadas en la integración de calor entre plantas considerando tres motores térmicos diferentes. La incorporación de los esquemas de asignación se utiliza para proporcionar soluciones justas a las partes interesadas. Además, el modelo matemático propuesto puede determinar los costos/beneficios individuales de las plantas industriales implicadas, de modo que se pueden considerar distintas plantas industriales con diferentes necesidades de servicios públicos, refrigeración y electricidad. Por otra parte, los estudios previos de integración de calor que implementan motores térmicos utilizan suposiciones significativas a través de factores de eficiencia fijos, así como variables internas (temperaturas de funcionamiento, caudales, datos de costes, propiedades termodinámicas, etc.), ya que optimizar los motores térmicos basándose en enfoques deterministas es excesivamente difícil debido al uso de modelos termodinámicos, termo hidráulicos y de transporte. Por estas razones, en este trabajo se presenta un procedimiento de solución que consiste en una estrategia de optimización híbrida metaheurística-determinista, donde los motores térmicos se simulan adecuadamente en un simulador de procesos, por lo que los resultados obtenidos bajo los diferentes esquemas de asignación son precisos.

METODOLOGÍA

El procedimiento general de solución propuesto (**Figura 1**) se describe como sigue: Inicialmente en la optimización metaheurística, el algoritmo I-MODE propone valores de las variables de decisión para cada motor térmico, luego estos son enviados desde MS Excel® a Aspen Plus®. Aspen Plus® ejecuta la simulación con los valores de decisión propuestos. Tras ejecutar la simulación, se obtienen cálculos rigurosos para los datos de diseño de cada motor térmico, los valores de las variables de respuesta se devuelven desde Aspen Plus® a MS Excel®, donde se evalúa el rendimiento de las funciones objetivo del modelo metaheurístico para proponer nuevos valores de las variables de decisión. Este proceso se lleva a cabo consecutivamente hasta que se alcanza el criterio de finalización del MNG. Una vez obtenidos los resultados de cada motor térmico, se selecciona la mejor solución y se envían las variables (eficiencias, rendimiento, temperaturas de operación, presiones de operación, etc.) a la plataforma de optimización determinista. En GAMS® se evalúa la función objetivo del modelo determinista y se obtienen resultados para los motores térmicos, la configuración óptima, los ingresos y los costos de la integración entre planta mediante los diferentes esquemas de asignación. Los resultados de los motores térmicos (calor suministrado, producción de electricidad, cantidad de utilidades de calor, frío y refrigeración, etc.) se seleccionan y se envían a la plataforma metaheurística. Finalmente, tras varias iteraciones entre la optimización metaheurística y la optimización determinista, se obtiene la convergencia (última iteración) mediante una diferencia mínima entre las variables de decisión (eficiencias, temperaturas, coeficientes de rendimiento, etc.).

Esquemas de Asignación

La función objetivo utilizada depende del esquema de asignación que se seleccione. El esquema de asignación de bienestar social busca maximizar las ganancias para todas las plantas

(φ^{SW}). Para este esquema de asignación,

$$\max \varphi^{SW} = \sum_{p \in P} R_p \quad (1)$$

El esquema de asignación Rawlsiana corresponde a la maximización de los ingresos menores de las partes interesadas. Por lo tanto, este esquema de asignación puede ser obtenido como se muestra en las ecuaciones siguientes,

$$\begin{aligned} \max \varphi^{RW} \\ \varphi^{RW} \geq TIR_p, \quad \forall p \in P \end{aligned} \quad (2)$$

Es esquema de asignación Nash es obtenido por la maximización de la suma de los logaritmos de los ingresos de todas las plantas. Por ello, el esquema de asignación Nash es obtenido como se muestra a continuación,

$$\max \varphi^{NS} = \sum_{p \in P} \ln TIR_p \quad (3)$$

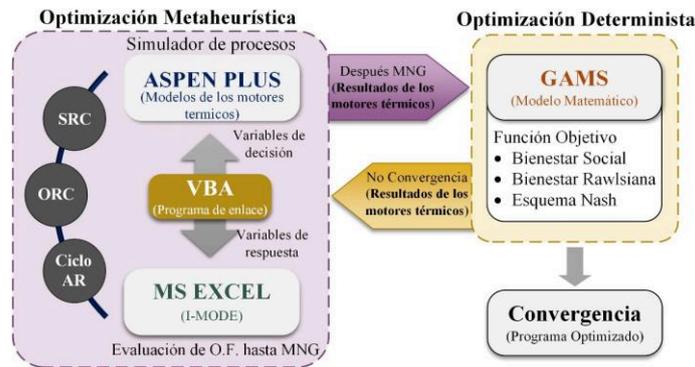


Figura 1. Enfoque de solución general.

RESULTADOS

Caso de estudio

Para mostrar la aplicabilidad de la metodología propuesta e ilustrar los resultados, se presenta un estudio de caso con cinco plantas disponibles para la integración de calor, que tienen una diversidad necesaria de servicios públicos calientes y fríos, refrigeración, electricidad y presupuestos disponibles. Hay que tener en cuenta que la planta 5 no requiere servicios públicos ni refrigeración, sólo requiere electricidad.

Además, el caso de estudio se aborda bajo cuatro escenarios para los tres esquemas de asignación: (a) Maximización de los ingresos totales individuales (TIR_p) sin considerar el presupuesto disponible de cada planta, (b) Maximización de TIR_p considerando el presupuesto disponible de cada planta, (c) Maximización de TIR_p considerando una disminución del 10% en el presupuesto disponible para cada planta, (d) Maximización de TIR_p considerando una disminución del 20% en el presupuesto disponible para cada planta.

Resultados de la Optimización Metaheurística

Las soluciones después del MNG para el SRC, el ORC y el ciclo AR se muestran en la Figura 2. Esta figura muestra el comportamiento del costo total anual en función de la ganancia por la venta de energía para el SRC. El punto A fue seleccionado como la mejor solución porque este punto genera el mayor beneficio total anual, que es igual a 6,831,683 \$/año. Además, la mejor solución presenta un costo unitario de producción de energía para el SRC ($PP \text{ Cos } t^{src}$) de 0.065 \$/kWh. Para el ORC, se observa que el costo total anual aumenta a medida que aumenta la ganancia por la venta de energía. La mejor solución para el ORC fue la que obtuvo la mayor ganancia total anual (punto A) con un valor igual a 2,442,221 \$/año. Además, este punto presenta un valor para el costo unitario de producción de energía para el ORC ($PP \text{ Cos } t^{orc}$) de 0.008 \$/kWh. Para el ciclo AR se muestra el comportamiento del costo total anual en función del calor total de refrigeración producido por el ciclo AR después del MNG. Cabe destacar que sólo se

obtienen dos soluciones. El punto A representa la mejor solución en términos económicos y en producción de refrigeración. En este punto, el aumento en la refrigeración producida es más significativo que el aumento del costo total anual del ciclo. El coste de capital unitario del ciclo AR (C_{cap}^{ar}) es de 210.5 \$/kW.

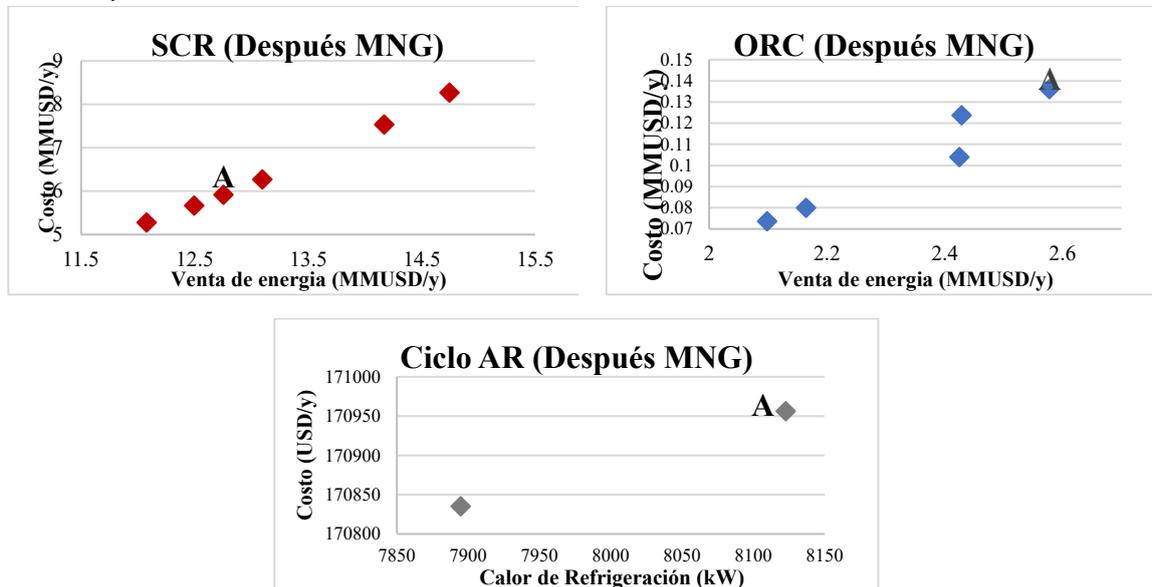


Figura 2. Soluciones para el SRC, el ORC y el ciclo AR usando I-MODE.

Resultados de la Optimización Determinista

La formulación matemática propuesta proporciona los ingresos y el *TAC* para cada planta bajo los diferentes esquemas de asignación en la **Figura 3** se presentan las distribuciones de ingresos obtenido bajo los diferentes esquemas. En primer lugar, en el escenario (a), la restricción presupuestaria no está activa. bajo el Bienestar Social la planta 1 y la planta 5 obtienen una gran cantidad de ingresos, mientras que las plantas 2, 3 y 4 obtienen ingresos inferiores a su *TAC*; lo que genera pérdidas económicas. Bajo el Bienestar Rawlsiana, se consiguen ingresos similares para todas las plantas, mientras que la diferencia de ingresos entre la planta 2 (mayor ingreso) y la planta 5 (menor ingreso) es del 41.5%. Bajo el esquema Nash, los ingresos de las plantas son notablemente similares, donde la diferencia entre la planta 5 (mayor ingreso) y la planta 1 (menor ingreso) es del 19%, lo que supone una diferencia menor de ingresos entre la planta de mayor ingreso y la de menor ingreso en comparación con el Bienestar Rawlsiana. El esquema de Nash es el más justo debido a que los ingresos de cada planta son similares.

En el escenario (b), bajo el esquema Bienestar Social, sólo las plantas 1, 2 y 4 utilizan el presupuesto total disponible. En el esquema Bienestar Rawlsiana, sólo la planta 5 no utiliza el presupuesto total. Bajo el esquema Nash, sólo la planta 1, la planta 4 y la planta 5 utilizan el presupuesto total. En términos de *TAP* obtenida bajo los esquemas de Bienestar Social y Nash, es menor que la *TAP* obtenida bajo el Bienestar Rawlsiana, donde la diferencia es mayor entre el Bienestar Social y el Bienestar Rawlsiana. Por otro lado, los ingresos de cada planta bajo los diferentes esquemas de asignación son diferentes, donde bajo el Bienestar Social sólo se logran altos ingresos para la planta 4 y la planta 2, mientras que para la planta 1 y la planta 5 los ingresos son menores, y los ingresos asignados a la planta 3 son excesivamente pequeños. En cuanto al Bienestar Rawlsiana, los ingresos son similares para cada planta, donde la diferencia entre la planta 2 (mayor ingreso) y la planta 5 (menor ingreso) es sólo del 33%. Bajo el esquema de Nash, los ingresos son muy similares entre las plantas y la diferencia es menor, ya que la diferencia entre la planta con mayor ingreso (planta 2) y la planta con menor ingreso (planta 3) es del 26%. Además, en términos de ingresos entre plantas, el esquema de Nash es más justo que los otros esquemas de asignación porque los ingresos son más similares entre las diferentes plantas. En el escenario (c), el *TAP* obtenido bajo el esquema de Bienestar Social y Nash es menor que la *TAP*

obtenida bajo el Bienestar Rawlsiana, donde la mayor diferencia se encuentra entre el Bienestar Social y el Bienestar Rawlsiana. Concretamente, en el esquema Bienestar Social, los ingresos de las plantas 1, 2, 3 y 4 son muy escasos, mientras que la planta 5 obtiene ingresos muy elevados. Los ingresos conseguidos por cada planta bajo los esquemas de Bienestar Rawlsiana y Nash son notablemente similares; sin embargo, a través del Bienestar Rawlsiana se consiguieron ingresos ligeramente superiores para cada planta. En el escenario (d) la *TAP* obtenida bajo el Bienestar Social y el Bienestar Rawlsiana es menor que la *TAP* obtenida bajo el esquema de Nash. La mayor diferencia de la *TAP* se da entre los esquemas Nash y Bienestar Social, que equivale al 5.6%. Bajo el Bienestar Social, sólo se alcanzan mayores ingresos en la planta 1, mientras que en el resto de las plantas los ingresos logrados no son satisfactorios. Los ingresos obtenidos bajo los esquemas Bienestar Rawlsiana y Nash son notablemente similares; sin embargo, en el esquema Nash, se obtiene un poco más de ingresos en cada planta. Por lo tanto, el esquema Nash es el mejor en este escenario en cuanto a ingresos generados, así como el más justo.

La **Figura 4** muestra los *TIRs* para cada planta en cada escenario, donde en todos los escenarios bajo Bienestar Social, los *TIRs* están altamente sesgados hacia plantas específicas, mientras que, para el resto de las plantas, hay valores negativos en algunos *TIRs*, lo que se traduce en costos extras en el presupuesto de estas plantas. Bajo el esquema Bienestar Rawlsiana y Nash, el *TIR* obtenido es el mismo en cada planta y esto ocurre en todos los escenarios. Sin embargo, los *TIRs* conseguidos en algunos escenarios son mayores bajo el Bienestar Rawlsiana y en otros son mayores bajo el esquema de Nash.

Además, el *TAC* de cada planta es distinto bajo los diferentes esquemas de asignación (**Figura 4**) en los escenarios (a) y (b). En el escenario (a) bajo el Bienestar Social, el *TAC* es bastante diferente en cada planta; sin embargo, este esquema no es satisfactorio debido al injusto *TIR* obtenido en algunas plantas. Bajo el esquema Nash, el *TAC* es similar para cada planta, por lo que puede considerarse injusto para algunas plantas; por ejemplo, hay plantas (planta 3 o planta 5) que requieren pocos servicios (servicios públicos, refrigeración, electricidad), mientras que otras plantas (planta 1 o planta 2) requieren muchos servicios, por lo que no es justo que una planta que requiere más servicios obtenga el mismo *TIR* y un *TAC* similar (o igual) a una planta que requiere pocos servicios. Además, el *TAC* de cada planta es distinto bajo los diferentes esquemas de asignación (**Figura 4**) en los escenarios (a) y (b). bajo el Bienestar Social, el *TAC* es bastante diferente en cada planta; sin embargo, este esquema no es satisfactorio debido al injusto *TIR* obtenido en algunas plantas. Bajo el esquema Nash, el *TAC* es similar para cada planta, por lo que puede considerarse injusto para algunas plantas; por ejemplo, hay plantas (planta 3 o planta 5) que requieren pocos servicios (servicios públicos, refrigeración, electricidad), mientras que otras plantas (planta 1 o planta 2) requieren muchos servicios, por lo que no es justo que una planta que requiere más servicios obtenga el mismo *TIR* y un *TAC* similar (o igual) a una planta que requiere pocos servicios. Bajo el Bienestar Rawlsiana, el *TAC* es diferente para cada planta; sin embargo, en términos de servicios requeridos y *TAC*, es el más justo porque las plantas que requieren más servicios tienen el *TAC* más alto, y las que requieren menos servicios tienen el *TAC* más bajo. Por tanto, se concluye que bajo el Bienestar Rawlsiana se obtienen mejores resultados en el escenario (a) y (b), tanto en términos de *TIRs* como de *TACs*. Bajo los esquemas Bienestar Rawlsiana y Nash en los escenarios (c) y (d) los *TACs* son iguales al presupuesto disponible para cada planta, por lo que los resultados solo difieren ligeramente en el *TIR* ganado por cada esquema de asignación.

CONCLUSIONES

A partir de los resultados obtenidos de la optimización general en el caso de estudio, se han encontrado las condiciones óptimas de funcionamiento (temperaturas, presiones, eficiencias, etc.) para los motores térmicos mediante la correcta simulación en Aspen Plus®. Además, las diferentes distribuciones de recursos encontradas bajo los diferentes esquemas muestran que para los escenarios (a) y (b) el esquema más justo es el esquema Rawlsiano mientras que en los escenarios (c) y (d) los esquemas Rawlsiano y Nash ofrecen distribuciones similares. Asimismo, el esquema de Bienestar Social obtiene distribuciones económicamente inaceptables para algunos de los participantes. El enfoque propuesto ha demostrado ser eficaz para satisfacer las diferentes

necesidades energéticas de los responsables de la creación de un parque ecoindustrial. Además, este enfoque es general y puede utilizarse para diferentes casos de estudio en los que la integración del calor entre plantas y los motores térmicos se consideren simultáneamente.

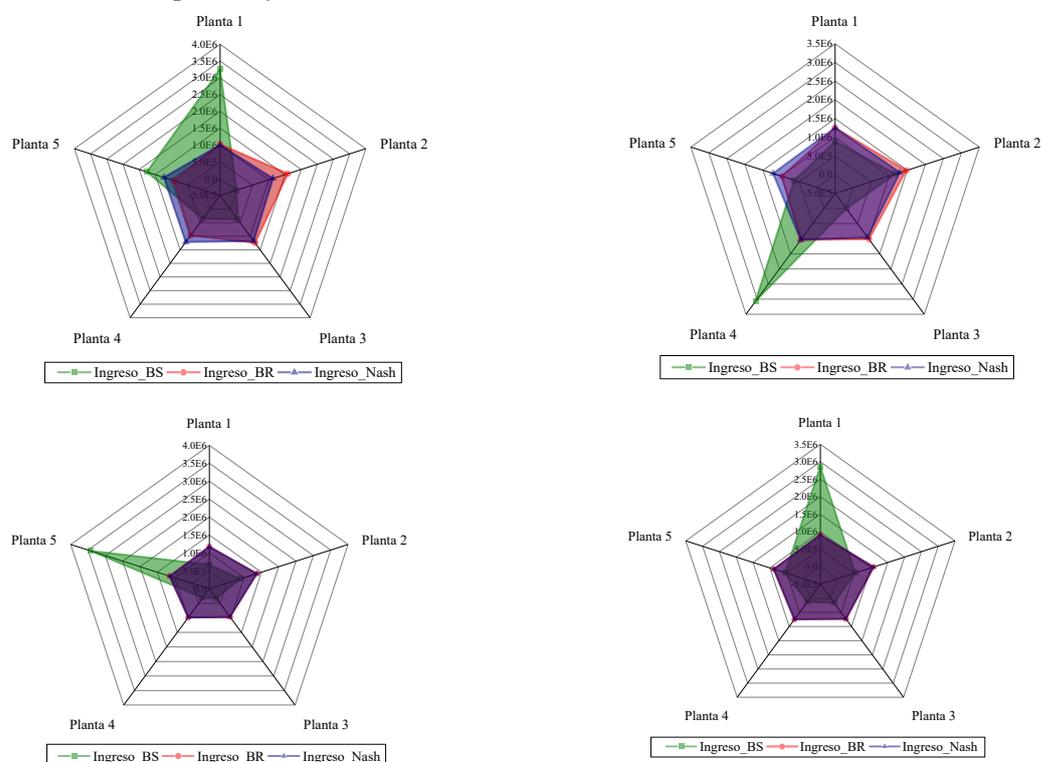


Figura 3. Distribución de ingresos para las plantas bajo los diferentes esquemas de asignación (escenario (a), (b), (c), (d)).

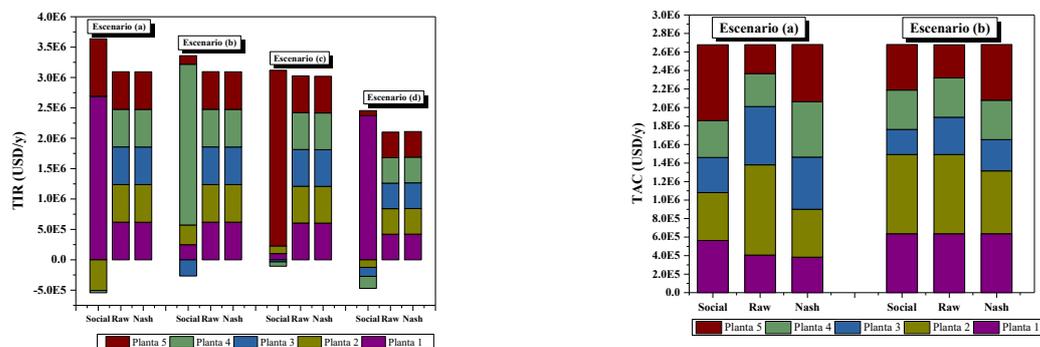


Figura 4. Distribución de ingresos totales para cada planta. Y Costo total anual para cada planta (escenario (a) y (b)).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Munguía-López, AdelC., Sampat, A.M., Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., Zavala, V.M. (2019). Fairness-guided design of water distribution networks for agricultural lands. *Comput Chem Eng*, 130, 106547.
- Ponce-Ortega, J.M., Hernández-Pérez, L.G. (2019). Optimization of Process Flowsheets through Metaheuristic Techniques. Springer International Publishing.
- Cheng, S-L., Chang, C-T., Jiang, D. (2014). A game-theory based optimization strategy to configure inter-plant heat integration schemes. *Chem Eng Sci*, 118, 60-73.
- Anastasovski, A., Rasković, P., y Guzović, Z. (2020). A review of heat integration approaches for organic Rankine cycle with waste heat in production processes. *Energy Convers and Manage*, 221, 113175.
- Bütün, H., Kantor, I., Maréchal, F. (2018). A heat integration method with multiple heat exchange interfaces. *Energy*, 152, 476-88.

Metodología para el diseño óptimo de procesos bajo escenarios de incertidumbre: Criterios estadísticos en la selección de diseños robustos

Jaime David Ponce-Rocha^{a, b, *}, Ricardo Morales-Rodríguez^{b, +}

^a CIATEQ A.C., Dirección de Ingeniería de Plantas y Construcción, Av. Del Retablo No. 150, Col. Constituyentes FOVISSSTE, México, 76150. *jaime.ponce@ciateq.mx

^b Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N, Col. Noria Alta, México 36050. +ricardo.morales@ugto.mx

RESUMEN

Dadas las restricciones y políticas de sostenibilidad actuales, el diseño de procesos químicos y bioquímicos está orientado hacia un enfoque multiobjetivo, así como la integración de incertidumbres como criterio de diseño. En el presente trabajo se propone una metodología para el diseño de óptimo de procesos bajo escenarios de incertidumbre con base en los principios de la programación estocástica y la optimización de dos etapas, generando una plataforma computacional a través de la integración entre matlabTM y aspen plusTM; empleando como funciones objetivo los ejes del análisis 4E, además de un algoritmo genético para el apartado de optimización. Adicionalmente se consideran criterios estadísticos como criterio de diseño de procesos. Como caso de estudio se integra un esquema de separación y purificación. Los resultados muestran que el uso del 80 % del valor en la curva de distribución acumulativa de cada variable de los resultados óptimos permite generar diseños robustos y factibles.

Palabras clave: Optimización bajo incertidumbre, algoritmos genéticos multiobjetivo, estadística, criterios para toma de decisiones.

INTRODUCCIÓN

Derivado de los requerimientos de la agenda 2030, el diseño de procesos químicos y bioquímicos debe ser enfocado hacia de un desarrollo sostenible y un mejor aprovechamiento de los recursos, donde el diseño de procesos participa en la determinación los valores óptimos de las variables asociadas con el diseño y operación de las operaciones unitarias presentes en el diagrama de flujo de proceso (Martin et al., 2022). Actualmente existen diferentes métricas para evaluar el desempeño óptimo de los procesos, tales como: la energía, exergía, economía e impacto ambiental, típicamente la combinación y evaluación conjunta de estas cuatro métricas es conocida como análisis 4E (por sus siglas en inglés), con aplicaciones directas a la mejora de procesos con altos consumos energéticos, así como beneficios en la sostenibilidad de procesos (Li et al., 2021, Ponce-Rocha et al., 2021).

El diseño y la optimización de plantas de proceso se ha centrado en puntos de operación estacionarios, sin embargo, todos los procesos están sujetos a la variabilidad por factores

internos y externos, por lo tanto, un diseño óptimo en un punto de operación estacionario puede resultar inviable cuando se presenta una variación en el proceso. Dada la falta de datos sobre la incertidumbre de datos disponibles en nuevos procesos, el campo de la ingeniería de sistemas de procesos se ha enfocado en el desarrollo de herramientas y metodologías enfocadas en el diseño de procesos bajo escenarios de incertidumbre, las cuales son de utilidad en la toma de decisión y selección de la configuración óptima del sistema (Al *et al.*, 2020).

De acuerdo con el estado del arte y necesidades en el diseño de procesos, el objetivo de este trabajo consiste en desarrollar e implementar una metodología para el diseño óptimo y robusto de procesos a través de estrategias de optimización multiobjetivo bajo incertidumbres, así como la determinación de un criterio basado en la estadística para la selección y toma de decisión en el diseño de procesos sujetos a escenarios de incertidumbre.

METODOLOGÍA

La metodología para el diseño óptimo de procesos bajo escenarios de incertidumbre se muestra en la Figura 1, la cual emplea las bases de la programación estocástica con la finalidad de resolver un problema de optimización con un enfoque de optimización-simulación. Las etapas sistemáticas de esta metodología integran: I. Definición de caso de estudio, II. Programación estocástica, III. Optimización multiobjetivo, IV. Diseño robusto de procesos.

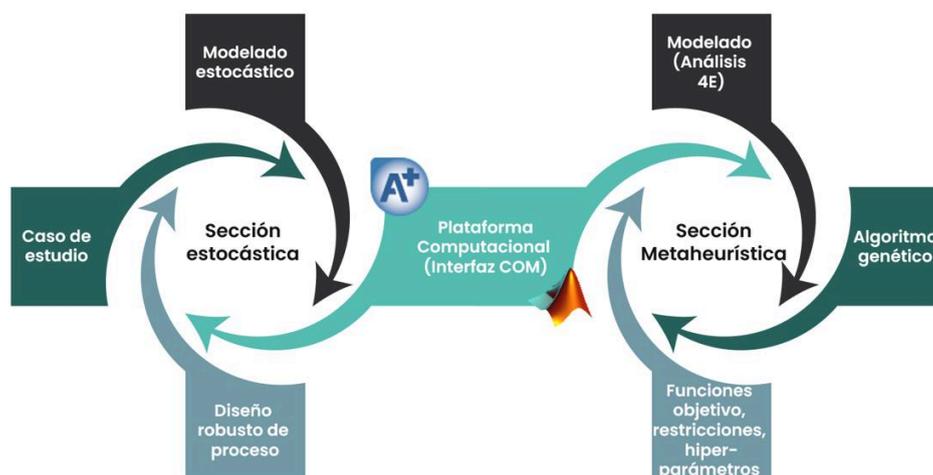


Figura 1. Metodología propuesta para el diseño óptimo de procesos bajo escenarios de incertidumbre.

I. Definición del caso de estudio.

La zona de separación y purificación de biocombustibles de segunda generación representa un reto importante debido a las altas tasas de dilución, múltiples productos y bajos rendimientos; estos factores se ven reflejados directamente en procesos energéticamente intensivos con una factibilidad económica-ambiental restringida. Por consiguiente, se estudia un esquema de separación y purificación para un caldo de

fermentación acetona-butanol-etanol (ABE), el cual contempla el uso de una columna de extracción líquido-líquido (C-101), seguida de cuatro columnas de destilación convencional (D-101, D-102, D-103, D-104), empleando como agente de extracción 2-etil-1-hexanol. Aspen plus V 12.1 TM fue empleado para la simulación del proceso, empleando el modelo termodinámico NRTL y la ecuación de estado Hayden-O'Connell, para la descripción del equilibrio de fases (Ponce-Rocha *et al.*, 2021).

II. Modelado estocástico.

El problema de optimización multiobjetivo bajo escenarios de incertidumbre es definido de la siguiente manera (1):

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{Min}} \quad \underline{Z} = [Z_k(\mathbf{x}, \theta^*)], \text{ s. t. } h(\mathbf{x}, \theta^*) = 0; \quad g(\mathbf{x}, \theta^*) \leq 0; \quad \mathbf{x} \in X, \theta^* \in \Theta^* \quad (1)$$

Donde, \underline{Z} representa el vector de k funciones objetivo (Energía, exergía, economía y ambiente), \mathbf{x} describe el vector de estados n -dimensional asociado con las condiciones operacionales y especiaciones de diseño (Número de etapas (NE), etapa de alimentación (NEA), flujo de agente de extracción (FAE), relación de reflujo molar (RR) y flujo de fondos (FF) o flujo de destilado (FD)), θ^* es el vector de incertidumbres s -dimensional. Por su parte \mathbf{h} & \mathbf{g} representan los vectores de restricciones de igualdad y desigualdad asociados con limitaciones estructurales y operacionales.

La solución al problema de optimización se basa en el modelo de la programación estocástica “*esperar y ver*”, donde se espera la ocurrencia de un evento incierto para posteriormente optimizarlo. Adicionalmente se discretiza la región de incertidumbre de modo que se obtiene una optimización multi-escenario. Se seleccionó como fuente de incertidumbre la composición y flujo de alimentación, adicionalmente se integró el método de muestreo del hipercubo latino para la generación de setenta y cinco escenarios aleatorios acotados entre los siguientes valores: acetona (A) 2,275±112 kg/h, butanol (B) 5,931±276 kg/h, etanol (E) 1,592±135 kg/h, agua (W) 10,479±498 kg/h, dióxido de carbono (CO₂) 82±5 kg/h, y 2-etil-1-hexanol (EA-2ETH) 25,000±5,000 kg/h como agente de extracción. Los valores de flujo de alimentación y desviación estándar fueron obtenidos y adaptados de un trabajo experimental previo (Ponce-Rocha *et al.*, 2021).

III. Optimización multiobjetivo

Como parte de los alcances de este trabajo se integró un entorno de programación (Matlab R2019a TM) donde se desarrolló una plataforma de simulación-optimización entre las herramientas computacionales aspen plus-matlab.

Las funciones objetivo-seleccionadas consideraron los ejes del análisis 4E (Energía, exergía, economía y ambiente, por sus siglas en inglés), adaptadas conforme el caso de estudio seleccionado y descritas en la Tabla 1.

Tabla 1. Definición de funciones objetivo.

Energía	Exergía
$RE = \frac{\text{Requerimientos energeticos [MJ]}}{\text{Productos [kg]}}$	$\sigma T_0 = \sum_{j=1} \sum_{i=1} [\Delta E' x_{Q,j} + \Delta E' x_{Sep,i} + \Delta E' x_{Conc,i}] [kW]$ $\sigma T_0 = \Delta \dot{E} x_{Entrada} - \Delta \dot{E} x_{Salida}$
Economía	Ambiente
$TAC = \frac{\text{Costo de equipos}}{\text{Periodo de recuperación de inversión} + \text{Servicios auxiliares}}$	$Factor_E = \frac{\text{Residuos [kg]}}{\text{Productos [kg]}}$

Referente al algoritmo de optimización se empleó una suite propia de matlab, gamuliobj, basado en algoritmos genéticos multiobjetivo (una variante de NSGA-II). Los hiperparámetros para la solución de cada escenario fueron los siguientes: 50 generaciones, 200 individuos, 0.8 de factor de cruce y una función de mutación adaptable factible.

IV. *Diseño robusto de procesos*

Este apartado integra el uso del análisis de flexibilidad, el cual está asociado con la optimización estocástica de dos etapas para el diseño bajo incertidumbre. Como primera etapa se seleccionan las variables de decisión fijas de cada optimización (Especificaciones de diseño de cada una de las columnas), a través de valores de medidas de tendencia central (promedio, moda) y un valor del 80 % de la curva de distribución acumulativa (CDA). Posteriormente para la segunda etapa se seleccionan las variables operativas que puedan cambiar en respuesta a condiciones variables (Condiciones operación de cada una de las columnas) (Adams II et al., 2018).

RESULTADOS

La Figura 2, muestra los resultados generados asociados a las especificaciones de diseño óptimas para la configuración estructural propuesta en este trabajo. Dicha figura está conformada por tres secciones, la primera sección hace referencia a la gráfica de coordenadas paralelas de cada una de las especificaciones estructurales obtenidas en cada una de las optimizaciones de los escenarios.

La segunda sección emplea histogramas con la finalidad de obtener una representación clara de la distribución de los valores obtenidos en cada optimización de cada escenario.

Finalmente, la tercera sección integra gráficas de curvas de distribución acumulativas para cada especificación de diseño, así como la ubicación de los criterios estadísticos para la toma de decisión de la configuración más robusta (azul-promedio, rojo-moda, verde- 80 % del valor de la curva de distribución acumulativa).

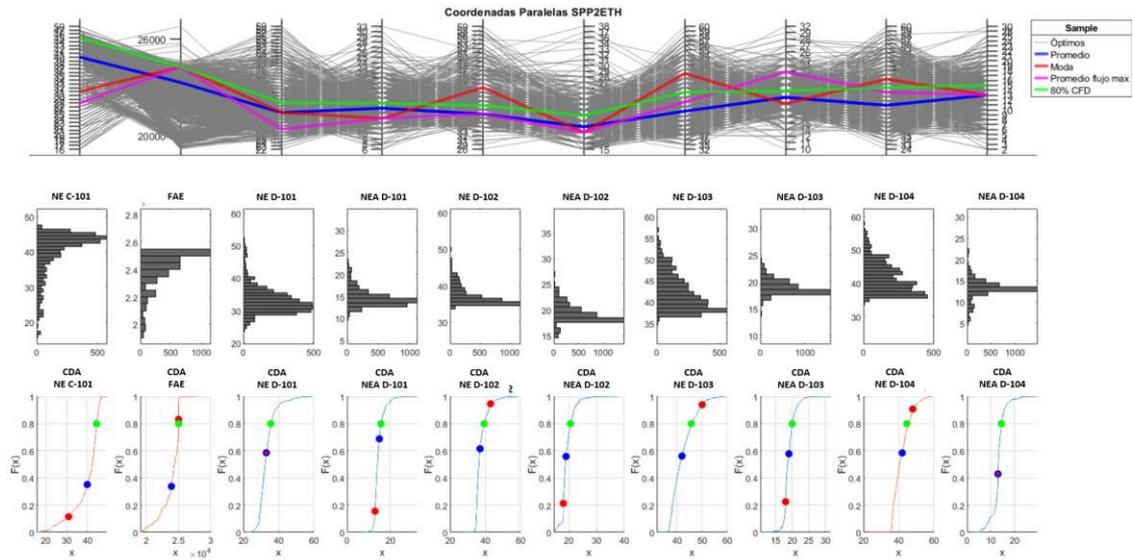


Figura 2. Resultados del diseño del esquema de separación y purificación bajo incertidumbres

La Tabla 2, muestra las configuraciones obtenidas por cada uno de los criterios de toma de decisión seleccionados, así como el valor de las funciones objetivo.

Tabla 2. Especificaciones de diseño estructural de columnas.

Variable / Criterio	FA	NE	NEA	NE	NEA	NE	NEA	NE	NEA	
	C ₁₀₁	D ₁₀₁	D ₁₀₁	D ₁₀₂	D ₁₀₂	D ₁₀₃	D ₁₀₃	D ₁₀₄	D ₁₀₄	
Nominal	44	23,384.69	28	18	35	20	38	18	42	16
Promedio	40	23,887.00	33	15	37	19	43	19	42	13
Moda	31	25,000.00	33	13	43	18	46	18	48	13
80 % CDA	45	25,000.00	36	16	39	21	46	20	46	15

De acuerdo con los resultados indicados en la Tabla 2, todos los diseños fueron evaluados bajo un enfoque *minimax* en el vector de alimentación (Acetona, butanol, etanol, agua, dióxido de carbono y flujo total), mostrando resultados factibles en todos los escenarios para el criterio del 80 % del valor en la CDA. La Tabla 3, muestra las especificaciones de diseño y condiciones de operación determinadas por la evaluación de los 12 escenarios propuestos por el enfoque *minimax*.

Tabla 3. Especificaciones del diseño flexible y condiciones de operación óptimas.

Equipo				
C ₁₀₁	D ₁₀₁	D ₁₀₂	D ₁₀₃	D ₁₀₄
NE: 45, NEA: 1, 45 FA: 25,000 kg/h D: 0.77 m, H: 27.43 m	NE: 36, NEA: 16, RR: 0.3116, RFF: 191.93 kmol/h, D: 3.26 m, H: 21.95 m P _{AE} ≥ 0.9990 R _{AE} ≥ 0.9990	NE: 39, NEA: 21, RR: 15.54-19.00, RFD: 41.70-44.50 kmol/h D: 2.28 m, H: 23.77 m P _A ≥ 0.9500 R _A ≥ 0.9950	NE: 46, NEA: 20, RR: 6.70-7.75, DFD: 41.59- 50.00 kmol/h D: 1.35 m, H: 28.04 m P _E ≥ 0.9000 R _E ≥ 0.9920	NE: 45, NEA: 15, RR: 0.1000, DFD: 55.85- 61.25 kmol/h D: 1.15 m, H: 28.04 m P _B ≥ 0.9950

Dado que los flujos de alimentación y composición son variables, los valores de la relación de reflujo, flujo de destilado o flujo de fondos son ajustados mediante un análisis de sensibilidad para determinar el rango de operación del esquema de separación y purificación, cumpliendo las restricciones de pureza y recuperación para cada equipo (**R** y **P**). Finalmente, los de escenarios evaluados empleando los resultados reportados en la Tabla 3, se determinó que los valores de las funciones objetivo se encuentran acotados en los siguientes intervalos: TAC: 7.48-8.07 MUSD/año, σT_0 : 1,972.90-2,145.70 kW, RE: 13.83-15.96 MJ/kg y Factor E: 0.68-0.73.

CONCLUSIONES

Con base en los resultados obtenidos, es posible determinar que la metodología propuesta y la plataforma computacional desarrollada permiten obtener resultados favorables para cada uno de los escenarios bajo incertidumbre planteados. Adicionalmente, la integración del 80 % del valor en las curvas de distribución acumulativa como criterio de diseño en procesos bajo escenarios de incertidumbre permite generar un esquema de separación y purificación adecuado para soportar algún tipo de perturbación inherente al proceso.

AGRADECIMIENTOS

Jaime David Ponce-Rocha agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo otorgado para el desarrollo de este trabajo a través del programa de becas de posgrado (731399).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adams II, T. A., Thatho, T., le Feuvre, M. C., & Swartz, C. L. E. (2018). The Optimal Design of a Distillation System for the Flexible Polygeneration of Dimethyl Ether and Methanol Under Uncertainty. *Frontiers in Energy Research*, 6, 41.
- Al, R., Behera, C. R., Gernaey, K. v., & Sin, G. (2020). Stochastic simulation-based superstructure optimization framework for process synthesis and design under uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 143, 107118.
- Li, Y., Ye, Q., Wang, N., Chen, L., Zhang, H., & Xu, Y. (2021). Energy-efficient extractive distillation combined with heat-integrated and intermediate reboilers for separating acetonitrile/isopropanol/water mixture. *Separation and Purification Technology*, 262, 118343.
- Martin, M., Gani, R., & Mujtaba, I. M. (2022). Sustainable process synthesis, design, and analysis: Challenges and opportunities. *Sustainable Production and Consumption*, 30, 686–705.
- Ponce-Rocha, J. D., Picón-Núñez, M., Carvalho, A., Santos, A., Gómez-Castro, F. I., & Morales-Rodríguez, R. (2021). A design and optimization framework for (bio-) chemical process based on exergo-economic and environmental aspects. *Computer Aided Chemical Engineering*, 50, 1897–1902.

Optimización del consume energético en el proceso de producción de ácido levulínico utilizando destilación reactiva

Heriberto Alcocer-García^a, Jose Luis Solis-Sanchez^a, Eduardo Sanchez-Ramirez^a, Juan G. Segovia-Hernandez^a

^a *Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. eric_aog@hotmail.com*

RESUMEN

El ácido levulínico (AL) es considerado dentro de los doce principales productos químicos provenientes de biomasa en términos de potencial de mercado. Para obtenerlo, se lleva a cabo una hidrólisis ácida de la glucosa utilizando ácido sulfúrico como catalizador. Debido a esto, el exceso de agua se vuelve un problema en las etapas de separación, haciendo que el proceso de purificación sea costoso y de un alto consumo energético. Por otra parte, la destilación reactiva (RD) es un proceso que integra reacción química y destilación en un solo equipo, la ventaja de esta reducción de equipos impacta directamente en la reducción del costo de inversión, menor consumo energético en las etapas posteriores de separación y por tanto un menor impacto ambiental. Por tanto, el objetivo de este proyecto es proponer un proceso donde se implemente una columna de destilación reactiva para así disminuir el consumo energético, los costos del proceso y, por tanto, el costo final de producción de AL. Se usa el esquema convencional para comparar la energía, el costo, impacto ambiental y la conversión cuando se usa la destilación reactiva. Los resultados muestran una conversión total de glucosa a ácido levulínico usando RD y purezas similares a las que se obtuvieron utilizando el reactor convencional. Además, se presenta una disminución en el costo de los equipos del 23% y 24% en el consumo energético comparado con el sistema convencional.

Palabras clave: Ácido levulínico, Destilación reactiva, Sustentabilidad, Intensificación de proceso.

INTRODUCCIÓN

Dado que las necesidades energéticas del mundo están en cambiando, la investigación y la dirección hacia dónde dirigir las biorrefinerías del siglo XXI son fundamentales. Esta visión sobre las biorrefinerías contribuirá a la sostenibilidad por su dependencia inherente de los recursos sostenibles y por el reciclaje de residuos con todo el proceso convirtiéndose en carbono neutral. El ácido levulínico (AL) tiene un enorme potencial como materia prima económica para producir una gama de sustancias químicas de importancia industrial como el metiltetrahidrofurano, un interesante compuesto utilizado como aditivo para combustibles con un potencial de 10000–1000000 millones de libras/año; delta-aminoácido levulínico, un herbicida biodegradable con 175–350 millones de libras/año; Ácido difenólico, un plastificante con 35 millones de libras/año y 1,4-butanodiol, un monómero con 200 millones de libras/año [1]. El mercado mundial de ácido levulínico exhibió un crecimiento moderado durante 2015-2020.

El AL solo puede producirse exclusivamente mediante procesos químicos catalizados por ácido, a diferencia de otros derivados de biomasa de alto valor, que pueden obtenerse por una vía biológica como la fermentación, la hidrogenación o la oxidación en el proceso de producción. Este atributo hace que el ácido levulínico sea especialmente atractivo porque se puede utilizar una variedad de alimentos lignocelulósicos económicos para la producción directa de esta molécula termodinámicamente estable [2].

Los procesos para la separación de mezclas líquidas incluyen muchas formas de destilación y dependen del equilibrio vapor-líquido de los componentes de la mezcla y su termodinámica. En el caso de la purificación de mezclas no ideales (por ejemplo, separación de azeótropos), los procesos de separación consumen una cantidad importante de energía y conducen a altos costos de capital y contaminación ambiental [3], lo que justifica la búsqueda de alternativas a la destilación convencional, que se utiliza normalmente para la purificación de ácido levulínico [4-6]. Se han propuesto esquemas híbridos para la purificación de ácido levulínico para eliminar el exceso de agua mediante el uso de extracción líquido-líquido [7] y esquemas para reducir el consumo de energía, como columnas de pared divisoria [8]. Por lo que en este trabajo se propone el uso de la destilación reactiva para producir ácido levulínico para obtener un proceso más sustentable, esto al promover la formación de LA de mejor manera que el proceso convencional y al mismo tiempo separando la mayor cantidad de agua del proceso; y con ello reducir el costo de capital, el uso de servicios y globalmente el impacto generado por el proceso convencional. Además, para obtener una comparación justa, el proceso convencional que usa un reactor CSTR seguido de tres columnas de destilación y el proceso intensificado que consiste en una columna de destilación reactiva seguida de dos columnas de destilación se optimizaron usando el algoritmo de evolución diferencial con lista tabú (DETL), para minimizar el consumo de energía.

METODOLOGÍA

La metodología se resume en la Figura 1.

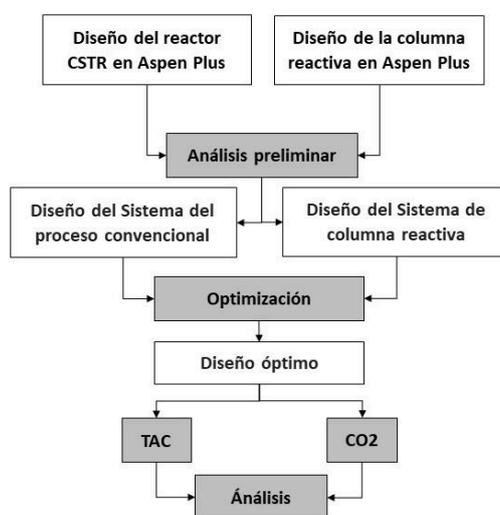


Figura 1.- Metodología

En la primera etapa, se realizó un análisis del tiempo de residencia y de los perfiles de temperatura en diseños preliminares del reactor y la columna de destilación reactiva. Una vez determinada la factibilidad, se llevó a cabo un proceso de optimización para encontrar los diseños óptimos que minimicen la carga térmica. Finalmente, se realizó un análisis comparativo utilizando como criterio el coste total anual (TAC) y las emisiones de CO₂.

RESULTADOS

Dentro de la literatura se especifican las condiciones de operación en las que se lleva a cabo la hidrólisis ácida para obtener ácido levulínico. Sin embargo, no especifican tiempos de reacción, por lo que se realizó un estudio de sensibilidad en un reactor CSTR. La Figura 2 muestra el análisis del tiempo de residencia, donde se observa la conversión de glucosa a ácido levulínico. HMF es un intermediario, desaparece rápidamente y no se acumula. Aunque la glucosa se consume casi en su totalidad, la conversión no es del 100%, esta conversión podría lograrse modificando las condiciones de operación o aumentando el tiempo de residencia.

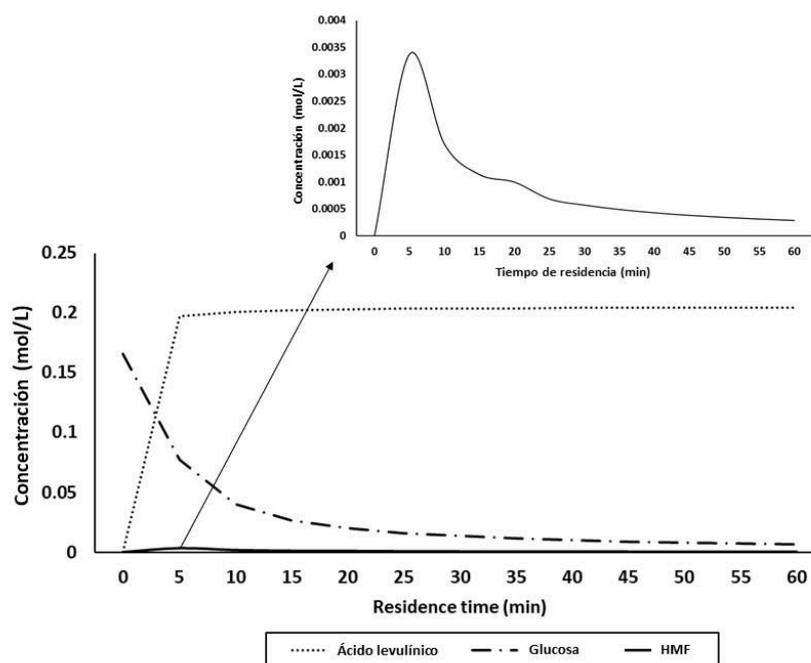


Figura 2.- Análisis del efecto del tiempo de residencia en la conversión de la glucosa en el reactor CSTR.

Una vez establecida la factibilidad del proceso, se realizó la optimización utilizando el algoritmo de evolución diferencial con lista tabú (DETL). Entre las variables del sistema convencional se encuentran la temperatura del reactor, el tiempo de residencia, el número de etapas, la etapa de alimentación, el diámetro, la relación de reflujo, los flujos de fondo y el flujo del domo. Para el sistema con destilación reactiva las variables fueron: Número de etapas, etapa de alimentación, diámetro, relación de reflujo, flujos de fondo, flujo de domo y retención. La minimización del consumo de energía a través del monitoreo del servicio del rehervidor se muestra en la Figura 3.

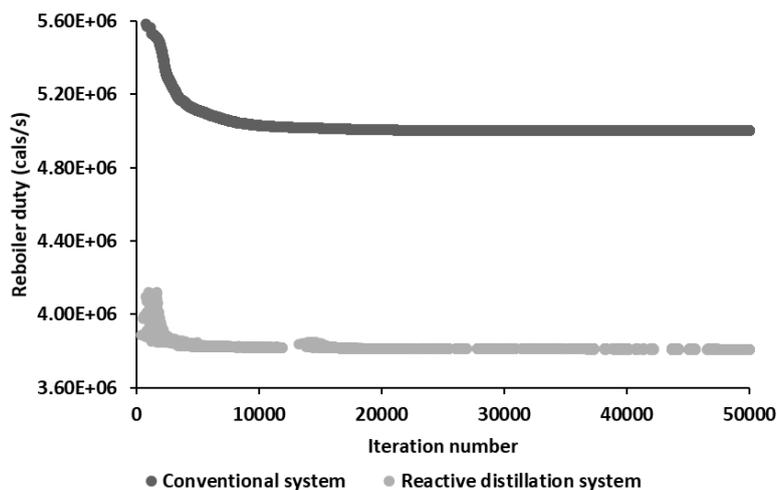


Figura 3.- Evolución del algoritmo en la minimización de la carga térmica.

Los diseños obtenidos a través de la optimización son mostrados en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros del diseño óptimo.

		Sistema Convencional (CS)			Sistema de destilación reactiva (RDS)		
Reactor	R1	--	--	--	--	--	--
Temperatura (°C)	168.82	--	--	--	--	--	--
Tiempo de residencia (min)	352						
Columnas	--	C1	C2	C3	CR1	CC2	CC3
Etapas	--	38	60	38	42	70	24
Etapas de alimentación	--	9	37	7	15	51	17
Relación de reflujo	--	0.39	0.96	0.42	0.003	0.75	0.38
Flujo de destilado (kg/h)	--	20015.04	7270.70	945.07	20005.34	7288.28	967.39
Flujo de fondo (kg/h)	--	7977.73	707.03	6325.63	7994.66	706.37	6320.89
Diámetro (m)	--	1.17	1.87	1.68	1.14	1.73	1.38
Etapas reactivas	--	--	--	--	15—42	--	--
Holdup (l)	--	--	--	--	0.56	--	--
Presión (atm)	1	1	1	1	1	1	1
Carga Térmica (cal/s)		680164	753169	158439	2975095	673960	161223
		341	909	3			

Ácido levulínico (%wt)	--	--	--	0.99	--	--	0.99
Ácido Formico (%wt)	--	--	0.88	--	--	0.86	--
Ácido sulfúrico (%wt)	--	0.99	--	--	0.99	--	--
TAC (\$/y)	1.07 x10 ⁷			8.27 x10 ⁶			
Carga térmica total (cal/s)	5.01 x10 ⁶			3.81 x10 ⁶			

Realizando un análisis general en términos de consumo energético, el RDS presenta un ahorro sobre el CS del 24%. Por otra parte, las temperaturas de degradación de los productos son mucho más altas que el rango de temperaturas que opera la columna de destilación reactiva, excepto la glucosa, la cual empieza a degradarse después de los 100°C [9]. En la Figura 4 se muestra el perfil de temperatura de la columna de destilación reactiva óptima, se observa que se encuentra en el rango establecido para que se lleve a cabo la hidrólisis ácida, la cual está entre 100-250 °C. Un aspecto importante de este tipo de sistemas es la viscosidad, en este caso la viscosidad de la mezcla es muy baja a las condiciones de presión y temperatura, garantizando así el transporte de masa en la columna.

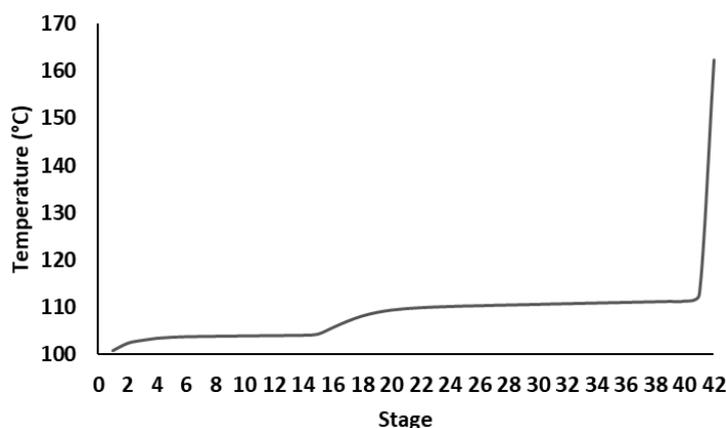


Figura 4.- Perfil de temperaturas del diseño óptimo de la columna reactiva.

CONCLUSIONES

La intensificación del proceso para la producción y purificación de ácido levulínico se realizó mediante el uso de una columna de destilación reactiva, se obtuvo la conversión de glucosa a ácido levulínico, obteniendo resultados similares en cuanto a conversión. Se realizó un análisis preliminar para evaluar la factibilidad de implementar la columna de destilación reactiva, obteniendo que la columna opera dentro de los rangos establecidos para favorecer la hidrólisis ácida. Además, se realizó el proceso de optimización para obtener los diseños óptimos del diseño convencional y del diseño intensificado. Gracias a la intensificación se demostraron las ventajas de la implementación de la columna de

destilación reactiva ya que favorece el ahorro energético en un 24% respecto al diseño convencional. Esta reducción se debe a la energía aportada a la reacción para separar el componente más abundante de la mezcla, favoreciendo así su separación y la de los demás componentes en etapas posteriores. Es importante mencionar que en ambos procesos la parte con mayor consumo de energía es la parte reactiva, por lo que es una pauta para futuras implementaciones de esquemas con integración de destilación reactiva ya que este alto consumo de energía puede ser aprovechado para separar un componente de la mezcla. Por otro lado, la reducción de equipos por la integración del reactor en la columna impacta en el costo total anual, generando un ahorro del 23% respecto al esquema convencional. Por lo tanto, en este trabajo se muestran las ventajas de implementar la destilación reactiva y se presenta una alternativa que mejora la sustentabilidad de la producción de ácido levulínico. Esta configuración cumple con las características de una economía circular, y los resultados pueden indicar la posibilidad de utilizar estas tecnologías intensificadas a nivel industrial para la producción y purificación de ácido levulínico.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Bozell, J. J., Moens, L., Elliott, D. C., Wang, Y., Neuenschwander, G. G., Fitzpatrick, S. W., y Jarnefeld, J. L. (2000). Production of levulinic acid and use as a platform chemical for derived products. *Resources, conservation and recycling*, 28(3-4), 227-239.
2. Serrano-Ruiz, J. C., West, R. M., y Dumesic, J. A. 2010. Catalytic conversion of renewable biomass resources to fuels and chemicals. *Annual review of chemical and biomolecular engineering*, 1, 79-100.
3. Chaudhari, S., Kwon, Y., Moon, M., Shon, M., Park, Y., & Nam, S. (2018). Melamine-modified silicotungstic acid incorporated into the polyvinyl alcohol/polyvinyl amine blend membrane for pervaporation dehydration of water/isopropanol mixtures. *Vacuum*, 147, 115-125.
4. De Rijke, A., Parton, R. F. M. J., Santoro, D., y Engendahl, B. (2019). *U.S. Patent No. 10,239,814*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
5. Dunlop, A. P. (1948). Furfural formation and behavior. *Industrial & Engineering Chemistry*, 40(2), 204-209.
6. Seibert, F., (2010). A method of recovering levulinic acid. 2010.
7. Nhien, L. C., Long, N. V. D., Kim, S., y Lee, M. (2016). Design and assessment of hybrid purification processes through a systematic solvent screening for the production of levulinic acid from lignocellulosic biomass. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(18), 5180-5189.
8. Alcocer-García, H., Segovia-Hernández, J. G., Prado-Rubio, O. A., Sánchez-Ramírez, E., y Quiroz-Ramírez, J. J. (2019). Multi-objective optimization of intensified processes for the purification of levulinic acid involving economic and environmental objectives. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 136, 123-137.
9. Chang, C., Xiaojian, M. A., y Peilin, C. E. N. (2006). Kinetics of levulinic acid formation from glucose decomposition at high temperature. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(5), 708-712.

Optimización de la sección de purificación del proceso de alquilación utilizando el algoritmo estocástico BUMDA

Rodolfo Murrieta-Dueñas^{a,*}, Jazmín Cortez-González^a, Roberto Gutiérrez-Guerra^b, Juan G. Segovia-Hernández, Arturo Hernández-Aguirre

^a *Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico Superior de Irapuato, carretera Silao-Irapuato km 12.5 El Copal, Irapuato, Gto. México 36821*

^b *Universidad Tecnológica de León. Campus I. Blvd. Universidad Tecnológica #225 Col. San Carlos León, Gto. México.*

**rodolfo.md@irapuato.tecnm.mx*

RESUMEN

Uno de los combustibles de mayor demanda es la gasolina con características de alto octanaje por lo que al producto final se le añaden ciertos aditivos como la gasolina de alquilación. En México, la gasolina de alquilación es producida en un proceso catalizado con ácido fluorhídrico, que aguas abajo del reactor se convierte en un contaminante para el producto de alto valor agregado degradando la calidad del alquilado. En este trabajo se plantea el desarrollo de la optimización de la sección de purificación de la planta de alquilación utilizando el algoritmo BUMDA acoplado a una técnica auto-adaptativa de manejo de restricciones con el objetivo de encontrar diseños que mejoren la calidad del producto. Los datos del diseño de la planta de alquilación fueron tomados para realizar la simulación de la sección ya mencionada en el software Aspen Plus. La optimización se llevó a cabo considerando como variables manipulables los parámetros de operación y variables de diseño del proceso. Los resultados muestran que para disminuir la concentración de HF en la corriente de alquilado, es necesario modificar las condiciones de operación (relación de reflujo, corrientes laterales y flujo de líquido). De acuerdo con los resultados obtenidos, la presión de operación disminuyó considerablemente, lo que da evidencia de que el proceso será más seguro para los operarios. Además, existe una reducción significativa de los requerimientos energéticos y por ende más limpio, ya que se reducen las emisiones de CO₂ a la atmósfera. Finalmente los diseños obtenidos son intensificados, amigables con el medio ambiente, reducen el riesgo y tienen un menor costo de operación.

Palabras clave: BUMDA, Optimización estocástica, alquilación, Manejo de restricciones.

INTRODUCCIÓN

A partir de la revolución industrial, la actividad económica mundial pasó de una economía basada en el reciclaje a una sustentada en recursos no renovables, éstos últimos particularmente favorecedores del progreso pero también de la degradación del medio ambiente. Por otro lado, la industria química responde a la demanda de soluciones para satisfacer las crecientes necesidades materiales de la sociedad aportando nuevos productos y desarrollando nuevos procesos de producción.

Uno de los procesos de producción de energéticos más importante dentro de los complejos petroquímicos es la producción de gasolinas de alto octanaje mediante la reacción de alquilación que fue propuesta en 1930.

La tecnología vigente en el proceso de alquilación a escala industrial usa catalizadores ácidos en fase líquida lo que ocasiona la contaminación del producto de alto valor agregado; el alquilado. En particular en México, la tecnología utilizada pertenece a Conoco-Phillips que utiliza ácido fluorhídrico (HF) como catalizador. Se han realizado algunas propuestas para mejorar el proceso, tales como: Incluir una red de intercambio de calor (Liebmann y col, 1998), la optimización del proceso simplificando el modelo matemático utilizando evolución diferencial (B.V. Babu, 2000), la propuesta de diseños rigurosos para las unidades de fraccionamiento de crudo (Bagajewicz, 2001) y recientemente se propone el uso de reactores con catalizadores sólidos (Y. Li, 2018)

A pesar de estas contribuciones aun no se han propuesto diseños optimizados que reduzcan la cantidad de energía requerida en la sección de purificación y que a su vez mejoren la calidad del alquilado. Por esta razón, en este trabajo, se propone realizar la optimización de la sección de purificación de la planta de alquilación, considerando como una de las restricciones más importantes dentro del diseño, la disminución de la concentración de HF en la corriente de alquilado.

METODOLOGÍA

La optimización del proceso de separación de la unidad de alquilación con HF consiste básicamente en columnas de destilación que al ser modeladas rigurosamente convierte el problema de optimización en altamente no lineal, multivariable y sujeto a restricciones termodinámicas y de diseño. En este trabajo se presenta la optimización de la sección de purificación de la unidad HFU descrita anteriormente, considerando como objetivo principal la minimización de la carga térmica teniendo en cuenta que la concentración de HF en la corriente de producto no debe rebasar el límite máximo permitido (Figura 1).

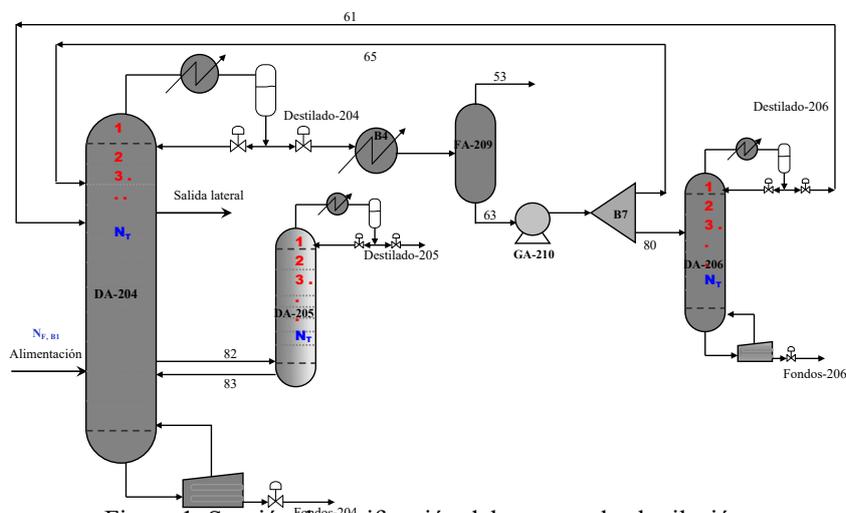


Figura 1. Sección de purificación del proceso de alquilación.

En este trabajo se implemento un algoritmo de estimación de la distribución. El Algoritmo BUMDA (Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm) fue desarrollado después de establecer los principios de los algoritmos basados en estimaciones de distribución por Valdez y col. (2008). Originalmente el BUMDA fue desarrollado para resolver problemas de optimización sin restricciones en espacios de búsqueda de variables continuas. El BUMDA está basado en la peculiar distribución de Boltzmann cuya característica principal es que contiene de manera implícita la función objetivo. Depende de dos parámetros, β y Z , siendo Z el parámetro de normalización. La principal bondad de esta distribución es que puede tener un comportamiento idéntico a la trayectoria de la función objetivo con los parámetros adecuados para la distribución y una población infinita. Para evitar tener una población infinita, se realiza una aproximación a la distribución de Boltzmann mediante una distribución normal que depende de dos parámetros que son la media y la varianza de la muestra seleccionada.

Un aspecto de suma importancia en el BUMDA es el método de selección del algoritmo. Este método consiste en ordenar la población del más al menos apto, una vez que la población esta ordenada se realiza el truncamiento y con la fracción seleccionada se realizan los cálculos necesarios para genera la población de la generación $t+1$. En el algoritmo se incluye elitismo, que en conjunto con el método de selección hace que la presión de selección sea adecuada y la búsqueda se realiza de forma más eficiente; esto permite evitar la convergencia prematura y a la vez ampliar la exploración en el espacio de búsqueda.

Considerando que existe un área de oportunidad en Ingeniería Química respecto a la técnica de manejo de restricciones en la optimización evolutiva y sabiendo de la existencia de varias técnicas empleadas en problemas particulares, se propone utilizar una técnica autoadaptativa de manejo de restricciones que permita conservar la información útil de las mejores características de cada individuo. Esta técnica ayuda a que el algoritmo de optimización estocástica realice la búsqueda en la dirección más promisoría en cada momento del proceso de optimización. Los beneficios de usar esta técnica de manejo de restricciones son que el algoritmo necesita pocas evaluaciones de función y por ende el tiempo de cómputo es reducido.

En la metodología de optimización se utilizaron tres paquetes computacionales: MATLAB, Excel y Aspen Plus. En MATLAB se alberga el código del algoritmo de optimización y desde donde se tiene el control del proceso. Excel es el gestor de tráfico de datos es decir es quien recibe y envía datos entre el algoritmo y el evaluador. Aspen Plus es un simulador modular secuencial que realiza la evaluación de la función objetivo resolviendo el modelo matemático sin realizar simplificaciones.

RESULTADOS

En la reformulación de gasolina, es necesario el uso de alquilado de alta calidad para elevar el octanaje del producto final; sin embargo, el alquilado obtenido en la planta de alquilación generalmente contiene altos niveles de HF que afecta de forma negativa la calidad del alquilado. En este sentido, la sección de purificación de la planta de

alquilación juega un papel muy importante en la obtención de alquilado de alta calidad y es evidente que una operación inadecuada de esta sección de la planta tendrá consecuencias sobre la calidad del producto.

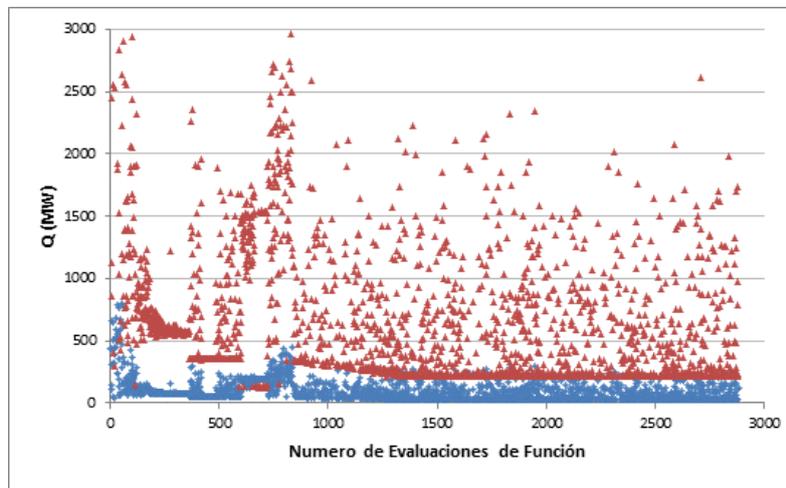


Figura 2. comportamiento de la función objetivo y la función original a lo largo del proceso de optimización de rediseño de la sección de purificación de la planta de alquilación.

En la Figura 2 se presenta el comportamiento del progreso de la optimización tanto de la función objetivo (carga térmica penalizada) como el valor original de carga térmica obtenido en la simulación. A cada evaluación de función le corresponden dos valores de carga térmica. El color rojo representa a la función penalizada y el azul al valor verdadero de la carga térmica obtenida por el evaluador.

Tabla 1. Diseños óptimos obtenidos de la optimización de la sección de purificación de la planta de alquilación.

Diseño	Columna DA-204			Columna DA-205			Columna DA-206			Columna DA-204		Q total Q (MW)	[CO2] Mton/año	Flujo Lateral	
	N _r	N _f	RR	N _r	N _f	N _r	N _f	RR	P (psi)	ppm HF	SIDE66 (kg/h)			FPL72 (kg/h)	
Nominal	90	28	10	29	29	24	2	1.5	300	290	373.31	----	91000.00	15393.7	
E1	82	30	6.49	15	15	17	12	10.36	228.66	2.90	124.89	2.11	95944.8	3700.6	
E2	84	23	11.04	10	10	17	14	10.47	237.80	1.85	311.29	3.72	95945.2	3703.1	
E3	82	30	6.45	15	15	13	5	8.56	232.16	3.4	190.44	2.16	95945.5	3701.9	
E4	82	30	6.47	15	15	17	14	11.24	237.50	3.2	191.17	2.29	95945.8	3700.5	
E5	82	30	6.48	15	15	24	10	11.38	239.96	10.2	191.53	2.31	95944.5	3701.1	

En la Tabla 1 se muestran 5 de los 30 experimentos realizados. De manera similar a las fases de optimización anteriores, la primera fila considera los valores nominales con los que se trabaja la planta, en tanto que las filas siguientes son los rediseños obtenidos después del proceso de optimización. El experimento 2, E2, es el mejor diseño encontrado, desde el punto de vista de la reducción de concentración de HF en la corriente de alquilado.

Los resultados muestran que, el número de etapas de las tres columnas DA-204, DA-205 y DA-206 se reduce en promedio 8 etapas en la columna principal y al menos una tercera parte en las columnas restantes, respecto al valor nominal y para compensar esta situación, la relación de reflujo en las columnas DA-204 y DA-206 se aumenta para lograr la purificación deseada.

Por otro lado, se observa que el diseño propone que el flujo de salida de la columna SIDE66 se aumente 4,000kg/h, esto favorecería la purificación del iso-butano. En tanto que para la corriente FPL72, se propone una reducción de 3/5 partes respecto al valor nominal, esto implica que la columna DA-206, requiera menos etapas para llevar a cabo la separación.

La presión de operación de la columna DA-204, presenta una disminución de 50 PSI, aproximadamente. Esto significaría, que existe una reducción del costo de operación del sistema de separación. Además, la carga térmica total del proceso se reduce más de la mitad, lo que impacta favorablemente en una reducción económica para la operación del proceso.

En cuanto a la concentración de HF en la corriente de salida de alquilados, se muestra que todos los diseños propuestos están por debajo de 10ppm, incluso existen 2 que están por debajo del valor permisible 3ppm. Esto significa, que el rediseño de la planta permitiría mejorar la calidad del alquilado y además, habría una reducción en el costo de operación del proceso, porque el tamaño de las columnas disminuye al igual que la presión y el flujo de la corriente de interconexión FPL72.

CONCLUSIONES

Debido a los resultados obtenidos en este trabajo, las conclusiones serán clasificadas en dos partes, las que corresponden a la herramienta de optimización y a la optimización del proceso de alquilación:

La herramienta de optimización propuesta en este trabajo, es una alternativa viable para la optimización de sistemas complejos de separación, tales como la sección de purificación de la planta de alquilación; ya que, es capaz de optimizar variables continuas y variables discretas obteniendo en todos los casos diseños que tengan una concentración menor de HF.

Los diseños obtenidos muestran una clara evidencia de hacer un rediseño de la sección de separación, ya que encuentra diseños que remueven el HF hasta una concentración de 3ppm (como lo establece la norma), reduce el riesgo de operación de plantas (índice de seguridad de planta), reduce las emisiones CO₂ a la atmósfera ya que los requerimientos energéticos se reducen considerablemente.

En conclusión, para disminuir la concentración de HF en la corriente de alquilado, es necesario modificar las condiciones de operación (RR, SIDE66 y FPL72). Por otro lado, si lo que importante es reducir la concentración de HF hasta lo permitido por la norma oficial, entonces, se requiere un rediseño de planta, donde la propuesta es presentar un diseño intensificado, donde las columnas DA-205 y DA-206 reduzcan su tamaño hasta

50% y se aumenten los parámetros de operación (excepto la presión). Por su parte la presión de operación en todos los casos es menor, lo que da evidencia de que el proceso será más seguro para los operarios. Además, existe una reducción significativa de los requerimientos energéticos, por lo que es un proceso más económico y por ende más limpio, ya que se reducen las emisiones de CO₂ a la atmósfera.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

S. I. Valdez, A. Hernandez and S. Botello, (2008), technical report: “A Boltzmann Based estimation of distribution algorithm”, No. I-08-10/25-04-2008. CIMAT.

Liebmann, K., Dhole, V. R., & Jobson, M. (1998). Integrated design of a conventional crude oil distillation tower using pinch analysis. *Chemical Engineering Research and Design*, 76(3), 335-347.

Babu, B. V., & Gaurav, C. (2000, December). Evolutionary computation strategy for optimization of an alkylation reaction. In *Proceedings of International Symposium and 53rd Annual Session of IChE (CHEMCON-2000)*.

Bagajewicz, M., & Savelski, M. (2001). On the use of linear models for the design of water utilization systems in process plants with a single contaminant. *Trans IChemE*, 79(Part A), 600-610.

Li, Q., Liu, Z., Xiao, Y., Zhao, P., Zhao, Y., Yang, T., & Yu, T. An intelligent optimization method for preliminary design of lead-bismuth reactor core based on Kriging surrogate model. *Frontiers in Energy Research*, 204.

Optimización de columnas de destilación de pared divisoria para la separación de mezclas cuaternarias

Montserrat Flores-Flores ^a, Fernando Israel Gómez-Castro ^{a,*}, Claudia Gutiérrez-Antonio ^b,
Araceli Guadalupe Romero-Izquierdo ^b, Massimiliano Errico ^c

^a Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n,
Guanajuato, Guanajuato, 36050, México. fgomez@ugto.mx

^b Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Av. Cerro de las
Campanas s/n, Col. Las Campanas, Querétaro, Querétaro, 76010, México

^c Department of Green Technology, Faculty of Engineering, University of Southern
Denmark, Campusvej 55, Odense, 5230, Dinamarca

RESUMEN

La destilación es uno de los procesos de separación más empleados en los procesos industriales, el cual permite la obtención de productos con alta pureza por medio de la aplicación de energía térmica. Desafortunadamente, la destilación es una operación unitaria con altos requerimientos energéticos y alto impacto ambiental, debido a su baja eficiencia termodinámica. Con el fin de mejorar el desempeño de los trenes de destilación se han propuesto esquemas intensificados, tales como la columna de pared divisoria para mezclas con más de tres componentes. Debido al gran número de posibles configuraciones de esquemas intensificados para la separación de mezclas de más de tres componentes se han desarrollado estrategias de síntesis para dichos sistemas, partiendo de trenes convencionales. No obstante, para algunas mezclas dichas metodologías no permiten satisfacer las especificaciones de pureza en algunas mezclas, debido a la eliminación de etapas. Así, se han generado nuevas metodologías de diseño de esquemas intensificados de destilación para la separación de una mezcla cuaternaria de hidrocarburos; específicamente mediante la generación de esquemas de doble pared divisoria en las últimas etapas del proceso de síntesis.

El esquema de doble pared divisoria permite mantener las recuperaciones y purezas obtenidas en los sistemas convencionales; sin embargo, este esquema presenta un aumento en los requerimientos energéticos. Lo anterior puede deberse a la alta complejidad del sistema, la cual dificulta el análisis de sensibilidad en una región amplia para los flujos de interconexión. Debido a esto se hace evidente la necesidad de aplicar una técnica de optimización rigurosa, que permita una exploración adecuada del espacio de búsqueda. Los métodos de optimización metaheurística cumplen con la característica de exploración, así como la explotación de las soluciones en la región del óptimo global. Así, en este trabajo se plantea el problema de optimización rigurosa, empleando un algoritmo genético multiobjetivo, del sistema de doble pared divisoria para la separación de una mezcla cuaternaria, teniendo como objetivo la minimización de la carga térmica y del número total de etapas. El algoritmo genético emplea redes neuronales artificiales

como modelo subrogado para obtener soluciones en un tiempo reducido. Por medio de la estrategia de optimización metaheurística se espera obtener mejores soluciones para el sistema de doble pared, reduciendo considerablemente la carga térmica en comparación con el diseño obtenido por análisis de sensibilidad.

Palabras clave: mezclas cuaternarias, pared divisoria, algoritmo genético.

INTRODUCCIÓN

La industrialización inclusiva y sostenible es uno de los Objetivos de Desarrollo Sostenible propuesto por la Organización de las Naciones Unidas (ONU). De acuerdo con la ONU (2022), se debe modernizar la infraestructura y reconvertir las industrias para que sean sostenibles, utilizando los recursos con mayor eficacia y promoviendo la adopción de tecnologías y procesos industriales limpios y ambientalmente racionales. En este contexto, la destilación es la operación unitaria de separación más utilizada a nivel mundial; se estima que cerca del 97% de las mezclas de fluidos se separan mediante esta tecnología. Sin embargo, la eficiencia termodinámica de la destilación es baja, alrededor del 10%, debido a los efectos de remezclado que se presentan en las columnas de destilación convencionales. Con la finalidad de reducir el consumo de energía de las columnas de destilación se han propuesto equipos intensificados; en la destilación intensificada se tienen columnas de destilación que se encuentran interconectadas mediante flujos de líquido y/o vapor, los cuales posibilitan prescindir de condensadores y/o rehervidores. En estos equipos, la localización de las corrientes de interconexión elimina el remezclado, por lo que se reduce entre el 30 y 50% del consumo de energía, con respecto a la destilación convencional.

La destilación intensificada ha sido ampliamente estudiada para la separación de mezclas ternarias, y en menor grado mezclas cuaternarias o de más componentes; esto último se debe a que el número de potenciales configuraciones se incrementa de manera significativa. Debido a ello se han propuesto diferentes métodos de diseño que se basan en movimiento de secciones con base en una secuencia convencional (Hernández y Jiménez, 1999), movimiento de secciones y eliminación de secciones (Rong y Errico, 2012), así como el uso de estrategias de optimización (Gutiérrez-Antonio y Briones- Ramírez, 2009). En particular, la separación de mezclas cuaternarias ha sido estudiada mediante columnas de destilación de pared divisoria (Sánchez-Ramírez y col., 2020) y doble pared divisoria (Flores-Flores y col., 2021). En el estudio de Sánchez-Ramírez y col. (2020) se analizan las columnas de destilación con pared divisoria considerando el consumo de energía, controlabilidad, índices de seguridad así como impacto ambiental. Los resultados de ese estudio indican que las columnas de pared divisoria con divisiones de líquidos poseen consumos de energía similares a los esquemas clásicos de pared divisoria, pero mejoran en términos de su seguridad inherente. Por otra parte, Flores- Flores y col. (2021) proponen un sistema de doble pared divisoria para la purificación de una mezcla cuaternaria de hidrocarburos; para ello, proponen una metodología de síntesis,

debido a que la metodología propuesta por Rong y Errico (2012) presenta limitantes para satisfacer las purezas requeridas en los componentes clave. Los resultados de ese estudio muestran que el sistema térmicamente equivalente con rectificadores laterales permite reducir los requerimientos energéticos con respecto al esquema convencional. Sin embargo, el sistema de columnas de doble pared divisoria alcanza las purezas deseadas, pero no se consigue ahorro energético. Por lo tanto, existe un área de oportunidad para mejorar el desempeño de los sistemas propuestos mediante una estrategia de optimización más rigurosa, que permita explorar con más detalle la región factible.

Por lo anteriormente expuesto, en el presente trabajo se propone el planteamiento del problema de optimización del esquema propuesto por Flores-Flores y col. (2021). Este problema de optimización será resuelto mediante un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones (Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2009). Adicionalmente, en dicha estrategia se usarán redes neuronales como modelo subrogado, con el objetivo de reducir el tiempo de cómputo (Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2015). Finalmente, la estrategia de optimización se encuentra acoplada al simulador de procesos Aspen Plus para la evaluación de las restricciones y las funciones objetivo (Briones-Ramírez y Gutiérrez-Antonio, 2018).

METODOLOGÍA

La purificación de una mezcla cuaternaria de hidrocarburos se ha tomado como caso de estudio. La mezcla consiste en n-butano (A), n-pentano (B), n-hexano (C) y n-heptano (D). Como base de cálculo, se asume un flujo de alimentación de 100 kmol/h. La composición de la corriente de alimentación se selecciona para permitir que los componentes más ligeros y más pesados tengan una mayor presencia en la mezcla. Por lo tanto, la composición molar del alimento es 40/10/10/40. Esta mezcla es purificada mediante una columna de doble pared divisoria, la cual fue propuesta por Flores-Flores y col. (2021); dicho esquema se presenta en la Figura 1.

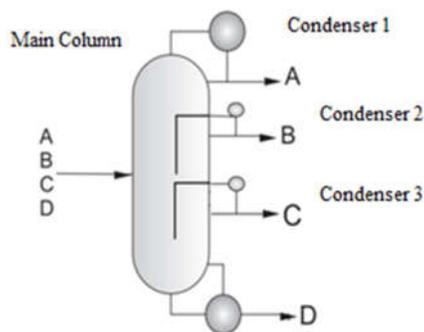
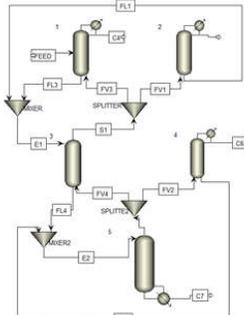


Figura 1. Columna de destilación de doble pared divisoria.

El diseño de la columna de destilación de doble pared divisoria se reporta en el trabajo de Flores-Flores, cuyos datos de diseño se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Diseño de la columna de destilación de doble pared divisoria.

Número total de etapas	Relación de reflujo	Flujo de interconexión (kmol/h)	Modelado en Aspen Plus
62	11.67 (COND1) 3.81 (COND2) 52.79 (COND3)	40 (FV1) 90 (FV2)	

El diseño de esta secuencia se obtiene considerando recuperaciones de 99% en los componentes clave. El diseño reportado se utilizará como solución inicial para la optimización, la cual se llevará a cabo mediante un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones, acoplado al simulador de procesos Aspen Plus, y acelerado mediante redes neuronales (Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2009; Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2015; Briones-Ramírez y Gutiérrez-Antonio, 2018). El algoritmo genera un conjunto de diseños óptimos que representan los mejores compromisos entre los objetivos seleccionados; se pueden considerar varios objetivos de forma simultánea, manipulando variables enteras y continuas, y el enlace con Aspen Plus permite utilizar el modelo completo de las columnas de destilación.

El algoritmo trabaja de la siguiente manera: la primera generación es creada a partir de un diseño inicial, y todos los individuos son enviados a Aspen Plus para simularlos y obtener información acerca de los objetivos y las restricciones; entonces, los individuos son ordenados en subpoblaciones, de acuerdo al número de restricciones satisfechas. Los mejores individuos son seleccionados para ser los nuevos padres de la segunda generación, y así sucesivamente. El proceso termina cuando el máximo número de generaciones ha sido alcanzado. La Figura 2 presenta el diagrama de flujo de la estrategia estocástica multiobjetivo que será empleada.

RESULTADOS

Con base en el caso de estudio seleccionado, así como el diseño reportado por Flores-Flores y col. (2021) se propone el siguiente problema de optimización.

Las funciones objetivo serán el número de etapas, así como el consumo de energía; estas funciones se seleccionan ya que el número de etapas se relaciona con los costos de capital, mientras que el consumo de energía se relaciona con los costos de operación.

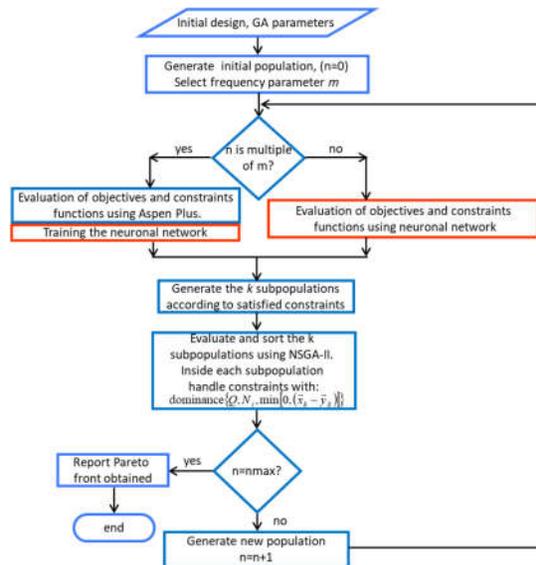


Figura 2. Diagrama de flujo de la estrategia de optimización estocástica multiobjetivo.

Ahora bien, las variables manipulables incluyen el número de etapas en las columnas 1, 2, 3, 4 y 5, de acuerdo al esquema de la Tabla 1. Es importante mencionar que los divisores de flujo no serán considerados como equipos a optimizar, dado que son una estrategia para el modelado del esquema de destilación; sin embargo, si se modificarán los flujos de interconexión que se distribuyen en ellos. De igual manera se considerarán las relaciones de reflujo en las columnas 1, 2 y 3, correspondientes a los condensadores totales en los que se extraen los componentes ligero (A), intermedio ligero (B), e intermedio pesado (C), respectivamente. Por otra parte, las restricciones consideran las recuperaciones que deben ser mínimo del 99% de acuerdo a la especificación de diseño, y por ende las purezas también deben mínimo del 99%. Ambos valores se consideran en por ciento masa. De allí que indirectamente, los flujos de los productos se encuentran indirectamente restringidos. Otra restricción radica en el número de etapas de las columnas 2 y 3, así como las columnas 4 y 5; esto obedece a la implementación de la doble pared divisoria, en la cual se asume igualdad de etapas en ambos lados de la pared.

Este problema de optimización se ha implementado en Matlab, y se encuentra en proceso de optimización. Se espera que derivado de una búsqueda más robusta en la región factible se puedan mejorar los consumos de energía de este esquema, respecto a los resultados reportados por Flores-Flores y col. (2021).

CONCLUSIONES

En este trabajo se propone la optimización de una columna de destilación de doble pared divisoria para la purificación de una mezcla cuaternaria de hidrocarburos. De allí que se propone el uso de un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones, que

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022.
Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio,
Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

emplea redes neuronales como modelo subrogado, y que se encuentra acoplado al simulador de procesos. El problema resultante es multiobjetivo, con restricciones continuas y enteras. Se espera que derivado de una búsqueda más robusta en la región factible se reduzca el consumo de energía de este esquema, y así poder contribuir a la consecución de los objetivos de desarrollo sostenible en materia de industria eficiente.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero proporcionado por CONACYT mediante la beca para la realización de los estudios post-doctorales de A.G. Romero-Izquierdo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Flores-Flores, M., Gómez-Castro, F.I., Romero-Izquierdo, A.G., Gutiérrez-Antonio, C., y Errico, M. (2021). Síntesis de secuencias de destilación de pared divisoria para la separación de mezclas cuaternarias. *Avances en Ingeniería Química (Memorias del XLII Encuentro Nacional de la AMIDIQ)*, 1(3), PRO1-PRO5.

Briones-Ramírez, A., y Gutiérrez-Antonio, C. (2018). Multiobjective optimization of chemical processes with complete models using Matlab and Aspen Plus. *Computación y Sistemas*, 22(4), 1157-1170.

Gutiérrez-Antonio, C., y Briones-Ramírez, A. (2009). Pareto front of Ideal Petlyuk sequences using a multiobjective genetic algorithm with constraints. *Computers and Chemical Engineering*, 33, 454.

Gutiérrez-Antonio, C., y Briones-Ramírez, A. (2015). Multiobjective stochastic optimization of dividing-wall distillation columns using a surrogate model based on neural networks. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 29(4), 491-504.

Hernández, S., y Jiménez, A. (1999). A. Design of Energy-Efficient Petlyuk Systems. *Computers and Chemical Engineering*, 23, 1005.

Rong, B.-G. y Errico, M. (2012). Synthesis of intensified simple column configurations for multicomponent distillations. *Chemical Engineering and Processing – Process Intensification*, 62, 1-17.

Sánchez-Ramírez, E., Ramírez-Márquez, C., Quiroz-Ramírez, J.J., Angelina-Martínez, A.Y., Cortazar, V.V. y Segovia-Hernández, J.G. (2020). Design of dividing wall columns involving sustainable indexed for a class of quaternary mixtures. *Chemical Engineering and Processing – Process Intensification*, 148, 107833.

ONU, 2022, Organización de las Naciones Unidas, Objetivos de Desarrollo Sostenible, Objetivo 7: garantiza el acceso a una energía asequible, segura, sostenible y moderna. Disponible en: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/energy/ml> (último acceso 21.04.2022).

OPTIMIZACIÓN BAJO INCERTIDUMBRE DE POLÍTICAS DE CONTROL POR ENFERMEDADES TRANSMITIDAS POR VECTORES

Angel Alfaro-Bernardfino*, Fabricio Napoles-Rivera

*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolas de Hidalgo, Avenida Francisco J. Mujica, SN, Edificio VI, Ciudad Universitaria, 58060 Morelia, Michoacán, México, así como correo electrónico del autor de contacto.
Correo*: 1423872x@umich.mx.*

RESUMEN

En la aplicación de cualquier modelo matemático determinista de transmisión de enfermedades por vectores existe diferentes factores que pueden afectar los resultados obtenidos. Debido a que las variables son inciertas en el futuro, por ello, la necesidad de que los modelos matemáticos de transmisión de enfermedades por vectores sean más exactos. Por ende, este trabajo se aplicará los efectos de la incertidumbre en las variables de un modelo matemático de transmisión de enfermedades por vectores por medio de escenarios inciertos, además se agregará parámetros de salud ocupacional con un enfoque socio-ambiental.

Palabras clave: optimización estocástica, CVaR, estrategias fumigación.

INTRODUCCIÓN

Todos los métodos de control de vectores tienen sus ventajas y desventajas y el número de ellos varía ampliamente. Sin embargo, la aplicación en cada país puede ser diferente, en el caso de países en desarrollo la práctica común es el uso de insecticidas en grandes áreas urbanas para disminuir la población de mosquitos; (Fabricio Napoles-Rivera y col., 2019). Sin embargo, la selección arbitraria del tipo de plaguicida, la dosificación y los lugares de aplicación, podrían reducir el impacto de las acciones tomadas y de esta manera aumentar el riesgo de infección en áreas vulnerables; Esto da la oportunidad de tomar acción en el problema de planificación y programación. Como es el caso de programación matemática para la selección óptima del tipo y la dosis de insecticida, en un lugar determinado para el control de las enfermedades transmitidas por mosquitos donde el modelo propuesto se basó en el modelo matemático de (Fabricio Napoles-Rivera, col, 2019).

METODOLOGÍA

Una población estimada de mosquitos en la ubicación específica de la localidad de Morelia, Michoacán. Se subdivide la localidad en CAGEB (Conjunto de Área Geoestadística Estatal Básica) (INEGI, 2017) se procederá a encontrar el tipo óptimo de insecticida, la dosificación, la selección de la programación del sitio para reducir la

probabilidad de infecciones al ser humano de las enfermedades transmitidas por mosquitos (ETM). Se tomará en cuentas la cantidad máxima recomendada por la organización mundial de la salud. (WHO. Pesticides and Their Application, 2006). Para evitar riesgo en la salud ocupacional de la localidad de Morelia. Teniendo esto en cuenta se planteará un modelo matemático aplicando incertidumbres múltiples escenarios afectando algunas variables como son el total de mosquitos y el total de mosquitos infectados en el primer periodo de tiempo. Definido en el modelo matemático los conjuntos: t es el tiempo en meses, c representa el tipo de insecticida, i es una ubicación determinada y s es el escenario de estudio. Este modelo es un problema de programación mixta entera no lineal (MINLP). En este modelo matemático se utilizará la metodología de solución de Pareto tomando un enfoque CVaR. Dando como resultados los escenarios más probables que sucedan en una gráfica de probabilidad acumulada, de estos escenarios se selecciona uno para el análisis de la planificación, dosificación y calendarización estratégica de fumigación, además, este escenario da una solución de equilibrio entre personas infectadas y costo total mínimo para este problema. A continuación, se muestran las ecuaciones de la estrategia CVaR en este problema (Luis Alberto Díaz-Trujillo y col., 2020):

$$\gamma_s^P = \frac{T_{P_s}^{infected} - T_{P_s}^{infected, LB}}{T_{P_s}^{infected, UB} - T_{P_s}^{infected, LB}} \quad (1)$$

$$\gamma_s^C = \frac{T_{C_s} - T_{C_s}^{LB}}{T_{C_s}^{UB} - T_{C_s}^{LB}} \quad (2)$$

$$\delta_s = |\gamma^{Cl,P} - \gamma_s^P| + |\gamma^{Cl,C} - \gamma_s^C| \quad (3)$$

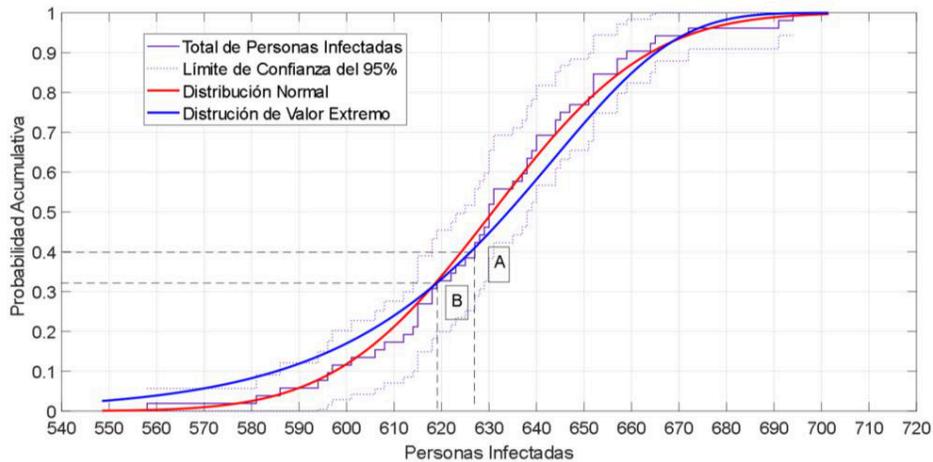
$$\min f = \frac{1}{N} \sum \delta_s \quad (4)$$

Donde, $T_{P_s}^{infected}$ y T_{C_s} son los valores del total de personas infectadas y costo total de cada escenario s . $T_{P_s}^{infected, UB}$ y $T_{C_s}^{UB}$ son los límites superiores, $T_{P_s}^{infected, LB}$ y $T_{C_s}^{LB}$ son los límites inferiores de las funciones objetivo normalizadas γ_s^P y γ_s^C y $\gamma^{Cl,P}$ y $\gamma^{Cl,C}$ son las variables de solución de condiciones de igualdad del total de personas infectadas y costo total, respectivamente. δ_s son los criterios de brecha. N es el número de funciones objetivas totales en el proceso de toma de decisión y f es la solución única.

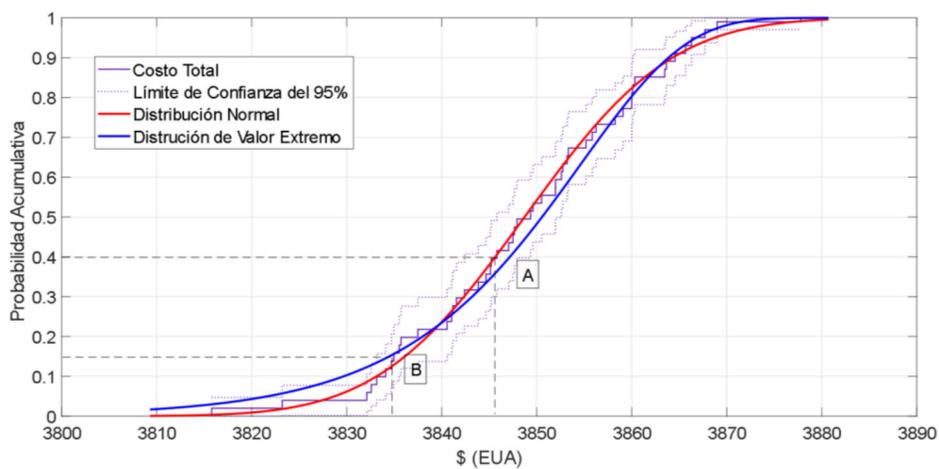
RESULTADOS

En la **FIGURA 1** se muestran las curvas de probabilidad acumulativa de las variables objetivo de personas infectadas $T_{P_s}^{infected}$ y el costo total T_{C_s} , obtenidas del modelo matemático de las enfermedades transmitidas por mosquitos. En la figura anterior se muestran también la comparación de los resultados obtenidos por el modelo matemático

de enfermedades transmitidas por mosquitos con una distribución normal y una distribución de valor extremo. Además de eso, se muestran los límites de confianza de los datos obtenidos por el modelo matemático con una confianza del 95%.



A. Probabilidad acumulativa de Total de personas infectadas $T_{P_s}^{infected}$ con una distribución normal



B. Probabilidad acumulativa del Costo total T_{C_s} con una distribución normal

FIGURA 1. Probabilidad acumulativa de las variables objetivo bajo el efecto de incertidumbre en modelo matemático de enfermedades transmitidas por mosquitos.

En la FIGURA 1A es la probabilidad acumulativa del total de personas infectadas $T_{P_s}^{infected}$, en esta se muestran dos puntos, el primero de ellos con la letra “A”, muestra que, para obtener un total de 627 personas infectadas, la probabilidad de obtener estas personas es de al menos el 60%. Como se menciona anteriormente se seleccionó un escenario que cumpliera con esta condición en ambas variables objetivo ($T_{P_s}^{infected}$ y T_{C_s}), por ello, el segundo punto en la gráfica con la letra “B”, es el escenario seleccionado para el análisis. En este, las personas infectadas son 619 con la probabilidad de al menos

obtener estas personas es el 67.27%. En **FIGURA 1B** es la probabilidad acumulativa del costo total T_{C_s} , para el punto con la letra “A” y “B”, muestra que, para obtener un costo total de 3845 y 3835.5 dólares (EUA), la probabilidad de obtener estos dólares (EUA) es de al menos el 60% y 84.93%, respectivamente.

Observado los datos y probabilidades del escenario seleccionado en la **FIGURA 1**, se procederá a dar las estrategias del tipo óptimo de insecticida, la dosificación, la selección de la programación del sitio para reducir la probabilidad de infecciones al ser humano de las enfermedades transmitidas por mosquitos.

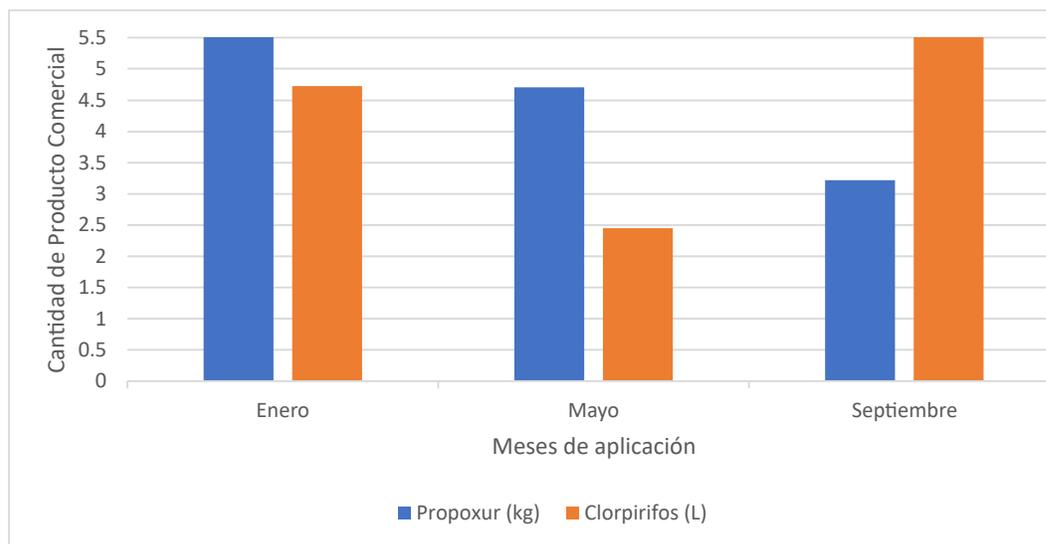


FIGURA 2. Cantidad de insecticida en su presentación comercial en la calendarización de su aplicación

En la **FIGURA 2** se muestra la cantidad de insecticida usado en los resultados desplegados por el software GAMS. (Brook, A. y col., 1988), como se puede observar la selección del insecticida óptimo fue para los insecticidas clorpirifos y propoxur, la aplicación de estos se realizarían en los meses de enero, mayo y septiembre, con una cantidad total anual de 18.85 L y 13.4 kg de producto comercial para clorpirifos y propoxur, respectivamente. Para la cantidad de insecticida de clorpirifos para los meses de enero, mayo y septiembre es 4.73, 2.45 y 11.68 L y para el insecticida propoxur es 5.71, 4.71 y 3.22 kg, respectivamente. Como se observa los insecticidas solo se aplican tres veces al año, esto debido a la restricción del efecto residual de los insecticidas, comentado anteriormente. La **FIGURA 3** muestra la cantidad de insecticida usado durante un año en cada CAGEB, se puede observar que la aplicación del insecticida de propoxur solo se aplica en las primeras diecisiete CAGEB's, mientras que el insecticida de clorpirifos se aplica en casi todas las CAGEB, excepto en la CAGEB número treinta. Las cantidades de los insecticidas tienden a un límite de un kilogramo y litro para propoxur y clorpirifos, respectivamente. sin embargo, en la CAGEB número 21 presenta una alta cantidad de insecticida, esto debido a la cantidad de personas que hay en esta

CAGEB, pues la cantidad de mosquitos totales depende de esta, y la cantidad de mosquitos infectados depende a su vez de los mosquitos totales.

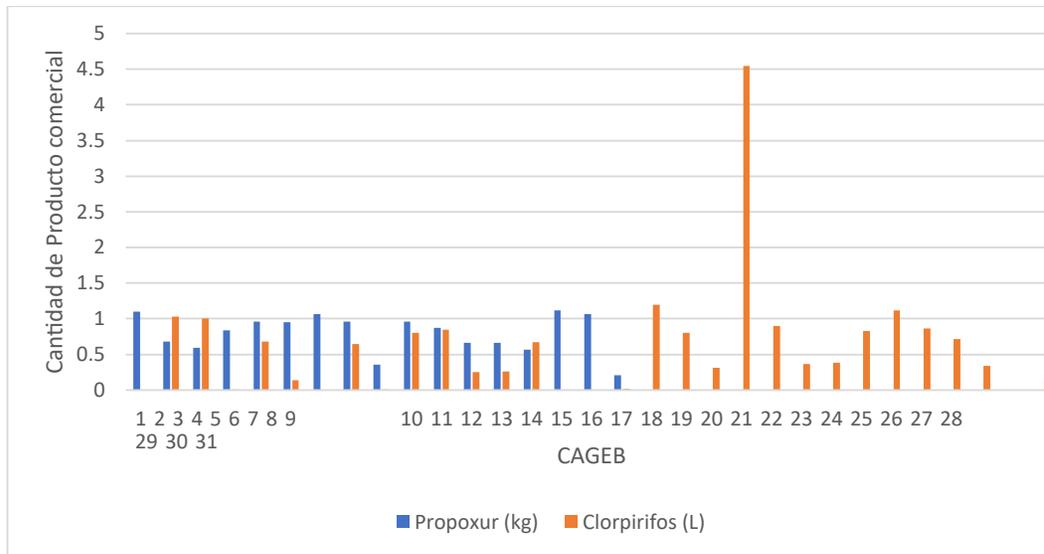


FIGURA 3. Cantidad de insecticida en su presentación comercial en la aplicación de las CAGEB's

Describe los resultados obtenidos. Se recomienda el uso de Figuras y Tablas para complementar la discusión de resultados. (Times New Roman 12 pt). Se muestra un ejemplo de formato.

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un modelo matemático estocástico con base en la mitigación de la población de mosquitos con una estrategia planificada de fumigación. El modelo propuesto se presentó como objetivo considerar la incertidumbre en la población de mosquitos existentes con base en una distribución normal, siendo esta un parámetro muy importante en el modelo matemático de enfermedades transmitidas por mosquitos, dando una mejor captura en el comportamiento de la migración de los mosquitos, las interacciones entre humano y mosquitos, las condiciones climáticas que afectan la población de mosquitos y la transmisión de enfermedades.

En cuanto a la selección del escenario estudiado entre el resto de los escenarios totales, da una alta probabilidad de que sucediera, debido a que, la cantidad de personas infectadas se encuentra entre un rango de 550 a 700 personas infectadas, sin embargo, la mayoría de los escenarios resueltos en el modelo matemático se encuentran entre un rango de 600 a 650 personas infectadas, mientras, que el escenario seleccionado arroja 619 personas infectadas, esto da que los datos presentados tengan una alta probabilidad de suceder. Finalmente, para el caso de la salud ocupacional es difícil sobre pasar los límites

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

recomendados, aunque la posibilidad está latente en un error humano, no se ha tenido datos si las bajas dosis a largo plazo puedan ser perjudiciales para el ser humano.

AGRADECIMIENTOS

Agradecer al consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT) por el apoyo económico en el transcurso de esta investigación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Fabricio Napoles-Rivera, Xate Geraldine Sanchez-Zarco, Lizeth Valencia-Barragan, and Jose María Ponce Ortega. 2019. MINLP Approach for Mosquito Borne Disease Control through Optimal Fumigation Policies, ACS Sustainable Chem. Eng. 2019.

INEGI. 2017. Statistical and Geographical Yearbook of Michoacan de Ocampo 2017.

Luis Alberto Díaz-Trujillo, Luis Fabián Fuentes-Cortés, Fabricio Nápoles-Rivera. 2020. Economic and environmental optimization for a biogas supply Chain: A CVaR approach applied to uncertainty of biomass and biogas demand. Computers and Chemical Engineering 141 (2020) 107018. doi: 10.1016/j.compchemeng.2020.107018.

WHO. 2006. Pesticides and Their Application: For the Control of Vectors and Pests of Public Health Importance, 6th ed.; World Health Organization (WHO): Geneva, Switzerland, 2006.

Optimización Multiobjetivo en el secado de cáscara de tuna roja (opuntia streptacantha) y extracción de biocompuestos

Julián Andrés Gómez-Salazar^a, María Elena Sosa-Morales^a, Juan Gabriel Segovia-Hernandez^{b*}, Eduardo Sánchez-Ramírez^b, Ramírez-Márquez C^b

^a*Universidad de Guanajuato, Campus Irapuato-Salamanca, División de Ciencias de la Vida, Departamento de Alimentos, Ex-Hacienda El Copal, Km. 9 Carr. Irapuato-Silao 36500 Irapuato, Guanajuato., México*

^b*Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050.*

**Email: gsegovia@ugto.mx*

RESUMEN

La cáscara de la tuna (*Opuntia streptacantha*) es una fuente potencial de biocompuestos, tales como flavonoides, antocianinas, betacianinas y betalainas. Para la obtención de sus biocompuestos se suelen utilizar comúnmente dos procesos consecutivos: secado y extracción. Sin embargo, estos procesos convencionales a menudo carecen de los principios de sostenibilidad y economía circular. Este trabajo demuestra el diseño y la optimización multiobjetivo para alcanzar procesos sostenibles. Lo anterior se basa en un algoritmo estocástico híbrido de un proceso de secado y la posterior extracción de los biocomponentes presentes en la cáscara de tuna roja, considerando la minimización multiobjetivo del costo del proceso y la reducción de emisiones de CO₂. El modelo se generó a partir de datos experimentales obtenidos en diferentes condiciones de secado (65, 75, 80 y 85 °C durante 6-9 h) y, posteriormente, se sometió a uno de dos métodos de extracción, extracción convencional o extracción asistida por microondas (MAE). Se consideró la extracción convencional usando dos solventes, agua y EtOH al 70% (50 min de tiempo de extracción), mientras que MAE se aplicó durante 5 o 10 min (usando agua como único solvente). Tanto el coste del proceso como la emisión de CO₂ aumentaron con la cantidad de compuesto extraído. La optimización multiobjetivo permitió obtener las mejores condiciones para la extracción de biocompuestos a partir de la cáscara de tuna roja de forma sostenible. Los resultados indican que la elección del parámetro de operación más adecuado para el proceso de secado es una temperatura de 72°C. Además, el proceso de extracción por el método MAE es la mejor opción

Palabras clave: Cáscara de tuna roja, Secado y extracción, Optimización, Procesos sostenibles.

INTRODUCCIÓN

El fruto de la tuna pertenece a la especie *Opuntia* y a la familia Cactaceae, crece generalmente en clima seco (Stintzing and Carle, 2005; Sumaya-Martínez et al., 2010). En la transformación de este fruto, el número de subproductos que se generan es alto, ya que la cáscara representa del 30 al 50% del fruto total, dependiendo de la variedad. En la

actualidad, el interés por el fruto de la tuna ha aumentado debido a los nutrientes y antioxidantes que puede aportar. La importancia nutritiva se debe al ácido ascórbico, la fibra, los aminoácidos, las composiciones fenólicas y la presencia de betalainas que se encuentran tanto en la pulpa como en la cáscara (Piga et al., 2003; Tesoriere et al., 2004). Las sustancias obtenidas de la cáscara pueden ser utilizadas en la industria alimentaria para ofrecer productos de valor añadido.

Existen diferentes etapas del proceso para obtener productos de valor agregado a partir de la cáscara de la fruta de tuna. En primer lugar, comúnmente es necesario realizar una etapa de secado, para luego realizar una extracción exitosa. Algunos métodos para secar los alimentos y sus subproductos, como la solar, la pulverización, la osmótica, el aire caliente y la liofilización. En el caso del secado por aire caliente, este se ve afectado por diferentes factores como la temperatura y la velocidad del aire (Wang et al., 2007). En cuanto al proceso de extracción de biocompuestos, existen diversos métodos de extracción, como el convencional y la aplicación de microondas. Este último se conoce como método de extracción asistido por microondas (MAE), que se basa principalmente en la generación de calor dentro del tejido celular y el posterior aumento de la presión interna, lo que provoca la ruptura celular y la liberación de biocompuestos (Khalili et al., 2018). MAE trae ventajas sobre la extracción convencional, principalmente reducción de tiempo. Existen diversos reportes para obtener compuestos bioactivos a partir de residuos con el uso de microondas, por ejemplo, a partir de cáscara de cacahuete (Ballard et al., 2010), cáscara de uva (Liazid et al., 2011) y cáscara de papa (Singh et al., 2011). En este contexto, para la obtención de los biocompuestos, comúnmente se emplean los procesos de secado y extracción, comenzando por el secado de la materia prima y la posterior extracción de los biocompuestos.

Es importante destacar que a menudo los procesos de secado y extracción convencional carecen de los principios de sostenibilidad y economía circular. Esto debido a que dichos procesos, principalmente el secado, están directamente relacionados con el consumo de energía eléctrica y este a su vez ligado a la emisión de gases de efecto invernadero, siendo estos índices de sostenibilidad. De esta forma, existe una asociación efectiva entre la cantidad de energía consumida en el proceso y la producción de CO₂ generada durante su producción. Este supuesto es válido dado que, en el caso particular de México, poco más del 45% de la producción eléctrica se encuentra en plantas termoeléctricas (National Center for Energy Control, CENACE, Mexico, 2020). Adicionalmente, el consumo de energía durante el secado genera una parte importante de los costos operativos durante el proceso (Erbay e Icier, 2009). Por otro lado, el proceso de extracción requiere el uso de solventes, lo que conlleva un costo asociado al proceso (Assefa and Keum, 2017). En este contexto, es importante describir y determinar las variables de diseño de los diferentes equipos a fin de operar en condiciones de mínimo consumo energético, además del impacto ambiental y los costos de operación, de acuerdo con los principios de sustentabilidad ambiental (Jiménez-González et al., 2012). Dichos cálculos se pueden realizar con optimización multiobjetivo. De hecho, los métodos de optimización estocástica están jugando un papel importante, ya que generalmente son herramientas numéricas robustas que presentan un esfuerzo computacional razonable en la

optimización de funciones con múltiples variables, requieren solo cálculos de la función objetivo y pueden usarse con todos los modelos sin problema de reformulación (Teh y Rangaiah, 2003).

Los principales objetivos de este trabajo fueron modelar y optimizar el proceso de secado y posterior extracción de biocomponentes de la cáscara de la tuna roja, evaluando índices de sostenibilidad y economía circular (impacto ambiental en términos de huella de CO₂, costo del proceso, revalorización de biorresiduos y la maximización del valor añadido).

METODOLOGÍA

Se utilizaron cáscaras de la tuna roja (*Opuntia streptacantha*), se secaron (65, 75, 80 y 85 ± 2 °C) entre 9 y 6 h, en un secador tipo túnel (diseñado y fabricado en la Universidad de Guanajuato) con una resistencia eléctrica de 2000 W, equipado con un ventilador de 170 W y un caudal de aire de 233 m³/h. Se determinó el contenido de humedad por el método 925.10 de la AOAC (AOAC, 1996).

Las muestras deshidratadas se pasaron al proceso de extracción. En el caso de la extracción asistida por microondas (MAE), los experimentos se realizaron en un sistema de extracción por microondas NEOS (Milestone, Italia) con una potencia de salida de 900 W (100% de la potencia) y una frecuencia de 2450 MHz. Para cada extracción se utilizó una relación 10:75 de cáscara seca:disolvente y una condición de baja potencia (20% de la potencia máxima del equipo, equivalente a 180 W), y agitación constante a 400 rpm durante 5 o 10 min y una temperatura de 60°C. Se evaluaron dos solventes: agua destilada y etanol al 70%. Respecto a la extracción convencional, se utilizaron los mismos solventes y la misma relación cáscara seca:disolvente que en MAE, se añadieron a un recipiente y se calentaron en una placa de calentamiento eléctrica con agitación a 400 rpm y temperatura (60°C).

Para determinar los compuestos fenólicos totales, la muestra se sumergió en 10 ml de metanol al 80%, se agitó en la oscuridad durante 1 hora y se centrifugó. El extracto se hizo reaccionar con una solución de reactivo de Folin-Ciocalteu (10%). Los resultados se informaron como mg de equivalentes de ácido gálico por gramo de peso seco (mg GAE/gd.s) (Slinkard y Singleton, 1977). Respecto a la determinación de flavonoides totales, la muestra se mezcló con 10 ml de metanol al 80% y se sometieron a extracción en ebullición durante 1 h. El extracto se centrifugó y se hizo reaccionar con una solución de cloruro de aluminio, acetato de potasio, metanol y de agua destilada. El contenido de flavonoides se determinó mediante un método espectrofotométrico, midiendo la absorbancia a 415 nm. Se realizó una curva de calibración de rutina y los resultados se informaron como mg de equivalentes de rutina (RE)/gm.s. La determinación de antocianinas totales se realizó mediante el método de pH diferencial (Pasko et al., 1999), utilizando una mezcla de acetona y borato de sodio 0,1 M a pH 1,0 y 4,5. Se midió la absorbancia a 515 y 700 nm, respectivamente. El contenido total de antocianinas (X) se estimó utilizando el coeficiente de extinción molar de la cianidina 3-glc(glucósido) (29.600 l/mol cm) y el peso molecular (MW). Los resultados se informaron como mg equivalentes de cianidina 3-glc/gm.s. Las betalainas totales se cuantificaron como betacianinas (betaninas) y betaxantinas (vulgaxantina-1) usando el método espectrofotométrico descrito por Nilsson (1970) a longitudes de onda de 537, 476 y 600 nm.

Respecto a la modelización del tiempo de secado, se aproxima el comportamiento a dos periodos de secado, período antecrítico y período poscrítico, descritos en las siguientes ecuaciones:

$$\theta_{\alpha} = \frac{S}{A} \left[\frac{(X_i - X_c)}{W_c} \right] \quad (\text{ecu. 1})$$

$$\theta_p = \frac{S}{A} * \frac{(X_c - X^*)}{W_c} \ln \frac{(X_c - X^*)}{(X_f - X^*)} \quad (\text{ecu. 2})$$

Donde θ_{α} y θ_p son el tiempo de secado antecrítico y poscrítico, respectivamente, W_c velocidad crítica de secado, X_i humedad inicial, X_c humedad crítica, X_f humedad final y X^* humedad en equilibrio, respectivamente.

En general, el costo total anual del proceso (TAC) se puede representar como la suma del costo de capital y los costos de servicio. Para este estudio, se consideró un período de recuperación de 10 años.

$$TAC = \frac{\text{Costos de Capital}}{\text{Período de recuperación}} + \text{Costos de operación} \quad (\text{ecu. 3})$$

Asimismo, se consideró al metano como combustible, y el cálculo de las emisiones de efecto invernadero se calculó con el siguiente modelo propuesto por Gadalla et al. (2005).

$$[CO_2]_{emisiones} = \left(\frac{Q_{combustible}}{NHV} \right) (CC)\alpha \quad (\text{ecu. 4})$$

donde $Q_{combustible}$ (kW) es la energía del combustible quemado, $\alpha = 3,67$ es la relación de masas molares de CO_2 y C, NHV (kJ/kg) es el valor neto calorífico del combustible con contenido de carbono y $[CO_2]_{emisiones}$ en kg/s (Gadalla et al., 2005).

Considerando las variables que entran en juego en el modelo del proceso, se consideró la siguiente función objetivo:

$$\min(TAC, CO_2, mg) = f(\theta_t, A, S, W_c, T_s, V_s, D_{cn}) \quad (\text{ecu. 5})$$

donde TAC es el costo total anual, CO_2 es la emisión de gases de efecto invernadero, mg es la cantidad de miligramos obtenidos de los compuestos de interés, θ_t es el tiempo total de secado, S es la masa del sólido seco, A es el área de secado y W_c es la velocidad crítica de secado.

Una vez modelado todo el proceso, se procedió a la optimización tratando de minimizar el coste total anual y las emisiones de gases de efecto invernadero. La Tabla 1 muestra las variables para el proceso de optimización.

Tabla 1. Variables para el proceso de optimización

Tipo de variable		Rango	Unidades
Tiempo de secado	Continuo	50-85	min
Velocidad de aire	Continuo	1-4	m/s
Área de secador	Continuo	0.2-0.4	m ²
Temperatura de Secado	Continuo	50-80	°C

Para optimizar el caso de estudio, se empleó un algoritmo de optimización estocástica híbrida, evolución diferencial con lista de tabúes (DETL). Emplea los pasos clásicos de evolución diferencial, sin embargo; su acción de búsqueda se mejora a través del concepto de Tabu List (TL) (Bonilla-Petriciolet et al., 2010; Sharma and Rangaiah, 2013; Contreras-Zarazúa et al., 2017). La aplicación del método se realizó mediante una plataforma híbrida, que implica la interacción entre Microsoft Excel, Aspen Plus y Visual Basic. Para la optimización, se utilizaron los parámetros en el método DETL que se muestran en la tabla 2.

Tabla 2. Variables para el proceso de optimización

Tipo de variable		Rango	Unidades
Tiempo de secado	Continuo	50-85	min
Velocidad de aire	Continuo	1-4	m/s
Área de secador	Continuo	0.2-0.4	m ²
Temperatura de Secado	Continuo	50-80	°C

RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del secado de cáscara de tuna, extracción de biocompuestos, y la optimización. En la tabla 3 se muestran los resultados de los biocompuestos obtenidos en las cáscaras deshidratadas a diferentes temperaturas.

Tabla 3. Contenido de biocompuestos en cáscara de tuna roja deshidratada

Compuestos Bioactivos	Temperaturas de secado				
	Fresca	65°C	75°C	80°C	85°C
Fenoles totales (mg GAE/g m.s)	27,73 ± 0,71	17,86 ± 0,48	19,82 ± 0,51	21,53 ± 0,24	18,04 ± 0,82
Flavonoides Totales (mg RE/g m.s)	10,19 ± 0,91	17,85 ± 0,41	18,86 ± 1,14	13,04 ± 0,34	13,53 ± 0,96
Antocianinas (mg cianidina 3-glc E/g m.s)	22,86 ± 1,93	2,31 ± 0,32	6,33 ± 1,11	4,49 ± 0,25	3,49 ± 0,31
Betacianinas (mg betaninas y vulgaxantina-1 E/g m.s)	0,52 ± 0,00	0,49 ± 0,00	0,61 ± 0,00	0,45 ± 0,00	0,71 ± 0,00
Betaxantinas (mg betaninas y vulgaxantina-1 E/g m.s)	0,13 ± 0,01	0,50 ± 0,00	0,38 ± 0,00	0,06 ± 0,00	0,12 ± 0,00

El contenido de fenoles totales en cáscara fresca (27,73 mg GAE/g) se redujo en el proceso de secado. Otros autores reportaron resultados similares en la disminución de compuestos fenólicos totales por secado, Nóbrega et al. (2015) para residuos de acerola, con una reducción de casi el 80% de compuestos fenólicos, y Vega-Gálvez et al. (2012) para rodajas de manzana. La disminución de la concentración de compuestos fenólicos totales se debe a su naturaleza termosensible. Respecto al contenido de flavonoides, los valores fueron más altos en las cáscaras deshidratadas que en las cáscaras fresca. A 65°C

y 75°C se presentaron los valores mayores con concentraciones de 17,71 y 17,82 mgRE/g, respectivamente. El aumento del contenido de flavonoides debido al secado fue similar al informado por Ching-Hui et al. (2006) para tomates y Mrkic et al. (2006) para brócoli, relacionado con un efecto de concentración por remoción de humedad. Por otro lado, el contenido de antocianinas en las cáscaras deshidratadas fue inferior al de las cáscaras frescas. Las antocianinas son pigmentos sensibles, fácilmente afectados por múltiples factores, como la temperatura, los cambios de pH y el oxígeno (De Rosso and Mercadante, 2007). Finalmente, las concentraciones de betacianinas (betaninas) y betaxantinas (vulgaxanthins-1) son afectadas por la temperatura de secado. De las betacianinas, las cáscaras deshidratadas a 85°C mostraron la mayor cantidad de betacianinas (0,71 mg equivalentes de betaninas/g). Para las betaxantinas (vulgaxantinas-1), la cáscara después del secado a 65°C mostraron la mayor concentración de estos biocompuestos (0,50 mg eqvulgaxantinas/g). Gokhale y Lele (2012) estudiaron dos temperaturas de secado, 80 y 100°C, y determinaron el contenido de betalaínas (betacianinas y betaxantinas) en la remolacha. Los autores observaron que al aplicar una temperatura de 100°C se producía una reducción de concentraciones de betacianinas. En este estudio, los valores más altos de betalaínas y flavonoides, en el caso de la cáscara de tuna deshidratada en comparación con la cáscara fresca, pueden atribuirse a que las cáscaras deshidratadas podrían presentar una formación de derivados de betanina e indicaxantina (Nistor et al., 2017), pigmentos que se encuentran en el género *Opuntia* (Tesoriere, 2004), lo que podría aumentar los valores del contenido de pigmentos.

Por otro lado, en la tabla 4 se muestran los resultados obtenidos de la extracción de biocompuestos.

Tabla 4. Contenido de biocompuestos en extractos de tuna roja deshidratada obtenidos por extracción asistida por microondas (MAE) o convencional

Método de Extracción	Solvente / tiempo de extracción	Fenoles totales (mg GAE/g extracto)	Flavonoides Totales (mg RE/g extracto)	Betacianinas (mg betaninas equivalentes/g extract)	Betaxantinas (mg eq vulgaxantina-1/g extract)
MAE	Agua/ 10min	48.59 ± 1.31	7.28 ± 0.20	25.21 ± 2.85	17.76 ± 1.88
	Etanol/10min	44.94 ± 0.54	10.42 ± 0.27	17.13 ± 1.39	16.6 ± 1.19
	Agua/ 5min	48.93 ± 1.09	10.48 ± 0.46	18.33 ± 0.68	9.76 ± 0.34
	Etanol/ 5min	45.79 ± 1.28	11.45 ± 1.87	17.57 ± 2.06	9.69 ± 1.14
	Agua/ 50min	47.85 ± 1.32	7.84 ± 0.41	21.46 ± 1.07	10.37 ± 0.39
Convencional	Etanol/ 50min	47.57 ± 0.88	12.28 ± 0.46	28.53 ± 1.27	16.4 ± 1.17

El contenido de fenoles totales en los extractos fue mayor al aplicar MAE y agua como solvente ($p < 0.05$). Melgar et al. (2017) observaron valores similares en el contenido de fenoles totales en extractos de tres variedades de cáscara de tuna liofilizada: *Opuntia ficus-indica*, *Saguigna* y *Guialla*, y *Opuntia engelmannii*. Respecto al contenido de flavonoides totales en los extractos, se obtuvo una mayor concentración de estos con la extracción convencional que con MAE, cuando se utilizó etanol como disolvente. Ammar et al. (2015), obtuvieron valores similares de flavonoides totales (9,7 mg RE/ g de extracto de flores de *Opuntia*), utilizando un método convencional y agua como disolvente. En cuanto al contenido de betacianinas y betaxantinas, en general, los valores de betacianinas

fueron superiores a las betaxantinas en ambos métodos, debido a que las betaninas son los pigmentos naturales en mayor cantidad en la variedad *O. streptacantha* (rojo-violeta). Mayores valores para las betacianinas se presentaron con el método convencional (etanol, 50 min), mientras que para las betaxaninas fue en MAE (agua, 10 min). Por otro lado, respecto a la optimización, los valores más bajos de emisiones de CO₂ se obtienen junto con los valores más bajos de TAC, como se muestra en la figura 1.

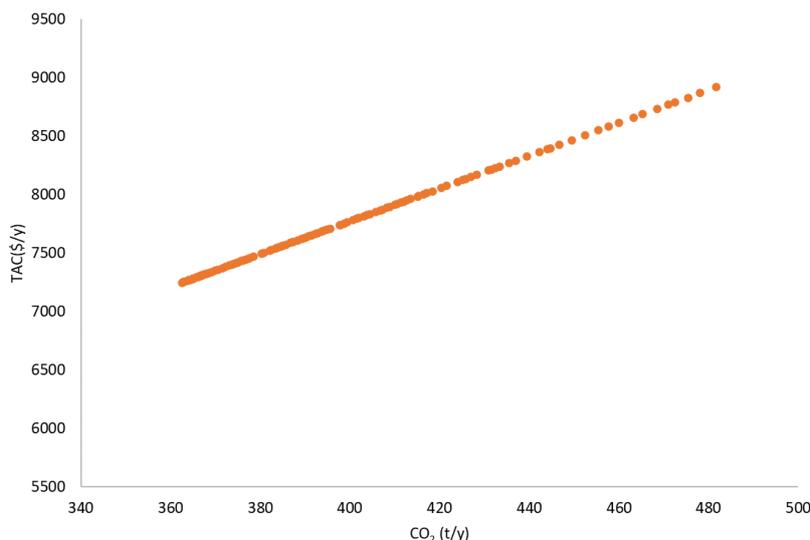


Figura 1. Frente de Pareto obtenido por la optimización multiobjetivo considerando los indicadores de TAC y emisiones de CO₂.

El comportamiento de los datos en la Figura 1 es comprensible si se considera que el valor del costo total anual está muy influenciado por los costos de los servicios, particularmente por el consumo de electricidad. No obstante, cuando se evalúan las emisiones de TAC y CO₂ (Fig. 2) frente a la cantidad de compuestos bioactivos extraídos, el escenario cambia por completo.

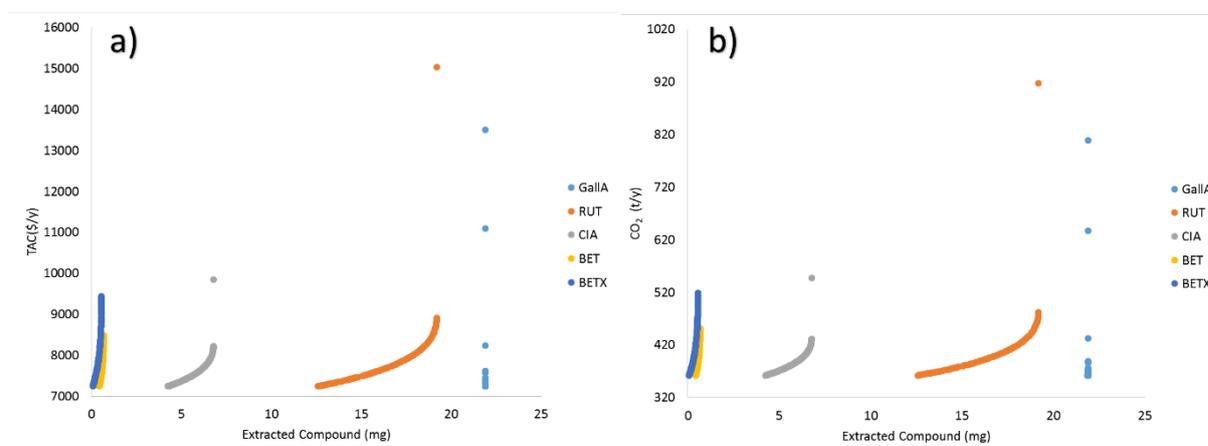


Figura 2. Frentes de Pareto que evalúan (a) TAC y (b) CO₂ frente al componente extraído. GallA: ácido galico, RUT: rutina, CIA: cianidina, BET: betalainas, BETX: betaxantinas).

Es posible extraer un amplio rango de miligramos de compuestos bioactivos, sin embargo, el comportamiento general muestra un aumento de TAC cuando aumenta la cantidad de compuesto extraído. Además, en un determinado punto de la gráfica de Pareto, el TAC cambia exponencialmente, y es evidente que, desde un punto de vista económico y ambiental, no es recomendable operar a partir de dicho punto. Por ejemplo, en el caso particular de la cianidina, este cambio exponencial se observa a 6,7 mg, y para rutina, el cambio exponencial se observa en 18,8 mg.

Finalmente, la temperatura del proceso de secado y extracción tiene un impacto en la TAC y en los miligramos de componente extraído. En la Figura 3 se muestra el efecto de la temperatura sobre el contenido de compuestos extraídos. En los casos de cianidina y rutina, se observan los valores optimo de extracción (6.7 y 18.8 miligramos) a 74°C y 72°C. En el caso particular del ácido gálico, las betalainas y las betaxantinas, no existe una variación notable entre la temperatura y la cantidad de compuesto obtenido, pero se observa que, a partir de los 72°C, ambos compuestos comienzan a coexistir.

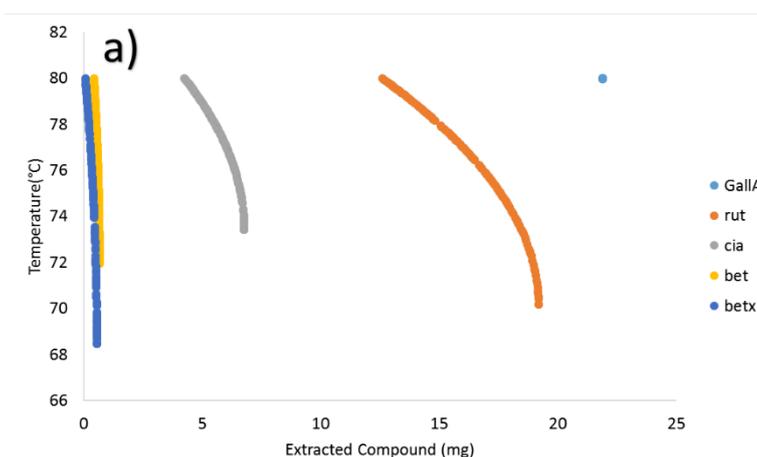


Figura 3. Frentes de Pareto que evalúan la temperatura frente al componente extraído. GallA: ácido gálico, RUT: rutina, CIA: cianidina, BET: betalainas, BETX: betaxantinas).

CONCLUSIONES

Las temperaturas entre 65°C y 75°C de secado fueron las más adecuadas para obtener los mayores valores de flavonoides totales, betaxantinas y antocianinas en la cáscara seca. El tiempo de extracción para MAE fue menor que el de la extracción convencional. Además, cuando se usó agua como solvente, MAE resultó en un mejor método de extracción para extraer compuestos fenólicos, flavonoides y betacianinas de la cáscara de tuna. El TAC y las emisiones de CO₂ cambian exponencialmente después de extraer un máximo de compuestos bioactivos, por lo tanto, desde un punto de vista económico y ambiental, no es recomendable operar a partir de dicho cambio. La temperatura de secado de 72°C es la óptima para maximizar la extracción de compuestos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ammar, I. Ennouri, M., Atia, H., 2015. Phenolic content and antioxidant activity of cactus (*Opuntia ficus-indica* L.) flower are modified according to the extraction method. *Industrial Crops and Products*, 54, 97-104. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2014.11.030>
- AOAC. (1996). *Official Methods of Analysis of AOAC International* (16th ed., Vol. II). Gaythersburg.
- Assefa, A.D., Keum, Y.S., 2017. Effect of extraction solvent and various drying methods on polyphenol content and antioxidant activities of yuzu (*Citrus junos* Sieb ex Tanaka). *Food Measure* 11, 576–585. <https://doi.org/10.1007/s11694-016-9425-x>
- Ballard, T., Mallikarjunan, P., Zhou, K., O'Keefe, S., 2010. Microwave-assisted extraction of phenolic antioxidant compounds from peanut skins. *Food Chemistry*. 120, 1185-1192. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2009.11.063>
- Bonilla-Petriciolet, A., Rangaiah, G. P., Segovia-Hernández, J. G., 2010. Evaluation of stochastic global optimization methods for modeling vapor–liquid equilibrium data. *Fluid Phase Equilibria*, 287(2), 111-125. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2009.09.021>
- Ching-Hui, C., Hsing-Yu, L., Chin-Yue, C., Yung-Chuan, L., 2006. Comparisons on the antioxidant properties of fresh, and hot-air-dried tomatoes. *Journal of Food Engineering* 77, 478-485. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2005.06.061>
- Contreras-Zarazúa, G., Vázquez-Castillo, J. A., Ramírez-Márquez, C., Segovia-Hernández, J. G., Alcántara-Ávila, J. R., 2017. Multi-objective optimization involving cost and control properties in reactive distillation processes to produce diphenyl carbonate. *Computers & Chemical Engineering*, 105, 185-196. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.11.022>
- De Rosso, V.V., Mercadante, A. A., 2007. The high ascorbic acid content is the main cause of the low stability of anthocyanin extracts from acerola. *Food Chemistry*, 103(3), 935–943. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2006.09.047>
- Erbay, Z., Icier, F., 2009. Optimization of hot air drying of olive leaves using response surface methodology. *Journal of Food Engineering*, 91, 533–541. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.10.004>
- Gadalla, M. A., Olujic, Z., Jansens, P. J., Jobson, M., Smith, R., 2005. Reducing CO₂ emissions and energy consumption of heat-integrated distillation systems. *Environmental science & technology*, 39(17), 6860-6870. <https://doi.org/10.1021/es049795q>
- Gokhale, S., Lele, S., 2012. Betalain content and antioxidant activity of beta vulgaris: effect of hot air convective drying and storage. *Journal of Food Processing and Preservation*. 38, 585-590. <https://doi.org/10.1111/jfpp.12006>
- Jiménez-Gonzalez, C., Constable, D. J. C., 2012. *Green Chemistry and Engineering: A Practical Design Approach*, Wiley, First Edition, Berlín.
- Khalili, G., Mazloomifar, A., Larijani, K., Tehrani, M.S., Azar, P. A., 2018. Solvent-free microwave extraction of essential oils from *Thymus vulgaris* L. and *Melissa officinalis* L. *Industrial Crops & Products*, 119, 214-217. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2018.04.021>

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

Liazid, A., Guerrero, R., Cantos, E., Palma, M., Barroso, C., 2011. Microwave assisted extraction of anthocyanins from grape skins. *Food Chemistry*, 124, 1238-1243. [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(03\)00184-5](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(03)00184-5)

Melgar, B., Días, M. I., Ciric, A., Sokovic, M., García-Castello, E. M., Rodríguez-López, A. D., Barros, L., Ferreira, I., 2017. By-product recovery of *Opuntia* spp. Peels: Betalainic and phenolic profiles and bioactive properties. *Industrial Crops & Products*, 107, 353-359. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2017.06.011>

Mrkic, V., Cocci, E., Rosa, M., Sacchetti, G., 2006. Effect of drying conditions on bioactive compounds and antioxidant activity of broccoli (*Brassica oleracea* L.). *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 86, 1559-1556.

National Center for Energy Control, CENACE, Mexico, 2020, [https://www.cenace.gob.mx/Docs/02_MBP/InformeTGR/2020/Informe%20TGR%20en%202020%20Preliminar%20\(v2020-11-23\).pdf](https://www.cenace.gob.mx/Docs/02_MBP/InformeTGR/2020/Informe%20TGR%20en%202020%20Preliminar%20(v2020-11-23).pdf)

Nilsson, T., 1970. Studies into the pigments in beetroot (*Beta vulgaris* L. ssp. *vulgaris* var. *rubra* L.). *Lantbrukshogskolans Annaler*, 36, 179-219.

Nistor, O.V., Seremet, L., Andronoiu, D.G., Rudi, L., Botez, E. 2017. Influence of different drying methods on the physicochemical properties of red beetroot (*Beta vulgaris* L. var. *Cylindra*). *Food Chemistry*, 236, pp. 59-67. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.04.129>

Nóbrega, E., Oliveira, E., Genovese, M., Correia, R., 2015. The impact of hot air drying on the physical-chemical characteristics, bioactive compound and antioxidant activity of acerola (*Malphigia emarginata*) residue. *Journal of Food Processing and Preservation*, 39, 313-141. <https://doi.org/10.1111/jfpp.12213>

Pasko, C., Innocent, G., Kunvari, M., Laszlo, M., Szilagyi, L., 1999. Lignan production by *Ipomea cairica* callus culture. *Phytochemistry*, 52, 879-883. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(99\)00304-0](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(99)00304-0)

Piga, A., Del Caro, A., Pinna, I., Agabbio, M., 2003. Changes in ascorbic acid, polyphenol content and antioxidant activity in minimally processed cactus pear fruits. *Journal of Food Science and Technology*, 36, 257-262. [https://doi.org/10.1016/S0023-6438\(02\)00227-X](https://doi.org/10.1016/S0023-6438(02)00227-X)

Sharma, S., Rangaiah, G. P., 2013. Multi-objective optimization of a bio-diesel production process. *Fuel*, 103, 269-277. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.05.035>

Singh, A., Sabally, K., Kubow, S., Donnelly, D., Garipey, Y., Orsat, V., Raghavan, G. S. V., 2011. Microwave-assisted extraction of phenolic antioxidants from potato peels. *Molecules*, 16, 2218- 2232, <https://doi.org/10.3390/molecules16032218>

Slinkard, K., Singleton, V., 1977. Total phenol analyses: automation and comparison with manual methods. *American Journal of Enology and Viticulture*, 28: 49-55.

Stintzing, F.C., Carle, R., 2005. Cactus stems (*Opuntia* spp.): a review on their chemistry, technology, and uses. *Molecular Nutrition & Food Research*, 49, 175–194, <https://doi.org/10.1002/mnfr.200400071>

Sumaya- Martínez, M., Suárez, T., Cruz, N., Alanís, E., Sampedro, J. 2010. Innovación de productos de alto valor agregado a partir de la tuna mexicana. *Revista Mexicana de Agronegocios*, 27, 435-441.

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

Tesoriere, L., Alleagra, M., Butera, D., Livera, M. A., 2004. Absorption, excretion, and distribution of dietary antioxidant in LDLs: potential health effects of betalains in humans. *American Journal of Clinical Nutrition*, 80, 941–945. <https://doi.org/10.1093/ajcn/80.4.941>

Vega-Gálvez, A., Ah-Hen, K., Chacana, M., Vergara, J., Martínez-Monzo, J., García-Segovia, P., Lemus-Moncada, R., Scala, K., 2012. Effect of temperature and air velocity on drying kinetics, antioxidant capacity, total phenolic, color, texture and microstructure of apple (var. Granny Smith) slices. *Food Chemistry*. 132, 51-59. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.10.029>

Wang, Z., Sun, J., Liao, X., Chen, F., Zhao, G., Wu, J., Hu, X., 2007. Mathematical modeling on hot air drying of thin layer apple pomace, *Food Research International*, 40, 39–46. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2006.07.017>

Diseño y optimización de un esquema intensificado para la purificación de grasas animales

Josué Julián Herrera-Velázquez^{a,*}, Julián Cabrera-Ruiz^a, Salvador Hernández-Castro^a

^a *Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. jj.herreravelazquez@ugto.mx*

RESUMEN

En el estado de Guanajuato los principales sectores productivos son el agroindustrial, autopartes-automotriz, productos químicos, cuero-calzado y confección-textil-moda, servicios de investigación, turismo, etc. Enfocados en la producción ganadera, así como la del cuero-calzado, la curtiduría es una actividad económica secundaria que representa el 68% de la producción nacional. Sin embargo, aunque es una industria muy importante en el estado representa también una gran área de oportunidad por la gran cantidad de elementos de desecho generados y que no solo representan un impacto ecológico si no el desperdicio de potencial materia prima (Carrillo et al., 2017). Existe un amplio espectro de aplicaciones para estos ácidos grasos, pero que no han sido aprovechadas usualmente por la gran cantidad de compuestos secundarios presentes en esta materia prima en particular. Utilizando datos obtenidos mediante caracterización experimental de un proceso de separación de grasas de desperdicios cárnicos se evaluará la opción más económica y que mayor recuperación de ácidos grasos nos permita obtener mediante una optimización estocástica multiobjetivo (Usando el algoritmo NSGA-II) aplicada a un proceso de destilación convencional en una interfaz de Python-Aspen Plus. Se determinó que dependiendo de la composición del flujo de alimentación de los ácidos grasos de desperdicio dependerá la selección de un proceso intensificado de purificación. Basándonos en el resultado óptimo obtenido, se propone el diseño de una secuencia de destilación térmicamente acoplada a rectificador lateral (TCDS-SR).

Palabras clave: Industria sostenible, destilación, optimización estocástica, PYMOO, Python-Aspen Plus.

INTRODUCCIÓN

A nivel experimental se ha estado desarrollando una técnica para la separación de ácidos grasos de los desperdicios cárnicos de la industria del curtido. Este estudio en particular se centra en la purificación de los ácidos grasos, etapa que sucede posterior a procesos específicos de lavado y preparación. Luego de caracterizar una muestra previa al proceso de purificado de 145 g, se obtuvo la composición presentada en la Tabla 1, con estos datos se propone el caso base del estudio. Los ácidos grasos llegan al proceso con una mezcla de agua-butanol, que está presente en una proporción 2:1. Se calienta a una temperatura de 64 °C que asegura que todos los ácidos grasos se encuentren en estado líquido en un intercambiador de calor para alimentarse a la secuencia de destilación.

Tabla 1. Composiciones en masa para una muestra de 145 g de ácidos grasos previa a la etapa de purificación. Alimentación del caso base. (Mezcla Butanol-Agua de 0.75-0.25).

Ácido graso	Porcentaje masa
Ácido mirístico	2%
Ácido palmítico	10%
Ácido palmitoleico	1%
Ácido linoleico	1%
Ácido linolénico	21%
Butanol	53%
Agua	12%

Se propone una secuencia de destilación convencional con destilación por domos presentada en la Figura 1. En la columna MAINC se recupera la mezcla butanol-agua en su totalidad y no es de interés separar dicha mezcla, ya que se necesita en etapas previas. En la columna C1 se recupera el ácido mirístico al 99.5% mol por el domo por conveniencia de producto por sus potenciales aplicaciones. El resto de los ácidos grasos se destilan por el fondo de dicha columna. Esta mezcla de ácidos grasos es potencial para un posterior proceso de transformación para la producción de biocombustibles.

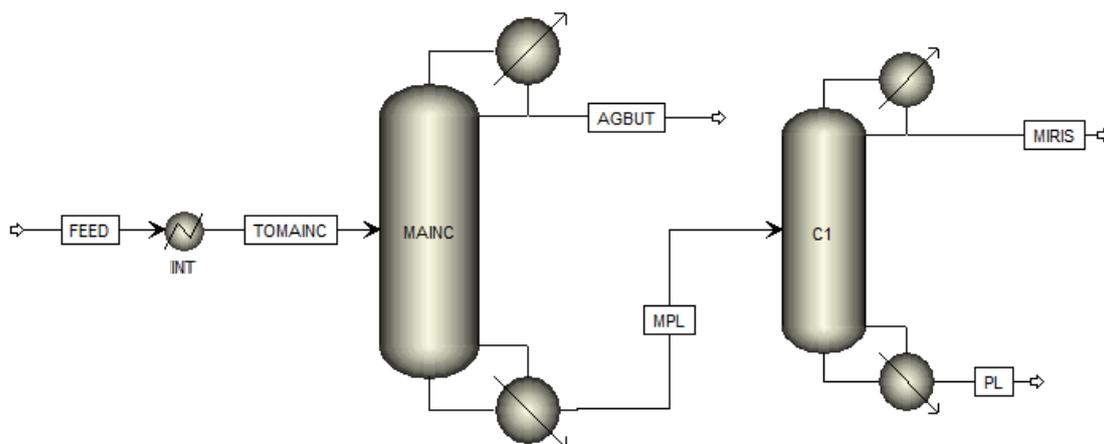


Figura 1. Secuencia convencional de destilación, utilizando el módulo RADFRAC en el software Aspen Plus v11.

Debido a que la procedencia de la alimentación es un desecho cárnico de la industria de la curtiduría, no se puede asegurar una composición fija de alimentación en todo momento, por lo cual, se propone una optimización de los flujos de alimentación para determinar la composición óptima que nos del diseño más barato y con mayor recuperación de ácidos grasos. Posteriormente, se elige el proceso de destilación intensificado más adecuado para dichas composiciones. El objetivo de este trabajo es determinar la composición y diseño que nos permita tener el proceso de separación que sea económicamente rentable y con mayor recuperación de productos de alto valor agregado para posteriores procesos de transformación a partir de una alimentación proveniente de desechos cárnicos.

METODOLOGÍA

El proceso descrito en la Figura 1 se diseña utilizando el software Aspen Plus v11, con el modelo termodinámico NRTL. El diseño del caso base se realiza con el módulo de métodos cortos DSTWU para determinar el número de etapas y etapa de alimentación de cada una de las columnas. La optimización se hace utilizando el módulo RADFRAC. Las características de los flujos de los domos de ambas columnas se ajustan dentro del software Aspen Plus v11 utilizando especificaciones de diseño.

Se utilizó el IDE Spyder 5.0.5 para desarrollar y ejecutar el código de Python. Se utilizó la paquetería PYMOO (*Multi-Objective Optimization in Python*), desarrollada por Blank, et al., (2020) para llevar a cabo la optimización multiobjetivo. Se implementó una plataforma que vincula Python-Aspen Plus como se muestra en la Figura 2, toda vez que se realizaron modificaciones específicas para su correcto funcionamiento como optimizador de procesos. El algoritmo NSGA-II que viene integrado en PYMOO, sigue el esquema general de un algoritmo genético, y contiene una selección modificada de supervivencia y apareamiento (Deb, K. et al, 2002). Utiliza una selección de apareamiento binario, donde cada individuo se compara por rango y por distancia de hacinamiento.

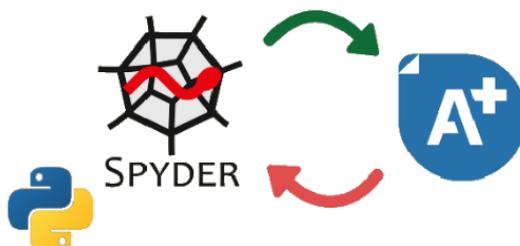


Figura 2. Interfaz de software para la optimización multiobjetivo del caso de estudio.

El caso de estudio fue optimizado de acuerdo con la función objetivo mostrado en la Ec. 1.

$$\text{Min}(TAC, Factor) = f(F_{MIR}, F_{PAL}, F_{PALT}, F_{LIN}, F_{LNL}, F_{BUT}, N_{MAINC}, N_{C1}, EA_{MAINC}, EA_{C1}) \quad (1)$$

siendo F_{MIR} el flujo de ácido mirístico [1-2], F_{PAL} el flujo de ácido palmítico [6-7], F_{PALT} el flujo de ácido palmitoleico [0.5-1.5], F_{LIN} el flujo de ácido linoleico [0.5-1.5] y F_{LNL} el flujo de ácido linolénico [12-13], todos los intervalos de flujo presentados están en kg/h. El flujo de mezcla de butanol-agua se determina con la Ec. 2:

$$F_{MEZCLA} = 2(F_{MIR} + F_{PAL} + F_{PALT} + F_{LIN} + F_{LNL} + F_{BUT}) \quad (2)$$

Entonces, la composición de butanol en la mezcla se varía entre 75% y 0.85%, por lo cual:

$$F_{BUT} = \frac{[75\%-85\%]}{100\%} F_{MEZCLA} \quad (3)$$

Lo que se encuentra dentro de los corchetes, es el valor aleatorio entre ambos límites que pruebe el optimizador. El flujo de agua, como una variable dependiente se calcula como lo dice la Ec. 4:

$$F_{AGUA} = F_{MEZCLA} - F_{BUT} \quad (4)$$

N_{MAINC} y N_{C1} son las etapas de la columna MAINC [5-20] y la columna C1 [30-45] respectivamente. EA_{MAINC} es la etapa de alimentación de la columna MAINC [2 - ($N_{MAINC} - 2$)] y EA_{C1} es la etapa de alimentación de la columna C1 [2 - ($N_{C1} - 2$)]. Las variables de optimización siguieron la misma estructura normalizada reportada por Herrera, J. (Herrera, J. et al, 2022) según se muestra en la Ec. 5, con el fin de dejar el límite superior de las variables de etapas de alimentación a la columna dependiente a su respectivo número de etapas totales.

$$V_{Ni} = \frac{(L_{Superior} - V_i)}{(L_{Superior} - L_{Inferior})} \quad (5)$$

Por separado, la función objetivo para el TAC (Costo Total Anual):

$$TAC = CS + \frac{CE}{AÑOS} \quad (6)$$

Donde CS es el costo de servicios, CE el costo de los equipos y años, el número de años previsto para la recuperación de inversión, 5 años para este estudio.

Y la función objetivo para el factor:

$$FACTOR = 1 - \frac{FAGR}{FT} \quad (7)$$

Donde FAGR es el flujo de ácidos grasos residuales en kg/h que se recuperan en el fondo de la columna C1, y FT es el flujo total de alimentación (Considerando la mezcla butanol-agua). Al minimizar la Ec. 7, se maximiza FAGR. Se utilizó el método NSGA-II para la optimización multiobjetivo con el método de descomposición ASF (*Augmented Scaling Feature*), una métrica muy conocida en la literatura de optimización multiobjetivo (Wierzbicki, A.P., 1980) con pesos de 0.2, 0.4, 0.5, 0.6 y 0.8. Para el estudio se usaron 30 generaciones con una población de 100 individuos, generando un número total de iteraciones de 3,000.

RESULTADOS

La Figura 3 muestra la nube de resultados filtrado a 1,000 iteraciones que representa las evaluaciones en el espacio de estudio encontrado por el algoritmo NSGA-II. De igual manera, presenta los puntos generales del frente de Pareto obtenido, donde se muestran las soluciones no dominantes que serán analizadas para determinar la mejor solución para ambas funciones objetivo.

La Figura 4 muestra el frente de Pareto obtenido, donde los círculos azules muestran los resultados no dominantes, y se presentan los puntos determinados por el ASF.

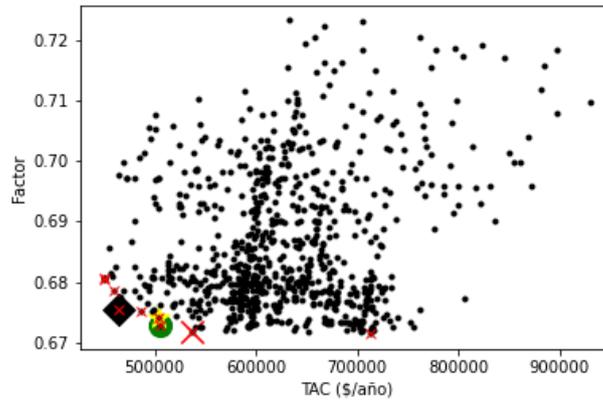


Figura 3. Nube de resultados en el espacio de las funciones objetivo filtrado a 1,000 iteraciones.

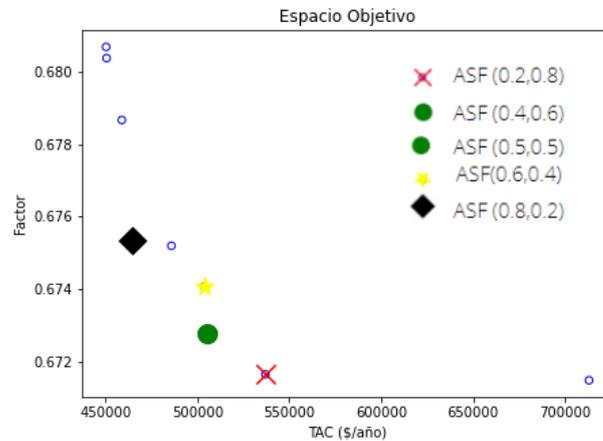


Figura 4. Frente de Pareto con las soluciones no dominantes y las soluciones determinadas por ASF para diferentes pesos.

En la Tabla 2, se presenta un resumen de los resultados obtenidos.

Tabla 2. Especificaciones de diseño y flujos de operación óptimas.

	CASO BASE	MÍN	ASF	ASF	ASF	ASF	ASF	MÍN
		TAC	(0.2,0.8)	(0.4,0.6)	(0.5,0.5)	(0.6,0.4)	(0.8,0.2)	FACTOR
F_{MIR} (kg/h)	1.2	1.04	1.00	1.01	1.01	1.01	1.11	1.01
F_{PAL} (kg/h)	6.00	6.05	6.01	6.00	6.00	6.00	6.05	6.00
F_{PALT} (kg/h)	0.60	0.66	0.54	0.56	0.56	0.55	0.55	0.50
F_{LIN} (kg/h)	0.60	0.79	0.53	0.56	0.56	0.58	0.58	0.55
F_{LNL} (kg/h)	12.60	12.11	12.00	12.04	12.04	12.09	12.00	12.02
F_{BUT} (kg/h)	31.80	35.64	34.64	34.79	34.79	35.19	35.47	34.61
F_{AGUA} (kg/h)	7.20	6.00	5.63	5.64	5.64	5.44	5.31	5.63
N_{MAINC}	7	6	6	7	7	6	6	6
N_{CI}	40	33	33	33	33	33	33	34
E_{MAINC}	4	4	4	4	4	4	4	4
E_{ACI}	20	26	9	25	25	9	25	12
TAC (USD/Año)	927,456	450,327	536,994	505,470	505,470	503,732	464,208	713,034
FACTOR	0.6723	0.6806	0.6717	0.6727	0.6727	0.6740	0.6753	0.6714

Tomando como resultado óptimo el encontrado por AFS(0.5,0.5), que coincide con la solución de AFS(0.4,0.6), la columna TCDS-SR, mostrada en la Figura 5, tendrá las siguientes dimensiones: 14 etapas en su columna principal (MAINC), y 24 etapas en rectificador (C1). FV en la etapa 6 y FL en la etapa 7. Alimentación en la etapa 6 de MAINC. El flujo de interconexión es de 50 kg/h.

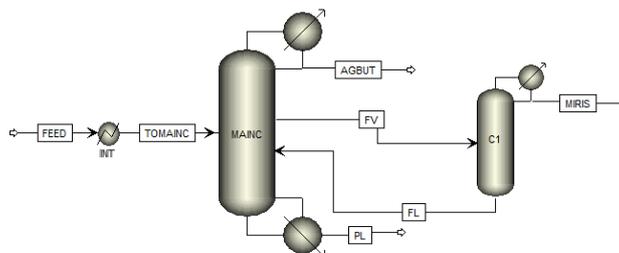


Figura 5. TCDS-SR, utilizando el módulo RADFRAC en el software Aspen Plus v11.

CONCLUSIONES

En base a los resultados obtenidos, se muestra que se tienen mejores resultados para las funciones objetivos propuestas en conjunto que su solución mono objetivo particular. La función objetivo FACTOR, varía poco entre casos de estudio, su disminución afecta directamente la carga térmica del intercambiador de calor de la alimentación, lo cual aumenta el TAC. El problema por secuencia convencional permite tener un estudio amplio a diferencia de haber optimizado la columna TCDS-SR directamente, por problemas de convergencia en el flujo de interconexión. Debido a que el valor de FACTOR varía poco, lo ideal sería hacer un estudio posterior al esquema intensificado con una nueva función objetivo orientada a aspectos operativos o de controlabilidad para tener un estudio riguroso del esquema propuesto.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Blank, J. y Deb, K. (2020). Pymoo: Multi-Objective Optimization in Python. *IEEE Access*, 8, 89497-89509.
- Carrillo-González, G., Azamar-Alonso, A., y Cervantes-Torre, G. (2017). Innovación tecnológica y curtiduría en el estado de Guanajuato Tannery and technological innovation in Guanajuato. *Economía Informa*, 402, 66-7.
- Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S. y Meyarivan, T. (2002). A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6, 182-197.
- Herrera, J., Zavala, F., Chávez, L., Cabrera, J. y Alcántara, J. (2022). Hybrid two-step optimization of internally heat-integrated distillation columns. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 130, 1-9.
- Wierzbicki, A.P. (1980). The Use of Reference Objectives in Multiobjective Optimization. Multiple Criteria Decision Making Theory and Application. *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*, 177, 468-486.

Control predictivo y optimización de los parámetros de penalización en una columna de destilación binaria

Luis Miguel Valenzuela^a, Antioco López-Molina^a, Misael Hernández-Hernández^a,
Carolina Conde Mejía^a

^aDivisión Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, UJAT

Carrera Nacajuca-Jalpa de Méndez, R/a Rivera Alta, c.p. 86205 Jalpa de Méndez, Tabasco, México

miguel.valenzuela@ujat.mx

RESUMEN

El diseño y optimización en procesos de destilación ha sido de gran interés debido a la necesidad de contribuir al ahorro energético y a la conservación de la naturaleza. Este artículo implementa el algoritmo direccional del murciélago dBA y el modelo de control predictivo (MPC) en una columna de destilación binaria para optimizar los parámetros de penalización y obtener un mejor ajuste del punto de ajuste. Las simulaciones numéricas muestran que los valores de referencia se alcanzan bajo perturbaciones en el flujo de alimentación.

Palabras claves: Columna de destilación, Control predictivo, Algoritmo bat direccional

INTRODUCCIÓN

La destilación ha sido una operación unitaria de gran importancia durante siglos. Muchos productos destilados han influido en el desarrollo cultural y económico en todo el mundo. El alcohol etílico, el queroseno y la gasolina son ejemplos de la aplicación de esta tecnología (ver [3]). Actualmente es la operación de depuración unitaria más utilizada en la industria química y petroquímica. Aunque existe un debate sobre su eficiencia energética, es el rey de la separación industrial (ver [4]). Sin embargo, su uso no es universal ni se utiliza para todo tipo de mezclas líquidas. Para que una mezcla líquida sea separada por destilación se deben cumplir tres aspectos 1) la formación de una segunda fase de tal manera que el líquido y el vapor estén en contacto; 2) que los componentes de la mezcla tienen diferentes volatilidades y, 3) que las dos fases se pueden separar por gravedad u otros medios mecánicos (ver [8]). Por otro lado, los elementos que favorecen un excelente proceso de destilación son el condensador y el rehervidor de la columna. La caldera es un intercambiador de calor que proporciona la energía suficiente para la separación de los componentes, generando el vapor necesario para promover la transferencia de masa y calor en cada placa, además ayuda al

control de la presión de operación (ver [6]). Por su parte, el condensador es otro intercambiador que extrae energía del vapor del domo de la columna para condensar la cantidad necesaria para volver a la torre y mantener la separación en condiciones de diseño (ver [5]). Controlar el correcto funcionamiento de estos dos elementos es vital para obtener los productos con las especificaciones de calidad deseadas y tener un funcionamiento seguro y estable. En este sentido, el control de las torres de destilación sigue siendo un tema de interés para la industria ya que mantener la calidad y la productividad es siempre una prioridad. El MPC sigue funcionando en la industria como un medio eficaz para hacer frente a los problemas de control con restricciones multivariantes. Este modelo puede manejar dinámicas de sistemas no lineales, restricciones estrictas en la entrada, el estado y la salida, y tiene en cuenta los criterios de rendimiento (ver [7]). La técnica básica de control predictivo del modelo incorpora modelos de respuesta escalonada normalizados para las variables controladas en función de las variables manipuladas y las variables de avance. Las variables de control son los objetivos de la estrategia de control multivariable e incluyen tanto objetivos como restricciones. las variables manipuladas son la salida del controlador multivariable y normalmente son puntos de ajuste para controladores básicos proporcionales integrales derivados (PID).

Se han propuesto varias estrategias para la optimización de los parámetros de penalización para el MPC, entre ellas el método de búsqueda aleatoria propuesto por Hamzacebi y Kutay (ver [1, 2]) que son algoritmos heurísticos para determinar mínimos locales o globales. Recientemente, Chakri et al., propone el algoritmo metaheurístico direccional del murciélago (dBA) que presenta mejoras en los tiempos de búsqueda en comparación con los métodos PSO, HS, CS, GA, DE, (ver [9]). Sin embargo, algunos de ellos tardan un tiempo considerable en ajustarse, lo que es un factor determinante en el funcionamiento de las columnas de destilación. Por lo tanto, en este trabajo se propone el método dBA para ajustar los parámetros de penalización dentro de un modelo de control predictivo (MPC), lo que mejora sustancialmente los tiempos de cálculo y permite una respuesta eficiente a las perturbaciones en la concentración y el flujo de alimentación.

METODOLOGÍA

Formulación del Modelo MPC

La formulación en términos del método de control predictivo (MPC), consta principalmente de los siguientes pasos:

- en cada tiempo de muestreo k , se resuelve un problema de control óptimo de horizonte finito sobre un horizonte de predicción N ,
- las futuras señales de control se calculan mediante optimización y cierto criterio para mantener el proceso lo más cerca posible de la trayectoria de referencia ω ,

- el método tiene en cuenta la dinámica del sistema, las restricciones y una función objetivo que pondera el esfuerzo de control y el error entre el valor de referencia deseado y la salida, lo que favorece una secuencia de control óptima.

En este trabajo, consideramos el siguiente sistema de tiempo de un modelo en espacio de estado, suponga que la planta tiene m entradas, q salidas y n_1 estados (ver [12])

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_m(k+1) &= \mathbf{A}_m \mathbf{x}_m(k) + \mathbf{B}_m \mathbf{u}(k) \quad (1) \\ \mathbf{y}(k) &= \mathbf{C}_m \mathbf{x}_m(k) \quad (2) \end{aligned}$$

donde \mathbf{u} es el vector de variables manipuladas o variable de entrada la dimensión m ; y se refiere al vector de salidas medidas de la dimensión q y \mathbf{x}_m es el vector de variables de estado de la dimensión n_1 . En (1), \mathbf{A}_m , \mathbf{B}_m y \mathbf{C}_m tienen dimensión $n_1 \times n_1$, $n_1 \times m$ y $q \times n_1$, respectivamente (ver [12]).

Para predecir la evolución de los estados en los siguientes instantes de muestreo H_p , se realizan las iteraciones para cada instante (ver [13]), obteniendo la ecuación (3)

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F}\mathbf{x}(k_i) + \Phi\Delta\mathbf{U} \quad (3)$$

El objetivo en la formulación general de una función objetivo es minimizar la distancia entre la trayectoria de referencia futura y la salida prevista del proceso y la penalización en el esfuerzo de control durante un horizonte de predicción y un horizonte de control respectivamente. Por lo tanto, definimos la siguiente función de costo

$$\mathbf{J} = (\mathbf{R}_s - \mathbf{Y})^T \mathbf{Q}_\delta (\mathbf{R}_s - \mathbf{Y}) + \Delta\mathbf{U}^T \mathbf{Q}_\lambda \Delta\mathbf{U} \quad (4)$$

donde $\mathbf{R}_s = [\mathbf{1}, \mathbf{1}, \dots, \mathbf{1}] \mathbf{r}(\mathbf{k}_i)$ es un vector que contiene la referencia actual, \mathbf{Q}_δ es la matriz de ponderación del error de seguimiento y \mathbf{Q}_λ es la matriz de ponderación del incremento de control.

Algoritmo direccional del Bat (dBA)

La elección de los parámetros de penalización se realizará mediante el algoritmo direccional del murciélago (dBat) propuesto por Chakri et al. [9], el cual se basa en una optimización de los parámetros de penalización a través de una búsqueda aleatoria en una región dada, para que el controlador sea robusto y suave en su respuesta.

Aunque el algoritmo BAT proporciona una rápida tasa de convergencia hacia el óptimo global para muchas funciones, ver ([9]), una de las desventajas es la convergencia prematura hacia los óptimos locales que puede ocurrir debido a la baja capacidad de exploración del algoritmo. Para superar esta deficiencia se han propuesto varias modificaciones, una de ellas es el Directional Bat Algorithm (dBA) propuesto por Chakri et al.,[9], que mejora sus

capacidades de exploración y explotación. En este trabajo consideramos el siguiente algoritmo

$$x_i^{t+1} = x_i^t + (x^* - x_i^t)f_1 + (x_k^t - x_i^t)f_2 \text{ si } F(x_k^t) < F(x_i^t)$$
$$x_i^{t+1} = x_i^t + (x^* - x_i^t)f_1 \text{ En otro caso} \quad (5)$$

Donde F es la función de fitness, mientras que f_1 y f_2 son las frecuencias de los dos pulsos y se actualizan de la siguiente manera:

$$f_1 = f_{\min} + (f_{\max} - f_{\min})\text{rand1}$$

$$f_2 = f_{\min} + (f_{\max} - f_{\min})\text{rand2}$$

Tanto rand1 como rand2 son dos vectores aleatorios con distribución uniforme entre 0 y 1, para más detalles (véase [10]).

Columna de destilación binaria

La dinámica en una columna de destilación binaria consiste principalmente en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias y un conjunto de ecuaciones algebraicas que describen las propiedades físicas y termodinámicas del proceso.

El presente trabajo se basa en la columna de destilación binaria estudiada por (Skogestad y Morari, 1988) (véase [11]). El modelo matemático de la columna de destilación tiene en cuenta las siguientes hipótesis:

- Mezcla binaria ideal
- Presión constante
- Volatilidad relativa constante
- Equilibrio en todas las etapas
- Condensador total
- Flujo molar constante
- Sin retención de vapor
- Dinámica de líquido linealizada, pero se incluye el efecto del flujo de vapor.

RESULTADOS

La comparación entre el rendimiento del MPC con parámetros de penalización optimizados y no optimizados se muestra en la Figura 1. El MPC reacciona más rápido con los parámetros

de penalización optimizados ante las perturbaciones en el caudal de alimentación y las variables manipuladas se mueven suavemente en un tiempo más corto.

La figura 1 a) y b) presenta las mejoras en los tiempos de ajustes en el set-point ante una perturbación en el flujo de alimentación. Se perturba el flujo de alimentación con un incremento del 10% en el minuto 500, la Figura 1 muestra que al aumentar el caudal la fase más volátil tiene un pico por abajo del set-point debido al incremento en la alimentación para el destilado x_D , de manera análoga en el minuto 1200 se realiza una disminución en el flujo de alimentación del 10% observando de nueva cuenta un pico por arriba del set-point en el destilado x_D debido a que la fase menos volátil es disminuida, en ambos casos se observa que el MPC logra estabilizar el sistema.

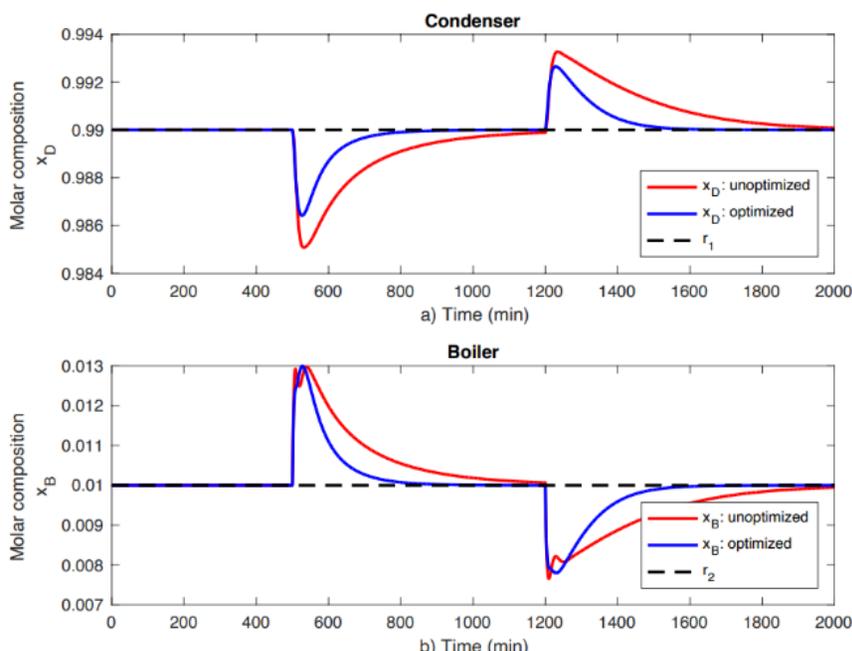


Figura 1. Parámetros de penalización optimizados $\delta_1 = 0.85, \delta_2 = 0.87, \lambda_1 = 0.009, \lambda_2 = 0.14$. Parámetros de penalización sin optimizar $\delta_1 = 0.7, \delta_2 = 0.9, \lambda_1 = 0.1, \lambda_2 = 0.2$.

CONCLUSIONES

En este trabajo analizamos la dinámica de una columna de destilación binaria usando el MPC y el algoritmo dBA que han sido ampliamente estudiados (ver [10] [12], [13]). La actuación del algoritmo MPC y dBA en la columna de destilación binaria ofrece mejoras significativas para controlar este tipo de procesos debido a las características intrínsecas del método como consideración de los efectos de todas las variables manipuladas y controladas, lo que ayuda a reducir las fluctuaciones. El MPC considera los errores entre el valor de referencia y la salida del proceso, así como el incremento de control, lo que ofrece un mejor ajuste en cada instante de tiempo. Los resultados obtenidos en este trabajo son importantes, ya que se

pueden implementar mejoras cada vez más realistas, por ejemplo, la incorporación de una perturbación de tipo aleatorio en el modelo MPC, pero principalmente este algoritmo puede ser utilizado para su aplicación y validación en laboratorios experimentales.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, a la Universidad de Guanajuato y al programa PRODED con clave UJAT-PTC-295 y UJAT-PTC-293, por el apoyo brindado para este trabajo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Hamzacebi C, Kutay F (2006). A heuristic approach for finding the global minimum: Adaptive random search technique. *Applied Mathematics and Computation* , 173 (2): 1323–1333.
- [2] Hamzacebi C, Kutay F. (2007). Continuous functions minimization by dynamics random search technique. *Applied Mathematical Modelling*, 31 (10): 2189–2198.
- [3] Górak A, Z. Olujic.(2014). Distillation: equipment and processes. *Academic Press*.
- [4] Kiss A A, R Smith. (2020) Rethinking energy use in distillation processes for a more sustainable chemical industry. *Energy* 2020; 203: 117788.
- [5] Kister H Z. Chapter 2 - Common Techniques for Distillation Troubleshooting. *Distillation* 2014; Academic Press: 37-101.
- [6] Kister H Z. et al. (1992). *Distillation design*. New York: McGraw-Hill.
- [7] Rawlings J B, et al. (2017). *Model predictive control: theory, computation, and design*. Nob Hill Publishing Madison.
- [8] Seader J D, E J Henley. (2005) .*Separation process principles*. New York: Wiley.
- [9] Chakri A, Khelif R, Benouaret M, Yang X S. (2017) .New directional bat algorithm for continuous optimization problems. *Expert Systems with Applications*, (69):159-175.
- [10] Qin, S.J. and T.A. Badgwell (1998). An Overview of Nonlinear Model Predictive Control Applications. In: *IFAC Workshop on Nonlinear Model Predictive Control. Assessment and Future Directions*. Ascona (Switzerland).
- [11] Skogestad Sigurd and Morari Manfred (1988). Understanding the Dynamic Behavior of Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem.* (27), 1848-1862. https://folk.ntnu.no/skoge/book/1st_edition/matlab_m/cola/cola.html#lin
- [12] Wang Liuping, (2009). *Model Predictive Control System Design and Implementation Using MATLAB*,” *Springer*, Australia.
- [13] Wang. Jianxin, Yu Na, Chen. Mengqi, Cong. Lin, Sun. Lanyi, (2018).“Composition control and temperature inferential control of dividing wall column based on model predictive control and PI strategies,” *Chinese Journal of Chemical Engineering*. (26), 1087-1101.

Planificación estratégica del agua en la fracturación hidráulica considerando comportamiento humano

Esbeydi Villicaña-García ^{a,*}, Luis Fernando Lira-Barragán ^a, José María Ponce-Ortega ^a

*Departamento de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria, Edificio VI, Morelia, Michoacán, 58060. *Correo: esbeydi.villicana@umich.mx*

RESUMEN

La producción de gas shale requiere una gran cantidad de agua para la fracturación hidráulica. Es por ello que es necesario encontrar una planificación estratégica que considere la gestión del agua, la incertidumbre relacionada con el agua requerida en cada pozo para fracturar y la incertidumbre del porcentaje de agua de retorno. Generalmente, el agua de retorno está altamente contaminada y se debe tratar antes de su disposición final. Además, el gobierno ofrece incentivos económicos al productor para reducir el consumo de agua dulce. El gobierno establece límites de agua dulce, si el productor logra esos objetivos, se reciben incentivos económicos, si no, hay castigos económicos. Se incentiva el tratamiento del agua de retorno para asegurar la correcta disposición final y la viabilidad de reutilizar el agua contaminada. Es importante comprender la preferencia del tipo de tratamiento mediante el uso de la matching law. La función objetivo es minimizar los costos totales anuales bajo escenarios de incertidumbre que involucran un esquema de incentivos y comportamiento de las personas involucradas. El modelo de optimización propuesto es un problema de programación mixto entero no lineal. Codificado en el software GAMS. El mejor de los casos ocurrió cuando hay una restricción máxima y una mayor cantidad de incentivos otorgados “R(+)” ya que representa el menor costo esperado y el menor consumo de agua esperado; por otro lado, el peor de los casos representa “R(+)” que corresponde a tener una combinación de incentivos, es decir, un caso donde en algunos tratamientos se propone mucho incentivo y en otros tratamientos se propone poco incentivo, siendo el caso “R(+)” el mayor costo y mayor consumo de agua dulce. Cuando se da mucho incentivo al tener una restricción máxima, la preferencia entre tratamientos es la misma, pero si no hay restricción, hay mayor discrepancia en la preferencia. La matching law puede ser una herramienta para favorecer la intensificación de este tipo de procesos.

Palabras clave: Gas Shale, Manejo de Agua, Optimización, Esquema de Incentivos, Comportamiento de Población.

INTRODUCCIÓN

El gas natural atrapado bajo la formación de shale es un recurso energético cada vez más valioso, es por ello que se debe considerar la gestión correcta del agua para satisfacer las necesidades de la sociedad junto con el diseño y la planificación del suministro de gas shale. Por otro lado, para mejorar un proceso en término de costos, el uso de la intensificación de procesos (PI) conduce a que sea sustancialmente más económico. Se han observado oportunidades de intensificación para la producción de gas shale, como un

impacto económico directo [1]. Proporcionar incentivos económicos es una práctica común para aumentar la motivación y el desempeño de los involucrados[2]. Los incentivos económicos se han utilizado en el desarrollo de planes para la conservación del agua que establecen objetivos de reducción del uso y promueven acciones de conservación del agua [3]. Es importante conocer el comportamiento de quienes participan en estos esquemas donde se cuenta con la posibilidad de elegir. Existen diferentes leyes que estudian el comportamiento de las personas, entre ellas, la matching law. Se ha demostrado que el comportamiento tiene un enorme impacto en las decisiones de planificación en las cadenas de suministro [4]. Estudiar la preferencia de los involucrados en la planificación de problemas ayuda a predecir cuál será su comportamiento y cómo influye en todo el sistema [5]. La novedad de este trabajo radica en el uso de PI junto con la matching law en la gestión del agua para la producción de gas shale utilizando esquemas de incentivos/penalizaciones económicas para promover la reutilización de agua y uso de tratamientos. Destacando que la matching law no ha sido estudiada bajo escenarios de incertidumbre.

METODOLOGÍA

El modelo matemático se basa en la superestructura de la **Figura 1**. Se consideran fuentes de agua dulce para usar en operaciones de fracturamiento hidráulico “n”. El agua de refluo debe someterse a alguno de los tratamientos “i” que pueden ser enviados a disposición final “d” o almacenamiento “j”. El agua tratada que se almacena se puede reutilizar. El modelo incluye balances de masa relacionados al agua dulce, de retorno, disposición final y descarga, agua que entra y sale de almacenamiento, unidades de tratamiento y de almacenamiento; además de restricciones de capacidad y diseño para las unidades de tratamiento, almacenamiento y disposición final. Se propone un esquema de incentivos junto con la matching law. Los incentivos estimulan a las personas a desempeñarse mejor en su respectivo trabajo y la matching law estudia la preferencia de las personas en relación a la elección entre una opción u otra. Se busca minimizar el consumo de agua ($F_{t,s}^{fresh}$). El gobierno establece un flujo objetivo ($F_{t,s}^{fresho}$) y el productor propone un flujo ($F_{t,s}^{freshp}$). Si el flujo de agua utilizado es igual o menor a la cantidad propuesta, se obtiene un incentivo económico ($R_{t,s}^{fresh}$), si el flujo de agua dulce es mayor al propuesto, se obtiene una penalización económica ($P_{t,s}^{fresh}$).

$$\left[\begin{array}{l} R_{t,s}^{fresh} \\ F_{t,s}^{fresh} = F_{t,s}^{freshp} > F \\ F_{t,s}^{fresh} = E_{t,s}^{fresh} \cdot u^f \cdot \frac{F_{t,s}^{freshp}}{F_{t,s}^{fresho}} \\ P_{t,s}^{fresh} = 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} F_{t,s}^{fresh} \\ F_{t,s}^{fresh} = 0 \\ P_{t,s}^{fresh} = E_{t,s}^{fresh} \cdot x^f \cdot \frac{F_{t,s}^{fresh} - F_{t,s}^{freshp}}{F_{t,s}^{fresho} \cdot 2 \cdot F} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} C_{t,s}^{fresh} \\ F_{t,s}^{fresh} < F_{t,s}^{freshp} \\ R_{t,s}^{fresh} = E_{t,s}^{fresh} \cdot v^f \cdot \frac{3 \cdot F_{t,s}^{fresh} + F_{t,s}^{freshp}}{2 \cdot F_{t,s}^{fresho}} \\ P_{t,s}^{fresh} = 0 \end{array} \right], \forall t, \forall s \quad (1)$$

En cuanto a los tratamientos, se aborda el efecto de cada tratamiento sobre el sistema. Según el flujo obtenido al final de cada tratamiento, el productor es recompensado o castigado económicamente.

$$\begin{bmatrix} Y_{A,i,s}^{treat} \\ F_{i,t,s}^{treat-out} = F_{i,t,s}^{treat-out} \\ R_{i,t,s}^{treat} = E_{i,t,s}^{treat} \cdot u^t \cdot \frac{F_{i,t,s}^{treat-out}}{F_{i,t,s}^{treat-out}} \\ P_{i,t,s}^{treat} = 0 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} Y_{B,i,s}^{treat} \\ F_{i,t,s}^{treat-out} > F_{i,t,s}^{treat-out} \\ R_{i,t,s}^{treat} = E_{i,t,s}^{treat} \cdot X^t \cdot \frac{F_{i,t,s}^{treat-out} + F_{i,t,s}^{treat-out}}{2 \cdot F_{i,t,s}^{treat-out}} \\ P_{i,t,s}^{treat} = 0 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} Y_{C,i,s}^{treat} \\ F_{i,t,s}^{treat-out} < F_{i,t,s}^{treat-out} \\ R_{i,t,s}^{treat} = 0 \\ P_{i,t,s}^{treat} = E_{i,t,s}^{treat} \cdot v^t \cdot \frac{3 \cdot F_{i,t,s}^{treat-out} - F_{i,t,s}^{treat-out}}{2 \cdot F_{i,t,s}^{treat-out}} \end{bmatrix}, i, t, s \quad (2)$$

Hernstein [6] estableció que la tasa relativa de respuesta es proporcional a la tasa relativa de recompensa. Esta igualdad se llama "matching" y la declaración de igualdad se llama "matching law". B representa el comportamiento de cada programa 1 y 2. R es la recompensa y P es la penalización. Al aplicar la matching law al uso de los distintos tratamientos, se determina la preferencia por cada uno de ellos, esto es posible porque está relacionada con los flujos económicos de incentivos y penalizaciones.

$$\sum_i \frac{B_{i,t,s}^{treat}}{B_{i,t,s}^{treat}} = \sum_i \frac{R_{i,t,s}^{treat} - P_{i,t,s}^{treat}}{(R_{i,t,s}^{treat} - P_{i,t,s}^{treat})}, \forall i, t, s \quad (3)$$

El comportamiento esperado relacionado a la preferencia de tratamientos ($EB_{i,t}^{treat}$) implica la probabilidad de preferencia por cada tipo de tratamiento. Considerando que es incierto, se espera que el perfil de comportamiento en términos de preferencia por cada tipo de tratamiento i varíe significativamente entre los escenarios.

$$EB_{i,t}^{treat} = \sum_s prob_s^{treat} B_{i,t,s}^{treat}, \forall i, \forall t \quad (4)$$

La Función objetivo es minimizar el Costo total anual esperado (ETAC).
 $Min ETAC = \sum_s prob_s TAC_s$ (5) Donde TAC_s es el costo total anual asociado al mismo escenario s , involucra el costo total de operación (TOCs), de capital (TCC), el incentivo económico total relacionado con el consumo de agua (I_s^{fresh}) y reuso (I_s^{treat}).

$$TAC_s = TOC_s + TCC + I_s^{fresh} + I_s^{treat}, \forall s \quad (6)$$

Las sanciones se consideran un gasto, por lo tanto, afectan positivamente al TAC y las recompensas afectan de forma negativa. Los incentivos totales por agua dulce (I_s^{fresh}) y tratamiento (I_s^{treat}) se calculan multiplicando el flujo correspondiente y la diferencia entre penalizaciones y recompensas:

$$I_s^{fresh} = H^{time} \cdot \sum_t F_{t,s}^{fresh} \cdot (P_{t,s}^{fresh} - R_{t,s}^{fresh}), \forall s \quad (7)$$

$$I_s^{treat} = H^{time} \cdot \sum_i \sum_t F_{i,t,s}^{treat-out} \cdot (P_{i,t,s}^{treat} - R_{i,t,s}^{treat}), \forall s \quad (8)$$

RESULTADOS

El agua para perforar y el agua de reflujo son parámetros inciertos que afectan las variables relacionadas en el modelo. Primero se identifican los parámetros inciertos, luego se asume una desviación estándar para generar valores aleatorios y obtener un conjunto de parámetros que representan esa incertidumbre. Se probó la solución del

modelo matemático proponiendo 70, 30 y 10 escenarios inciertos. Al correr el modelo se pudo determinar que, a mayor número de escenarios, mayor es el consumo computacional y más difícil es llegar a una solución. Se decidió seleccionar 10 escenarios para determinar el comportamiento del modelo. Cada escenario tiene un valor diferente para los parámetros relacionados con el agua requerida para perforar y el agua de reflujó. Además, se estudia el efecto de usar incentivos máximos (R) y no usar incentivos máximos (NR). El efecto de la variación del incentivo en ETAC y ETWR se muestra en la **Figura 2a**. El ETAC más bajo y el ETWR más bajo están representados por el escenario “R(+)”, lo que significa que es un escenario que usa restricción en los incentivos máximos y los incentivos pueden ser mayores que los otros escenarios (**Figura 2a**). Al no utilizar incentivos representa uno de los ETAC y ETWR más altos (**Figura 2b**). Sin embargo, el escenario con mayor costo y consumo de agua es “R(-)”, el cual representa un escenario con restricción en los incentivos máximos y los incentivos base utilizados son una mezcla de mucho y poca cantidad de incentivo. El escenario “R(+)” mejora la ETAC en un 98.56% en comparación a no utilizar incentivos y la ETWR en un 98.09%. Debido a la proximidad en los incentivos con 10 escenarios (**Tabla 1**), la preferencia en el tratamiento 5 es negativa (**Figura 3a**), es decir que el castigo es mayor que la recompensa y representa dificultad para lograr las metas establecidas por el gobierno y eventualmente el productor rechazará el tratamiento 5. Cuando los incentivos son mayores, la preferencia de tratamiento es igual en todos ellos (**Figura 3b**). En cambio, cuando se trata de una mezcla de incentivos, la diferencia de preferencia es más notoria (**Figura 3c**).

CONCLUSIONES

Este trabajo presentó un modelo de optimización capaz de determinar la correcta planificación y gestión del agua en la obtención de shale gas, teniendo en cuenta la incertidumbre asociada al agua requerida para perforar cada pozo y el agua que retorna a la superficie. Se busca la intensificación del proceso reutilizando la mayor cantidad de agua tratada y reduciendo el consumo de agua dulce e incluyendo nuevas técnicas como la matching law. Involucrar incentivos económicos asegura la reutilización del agua y al mismo tiempo promueve su tratamiento; al utilizar la matching law se cuantifica la preferencia por cada tipo de tratamiento. Los incentivos y sanciones se otorgan a las personas que están involucradas en la red de producción de gas shale, su comportamiento afecta los resultados de acuerdo a los incentivos otorgados. Al estudiar escenarios bajo incertidumbre junto con la matching law, genera resultados favorables respecto a los posibles comportamientos ante cambios en los parámetros utilizados, dando un mayor espectro en la solución. Conocer la preferencia por cada tipo de tratamiento permite establecer el comportamiento de los involucrados para modificarlo de acuerdo a las necesidades del interesado. Se analizaron diferentes casos con diferente número de escenarios, destacando que cuanto más cercanos sean los valores de los incentivos de base entre ellos, más difícil será de resolver. También es importante señalar que los resultados obtenidos son una guía para establecer el efecto de la preferencia en la planificación. El modelo es general y se puede aplicar a diferentes casos de estudio haciendo los ajustes necesarios a los parámetros involucrados. La relación de la intensificación de los procesos

con el comportamiento de los implicados no ha sido estudiado a profundidad y es un tema de gran interés ya que de ello dependen los resultados.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo financiero obtenido de CONACyT y UMSNH-CIC.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Ortiz-Espinoza, A. P., Jiménez-Gutierrez, A. (2020). Shale gas as an option for the production of chemicals and challenges for process intensification. *Process Intensification and Integration for Sustainable Design*. 1-14.
- [2] Govindarajulu, N., Daily, B. F. (2004). Motivating employees for environmental improvement. *Industrial Management & Data Systems*. 104(4), 364-372.
- [3] Sabzi, H. Z., Rezapour, S., Fovargue, R., Moreno, H., Neeson, T. M. (2019). Strategic allocation of water conservation incentives to balance environmental flows and societal outcomes. *Ecological Engineering*. 127, 160-169.
- [4] Lai, X., Tao, Y., Wang, F., Zou, Z. (2019). Sustainability investment in maritime supply chain with risk behavior and information sharing. *International Journal of Production Economics*. 218, 16-29.
- [5] Villicaña-García, E., Sánchez-Bautista, A. F., Ponce-Ortega, J. M. (2022). Involving behavior of population in the strategic planning of integrated energy systems. *Computers & Chemical Engineering*. 157, 107583.
- [6] Herrnstein, R.J. (1961). Relative and absolute strength of response as a function of frequency of reinforcement. *Journal of the Experimental Analysis of Behavior*. 4(3), 267-272.

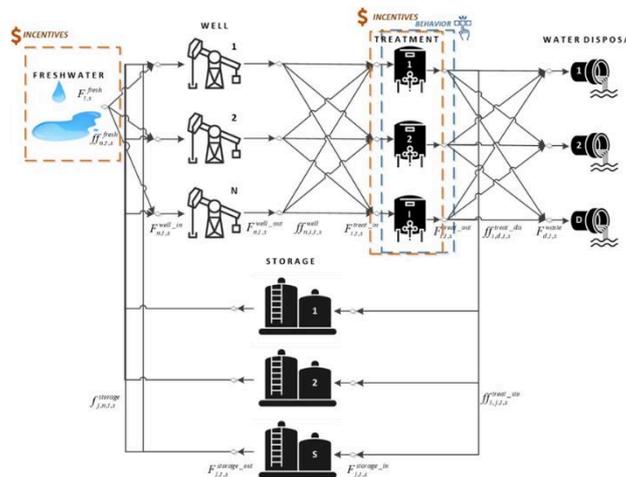


Figura 1. Superestructura propuesta para intensificar la reutilización de agua en operaciones de fracturamiento hidráulico.

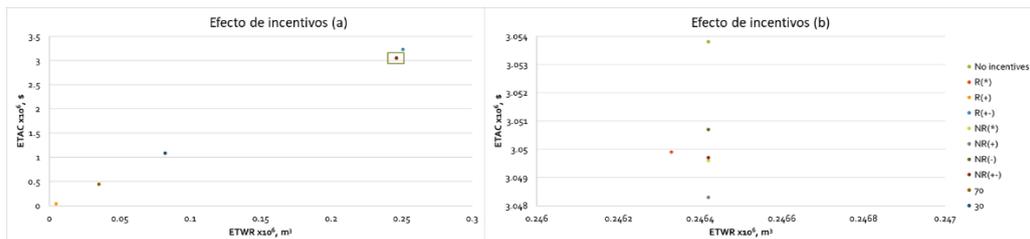


Figura 2. Efecto de los incentivos sobre los costos y el agua dulce. “R” representa usar los incentivos máximos, “NR” significa no usar los incentivos máximos. (*) incentivo base, (+) más incentivo, (-) menos incentivo y, (+-) mezcla de incentivos.

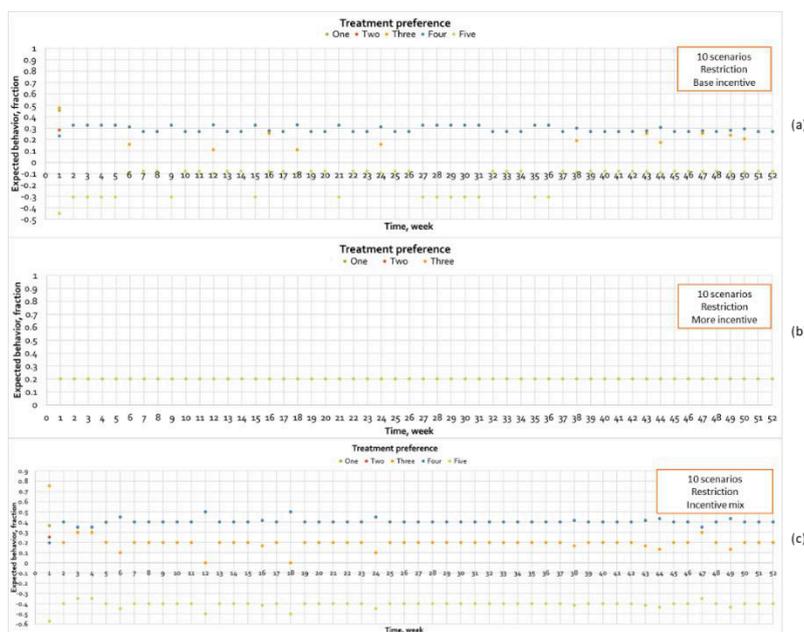


Figura 3. Preferencia de tratamiento al usar restricción en incentivos máximos con incentivos base (a), más incentivos (b) y combinación de incentivos (c).

Tabla 1. Incentivos considerados

Concepto	Incentivo base (BI)	Más incentivo	Menos incentivo	Combinación
Tratamiento	$\$/m^3$	$BI \cdot 10.75, \$/m^3$	$BI \cdot 0.01, \$/m^3$	$\$/m^3$
1	1.2500	13.4375	0.0125	1.2500
2	1.3125	14.1094	0.0131	14.1094
3	1.1250	12.0938	0.0113	0.0113
4	1.3375	14.3781	0.0134	1.3375
5	1.0625	11.4219	0.0106	11.4219
Agua dulce	0.2000	2.1500	0.0020	0.0020

ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS CINÉTICOS UTILIZANDO ALGORITMOS EVOLUTIVOS.

Juan Carlos Padilla Valtierra ^a, Heriberto Alcocer-García ^a, Eduardo Sánchez-Ramírez ^{a*},
Juan Gabriel Segovia-Hernández ^a.

^a *Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 36050, México. *eduardo.sanchez@ugto.mx*

RESUMEN

En la actualidad gran parte de los residuos provenientes de actividades agrícolas (biomasa lignocelulósica) son desechados o quemados. Sin embargo, estos desechos pueden ser aprovechados para generar una amplia gama de productos de alto valor agregado. Dentro de estos bio-productos destaca el Metiltetrahydrofurano el cual es un aditivo que puede ser utilizado de forma directa con la gasolina. Sin embargo, a pesar de que es un producto de amplio interés comercial no se encuentran reportados datos cinéticos de las reacciones que intervienen para su formación. Por tanto, en este trabajo se determinaron las constantes cinéticas en una cinética del tipo Arrhenius, mediante optimización determinística utilizando el algoritmo de evolución diferencial con lista tabú y tomando como criterio la minimización del error de los flujos resultantes comparados con un perfil experimental. Los resultados indican que con los valores obtenidos de las constantes cinéticas se pueden obtener los perfiles de composición experimentales, obteniendo un error entre los flujos molares de 1.47×10^{-3} .

Palabras clave: Metiltetrahydrofurano, Constantes cinéticas, Evolución diferencial con lista tabú.

INTRODUCCIÓN

La síntesis de 2-metiltetrahydrofurano (2MTHF) a partir de biomasa ha adquirido atención significativa ya que, por sus propiedades físicas y químicas, este compuesto sirve como un aditivo de gasolina con excelentes propiedades de combustión [1] y de acuerdo con Pace et al., [2] este compuesto además de tener aplicaciones en la industria de resinas comerciales es utilizado como un importante solvente en la síntesis orgánica siendo una alternativa fiable respecto al uso de solventes tradicionales tales como tolueno o Metil ter-butyl éter.

Actualmente existen trabajos relacionados con la producción de este compuesto como el publicado por Liu et al., [1] donde se habla tanto de las reacciones químicas que se llevan a cabo como de las selectividades de sus productos. Sin embargo, la literatura no presenta información relevante relacionada con este proceso tales como los parámetros cinéticos involucrados en el proceso.

En este trabajo se busca determinar el valor de las constantes cinéticas k y E siendo estas la constante de velocidad y la energía de activación, respectivamente. Para esto, se usará el método de evolución diferencial con lista tabú (DETL por sus siglas en inglés) que es ejecutado en un par de programas que por un lado nos permiten simular el proceso mientras se iteran los datos para finalmente encontrar los valores de dichas constantes.

METODOLOGÍA

Revisando el esquema de reacciones involucradas en la producción de 2MTHF que se muestra en la figura 1, observamos que el número de variables utilizadas son 10 correspondientes al par de constantes cinéticas (k y E), presentes en las 5 reacciones.

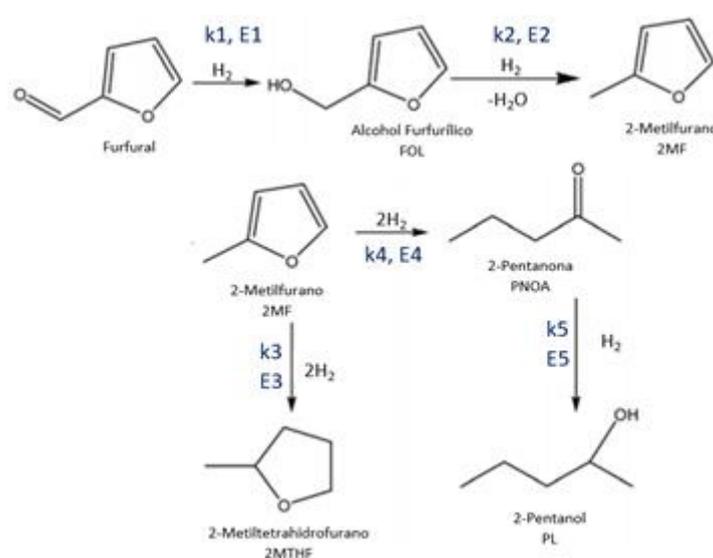


Figura 1. Mapa de reacciones involucradas en el proceso, con sus respectivas variables cinéticas de interés

Para determinar los flujos de alimentación, tomamos los resultados del trabajo realizado por Nhien et al. [3] en el cual se realiza un diseño y optimización de biorrefinerías para la producción de furfural, donde se reporta un valor de producción de 6207.3 kg/hr el cual fue considerado como nuestro valor del flujo de furfural mientras que para el flujo de hidrógeno se usó la relación reportada por Liu et al., [1]. Con dichos valores se obtuvieron los flujos teóricos reportados en la tabla 1.

Tabla 1. Flujos teóricos de salida

Entrada		Salida		
Compuesto	Kmol/hr	Compuesto	Selectividad [1]	Kmol/hr
Furfural	64.6018	2MTHF	0.873	56.3973714
H2	542.65512	2MF	0.061	3.9407098
		PL	0.049	3.1654882
		FOL + PNOA	0.017	1.0982306

Se llevó a cabo la implementación del método DETL, su uso trae consigo una serie de ventajas tales como presentar una convergencia más rápida además de un menor esfuerzo y tiempo computacional para resolver problemas lineales y no convexos [5]. Además, los resultados de la aplicación de este método han demostrado ser un éxito en diversos problemas de la ingeniería química.

Para la aplicación del método, se trabajó con un esquema híbrido entre Aspen Plus V11 y Microsoft Excel, usando el editor “Visual Basic” como interfaz entre ambas partes. En Aspen Plus se planteó el sistema con las respectivas reacciones, y es donde se especifican las constantes cinéticas y condiciones de operación. Para esta simulación, de acuerdo con los tipos de compuestos implicados se utilizó el método termodinámico “NRTL”. Además, se trabajó con un reactor del tipo CSTR operando a 1MPa y 180°C. Por otro lado, Microsoft Excel se utilizó como la interfaz entre los dos programas y como base de datos donde se especifica el valor de los flujos de salida teóricos los cuales se compararán con los valores extraídos de Aspen.

Una vez establecido el algoritmo, se establecen los límites de las variables de optimización. Este paso es crucial para poder ajustar los valores cinéticos, por ello se estableció un criterio para redefinir los valores de estos límites. Si el algoritmo encontraba individuos con un error en la sumatoria de los flujos menor a 0.01 se continuaba con la optimización, de no ser así se redefinían los límites tomando en cuenta los mejores resultados. La metodología se resume en la Figura 2.

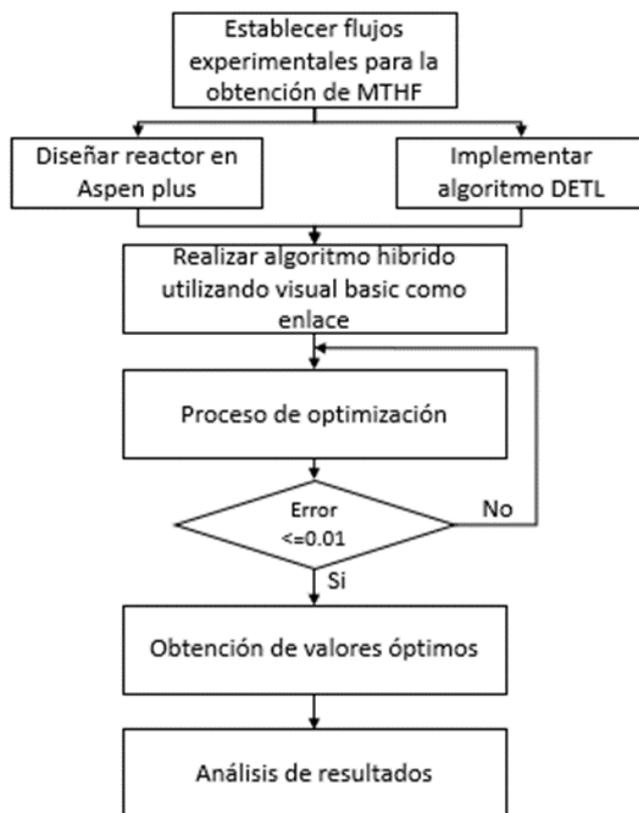


Figura 2. Pareto de optimización

RESULTADOS

En la Figura 3 se muestra el Pareto de optimización donde se observa que a lo largo de las generaciones realizadas se presentaron una gran variedad de valores de error. Podemos notar que antes de las 1000 generaciones es donde se presenta una mayor variabilidad en los errores presentándose valores más dispersos y alejados del cero, sin embargo, a partir de este número de generaciones, los errores reportados se fueron normalizando, marcando una tendencia más dirigida hacia el cero lo que representa que el algoritmo a medida que avanza encontrando distintos valores que se acercaban a cumplir la función objetivo.

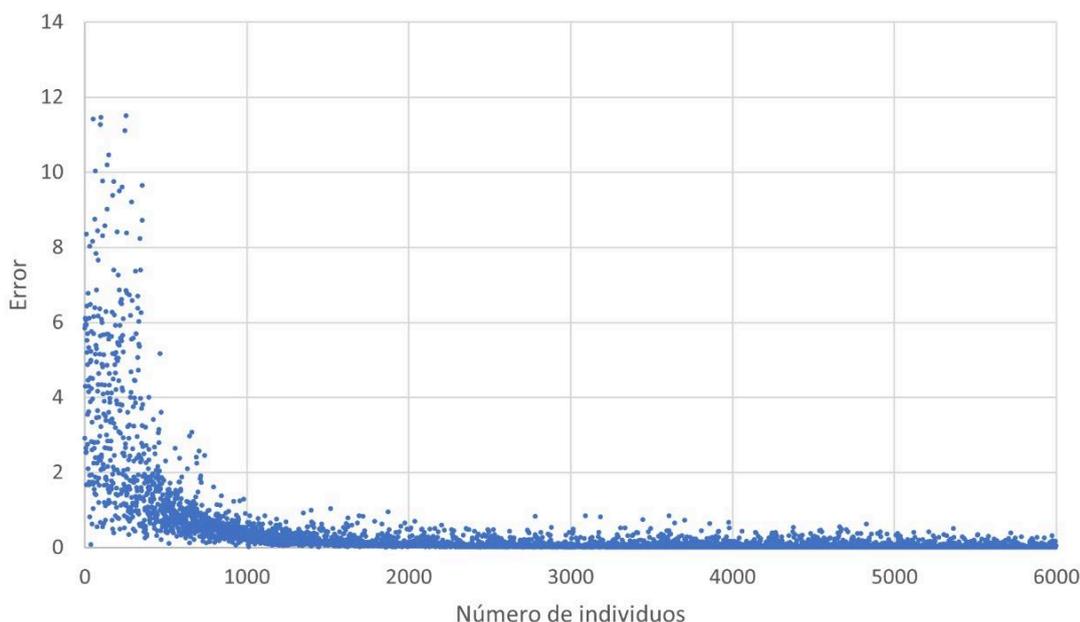


Figura 3. Resultados de la optimización

Finalmente, dentro de las 6000 generaciones encontramos un grupo de valores óptimo donde el error es el más pequeño lo cual nos indican que para cada una de las variables cinéticas, se ha conseguido que, como se muestra en la Figura 4, las diferencias entre los flujos teóricos y experimentales sean prácticamente nulas, presentando un error de 1.47×10^{-3} , dichos valores de las constantes cinéticas están expresados en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores de las constantes cinéticas en el óptimo.

No.	k	E [cal/mol]
1	1716.51	5415.59
2	284.138	7426.57
3	440.219	11416
4	209.968	13091.4
5	207.972	12112.8

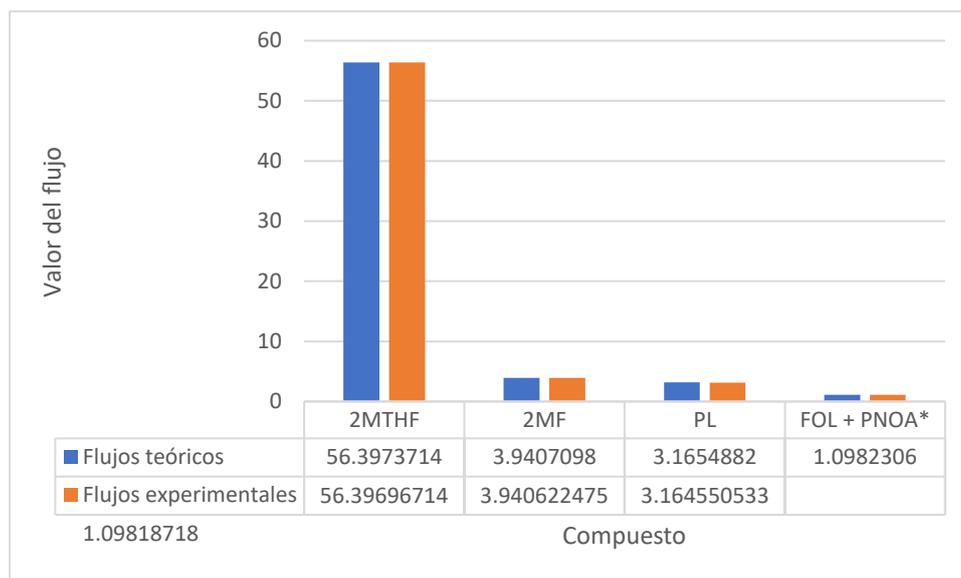


Figura 4. Gráfico comparativo entre flujos teóricos y flujos experimentales.
 *Flujo FOL=0.0829448, flujo PNOA=1.01524238 [kmol/hr]

En tanto a los resultados obtenidos se puede destacar que la primera reacción es la que ocurre más rápido esto debido a que tiene los mayores valores de k y los menores valores de la energía de activación. Tanto el compuesto de interés 2MTHF como la PNOA se obtienen a partir del intermediario 2M, si se observan los valores obtenidos en la ecuación 3 y 4, se puede visualizar que se favorece la formación de 2MTHF ya que tiene mayores valores de k y una menor energía de activación. Por tanto, esto explica porque en el perfil final se logra obtener una mayor concentración de 2MTHF.

CONCLUSIONES

La aplicación del método DETL se llevó a cabo de manera exitosa logrando conseguir los valores de las constantes cinéticas respetando las selectividades de los productos con un error de 1.47×10^{-3} .

El conocer estas variables cinéticas nos abren paso a la búsqueda y optimización de nuevos procesos para la producción del 2MTHF. Además, nos ayudan a comprender de que forma se llevan a cabo las reacciones y la importancia de cada una de ellas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

EJEMPLOS DE FORMATO:

[1] Liu, P., Luyang, S., Xinxin, J., Chen, Z., Wei, Z., Yongji, S., Hong, W., Cuiqing, L. (2020). "Efficient one-pot conversion of furfural into 2-methyltetrahydrofuran using non-precious metal catalysts", *Elsevier*, 490, 110951.

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

[2] Pace, V., Hoyos, P., Domínguez de María, P., Alcántara, A. (2012). “2-Methyltetrahydrofuran (2-MeTHF): a biomass-derived solvent with broad application in organic chemistry”, *ChemSusChem*, 5, (8), 1369-1379.

[3] Long, N. V. D., Kim, S., & Lee, M. (2016). “Design and optimization of intensified biorefinery process for furfural production through a systematic procedure”, *Biochemical engineering journal*, 116, 166-175.

[4] Romero-García, A. G., Prado-Rúbio, O. A., Contreras-Zarazúa, G., Ramírez-Márquez, C., Segovia-Hernández, J. G. (2019). “Simultaneous design and controllability optimization for the reaction zone for furfural bioproduction. In Computer Aided Chemical Engineering”, *Elsevier*, (46), 133-138.

Optimización de una Columna de Destilación Catalítica para producción de Bioturbosina considerando Aspectos Económicos y de Control

Gabriel Contreras Zarazúa^{a*}, Eduardo Sánchez Ramírez^b, Juan Gabriel Segovia Hernández^b, Juan José Quiroz Ramírez^a.

Berenice Gómez-Almanza ^a, Juan Luis Pérez-González ^a, Rodrigo González-Gaona ^{b,*}

^aConacyt, Ciatec A.C. Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitiva, Leon, Guanajuato, Mexico 37545.

^bUniversidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. gago_9014@hotmail.com

RESUMEN

En este trabajo se desarrolló el diseño y optimización simultánea de un proceso intensificado para producción de jet fuel, por el proceso ATJ. El proceso intensificado consiste en una columna de destilación reactiva catalítica. Dicho proceso integra las etapas de oligomerización, hidrogenación y purificación en un solo equipo. El proceso de diseño y optimización simultánea se realizó usando el algoritmo de evolución diferencial con lista tabu (DETL). Como funciones objetivo se consideraron el costo anual total y el número de condición, para evaluar cuestiones de costos y propiedades de control, respectivamente. El proceso optimizado se contrastó contra el proceso intensificado original. Los resultados indican que el proceso optimizado reduce en un 30% los consumos energéticos y en hasta un 80% el costo anual total, debido a reducciones en consumos energéticos y dimensiones del equipo. En cuanto a las propiedades de control, se observa que el proceso optimizado tiene un número de condición 82.52 contra 915,000 del proceso original. Esto se traduce, en que el proceso optimizado soporta mejor perturbaciones lo que facilita el control y se asegura de una manera más fiable la calidad de la bioturbosina.

Palabras clave: Optimización estocástica, Evolución diferencial, Intensificación de procesos, Destilación reactiva, Jet fuel.

INTRODUCCIÓN

Actualmente el mundo se enfrenta a demandas energéticas cada vez mayores. Este crecimiento en la energético está asociado a un aumento en la producción de bienes y servicios, incremento en la calidad de vida, entre otros. Desafortunadamente, la mayoría de la energía producida por el ser humano deriva de la quema de fuentes fósiles como el carbón, gas natural, gasolinas etc., lo cual ocasiona severos problemas medio ambientales, debido a la emisión de gases de efecto invernadero como el CO₂. El dióxido de carbono es el principal gas efecto invernadero, estudios recientes revelan que para el año 2018 su

concentración en la atmosfera había pasado de 280 a 408ppm, tomando el año 1900 como referencia. Este incremento significa un aumento 0.8°C en la temperatura global de la tierra y se espera que para el año 2100 el incremento de la temperatura alcance los 5°C (Bains et al., 2017).

Con el fin de reducir sus emisiones, diversas industrias como el sector de la aviación han empezado a desarrollar tecnologías para reducir sus emisiones de CO_2 . La industria del avión es responsable del 2.6% de las emisiones de CO_2 y se esperara que para mediados de siglo esta industria emita el 20.2% de las emisiones de CO_2 . Una alternativa interesante para reducir las emisiones contaminantes es reemplazar el combustible de avión (también llamado turbosina) el cual proviene de fuentes fósiles, por bioturbosina el cual es un combustible renovable derivado de residuos de biomasa, aceites vegetales, etc. Diversos procesos y biomasas han sido propuestos para producir bioturbosina, sin embargo, una alternativa poco explorada es el proceso ATJ (Alcohol to Jet fuel), el cual consiste en convertir residuos lignocelulósicos en azúcares, los cuales son transformados a hidrocarburos (Wang and Tao, 2016). Al igual que lo que ocurre con otras alternativas para producir bioturbosina o incluso otros biocombustibles, la viabilidad económica sigue siendo el principal reto de este tipo de tecnologías. En el caso del proceso ATJ una etapa crítica y que demanda una gran cantidad de energía es la etapa de oligomerización e hidrogenación, ya que es en esta etapa donde se producen y separan los hidrocarburos. En ese sentido, la intensificación de procesos acoplada con técnicas rigurosas de optimización puede ayudar a disminuir el consumo energético y costes de operación de los procesos, a fin de aumentar la rentabilidad y adopción de estos procesos. En este trabajo se propone un proceso intensificado basado en destilación reactiva catalítica para sustituir a las actuales etapas de oligomerización e hidrogenación en el proceso ATJ. Esta columna es diseñada y optimizada simultáneamente, usando el método de optimización estocástica de evolución diferencial con lista tabú (DETL). La minimización del del costo anual total es propuesta como función objetivo económica. Por otro lado, debido a que la columna catalítica es notablemente más compleja y con el fin de asegurar una operación viable de este equipo, la minimización del número de condición es propuesta como segunda función objetivo a fin de evaluar las propiedades de control.

METODOLOGÍA

Primeramente, el proceso intensificado de destilación reactiva catalítica es generado a partir del proceso convencional. Como se aprecia en la Figura 1., el proceso convencional consta de 2 zonas reactivas, la primera es la etapa de oligomerización, donde el etileno es alimentado a un reactor de lecho fijo, posteriormente los productos del reactor los cuales son; compuestos ligeros (C_2 - C_5) y oligómeros (C_6 - C_{17}) son alimentados a una columna de destilación, donde los compuestos ligeros son recirculados, mientras los oligómeros pesados son enviados a la zona de hidrogenación. En esta segunda zona de reacción, los oligómeros son transformados a alcanos mediante reacciones de hidrogenación, las cuales se llevan a cabo en un segundo reactor de lecho fijo. Finalmente, los productos del reactor de hidrogenación son separados en tres fracciones principales, ligeros, jet-fuel y diesel (Wang and Tao, 2016).

La columna catalítica integra estas etapas de separación y reacción en un solo equipo, la zona de oligomerización se encuentra en la parte superior de la columna, es en esta zona donde se obtiene la distribución adecuada de hidrocarburos. Los compuestos que descienden de esta zona son transformados en olefinas (alcanos), los cuales al mismo tiempo que son producidos son separados en las 3 fracciones principales. El modelado matemático de este proceso intensificado se realizó en el software Aspen Plus, considerando un flujo de entrada de etileno de 2100kg/hr. Los modelos cinéticos se tomaron de (Goortani et al., 2015). Como modelo termodinámico se seleccionó el NRTL-RK (Interan, 2021). Es importante mencionar, que diseño original de la columna intensificada fue obtenido mediante un análisis de sensibilidad de algunos parámetros importantes de diseño, como lo son hold ups, número de etapas, etapas de alimentación, etc.

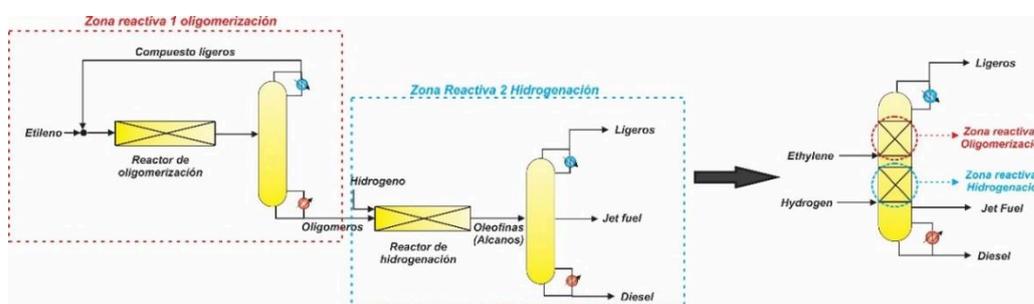


Figura 1. Intensificación del proceso A13.

El diseño preliminar de la columna catalítica servirá como punto inicial para el algoritmo de optimización. Como ya se mencionó anteriormente, el costo anual total (TAC) y el número de condición fueron las funciones objetivo a minimizar. El costo anual total consiste en la suma de los costos de capital anualizados, más los costos de operación. Como se muestra a continuación:

Costo de capital

$$TAC = \text{Costo de operación} + \text{Costo de capital} \cdot \text{Tiempo de recuperación} \quad (1)$$

El TAC fue calculado usando el método de Guthrie. Acero inoxidable fue considerado como material de construcción, además de considerar un periodo de recuperación de 10 años. Los parámetros necesarios para estimar el costo de la columna fueron tomados del trabajo previo de (Turton et al., 2018). Por otro lado, los costos de operación están calculados considerando 8500 horas de operación anuales para el proceso. Agua de enfriamiento (0.355USD/GJ), electricidad (16.8 USD/kwh) y Fired heat (20.92 USD/GJ) fueron los servicios considerados (Turton et al., 2018).

El número de condición fue calculado, mediante la descomposición de valores singulares de la matriz de ganancias relativas, de acuerdo con la ecuación 2:

$$K = W \cdot S \cdot V^T \quad (2)$$

Donde K es la matriz de ganancias relativas, W y V son matrices unitarias y S es la matriz de valores singulares. De la matriz S se toma el valor singular máximo (σ^*) y el valor singular mínimo, para calcular el número de condición como se muestra continuación:

$$\gamma = \frac{\sigma^*}{\sigma_*} \quad (3)$$

Es importante mencionar, que el número de condición representa la sensibilidad del sistema cuando es sometido a perturbaciones. Por lo tanto, un número de condición grande representa que el sistema es susceptible a perturbaciones y puede resultar en sistemas dinámicos inestables, por esta razón valores pequeños de número de condición ($1000 >$) son recomendados (Contreras-Zarazúa et al., 2017).

Con base a los anterior, el problema de optimización puede plantearse matemáticamente como la ecuación 4.

$$\begin{aligned} \min Z &= [TAC\gamma] \\ \text{Sujeto a } & y_i \leq u_i \\ & \geq TE_i \end{aligned} \quad (4)$$

Las funciones objetivo están restringidas a cumplir con las especificaciones de puntos de ebullición mínimos (TE_i) para cada uno de los productos los cuales son 220°C para el jet fuel y 300°C para el diesel. Por otro lado, el problema de optimización también está sujeto a cumplir con cantidades mínimas de producción (u_i) las cuales fueron, 1000kg/hr para el jetfuel y 100kg para diesel. Como variables de decisión se tomaron, el número de etapas, etapas de alimentación, número de etapas reactivas, valores de hold up, relación de reflujo y carga térmica.

Evolución diferencial con lista tabú (DETL por sus siglas ingles), el método matemático utilizado para resolver el problema de optimización. El DETL es un método de búsqueda directa basado en poblaciones, especialmente diseñado para funciones no continuas y altamente no lineales. Este método consta de las 4 etapas características de los algoritmos evolutivos: generación de la población inicial, mutación, cruce y selección. Su principal característica es su capacidad para evitar o visitar zonas con malos valores de funciones objetivo, esto mediante el seguimiento de las búsquedas previas haciendo uso de la lista tabú, mejorando su eficiencia computacional (Srinivas and Rangaiah, 2007). Los parámetros usados para el algoritmo son: tamaño de población: 120, número de generaciones: 1250, tamaño de lista Tabú 60, factor de cruce: 0.8, factor de mutación: 0.3 y radio tabú de 0.01. Los parámetros del algoritmo fueron tomados de (Contreras-Zarazúa et al., 2017). Finalmente, la implementación de la estrategia de optimización involucra una plataforma híbrida, donde, el algoritmo de optimización está programado en Excel y el modelo matemático del proceso y resolución de ecuaciones se encuentra en Aspen Plus.

RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos durante la etapa de diseño y optimización simultánea de la columna catalítica. A fin de determinar la solución con el mejor equilibrio entre ambas funciones objetivo, se usó la metodología de punto de utopía para determinar la solución, la cual requiere del análisis de frente de Pareto. El frente de Pareto del se muestra en la Figura 2

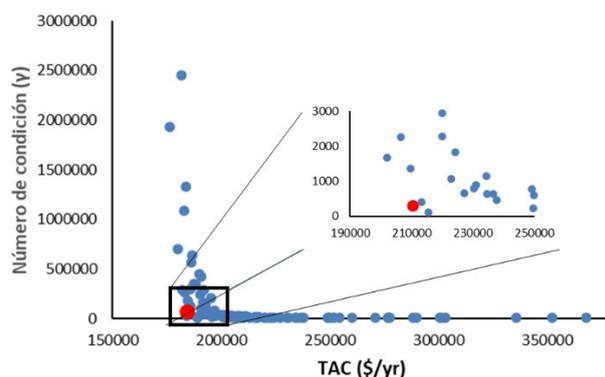


Figura 2. Frente de Pareto columna catalítica

Como se puede apreciar en la Figura 2 el rango en el que oscilan los número de condición para las diferentes soluciones es bastante amplio, van desde 11.34 hasta 2,500 000 lo que indica que el diseño que los parámetros de diseño de la columna tienen un impacto bastante fuerte sobre la contabilidad del proceso. Note la presencia de un punto rojo en el Pareto., este punto corresponde a la solución con el mejor trade-off entre ambos objetivos. La Tabla 1 muestra la comparativa del proceso intensificado original, contra el proceso obtenido mediante la técnica de optimización.

Tabla 1. Parámetros de diseño de proceso intensificado convencional vs optimizado

Variable de diseño	Proceso Original	Proceso Optimizado
Numero de etapas	80	29
Etapas alimentación etileno	15	21
Etapas alimentación hidrogeno	59	26
Etapas reactivas Oligomerización	2-29	12-16
Etapas reactivas Hidrogenación	30-59	17-25
Relación de reflujo	100	51.55
Carga térmica (kW)	170	117.642
Flujo Hidrogeno (kg/hr)	22	20.6417
Diámetro (m)	4	1.39
Numero de condición	915,000	82.58
TAC	1,028,913.875	215,553.212

Como se puede apreciar en la Tabla 1 el proceso intensificado muestra mejores resultados, con respecto a su parte original. Se puede apreciar que el proceso optimizado presenta ahorros energéticos de un 30% mientras que los ahorros en costos son del casi 80%. En cuanto a las propiedades de control se puede apreciar que el proceso optimizado tiene un número de condición de 82.58 contra 915,000 del proceso original. Eso quiere decir que el proceso optimizado es menos sensible a cambios o perturbaciones. Esto se debe a las etapas reactivas y diámetros de la columna. Las reacciones de oligomerización e hidrogenación son muy sensibles a los cambios de temperatura, por lo que tener muchas

etapas reactivas para estas zonas implica que es más fácil que el proceso tenga una perturbación de temperatura, lo que afecta de manera dramática la conversión de los hidrocarburos. En cambio, el proceso optimizado ha determinado que no es necesario tener muchas etapas reactivas para estas zonas, además el proceso de optimización ha identificado la localización óptima de las zonas reactivas de temperaturas de la columna, evitando así que el proceso sea sensible a perturbaciones.

CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolló el diseño y optimización simultánea de una columna de destilación reactiva para producción de jet fuel por el proceso ATJ. Las funciones objetivo fueron, el costo anual total y el número de condiciones, los cuales se usaron para evaluar los costos y propiedades de control. Los resultados indican que el algoritmo de optimización es capaz de generar un diseño que el cual tiene un 30% de ahorro de energía y un 80% de ahorro en costos con respecto al proceso original. Así mismo, el proceso optimizado tiene un número de condiciones de 82.58 el cual es un valor notablemente más bajo que el proceso original. Los resultados indican, que el diseño de un proceso usando técnicas robustas de optimización generan procesos notablemente más baratos y eficientes. Como trabajo a futuro se propone la optimización del proceso convencional y un análisis riguroso de control, a fin de tener un panorama más amplio, de las mejoras del proceso optimizado.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bains, P., Psarras, P., Wilcox, J., 2017. CO₂ capture from the industry sector. *Prog. Energy Combust. Sci.* 63, 146–172. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2017.07.001>
- Contreras-Zarazúa, G., Vázquez-Castillo, J.A., Ramírez-Márquez, C., Segovia-Hernández, J.G., Alcántara-Ávila, J.R., 2017. Multi-objective optimization involving cost and control properties in reactive distillation processes to produce diphenyl carbonate. *Comput. Chem. Eng.* 105. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.11.022>
- Goortani, B.M., Gaurav, A., Deshpande, A., Ng, F.T.T., Rempel, G.L., 2015. Production of isooctane from isobutene: Energy integration and carbon dioxide abatement via catalytic distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 54, 3570–3581. <https://doi.org/10.1021/ie5032056>
- Interan, R.R., 2021. OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS INTENSIFICADOS PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOTURBOSINA A TRAVÉS DE ALCOHOLES DE FORMA SUSTENTABLE. Universidad de Guanajuato.
- Srinivas, M., Rangaiah, G.P., 2007. Differential evolution with tabu list for solving nonlinear and mixed-integer nonlinear programming problems. *Ind. Eng. Chem. Res.* 46, 7126–7135. <https://doi.org/10.1021/ie070007q>
- Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., 2018. Analysis, synthesis and design of chemical processes. Pearson Education., 1-1200.
- Wang, W.C., Tao, L., 2016. Bio-jet fuel conversion technologies. *Renew. Sustain. Energy Rev.* 53, 801–822. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.09.016>

Metodología híbrida para sintonización de algoritmos de optimización global estocásticos con Matlab-R

Julio César Sánchez-Rendón^a, Luis Gerónimo Matallana^b, Fernando Israel Gómez-Castro^c, Oscar Andrés Prado-Rubio^{a,*}.

^a*Grupo de Investigación en Aplicación de Nuevas Tecnologías (GIANT), Universidad Nacional de Colombia, Sede Manizales, campus la Nubia. Km 9 vía al Aeropuerto La Nubia C.P 170003, Colombia.*

^b*Grupo de Investigación en Alimentos y Agroindustria, Universidad de Caldas, Calle 65, No. 26-10, C.P. 170002, Colombia*

^c*Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N; C.P. 36050, México.*

Correo de autor de contacto: oaprador@unal.edu.co.

RESUMEN

Las metaheurísticas son algoritmos de optimización global estocástica que podrían resolver el problema de estimación de parámetros de manera eficiente y rápida. Estos optimizadores contienen hiper-parámetros que controlan su comportamiento en el espacio de búsqueda y, por tanto, deberían ser sintonizados para mejorar su desempeño. En este trabajo se presenta una metodología híbrida de sintonización por interconexión de Matlab[®] y R[®] a través de los paquetes “R.matlab” y “irace”. Como caso de estudio se tiene el problema de estimación de parámetros para un modelo matemático de bioproducción de xilitol altamente no lineal con 5 estados y 11 parámetros. Se comparó el desempeño de metaheurísticas (i.e. algoritmos genéticos, optimización por enjambre de partículas y templado simulado) sintonizadas con la metodología propuesta con respecto a sus configuraciones por defecto. Se encontró que la sintonización mejora significativamente la reproducibilidad y robustez en la solución del problema de optimización. Finalmente, se proponen directrices para la sintonización de algoritmos de optimización global estocásticos en Matlab[®].

Palabras clave: Optimización estocástica, sintonización de optimizadores, estimación de parámetros, bioproducción de xilitol.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, se presentan diversas problemáticas como cambio climático, pobreza, contaminación, pérdida de bosques y biodiversidad, hambruna, escasez de fuentes de energía, entre otros, que se ven acentuadas por la actividad antrópica ligada a una creciente población mundial. La biotecnología puede ofrecer soluciones eficientes, económicamente viables y ambientalmente amigables a dichas problemáticas (Montana-

Hoyos y Fiorentino, 2016). En este sentido, se hace necesario entender los sistemas biológicos de forma causal, siendo una aproximación cada vez más utilizada el modelamiento matemático. Sin embargo, los modelos matemáticos de sistemas biológicos y bioprocesos suelen exhibir una complejidad considerable, debida principalmente a no linealidades y un elevado número de ecuaciones y/o parámetros, contrastada con la falta de información de datos experimentales. Como consecuencia, el problema de estimación de parámetros en este tipo de modelos matemáticos se convierte en una optimización no convexa, afectando directamente la capacidad predictiva del modelo matemático y su interpretabilidad (Koutinas et al., 2012). Los algoritmos de optimización estocásticos, también llamados metaheurísticas, son una alternativa ampliamente usada para la solución de problemas de optimización no convexos, que han ganado popularidad por su facilidad de uso y eficiencia (Spall, 2012). No obstante, estos algoritmos cuentan con parámetros internos (hiper-parámetros) que deben ser sintonizados adecuadamente para darle velocidad y robustez al optimizador. La adecuada sintonización de los hiper-parámetros es de gran importancia en la optimización de modelos no convexos que presentan un número considerable de óptimos locales, tal como ocurre con los modelos que representan bioprocesos. Así, en este trabajo se expone una metodología para la sintonización automática robusta de algoritmos de optimización estocásticos en Matlab en interconexión con el software R y su paquete “irace”, probando la metodología en la optimización de un proceso biotecnológico.

METODOLOGÍA

Caso de estudio: bioproducción de xilitol

El xilitol es un azúcar de cinco carbonos usualmente empleado como edulcorante en reemplazo de la sacarosa; así mismo, presenta un amplio abanico de aplicaciones en las industrias alimenticia y farmacéutica como un aditivo multipropósito (Ur-Rehman et al., 2015). Sirisansaneeyakul *et al.* (2013) realizaron una serie de 22 experimentos en modalidad Semilotes repetidos para la bioproducción de xilitol. Estos experimentos cuantificaron el crecimiento diaúxico de *Candida magnoliae* en glucosa y xilosa, junto con la producción de xilitol en el transcurso del tiempo. La concentración de metabolitos fue medida con HPLC y la concentración de biomasa por gravimetría. La fermentación fue controlada a pH 7.0, 30°C, agitación de 300 rpm y tasa de aireación de 1.0vvm. El modelo matemático que describe este bioproceso está compuesto por 5 estados y 11 parámetros, en donde se consideran los fenómenos de inhibición de absorción de glucosa y xilosa, transporte intra y extracelular y estequiometría de la reacción de xilosa a xilitol (Tochampa *et al.*, 2015). La integración del modelo fue realizada con el algoritmo ode15s en Matlab[®] R2018.

Función objetivo y algoritmos de optimización

La función objetivo utilizada en esta investigación corresponde al tipo de mínimos cuadrados, la cual genera estimados no sesgados, eficientes y de máxima verosimilitud (Charaniya *et al.*, 2008). Los algoritmos de optimización utilizados son templado simulado (SA), Algoritmo genético (GA) y optimización por enjambre de partículas

(PSO) disponibles en el paquete de optimización global de Matlab® R2018. Estos optimizadores presentan diferentes métodos de búsqueda para encontrar el mínimo global de una función. Así, SA simula el enfriamiento de un cristal perfecto (4 hiper-parámetros), GA simula el proceso evolutivo (14 hiper-parámetros) y PSO simula el comportamiento de forrajeo de un grupo de animales (6 hiper-parámetros) (Sakawa, 2002; Poli *et al.*, 2007; Dowsland y Thompson, 2012).

Metodología híbrida para sintonización de metaheurísticas.

Esta metodología fue desarrollada por interconexión entre los lenguajes R® y Matlab®, a través del paquete “R.matlab” implementado en R®, el cual permite la ejecución de comandos en Matlab® desde R® (Bengtsson *et al.*, 2018). En este sentido R® es el lenguaje maestro y Matlab® el lenguaje esclavo. La sintonización se realizó con el paquete “irace”, el cual utiliza un algoritmo de *racing* iterativo (López-Ibáñez *et al.*, 2016). Este algoritmo genera configuraciones aleatorias de hiper-parámetros que luego son probadas en el problema de optimización y descartadas a través de la prueba F de Fisher.

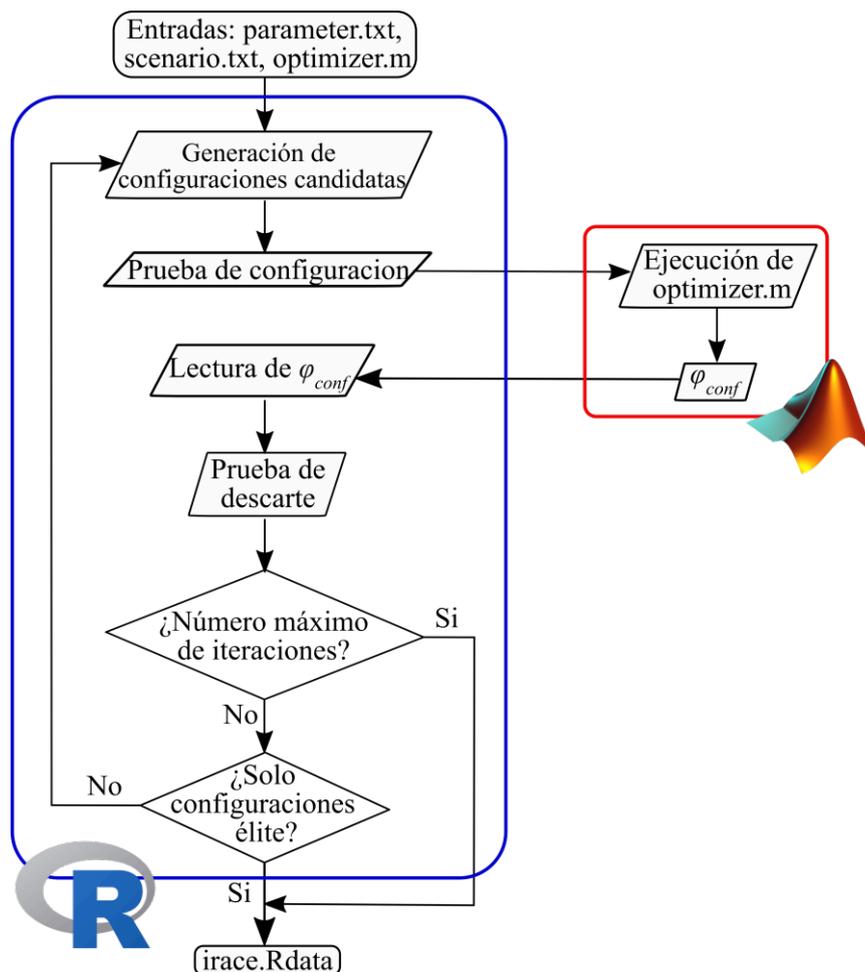


Figura 1. Metodología híbrida para la sintonización de optimizadores por interconexión de Matlab® y R®.

La Figura 1 presenta el diagrama de flujo de la metodología híbrida. Se requiere especificar los hiper-parámetros y sus tipos (parameter.txt), opciones de “irace”

(scenariotxt), problema de optimización junto con optimizador en Matlab (optimizar.m). El archivo irace.Rdata contiene información del proceso de sintonización y las configuraciones sintonizadas. Una vez que se obtienen las configuraciones sintonizadas, se realizaron 45 optimizaciones por metaheurística con el fin de evaluar su desempeño sobre el caso de estudio.

RESULTADOS

Los resultados generales del proceso de sintonización se muestran en la Tabla 1. Es posible observar similitudes en el desempeño de los optimizadores, específicamente en los valores mínimos de la función objetivo φ_{conf} . Lo anterior indica que durante el proceso de sintonización se encontraron configuraciones que pueden alcanzar la misma solución, posiblemente cercana al óptimo global. Sin embargo, los valores máximos de φ_{conf} presentan variaciones inclusive en ordenes de magnitud (GA respecto a SA y PSO), lo que indica que el proceso de sintonización se vio afectado por el mecanismo de búsqueda de las metaheurísticas, siendo más eficientes PSO y SA en comparación con GA. Así mismo, el número de configuraciones en los tres optimizadores difiere siendo nuevamente mayor en GA con respecto a PSO y SA. Lo anterior puede ser atribuido a la mayor cantidad de hiper-parámetros en GA, lo que probablemente aumenta la posibilidad de generar configuraciones no adecuadas para el optimizador en este caso de estudio específico.

Tabla 1. Resultados generales del proceso de sintonización.

Metaheurística	Indicadores	Valores
Templado simulado (SA)	Configuraciones generadas	119
	Valor máximo de φ_{conf}	20.49
	Valor mínimo de φ_{conf}	1.07
	Mejor configuración	105
	Esfuerzo computacional (s)	93852
Optimización con enjambre de partículas (PSO)	Configuraciones generadas	117
	Valor máximo de φ_{conf}	41.31
	Valor mínimo de φ_{conf}	1.31
	Mejor configuración	96
	Esfuerzo computacional (s)	54504
Algoritmo genético (GA)	Configuraciones generadas	158
	Valor máximo de φ_{conf}	4334
	Valor mínimo de φ_{conf}	1.04
	Mejor configuración	92
	Esfuerzo computacional (s)	235x10 ³

Nota: φ_{conf} valor de función objetivo.

En cuanto al esfuerzo computacional, los tres algoritmos presentaron valores diferentes siendo nuevamente el mayor GA, seguido de SA y finalmente, PSO. Dado que la parte del proceso de sintonización que requiere mayor tiempo corresponde a la solución del

problema de optimización específico con una configuración dada por “irace”, es posible afirmar que durante la sintonización el optimizador GA generaba combinaciones de parámetros del caso de estudio que llevaban a un sistema EDO divergente, haciendo más compleja la calibración del modelo matemático. Tomando en cuenta lo anterior, PSO y SA mostraron en general un desempeño superior a GA en este caso de estudio.

Se realizó una prueba para determinar la diferencia en el desempeño de los optimizadores con configuraciones por defecto y sintonizadas para este caso de estudio. La dispersión de los φ_{conf} obtenidos se muestran en la Figura 2. Se observa que el optimizador GA presenta el peor desempeño siendo incapaz de alcanzar el óptimo global tanto en su configuración por defecto como sintonizada. Con respecto a PSO y SA ambos tienen un desempeño superior con sus configuraciones sintonizadas, mostrando una dispersión concentrada en valores φ_{conf} inferiores a 5. Adicionalmente, PSO presenta un mejor desempeño comparado con SA, al presentar una mediana (línea roja) en un valor más bajo, lo que indica que se tiene mayor probabilidad de alcanzar el óptimo global. Estos resultados se corresponden con las conclusiones teóricas alcanzadas por Wolpert y Macready (1997). A partir de una demostración matemática se mostró que no existen optimizadores “universales”, es decir, un optimizador particular tendrá un mejor o peor desempeño según el problema particular (como sucedió con GA). Adicionalmente, se demostró que, aunque el optimizador pueda funcionar, es necesario sintonizarlo para garantizar un buen desempeño (como sucedió con PSO y GA).

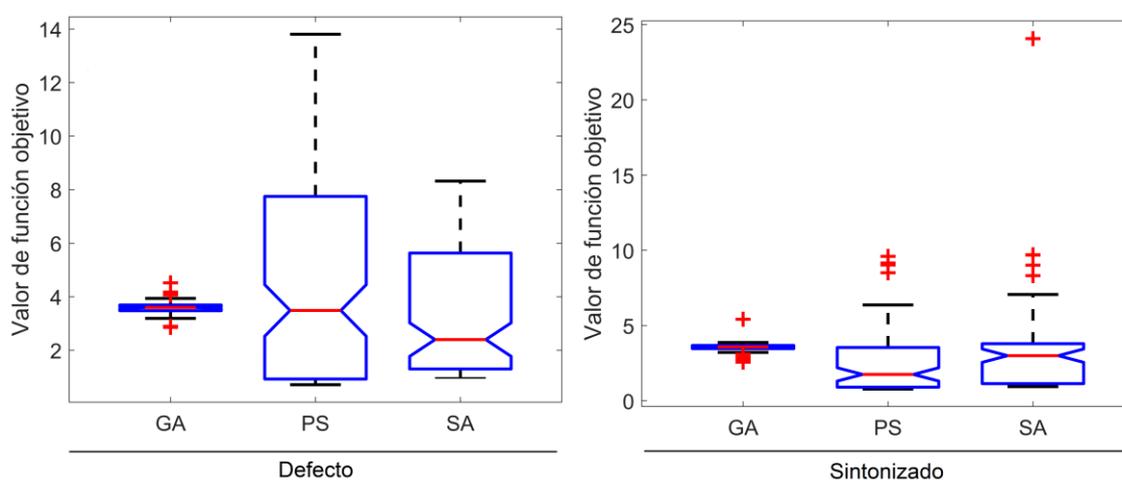


Figura 2. Comparación de desempeño entre optimizadores con configuraciones por defecto y sintonizadas.

CONCLUSIONES

Se logró la construcción de una metodología híbrida para la sintonización automática de metaheurísticas en Matlab® mediante interconexión con R® y su paquete “irace” validada con un modelo matemático altamente no lineal de bioproducción de xilitol.

Adicionalmente, se demostró que diferentes optimizadores pueden presentar desempeños variables en el mismo problema de optimización y que la sintonización mejora significativamente el tiempo y la calidad de la solución obtenida.

Tomando en consideración los resultados, en este trabajo se plantean las siguientes directrices para sintonización de algoritmos de optimización estocásticos:

1. Probar el desempeño de distintos optimizadores con sus parámetros por defecto en el problema de optimización específico.
2. Sintonizar por lo menos dos algoritmos que presenten capacidad para resolver el problema específico mediante la metodología híbrida de la Figura 1.
3. Seleccionar el optimizador sintonizado con menores dispersión y mediana en los valores de función objetivo (indica mayor robustez y reproducibilidad).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bengtsson, H., Jacobson, A., Riedy, J. (2018). R.matlab: Read and Write MAT Files and Call MATLAB from Within R. ur: <https://cran.r-project.org/web/packages/R.matlab/R.matlab.pdf>
- Charaniya, S., Hu, W.-S., Karypis, G. (2008). Mining bioprocess data: opportunities and challenges. *Trends in Biotechnology*, 26, 690-699.
- Dowland, K.A., Thompson, J. (2012). Simulated annealing, En G. Rozenberg, T. Bäck y J.N. Kok (Eds.), *Handbook of Natural Computing*. (pp. 1623–1655). De Springer.
- Koutinas, M., Kiparissides, A., Pistikopoulos, E.N., Mantalaris, A. (2012). Bioprocess systems engineering: transferring traditional process engineering principles to industrial biotechnology. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 3, e201210022.
- López-Ibáñez, M., Dubois-Lacoste, J., Pérez Cáceres, L., Birattari, M., Stützle, T. (2016). The irace package: Iterated racing for automatic algorithm configuration. *Operations Research Perspectives*, 3, 43-58.
- Montana-Hoyos, C., Fiorentino, C., (2016). Bio-Utilization, Bio-Inspiration and Bio-Affiliation in Design for Sustainability: Biotechnology, Biomimicry and Biophilic Design. *The International Journal of Designed Objects*, 10, 1-18.
- Poli, R., Kennedy, J., Blackwell, T. (2007). Particle swarm optimization. *Swarm Intelligence*, 1, 33-57.
- Sakawa, M., (2002). Genetic Algorithms for 0–1 Programming. En M. Sakawa (Ed.), *Genetic Algorithms and Fuzzy Multiobjective Optimization*. (pp. 29-52). De Springer.
- Spall, J.C. (2012). Stochastic Optimization. En J.E. Gentle, W.K. Härdle y Y. Mori (Eds.), *Handbook of Computational Statistics: Concepts and Methods*. (pp. 173-201). De Springer.
- Sirisansaneeyakul, S., Wannawilai, S., Chisti, Y., (2013). Repeated fed-batch production of xylitol by *Candida magnoliae* TISTR 5663. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 88, 1121–1129.
- Ur-Rehman, S., Mushtaq, Z., Zahoor, T., Jamil, A., Murtaza, M.A., (2015). Xylitol: A Review on Bioproduction, Application, Health Benefits, and Related Safety Issues. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 55, 1514-1528.
- Tochampa, W., Sirisansaneeyakul, S., Vanichsriratana, W., Srinophakun, P., Bakker, H.H.C., Wannawilai, S., Chisti, Y., (2015). Optimal Control of Feeding in Fed-Batch Production of Xylitol. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54, 1992-2000.
- Wolpert, D.H., Macready, W.G. (1997). No free lunch theorems for optimization. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 1, 67-82.



**OPTIMIZACIÓN
ESTADÍSTICA
APLICADA**

ACADEMIA DE INGENIERIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA
A LA INGENIERÍA QUÍMICA

AÑO 2014

Política inteligente para la operación de un sistema energético con fuentes renovables

Valeria M. Domínguez-Pérez ^a, Jorge L. Tena-García ^{a,*}, Camila Terán-Quevedo ^{b,*} y Luis F. Fuentes-Cortés ^a

*Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Celaya, Antonio García Cubas Pte #600 esq. Av. Tecnológico, Celaya, Guanajuato. México. *jorge.tena@itcelaya.edu.mx*

RESUMEN

Los sistemas energéticos con fuentes renovables (SER) involucran el análisis de datos de variables ambientales y de comportamientos de consumo para evaluar su factibilidad técnica y económica. Por otro lado, el control de los SER se vuelve complejo cuando tienen flexibilidad operativa para cada periodo y escenario.

El caso de estudio que se presenta consiste en proponer una política de operación inteligente (POI) de un SER de operación flexible con interconexión diseñado para un edificio de estudiantes residentes en la ciudad de Monterrey, N.L., mediante un algoritmo de optimización en Julia (AO) que tiene como función objetivo minimizar el costo anual total (CAT) que emplea mediciones históricas in situ.

El AO genera n políticas de operación (PO) para m escenarios, éstas fueron analizadas con la técnica de agrupamiento K-means para identificar los patrones de las características operativas más representativas del RES. Al modificar los parámetros para K-means, se pueden observar como las POI van acercándose al patrón principal de comportamiento de las PO. Finalmente, se presenta algunas propuestas de POI dependientes de la temporada que cumplen con los criterios para considerarse un posterior objeto de estudio.

Palabras clave: Ciencia de datos, K-means, Operación inteligente de Baterías, energía solar, energía eólica.

INTRODUCCIÓN (Times New Roman 12 pt, negritas)

Realizar análisis de datos en problemas de ingeniería no es algo nuevo, ya que se realiza con frecuencia para mejorar productos de consumo, manufactura, mercadotecnia, investigación científica, etc. (Morales, 2015). Sin embargo, ante la necesidad de obtener resultados más precisos se requiere recabar, almacenar y procesar gran cantidad de información, lo cual implica un enorme esfuerzo humano y computacional para ser interpretada cuando no se aprovechan herramientas de análisis y reconocimiento. (TenaGarcía, García-Alcala, López-Díaz, & Fuentes-Cortés, 2021).

Los sistemas energéticos que utilizan energía renovable (SER) son susceptibles a esta problemática, debido al impacto de la intermitencia de los recursos, la variabilidad de las fuentes renovables, variables meteorológicas y la demanda energética. Además, si se busca un diseño que alcance altos desempeños, mediante la optimización, la solución incluye políticas flexibles de compra-venta de energía y de operación de baterías. Para definir la operación óptima de los sistemas de almacenamiento es primordial para asegurar un desempeño correcto del sistema considerar que el comportamiento debe tener

ciertas cualidades y principalmente describir, en lo posible una curva con carga y descarga constante (Chen, et al. 2011).

En este trabajo se busca identificar mediante análisis de datos y técnicas de agrupamiento k-means las políticas inteligentes de operación de las baterías para dos casos de estudio: SER interconectados y aislados de la red principal. Como resultado de modificar algunos parámetros relacionados con los sistemas de almacenamiento al momento de correr una optimización se presentan los resultados de la función objetivo y el comportamiento del estado de carga de batería que consiste en el modelo o política de operación de las baterías.

METODOLOGÍA

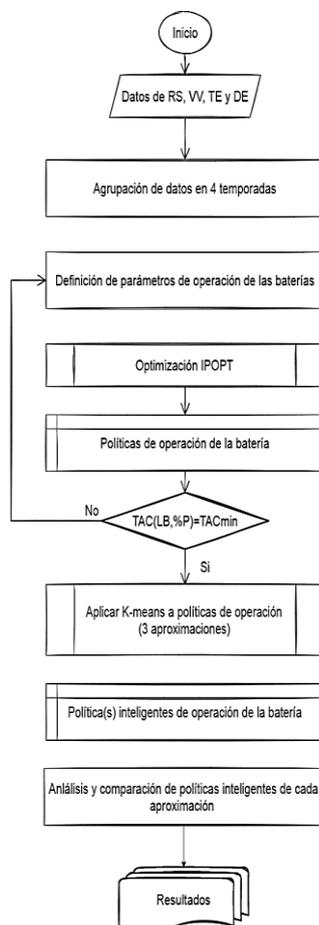


Figura 1. Diagrama de flujo proceso de cálculo de políticas inteligentes

Se utilizan los resultados provenientes de modelos de optimización para SER interconectados y en isla, donde la política de operación de las baterías es flexible (POF) y se ajusta a los datos de los parámetros de entrada, éstas POF son analizadas, para después aplicarles el método de agrupamiento de datos k-means bajo tres criterios, y seleccionar así las mejores políticas de operación con base en los patrones obtenidos.

Estas políticas de operación inteligentes (POI) son representativas de los resultados provenientes de los modelos de optimización.

Los tres criterios se definen más adelante, en esta misma sección, pero los resultados indicaron que la precisión del patrón se incrementa al incrementar el número de clusters. La figura 1, sintetiza en un diagrama de flujo la secuencia para obtener los resultados que se muestran en la sección de resultados.

Modelos de optimización. Se utiliza un modelo de optimización con interconexión como base, después se a la red que se define a partir de algunas variables, restricciones y que tiene como función objetivo el costo anual total (CAT). Para revisar las ecuaciones del modelo de optimización pueden verse en el anexo 1A, Así mismo, en el anexo 1B puede observarse el modelo de optimización para un sistema en isla. En ambos casos se tiene el dimensionamiento de los equipos, mientras que se puede modificar parámetros relacionados con el uso de la batería, como el promedio de carga, y los límites de carga.

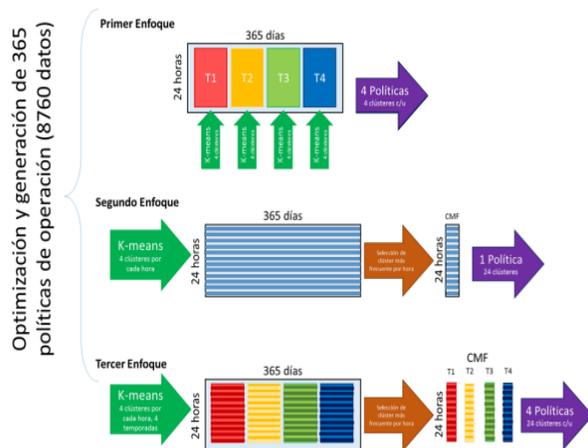


Figura 2. Resumen conceptual de los tres criterios para selección de POI

k-means. Este método de agrupamiento de datos realiza una clasificación de los valores analizados definiendo cantidades clave denominadas centroides dentro del rango máximo de los datos a clasificar. Estos centroides se localizan en puntos en los que hay más datos cercanos, que son asignados al clúster del centroide k_i . Cada agrupamiento tiene su propio centroide k_i y de acuerdo al criterio del analizador de datos, se elige la cantidad de clústeres para separar la información. Más acerca de este método, en referencias esenciales como Hamerly and Elkan, 2004, Julia Statistics, 2012 and Kettaneh, Berglund and Wold, 2005.

Criterios para determinar las políticas inteligentes de operación de la batería

Tabla 1. Número de clústeres usados para cada método

Enfoque	Clústeres generados	Clústeres seleccionados
1	16	16
2	96	24
3	384	96

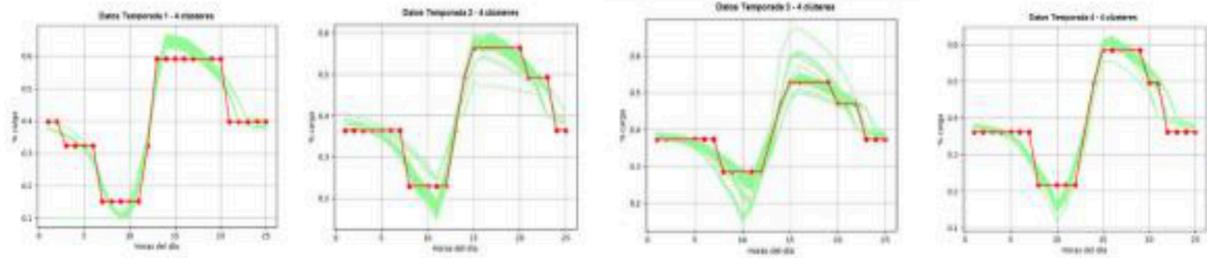
Criterio 1. Para hacer más ligera la elaboración de las políticas Inteligentes de operación de baterías POI se recurrió a separar todas las POF por temporadas para luego ser clasificada cada periodo operativo t (cada hora del día) en 4 posibles grupos por cada escenario tipo (s). Una vez identificados el clúster más frecuente para cada periodo t de cada temporada del año, se definieron 4 POI, una por temporada, que presentan un comportamiento de escalones. En este enfoque se produjeron en total 16 agrupamientos globales.

Criterio 2. Para simplificar la implementación de POI, se decidió definir una única política de operación para los tiempos operativos ($t=1, \dots, 24$) de un escenario tipo, s , es decir, una POI que podría emplearse cualquier día del año. Además, se buscaba mejorar la “forma” de la curva de la POI, para obtener un mejor ajuste respecto a las POF, para lograrlo se clasificó la información en 4 clústeres por cada hora del día, de esta forma, se produjeron un total de 96 clústeres.

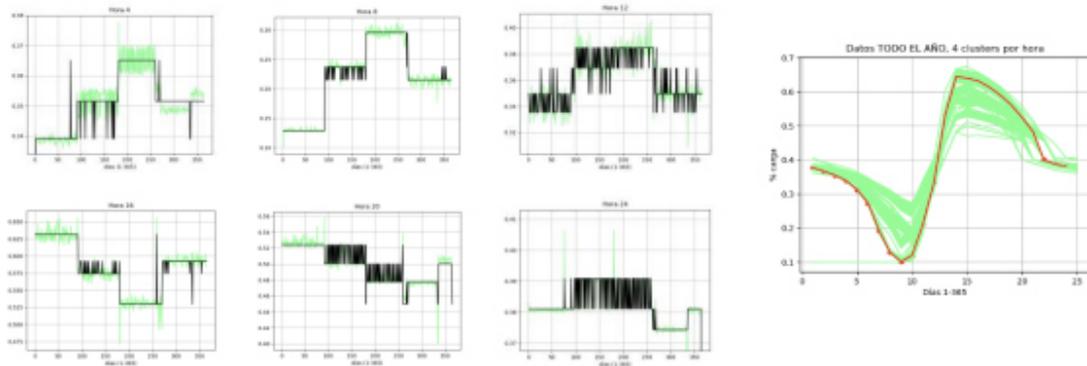
Criterio 3. Para lograr una mejor representación de las POF mediante la determinación de POF, se decidió mezclar los criterios 1 y 2, de forma que en primer lugar se separó la información inicial en 4 temporadas, después se utilizaron 4 clústeres para cada periodo operativo t , por lo que se obtuvieron 4 POI, con un mejor ajuste que en el criterio 1, al mismo tiempo que se logró una mejor representación de la información para cada temporada, de acuerdo con los resultados. Para este enfoque se necesitaron 384 clústeres.

En la figura 2 se puede observar de manera gráfica los tres procesos de generación de POI, así como en la tabla 1, donde se observan cuantos de los clústeres fueron empleados para generarlas.

a)



b)



c)

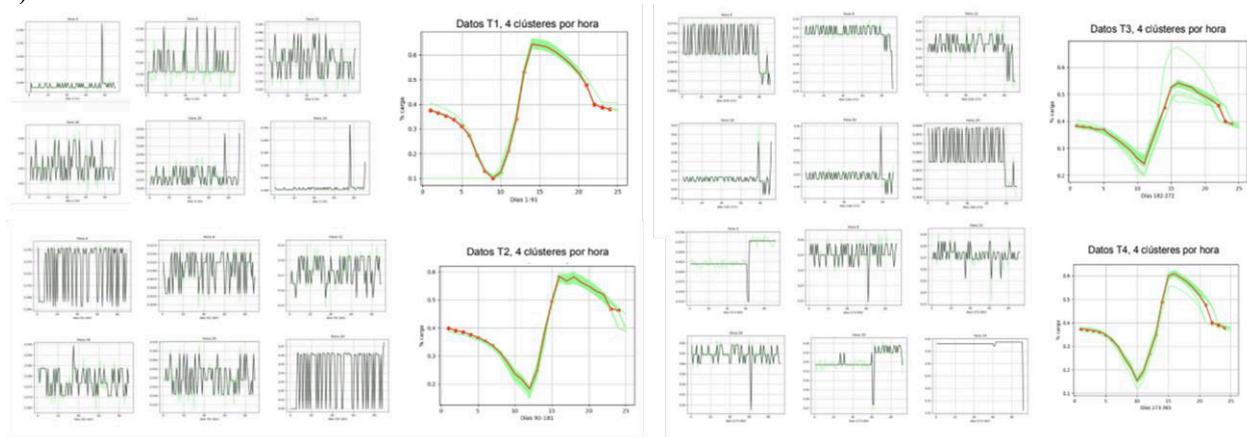


Figura 2. Políticas de operación inteligentes a) enfoque 1, 4 clústeres por temporada. b) enfoque 2, 4 clústeres por hora, para todo el año. C) 4 clústeres por hora para cada temporada del año

RESULTADOS (Times New Roman 12 pt, negritas)

Los resultados de los tres criterios empleados se muestran en la figura 3. De forma evidente, en el primer criterio, figura 3a, se logra tener 4 POI en forma de escalón que fallan en representar fielmente la mayor parte de las POF, por el simple análisis cualitativo.

En la figura 3b se observa que la POI generada para todo el año se aproxima al comportamiento general de las POF, sin embargo, muchos de los datos originales, se alejan de ésta, principalmente en las horas pico, o incluso donde hay valles, esto puede indicar que, con este enfoque, se obtiene un resultado centrado respecto a los datos recibidos.

El último proceso para obtener POI, figura 3c, implica que, si se separa por temporada la información original, para después obtener las POI, se logra un mejor “calce” de las curvas. En el análisis cualitativo, se cumple “la prueba del ojo” y que cada temporada se comporta de manera independiente, lo que se puede observar al comparar las POI resultantes contra el promedio de POF originales. Los tres enfoques obtuvieron resultados similares para los dos tipos de RES modelados, con interconexión a la red principal y sistemas aislados. Observe la figura 4 donde se presentan los resultados del enfoque 3 para los dos sistemas.

Para finalizar se obtuvo la tabla 2 se mide la desviación respecto al día promedio. Es decir, se mide la Desviación porcentual absoluta respecto a cada valor del escenario de operación promedio (los valores promedio anuales de cada periodo t). Sin embargo, este no es una medida de error de las POI, sino que se demuestra que basarse en una operación promedio, representaría un error mayor que varía de acuerdo a las diferentes temporadas, ya que la POI sí tiene la representatividad de los periodos t para cada temporada, con base en su frecuencia, el valor de los centroides utilizados y la desviación estándar de cada caso.

Tabla 2. DPA de los clústeres de cada temporada vs hora promedio

Hora	Error T1	Error T2	Error T3	Error T4
1	0.354%	5.803%	1.299%	0.919%
2	1.421%	5.313%	2.186%	0.082%
3	2.396%	6.282%	3.843%	1.280%
4	3.329%	7.358%	5.402%	3.272%
5	5.436%	10.079%	11.297%	5.088%
6	10.468%	16.572%	15.057%	8.273%
7	24.527%	30.384%	28.882%	15.327%
8	41.381%	43.554%	43.707%	14.817%
9	44.678%	51.816%	59.711%	15.077%
10	30.755%	29.451%	44.230%	16.057%
11	19.521%	18.072%	7.480%	26.871%
12	5.663%	49.445%	12.723%	25.691%
13	8.014%	49.447%	21.904%	28.748%
14	9.753%	35.157%	23.195%	16.641%
15	8.388%	16.178%	10.857%	1.646%
16	8.149%	0.107%	7.072%	4.416%
17	7.799%	0.279%	6.200%	4.180%
18	7.103%	5.683%	4.345%	4.413%
19	6.203%	6.491%	4.129%	4.000%
20	5.294%	9.669%	1.617%	3.294%
21	3.683%	15.501%	4.057%	3.458%
22	3.396%	25.753%	11.015%	2.929%
23	0.508%	20.228%	2.954%	0.370%
24	0.323%	21.153%	2.151%	0.328%

CONCLUSIONES

El modelado y optimización de sistemas energéticos implica en muchos casos la utilización de políticas flexibles de operación de la batería y del comportamiento de la compra-venta de energía, en caso de interconexión. Cuando para cada periodo operativo

se permite el ajuste del estado de carga de la batería se vuelve complicado el control de los RES. En este trabajo se presentan los resultados de definir las políticas de operación inteligentes de un sistema de almacenamiento (POI) usando las múltiples políticas de operación flexibles (POF) de un modelo de optimización de RES. Se presentan tres enfoques en donde se aplican la técnica k-means para hacer un reconocimiento de patrones y clasificar datos, para establecer políticas de operación inteligentes. De acuerdo con los resultados, para el sistema interconectado y en isla, es más adecuado utilizar 4 clústeres por cada periodo operativo y dividir en 4 temporadas los datos de entrada, esto puede deberse a la influencia de la disponibilidad de energía proveniente de fuentes renovables de energía, principalmente la radiación solar. Por este motivo, las POF y las POI tienen comportamientos que varían de acuerdo al cambio de estación. Una vez obtenidos estos resultados queda comprobar su eficacia al momento de que el SER es operado bajo estas condiciones, para esto se utilizaría un simulador que permita identificar cómo reciente el SER operar bajo las restricciones de la POI seleccionada.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Rodríguez de San Miguel, S. (2019). Energía renovable en México: Retos y oportunidades. Espacios.
- Hansen, K., Breyer, C., & Lund, H. (2019). Status and Perspectives on 100% renewable energy systems. Energy.
- Tena-García, J. L., García-Alcala, L. M., López-Díaz, D. C., & Fuentes-Cortés, L. F. (2021). Implementing Data Reduction Strategies for the Optimal Design. Springer.
- Chen, C., Duan, S., Cai, T., Liu, B., & Hu, G. (2011). Smart energy management system for optimal microgrid economic operation. IET renewable power generation, 5(3), 258-267.
- Hamerly, G. and Elkan, A., Advances in neural information processing systems 16, 281 (2004) J. Statistics. Clustering.jl. <https://github.com/JuliaStats/Clustering.jl> (2012)
- N. Kettaneh, A. Berglund, S. Wold, Computational Statistics and Data Analysis 48(1), 69 (2005). DOI <https://doi.org/10.1016/j.csda.2003.11.027>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167947303002949>.

ANEXO I Modelo de RES interconectado

$$\eta_{t,s}^{PV} = \eta_0^{PV} [1 - \beta_{Ref} \cdot (T_{t,s}^{amb} - T_{Ref})], \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (1)$$

$$W_{t,s}^{PV} = \alpha_{t,s} \cdot \eta_{t,s}^{PV} \cdot A^{PV}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (2)$$

$$W_{t,s}^{PV} = W_{t,s}^{PVB} + W_{t,s}^{BS} + W_{t,s}^{GS}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (3)$$

$$W_{t,s}^{WT}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta = \begin{cases} 0 & \text{if } WS_{t,s} < WS_{mi} \\ \beta_{t,s} \cdot \rho^{air} \cdot A^{WT} \cdot WS^3 & \text{if } WS_{mi} \leq WS_{t,s} < WS_{nom} \\ W_{nom}^{WT} & \text{if } WS_{nom} \leq WS_{t,s} < WS_{stop} \\ 0 & \text{if } WS_{t,s} \geq WS_{stop} \end{cases} \quad (4)$$

$$E_{t,s}^{BS} - E_{t-1,s}^{BS} = \eta_{t,s}^{BS} \cdot W_{t,s}^{BS} - W_{t,s}^{BSB} - W_{t,s}^{BSG}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (5)$$

$$SoC_{t,s} = \frac{E_{t,s}^{BS}}{E^{\mu}}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (6)$$

$$\eta_{t,s}^{PV} = a \cdot SoC_{t,s}^2 + b \cdot SoC_{t,s} + c, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (7)$$

$$E^{\mu} \geq E_{t,s}^{BS}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (8)$$

$$W_{t,s}^D = W_{t,s}^{PVB} + W_{t,s}^{WT} + W_{t,s}^{BSB} + W_{t,s}^{GB}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (9)$$

$$TAC = CCost + OMCost + PCost - PInc \quad (10)$$

$$CCost = \psi \cdot (\phi^{BS} + \phi^{PV} + \phi^{WT} + v^{PV} \cdot A^{PV} + v^{WT} \cdot A^{WT} + v^{BS} \cdot E^{\mu}) \quad (11)$$

$$OMCost = \Theta \cdot \sum_{s=1}^S \sum_{t=1}^T (v^{OMPV} \cdot W_{t,s}^{PV} + v^{OMWT} \cdot W_{t,s}^{WT} + v^{OMBS} \cdot W_{t,s}^{BS}) \quad (12)$$

$$PCost = \Theta \cdot \sum_{s=1}^S \sum_{t=1}^T v_t^G \cdot W_{t,s}^{GB} \quad (13)$$

$$PInc = \Theta \cdot \omega^P \cdot \sum_{s=1}^S \sum_{t=1}^T (W_{t,s}^{GS} + W_{t,s}^{BSG}) \quad (14)$$

$$A^{PV} \leq A^B \quad (15)$$

$$E^{\mu} \geq E_{t,s}^{BS}, \forall t \in \tau, \forall s \in \zeta \quad (16)$$

Diseño de una Formulación Emulsionada: Etapa de Optimización

Candy Guadalajara-Rivera ^a, Alicia Román-Martínez ^{a,*}, Patricia Aguirre-Bañuelo ^a,
Divanery Rodríguez-Gómez ^b

^a *Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. Manuel Nava Martínez #6, Zona Universitaria, CP 78210, San Luis Potosí.*

^b *Coordinación de Ingeniería Bioquímica, Instituto Tecnológico Superior de Irapuato, Carretera Irapuato-Silao km 12.5, Irapuato, Guanajuato, CP 36821, México.*

* *alicia.romanm@uaslp.mx*

RESUMEN

Los productos de cuidado personal como, cremas, champús, jabones, protectores solares, etc., son altamente consumidos en la actualidad. El éxito comercial de estos productos se basa no solo en la satisfacción de las necesidades del consumidor, también involucra el cumplimiento de regulaciones ambientales, de salud y seguridad, todo esto haciendo uso de la menor cantidad de recursos económicos y en un tiempo de diseño reducido. Debido a que una sola especie química no tiene la capacidad de satisfacer la gran variedad de requerimientos, es necesario formular un producto, que en el caso de la industria cosmética implica el uso de 15 a 50 ingrediente diferentes (Jones & Selinger, 2019), de ahí la complejidad del diseño de este tipo de productos. Esto ha llevado al desarrollo de metodologías con una etapa de diseño asistido por computadora y una validación experimental. Con la finalidad de validar la metodología planteada, se implementó un caso de estudio para el diseño de una crema hidratante facial (emulsión O/W) con contenido de ácido hialurónico, cuya etapa de identificación de ingredientes y optimización se muestran en este trabajo.

Palabras clave: Emulsión, Diseño de producto, Productos de cuidado personal, Optimización.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, los productos de cuidado personal tienen una gran importancia en el día a día de las personas. Para el 2010, el tamaño del mercado de la industria cosmética y de perfumería fue de 382 billones de dólares (Calvo et al., 2020). Una gran parte de los productos pertenecientes tanto a la industria cosmética como farmacéutica son manufacturados en forma de emulsiones, al ser un útil sistema de liberación de fármacos y agentes cosméticos sobre la piel (Simões et al., 2019).

Una emulsión es una mezcla de dos líquidos normalmente inmiscibles, estabilizada cinéticamente por agentes emulsionantes que se encuentran en la interfase de los dos líquidos (Kontogeorgis et al., 2019). Pueden ser clasificadas en términos de la naturaleza

del líquido que conforma la fase continua, en dos tipos de emulsiones, aceite en agua (O/W oil in wáter) y agua en aceite (W/O wáter in oil). Dependiendo del tipo de emulsión, son las características presentes en el producto, por ejemplo, las emulsiones O/W presentan una consistencia ligera, no pegajosa y sensación hidratante y se utilizan en productos cosméticos sin enjuague, además de ser altamente utilizadas por su bajo costo (por su alto contenido de agua). Por otro lado, las emulsiones W/O presentan una sensación oleosa y se utilizan en cosméticos como cremas limpiadoras.

En términos generales, el diseño de un producto consiste en identificar las necesidades del consumidor para transformarlas en características o atributos que debe presentar el producto. Dependiendo de la estrategia de solución utilizada, se identifican diferentes enfoques del diseño de producto. “Experimental a prueba y error”, que es una técnica ampliamente utilizada, aunque ineficiente en términos de tiempo y recurso (Conte, 2010), “Asistido por computadora”, que hace uso de modelos matemáticos, para la estimación de propiedades fisicoquímicas tanto de los componentes como de la formulación, y la “Integración modelado-experimental” que involucra una etapa asistida por computadora y su posterior validación experimental.

La metodología planteada describe una etapa de diseño de producto asistido por computadora que nos proporcione una formulación potencial, la cual será validada experimentalmente en una segunda etapa de diseño (Guadalajara-Rivera et al., 2021). Para probar la metodología planteada, se implementó un caso de estudio, que tiene como objetivo diseñar una emulsión con contenido de ácido hialurónico obtenido de una fuente considerada desecho de la industria de los alimentos (Guadalajara-Rivera et al., 2022).

METODOLOGÍA

Durante la etapa de diseño asistido por computadora se utilizaron modelos matemáticos y herramientas computacionales para obtener una lista de candidatos potenciales para la obtención de la formulación de interés. En la tarea 1.1 se identificaron las necesidades del consumidor y atributos necesarios en la emulsión y se generó una lista de propiedades objetivo-necesarias para el diseño: toxicidad (LC_{50}), desviación hidrofílica-lipofílica (HLD), balance hidrofílico-lipofílico (HLB), pH, parámetros de solubilidad de Hansen ($\delta_D, \delta_P, \delta_H$), punto de inflamabilidad (T_f), cloud point (CP), volumen molar (V) y viscosidad dinámica μ .

En las tareas 1.2 y 1.3 se identificó el ingrediente activo (ácido hialurónico), fase continua (agua), fase dispersa y surfactante. Hasta este punto la selección de los componentes se realizó con ayuda de bases de datos y un proceso de tamizado con base en las propiedades individuales de cada componente (Guadalajara-Rivera et al., 2021).

Ingrediente activo: Para cumplir la función principal del producto de humectar la piel, se eligió el ácido hialurónico, un polisacárido compuesto por el disacárido de ácido glucurónico y N-acetil glucosamina. Normalmente se encuentra en la dermis y contribuye a la hidratación y elasticidad de la piel.

Fase continua: Dentro de las necesidades del consumidor se encuentran obtener un producto sensorialmente agradable, suave al tacto y que proporcione una sensación fresca al contacto, por lo cual se propuso una emulsión O/W cuya fase continua es agua, por su no toxicidad y bajo costo.

Fase dispersa: Para la selección de la fase dispersa, se recopiló una base de datos con aceites, en la cual se recopilaron los parámetros necesarios, en el caso de los parámetros no encontrados en la literatura, se utilizaron modelos matemáticos para su estimación. $-\log(LC_{50})$, T_f y $\delta_D, \delta_P, \delta_H$, se utilizaron como un primer filtro para reducir el número de posibles fases orgánicas.

Surfactante: Al ser un producto de uso tópico se espera que sea una formulación no irritante, por lo tanto, se utilizó una base de datos que incluye únicamente surfactantes no iónicos. Para la selección del surfactante se recurrió a los parámetros: flash point, $-\log(LC_{50})$ y HLB. Los valores de T_f se recopilaron de la bibliografía, el parámetro $-\log(LC_{50})$ se estimó con un método de contribución de grupos y el valor HLB buscó en bibliografía y en el caso de los valores no disponibles, se calculó por definición.

Tabla 1. Listado de propiedades-objetivo utilizadas en los componentes individuales

Propiedad-objetivo	Modelos utilizados (propiedades individuales)
$-\log(LC_{50})$	Bibliografía, GC-Martin and Young
T_f	Bibliografía, ChemSpider, PubChem, Método C&G GC-Constantinou and Gani,1994
Solubilidad de Hansen	Bibliografía, M&G GC-Marrero and Gani,2001
HLB	Base de datos, bibliografía, Eq. Griffin
Cloud Point	Método M&G GC-Marrero and Gani
Volumen molar	Bibliografía, ChemSpider, PubChem

- Método de contribución de grupos GC- Martin and Young: $-\log(LC_{50})$

El parámetro LC_{50} se refiere a la concentración a la cual se presenta el 50% de mortalidad en la muestra utilizada, ng es el número de grupos presentes en la molécula de interés, n_i es el número de repeticiones de cada grupo en la molécula y α_i es el valor correspondiente al grupo.

$$-\log(LC_{50}) = \sum_{i=1}^{ng} n_i \alpha_i$$

La implementación de esta metodología demanda la inspección visual de la estructura molecular del compuesto a calcular. Los grupos de interés, así como sus valores se obtuvieron del trabajo de Martin & Young, 2001.

- Parámetros de solubilidad de Hansen $\delta_d, \delta_p, \delta_{hb}$

Es importante que los ingredientes presentes en la formulación no sean capaces de disolver las proteínas de la piel, de ser así se traduciría en irritación cutánea, una característica indeseable en la formulación es por esto que, los límites de aceptación para

los parámetros de solubilidad de Hansen definidos son los parámetros de solubilidad de algunas proteínas presentes en la piel.

δ_d , δ_p y δ_{hb} fueron recopilados de la bibliografía y en el caso de los valores no disponibles, fueron estimados con ayuda del método de contribución de grupos (Stefanis & Panayiotou, 2008), el cual cuenta con dos grupos de contribución de primer orden C_i y de segundo orden D_j .

$$\delta_d = (\sum_i N_i C_i + W \sum_j M_j D_j + 17.3231) MPa^{(1/2)}$$

$$\delta_p = (\sum_i N_i C_i + W \sum_j M_j D_j + 7.3548) MPa^{(1/2)}$$

$$\delta_{hb} = (\sum_i N_i C_i + W \sum_j M_j D_j + 7.9793) MPa^{(1/2)}$$

Una vez obtenida la lista de ingredientes potenciales se plantea un problema de optimización para determinar la composición que nos permita obtener la menor toxicidad. Para esta etapa se utilizaron como propiedades- objetivo de la mezcla LC_{50} , volumen molar (regla de mezclado lineal) y viscosidad (modelo no lineal).

RESULTADOS

En la table número dos se muestra la lista de propiedades-objetivo generada en la tarea 1.1, con las restricciones correspondientes.

Tabla 2. Lista de propiedades objetivo y restricciones.

Propiedades objetivo	Restricciones
Parámetro de toxicidad LC50	$-\log(LC_{50}) > 3.6 \text{ mol} / m^3$
Desviación hidrofílica-lipofílica	HLD \neq 0
Balance hidrofílico-lipofílico	HLB>12
pH	$4.5 < \text{pH} < 5.75$
Parámetros de solubilidad de Hansen	$\delta_D < 19.4$ & $\delta_D > 25.4 \text{ MPa}^{0.5}$ $\delta_P < 6.8$ & $\delta_P > 12.8 \text{ MPa}^{0.5}$ $\delta_H < 8.9$ & $\delta_H > 14.9 \text{ MPa}^{0.5}$
Punto de inflamabilidad	$T_f > 70 \text{ }^\circ\text{C}$
Volumen molar	$20 < V < 150 \text{ cm}^3 / \text{mol}$
Viscosidad dinámica	$5 < \mu < 2500 \text{ cP}$

Se dispuso de una base de datos con 75 aceites diferentes, los cuales fueron filtrados con base en los valores de $-\log(LC_{50})$, T_f y $\delta_D, \delta_P, \delta_H$, lo cual dio como resultado un total de 5 candidatos viables (oleyl alcohol, octyldodecanol, olive oil, safflower oil y palm oil). Al ser el parámetro de toxicidad un valor de gran importancia, se seleccionó el aceite con la toxicidad más baja (mayor $-\log(LC_{50})$).

En el caso de los surfactantes no iónicos, se cuenta con una base de datos de 44 compuestos. El primer filtro utilizado fue con la ayuda del T_f , $-\log(LC_{50})$ y el valor de

HLB, con este primer filtro se redujo el número de surfactantes a 6 posibles. Se realizó una revisión bibliográfica y se eligió como surfactante potencial el sucrose palmitate. En la etapa de optimización se tiene como objetivo maximizar el parámetro $-\log(LC_{50})$ de la mezcla (fase continua, fase dispersa, surfactante e ingrediente activo).

Función objetivo:

$$\max\{8.76x_{FD} + 7.67x_S + 3.25x_{IA}\}$$

s.a.

$$x_{FC} + x_{FD} + x_S + x_{IA} = 1 \quad (1)$$

$$V = 18.015x_{FC} + 364x_{FD} + 447x_S + 226.58x_{IA} \quad (2)$$

$$\mu = 1.0016\eta_r \quad (3)$$

$$\eta_r = 1 + \frac{599.04 - 589.04\varphi^{\frac{7}{3}}}{235.616 - 1487.6\varphi + 2515.968\varphi^{\frac{5}{3}} - 1487.6\varphi^{\frac{7}{3}} + 235.616\varphi^{\frac{10}{3}}} \varphi \quad (4)$$

$$\varphi = \frac{364x_{FD}}{V} \quad (5)$$

$$\frac{403.31x_{IA}}{18x_{FC} + 298.6x_{FD} + 580.71x_S + 403.31x_{IA}} = 0.01 \quad (6)$$

$$0.5 < \frac{18x_{FC}}{18x_{FC} + 298.6x_{FD} + 580.71x_S + 403.31x_{IA}} \quad (7)$$

$$\frac{298.6x_{FD}}{18x_{FC} + 298.6x_{FD} + 580.71x_S + 403.31x_{IA}} < 0.25 \quad (8)$$

$$20 < V < 150 \quad (9)$$

$$5 < \mu < 2500 \quad (10)$$

Donde:

x_{FC} : Fracción molar de la fase continua (agua)

x_{FD} : Fracción molar de la fase dispersa (octyldodecanol)

x_S : Fracción molar del surfactante (sucrose palmitate)

x_{IA} : Fracción molar del ingrediente activo (sodium hyaluronan)

V : Volumen molar (cm^3/mol)

μ : Viscosidad dinámica (mPa.s)

η_r : Viscosidad relativa

φ : Fracción volumétrica de la fase dispersa en la mezcla

El problema de optimización planteado se resolvió como problema de programación no lineal (NLP) con ayuda del software GAMS 38.3.0. La solución arrojó la composición de nuestra formulación en fracción molar, por lo cual se realizó el cálculo para obtener la composición en porcentaje másico relacionando la fracción molar con el peso molecular de cada componente.

Tabla 3. Composición de formulación potencial de una emulsión hidratante

	Componente	Fracción molar	Porcentaje en peso (%)
Frase continua	Agua	0.956	50.11
Fase dispersa	Octyldodecanol	0.029	25.22
Surfactante	Sucrose palmitate	0.014	23.67
Ingrediente activo	Hialuronato de sodio	0.0008534312	1

CONCLUSIONES

Con ayuda de la etapa de diseño asistido por computadora de la metodología sistemática híbrida planteada, fue posible obtener una formulación potencial la cual incluye una lista de componentes, así como su composición en porcentaje en peso. La formulación potencial obtenida será sometida a un ligero cambio, ya que en una etapa posterior es necesario seleccionar los aditivos necesarios en la formulación, para después finalizar la etapa de diseño asistido por modelos matemáticos con la estimación de las propiedades objetivos para verificar que no hay cambios significativos en la formulación y que por tanto los valores continúan dentro de los parámetros establecidos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Calvo, F., Gómez, J.M., Ricardez-Sandoval, L., & Alvarez, O. (2020). Integrated design of emulsified cosmetic products: A review. *Chemical Engineering Research and Design*, 161.
- Conte, E. (2010). Innovation in Integrated Chemical Product-Process Design-Development through a Modelbases System Approach. *Ph.D. Thesis, DTU Chemical Engineering*.
- Guadalajara-Rivera, C., Aguirre-Bañuelo, P., Corpus-Badillo, L., Moctezuma-Velazquez, E., & Román-Martínez, A. (2022). Production of hyaluronic acid from eggshell membranes from eggshell membranes for potential use in personal-care products. *9th International Conference on Engineering for Waste and Biomass Valorisation*.
- Guadalajara-Rivera, C., Aguirre-Bañuelo, Rodríguez-Gómez, D. (2021). Diseño de productos asistido por computadora: Formulaciones emulsionadas de productos de cuidado personal. *Avances en Ingeniería Química*, 1(3), (pp.1805-1810).
- Jones, O., & Selinger, B. (2019). *Australian Academy of Science*. <https://www.science.org.au/curious/people-medicine/chemistry-cosmetics>.
- Kontogeorgis, G. M., Mattei, M., Ng, K. M., & Gani, R. (2019). An Integrated Approach for the Design of Emulsified Products. *AIChE Journal*, 65(1).
- Martin, T. M., & Young, D. M. (2001). Prediction of the Acute Toxicity (96-h LC₅₀) of Organic Compounds to the Fathead Minnow (*Pimephales promelas*) Using a Group Contribution Method. *Chemical Research in Toxicology*, 14(10), 1378–1385.
- Simões, A., Veiga, F., & Vitorino, C. (2019). Developing Cream Formulations: Renewed Interest in an Old Problem. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 108(10).
- Stefanis, E., & Panayiotou, C. (2008). Prediction of Hansen Solubility Parameters with a New Group-Contribution Method. *International Journal of Thermophysics*, 29(2), 568–585.

Producción de pellets combustibles de mezclas de biomasa agrícolas residuales mediante optimización estadística

Noemí Hernández-Neri, Claudia Gutiérrez-Antonio *, Araceli Guadalupe Romero-Izquierdo, Sergio Iván Martínez-Guido, Ana Angélica Feregrino Pérez, Juan Fernando García Trejo

Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Av. Cerro de las Campanas s/n, Col. Las Campanas, Querétaro, Querétaro, 76010, México. claudia.gutierrez@uaq.mx

RESUMEN

La producción y uso de biocombustibles sustentables es una alternativa que contribuye a alcanzar el objetivo de desarrollo sostenible relacionado con energía asequible y renovable. Para tal fin, los residuos son una materia prima atractiva para la producción de biocombustibles. Dichos residuos no compiten, de manera directa o indirecta, con los cultivos alimenticios para su generación, además de que, debido a su inadecuada disposición y elevados volúmenes, representan un problema de contaminación. En particular, la mayoría de los residuos agrícolas son abandonados o quemados en los campos de cultivo, y no generan valor agregado para el sector que los produce. Entre los residuos que se generan en el campo mexicano, la cascarilla de arroz es uno de los más abundantes y de lenta degradación por su elevado contenido de sílice. El uso de este residuo se ha explorado para la producción de pellets combustibles; sin embargo, el biocombustible resultante no satisface el estándar ISO 17225-6 respecto del contenido de cenizas. En este contexto, la mezcla de residuos es una alternativa que posibilita el cumplimiento de dicho estándar. Por ello, en el presente trabajo se lleva a cabo una optimización estadística que permite producir pellets combustibles que satisfagan el estándar ISO 17225-6 a partir de cascarilla de arroz y su mezcla con paja de frijol. Para tal fin, se realiza un diseño de experimentos considerando como factores el contenido de humedad y el porcentaje de paja de frijol, siendo el poder calorífico la variable respuesta. Con base en la caracterización fisicoquímica de los pellets obtenidos experimentalmente se elabora una superficie de respuesta que permite determinar los parámetros requeridos para satisfacer el estándar. De acuerdo con los resultados de la optimización, los pellets combustibles producidos con 90 % peso de paja de frijol y 10 % peso de cáscara de arroz, con 15.0 % de contenido de humedad cumplen con la norma ISO 17225-6. En estas condiciones, los pellets combustibles tienen un poder calorífico de 3,645.78 kcal/kg, 6.98 % cenizas, 9.76 % de humedad final, 610.78 kg/m³ de densidad aparente y 99.51 % de durabilidad.

Palabras clave: optimización estadística, pellets combustibles, residuos agrícolas, poder calorífico, estándar ISO.

INTRODUCCIÓN

La producción de energía asequible y no contaminante es uno de los Objetivos de Desarrollo Sostenible propuesto por la Organización de las Naciones Unidas (ONU). De acuerdo con la ONU (2022), el acceso a la electricidad ha comenzado a acelerarse, la eficiencia energética continúa mejorando y la energía renovable está logrando resultados excelentes en el sector eléctrico. En este contexto, la investigación en torno a la producción de biocombustibles es de gran relevancia, tanto para el sector del transporte como para la generación de electricidad y/o calor. En particular, para la generación de energía eléctrica y/o térmica destacan los biocombustibles sólidos, los cuales son una alternativa energética de fácil manejo y bajo costo. Dentro de los biocombustibles sólidos se encuentran las briquetas, las astillas, y los pellets combustibles. Los pellets combustibles son los biocombustibles sólidos más populares, debido a su fácil manejo y alto poder calorífico. Los pellets combustibles se definen como pequeños cilindros de biomasa densificada con extremos rotos obtenidos por medio de compresión mecánica (ISO, 2021); las dimensiones de los pellets combustibles son usualmente diámetros < 25 mm, con longitudes de 3.15 mm a 40 mm (ISO, 2021). Los pellets combustibles pueden emplearse en sistemas de calefacción, tanto doméstica como industrial, así como en la generación de electricidad. Las biomásas lignocelulósicas son las principales materias primas utilizadas para la producción de pellets combustibles; en ellas se incluyen residuos agrícolas, agro-industriales, y forestales, así como cultivos energéticos. En la literatura se ha reportado la fabricación de pellets combustibles a partir de cascarilla de arroz, podas de jardín, cáscara de cacahuate, paja de trigo, heno, paja de frijol, rastrojo de maíz, entre otros (Pradhan et al, 2018; Ríos-Badrán et al, 2020).

En México, se producen grandes cantidades de residuos provenientes de diferentes cultivos; entre ellos se encuentran los residuos primarios (agro-residuos), es decir, obtenidos al momento de la cosecha, entre los que se encuentran hojas y tallos del maíz, tallos y vaina de sorgo, puntas y hojas de caña de azúcar, paja de trigo, paja de cebada y de frijol. También se tienen a los residuos secundarios obtenidos del procesamiento postcosecha, entre los que están el bagazo de caña de azúcar, mazorcas y olotes, el bagazo de maguey o agave, la cáscara de arroz, y la pulpa de café (residuos agro-industriales). Como consecuencia de la actividad agrícola, se genera una gran cantidad de residuos, algunos de los cuales son eliminados generalmente por medio del fuego en la misma parcela o dando uso de poco valor agregado. En particular, la cascarilla de arroz es un residuo agro-industrial que constituye aproximadamente el 20% de la producción mundial de este grano arroz. La cascarilla de arroz es el principal subproducto generado por la industria de la molienda del arroz (Hernández-Neri et al, 2022); ésta está constituida principalmente por celulosa y sílice, elementos que son muy importantes en la producción de combustibles, ya que posibilitan el incremento en el rendimiento del producto final. La densidad de la cascarilla de arroz es baja, por lo cual al apilarse ocupa grandes espacios.

La cascarilla de arroz ha sido empleada para la producción de pellets combustibles; sin embargo, no satisface los requerimientos del estándar ISO (2022) debido a su elevado contenido de ceniza (Ríos-Badrán et al, 2020). En este contexto, la mezcla de biomásas es una alternativa que permite utilizar los residuos que por sí mismos no satisfacen los

requerimientos del estándar. En los estados de México donde se cultiva el arroz también se cultiva el frijol, derivado del cual se genera paja de frijol, la cual está constituida por residuos de tallo, hoja y vaina. Este residuo es una biomasa orgánica con alto contenido de carbono (Hernández-Neri et al, 2022). Por ello, la paja de frijol es un material lignocelulósico con potencial para ser usado como materia prima para la producción de biocombustibles. En México se producen más de un millón de toneladas de frijol anuales; por lo que es inevitable la generación de residuos, la cual representa una gran cantidad de materia prima para la producción de pellets.

Por lo anteriormente expuesto, la producción de pellets de biocombustibles a partir de cáscara de arroz y paja de frijol es el objetivo de la presente investigación. Para ello se determinarán la proporción de las biomásas, así como el contenido de humedad que permitan obtener pellets que cumplan con los estándares de calidad de la norma ISO-17225-6 (ISO, 2022).

METODOLOGÍA

La cascarilla de arroz fue recolectada en Ezequiel Montes, Querétaro, y la paja de frijol fue obtenida en El Carmen, Hidalgo. Previo a la densificación, se realizó la molienda para reducir el tamaño de partícula de ambas biomásas, y posteriormente se utilizó un tamiz para homogeneizar el tamaño de las muestras. Para determinar las condiciones óptimas para densificar las materias primas se seleccionaron dos factores con tres niveles: porcentaje de humedad (10%, 15%, 20%), y proporción de cascarilla de arroz y paja de frijol (75:25; 50:50; 25:75). Se estableció un diseño aleatorizado de experimentos de 3^2 , con ayuda del programa JMP. Las variables de respuesta fueron químicas [humedad (%), cenizas (%), carbono total (%), compuestos volátiles (%) y nitrógeno total], y energética [poder calorífico (MJ/kg)]. Para fabricar los pellets, las materias primas mezcladas y homogenizadas se procesaron en una pelletizadora de rodillos con una matriz de 8 mm de diámetro (Hernández-Neri et al, 2022). Todos los pellets producidos se realizaron por triplicado.

Las pruebas de caracterización de los pellets incluyen la determinación de contenido de humedad (gravimétrico PROY-NOM-211-SSA-200), cenizas (Gravimétrico NMX-F-066-S-1978), materia volátil (Gravimétrico APHA), contenido de carbono (Gravimétrico), nitrógeno total (digestión y espectrofotometría), y poder calorífico (calorímetro isoperibólico) (Hernández-Neri et al, 2022).

Con los datos generados se utilizó el Software JMP para realizar el análisis de la superficie de respuesta. Con base en los resultados de la caracterización de los pellets combustibles se realizó el análisis considerando las variables respuesta que no cumplen los parámetros establecidos en la norma. Para obtener el modelo, se especificaron como límites entre 10-15% de contenido de humedad inicial de la mezcla de biomásas, y una proporción entre 0-40% de la cantidad de paja de frijol.

RESULTADOS

El contenido de humedad es uno de los parámetros más importantes, ya que, cuando este es demasiado bajo, la fricción entre la biomasa y la matriz será alta, lo que aumentará el consumo de energía. El contenido de humedad mostró diferencias estadísticas ($p < 0.05$) entre los diferentes tipos de humedades, mientras que no hubo diferencias estadísticas entre las diferentes mezclas. Se mostró mayor diferencia entre tratamientos con humedad inicial de 20.0%, lo cual originó que los pellets tuvieran una humedad final de 13.35%, la cual es mayor que la especificación de la norma ISO 17225-6 ($< 10\%$). Los valores promedio de los pellets con humedad inicial de 15% fueron de 9.98% y 7.76% con un 10% de humedad inicial.

La materia volátil participa en el proceso de combustión de la biomasa, afectando el rendimiento y la estabilidad física (Tauro et al., 2018). El contenido de materia volátil no mostró diferencias estadísticas significativas ($p > 0.05$) entre los diferentes valores de humedad; sin embargo, hubo diferencias entre las diferentes proporciones de mezclas. El contenido del material volátil fue de 84.72% (25:75), 80.49% (50:50) y 76.10% (75:25).

Entre mayor sea la cantidad de ceniza en el biocombustible, menor será el calor obtenido, y se presentan problemas de manejo y disposición de la misma. El contenido de cenizas mostró diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$) entre las diferentes proporciones de biomasa en la mezcla, mientras que no se encontraron diferencias estadísticas significativas entre los diferentes contenidos de humedad. La norma ISO 17225-6 especifica un contenido máximo de cenizas de 6.0 % para los pellets de la clase A y de 10.0 % para la clase B. El contenido de ceniza de las muestras fue 9.84% (25:75), 12.74% (50:50) y 16.22% (75:25); los valores sugieren que se clasifican en clase B.

El contenido de carbono es el más importante en términos de energía potencial, ya que altos contenidos de carbono fijo son asociados a altos poderes calóricos. No hubo diferencias significativas ($p > 0.05$) en el contenido de carbono entre diferentes contenidos de humedad. Sin embargo, hubo diferencias estadísticamente significativas entre tratamientos de diferentes proporciones de biomasa. Los pellets elaborados con cascarilla de arroz y paja de frijol en proporción 25:75 mostraron un mayor contenido de carbono con 47.39%, mientras que la proporción 75:25 obtuvo 42.54% de carbono total.

Por otra parte, los pellets elaborados con cáscara de arroz y paja de frijol en proporción 25:75 mostraron un mayor contenido de nitrógeno con 0.52%, mientras que la proporción 75:25 obtuvo 0.46%. La norma ISO 17225-6 especifica un contenido ≤ 0.7 , por lo que los diferentes tratamientos se encuentran dentro de lo establecido.

El poder calorífico mostró diferencias estadísticas ($p < 0.05$) entre las distintas humedades utilizadas, mientras que no hubo diferencias estadísticas entre las diferentes mezclas. El efecto de la humedad fue claro, ya que la biomasa con humedad de 20.0 % fue la que obtuvo los resultados más bajos de contenido energético con una media de 3021.51 kcal/kg. Con la humedad de 10.0% fue posible obtener valores de poder calorífico de hasta 3475.26 kcal/ kg. El pellet de mayor humedad quedó por debajo del valor de referencia de la norma que indica un rango de 3511-4538 kcal/kg.

El modelado de la superficie de respuesta se realizó principalmente respecto del contenido de cenizas y poder calorífico, ya que estas variables mostraron valores fuera de lo establecido de acuerdo a la norma. Se determinó que el empleo de materia prima con 14-15.0% de humedad inicial y una mezcla de biomasa con 90% paja de frijol y 10% cáscara de arroz permitiría obtener pellets con un poder calorífico de 3645.78 kcal/kg, 6.98-7% de cenizas, humedad final de 9.76%, densidad a granel de 610.78 kg/m³, y durabilidad de 99.51%. El resto de los parámetros evaluados en la norma se cumplirán; dichos parámetros son longitud, diámetro, y nitrógeno. El porcentaje de material volátil y carbono son similares a los reportados para otras biomásas de estudio. El modelo de superficie de respuesta que se muestra en la Figura 1.

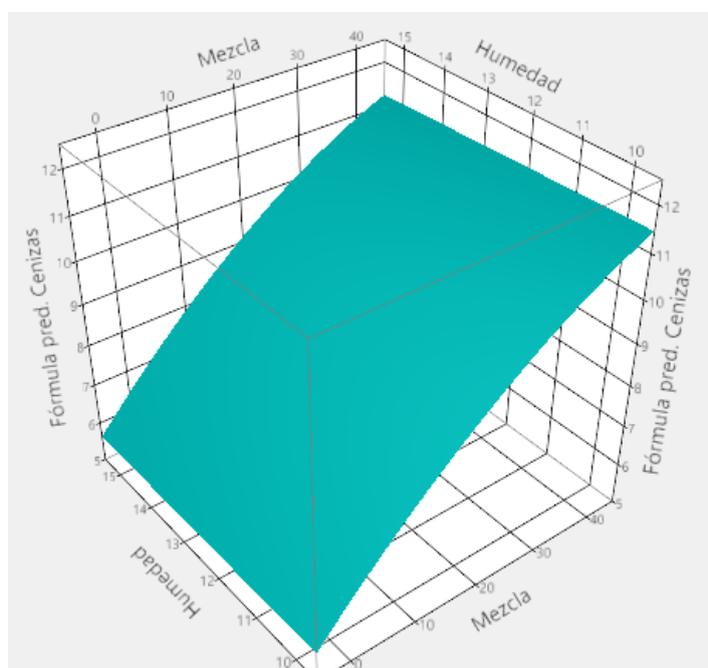


Figura 1. Diseño de superficie de respuesta

La predicción del poder calorífico (R^2 : 0.81) y contenido de cenizas (R^2 : 0.99) con respecto a los datos experimentales mostró un buen ajuste. Además, el análisis de varianza informa valores del cuadrado medio del error de 0.439 y 0.200 para poder calorífico y contenido de cenizas, respectivamente

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos a partir del modelo de optimización estadística muestran que es posible obtener pellets combustibles a partir del uso de residuos agro-industriales como la cascarilla de arroz y paja de frijol; para tal fin se establecieron como factores de control el porcentaje de humedad y proporción de biomasa, con tres niveles cada uno de ellos.

Los pellets elaborados con 25% de cáscara de arroz y 75% de paja de frijol al 15% de humedad mostraron: 9.98% de humedad final; 83% de compuestos volátiles; 9.84% de cenizas; 47.39% de carbono; 0.52% de nitrógeno; 14.07 MJ/kg; 7.97 mm de diámetro; 24.12 mm de longitud; 613.27 kg/m³ y 99.75% de durabilidad. Aunque algunos parámetros cumplen con la norma, el contenido de cenizas y el poder calorífico se encuentran fuera de los valores establecidos.

De acuerdo al análisis de superficie de respuesta se determinó que las mejores condiciones fueron el empleo de 15.0% de humedad inicial y una mezcla de biomasa con 90% paja de frijol y 10% cáscara de arroz; con dichas variables se obtuvieron pellets con un poder calorífico de 3414.59 kcal/kg, 9.50% de cenizas en peso seco, una humedad final de 9.69%, una densidad a granel de 613.89 kg/m³, durabilidad de 99.81%.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero proporcionado por la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Querétaro a través del Fondo de Cultura Emprendedora con el proyecto: Uso de cáscara de arroz y paja de frijol para la producción de biocombustibles sólidos. Asimismo, N. Hernández Neri recibió una beca de CONACyT para sus estudios de posgrado. Así como el apoyo otorgado por CONACyT a través del proyecto 320583 en la Convocatoria de Ciencia Básica y/o Ciencia de Frontera, Modalidad: Paradigmas y Controversias de la Ciencia 2022.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ríos-Badrán, I.M., Luzardo-Ocampo, I., García-Trejo, J.F., Santos-Cruz, J., Gutiérrez-Antonio, C. (2020). Production and characterization of fuel pellets from rice husk and wheat straw. *Renewable Energy*, 145, 500-507.
- Priyabrata Pradhan, P., Mahajani, S.M., Arora, A. (2018). Production and utilization of fuel pellets from biomass: A review. *Fuel Processing Technology*, 181, 215-232.
- Tauro, R., García, C.A., Skutsch, M., Masera, O. (2018). The potential for sustainable biomass pellets in Mexico: An analysis of energy potential, logistic costs and market demand. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, Part 1, 380-389.
- Hernández-Neri, N., Gutiérrez-Antonio, C., García-Trejo, J., Feregrino-Pérez, A., Toledano-Ayala, M. (2022). Valorisation of rice husks and bean straws through fuel pellets production: an experimental and modelling approach. *Revista Mexicana De Ingeniería Química*, 21(2), Alim2679.
- ISO, 2021, ISO 17225-6:2021, Solid biofuels — Fuel specifications and classes — Part 6: Graded non-woody pellets. Disponible en: <https://www.iso.org/standard/76093.html> (último acceso 21.04.2022).

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022.
Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio,
Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

ONU, 2022, Organización de las Naciones Unidas, Objetivos de Desarrollo Sostenible, Objetivo 7: garantiza el acceso a una energía asequible, segura, sostenible y moderna. Disponible en: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/energy/ml> (último acceso 21.04.2022).

Optimización de la Extracción de Cobre Mediante Lixiviación Ácida de Residuos Electrónicos por medio de la Metodología de Superficie de Respuesta

Jaime Gómez-Duran^{a*}, Zeferino Gamiño-Arroyo^a, Fernando Israel Gómez-Castro^a, Mónica Ayala-Gómez^b

*a Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N, Guanajuato, Gto. 36050, México. *ja.gomezduran@ugto.mx*

b Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N, Guanajuato, Gto. 36050, México.

RESUMEN

En el presente trabajo se realizó un estudio mediante la metodología de superficie de respuesta para evaluar la influencia y optimizar las variables de proceso en la lixiviación ácida para la recuperación de cobre. Se ha encontrado que a menores tamaños de partícula se alcanza la mayor concentración de cobre; sin embargo, la mejor recuperación se logra a mayores tamaños de partícula. Por otra parte, la presencia de peróxido de hidrogeno aumenta la eficiencia de recuperación, pero tiene efectos adversos a tamaños de partículas menores a 500 μm . A su vez, por la naturaleza de la solución se necesitan altas velocidades de mezclado.

Palabras clave: Minería urbana, reciclaje, superficie de respuesta.

INTRODUCCIÓN (Times New Roman 12 pt, negritas)

Con el desarrollo de nuevas tecnologías se ha propiciado un aumento en la demanda de equipos electrónicos como computadores, teléfonos, aparatos y electrodomésticos inteligentes, estimándose entre 3% y 5% por año (Charles y col., 2017), aumentando así el consumo de materia prima de metales nobles (Ag, Au, Pd, Pt) y metales bases como el Cu. Debido a esto, se prevén riesgos de abastecimiento debido a la demanda, así como, por problemas geopolíticos, que se han desarrollado entorno a las fuentes de estos metales (TWG. Council, 2017; PGM Management, 2017). A su vez, por el corto tiempo de vida y las mejoras tecnológicas que provocan una rápida obsolescencia se promueve un crecimiento más acelerado tanto de la demanda como en la generación de residuos de aparatos eléctricos y electrónicos (RAEE) (Tsydenova & Heyken, 2019), los cuales representan entre un 3.1% y 5.0% en peso de los RSU en México según el INEGI (Delegacionales C.C.N.d.G.M, 2013). En 2015 se generaron en México 1.1 megatoneladas de RAEE al año, presupuestándose un crecimiento del 17% para el 2026 (Baldé, 2017), reciclándose alrededor del 10% mientras que el resto es depositado en rellenos sanitarios y bodegas (INCyTU, 2018), como se muestra en la Figura 1. Esto genera un problema medioambiental. Los tableros electrónicos impresos (PCB por sus cifras en inglés) son una fuente de cobre (Kaya, 2019), el cual

representa entre un 0.2 y 0.5% de los RAEE, y junto a otros metales puede representar entre un 75 a 90% del valor de (Kaya, 2016). Lo anterior hace urgente el desarrollo de tecnologías de reciclaje viables y amigables con el ambiente (Lu & Xu, 2016).

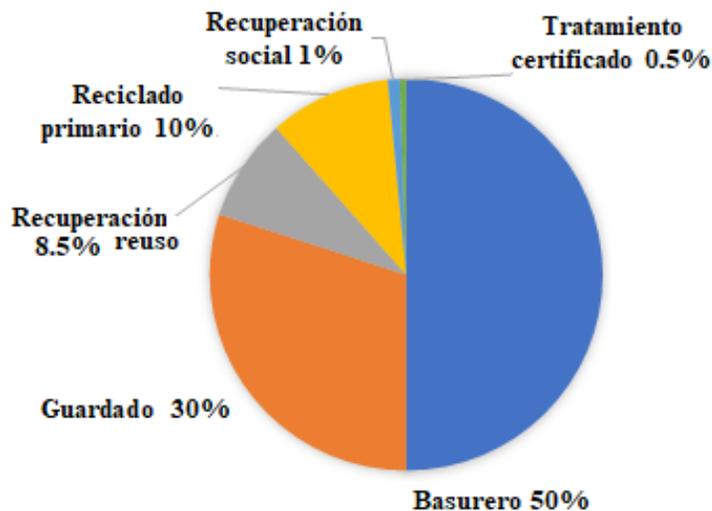


Figura 1. Distribución del tratamiento de residuos electrónicos en México (INCyTU, 2018)

La lixiviación es una tecnología hidrometalúrgica en la que se usa un agente acomplejante para la solubilización de los metales de interés (Gamiño-Arroyo y col., 2021). En los estudios referentes a la lixiviación de cobre, existe una etapa de conminución para exponer el metal a la solución y poder llevar a cabo el proceso (Oliveira y col., 2012). Sin embargo, muy pocos estudios han sido llevados a cabo para determinar cómo afectan las variables de proceso a la extracción de cobre a partir de los PCB, dada la complejidad del proceso por la mezcla de metales y su naturaleza química, la hidrofobicidad de la matriz polimérica sólida, así como la naturaleza heterogénea del sólido. Estos factores dificultan el modelado y optimización de la extracción mediante métodos rigurosos, por lo que en el presente trabajo se desarrolló un estudio usando la metodología de superficie de respuesta (RSM), modelando y analizando el impacto de las variables escogidas para el estudio.

METODOLOGÍA

Se realizó una estimación del número de equipos electrónicos desde el 2015 hasta el 2018, teniendo en cuenta los equipos importados, producidos y exportados; contrastando con los equipos en uso. Con la metodología desarrollada por el INECC-IPN (Moguel, 2007) con respecto al tiempo de vida útil de estos equipos, se obtiene un estimado del número de tarjetas electrónicas residuales, con un peso estándar, extrapolando con datos estadísticos recientes como los expuestos en el inventario de residuos de la Ciudad de México (SEDEMA, 2019) y a nivel nacional por parte del INEGI y SEMARNAT (INEGI, 2018), lo cual se muestra en la Tabla 1.

Se llevó a cabo la determinación de la concentración de cobre en tableros electrónicos impresos residuales de tabletas electrónicas mediante lixiviación con agua regia en los PCB evaluados a diferentes tamaños de partícula después de la molienda, teniendo en cuenta la distribución granulométrica. Se realizó el análisis mediante RSM de la lixiviación de cobre con soluciones acuosas de ácido sulfúrico teniendo en cuenta las variables con sus respectivos valores y codificación como es mostrada en la Tabla 2.

Tabla 1. Masa total de PCB residuales de alto valor (Í.P.S.D CV, 2014)

AÑO	ESTIMATIVO DE MILLONES DE UNIDADES DE		
	LAPTOPS PC DE MESA CELULAR/TABLET		
2015	16.9	18.3	15
2016	18.5	20.1	16
2017	20.2	21.9	18
2018	21.9	23.8	20
Masa promedio PCB (Tm)/año	94.303	118.793414.36	Elaborada para el presente estudio a partir de (CV, 2014; INEGI, 2018; SEDEMA, 2019).

Tabla 2. Variables y valores del diseño experimental

Variables	Var	Valores			
Tamaño de partícula (um)	[PS]	18	35	60	140
Velocidad de agitación (rpm)	[v]	350	500	700	1000
[Ac sulfúrico] (mol/L)	[Ac]	1	2	3	4
Tiempo (h)	[t]	1	2	4	8 24
[Peróxido] p/p	[PO]	0	0.025		
Respuesta					
g Cu/Tm WPCB tratado					

RESULTADOS

Se realizó la trituration y molienda intercalada con un molino de discos y una licuadora industrial en el que se procesaron 1 kilogramo de tableros electrónicos residuales de celulares de gama media – baja desechados entre 2016 a 2019, obteniéndose un total de 333.14 gramos con tamaños de partícula menor a 1 mm.

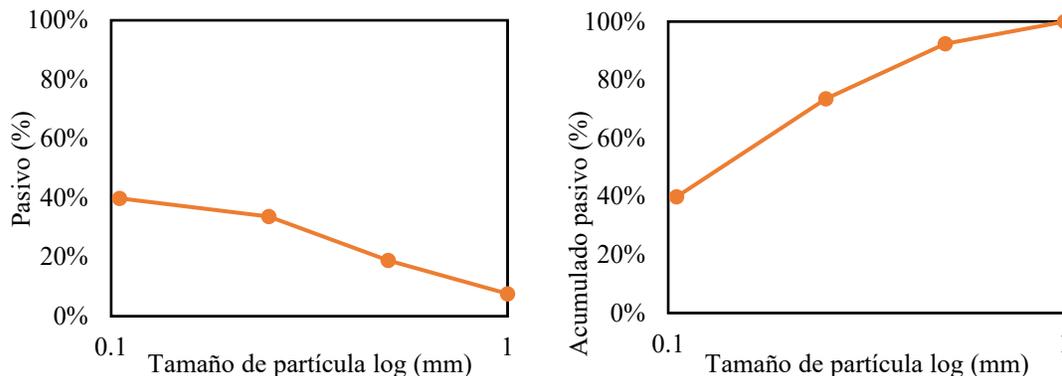


Figura 2 Distribución granulométrica de los residuos molidos que pasa por malla (izq) acumulativos (der)

Teniendo el análisis granulométrico, se realizó la lixiviación con agua regia a los diferentes tamaños de partícula, obteniéndose la cantidad de cobre extraído por PCB residual tratado a los diferentes tamaños de partícula como se muestra en la Figura 3. Asumiendo una distribución homogénea del cobre, se puede ver que, a un menor tamaño de partícula, se tiene una mayor exposición del cobre y al tener un menor tamaño las partículas de cobre, facilita también la extracción del cobre, el cual puede llegar a representar un poco más del 40% en peso del tablero a tamaños menores de $105\mu\text{m}$, representando la máxima cantidad extraíble. A tamaños mayores de $500\mu\text{m}$ sólo es extraíble entre 85 a 80% del cobre total, representando entre 32 y 34% en peso del PCB residual (WPCB por sus siglas en inglés).

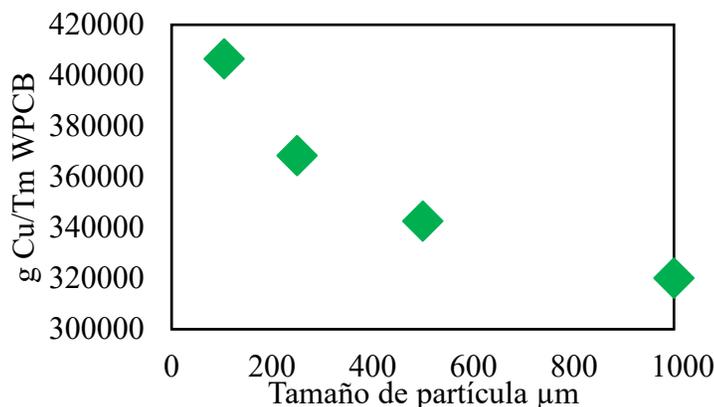


Figura 3. Masa de cobre (g) extraíble por tonelada métrica de PCB residual tratado a diferentes tamaños de partícula

En el caso de la extracción con ácido sulfúrico a las diferentes condiciones expresadas en la Tabla 2, se tiene un comportamiento inverso con respecto al tamaño de partícula, el cual se puede explicar por la alta hidrofobicidad de la matriz polimérica que a menores tamaños de partícula presenta una mayor resistencia a la transferencia de masa. Se corroboraron las limitaciones de transferencia de masa por medio de la evaluación del efecto de la velocidad de mezclado, dado que las velocidades deben ser mayores o igual a 750 rpm para que se pueda notar una extracción de cobre aceptable. El peróxido de hidrógeno mejoró la extracción de cobre por la funcionalización de la matriz polimérica (Van Yken y col., 2021), lo que junto al aumento del potencial de oxidación, permitió

una mejora en el extracción de cobre, En el caso del aumento de la concentración de ácido sulfúrico (mayores a 2), esta variable afecta negativamente debido a la disminución de pH, lo que tiene efectos no deseados, como lo muestran los diagramas de equilibrio del cobre(King, 2010).

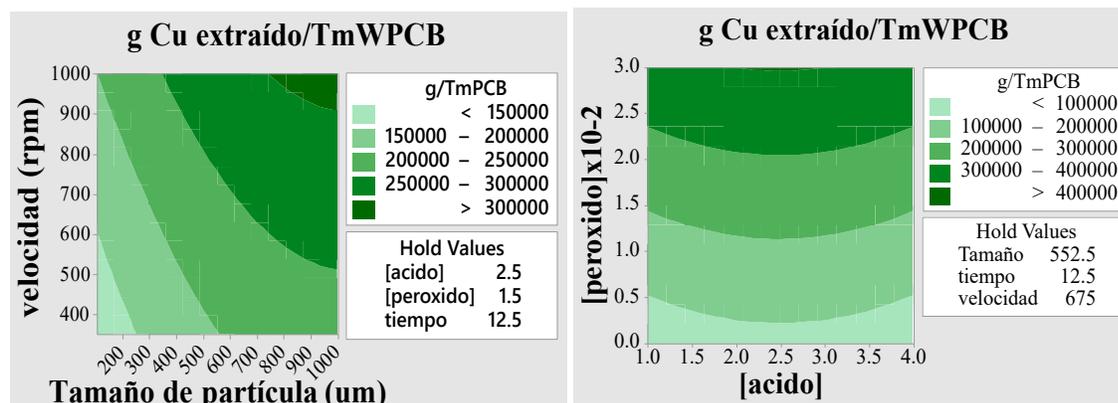


Figura 4. Distribución granulométrica de los residuos molidos que pasa por malla (izq) acumulativos (der)

Obteniéndose

$$\frac{g \text{ Cu}}{TmPCB} 10^{-7} = 1.65 + 0.24 PS + 1.64 PO + 1.26t + 4x10^{-3}v - 2.5x10^{-3}PS^2 - 3.3x10^{-3}[Ac]^2 + 0.24PSPO + 1.26PO t \quad \text{Ec. 1}$$

Con $R^2 = 78.04$ y $R^2(\text{ajustado}) = 75.25$

A pesar de que el modelo obtenido muestra que a mayores velocidades de mezclado se tiene una mejor extracción, durante la experimentación se observó que a esta velocidad se formaban remolinos, los cuales arrojaban los residuos fuera de la solución. Debido a esto, son necesarias evaluaciones adicionales para establecer de mejor manera el efecto de la velocidad de mezclado.

CONCLUSIONES

Mediante la metodología de RSM se logró el modelado de la extracción de cobre con ácido sulfúrico. Todas las variables presentaron impacto en la extracción de cobre, siendo PS y [Ac] las de mayor impacto. El óptimo local encontrado fue a tamaños de partícula mayores a 1 mm, con H_2O_2 , una concentración de ácido de 2.5 mol/L y un tiempo de 24 h con velocidad mayores a 750 rpm. Debido a la alta complejidad del proceso, especialmente la naturaleza hidrofóbica de la matriz en la que se encuentran los metales, se presenta una desviación significativa ($R^2 = 75.25$) del comportamiento real, así como un bajo rendimiento a tamaños de partícula menores a 250 μm

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo de la Universidad de Guanajuato. Asimismo, J.A. Gómez-Durán agradece el apoyo económico de CONACyT por medio de una beca para la realización de sus estudios doctorales.

II Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Mayo 18-20, 2022.

Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar

© 2022, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

BIBLIOGRÁFICAS

- Baldé, C. P., Forti, V., Gray, V., Kuehr, R., Stegmann, P. (2017). *The Global E-waste Monitor 2017 Quantities, Flows, and Resources*.
- Charles, R. G., Douglas, P., Hallin, I. L., Matthews, I., & Liversage, G. (2017). An investigation of trends in precious metal and copper content of RAM modules in WEEE: Implications for long term recycling potential. *Waste Management*, 60, 505-520. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2016.11.018>
- Council, T. W. G. (2017). *Gold Demand Trends 2016*. Retrieved 22-01-2020 from <https://www.gold.org/goldhub/research/gold-demand-trends/gold-demand-trends-full-year-2016/technology>
- CV, Í. P. S. D. (2014). *Plan de manejo de residuos de aparatos electrónicos y eléctricos RAEE*.
- Delegacionales, C. C. N. d. G. M. y. (2013). *Módulo 6: Residuos Sólidos Urbanos*. Ciudad de Mexico
- Gamiño-Arroyo, Z., Pareau, D., Buch, A., Gomez-Castro, F. I., Sánchez-Cadena, L. E., Stambouli, M., Avila-Rodriguez, M. (2021). Design of Multistage Extraction System for Simultaneous Separation of Silver and Gold from Thiourea Solutions. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 164, 108391. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cep.2021.108391>
- INCYTU. (2018). *Residuos Electrónicos*. Ciudad de Mexico Retrieved from https://www.foroconsultivo.org.mx/INCYTU/documentos/Completa/INCYTU_18-008.pdf
- INEGI. (2018). *Basura*. Retrieved 15-08-2021 from <http://cuentame.inegi.org.mx/territorio/ambiente/basura.aspx?tema=T>
- Kaya, M. (2016). Recovery of metals and nonmetals from electronic waste by physical and chemical recycling processes. *Waste Management*, 57, 64-90. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2016.08.004>
- Kaya, M. (2019). *Electronic Waste and Printed Circuit Board Recycling Technologies* (1 ed.). Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-26593-9>
- King, F. (2010). Critical review of the literature on the corrosion of copper by water.
- Lu, Y., & Xu, Z. (2016). Precious metals recovery from waste printed circuit boards: A review for current status and perspective. *Resources, Conservation and Recycling*, 113, 28-39. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2016.05.007>
- Management, J. M. P. P. M. (2017). *PGM MARKET REPORT MAY 2017 Summary of Platinum, SUPPLY & DEMAND IN 2016*.
- Moguel, G. J. R. (2007). *DIAGNÓSTICO SOBRE LA GENERACIÓN DE RESIDUOS ELECTRÓNICOS EN MÉXICO*. Ciudad de Mexico
- Oliveira, P., Taborda, F., Nogueira, C., & Margarido, F. (2012). The Effect of Shredding and Particle Size in Physical and Chemical Processing of Printed Circuit Boards Waste. *Materials Science Forum*, 730-732, 653-658. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.730-732.653>
- SEDEMA. (2019). *INVENTARIO DE RESIDUOS SÓLIDOS DE LA CIUDAD DE MÉXICO*. Ciudad de México
- Tsydenova, N., & Heyken, M. (2019). Formal and Informal E-waste Collection in Mexico City. In A. Pehlken, M. Kalverkamp, & R. Wittstock, *Cascade Use in Technologies 2018* Berlin, Heidelberg. Van Yken, J., Cheng, K. Y., Boxall, N. J., Sheedy, C., Nikoloski, A. N., Moheimani, N. R., & Kaksonen, A. H. (2021). A Comparison of Methods for the Characterisation of Waste-Printed Circuit Boards. *Metals*, 11(12), 1935. <https://www.mdpi.com/2075-4701/11/12/1935>



**NUEVAS
TÉCNICAS DE
OPTIMIZACIÓN**

DISEÑO MOLECULAR ÓPTIMO DE FÁRMACOS PÉPTIDICOS ASISTIDO POR COMPUTADORA

Benavides-Merla Ariel Emilio ^a, Aguirre Bañuelos Patricia ^a, Escobedo Moratilla Abraham ^b, Román Martínez Alicia ^{a**}

RESUMEN

Los péptidos y peptidomiméticos representan una clase única de compuestos farmacéuticos que suelen ser capaces de inhibir y/o modular complejos de proteínas funcionales, demostrando una baja toxicidad y un buen acoplamiento proteico, con el fin de mantener la homeostasis inmunológica contra una plétora de patologías². Comprender este mecanismo de acción de las interacciones péptido-proteína y/o ligando, son un gran reto para la industria biofarmacéutica, dado a que es necesario proponer cambios específicos a las estructuras químicas de los compuestos de estudio para determinar su comportamiento celular y así incrementar su afinidad con la diana terapéutica. Para ello, implementaremos una metodología sistemática que abarca el uso de diferentes enfoques computacionales¹, estableciendo los parámetros y limitaciones para la adecuada optimización del diseño molecular asistido por computadora (*Computer-aided drug design*) que conducen al desarrollo de candidatos fármacos peptídicos. En el caso de nuestro proyecto de investigación, nos centraremos en el diseño de un fármaco peptídico del complejo de la neuroquinina-1⁸ (NK1R) y su respectivo ligando, un undecapéptido perteneciente a las taquininas denominado sustancia P, asociados a enfermedades neurodegenerativas, que al unirse modulan la presencia de inflamación y dolor². Primeramente, identificaremos la disponibilidad de la estructura tridimensional del complejo NK1R-sustancia P en las bases de datos Protein Data Bank y UniprotKB con el fin de detectar las regiones proteínicas que serán utilizadas como plantilla para el diseño⁹. Una vez identificadas las regiones proteínicas, es necesario comprender las propiedades de los aa de anclaje tanto del receptor como el ligando mediante Expassy⁴, así como comprender y predecir los sitios de unión del complejo por medio de DoGSiteScorer¹². Además, se determina la flexibilidad y estabilidad de la estructura del ligando específico (sustancia P) mediante el software de optimización Avogadro a diferentes estados de protonación⁵. Posteriormente se busca la conformación y posición óptima del receptor (NK1R) mediante el software Chimera⁷. En caso de encontrarse con otros ligandos, se realiza un cribado virtual¹¹ para determinar que ligando presenta mayor afinidad al receptor. Por último, se emplean softwares de acoplamiento molecular (*docking molecular*) como Autodocks Tools para generar una predicción de interacciones del complejo receptor-ligando^{3,10}. Como resultados esperados, tendremos a nuestra disposición tres perfiles del receptor NK1R⁸, con sus respectivos ligandos involucrados en la respuesta analgésica y/o antiinflamatoria¹, que nos permitan la construcción de un complejo péptido-ligando útil para la validación de candidatos fármacos peptídicos de alta calidad, para la industria biofarmacéutica.

Palabras clave: fármacos peptídicos, diseño molecular asistido por computadora (*computer-aided drug design*), acoplamiento molecular (*docking molecular*).

INTRODUCCIÓN

La industria farmacéutica es reconocida por el cumplimiento de estándares de calidad que requieren ser evaluados constantemente para cumplir con las especificaciones del producto. Sin embargo, a pesar de ello, el descubrimiento de un fármaco a su vez conlleva un esfuerzo multidisciplinario y costoso para la industria farmacéutica con una aproximación de 12 a 20 años de estudio, para la implementación de un diseño único.

Ante esta problemática la industria farmacéutica ha evolucionado con el fin de mejorar su rendimiento operativo hacia la sustentabilidad y la excelencia de sus productos, poniendo en práctica enfoques orientados hacia la gestión de la calidad desde el diseño, también conocida como Quality by Design.

Siendo un enfoque totalmente práctico, dado a que incorpora toda la gestión de la información del producto a diseñar, pronosticando como van a ser evaluados los productos bajo el desarrollo de ensayos clínicos, acelerando sus procesos de manera efectiva, reduciendo las variables del diseño experimental y seleccionando solamente aquellos productos que se encuentren en un estado a prioripara la industria farmacéutica, impulsándola hacia el desarrollo de nuevas estrategias adecuadas para el aseguramiento del desempeño del proceso y del producto.

Como resultado se han desarrollado softwares y herramientas basadas en modelos bioinformáticos que han adquirido un papel importante en muchos campos de la ciencia. Y sin duda se han convertido en un ingrediente clave para el descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos en la industria farmacéutica llamada peptidología computacional.

En la actualidad a esta metodología se le conoce como el diseño de fármacos asistido por computadora, también conocido como computer aided drug design (CADD). Dicha metodología no solamente se enfoca en el desarrollo de moléculas de un tamaño considerablemente pequeño para una determinada diana terapéutica, según la regla de Lipinski, sino que también puede ser una guía especializada para el diseño, optimización y selección de compuestos de mayor tamaño como los péptidos o moléculas similares a los péptidos, es decir peptoides o peptidomiméticos, cuyas propiedades fisicoquímicas sean de gran interés para la industria farmacéutica considerando sus componentes bioactivos, siendo así bioproductos.

Comprender el modo de acción de las moléculas bioactivas a nivel molecular es un gran reto, pues es necesario: 1) encontrar nuevos compuestos líderes para su posterior optimización, 2) identificar compuestos selectivos; y 3) optimizar la actividad biológica de compuestos activos.

Nuestra investigación se enfocará en desarrollar una metodología sistemática para caracterizar y proporcionar candidatos fármacos peptídicos mediante el diseño molecular asistido por computadora. (CADD), que nos permita reducir los tiempos y costos para el desarrollo de un fármaco peptídico dentro de la industria farmacéutica. Estableciendo los parámetros y limitaciones dentro de un espacio experimental virtual (in silico), para su

adecuada optimización del acoplamiento molecular (molecular docking) con la respectiva diana terapéutica, capaz de inducir una respuesta analgésica y/o antiinflamatoria.

METODOLOGÍA

La presente investigación se desarrolló en la Unidad de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí. El alcance de la investigación es el cumplimiento de los parámetros establecidos para el diseño de candidatos de fármacos peptídicos con actividad analgésica y antiinflamatoria. Como resultado tendremos a nuestra disposición una metodología sistemática que nos permita evaluar, el cumplimiento de los parámetros establecidos. Para establecer los parámetros, fue necesario emplear diversos enfoques computacionales desde el enfoque basado en la estructura tridimensional del complejo péptido-ligando, así como el análisis de las propiedades de los aminoácidos de anclaje del péptido, de los ligandos específicos, del conocimiento del péptido/ligandos posibles o la creación desde novo del péptido hasta el adecuado acoplamiento molecular (docking molecular). Lo cual nos lleva a la estimación de candidatos fármacos peptídicos con mayor afinidad y permeabilidad celular.

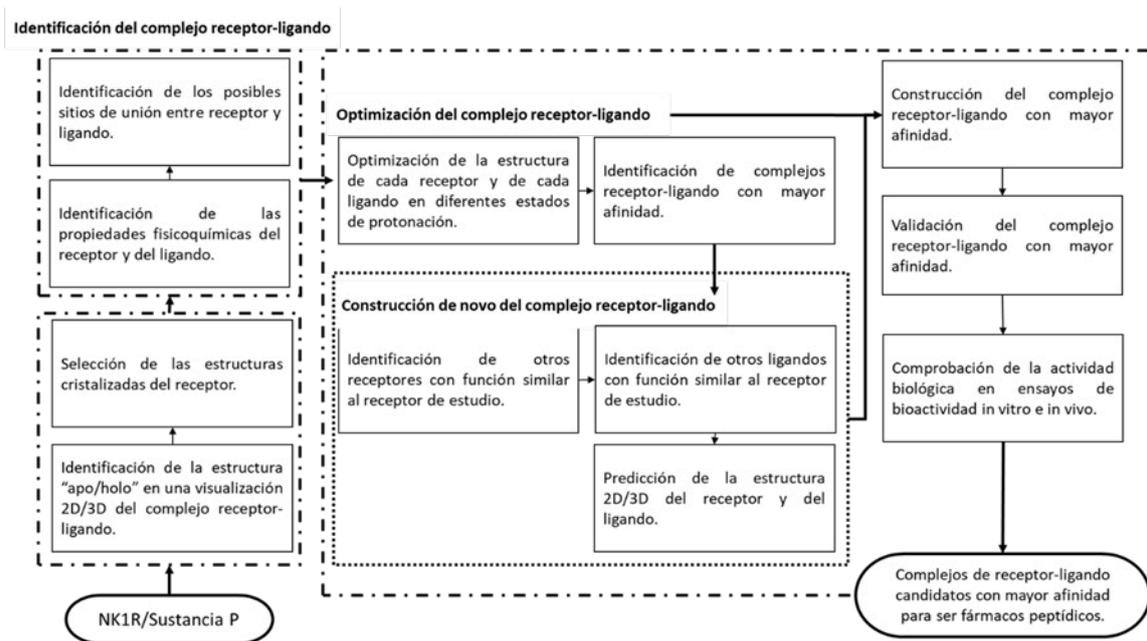


Figura.1. Representación sistemática de la metodología. Se puede observar en 4 pasos fundamentales para el diseño de fármacos peptídicos. a) Identificación del complejo receptor-ligando. b) Optimización del complejo receptor-ligando. c) Construcción de novo del complejo receptor-ligando. d) Ensayos de Docking molecular para la validación de complejo receptor-ligando con mayor afinidad.

El primer paso fue la identificación de la disponibilidad de la estructura tridimensional del complejo receptor-ligando dentro de las bases de datos, con el fin de detectar las regiones proteicas, que serán utilizadas como plantilla para el diseño de péptidos. Una vez identificado el complejo, podemos determinar si, tenemos el ligando adecuado para nuestro receptor, de no ser así nuestra metodología nos permitirá identificar los posibles ligandos relacionados con nuestro péptido. Si tenemos el ligando específico para nuestro

complejo, pues optamos por identificar la flexibilidad y estabilidad de las estructuras tanto del receptor como del ligando mediante Avogadro.

Posteriormente determinamos si nuestro complejo está listo geoméricamente, dado a que dicho programa nos permite visualizar los estados de protonación y de energía libre de nuestros ligandos, lo cual es de gran ayuda para luego emplear ensayos por medio de herramientas de acoplamiento molecular (docking molecular). Por lo tanto, en la medida que se cumplen los parámetros y etapas establecidas para el espacio experimental virtual (in silico) se validará la metodología sistemática para la obtención de candidatos fármacos peptídicos mediante el nivel de optimización del diseño del bioproducto con capacidad de ejercer un efecto terapéutico analgésico y/o antiinflamatorio.

RESULTADOS

Nuestra metodología inicia desde la identificación de la disponibilidad de la estructura tridimensional del complejo receptor-ligando dentro de las bases de datos, con el fin de detectar las regiones proteicas, que serán utilizadas como plantilla para el diseño de fármacos peptídicos. En la tabla 1, podemos observar el resultado de la selección de receptores NK1R, siendo las estructuras cristalizadas 6J20, GHLO y 6HLP, las estructuras que cumplen con los criterios de selección desde la resolución en Å, y un valor de R cercano a 0.

Base de Datos Blanco de Estudio	PDB								
	PDB ID	Nombre	Tamaño del Receptor (aa)	Peso Molecular (kDa)	Método	Resolución (Å)	# Átomos Solapados	Rfree	Clasificación
RECEPTOR NK1R	6E59	Crystal structure of the human NK1 tachykinin receptor	542	62.45	Difracción de rayos X	3.40	8	0.301	Proteína de señalización
	6J20	Crystal structure of the human NK1 substance P receptor	441	51.02		2.70	2	0.281	Proteína de membrana
	6J21			51.32		3.20	2	0.267	
	6HLL			59.33		3.27	8	0.275	
	6HLO	Crystal structure of the Neurokinin 1 receptor	520	65.75		2.40	5	0.236	
	6HLP			67.50		2.20	6	0.221	

Tabla.1. Enfoque basado en la estructura 3D del complejo receptor-ligando. Se observa que las estructuras cristalizadas 6J20, 6HLO y 6HLP cumplen con los criterios para la selección del cristal representativo del receptor NK1R.

Una vez seleccionadas las estructuras cristalizadas, tenemos que evaluar sus propiedades fisicoquímicas, las cuales nos permitirán identificar las regiones proteicas del sitio de unión con mayor área de interacción y con un porcentaje de probabilidad mayor a 80%.

En la tabla 2. Podemos observar las características fisicoquímicas de las estructuras cristalizadas seleccionadas previamente con los criterios del cristal óptimo para ensayos de docking molecular. Además de identificar el patrón conservado correspondiente a la familia de receptores de la proteína G



Figura.2. Enfoque basado en las propiedades de los aminoácidos.

Base de Datos	PDB	EXPASSY - PROTPARAM				
	PDB ID	Tamaño de la Secuencia (aa)	Punto Isoléctrico (pH)	Peso Molecular (Da)	aa (+)	aa (-)
Blanco de Estudio	6E59	542	7.90	61806.37	49	47
	6J20	520	8.87	50438.08	38	30
	6J21	441	8.78	50382.02	38	31
	6HLL	520	7.86	58977.32	48	46
	6HLO					
	6HLP					

Tabla.2. Enfoque basado en las propiedades de los aminoácidos de anclaje del receptor. Se observa que el dominio conservado en las secuencias aminoacídicas correspondientes con el receptor NK1R, pertenece a la familia de receptores de la proteína G.

En cuanto al sitio de unión. En la tabla 3. Podemos observar las características de las dimensiones del área de sitio de unión al ligando de cada una de las estructuras cristalizadas del receptor NK1R. Siendo la estructura 6HLO, la que presenta un mayor porcentaje de drogabilidad.

Base de Datos	PDB	ZBH-DOGSITESCORER				
	PDB ID	Pocket Principal	Volumen (Å ³)	Superficie (Å ²)	Profundidad (Å)	Drug Score (%)
Blanco Terapéutico	6J20	P_0	765.21	846.43	17.15	0.81
	6HLO		865.61	920.46	23.11	0.84
	6HLP		762.38	797.43	16.81	0.81

Tabla.3. Enfoque basado en el conocimiento del receptor-ligando. Se observa las características de las dimensiones del área de sitio de unión al ligando de cada una de las estructuras cristalizadas del receptor NK1R. Siendo la estructura 6HLO, la que presenta un mayor porcentaje de drogabilidad.

Por otra parte, en cuanto a los ligandos específicos, se encontró que tanto los ligandos GWA y GBQ, correspondientes a los medicamentos Aprepitant y Neupitant, respectivamente, tienen mayor presencia en las estructuras cristalizadas seleccionadas previamente. Dicha información nos permite comparar la afinidad (kJ/mol) de estos medicamentos con el ligando peptídico de la sustancia P.

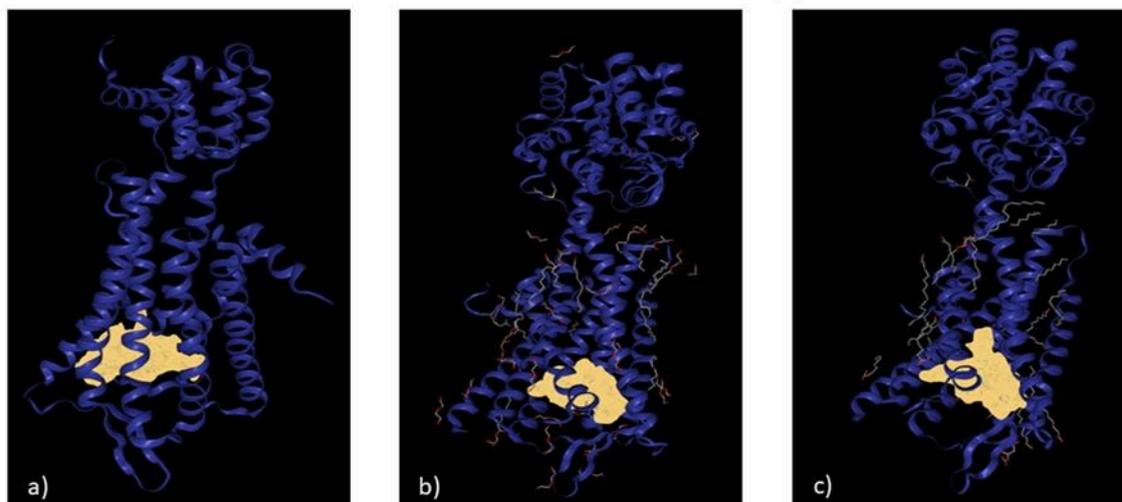


Figura.3. Estructuras del receptor NK1R. a) Sitio de unión de la estructura cristalizada 6J20. b) Sitio de unión de la estructura cristalizada 6HLP. c) Sitio de unión de la estructura cristalizada 6HLO. En ambas estructuras comparten un sitio de unión de dimensiones similares, sin embargo, 6HLO, presenta un mayor porcentaje de drogabilidad.

Al identificar el complejo receptor-ligando, podemos determinar si tenemos el ligando específico adecuado para nuestro receptor, de no ser así nuestra metodología nos permitirá identificar los posibles ligandos relacionados con nuestro receptor de estudio. Posteriormente, se necesita que ambas estructuras, tanto receptor y ligando estén optimizadas para un ensayo de docking molecular, para esto es necesario identificar la flexibilidad y estabilidad de la estructura del ligando a diferentes estados de protonación, para identificar el estado basal de energía de cada ligando.

CONCLUSIONES

Como resultado tendremos a nuestra disposición una metodología sistemática que nos permitirá identificar las limitaciones de cualquier péptido mediante diversos enfoques computacionales. Por último, tendremos que hacer la validación de cada ensayo de docking molecular para los distintos estados de protonación dentro de un rango de 7.0 a 8.0. Esta validación nos permitirá obtener la unión adecuada entre receptor y ligando y así obtener diseños únicos de alta calidad.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, por permitirme ser parte del programa del posgrado. Así mismo a mis mentores y que forman parte de este proyecto, en especial a mi directora de tesis, Dra. Alicia Román.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Alshehri, Abdulelah S; Gani, R; & You, F. (2020). Deep learning and knowledge- based methods for computer-aided molecular design—toward a unified approach: State- of-the-art and future directions. *Computers and Chemical Engineering*. Vol.141. doi: **10.1016/j.compchemeng.2020.107005**.
- [2] Dadar, M; Shahali, Y; Chakraborty, S; Prasad, M; Tahoori, F; Tiwari, R; & Dhama, K. (2019). Anti-inflammatory peptides: current knowledge and promising prospects. *Inflammation Research*. Vol.68(2), (pp.125-145). doi: **10.1007/s00011-018-1208-x**.
- [3] Eberhardt, J; Santos-Martins, D; Tillack A; & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *Journal of Chemical Information and Modeling*.
- [4] Gasteiger, E; Gattiker, A; Hoogland, C; Ivanyi, I; Appel, R.D; & Bairoch, A. (2003). ExPASy: the proteomics server for in-depth protein knowledge and analysis. *Nucleic Acids Research*. Vol.31. (pp. 3784-3788).
- [5] Hanwell, M; Curtis, Donald, E; Lonie, David, C; Vandermeersch, T; Zurek, E; & Hutchison, Geoffrey, R. (2012). Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*. (pp. 4-17).
- [6] La Manna Sara, Di, Natale, C; Florio, D; & Marasco, D. (2018). Peptides as Therapeutic Agents for Inflammatory-Related Diseases. *International Journal of Molecular Sciences*. Vol.1(18). doi:**10.4155/fmc.15.142**.
- [7] Pettersen, E.F; Goddard, T. D; Huang, C.C; Couch, G.S; Greenblatt, D.M; Meng, E.C; & Ferrin T.E. (2004). UCSF Chimera - A visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of Computational Chemistry*, Vol.25(13), (pp. 1605-1612).
- [8] Schoppe, J; Ehrenmann, J; Klenk, C; Rucktooa, P; Schutz, M; Dore, A.S; & Pluckthun, A. (2019). Crystal structures of the human neurokinin 1 receptor in complex with clinically used antagonists. *Nature Communications*. Vol.10. (pp. 17).
- [9] The UniProt Consortium. (2019). UniProt: a worldwide hub of protein knowledge. *Nucleic Acids Research*. Vol.47.
- [10] Trott, O; & Olson, A.J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, Vol.31(2), (pp. 455-461).
- [11] Vanhee, Peter; Van Der Sloot, Almer M; Verschuere, E; Serrano, L; Rousseau, F; & Schymkowitz, Joost. (2011). Computational design of peptide ligands. *Trends in Biotechnology*. Vol.29(5), (pp.231-239). doi: **10.1016/j.tibtech.2011.01.004**.

Aplicación de la Teoría de Juegos en un modelo del Sistema Eléctrico Nacional basado en el concepto de Energy Hub

Carlos A. Rangel-Osornio ^a, Luis R. Barajas-Villarruel ^a, Vicente Rico-Ramírez ^{a,*}

*Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Celaya, Departamento de Ingeniería Química, Antonio García Cubas Pte. 600, Celaya, Gto., México, 38010.
ejemplo@ugto.mx*

RESUMEN

En este trabajo se presenta un modelo matemático basado en teoría de juegos para la gestión óptima de un sistema eficiente de producción, conversión y distribución de energía eléctrica en el país. Como punto de partida para el desarrollo, se utilizó un modelo basado en el concepto de *Energy Hub* (EH) planteado como un problema lineal (LP); el objetivo consiste en minimizar los costos de operación y generación de energía eléctrica. Dicho modelo se replanteó en un contexto de teoría de juegos, en el que se consideran el equilibrio de Nash y las interacciones líder-seguidor de Stackelberg como escenarios para el análisis. Con el modelo propuesto se estudia el comportamiento del sistema en el que las regiones de control del Sistema Eléctrico Nacional (SEN) se consideran como los participantes del juego matemático.

Palabras clave: Teoría de Juegos, Equilibrio de Nash, Energy Hub

INTRODUCCIÓN

El Sistema Eléctrico Nacional (SEN) está conformado por nueve regiones de control y un pequeño sistema aislado llamado Sistema Mulegé (MLG). [1] Las siete regiones del macizo continental (noroeste, norte, noreste, oeste, centro, este, peninsular) se encuentran interconectadas y forman el Sistema Interconectado Nacional (SIN). En ellas se comparten los recursos y reservas de capacidad ante la diversidad de demandas y situaciones operativas. Esto hace posible el intercambio de energía para lograr un funcionamiento más económico y confiable en su conjunto. Además, existen trece conexiones internacionales con Norte y Centroamérica, de las cuales once se encuentran en la frontera con Estados Unidos y dos con Centroamérica.

La compra-venta de energía es regulada por el Centro Nacional de Control de Energía (CENACE) mediante el Mercado Eléctrico Mayorista (MEM). Dentro de este mercado actualmente se enlistan 119 Participantes, de los cuales 80 son generadores de energía eléctrica. [2] Esto genera competitividad en el mercado para abastecer energía en el sistema.

Para representar la energía convertida en cada región se ha utilizado el concepto de Energy Hub (EH). [4] Un EH es una unidad en la que se pueden convertir, acondicionar y almacenar múltiples portadores de energía. Además, representa una inter-fase entre

diferentes infraestructuras y/o cargas energéticas. El objetivo del concepto EH es proporcionar un marco de modelado que sea suficientemente general para cubrir todos los tipos de flujos de energía, pero lo suficientemente concreto para hacer declaraciones sobre sistemas reales.

Bajo este concepto, cada región del SEN (equivalente a un Hub) cuenta con una función objetivo que es minimizar costos de combustible, importación y exportación, además de reducir costos por emisiones. Dado que el número de participantes es elevado, se propone que cada región participe como jugador en un Equilibrio de Nash. El Equilibrio de Nash es un concepto de solución de la teoría de juegos, en el cual se asume que cada jugador conoce la estrategia que tomarán los demás jugadores. El equilibrio se logra cuando ninguno de los jugadores puede aumentar su recompensa cambiando unilateralmente sus acciones. Es decir, es el punto en donde ningún jugador tiende a cambiar su estrategia, asumiendo una estrategia constante de los demás participantes.

Asimismo, otro concepto de solución de la teoría de juegos es la competencia de Stackelberg, el cual consiste en un juego entre un líder y un seguidor, o bien, múltiples líderes y múltiples seguidores. Este tipo de problemas en programación matemática son conocidos como problemas de dos niveles, siendo la función objetivo superior el líder y la inferior el seguidor.

METODOLOGÍA

El modelo LP utilizado como referencia se basa en el modelo NLP de Andrés-Martínez y col. [4]; se realizan las mismas consideraciones y se usan los mismos parámetros de dicho modelo NLP.

La función objetivo de cada región (Ecuación 1) considera el costo de los portadores de energía (CPE_k), importaciones ($Cimp_m$), exportaciones ($Cexp_n$) y costo por emisiones de CO_2 ($Cco2$). Donde, $P_{i,k}$ es el flujo del portador de energía k en el Hub i , $IM_{m,i}$ es la importación de energía desde el nodo m al Hub i , $EX_{i,n}$ es la exportación de energía desde el Hub i al nodo n , $Tco2$ son las toneladas de CO_2 producidas por MW de energía eléctrica generada por tecnología q , y $Lc_{i,c}$ es el flujo de electricidad en el Hub i que sale del convertidor c . Las restricciones del modelo lineal son tomadas del trabajo presentado por Barajas-Villarruel [3].

$$\min \psi_i = \sum_{k \in K} CPE_k P_{i,k} + \sum_{m \in MI(m,i)} Cimp_m IM_{m,i} - \sum_{n \in IN(i,n)} Cexp_n EX_{i,n} + Cco2 \sum_{c)UsQconv(q)UsIC(i,c)} Tco2_q Lc_{i,c} q, c \in sQC(q). \quad \text{Ec. 1}$$

Se proponen dos enfoques de solución al problema del Sistema Eléctrico Nacional, un equilibrio de Nash y un equilibrio de Stackelberg. En el equilibrio de Nash, cada región minimiza su función objetivo (Ecuación 1). En el equilibrio de Stackelberg (Ecuación 3), se propone priorizar la reducción de emisiones en el nivel superior, con el objetivo de mitigar el aumento de costos ocasionados por la competitividad del equilibrio de Nash.

Para resolver el equilibrio de Nash, se establecen las condiciones de optimalidad de Karun-Kush-Tucker (KKT) para cada participante o región (Ecuación 2), lo que genera un problema mixto complementario (MCP).

$$\begin{aligned}
 \min_{x_i} f_i(x_i, x_{-i}) \quad \forall i & \quad \nabla_{x_i} f(x_i, x_{-i}) + \sum h_{ij}(x_i) \lambda_{ij} + \sum g_{ik}(x_i) \mu_{ik} \geq 0 \\
 \text{s. t. } h_{ij}(x_i) = 0 \quad \forall i, j & \rightarrow \perp x_i \geq 0 \\
 g_{ik}(x_i) \leq 0 \quad \forall i, k & \quad h_{ij}(x_i) = 0 \quad \lambda_{ij} \text{ libre } \forall k \\
 & \quad g_{ik}(x_i) \leq 0 \perp \mu_{ik} \geq 0 \quad \forall l
 \end{aligned} \tag{Ec. 2}$$

Actualmente existen algoritmos de solución para este tipo de problemas, pero la naturaleza matemática del problema resultante puede conducir fácilmente a infactibilidades que hacen complicada la convergencia del modelo. Por ello se hace uso de conjuntos de orden especial de tipo 1 (SOS1) para relajar el problema y permitir la desviación de las restricciones disyuntivas generadas de las condiciones de KKT. Esta desviación es añadida a la función objetivo como se describe en la Ecuación 3. [5]

$$\begin{aligned}
 \min f(x) \quad \text{s. t. } g(x) \geq 0 \perp \mu_{ik} \geq 0 & \rightarrow \min f(x) \quad \text{s. t. } 0 \leq x \leq M(1-b) \quad 0 \\
 & \quad \leq g(x) \leq M(1-b) \quad b \\
 & \quad \in \{0,1\} \\
 \min f(x) + |\sigma| \quad \text{s. t. } 0 \leq x \leq M(1-b + \sigma) \quad 0 & \rightarrow \min f(x) + \sigma^+ + \sigma^- \\
 \leq g(x) \leq M(1-b + \sigma) \quad b & \quad \text{s. t. } 0 \leq x \leq M(1-b + \sigma^+ + \sigma^-) \\
 \in \{0,1\} & \quad 0 \leq g(x) \leq M(1-b + \sigma^+ + \sigma^-) \\
 & \quad b \in \{0,1\} \quad \sigma^+, \sigma^- \text{ SOS1}
 \end{aligned} \tag{Ec. 3}$$

La solución de un problema de dos niveles (Ecuación 4) puede ser obtenida de manera similar, estableciendo las condiciones de optimalidad en el nivel inferior.

$$\begin{aligned}
 \min_x F(x, y) \quad \text{s. t. } H_i(x_i) = 0 \quad \forall i & \rightarrow \min F(x, y) \\
 G_j(x_j) \leq 0 \quad \forall j & \quad \text{s. t. } H_i(x_i) = 0 \quad \forall i \\
 \min_y f(x, y) \quad \forall i & \quad G_j(x_j) \leq 0 \quad \forall j \\
 \text{s. t. } h_k(x, y) = 0 \quad \forall k & \quad \nabla_y f(x, y) + \sum_k h_k(x, y) \lambda_k + \sum_l h_l(x, y) \mu_l \\
 g_l(x, y) \leq 0 \quad \forall l & \quad h_k(x, y) = 0 \quad \lambda_k \text{ libre } \forall k \\
 & \quad g_l(x, y) \leq 0 \perp \mu_l \geq 0 \quad \forall l
 \end{aligned} \tag{Ec. 4}$$

RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra la distribución óptima de los flujos de potencia reportados para el modelo NLP, el modelo LP, el equilibrio de Nash y equilibrio de Stackelberg. Se puede observar que en general, la distribución de flujos es muy similar en el modelo NLP y LP (Figuras 1a y 1b. Aquí la diferencia se asocia a que las eficiencias de los convertidores y los costos de combustibles son constantes para todas las regiones, lo que genera múltiples soluciones. [3]

Por su parte, en el modelo de Equilibrio de Nash (Figura 1c), se puede observar que, al considerar la competitividad de las regiones, hay un aumento en el uso de combustóleo y disminución del uso de gas natural; este aumento es más significativo en las regiones 3, 4 y 6 (Occidental, Noroeste y Noreste.). Por otra parte, en la región 1 (Central) el uso de carbón disminuye, y aumenta el uso de gas natural.

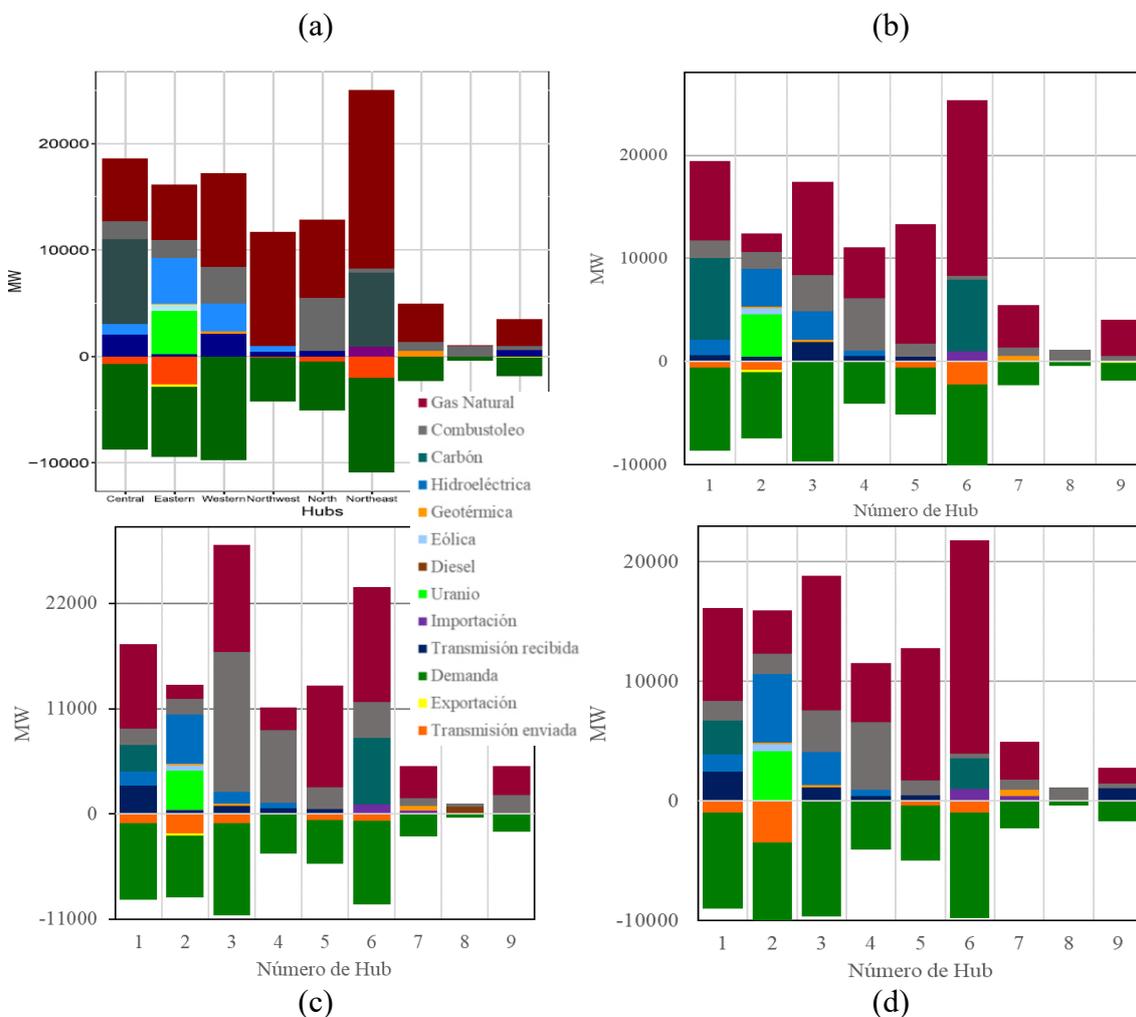


Figura 1. Distribución de Óptima de Flujos: A) Modelo NLP, B) Modelo LP, C) Modelo de Equilibrio de Nash, D) Modelo de Equilibrio de Stackelberg

En el Equilibrio de Stackelberg (ES) (Figura 1d), el uso de energía hidroeléctrica aumenta en las regiones 2 y 3 (Oriental y Occidental); también se observa un aumento del uso de gas natural, lo que a su vez ocasiona mayor flujo de transmisión enviada a otras regiones.

En la Tabla 1 se puede observar el porcentaje de energía limpia utilizada en el SEN para cada modelo. En los modelos LP y de Equilibrio de Nash (EN), debido a que se requiere lograr una producción de energía limpia del 25% de la energía total producida en el sistema, las soluciones se mantienen en este límite. Sin embargo, en el modelo de

Stackelberg (ES), al considerar las emisiones como función líder, se logra un 30% de producción de energía limpia en el sistema. En la Tabla 2 se muestran los costos por exportación, importación, combustible y por emisiones. En los modelos LP y EN, el aumento de uso de combustóleo, que se mencionó anteriormente (Figura 1), se ve reflejado en el costo de combustible y emisiones. Además, hay un aumento en el costo por importaciones.

Tabla 1. Potencia generada por tipo de energía en MW.

Tipo de Energía	LP	EN	ES
Limpia	11,347	11,245	13,432
Convencional	34,042	33,734	31,159
Total	45,389	44,979	44,591
% Limpia	25	25	30

En el modelo ES, el costo por emisiones es menor que en los modelos LP y EN, debido al aumento de energías limpias del 30% (Tabla 1). Sin embargo, hay un aumento de energía importada, lo que se puede atribuir a que las importaciones no son parte del sistema y no generan emisiones dentro de este. También se puede destacar que no hay exportación de energía, esto sucede por las consideraciones del modelo, en las que solo se establecen los límites de exportación y no un flujo de demanda para dicho fin. Sin embargo, el beneficio de esto último se puede ver reflejado en un enfoque multiperiodo, en donde existe la posibilidad de tener almacenamiento de energía; al no haber exceso de energía para exportar, no se requeriría almacenamiento de la misma.

Tabla 2. Costos por importación, exportación, combustible y emisiones en \$/MW.

	LP	EN	ES
Exportaciones	157,416	157,416	0
Importaciones	8,984	24,014	27,869
Combustible	2,349,047	2,684,275	
Emisiones	494,689	526,899	449,491
Total	2,677,336	3,077,772	2,932,939

CONCLUSIONES

Al considerar el Sistema Eléctrico Nacional bajo un esquema de Teoría de Juegos, se toma en cuenta la competitividad que existe en el mercado de generación de energía. Esto ocasiona un cambio en las decisiones óptimas individuales.

El Equilibrio de Nash busca que cada jugador maximice su función objetivo considerando las decisiones de los demás participantes, dentro de un mercado en el que existe competencia. Debido a esto, la función objetivo resultante es mayor con respecto al enfoque global del modelo LP; esto es a causa del aumento de energía importada. Sin embargo, se esperaría que la congestión en las redes de transmisión se viera reducida.

El Equilibrio de Stackelberg considera una interacción líder-seguidor; bajo este esquema, se consideran los costos por emisiones como objetivo líder, lo que produce mayor generación de energía por fuentes limpias y, en consecuencia, reduce costos al ser más barata la producción de estas fuentes. En este enfoque, los participantes se mantienen bajo un Equilibrio de Nash en el nivel inferior del problema.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al CONACYT y al Tecnológico Nacional de México por el apoyo proporcionado para el desarrollo de este proyecto.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Centro Nacional de Control de Energía (CENACE) (2020). Programa de Ampliación y Modernización de la Red Nacional de Transmisión y Redes Generales de Distribución del Mercado Eléctrico Mayorista (PAMRNT). https://www.cenace.gob.mx/Docs/10_PLANEACION/ProgramasAyM/Programa de Ampliación y Modernización de la RNT y RGD 2020 - 2034.pdf
- [2] Centro Nacional de Control de Energía (CENACE) (2016). Mercado Eléctrico y Operación del Sistema. <https://www.gob.mx/cenace/acciones-y-programas/mercado-y-operaciones-60717>
- [3] Barajas-Villarruel, L.R. (2022). Uso de la Programación Matemática para la Gestión Óptima de un Sistema de Producción, Conversión y Distribución de Energía Eléctrica en el Contexto Nacional. *Tesis de Maestría*. Instituto Tecnológico de Celaya.
- [4] Andrés-Martínez, O., Fuentes-Cortés, L.F. y Flores-Tlacuahuac, A. (2019) 110th Anniversary: Modeling National Power Flow Systems through the Energy Hub Approach. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 58, No. 31, pp. 14252-14266.
- [5] Weinhold, R. and Gabriel, S. A. (2020) Discretely constrained mixed complementary problems: Application and analysis of a stylised electricity market. *Journal of the Operational Research Society*, Vol 71, No. 2, pp. 237-249.