



SOAIQ

UNIVERSIDAD DE
GUANAJUATO



ISSN: 2992-8532

AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA

Vol 1, No. 2

MEMORIAS

III SIMPOSIO

de

Optimización Aplicada a la
Ingeniería Química

III SOAIQ

Guanajuato, Gto., 04 al 06 de octubre de 2023



AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA

Vol. 1, No. 2

**Memorias del III Simposio de Optimización
Aplicada a la Ingeniería Química**

AVANCES EN OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA, Vol. 1. No. 2, octubre 2023, 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 Santibáñez 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: 30 de octubre de 2023. Tamaño del archivo: 13.8 MB.



BIENVENIDA

En el contexto de la Ingeniería Química del siglo XXI, la optimización se ha convertido en una herramienta imprescindible que está transformando la forma en que se abordan los desafíos industriales y científicos. Con el rápido crecimiento de la población mundial y el aumento de la demanda de productos químicos, la industria se enfrenta a una creciente presión para encontrar soluciones eficientes, sostenibles y económicamente viables. En este panorama, la optimización emerge como una disciplina poderosa y versátil, que abarca una amplia gama de aplicaciones en la ingeniería química.

Una de las áreas donde la optimización destaca es en la mejora de la eficiencia en los procesos químicos. La complejidad inherente a muchas operaciones industriales demanda un enfoque sistemático y basado en datos para maximizar el rendimiento y minimizar los desperdicios. La optimización permite encontrar las mejores condiciones operativas para cada proceso, considerando múltiples variables, restricciones y objetivos. Al identificar estas condiciones, se logra una utilización más eficiente de los recursos y una disminución de los costos de producción, al tiempo que se reduce el impacto sobre el medio ambiente. Esto es de gran importancia en un mundo cada vez más preocupado por la sostenibilidad y la reducción de emisiones. Al minimizar los subproductos no deseados y las emisiones contaminantes, la optimización contribuye a una producción más limpia y responsable, lo que favorece la imagen y el desempeño ambiental de las empresas. Estos esfuerzos de optimización también se extienden a la gestión de la cadena de suministro, donde se busca reducir los costos logísticos y las emisiones de transporte, al tiempo que se asegura la entrega oportuna y eficiente de productos.

Además de la eficiencia y sostenibilidad, la optimización desempeña un papel crucial en la mejora de la calidad del producto y la seguridad de las operaciones. Mediante el diseño de sistemas de control avanzados basados en modelos matemáticos, se pueden mantener las variables del proceso dentro de rangos deseados, evitando desviaciones no deseadas y asegurando la uniformidad del producto. Esto no solo aumenta la calidad, sino que también mejora la seguridad y confiabilidad de los procesos, protegiendo a los trabajadores y el entorno.

Por otra parte, la optimización matemática se ha vuelto esencial para acelerar la investigación y el desarrollo de nuevos materiales, catalizadores y productos químicos. Con la capacidad de explorar grandes espacios de diseño en busca de soluciones óptimas, esta disciplina ha permitido avances significativos en campos como la nanotecnología, la biotecnología y la ciencia de los materiales.

La optimización ha dejado de ser una herramienta opcional para convertirse en un pilar fundamental en la Ingeniería Química del siglo XXI. Desde la mejora de la eficiencia y la sostenibilidad hasta el diseño de productos innovadores y la gestión de la cadena de suministro, su impacto se extiende por toda la industria química, promoviendo un enfoque más informado, responsable y orientado al futuro. A medida que avanza la tecnología y la capacidad de cómputo, se espera que la optimización matemática continúe desempeñando un papel aún más destacado, impulsando la innovación y el progreso en esta importante industria. Esto permite visualizar la importancia de la optimización en la Ingeniería Química, así como la necesidad de contar con este foro especializado en el área, donde se compartirán los avances en optimización y sus aplicaciones a la Ingeniería Química y áreas afines.



En este tercer Simposio se recibieron un total de 36 trabajos, distribuidos en tres áreas principales: Optimización Determinística Aplicada, Optimización Estocástica Aplicada, y Nuevas Técnicas de Optimización. Aprovechando las bondades de las plataformas virtuales, se contará con la participación de cuatro expertos reconocidos internacionalmente, quienes compartirán con los asistentes una variedad de temas relacionados con las distintas ramas de la optimización en Ingeniería Química. Asimismo, se contará con un panel de expertos quienes discutirán el impacto de la optimización en la Industria 4.0.

Esta tercera edición del Simposio guarda un especial significado, ya que será la primera ocasión en la cual el evento se lleva a cabo de forma presencial. Las primeras ediciones se llevaron a cabo en modalidad virtual, con el fin de salvaguardar la seguridad de los participantes. Una vez que se han retomado en su totalidad las actividades presenciales, hemos decidido llevar a cabo este tercer Simposio en dicha modalidad. Estamos seguros de que esto permitirá una mayor interacción entre los participantes, cumpliendo así uno de los objetivos principales del evento. En esta ocasión se ha decidido elegir como sede la ciudad de Guanajuato, Guanajuato, teniendo como institución co-organizadora a la Universidad de Guanajuato, a la cual se agradece profundamente el apoyo otorgado para la organización y desarrollo del evento, así como las facilidades para el uso de los espacios de la institución.

Es un gusto para nosotros recibir a los participantes en este III Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química. Agradecemos el interés en el evento, y esperamos que el programa que hemos preparado sea del agrado de los asistentes. Es nuestro objetivo promover la investigación en los temas que nos competen, así como la interacción entre la comunidad y la generación de nuevos proyectos que permitan la solución de distintos problemas en los que el ingeniero químico, con sus conocimientos y habilidades en optimización, puede aportar. Asimismo, esperamos que disfruten mucho de Guanajuato capital, ciudad que les recibe con los brazos abiertos. Les damos la más cordial bienvenida.

Dr. Fernando Israel Gómez Castro
Presidente del Comité Organizador

Dr. Juan Gabriel Segovia Hernández
Presidente del Comité Técnico



CONSEJO DIRECTIVO 2022-2024

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 Santibáñez Aguilar

Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey

Vocal de Investigación

santibanez.ezequiel@tec.mx



UNIVERSIDAD DE
GUANAJUATO



COMITÉ ORGANIZADOR

III SIMPOSIO DE OPTIMIZACIÓN APLICADA A LA INGENIERÍA QUÍMICA

Fernando Israel Gómez Castro

Juan Gabriel Segovia Hernández

Claudia Gutiérrez Antonio

Eduardo Sánchez Ramírez

José Ezequiel Santibáñez Aguilar



UNIVERSIDAD DE
GUANAJUATO



COMITÉ TÉCNICO III SOAIQ

Juan Gabriel Segovia Hernández

Presidente

Fernando Israel Gómez Castro

Claudia Gutiérrez Antonio

Eduardo Sánchez Ramírez

José Ezequiel Santibáñez Aguilar



COMITÉ REVISOR

III SOAIQ

Abraham Escobedo Moratilla
Antonio Flores Tlacuahuac
Aurora de Fátima Sánchez Bautista
Aurora del Carmen Munguía López
César Ramírez Márquez
Christian Felipe Rodríguez Robles
Divanery Rodríguez Gómez
Dulce Celeste López Díaz
Francisco López Villarreal
Gabriel Contreras Zarazúa
Gerardo Giovanni Esquivel Patiño
Héctor Hernández Escoto
Ilse María Hernández Romero
Iraís Amaranta Quintero Ortega
J. Carlos Cárdenas Guerra
Jaime David Ponce Rocha
Javier Tovar Facio
Jazmín Cortez González
Jesús Manuel Núñez López

Jorge Luis García Castillo
Juan José Quiroz Ramírez
Juan Ramón Lizárraga Morazán
Julián Cabrera Ruiz
Luis Fernando Lira Barragán
Luis Germán Hernández Pérez
Luis Gerónimo Matallana Pérez
Luis Miguel Valenzuela Gómez
Martín Picón Núñez
Oscar Andrés Prado Rubio
Oscar Daniel Lara Montaña
Pablo Tenoch Rodríguez González
Pascual Eduardo Murillo Alvarado
Rodolfo Murrieta Dueñas
Sergio Iván Martínez Guido
Úrsula Fabiola Rodríguez Zúñiga
Varinia López Ramírez
Zeferino Gamiño Arroyo



ÍNDICE

OPTIMIZACIÓN DETERMINÍSTICA APLICADA	11.
OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA APLICADA.....	72
NUEVAS TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN	151

OPTIMIZACIÓN DETERMINÍSTICA APLICADA

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE
OPTIMIZACIÓN APPLICADA
A LA INGENIERÍA QUÍMICA

AMQAR

Optimización multiobjetivo de la cadena de suministro para la producción de metanol renovable: potencial económico vs impacto ambiental

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

^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

El metanol es un componente de gran importancia en la industria, siendo fundamental para la producción de derivados como el formaldehído, el ácido acético, el dimetil éter, entre otros. Existe una variedad de materiales residuales que pueden emplearse para la generación de metanol. El aprovechamiento de estos materiales en la producción de dicho alcohol permitiría dar un segundo uso a residuos para la obtención de un producto con una amplia diversidad de aplicaciones. En este trabajo se presenta un modelo matemático que representa la cadena de suministro para la producción de metanol a partir de distintos tipos de residuos disponibles en México. La forma relajada del modelo se resuelve en el software GAMS V34.2.0, empleando como función objetivo económica la ganancia y como función ambiental las emisiones de dióxido de carbono. Se ha encontrado que la solución con el mejor compromiso corresponde a una ganancia de 7,334,100 UDS/año y emisiones de dióxido de carbono de -0.021 Mt/año.

Palabras clave: metanol renovable, cadena de suministro, optimización multiobjetivo, impacto ambiental.

INTRODUCCIÓN

En México, los sectores con mayor generación de emisiones al ambiente son el sector transporte, el sector energético y el sector industrial, los cuales tienen aportes en emisiones de CO₂ del 35%, 27% y 21% respectivamente (Transparency Climate, 2020). Para el caso concreto del sector industrial, la mejora en los procesos y la forma de obtención de los productos debe generar procesos y productos más verdes. La modificación del proceso de obtención de metanol en México representa un área de oportunidad, dado que la estrategia actual no es suficiente para satisfacer la demanda nacional. Sólo en el 2021 fue necesario realizar compras de metanol al extranjero por 162,442.4 toneladas (Secretaría de Economía, 2022). Debido a esto, se abre la

oportunidad de inclusión de procesos de obtención de metanol alternativos que permitan aportar a satisfacer la demanda nacional y evitar la compra externa. Una de estas alternativas es la modificación de la materia prima, cambiando el uso de fuentes fósiles por biomasa. Esto evitaría la dependencia en un sólo tipo de materia prima para la obtención del metanol, lo cual ha ocasionado problemáticas para satisfacer la demanda en años previos ante el desabasto de gas natural (Caloca Moreno y Medina Estrada, 2016)

Existen estudios comparativos de obtención de metanol a partir de carbón y biomasa, dónde se muestra una disminución en el consumo energético de los procesos y en cuanto a emisiones de CO₂ (Liu y col., 2020). Otros estudios muestran estrategias para procesar residuos orgánicos con alto contenido de agua para la obtención de metanol, que anteriormente por falta de parámetros era difícil estudiar (Patel y col., 2021; Hernández y col., 2016). Estudios como los de Espinoza-Vázquez y col. (2021, 2022) y el de Contrera-Zarazúa y col. (2021) han presentado propuestas de estudios en México referentes a la cadena de suministro para la producción de ácido levulínico y furfural empleando biomasa. Hay pocos reportes relacionados con la optimización de la cadena de suministro para la producción de metanol a partir de materiales renovables, enfocándose en un número reducido de potenciales materias primas (Moretti y col., 2021; Nugroho y col., 2022). Estudios preliminares han mostrado el potencial de producción de metanol a partir de fuentes renovables en México, tomando en cuenta indicadores económicos (Hernández-Camacho y col., 2022). Sin embargo, resulta indispensable evaluar el potencial impacto ambiental de estos esquemas de producción, con el fin de asegurar su sostenibilidad. Dado lo anterior, en este trabajo se busca realizar un análisis de la cadena de suministro de metanol en el país, utilizando diversos residuos para su obtención, considerando distintos tipos de tecnologías.

METODOLOGÍA

Se formuló una superestructura para la representación del caso de estudio (Figura 1). Se determinaron los residuos que cuentan con mayor disponibilidad en México de manera anual. En este análisis preliminar, se eligieron 12 tipos de residuos, ubicados en 29 estados distintos y considerando la posibilidad de transformarlos en cualquiera de los 32 estados del país. La superestructura involucra 4 tecnologías de procesamiento distintas, debido a que se cuenta con residuos lignocelulósicos con poca humedad y que son posible tratarlos mediante gasificación o pirolisis; por otro lado, se encuentran materiales con altos niveles de humedad, los cuales requieren un proceso de digestión anaerobia. Por último, se cuenta como potencial materia prima el CO₂, considerado residuo industrial, el cual requiere un proceso específico catalítico. Además, se tomaron como mercados la Ciudad de México y los estados de Baja California, Chihuahua, Estado de México y Nuevo León, siendo estos los que presentan la necesidad de realizar compras al extranjero para poder abastecer su demanda de metanol.

Para este trabajo se definen dos funciones objetivo: la maximización de la ganancia para asegurar un impacto económico positivo, y la minimización de las emisiones de CO₂, según se muestra en las ecuaciones 1 y 2.

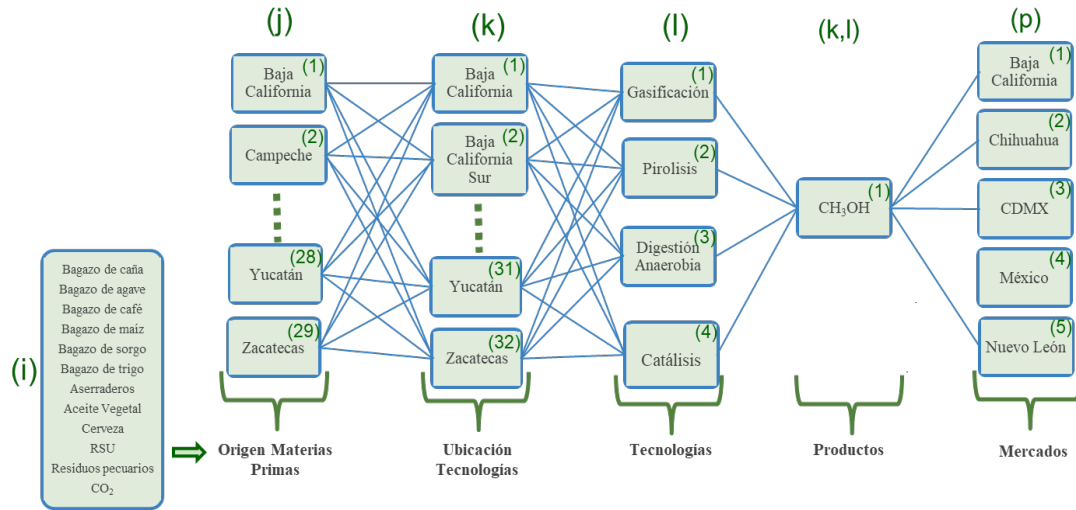


Figura 1. Superestructura planteada para la producción de metanol en México.

$$Gan = \sum_k (CV_{MeOH})_k - \sum_k (C_{Pr} * F_{MeOH})_k - \sum_k (C_{Ope} * F_{MeOH})_k - \sum_k (C_{BT})_k - \sum_k (C_{TOP,jk}) - \sum_k (C_{TPM,km}) \quad (1)$$

$$Em = \sum_k Em_{prod,k} + Em_{o-p,k} + Em_{p-m,k} \quad (2)$$

donde i representa la materia prima, j la ubicación de origen, k la ubicación de la planta, l las tecnologías y p los mercados. CV_{MeOH} es el precio de venta de metanol, C_{Pr} es el costo de producción, F_{MeOH} es el flujo de metanol, C_{Ope} es el costo de operación, C_{BT} costo de materia prima, C_{TOP} es el costo de transporte origen-planta y C_{TPM} es el costo de transporte de planta-mercado. Por otro lado Em_{prod} son las emisiones debidas a la producción, Em_{o-p} son las emisiones de transporte de origen-planta y Em_{p-m} son las emisiones de transporte de planta-mercado.

Se generó un modelo matemático basado en GDP, en el cual las disyunciones representan el efecto de las decisiones discretas en la superestructura. El modelo fue relajado y resuelto empleando el software GAMS, con el resolvidor CPLEX en un equipo HP FAO8J9GT, AMD Ryzen 5 5500U y 8 GB RAM. Este modelo estuvo conformado por 3741 ecuaciones (igualdades y desigualdades) y 9810 variables, requiriendo 0.250 segundos para converger.

Se establecieron los valores máximos y mínimos para cada función objetivo (Tabla 1), posteriormente empleando el método de restricciones ϵ para la obtención del Frente de Pareto, el cual permite identificar el comportamiento de las posibles soluciones del problema de optimización multiobjetivo.

Tabla 1. Máximos y mínimos de las funciones objetivo para una optimización multiobjetivo.

	Max	Min
Ganancia (USD/año)	7.33E+06	-3.72E+07
Emisiones (Mt/h)	8.39E-05	-2.20E-02

Para la generación del frente de Pareto, se utilizó el muestreo de Hammersley, tomando 100 puntos muestrales, considerando como función objetivo principal la ganancia económica, mientras que la función de emisiones de CO₂ se agregó como restricción. Una vez que se ha generado el frente de Pareto, se determina la solución con el mejor compromiso por medio del cálculo de la distancia euclidiana para cada punto en el frente, según se muestra en la ecuación 4.

$$Distancia = \sqrt{\sum_{i=1}^k z_{i,norm}^2} \quad (3)$$

Esta función permite encontrar la solución con el mejor compromiso entre las dos funciones objetivo, la opción seleccionada es aquella que se acerque más al punto de utopía.

RESULTADOS

La Figura 2 muestra el Frente de Pareto obtenido para el modelo multiobjetivo, mostrando en color rosa la solución con el mejor compromiso, la cual cuenta con una distancia euclidiana de 0.28. Esta solución es la que se considera para obtener las rutas de la cadena de suministro.

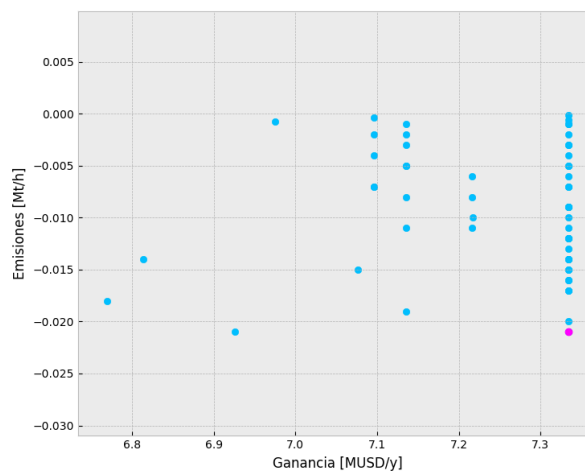


Figura 2. Frente de Pareto para solución con mejor compromiso.

Para este modelo se consideró una producción de metanol de 162,422.4 ton/año a nivel nacional, lo cual coincide con la compra internacional de metanol en México en 2021. Por tanto, el esquema busca completar el abastecimiento de la demanda nacional. Los resultados de la optimización establecen una ganancia de 7,334,100 USD/año, con una cantidad de emisiones equivalente a -0.021 Mt/h, lo cual implica que no se están generando emisiones, sino que se están mitigando. Esto se debe a que una de las materias primas es el CO₂ como residuo industrial. En la Figura 3a se muestran las rutas que deben seguir los residuos desde su origen hasta la ubicación de las plantas de procesamiento. Por otra parte, en la Figura 3b se muestran las rutas que debe recorrer el producto desde las plantas hasta los mercados.

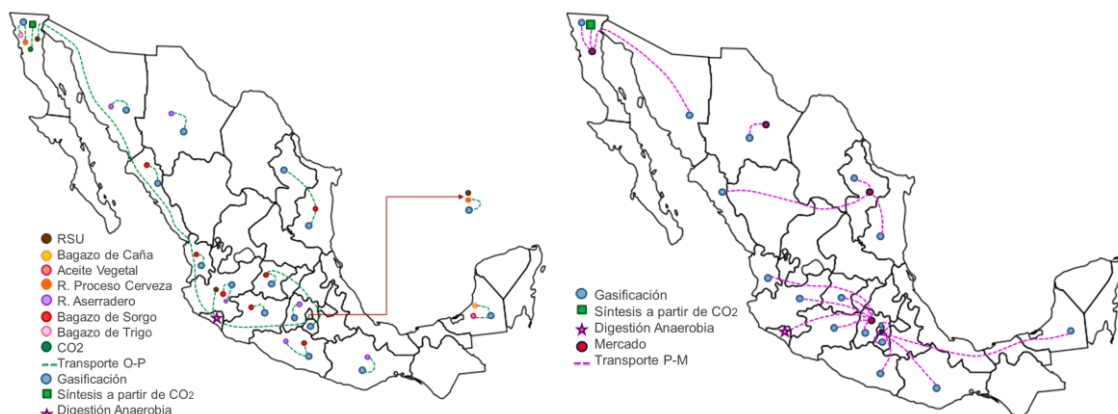


Figura 3. 3a) Transporte Origen-Planta, 3b) Transporte Planta-Mercado.

En la cadena de suministro óptima se utilizan 8 tipos de residuo como materia prima, los cuales entran en las 3 categorías de residuos consideradas. Además, se requieren 3 tipos distintos de procesamientos: gasificación, digestión anaerobia y catálisis. La pirólisis no fue seleccionada, debido a que para el tratamiento de residuos lignocelulósicos resultó más atractiva económicamente la gasificación. Se instalaron 18 plantas de procesamiento en distintos estados, de las cuales 16 son de gasificación, una de catálisis y una de digestión anaerobia para todo el país. En cuanto a los 5 mercados, las plantas de procesamiento del sur y del centro del país abastecen a los mercados centrales: Ciudad de México y Estado de México; por otro lado, los mercados del norte son abastecidos por plantas de procesamiento que se encuentran en el mismo estado del mercado o en estados cercanos.

CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó la optimización multiobjetivo para la cadena de suministro de metanol en México, la cual fue modelada mediante programación disyuntiva generalizada (GDP), resuelta en GAMS con el revolver CPLEX para un modelo MILP y generando el frente de Pareto con ayuda del método de restricciones. Se ha determinado que la solución con el mejor compromiso entre maximización de ganancia y minimización de emisiones de CO₂ corresponde a una ganancia de 7,334,100 USD/año y emisiones de -0.021 Mt/h. Esta solución implica el uso de gasificación, catálisis y digestión anaerobia como tecnologías de procesamiento. Los resultados muestran que el uso de CO₂ como materia prima permite mitigar emisiones, al ser mayor la cantidad de CO₂ requerido para producir metanol, del que puede generar el proceso, generando a la vez un beneficio económico importante.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad de Guanajuato, la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo y la Universidad de Salamanca por el apoyo otorgado para la

realización de este proyecto. N.V. Hernández-Camacho agradece a CONAHCYT por el apoyo recibido durante sus estudios de Posgrado y a la Universidad de Salamanca (USAL), por las facilidades y recursos prestados para realizar un intercambio académico.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Climate Action Tracker (CAT). (22 de septiembre de 2020). <https://climateactiontracker.org/countries/mexico/>

Contreras- Zarazúa, G., Martín, M., Ponce-Ortega, J.M. & Segovia-Hernández, J.G. (2021). Sustainable Design of an Optimal Supply Chain. For Furfural production from agricultural wastes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 60, 14495-14510.

Espinoza-Vázquez, Y.M., Gómez-Castro, F.I. & Ponce-Ortega, J.M. (2021). Optimization of the supply chain for the production of biomass-based fuels and high- added value products in Mexico. *Computers & Chemical Engineering*, 145, 107181

Espinoza-Vázquez, Y.M., Gómez-Castro, F.I. & Ponce-Ortega, J.M. (2022). Multiobjective optimization of the supply chain for the production of biomass-based fuels and high-value added products in Mexico. *Computers & Chemical Engineering*, 157, 107598.

Hernández, B., & Martín, M. (2016). Optimal Process Operation for Biogas Reforming to Methanol: Effects of Dry Reforming and Biogas Composition. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 55, 6677-6685.

Hernández-Camacho, N.V., Gómez-Castro, F.I., Ponce-Ortega, J.M. & Martín, M. (2022). Optimización de la cadena de suministro para la producción de metanol a partir de biomasa: determinación de materia prima y ubicación de biorrefinerías. *Avances en Optimización Aplicada a la Ingeniería Química*, 1(1), 67-72.

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.

Moretti, L., Milani, M., Lozza, G.G., & Manzolini, G. (2021). "A detailed MILP formulation for the optimal design of advances biofuel supply chains". *Renewable Energy*, 171, 159-175.

Nugroho, Y.K., Zhu, L., & Heavey, C. (2022). "Building an agent-based techno-economic assessment coupled with life cycle assessment of biomass to methanol supply chains". *Applied Energy*, 309, 118449.

Patel, S.K.S., Gupta, R.K., Kalia, V.C., & Lee, J.K. (2021). Integrating anaerobic digestion of potato peels to methanol production by methanotrophs immobilized on banana leaves. *Bioresources Technology*, 323, 124550.

Secretaría de Economía.
<https://www.economia.gob.mx/datamexico/es/profile/product/methanol-methyl-alcohol>

PLANIFICACIÓN ESTRATÉGICA DE BIORREFINERÍAS EN BENEFICIO DE REGIONES CON BAJO ÍNDICE DE DESARROLLO HUMANO

Juan Carlos Pulido-Ocegueda ^a, José Ezequiel Santibañez-Aguilar ^b, José María Ponce-Ortega ^a

^a *Departamento de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Michoacán, México, 2027805h@umich.mx.*

^b *Escuela de Ingeniería y Ciencia, Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey, 64849, México*

RESUMEN

La biomasa ha tomado relevancia en los últimos años, a consecuencia del impacto ambiental generado por los combustibles fósiles. Por ello, el uso de biomasa residual proveniente de distintos sectores se ha tomado como una alternativa para la generación de productos de valor agregado; como combustibles, químicos y energía. En este contexto, la planificación de un esquema distribuido de biorrefinerías involucra la selección de materias primas, sitios de cultivo y recolección, rutas de procesamiento, sitios de procesamiento y la distribución de los distintos productos hacia los mercados. Los problemas de planificación de cadenas de suministro se han estudiado ampliamente desde el punto de vista económico y ambiental; sin embargo, un impacto que no se ha estudiado a fondo es la medida del impacto social en estos sistemas. Por lo tanto, este trabajo incorpora una nueva métrica a la optimización de cadenas de suministro enfocada a la inclusión del impacto social mediante el índice de desarrollo humano en diferentes sitios de la cadena productiva a través de un modelo de planificación mixto-entero lineal implementado en el software GAMS. El modelo se implementó en un caso de estudio hipotético en México para la planificación estratégica de cadenas de suministro involucrando una función objetivo para maximizar el beneficio social simultáneamente con la maximización de la ganancia económica y la minimización de emisiones de CO₂ equivalente para las regiones del país. Los resultados muestran que al considerar el beneficio económico y social como objetivos es posible beneficiar a los participantes de la cadena de suministro con un nivel de satisfacción que va desde el 55 al 83% aproximadamente, además, se muestra un ligero aumento porcentual del índice de desarrollo humano para los estados del país.

Palabras clave: Impacto Social; Cadenas de Suministro; Biorrefinerías; Planificación.

INTRODUCCIÓN

El uso de la biomasa residual ha tomado un gran impacto en los últimos años, a consecuencia de los temas relacionados con el impacto ambiental y energético, por esta razón, se considera a la biomasa residual como una materia prima prometedora para ser utilizada como fuente de energía (Lozano-García et al., 2020), esto mediante el uso de residuos agroindustriales (Saravanan et al., 2021), residuos orgánicos sólidos urbanos (Kumar y Samadder, 2020) y lodos residuales (Munsik et al., 2019).

En este contexto, la optimización de las cadenas de suministro energético busca alternativas que mejoren la calidad de vida de la humanidad, pero la mayoría trabajos realizados son a macro-escala es decir no contemplan a las pequeñas partes involucradas dentro de la cadena de suministro general ni a sus participantes. Existen varios trabajos enfocados en analizar, abordar y resolver diferentes problemas y desafíos relacionados con las cadenas de suministro de biomasa. Por ejemplo, Roni et al., (2019) desarrollaron un modelo mixto entero lineal para optimizar una cadena de suministro basada en biomasa de desechos agrícolas y desechos sólidos municipales.

En cuanto a la evaluación de la cadena de suministro, a pesar de que los temas económicos y ambientales han sido debidamente estudiados, la dimensión social en las cadenas de suministro es poco considerada. En este sentido, el impacto social se puede asociar a la generación de empleos, y se ha evidenciado en diferentes trabajos. Por ejemplo, Santibañez-Aguilar et al. (2014) presentaron un problema multiobjetivo mixto entero lineal para la planificación óptima de una cadena de suministro de biomasa considerando múltiples materias primas, así como objetivos ambientales, sociales y económicos simultáneamente. Más recientemente, Contreras-Zarazúa et al. (2021) propusieron una cadena de suministro multiperíodo para producir furfural a partir de residuos agrícolas en México, considerando el aspecto social de la generación de empleos. Si bien la dimensión social puede considerarse a través de los empleos generados y la seguridad de los procesos, podría no ser la forma más adecuada de evaluar el impacto social en una cadena de suministro o en un sistema productivo. Una métrica de dimensión social debe ser multifactorial y, por lo tanto, algunos investigadores han desarrollado índices compuestos para medir de manera más completa las múltiples dimensiones del bienestar (Yee-Ting y Nai-Peng, 2019).

En este sentido el índice de desarrollo humano (IDH) propuesto por el Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo es una medida sinóptica del desarrollo humano. Mide el logro promedio de un país en tres dimensiones básicas del desarrollo humano (López-Calva et al., 2004): a) Esperanza de vida al nacer, b) Tasa de alfabetización de adultos y la tasa bruta combinada de matrícula en primarias y secundarias, c) Un nivel de vida digno per cápita medido en términos de paridad de poder adquisitivo (PPA) en dólares estadounidenses. Por lo tanto, este trabajo considera simultáneamente la biomasa residual agroindustrial, los residuos sólidos urbanos y los lodos residuales como materias primas potenciales en una formulación matemática de planificación óptima de cadenas de suministro de biorrefinerías que involucra la evaluación del impacto social, mediante una función objetivo social multifactorial basada en el índice de desarrollo humano para promover la selección de ubicaciones con bajos niveles de desarrollo, además de buscar las mejores alternativas para la optimización económica y ambiental en la cadena de suministro, mediante una función objetivo económica y una función objetivo ambiental.

METODOLOGÍA

El modelo matemático incluye ecuaciones de balances de masa, así como diversas restricciones de factibilidad técnica. Las funciones objetivo se presentan a continuación:

Función objetivo social.

La variable binaria asociada a la existencia de un sitio de cultivo permite formular una función objetivo social para promover sitios con bajo índice de desarrollo humano. Es

importante señalar que solo contribuyen al valor de la función objetivo los sitios que deben existir debido a que existen las conexiones de nodos debido al transporte, por tanto, entre mayor sea la función objetivo social, mayores serán los sitios en los que se beneficiara su IDH, como lo representa la Ecuación 1.

$$SocialProfit = \sum_m \sum_h (1 - IDH_h) * y_{m,h}^{existence} \quad (1)$$

Función objetivo ambiental.

La función objetivo ambiental considera con el CO₂ equivalente generado por transporte, es dependiente de las distancias entre cada nodo, las materias primas distribuidas hacia las biorrefinerías, los productos distribuidos hacia los mercados y el factor de emisión equivalente a cada caso de transporte, teniendo en cuenta la naturaleza de las materias primas y los productos, como se presenta en la Ecuación 2.

$$Ambiental = \sum_m \sum_h \sum_f \sum_t DM_{h,f} \cdot EM_{m,h,f,t}^{out} M_{m,h,f,t}^{distr} + \sum_p \sum_f \sum_c \sum_t DP_{f,c} \cdot EP_{p,f,c,t} \cdot P_{p,f,c,t}^{out} \quad (2)$$

Función objetivo Económico

La función objetivo económica contempla el beneficio neto anual, esta función viene dada por la sumatoria de los distintos componentes que conforman la parte económica del modelo, es decir, contempla costos por producción, almacenamiento y transporte de materias primas y productos en los distintos nodos origen destino, además de, las ventas de productos en los nodos específicos designados. Por lo que esta función objetivo proporciona un valor neto total de ganancias económicas para los sitios pertenecientes a la cadena de suministro. Como se muestra en la Ecuación 3.

$$PROFIT = \sum_p \sum_c \sum_t C_{p,c,t}^{product} \cdot V_{p,c,t}^{out} sale - \sum_m \sum_h \sum_t C_{m,h,t}^{produced} \cdot M_{m,h,t}^{produced} - \sum_m \sum_h C_{m,h}^{total} alm - \sum_m \sum_f C_{m,f}^{total} alm - \sum_p \sum_f C_{p,f}^{total} alm - \sum_p \sum_c C_{p,c}^{total} alm - \sum_m \sum_h \sum_f \sum_t C_{m,h,f,t}^{transp} \cdot M_{m,h,f,t}^{out} distr - \sum_p \sum_f \sum_c \sum_t C_{p,f,c,t}^{transp} \cdot P_{p,f,c,t}^{out} distr - \sum_m \sum_p \sum_r \sum_{ft} C_{m,p,r,f,t}^{process} \cdot M_{m,p,r,f,t}^{out} process \quad (3)$$

RESULTADOS

El modelo matemático asociado al caso de estudio es MILP y está constituido por 3,204 variables binarias, 16,165 variables continuas y 21,459 restricciones. La codificación se realizó en el software GAMS tomando en promedio 0.470s de tiempo del CPU con un procesador i3-1005G1 a 1.20GHz con una memoria RAM de 4.00GB. La solución de los puntos óptimos de la curva Pareto se obtuvo mediante el resolvidor CPLEX.

La Figura 1 muestra la curva Pareto entre los objetivos económico y ambiental. Como puede observarse, existe un claro compromiso entre ambos objetivos.

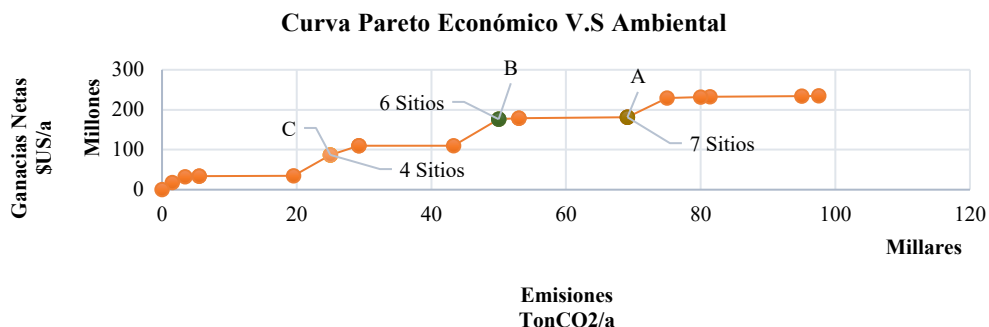


Figura 1.-Curva Pareto del uso de biomasa para mejoramiento del IDH en las regiones analizadas. Cada una de las soluciones de la curva Pareto de la Figura 1 corresponde a distintas configuraciones para la cadena de suministro para satisfacer las restricciones del modelo. El punto óptimo A tiene una ganancia neta económica de 181 millones de dólares por año, con un impacto ambiental de 69,128 Ton de CO₂ equivalente y beneficia a 7 sitios de cultivo, mientras el punto óptimo B tiene una ganancia neta económica de 176 millones de dólares por año, con un impacto ambiental de 50,000 Ton de CO₂ equivalente y beneficia a 6 sitios de cultivo y finalmente el punto óptimo C tiene una ganancia neta económica de 87 millones de dólares por año, con un impacto ambiental de 25,000 Ton de CO₂ equivalente y beneficia a 4 sitios de cultivo.

Como puede observarse el mayor impacto ambiental se presenta en el escenario A debido las materias primas, productos, transportes y tecnologías de proceso dentro de la cadena de suministro, a diferencia del escenario C que presenta un menor impacto ambiental y por lo tanto una disminución en materias primas, productos, transportes y el uso de tecnologías de proceso; esto nos muestra que conforme el impacto ambiental aumenta las ganancias económicas y el beneficio social también aumentara, es decir el impacto ambiental es directamente proporcional a las ganancias económicas y al beneficio social.

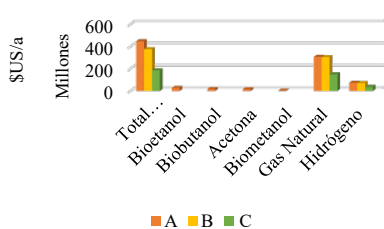


Figura 2.- Beneficio económico por ventas de productos.

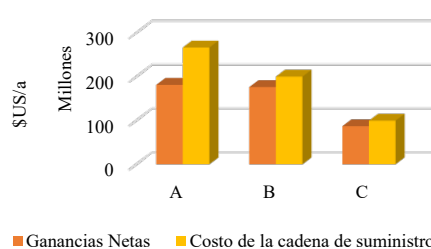


Figura 3.- Análisis económico para cada escenario.

La Figura 2 muestra los productos resultantes en los diferentes puntos de la Figura 1 (A, B, C) donde se observa que en el escenario A los productos resultantes en la cadena de suministro fueron bioetanol, butanol, acetona, biometanol, gas natural e hidrógeno gas, mientras que en los escenarios B y C se comercializaron sólo dos productos gas natural e hidrógeno. La Figura 3 presenta una comparación entre la ganancia económica neta y el costo total de la cadena de suministro para los puntos seleccionados en la Figura 1.

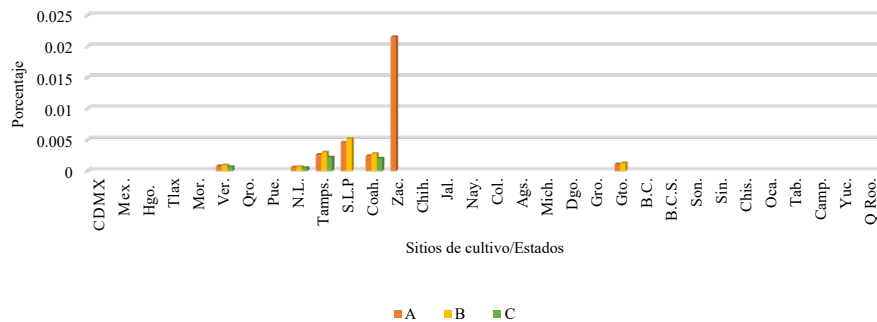


Figura 4.- Incremento del IDH por el uso de biomasa para el beneficio de sitios de cultivo pertenecientes a la cadena de suministro.

Es importante mencionar que, aunque el escenario A tuvo mayores ingresos económicos por ventas en los mercados, presentó una ganancia neta económica menor, esto debido a que dentro de la cadena de suministro se utilizó una mayor cantidad de materias primas en las biorrefinerías, lo que implicó mayores costos en materias primas, costo de transportes y producción tanto de materias primas como de productos; por otro lado, este escenario tuvo el mayor beneficio social al contribuir al beneficio de 7 sitios de cultivo. Este mismo comportamiento se presenta en el escenario B que beneficio a 6 sitios de cultivo y el escenario C que beneficio a solo 4 sitios de cultivo.

Para evaluar el impacto social se tomó en cuenta el Índice de Desarrollo Humano (IDH) y su incremento o disminución cuando algún cambio en la cadena de suministro es hecho por medio del cambio de producto interno bruto. La Figura 4 muestra el incremento porcentual del IDH respectivamente. Aunque el aumento en el IDH humano es muy similar en los escenarios analizados de la curva Pareto, es posible notar que el escenario A tiene el incremento más significativo en los sitios de cultivo que se consideran con un bajo IDH. Cabe mencionar que el incremento del IDH que se observa en la Figura 4 contempla parámetros fijos como son el índice de esperanza de vida y el índice de educación, y que el producto interno bruto calculado a partir de las ganancias netas es per cápita por lo que se contempla a la población de cada sitio de cultivo para así asegurar que el aumento sea lo más real posible, como consecuencia de esto en la figura se puede notar que Zacatecas es el sitio de cultivo con un aumento porcentual mayor, para el escenario B San Luis Potosí es el sitio de cultivo con mayor aumento de IDH, mientras para el escenario C Tamaulipas es el sitio de cultivo con mayor aumento de IDH.

CONCLUSIONES

De la comparativa de los escenarios A, B y C se puede observar que los cambios escalonados presentados entre cada solución indican el uso de nuevas materias primas, nuevas tecnologías de procesamiento y la generación de nuevos productos, esto conlleva a un aumento de emisiones de CO₂ dentro de la cadena de suministro y por lo tanto un aumento económico en las ganancias netas, a su vez estos aumentos también permiten beneficiar a más sitios de cultivo aumentando su índice de desarrollo humano. Cabe mencionar que el modelo considera de forma estratégica aquellos sitios de cultivo que presenten la menor cantidad de emisiones de CO₂ dentro de la cadena de suministro, considerando los transportes de materias primas y productos. De estos escenarios en cuanto al uso de materias primas, generación de producto y beneficio social de los sitios de cultivo en la cadena de suministro se puede concluir que conforme las soluciones se

acerquen más hacia valores bajos de ganancias netas y emisiones de CO₂ el uso de materias primas, generación de productos y beneficio hacia sitios de cultivo será menor, por ejemplo, la solución del escenario A presenta una mayor cantidad de materias primas como son el rastrojo de maíz y de sorgo, además de la generación de productos como bioetanol, biobutanol, biometanol y acetona, y por ende considera más sitios de cultivo dentro de la cadena de suministro en comparación con los otros dos escenarios (B y C) que sólo utilizan dos materias primas y generan dos productos, esto nos indica que el modelo cumple con su función, en cuanto a los tres objetivos de desarrollo sostenible. Cabe mencionar que en estos escenarios se observa que el beneficio social por aumento del índice de desarrollo humano es mejor para aquellas cadenas de suministro que tienen una mayor cantidad de sitios de cultivo participantes esto debido a que al involucrar más materias primas y una mayor generación de productos las ganancias netas repartidas de forma equitativa se ven mayormente beneficiadas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Contreras-Zarazúa, G., Martin-Martin, M., Ponce-Ortega, J., Segovia-Hernandez, J., “Sustainable design of an optimal supply chain for furfural production from agricultural wastes”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 60,14495-14510 (2021). <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c01847>

Kumar, A., Samadder, S., “Performance evaluation of anaerobic digestion technology for energy recovery from organic fraction of municipal solid waste: A review”, *Energy*. 197,117253 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117253>

López-Calva, L., Rodríguez-Chamussy, L., Skékely M., “Medición del Desarrollo Humano en México”, *Estudios sobre desarrollo humano PNUD*. 5-22 (2004).

Lozano-García, D., Santibañez-Aguilar, J., Lozano, F., Flores-Tlacuahuac, A., “GIS-based modeling of residual biomass availability for energy and production in Mexico”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 120,109610 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109610>

Munsik, P., Namgyu, K., Seunghwan, J., Tae-Young, J., Donghee, P., “Optimization and comparison of methane production and residual characteristics in mesophilic anaerobic digestion of sewage sludge by hydrothermal treatment”, *Chemosphere*. 264,128516 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128516>.

Roni, M.S., Thompson, D.N., Hartley, D.S., “Distributed biomass supply chain cost optimization to evaluate multiple feedstocks for a biorefinery”, *Applied Energy*. 254,113660 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113660>

Santibañez-Aguilar, J., Gonzalez-Campos, J., Ponce-Ortega, J., Serna-Gonzales, M., El-Halwagi, M., “Optimal planning and site selection for distributed multiproduct biorefineries involving economic, environmental and social objectives”, *Journal of Cleaner Production*. 65,270-294 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.08.004>

Saravanan, A., Senthil-Kumar, P., Nurul-Syahirah-Mat-Aron., Jeevanantham, S., Karishma, S., Yaashikaa, P., Wayne-Chew, K., Loke, P., “A review on bioconversion processes for hydrogen production from agro-industrial residues”, *International Journal of Hydrogen Energy*. (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.08.055>

Yee-Ting, N., Nai-Peng, T., “Human Development Index as a predictor of life satisfaction”, *Journal of Population and Social Studies*. 27,70-86 (2019). 10.25133/JPSSv27n1.005

Modelo de optimización para la planificación estratégica de la explotación del litio en México

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

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Facultad de Ingeniería Química, Av. Francisco J. Mujica S/N, Morelia, Michoacán, 58030, MÉXICO. 1609763a@umich.mx

RESUMEN

En este proyecto se presenta un modelo de programación matemática para la implementación de una cadena de suministro de compuestos de litio en México. En este contexto, actualmente la fabricación de baterías de ion-litio representa una alternativa novedosa en el campo del almacenamiento de energía eléctrica debido a las numerosas ventajas que estas presentan como lo son periodos de carga cortos, larga vida útil, alta eficiencia, etc., lo cual conlleva un gran aumento en la demanda de compuestos de litio en los últimos años a nivel mundial. En este sentido, el presente trabajo tiene como objetivo económico la maximización de las ganancias del proceso productivo del litio desde su extracción a partir de distintas fuentes, procesamiento, producción y distribución de distintos compuestos. La optimización determinística es aplicada en la plataforma de optimización GAMS donde se consideran todas las interacciones másicas posibles entre zonas de extracción, plantas de procesamiento, mercados y fuentes en cuanto a litio y sus derivados se refiere. Con intención de enriquecer la discusión de resultados se presenta el caso de estudio de México, en el que se seleccionan un conjunto de zonas de extracción a partir de arcilla y salmuera, se propone un conjunto de plantas de procesamiento en las cuales es posible la instalación de seis diferentes tecnologías de procesamiento desde las cuales se satisface la demanda de los compuestos de litio presentada por un conjunto de mercados. Finalmente la metodología contempla la importación y exportación de Li_2CO_3 en medida de lo posible. Los resultados derivados del análisis del modelo de optimización indican que es posible implementar una cadena de suministro de litio en México tanto desde una perspectiva técnica como económica. Además, el trabajo presenta soluciones atractivas a corto y largo plazo que pueden ser de utilidad para los tomadores de decisiones.

Palabras clave: Cadena de Suministro, Optimización determinística, Litio en México,

INTRODUCCIÓN

Actualmente la transición a una movilidad eléctrica es uno de los principales intereses de la sociedad, teniendo como propósito el reducir las emisiones de CO_2 estableciendo bases y pautas para promover el uso de tecnologías y combustibles limpios que permitan posicionar la movilidad eléctrica como una alternativa viable y sostenible.

En este sentido, el litio es de particular interés debido a las numerosas ventajas que presenta en cuanto a la fabricación de baterías se refiere. Este elemento se puede encontrar en depósitos de arcilla en aproximadamente 145 especies mineralógicas, siendo las principales la espodumena, lepidolita, ambligonita, petalita, trifilita y eucryptita. Por otra

parte, también es posible llevar a cabo la extracción de litio a partir de depósitos de salmuera, mismas que representan alrededor del 66% de los recursos de litio a nivel mundial. Además, la extracción de litio a partir de fuentes de salmuera ha demostrado ser más rentable que la producción a partir de mineral de roca dura. Anteriormente la producción de roca dura domino el mercado; sin embargo, recientemente el Li_2CO_3 que se produce se obtiene a partir de salmueras continentales debido en gran medida al menor costo de producción. Por su parte, alrededor del 70% de los recursos probados de litio a nivel mundial se encuentran en el sur del continente americano, principalmente en Bolivia, Chile y Argentina. En este sentido, actualmente México no cuenta con ningún yacimiento de litio en explotación, sin embargo, se cuenta con al menos tres yacimientos potenciales en exploración a lo largo de la república particularmente en los estados de Baja California Norte, San Luis Potosí, Zacatecas y Sonora. En conjunto con Estados Unidos y Canadá, México puede producir grandes cantidades de litio para las industrias existentes y emergentes tanto en Norteamérica como en el mundo.

Como se mencionó con anterioridad, una de las principales aplicaciones del litio, particularmente del Li_2CO_3 es la manufactura de baterías para una gran variedad de dispositivos móviles y automóbiles además, también es utilizado para la creación de polímeros, lubricantes, cerámica y vidrio entre otros usos. En este sentido, las baterías de litio representan una alternativa novedosa en el campo del almacenamiento de energía eléctrica debido a las numerosas ventajas que presentan, por ejemplo, tienen una mayor eficiencia con respecto a otro tipo de baterías, periodos de carga cortos, larga vida útil, etc. Ahora bien, la demanda de Li_2CO_3 a nivel mundial paso de 123 mil toneladas en 2010 a 214 mil toneladas en el año 2017 y se proyecta una demanda de aproximadamente 669 mil toneladas para el año 2025, lo cual representa un aumento del 312%, de las cuales se estima que el 76% sea requerido para la fabricación de baterías.

Por su parte en México se presentó una importación aproximada de 195 toneladas de Li_2CO_3 durante el año 2019, sin embargo, se espera que la demanda de este compuesto aumente considerablemente en el territorio nacional debido a la implementación de nuevas industrias que demanden este tipo de compuestos, además de la creación de la empresa paraestatal “Litio para México” creada por el gobierno nacional para la exploración y extracción de litio en el país, por lo cual resulta fundamental la planeación estratégica de la producción de compuestos de litio ante el nuevo panorama en que se encuentra el país.

Por todo lo anteriormente expuesto, en el presente trabajo se propone un modelo matemático para la explotación de litio a partir de distintas fuentes y sus unidades de procesamiento para cada una de ellas además de la producción de los principales derivados del Li_2CO_3 con el fin de generar la planeación óptima del litio y sus derivados teniendo como objetivo la maximización de las ganancias totales y satisfaciendo las demandas de los mercados considerando la importación y exportación.

METODOLOGÍA

Con intención de facilitar la comprensión de la metodología propuesta se definen a continuación los conjuntos empleados y su connotación.

s = Zona de producción de litio a partir de salmuera.

r = Zona de producción de litio a partir de roca dura (arcilla) **i** = Planta de procesamiento de materia prima.

j = Mercado al que se exporta Li_2CO_3 .

k = Fuente desde la que se importa Li_2CO_3 .

q = Mercados para usos directos de Li_2CO_3 .

t = Periodo de tiempo.

La metodología propuesta consiste en todas las expresiones matemáticas que modelan las interacciones mostradas en la superestructura donde se visualizan todas las posibles soluciones al problema de interés (véase la **Figura 1**). A través de ella, se determina la factibilidad técnica y económica de la extracción, procesamiento y distribución de los derivados del litio. En este sentido, la superestructura considera un conjunto de divisores de flujo para el envío a diversas rutas, mercados y unidades de procesamiento; asimismo, se incluye una cantidad considerable de mezcladores previo a la entrada a los mercados, plantas de procesamiento etc. Además, se considera la exportación directa tanto de la materia prima para su procesamiento en el extranjero (como en la práctica ocurre en algunos casos) como del Li_2CO_3 producido en las plantas de procesamiento. Por su parte, la materia prima segregada a cada planta de procesamiento ingresa a cada una de las tecnologías de acuerdo con el producto deseado y a su vez existe la posibilidad de la producción de alguno de sus derivados a partir del Li_2CO_3 producido o del importado. En este sentido el Li_2CO_3 producido y que sale de la planta de procesamiento es utilizado para satisfacer la demanda nacional de este compuesto además de existir la posibilidad de exportar el recurso. En esta metodología se evalúan varios factores como los costos de transporte, operación, capital, ventas de cada uno de los compuestos producidos y ganancias totales.

La formulación matemática también incorpora expresiones para el modelamiento de las unidades de procesamiento incluyendo las necesarias para determinar su capacidad operacional. Es importante destacar que el modelo es capaz de considerar la temporalidad y se considera las variaciones tanto en los datos de entrada como en las variables de salida.

Además de todas las expresiones previamente descritas, el modelo incluye relaciones matemáticas para la cuantificación de las ventas y de los costos asociados al proyecto. Los ingresos totales se obtienen por la venta de materia prima, productos derivados del litio y los subproductos de su procesamiento (LiOH , LiCl , LiBr , Li_2CO_3 , KOH y Na_2SO_4):

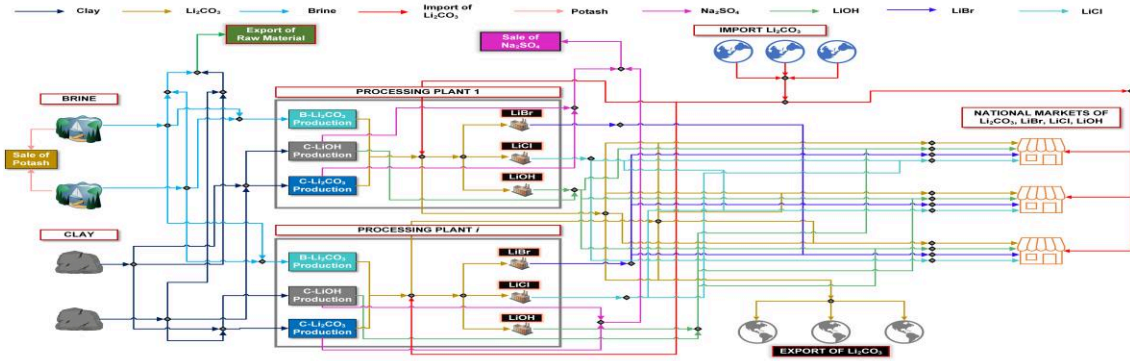


Figura 1. Superestructura del modelo de optimización.

Las expresiones mencionadas anteriormente se muestran a continuación:

$$Sales^{OH} = \sum_t UP_t^{OH} F_t^{tot-OH} - produced \quad (1)$$

$$Sales^{Cl} = \sum_t UP_t^{Cl} F_t^{tot-Cl} - produced \quad (2)$$

$$Sales^{Br} = \sum_t UP_t^{Br} F_t^{tot-Br} - produced \quad (3)$$

$$Sales^{direct-uses} = \sum_i \sum_t UP_t^i \zeta_{CO_3} f_{i,t}^{direct-uses} \quad (4)$$

$$Sales^{Li_2CO_3-export} = \sum_j \sum_t UP_{j,t}^{Li_2CO_3} P_{j,t}^{export} \quad (5)$$

$$Sales^{potash} = \sum_s \sum_t UP_t^{potash} F_{s,t}^{Potash-produced} \quad (6)$$

$$Sales^{Na_2SO_4} = \sum_i \sum_t UP_t^{Na_2SO_4} F_{i,t}^{Na_2SO_4-Li_2CO_3-produced} + F_{i,t}^{Na_2SO_4-LiOH-produced} \quad (7)$$

$$Sales^{rm} = \sum_t \left[\sum_s F_{s,t}^{export} \left(UP_{s,t}^b P_{s,t}^b UTC_{s,t}^b \right) + \sum_r F_{r,t}^{export} \left(UP_{r,t}^c P_{r,t}^c UTC_{r,t}^c \right) \right] \quad (8)$$

Por otra parte, respecto de los costos generados por el proyecto se consideran los costos de las plantas de procesamiento (de capital y operacionales), de materia prima y de transporte (de todos los trayectos mostrados en la superestructura) así como los asociados a la importación de materia prima. Primeramente, se muestran los costos de capital, los cuales incluyen costos fijos y variables de la instalación de cada planta de procesamiento para la producción de cada uno de los compuestos, además de que se considera un exponente que relaciona las economías de escala:

$$CapCost_i^{b-process} = k_F \left[FC_i^{b-process} y_i^b + VC_i^{b-process} \left(F_i^{b-process-cap} \right)^{\beta^{b-process}} \right], \quad \forall i \quad (9)$$

$$TCC = \sum_i CapCost_i^{process-plant} \quad (10)$$

Por su parte, los costos de operación incluyen los costos de procesamiento de las materias prima, de transporte tanto de materias primas desde su sitio de extracción a las plantas de procesamiento, los productos generados hasta sus correspondientes mercados y hacia la exportación de este y finalmente se incorpora el costo relacionado a la importación de Li_2CO_3 :

$$Cost^{op\ b\ process} = \sum_i \sum_t UOC_i^{b\ process} F_{i,t}^{b\ process\ in} \quad (11)$$

$$Cost^{process\ trans\ brine\ pp} = \sum_s \sum_i \sum_t UTC_{s,i}^{trans\ brine} f_{s,i,t}^{b-} \quad (12)$$

$$TIC = \sum_k \sum_t UC_{k,t} f_{k,t}^{import} \quad (13)$$

$$TOC = TTC + TOPC + TIC \quad (14)$$

De esta manera, la función objetivo económica corresponde a la maximización del total de las ganancias (TP), mismas que están constituidas por las ganancias asociadas a las ventas menos los costos de capital y de operación:

$$TP = TS - TOC - TCC \quad (15)$$

RESULTADOS

Una vez que la metodología planteada anteriormente es implementada con un caso de estudio se obtienen los siguientes resultados. En este sentido, se considera la existencia de 10 zonas potenciales con reservas de litio probadas, 5 a partir de salmuera y 5 a partir de mineral-arcilla; además se propone la existencia de 10 posibles plantas de procesamiento para producir Li_2CO_3 , $LiOH$, $LiCl$ y $LiBr$ ubicadas en las ciudades de Hermosillo, Monterrey, CDMX, Torreón, Tuxtla Gutiérrez, Guanajuato, Ciudad Juárez, Saltillo, Matamoros y Tijuana, desde las cuales se debe satisfacer la demanda existente en los mercados de Monterrey, Aguascalientes, Querétaro y Mexicali considerando un horizonte de tiempo de 1 año y cada periodo de tiempo de 1 mes (véase la **Figura 2**). Una vez obtenida la información necesaria por el modelo, se implementa en la plataforma GAMS y en la **Figura 3** se muestran los porcentajes en los que se satisface la demanda de cada uno de los derivados de litio en cada mercado.

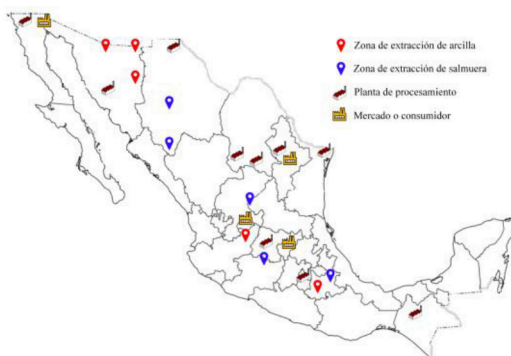


Figura 2. Caso de estudio analizado.

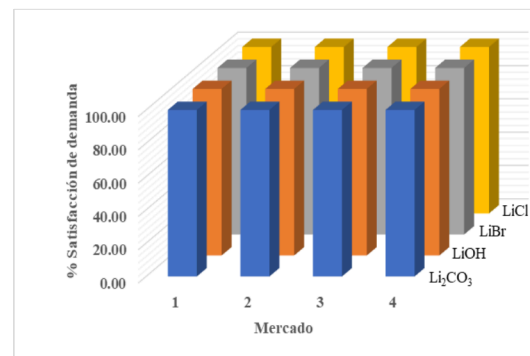


Figura 3. Porcentajes de satisfacción de demanda.

Por su parte la **Figura 4** muestra la solución al caso de estudio en la que es importante destacar que solo se exporta arcilla como materia prima además de que únicamente se seleccionan 5 unidades de procesamiento de las 10 propuestas (Hermosillo, CDMX, Guanajuato, Ciudad Juárez y Saltillo), cada una con un grupo distinto de tecnologías de procesamiento y productos obtenidos. Además, se muestran las capacidades de producción de cada una de las tecnologías, los subproductos obtenidos y el Li_2CO_3 exportado. También, es posible visualizar como se lleva a cabo la distribución de cada

compuesto hacia los mercados existentes. Finalmente en la **Tabla 1** se muestran los costos asociados al caso de estudio planteado y las ganancias obtenidas.

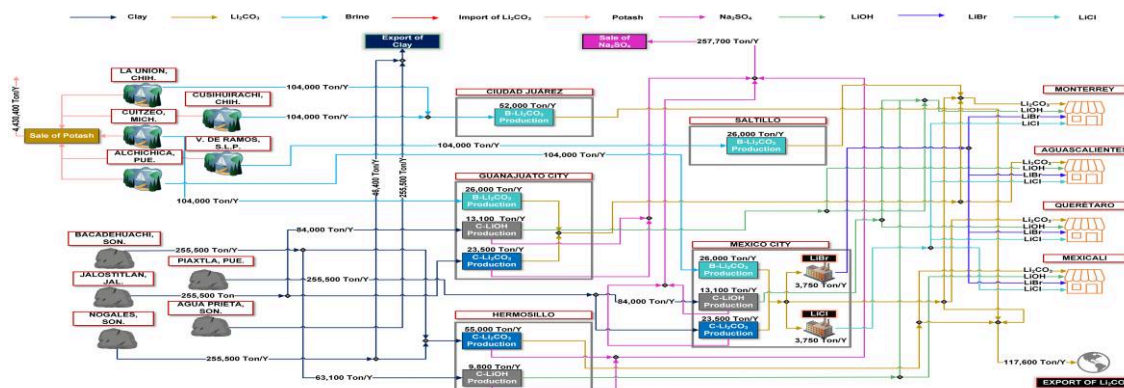


Figura 4. Solución del caso de estudio.

Tabla 1.- Detalle de los costos e ingresos totales del caso de estudio.

Concepto	Millones de USD
Costos totales de capital	44.70
Costos totales de operación	9,758.10
Ingresos generados por las ventas	15,388.23
Ganancias totales	5,585.43

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos del caso de estudio analizado muestran el enorme potencial que tiene el país en la industria del litio que aún no se desarrolla, generado un beneficio económico considerable, demostrando así que es altamente viable llevar a cabo la explotación del litio y su conversión a productos derivados de éste. Cabe destacar que el modelo es general y puede ser aplicado a cualquier caso de estudio de interés. Los resultados presentados en este trabajo pueden ser un marco de referencia para investigaciones futuras en el área de la extracción de litio en México y en el mundo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bowell, R. J., Lagos, L., de los hoyos, C. R., & Declercq, J., “Classification and Characteristics of Natural Lithium Resources,” *Elements*, Vol. 16, p. 259-564, 2020. DOI: 10.2138/gselements.16.4.259.

Marmolejo Cervantes, M. Á., & Garduño Rivera, R, “Mining-energy public policy of lithium in Mexico: Tension between nationalism and globalism,” *Resources Policy*, Vol.77, 2022. DOI /10.1016/j.resourpol.2022.102686.

SE, S.D., “Perfil de mercado del Litio.”, 2021.

Obaya, M., & Céspedes, M., “Análisis de las redes globales de producción de baterías de ion de litio: Implicaciones para los países del triángulo del litio”, *Documentos de Proyectos (LC/TS.2021/58)*, Comisión Económica para América Latina y el Caribe (CEPAL), 2021.

Análisis multi-variable en el costo de transporte de biomasa: una nueva formulación

Oscar Daniel Lara-Montaña ^a, Raúl Jesús Tauro ^b, Sergio Iván Martínez-Guido ^a, José Ezequiel Santibañez-Aguilar ^{c,*}

^a *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Campus Amazcala, Carretera a Chichimequillas S/N km 1, CP 76265, El Marqués, Querétaro, México.*

^b *Investigador por México, Dirección Adjunta de Desarrollo Tecnológico e Innovación, CONAHCYT. Av. Insurgentes Sur 1582, Col. Crédito Constructor, Alcaldía Benito Juárez, CP 03940, Ciudad de México.*

^c *Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501, CP 64849. Monterrey, Nuevo León, México.*

**santibanez.ezequiel@tec.mx*

RESUMEN

Una cadena de suministro puede ser definida como el movimiento de materiales, partes, dinero, productos e información con el objetivo de evitar una falla en el proceso (Plenert, 2007). Esto con el fin de satisfacer las necesidades del cliente en el menor tiempo posible, razón por la que se infiere que es necesario contar con un óptimo manejo en términos de logística. En este contexto, el *transporte* resulta ser una actividad de suma relevancia, dado que rara vez las materias primas/procesamiento/y consumo son llevados en el mismo sitio (Sunil, 2017). Sin embargo, en la búsqueda de configuraciones óptimas para las cadenas de suministro, los modelos propuestos basan su solución en un conjunto de variables muy poco diverso con respecto al transporte, en las que se incluyen principalmente el costo específico por kilómetro recorrido. Se dejan de considerar variables que pueden ser de suma relevancia cuando se trata del transporte de biomasa, como es el caso de la densidad del material, tipo de camión, factor de resistencia, humedad el material, tipo de camino, entre otras. En este trabajo, los esfuerzos se enfocan en la búsqueda de una formulación más robusta que integre aspectos que permitan que el modelo se apegue más a la realidad del sistema. Para ello se realiza una revisión sobre variables que se encuentran directamente asociadas a la logística de transporte, para posteriormente, mediante análisis estadísticos y herramientas de optimización, se obtiene una ecuación pertinente minimizando la diferencia entre los valores predichos por la ecuación obtenida y el dato esperado en la literatura. Así mismo, se usará para el análisis de un caso de estudio comparando los resultados obtenidos a las ecuaciones convencionales usadas hasta ahora.

Palabras clave: Optimización de procesos, cadena de abastecimiento, transporte.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas las cadenas de suministro han sido adoptadas en el diseño de biorrefinerías, particularmente cuando se enfocan en el procesamiento de diversas materias primas para la producción de biocombustibles y productos de alto valor. En este sentido, el transporte de biomasa toma un papel crucial en el costo total de la cadena de valor, llegando a superar el 50% del costo total del proyecto. De esta forma, el costo de transporte se posiciona como un catalizador o inhibidor para que una cierta región o empresa incline la balanza hacia la utilización de la biomasa como materia prima renovable.

Existen diversos trabajos que consideran que el costo de transporte es afectado por diferentes variables como; la distancia, cantidad transportada, tiempo de carga, condiciones del camino, tipo de transporte, etc. por mencionar algunos (ver Yu *et al.*, 2016). Asimismo, es posible asumir que existen múltiples variables que afectan el costo de transporte y se tendrá diversos impactos en el desempeño de la cadena de suministro. Además, cada trabajo que considera el costo de transporte de biomasa puede considerar diferente funcionalidad de las variables. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo es obtener una nueva formulación multivariable para estimar el costo de transporte en una cadena de suministro basado en criterios preestablecidos por varios autores con el fin de tener una ecuación general de costo de transporte de biomasa que pueda ser aplicada varios casos independientes.

METODOLOGÍA

El objetivo de este trabajo es la obtención de una nueva formulación para el costo de transporte de biomasa para ser usada en modelos de planificación de cadenas de suministro. El trabajo está basado en una revisión bibliográfica exhaustiva, estimaciones en campo del costo de transporte, así como de la experiencia de expertos en el campo. La metodología propuesta para la formulación consta de 5 etapas principales:

- Revisión bibliográfica de formulaciones existentes para costo de transporte
- Clasificación de variables en las formulaciones con características similares
- Análisis del nivel de importancia por grupo de variables
- Recolección de datos de costo de transporte de biomasa a partir de diversas fuentes
- Obtención de correlaciones para costo de transporte en función de las variables identificadas.

Revisión bibliográfica:

El objetivo de la etapa de revisión bibliográfica es identificar variables importantes que afectan el costo de transporte de biomasa según varios autores. Se realizó una revisión sistemática de 51 trabajos en los cuales se usó o definió una función para el cálculo del

costo de transporte desde en un periodo comprendido desde 1982 a 2022 con el fin de observar la evolución de las formulaciones y las variables utilizadas.

En este contexto, Marrison y Larson (1995) mencionaron que el costo de transporte depende de un costo variable que puede afectar el costo final. Leboreiro y Hilaly (2011) consideraron la forma de la biomasa, radio de recolección y factor de tortuosidad como algunas de las principales variables que afectan el costo de transporte. Sultana y Kumar (2014) incluyeron la distancia promedio, costo de carga y descarga de biomasa, así como el costo del combustible dependiendo del tipo de vehículo. Además, Delivand et al. (2015) incluyeron el costo del combustible, mantenimiento, y capacidad como componentes críticos en la ecuación de costo de transporte. Más recientemente, Rahemi et al. (2020) estableció que la cantidad de biomasa, distancia de transporte y costo de carga y descarga como principales variables para calcular el costo de transporte.

Clasificación de variables:

Una vez identificadas las variables asociadas al costo de transporte, es importante la clasificación de las mismas. A pesar de que existen muchas formulaciones con diferentes variables, es posible encontrar relación entre varias de ellas. Se estableció una clasificación general en base a las características o tipos de variables, las cuales son: a) variables relacionadas al tipo de camino, b) variables relacionadas al tipo de transporte, c) variables relacionadas a la distancia, d) variables relacionadas a la biomasa transportada, e) otras variables.

Dentro de las variables relacionadas al camino se encuentran variables como el factor de tortuosidad, mientras que dentro de las variables asociadas a la distancia están radio de recolección y distancia promedio. También, dentro de variables relacionadas con las características de la biomasa están humedad, densidad y tipo por mencionar algunas.

Análisis del nivel de importancia por grupo de variables

Posteriormente a asociar las variables por características comunes se procede a un análisis estadístico para determinar los grupos de variables, así como las variables individuales con mayor relevancia para la estimación del costo de transporte.

Recolección de datos de costo de transporte

Una vez determinadas las principales variables que afectan el costo de transporte, se procede a coleccionar los datos disponibles en la literatura y en bases de datos existentes. Es importante mencionar que en varios casos los datos no están disponibles de la manera en que se requieren debido a que las ecuaciones propuestas por cada fuente son diferentes, por lo que algunos se estiman acorde a la información disponible y se estandarizan con el fin de poder hacer tratamiento y comparaciones posteriores.

Obtención de correlaciones para costo de transporte

La etapa final consiste en obtener correlaciones entre las variables identificadas y el costo de transporte con lo que es posible obtener ecuaciones generales y acotadas bajo ciertos límites.

RESULTADOS

Con el fin de dar claridad respecto a los resultados obtenidos se provee una descripción general de los mismos en cada una de las etapas acorde a la metodología propuesta.

Como resultado de la revisión bibliográfica, se procedió a analizar 51 trabajos en el periodo de 1982 a 2022 con lo que se identificaron 66 variables diferentes; sin embargo, este número se redujo a 26 ya que varias de ellas correspondían al mismo conjunto, pero con distinto nombre.

Tabla 1. Grupos y variables que afectan el costo de transporte acorde a la metodología propuesta

Variables relacionadas al tipo de camino		
Máximo peso permitido	Tipo de camino	Factor de tortuosidad
Cargos en casetas	Tiempo permitido transportar	
Variables relacionadas al tipo de transporte		
Costo fijo	Horas de trabajo	Costo mantenimiento
Eficiencia de combustible	Tipo de camión	
Variables relacionadas a la distancia		
Distancia promedio	Radio de recolección	Número de sitios de recolección
Distancia a puntos de venta	Distancia ida-vuelta	Distancia a plantas
Variables relacionadas al tipo de biomasa transportada		
Tipo de biomasa	Humedad	Densidad
	Estado físico	
Otras		
Capacidad de planta	Precio de combustible	Tipo de transporte
Demanda	Número de camiones disponibles	Costo variable

Posteriormente, se realizó un análisis a mayor profundidad de las variables identificadas con lo que se lograron agrupar en 5 grupos: a) variables relacionadas al tipo de camino, b) variables relacionadas al tipo de transporte, c) variables relacionadas a la distancia, d) variables relacionadas a la biomasa transportada y e) otras variables. La Tabla 1 presenta las variables identificadas en cada uno de los grupos.

Basado en las variables identificadas y sus grupos, se procedió a realizar un análisis estadístico, basado en la frecuencia de uso de la variable o sus derivadas, acorde a las formulaciones presentadas en cada uno de los artículos, que se utilizó dicha variable o alguna de sus variables derivadas para el cálculo del costo de transporte. Realizando este procedimiento se pudo obtener que las variables que tienen mayor influencia en la estimación del costo de transporte son distancia promedio (D), cantidad de biomasa transportada (M), densidad (ρ) y costo variable (V). Es importante mencionar que puede verse que al menos una variable relacionada con cada grupo identificado fue seleccionada. Por tanto, se puede establecer que el costo de transporte será una función de las variables establecidas (Ec 1).

$$CT = f(D, M, \rho, V) \quad (1)$$

Respecto a la recolección de datos para su posterior procesamiento, se puede mencionar que se identificaron que pueden ser datos provenientes de campo obtenidos por medio de estudios, análisis y encuestas o bien, datos obtenidos a partir de ecuaciones asumidas para el costo de transporte. En este caso, se ha preferido tomar los datos de campo como base y los datos basados en ecuaciones se usan principalmente para establecer límites.

Finalmente, una vez que los datos son recopilados, se analizan para completar los datos faltantes en su caso, con ayuda de los límites establecidos por medio de la revisión bibliográfica. Posteriormente, se resuelve un problema de optimización para encontrar la correlación tomando como función objetivo la minimización del absoluto del error relativo respecto al dato teórico o reportado del costo de transporte y el valor calculado por medio de la ecuación propuesta con el fin de seleccionar la ecuación que haga mejor predicción de los datos reportados. Cabe mencionar que se utilizó el software ALAMO para poder hacer la propuesta de diferentes funcionalidades de las variables y sus combinaciones minimizando el error mencionado.

$$= \sum_{i \in \text{DATOS}} \frac{|CT_i^{\text{estimado}} - CT_i^{\text{reportado}}|}{CT_i^{\text{reportado}}} \quad (2)$$

CONCLUSIONES

Por medio de la metodología propuesta es posible proponer una ecuación para estimar el costo de transporte de biomasa bajo diversas situaciones y características, resolviendo la problemática de ambigüedad que existe con la diversidad de ecuaciones actualmente existentes para el costo de transporte.

Si bien la ecuación obtenida es una función con mayor complejidad que las ecuaciones típicas para el costo de transporte, ésta cuenta con mayor rigurosidad y respaldo ya que

se basa en la experiencia y consideraciones de diversos trabajos que estiman el costo de transporte

Debido a que los datos considerados fueron obtenidos en diferentes regiones del mundo, se puede decir que la ecuación obtenida es general y podría aplicarse en cualquier parte del mundo siempre y cuando se cuente con la información requerida para el uso de la ecuación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Plenert, G. (2007). Reinventing lean: introduction lean management into the supply chain. *Elsevier*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-370517-4.X5000-X>
- Sunil, C. 2017. Supply chain management: strategy, planning, and operation (what's new in operations management). *Pearson*. ISBN: 978-0134731889.
- Marrison, C. I., Larson, E. D. (1995). Cost versus scale for advanced plantation-based biomass energy systems in the USA and Brazil (No. NREL/CP-200-8098; CONF-9508104-). National Renewable Energy Lab.(NREL), Golden, CO (United States).
- Leboreriro, J., Hilaly, A.K. (2011). Biomass transportation model and optimum plant size for the production of ethanol. *Bioresource Technology*. 2712-2723. 10.1016/j.biortech.2010.10.144
- Sultana, A., Kumar, A. (2014). Development of tortuosity factor for assessment of lignocellulosic biomass delivery cost to a biorefinery. *Applied Energy*, 119, 288-295.
- Delivand, M. K., Cammerino, A. R. B., Garofalo, P., Monteleone, M. (2015). Optimal locations of bioenergy facilities, biomass spatial availability, logistics costs and GHG (greenhouse gas) emissions: a case study on electricity productions in South Italy. *Journal of Cleaner Production*, 99, 129-139.
- Rahemi, H., Torabi, S. A., Avami, A., Jolai, F. (2020). Bioethanol supply chain network design considering land characteristics. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 119, 109517.

Un enfoque basado en alianzas para el diseño óptimo de un sistema de cogeneración comunitario

Javier García-Martínez ^{a, *}, Diego Guzmán-Soria ^a, Victor M. Zavala ^b, Luis Fabián Fuentes-Cortés ^a

^a *Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México en Celaya, Antonio García Cubas Pte. 600 Col. Fovissste, Celaya, Guanajuato, México, 38010.* ^b *Department of Chemical and Biological Engineering, University of Wisconsin- Madison, 1415 Engineering Drive, Madison, WI, USA, 53706-1067. *d2103006@itcelaya.edu.mx*

RESUMEN

El conflicto entre tomadores de decisiones durante la etapa de planeación de un sistema energético puede ser determinante para el éxito en la implementación de este. En el caso de sistemas energéticos comunitarios, múltiples actores como entidades gubernamentales, privadas y pobladores de la región están comúnmente involucrados en las decisiones e implementación del proyecto. En este trabajo se presenta un método para el diseño óptimo de sistemas energéticos basado en la predicción de posibles alianzas entre las partes interesadas. El objetivo es mitigar los conflictos en un entorno de toma de decisiones multicriterio mediante la predicción de posibles alianzas y la propuesta de soluciones consensuadas que tomen cuenta los intereses en común de cada grupo. En primer lugar, se obtienen soluciones multicriterio mediante un método de coeficientes de peso, en donde cada solución representa los intereses de cada uno de los actores. A continuación, basado en el concepto de distancias ideológicas, se generan grupos de actores con intereses en común mediante un método de *soft clustering*. Posteriormente, se obtiene una solución óptima para cada alianza utilizando una modificación del método de *utopia tracking*. Por último, se propone una solución final intermedia entre cada una de las alianzas. El modelo se prueba con un caso de estudio de un municipio del centro-oeste de México. Los resultados muestran el efecto de considerar dos estrategias de generación de alianzas en el diseño final del sistema energético y en la satisfacción de los intereses de las partes interesadas.

Palabras clave: Alianzas, Ambiente de decisión multicriterio, Cogeneración, Fuzzy C-means, Optimización multiobjetivo

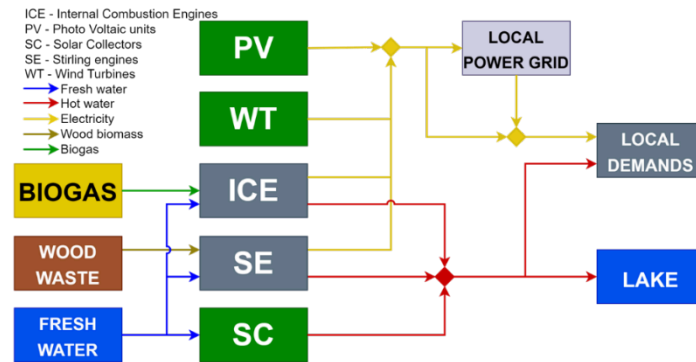


Figura 1. Superestructura

INTRODUCCIÓN

El acceso a energía confiable, asequible y sostenible es necesario para promover la equidad social y el crecimiento económico [1]. En este sentido los sistemas de producción combinada de calor y electricidad (CHP) o cogeneración son una importante alternativa a los sistemas tradicionales debido a su importante ahorro energético y beneficios en la conservación del medio ambiente [2]. Generalmente, la planeación implementación de sistemas energéticos es un problema multiobjetivo y de toma de decisiones en el cual existen conflictos de intereses entre los actores involucrados, por lo que el problema se vuelve complejo y existe el riesgo de fracaso del proyecto si no se llega a un acuerdo [3]. Por lo tanto, es importante definir soluciones que reduzcan la insatisfacción de los actores involucrados [4]. Diversos enfoques han sido desarrollados para abordar este problema [5, 6], sin embargo, ninguno de ellos toma en cuenta las potenciales alianzas entre tomadores de decisiones.

Se presenta un modelo de programación no 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), el consumo de agua (WC) y el índice de diversidad energética (EDI) 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

El modelo de optimización para abordar el problema de diseño del sistema energético está representado 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), unidades de combustión interna (ICE), motores Stirling (SE) y generación de agua caliente mediante colectores solares (SC). Las tecnologías WT y PV dependen de la disponibilidad de fuentes de energía renovables, el sistema ICE utiliza biogás para

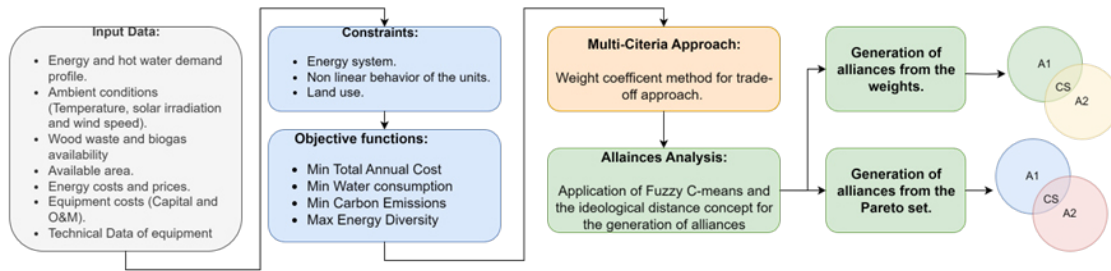


Figura 2. Estrategia de optimización.

generar energía eléctrica y agua caliente, el ICE se utiliza residuos de madera y los SC generan agua caliente utilizando la radiación solar. Como los sistemas FV, WT y SC dependen de las condiciones climáticas la combinación con las demás tecnologías permite una política de funcionamiento flexible. La electricidad y agua caliente 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 mientras que en el caso del exceso de agua es liberado al ambiente. Además, cuando la energía producida por el sistema no puede satisfacer la demanda, la electricidad necesaria se compra a la red local.

Estrategia de optimización.

La estrategia de optimización se presenta en la Figura 2. El resultado es un modelo de programación lineal multiobjetivo multi periodo. Las restricciones del modelo están definidas por los balances de materia y energía del sistema, las ecuaciones de diseño de las unidades de generación, rendimiento a carga parcial, demanda térmica y eléctrica, consumo de agua, combustible y energía externa, y el uso del suelo. Por cuestiones de espacio no se incluye el modelo del sistema energético. 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 compraventa 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 generación. En esta misma dimensión también se considera el consumo de agua por parte de las unidades de generación de electricidad y agua caliente (Ecuación 3). Por último, la dimensión técnica considera la maximización del índice de diversidad energética [7] (Ecuación 4).

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

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

$$WCon = WC^{ICE} + WC^{SE} + WC^{SC} \quad (3)$$

$$EDI = -\sum_i^S Pe_i \ln Pe_i \quad (4)$$

En primer lugar, las funciones objetivo se escalan utilizando las soluciones de los problemas mono objetivo [6]. A continuación, se aplica el método de coeficientes de peso (Ecuación 5) para calcular un conjunto de soluciones óptimas de Pareto vinculadas a criterios específicos para considerar las diferentes prioridades de los grupos de interés.

$$\min \Phi = \sum_{i=1}^n \omega_i \cdot \phi_i \quad (5)$$

donde ω_i es el nivel de preferencia de los diferentes interesados sobre las funciones objetivo y ϕ_i las funciones objetivo escaladas. Los valores de ω_i expresan el peso de la función objetivo para la solución asociada al criterio específico ($\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\}$). Como resultado del proceso de optimización multicriterio, se crea un conjunto de soluciones óptimas de Pareto ($\Psi = \{f^*_1, \dots, f^*_n\}$). La generación de soluciones para los posibles grupos o alianzas está basada en el fenómeno de polarización ideológica [8]. En este trabajo, esas soluciones son generadas mediante las siguientes dos estrategias:

Generación de alianzas a partir del conjunto de Pareto. 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 [9]:

$$\operatorname{argmin} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^c w_{i,j}^m |f_i - c_j|^2 \quad (6)$$

$$w_{i,j} = \left(\sum_{k=1}^c \left(\frac{|f_i - c_j|}{|f_i - c_k|} \right)^{\frac{2}{m-1}} \right)^{-1} \quad (7)$$

Donde c_j es el centro del cluster j , $w_{i,j}$ es el peso o indica el grado en que el elemento, f_i , pertenece al cluster c_j y m es un parámetro de difuminación. Por último, basados en el método de *utopia tracking* [6] y en el concepto de distancia ideológica [8], se obtiene una solución compromiso minimizando la distancia a la media de los centroides de los dos grupos.

$$CS = \sum^L (f_i - c_i^{mid})^2 \quad (8)$$

Generación de alianzas a partir del conjunto de pesos. El mismo método de *soft clustering* es aplicado al conjunto de pesos que representan las preferencias de los actores. Esto evita el computo de numerosas soluciones individuales. Para esta estrategia, la solución compromiso es la minimización de la función multiobjetivo con los pesos promedio de los pesos de las alianzas:

$$\min \Phi = \sum_{i=1}^n \omega_i^{prom} \cdot \phi_i \quad (9)$$

Caso de estudio.

El caso de estudio está definido por los parámetros climáticos (irradiación solar, temperatura ambiente y velocidad del viento) y la demanda eléctrica y de agua caliente de Erongarícuaro, un municipio del Estado de Michoacán en México.

RESULTADOS

De acuerdo con los resultados de la Tabla 1, el índice de diversidad energética presenta el mayor conflicto con las demás funciones objetivo, es decir, se obtiene el peor desempeño de estas. Esto debido a que lo que se busca es que exista una producción de

energía equilibrada entre las distintas tecnologías. Mientras mayor sea el índice, más similar es la producción total de energía de cada tecnología, lo que promueve la diversidad en las fuentes de producción. Podemos ver que para el caso de la maximización del EDI obtenemos un sistema en donde participan todas las tecnologías, lo cual aumentan el costo del sistema, emisiones y consumo de agua.

Tabla 1. Resultados de las funciones objetivo individuales y soluciones compromiso.

	Funciones objetivo					Sistema de cogeneración			
	TAC (\$)	CO2 (Ton)	WC (Ton)	EDI	PV (kW)	WT (kW)	SE (kW)	ICE (kW)	SC (kW)
TAC	-8,624	963	85,583	0.65	0	6,931	0	0	282
CO2	94,904	355	55,143	0.66	0	6,931	0	0	300
WC	588,788	868	3,105	0.85	157	3,824	0	9	12
EDI	637,292	1,601	176,994	1.33	131	2,499	603	300	300
CS-Pareto	463,050	1,369	165,112	1.11	80	3,742	521	300	300
CS-Weights	132,096	686	49,676	1.14	14	6,472	57	73	149

Los resultados del problema multi objetivo pueden verse en la Figura 3A. Para este problema fueron considerados 20 actores con diferentes intereses. Puede observarse que las diferentes preferencias sobre cada uno de los objetivos dan como resultado una dispersión de las soluciones. Debido a esta distancia ideológica en los participantes no existe una clara solución que pueda satisfacer simultáneamente los intereses individuales.

Como se describió anteriormente, para reducir el conflicto entre cada uno de los actores se propusieron dos métodos para generar las alianzas. Los resultados de ambas técnicas pueden verse en la Figura 2B. Los puntos A-Pareto son las soluciones de la estrategia aplicada al conjunto de Pareto. Como se observa, estos puntos representan las soluciones consensuadas para cada una de las alianzas que podrían generarse. Los puntos A-Weights son las soluciones de la estrategia aplicada a los pesos. Mediante esta estrategia no es necesario realizar el computo de las soluciones individuales. Debido a esto podemos observar que estas soluciones no se ajustan con los resultados de la otra estrategia.

Posteriormente, proponemos la generación de soluciones compromiso, una por cada estrategia. Esto se lleva a cabo mediante la minimización de la distancia al punto medio entre los resultados de las alianzas. Estos resultados son los puntos CS-Pareto y CS-Weights. Existe una clara diferencia entre estos puntos. Por una parte, la solución compromiso CS-Pareto se encuentra alejada del punto medio entre las alianzas obtenidas mediante la primera estrategia. Esto puede ser debido a que el punto medio se encuentra en una región infactible. En cuanto a la solución CS-Weights podemos observar que tampoco se encuentra en el punto medio entre las alianzas de la segunda estrategia. Sin embargo, es de esperarse ya que esta solución no se basa en generar un punto medio sino una combinación de pesos promedio para posteriormente resolver el problema multiobjetivo, lo cual es una ventaja sobre la otra estrategia pues evitamos la búsqueda de la solución en una posible región infactible. Además, los resultados de la primera estrategia se ven influenciados por el comportamiento del modelo.

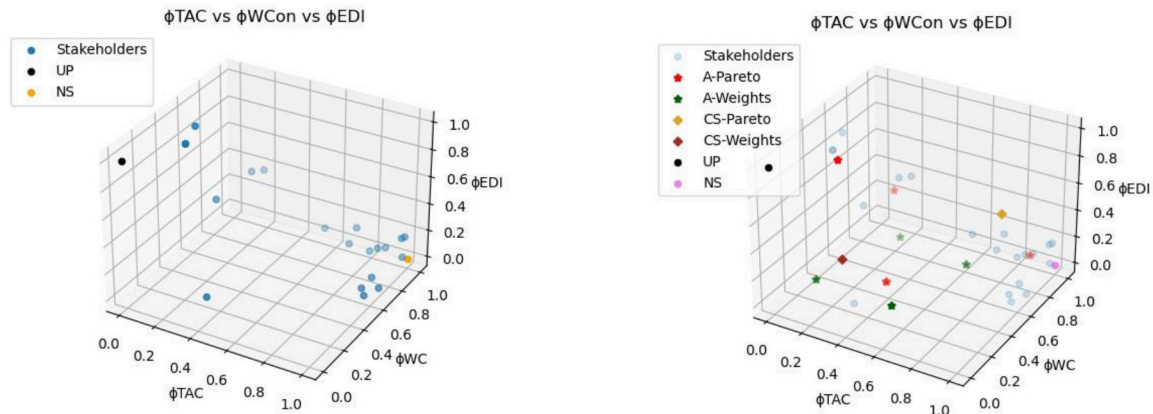


Figura 3. Frentes de Pareto. A) Soluciones individuales B) Soluciones compromiso y de las alianzas.

Por último, en la Tabla 1 se presentan los resultados de las soluciones compromiso y la configuración del sistema de cogeneración. Se observa que la CS-Weight presenta mejores resultados que la CS-Pareto en cada una de las funciones objetivo.

CONCLUSIONES

Se demostró que mediante ambas estrategias es posible reducir los debates entre numerosas partes interesadas a unos pocos grupos, facilitando el consenso y promoviendo decisiones informadas. La metodología que genera alianzas mediante ponderaciones evita el cómputo de soluciones individuales. Además, a diferencia de la otra metodología, ésta no se ve influida por el comportamiento del modelo, ya que sólo tiene en cuenta los intereses de las partes interesadas representados por las ponderaciones. Esta solución también nos asegura que la solución sea una solución de Pareto.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] IEA (2020). Sdg7: Data and projections. Technical report, International Energy Agency, Paris.
- [2] Dong L, Liu H, Riffat S. (2009) Development of small-scale and micro-scale biomass-fuelled CHP systems – A literature review. *Applied Thermal Eng.* 29, 2119-2126.
- [3] García-Martínez, J., Reyes-Patiño, J. L., López-Sosa, L. B., & Fuentes-Cortés, L. F. (2022). Anticipating alliances of stakeholders in the optimal design of community energy systems. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 54, 102880
- [4] 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
- [5] 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.
- [6] Zavala, V. M. and Flores-Tlacuahuac, A. (2012). Stability of multiobjective predictive control: A utopia-tracking approach. *Automatica*, 48(10):2627–2632.
- [7] Ranjan, A, Hughes, L (2014). Energy security and the diversity of energy flows in an energy system. *Energy*, 73, 137-144.
- [8] Flavin, P. & Law, W. (2022). Ideological proximity, issue importance, and vote choice. *Electoral Studies*, 75, 102422
- [9] Statistics, J. (2019). Clustering. fuzzy c-means.

Ajuste de parámetros del modelo NRTL para predicción del punto de inflamabilidad mediante optimización convexa

Cristian Ricárdez García^a, Jennifer Lizbeth Pérez Vicente^a, Luis Miguel Valenzuela Gómez^a, Carolina Conde Mejía^a, Antioco López Molina^{a}*

^a División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Carretera Villahermosa – Comalcalco km.27, Ribera Alta, México, 86205.

*[*antioco.lopez@ujat.mx](mailto:antioco.lopez@ujat.mx)*

RESUMEN.

El punto de inflamación (FP) es una propiedad fundamental que permite evaluar la peligrosidad de líquidos inflamables, al tiempo que establece pautas para su manejo, transporte y almacenamiento seguro. En el caso de mezclas de componentes como ABE diluidos en agua, la disponibilidad limitada o aislada de datos sobre el punto de inflamación hace que sea esencial predecir estos valores con precisión. Esto es crucial para llevar a cabo análisis de seguridad de procesos de manera sistemática y con mayor confianza. En este estudio, utilizamos el modelo termodinámico NRTL como base para predecir el punto de inflamación en mezclas binarias, específicamente, acetona + agua, butano + agua y etanol + agua. Si bien el modelo proporciona predicciones aceptables en todo el rango de composición de estas soluciones, la necesidad de una precisión máxima para fines de seguridad nos lleva a emplear un enfoque de optimización de parámetros del Modelo NRTL mediante la técnica de optimización convexa. Los resultados de esta optimización se comparan con los obtenidos mediante la técnica de mínimos cuadrados, logrando una reducción en el error.

Palabras clave: Flash point; Optimización; inflamabilidad; modelos termodinámicos;

INTRODUCCIÓN

El punto de inflamación (FP) se define como la temperatura a la cual el vapor de un líquido alcanza una concentración en el aire que puede generar una llama, lo que se interpreta como el límite inferior de inflamabilidad¹. Un estudio previo ha demostrado que, en el caso de mezclas acuosas de este tipo, el modelo NRTL es capaz de predecir con precisión el punto de inflamación en todo el rango de composición de estas soluciones ternarias, utilizando los puntos de inflamación de los componentes individuales. Sin embargo, existe la posibilidad de mejorar aún más estos resultados mediante la optimización de los coeficientes de fugacidad en este modelo².

La obtención de predicciones precisas para estas mezclas es fundamental para llevar a cabo análisis de seguridad de procesos de manera sistemática y con mayor certidumbre. Esto, a su vez, facilitará la creación de procesos inherentemente seguros, la definición de las capas de protección pertinentes y la elaboración de planes de emergencia adecuados³.

Dado que la información sobre la caracterización de mezclas de este tipo es limitada y la investigación en la clasificación de peligrosidad es escasa, surge la necesidad de buscar métodos que permitan optimizar y adaptar un modelo que cumpla con los requisitos de predicción precisa de ciertos parámetros. Esto conduce a la exploración de enfoques de

optimización matemática, numérica y estadística. Aunque la optimización convexa no lineal general mediante métodos de punto interior sigue siendo un área de investigación activa y aún no se ha llegado a un consenso sobre cuál es el mejor método o métodos, es razonable anticipar que la resolución de problemas generales de optimización convexa se convertirá en una tecnología establecida en unos pocos años.⁴

METODOLOGÍA

Para llevar a cabo la optimización del modelo NRTL, se inicia con la recopilación de datos esenciales de un estudio previo donde se seleccionó este modelo como el más adecuado para la mezcla en estudio. Los valores de A_{ij} y A_{ji} para la mezcla binaria agua + etanol del NRTL fueron tomados de la base de datos de Aspen Plus V10. Una vez que se han adquirido estos parámetros y variables del modelo con la asistencia de la herramienta de programación Wolfram Mathematica 10.4, así como algunos cálculos realizados en una hoja de cálculo de Excel, se proponen métodos y enfoques para optimizar el modelo. En particular, se opta por utilizar el método de optimización convexa, el cual ha sido respaldado por Alejandro Garcés Ruíz en uno de sus libros debido a su utilidad en la optimización de sistemas dinámicos.⁵

El proceso de optimización se basa en un conjunto discreto de datos que relacionan las concentraciones con la temperatura. La metodología se centra en la optimización de los parámetros del modelo NRTL mediante el cálculo de sus puntos críticos para un conjunto de N funciones de prueba de tipo NRTL. Los parámetros seleccionados para la optimización del modelo son las " λ_{ij} ", proporcionadas por Aspen Plus y denominadas como " K_n " en la herramienta de programación WM.

Seguidamente se construye una matriz que llamaremos *data* para almacenar los datos discretos correspondientes a las concentraciones y temperaturas. La función que se propone para ajustar la nube de datos está dada por:

$$h(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \varphi_i(x)$$

donde

$\varphi_i(x)$: Son funciones de la forma NRTL.

Se procedió a generar una matriz de diseño para un modelo lineal mediante la instrucción *DesignMatrix* de wolfram

```
designMatrix = DesignMatrix[data, basis, x, IncludeConstantBasis → False]
```

donde

data: Es un arreglo matricial que contiene todos los puntos correspondientes a las concentraciones y temperaturas experimentales.

basis: Contiene las N funciones de prueba de la forma NRTL.

IncludeConstantBasis: Permite considerar o no el término constante en el modelo lineal mediante la instrucción True o False respectivamente.

Se propone la función objetivo

$$f(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \sum_{i=1}^N |a_i \lambda_i - b_i|, \quad (1)$$

donde

a_i : Corresponden a los valores obtenidos en la matriz de diseño “designMatrix”.

b_i : Corresponden a los valores experimentales de la temperatura del punto de inflamabilidad.

Nótese que la función f dada en (1) es una función convexa. Se construye el espacio de restricciones mediante la introducción de un vector $r = (r_1, r_2, \dots, r_N)$ que cumpla lo siguiente:

$$|a_i \lambda_i - b_i| < r_i \text{ para toda } i = 1, \dots, N. \quad (2)$$

De esta manera minimizar la función convexa (1) es equivalente a minimizar la función

$$g(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N r_i. \quad (3)$$

Sujeta a las restricciones dadas en (2): $|a_i \lambda_i - b_i| < r_i$ para toda $i = 1, \dots, N$.

Con el objetivo de aplicar la optimización lineal a la función (3) sobre el espacio de restricciones dadas en (2) se utiliza la función

$$\text{LinearOptimization}[\text{objective}, \{\text{parameters}, \text{condition}\}, \{\lambda, r\}], \quad (4)$$

donde

objective: Corresponde a la función objetivo

(3), *parameters*: Contiene los valores a_i y b_i .

La instrucción (4) permite calcular los valores λ_i y r_i que optimizan el problema (3).

RESULTADOS

Los resultados obtenidos mediante la aplicación de la técnica de optimización convexa se comparan con los obtenidos a través del método de mínimos cuadrados, y se observa que la técnica de optimización convexa logra un desempeño superior en términos de errores, con valores de 0.14 en contraste con el 0.20 obtenido mediante el método de mínimos cuadrados. Estos resultados se ilustran en la Figura 1. Para lograr este ajuste óptimo, se calculan los parámetros λ_i y r_i , los cuales se determinan en función de las funciones y el modelo en perspectiva. Para las funciones y variables $\varphi_i, G1, X \dots$ $Kn = A_{ji} = 3.4578$ para el modelo convencional. Sin embargo, en el modelo optimizado, estos valores se ven influenciados por el software utilizado, y en promedio, se obtiene un valor de A_{ji} igual a 4.2041, para mezcla agua + etanol, lo que refleja una mejora significativa en el ajuste de la temperatura.

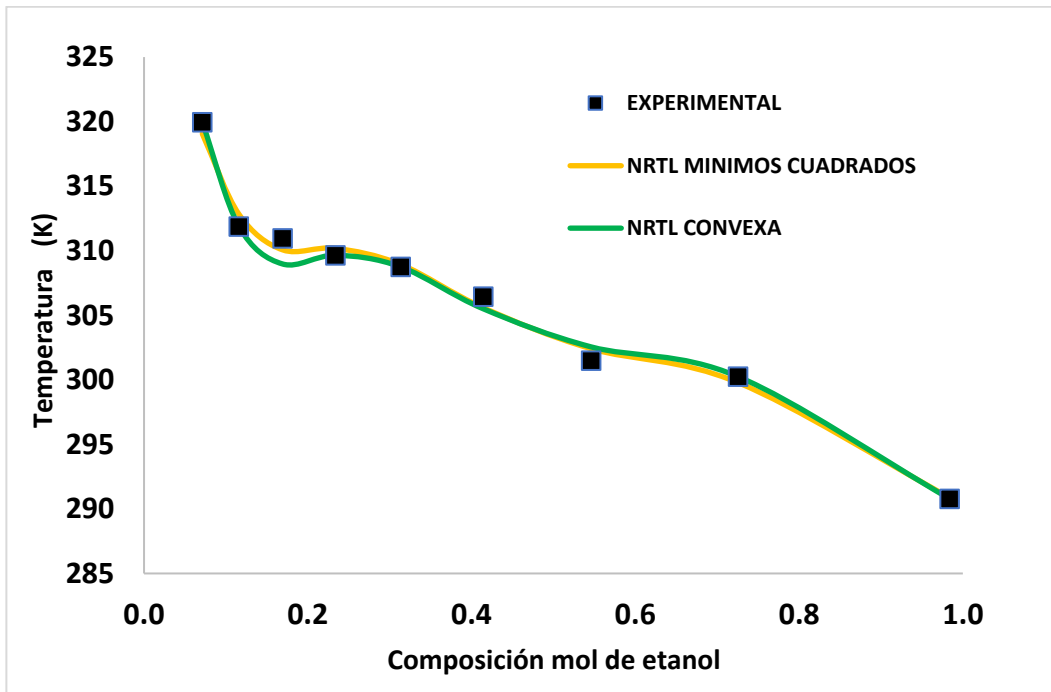


Figura 1 comparación de métodos convexo vs mínimos cuadrados (mezcla etanol+agua).

Fig.1. La curva en color verde corresponde al ajuste mediante optimización convexa, mientras que la curva en color amarilla corresponde al ajuste por mínimos cuadrados para una serie de 9 funciones de prueba.

La Tabla 1 muestra la comparación de las temperaturas en la cual se puede apreciar la similitud entre los métodos estudiados.

Tabla 1 comparación de las temperaturas obtenidas con los diferentes métodos.

T EXPERIMENTAL	T MET. CONVEXA	T MET. MINIMOS CUADRADOS	T MET. CONVENCIONAL
290.783	290.783	290.878	291.041
300.25	300.25	299.786	295.145
301.483	302.551	302.407	297.849
306.45	305.501	305.581	299.881
308.75	308.75	308.935	301.683
309.65	309.65	310.184	303.650
310.95	308.972	310.067	306.182
311.883	311.883	312.822	309.868
319.95	319.95	319.061	315.637

Para apreciar de forma más detallada los resultados que se resaltan, la Figura 2 muestra el modelo antes y después de la optimización y la comparación de las temperaturas según el método.

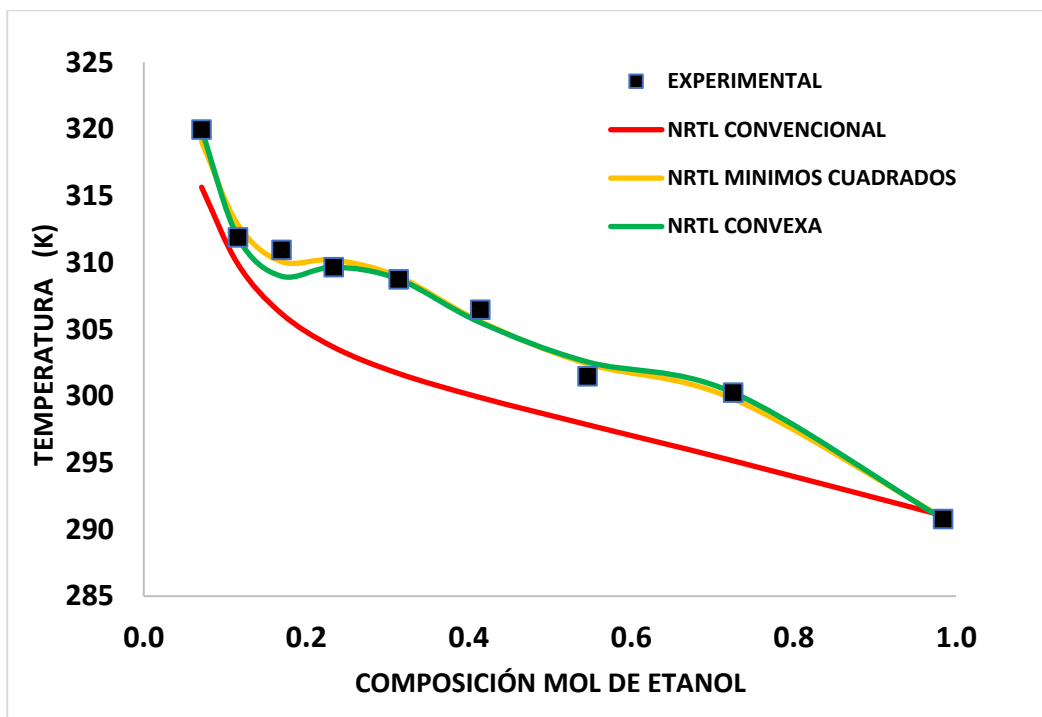


Figura 2 comparación de los métodos de optimización aplicados a el modelo NRTL.

La Figura 2 muestra la línea de color verde a el modelo NRTL optimizado, siendo esta la correspondiente al método de optimización convexa muestra en perspectiva observable un mejor ajuste con respecto al método de mínimos cuadrados cuya tendencia es de color amarillo para la mezcla etanol + agua.

La Tabla 2 muestra los errores porcentuales de los métodos utilizados, optimizados y convencional del modelo NRTL con respecto a las temperaturas experimentales lo que demuestra la veracidad de optimización y da a conocer las variables del modelo NRTL convencional.

Tabla 2 errores porcentuales de los métodos utilizados

ERROR PORCENTUAL DE LAS TEMPERATURAS DE CADA METODO.			
METODOS	T MET.CONVEXA	T MET. MINIMOS CUADRADOS	T MET.CONVENCIONAL
%ERROR	0.144	0.208	1.43

CONCLUSIONES

Este estudio subraya la importancia crítica del punto de inflamación en la gestión segura de líquidos inflamables y la necesidad imperante de predecir con precisión este parámetro, especialmente en el contexto de mezclas complejas como ABE diluidos en agua. La adopción del modelo termodinámico NRTL como base para estas predicciones demuestra ser prometedora, pero la búsqueda de una precisión óptima con fines de seguridad lleva a la implementación de la técnica de optimización convexa en la optimización de sus parámetros. Los resultados comparativos muestran que esta aproximación supera significativamente al método de mínimos cuadrados, con un error reducido a 0.14 en contraste con 0.20. Estos hallazgos subrayan la importancia de la aplicación de técnicas avanzadas en la mejora de la precisión y la confianza en la seguridad en el manejo de sustancias inflamables, lo que beneficia la seguridad industrial y el cumplimiento de las regulaciones de manera más efectiva.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) Liaw, H. J.; Tang, C. L.; Lai, J. S. A Model for Predicting the Flash Point of Ternary Flammable Solutions of Liquid. *Combust Flame* 138 (4), 308–319. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.06.002>.
- (2) Villanueva Perales, Á. L. Simulación y Optimización de Procesos Simulación y Optimización de Procesos Químicos Métodos Termodinámicos En Simuladores de Procesos.; 2010.
- (3) Huici Montagud. NTP 663. Propiedades Físicoquímicas Relevantes En La Prevención Del Riesgo Químico.
- (4) Boyd, S. P.; Vandenberghe, L. *Convex Optimization*; Cambridge University Press, 2004.
- (5) Alejandro Garcés Ruiz. Optimización Convexa Aplicaciones En Operación y Dinámica de Sistemas de Potencia.

Diseño y Optimización de Intercambiadores Compactos Tipo Compabloc.

Jamel Eduardo Rumbo-Arias^a, Martín Picón-Núñez^{a*}, Fernando Israel Gómez-Castro^a,
Jorge Luis García-Castillo^b.

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

^bUniversidad de Guanajuato, Campus Irapuato-Salamanca, División Ciencias de la Vida, Departamento de Ingeniería Ambiental, Ex Hacienda El Copal km 9; carretera Irapuato-Silao, Irapuato, Gto. México 36500.

piconnunez@gmail.com.

RESUMEN

Los intercambiadores de calor de plato soldado de tipo Compabloc son equipos muy eficientes que permiten transferir cargas térmicas en unidades más pequeñas comparado con la tecnología tubo y carcasa. Esto se debe a las características geométricas de sus placas corrugadas. La principal desventaja de estos equipos radica en que Compabloc es una marca comercial, razón por lo cual los métodos de diseño no están disponibles en la literatura abierta. En este trabajo se propone una metodología de diseño y se plantea una optimización determinística para resolver un modelo MINLP de 29 ecuaciones, 318 variables con un tiempo de cómputo de 0.172 s, donde el objetivo es minimizar el Costo Total Anualizado del equipo y costos por bombeo (TAC). Se analizaron dos casos de estudio encontrándose que, para el diseño óptimo, la contribución del costo por bombeo al costo total anualizado está en el rango de 12.2 al 13.6 %.

Palabras clave: Compabloc, Desempeño termo-hidráulico, Caída de presión, Optimización determinística, MINLP, DICOPT.

INTRODUCCIÓN

La tecnología de intercambiadores de calor de tipo plato soldado cuadrado, como la marca comercial Compabloc (Figura 1) tienen características de construcción que los hacen altamente efectivos para llevar a cabo la función de transferir una determinada carga térmica en dimensiones relativamente pequeñas (Arsenyeva et al.,2015; Picón-Núñez et al.,2021). Los aspectos importantes en el dimensionamiento de este tipo de equipos son: (1) la geometría de las placas térmicas y su caracterización termo-hidráulica, (2) el dimensionamiento del equipo para satisfacer una carga térmica bajo las limitaciones impuestas por la caída de presión (Lee, J et al,2015; Picón-Núñez et al.,2006). La técnica de diseño se basada en el uso de la caída de presión disponible de una sola corriente; ésta establece el área libre de flujo para iniciar el cálculo de los parámetros térmicos. Las demás variables geométricas las define la carga térmica que se desea transmitir. Los platos corrugados más usados son los de tipo Chevron (Figura 2). Éstos tienen características geométricas bien definidas como son la longitud del plato, espacio entre

platos, el paso de la ondulación, Angulo Chevron y altura de la corrugación. Tales parámetros están relacionados con el desempeño termo-hidráulico del plato y determinan el tamaño del equipo y las caídas de presión en el diseño final (Arsenyeva et al.,2011). Desde el punto de vista de diseño, la principal limitación de los intercambiadores Compabloc radica en que es una marca comercial de propiedad industrial, razón por la cual los métodos de diseño no están disponibles en la literatura abierta. Por esta razón el principal objetivo de este trabajo es desarrollar una metodología de diseño y de optimización para desarrollar una metodología para la aplicación en procesos que requieren recuperación de calor.

Existen diversas variables que influyen en el diseño de intercambiadores de calor Compabloc. Encontrar el costo mínimo del equipo con el menor costo de potencia de bombeo no es tarea sencilla cuando se tienen varios factores que alteran el rendimiento termo-hidráulico. De aquí surge la necesidad de aplicar una metodología de optimización determinística para equilibrar los costos de inversión y de operación (Arsenyeva et al., 2011; Sadeghianjahromi et al,2022). En este trabajo se implementó una metodología de optimización por medio de la interfaz GAMS empleando BARON como un optimizador global determinístico que resuelve un modelo MINLP donde la función objetivo es minimizar el costo total anualizado del equipo (TAC) obtenido como resultado caídas de presiones y áreas relativamente bajas lo que genera una perspectiva interesante cuando se considera la inversión en un proyecto de recuperación de calor.

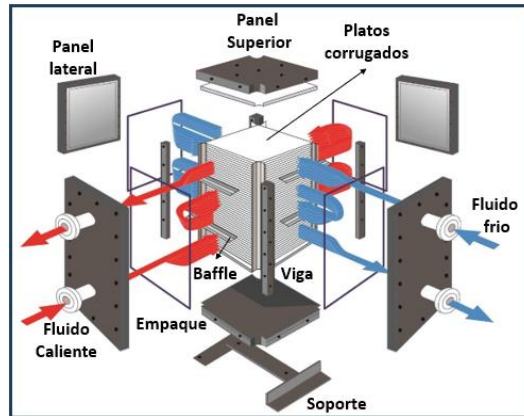


Figura 1. Intercambiador de calor de placa soldada tipo Compabloc.

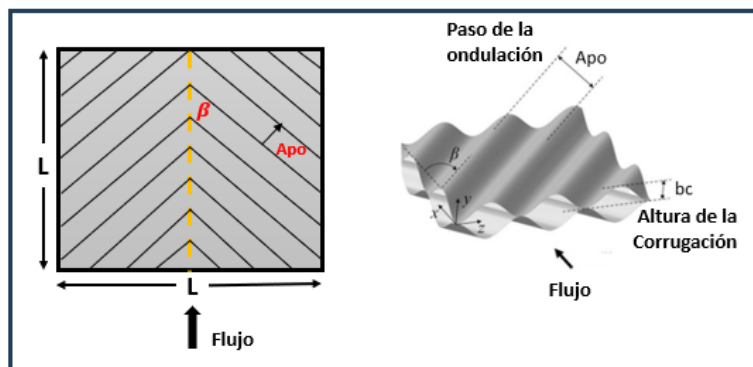


Figura 2. Placas Cuadradas Tipos CHEVRON para Intercambiador de calor tipo Compabloc.

METODOLOGÍA

El diseño de intercambiadores de placa soldada (Figura 1) requiere la especificación de la información de proceso como: propiedades físicas, datos de operación y geometría del plato. Se procede a calcular el diámetro hidráulico a partir de las ecuaciones (1) (2) y (3) (Picón-Núñez et al.,2022). Mediante un proceso iterativo se calcula el factor de fricción f , el área seccional libre de flujo A_c y el número de Reynolds Re . Se selecciona como corriente crítica la que genere el mayor valor de A_c para evitar que la corriente opuesta genere altas caídas de presión; posteriormente, con la expresión (4) se calculan los coeficientes de transferencia de calor (Sadeghianjahromi et al.,2022). Con esta información se pueden calcular todos los parámetros térmicos y al final se calcula una nueva área seccional térmica. Si ésta es menor a un error y permite que la nueva caída de presión sea menor que la permisible, se ha concluido el diseño; de lo contrario, se reinicia el proceso iterativo modificando las variables geométricas. La Figura 3 muestra el diagrama de flujo del proceso de diseño. Esta metodología se programó utilizando el software de MATLAB.

$$A_c^2 = \frac{2 N f L m^2}{\rho d_h \Delta P} \quad (1)$$

$$Re = \frac{m d_h}{\mu A_c} \quad (2)$$

$$f = ((a * Re^b)^{15} + (c * Re^d)^{15})^{\frac{1}{15}}$$

$$\begin{aligned} a &= (0.5803 * \beta^2 - 35.119 * \beta + 553.49) \\ b &= (0.0003 * \beta^2 - 0.0362 * \beta + 0.281) \\ c &= (0.0318 * \beta^2 - 2.2718 * \beta + 43.37) \\ d &= (-0.0002 * \beta^2 + 0.0207 * \beta - 0.714) \end{aligned} \quad (3)$$

$$Nu = [0.00004 * \beta^{1.5107} * Re + 5.5607 * \beta^{0.5281}] * P_r^{0.3} \quad (4)$$

Para llevar a cabo la optimización, el modelo matemático fue implementado en el software GAMS y corresponde a un Modelo de Programación Mixta Entera No Lineal (MINLP) el cual fue resuelto utilizando el solver DICOPT. La metodología de optimización para resolver el diseño del intercambiador de calor Compabloc se basa en minimizar los costos (TAC) con función sujeta a sus respectivas restricciones (ecuación 5). La Figure 4 muestra el diagrama de flujo del proceso de optimización.

$$\begin{aligned} \min(TAC) = \text{Costo equipo} & \left[\frac{i * (1 + i)^n}{(1 + i)^n - 1} \right] + \left[\frac{\Delta P * m}{\rho} \right] * \left[\frac{\$kWh * 24 * 365}{\epsilon} \right] \\ & \Delta P_h \leq \Delta P_{hidraulica} \\ & \Delta P_c \leq \Delta P_{hidraulica} \\ & 35 \leq \beta \leq 60 \\ & 0.28 \leq L \leq 2.2 \\ & 1 \leq N \leq 4 \\ & 0.0015 \leq b_b \leq 0.005 \\ & 0.002 \leq b_c \leq 0.0055 \\ & Re \leq 10,000 \\ & A_{po} = 0.0198 \end{aligned} \quad (5)$$

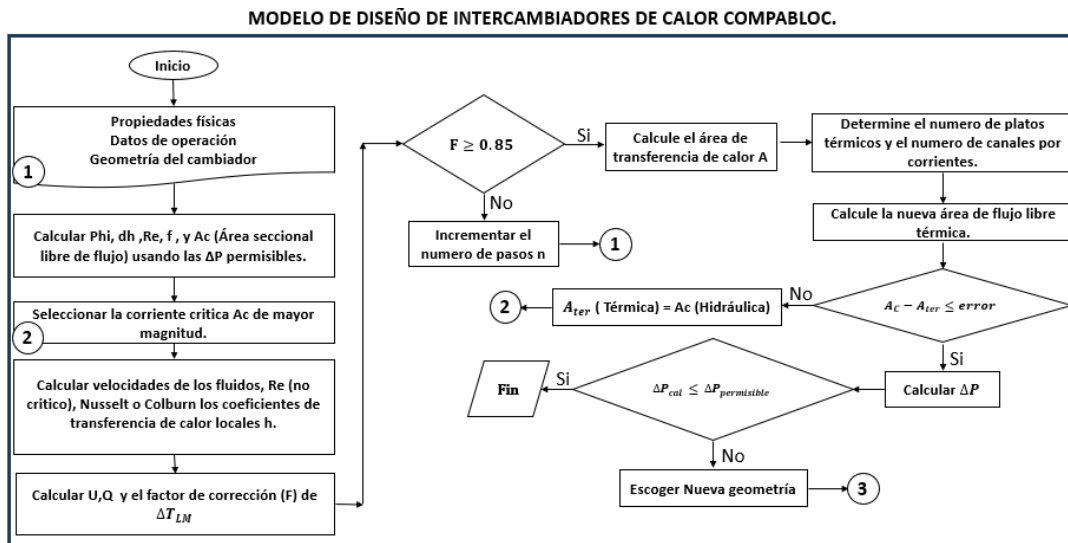


Figura 3. Diagrama de flujo de diseño del Intercambiador de calor de placa soldada tipo Compabloc.

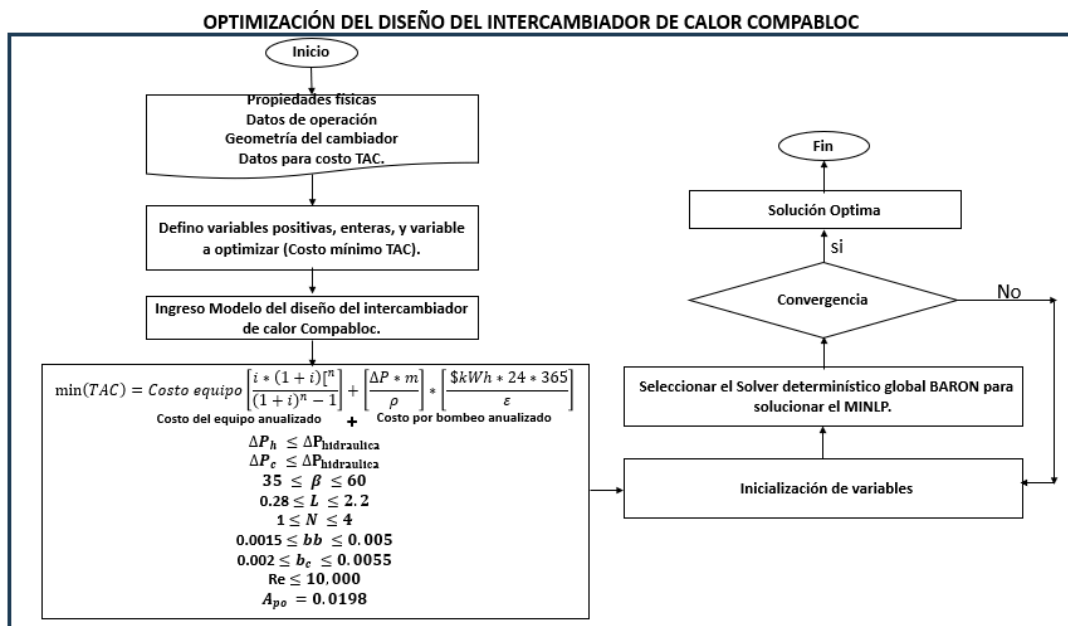


Figura 4. Diagrama de flujo de Optimización del Intercambiador de calor de placa soldada tipo Compabloc.

RESULTADOS

Para evaluar las metodologías de diseño y optimización, se implementan dos casos de estudios. En el caso 1 se desea enfriar queroseno con (42 API) que sale de la base de una columna de extracción lateral a 200 °C y se enfría 90 °C mediante petróleo crudo ligero. Para el caso 2 se tiene que se desea enfriar gasóleo de 200 °C a 40 °C con agua de enfriamiento disponible de 30 °C a 50 °C. Las Tablas 1 y 2 muestran los datos de operación y propiedades físicas de los casos 1 y 2 respectivamente (Kakac et al, 2002). Los resultados del diseño optimizado para ambos casos se presentan en las Tablas 3 y 4.

Tabla 1. Propiedades físicas y condiciones de operación para el caso de estudio 1.

Flujos [Kg s ⁻¹]	6.25	27.7
T_{in} [°C]	200	
4		0
T_{out} [°C]	90	78
ΔP_{permissible} [Pa]	100,000	100,000
ρ , [kg m ⁻³]	850	992.8
Cp , [J kg ⁻¹ °C ⁻¹]	2,280	4,180
K , [W m ⁻¹ °C ⁻¹]	0.125	0.671
μ , [Kg m ⁻¹ s ⁻¹]	0.17 x 10 ⁻³	670 x 10 ⁻⁶

Tabla 2. Propiedades físicas y condiciones de operación para el caso de estudio 2.

Flujos [Kg s ⁻¹]	5.55	19.4
T_{in} [°C]	200	30
T_{out} [°C]	40	50
ΔP_{permissible} [Pa]	80,000	80,000
ρ , [kg m ⁻³]	730	820
Cp , [J kg ⁻¹ °C ⁻¹]	2,470	2,050
K , [W m ⁻¹ °C ⁻¹]	0.132	0.134
μ , [Kg m ⁻¹ s ⁻¹]	0.43 x 10 ⁻³	3.2 x 10 ⁻⁶

Tabla 3. Resultados de optimización del intercambiador Compabloc caso de estudio 1: Queroseno-crudo.

Variables	Valor	Variables	Valor
β [°]	35	Q [KW]	1,507.93
Apo [m]	0.0198	U [W/m ² °C]	1,230.84
bb [m]	0.0037	ΔTml [°C]	80.71
L [m]	0.28	A [m ²]	16.17
bc [m]	0.0042	ΔPh [Pa]	418.89
Phi [-]	1.35	ΔPc [Pa]	6,589.62
Np [-]	152	Costo Equipo Anual [USD/año]	2,971.88
Nc [-]	75	Costo Bombeo Hot Anual [USD/año]	8.20
N [-]	1	Costo Bombeo Cold Anual [USD/año]	401.67
F [-]	0.9383	Costo min Total [USD/año]	3,381.75

Tabla 4. Resultados de optimización del intercambiador Compabloc caso de estudio 2: Queroseno-agua.

Variables	Valor	Variables	Valor
β [°]	36.7	Q [KW]	2280
Apo [m]	0.0198	U [W/m ² °C]	2007.96
bb [m]	0.0024	ΔTml [°C]	51.69
L [m]	0.28	A [m ²]	23.44
bc [m]	0.0029	ΔPh [Pa]	483.01
Phi [-]	1.18	ΔPc [Pa]	7910.99
Np [-]	252	Costo Equipo Anual [USD/año]	3681.82
Nc [-]	126	Costo Bombeo Hot Anual [USD/año]	9.15
N [-]	1	Costo Bombeo Cold Anual [USD/año]	568.68
F [-]	0.9369	Costo min Total [USD/año]	4259.66

CONCLUSIONES

Se propuso un modelo MINLP de 29 ecuaciones, 318 variables con un tiempo de cómputo de 0.172 segundos para optimizar el costo total anual de operación (TAC por sus siglas en inglés). Se analizaron dos casos de estudio encontrándose que, para el diseño óptimo, la contribución del costo por bombeo comparado con el costo total del equipo anualizado está en el rango de 12.2% al 13.6 %.

Por otro lado, se puede observar en la optimización que la variable ángulo de corrugación (β) en un rango de $[35^\circ, 60^\circ]$, toma valores de 35° a 36.7° , mientras que la longitud del plato (L) siempre toma un valor de 0.28 m en un rango de $[0.28, 2.2]$. El espacio entre platos (bb) toma valores intermedios de 0.0024 a 0.0037 en un rango de $[0.0015, 0.005]$. De estos resultados se puede inferir que con mayores ángulos Chevron y de longitud de placa, el costo del equipo disminuye, pero los costos por bombeo se crecen rápidamente. Dado que el área de transferencia de calor y la caída de presión son dos variables que se mueven de manera inversa, durante la optimización el modelo busca equilibrar con la variable espacio, entre platos, tomando valores medios para no generar TAC elevados.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Arsenyeva, O. P., Tovazhnyanskyy, L. L., Kapustenko, P. O., Khavin, G. L., & Yuzbashyan, A. (2015). Shell-and-Plate Heat Exchangers for efficient heat recovery under the industrial application. *Chemical Engineering Transactions*, 45, 1231–1236.
- Arsenyeva, O. P., Tovazhnyansky, L. L., Kapustenko, P. O., & Khavin, G. L. (2011). Optimal design of plate-and-frame heat exchangers for efficient heat recovery in process industries. *Energy*, 36(8), 4588-4598.
- Kakac, S., Liu, H., & Pramuanjaroenkij, A. (2002). *Heat exchangers: selection, rating, and thermal design*. CRC press.
- Lee, J., & Lee, K. S. (2015). Friction and Colburn factor correlations and shape optimization of chevron-type plate heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 89, 62-69.
- Picón-Núñez, M., Delgado-García, D. C., & García-Castillo, J. L. (2022). Designing compact heat recovery systems to increase energy efficiency. *Chemical Engineering Research and Design*, 187, 413-424.
- Picón-Núñez, M., Martínez-Rodríguez, G., & López-Robles, J. L. (2006). Alternative design approach for multipass and multi-stream plate heat exchangers for use in heat recovery systems. *Heat Transfer Engineering*, 27(6), 12–21.
- Picón-Núñez, M., & Rumbo-Arias, J. E. (2021). Improving thermal energy recovery systems using welded plate heat exchangers. *Energy*, 235, 121373.
- Sadeghianjahromi, A., Jafari, A., & Wang, C. C. (2022). Numerical investigation of the effect of chevron angle on thermofluids characteristics of non-mixed and mixed brazed plate heat exchangers with experimental validation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 184, 122278.

Diseño óptimo de celdas electrolíticas microbianas para la producción de biohidrógeno

Uriel Roberto Pedroza-Medina^a, Luis Felipe Cházaro-Ruiz^b, Alicia Román-Martínez^{a,*}

^a*Facultad de Ciencias Químicas, UASLP, Manuel Nava 6, San Luis Potosí, SLP, 78210, México*

^b*División de Ciencias Ambientales, IPICYT, A. C., Camino a la Presa San José 2055, San Luis Potosí, SLP, 78216, México*

**alicia.romanm@uaslp.mx*

RESUMEN

En un marco de economía circular, la tecnología de celdas electrolíticas microbianas (CEM) se ha propuesto como herramienta para descomponer los contaminantes orgánicos de aguas residuales, así como la obtención de hidrógeno. El presente trabajo propone un modelo de CEM de parámetros distribuidos para aplicarlo como restricción en un problema de optimización. El modelo es resuelto empleando software de simulación empleando el método de elemento finito. Se realiza análisis de sensibilidad global obteniendo los índices de Sobol de tres variables de entrada sobre la producción de hidrógeno y la eficiencia eléctrica de la celda y se aplicó un algoritmo de optimización para encontrar los valores óptimos de las variables de diseño. La simulación del caso base indica que un sistema modular de CEM puede incrementar la producción de hidrógeno y alcanzar un 60% la remoción de materia orgánica. La función objetivo maximiza la eficiencia eléctrica a 267% respecto al voltaje aplicado.

Palabras clave: celda electrolítica microbiana; biohidrógeno; modelación; optimización

INTRODUCCIÓN

La celda electrolítica microbiana (CEM) es una tecnología novedosa que ha generado gran interés científico debido a su capacidad de aprovechar las propiedades conductoras de las bacterias electroactivas, que ayudan a catalizar la oxidación electroquímica de sustrato orgánico, convirtiendo energía eléctrica a energía química en forma de gas H₂ producido por la reducción de protones en medio electrolítico. La principal ventaja de esta tecnología es su habilidad de emplear la materia orgánica disuelta en aguas residuales como sustrato, permitiendo el tratamiento de efluentes de agua residual y la síntesis de hidrógeno. Se han probado distintos efluentes de agua residual como fuentes de sustrato para su operación con distintos grados de remoción de contaminante orgánico y producción de hidrógeno. El diseño de un reactor de CEM está influenciado por la concentración de sustrato en la alimentación, la geometría y tamaño de reactor, materiales y configuración de electrodos, distancia entre ánodo y cátodo, la presencia de un separador entre electrodos, la composición del medio electrolítico y las comunidades microbianas en el compartimento anódico (Rousseau, 2021). Se han llevado a cabo estudios experimentales para comprender y optimizar los fenómenos que ocurren en estos sistemas. En estos trabajos se encuentra que la producción de hidrógeno se ve favorecida a menores tiempos de residencia del sustrato alimentado y en mayores voltajes aplicados a la celda (Gil-Carrera, 2013).

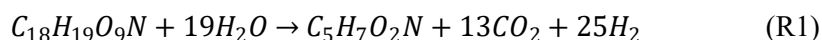
La optimización basada en modelos matemáticos es un enfoque de investigación que se emplea para estudiar sistemas empleando menos recursos materiales y en potencialmente menor tiempo, aunque existen pocos estudios sobre sistemas bioelectroquímicos. Estos trabajos se han centrado en maximizar la eficiencia de remoción de contaminante orgánico y la generación de energía. Un estudio pionero de modelación matemática realizó el análisis de un modelo dinámico incluyendo dos poblaciones microbianas para describir la operación de un reactor CEM continuo que encontró productividades óptimas de hidrógeno reduciendo la resistencia interna de la celda, afectada por los materiales de electrodo, presencia de membrana y tamaño de celda (Pinto, 2012). Estudios de optimización multiobjetivo que buscan maximizar la densidad de potencia y la remoción de materia orgánica en celdas de combustible microbianas encuentran que estos criterios son antagónicos (Abu-Reesh, 2020), la densidad de potencia aumenta a mayores concentraciones de sustrato mas la eficiencia de remoción de orgánicos disminuye.

Recientemente, se han desarrollado modelos de simulación multifísica, acoplando EDP de fenómenos de transporte y distribución de corriente para describir el funcionamiento de las CEM en diferentes geometrías (Hernández-García, 2020; Casula, 2021), pero no se han aplicado estrategias de optimización para encontrar configuraciones de celda óptimas. En el presente trabajo, se desarrolla un modelo de CEM en 2D al cual se realiza un análisis de sensibilidad global y un algoritmo de optimización para comprender los efectos de las variables de diseño sobre la productividad de hidrógeno y encontrar valores óptimos de estas variables para maximizar la eficiencia eléctrica de la celda.

METODOLOGÍA

Definición del problema

Se simula un reactor de CEM de tanque de 100 L con 6 módulos de electrodos arreglados en cartuchos de PVC como ánodo-cátodo-ánodo, colocados en caras alternadas del tanque para inducir un flujo en serpentin, como se ilustra en la Figura 1. Sobre las caras externas de los ánodos crece una biopelícula electroactiva donde los microorganismos se representan por una fórmula empírica $C_5H_7O_2N$ que crece al alimentar agua residual con sustrato orgánico genérico $C_{18}H_{19}O_9N$ a un flujo volumétrico $Q = f(v_0)$, como se muestra en la reacción (R1), dando lugar a un bioánodo.



La biopelícula funciona como catalizador de la oxidación electroquímica del sustrato (R2) tras la aplicación de un voltaje externo V_{app} :



Los electrones producidos generan una corriente que es conducida de los bioánodos hacia el cátodo por un circuito externo al mismo tiempo que los protones migran a través de una membrana de polietileno selectiva para protones, y son reducidos en la superficie del cátodo gracias a la corriente generada (R3).



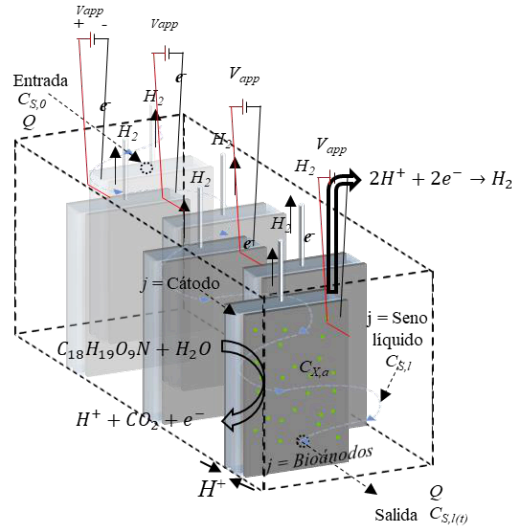


Figura 1. Esquema del espacio de modelación ilustrando volúmenes de balance (j = seno líquido, bioánodo y cátodo), entradas y salidas relevantes.

Modelo matemático y simulación

El modelo considera los dominios j = líquido, bioánodo y cátodo y las especies i = sustrato (S), biomasa (X) e hidrógeno (H). El flujo del líquido está descrito por (1), donde \mathbf{u} es el campo de velocidad del fluido, ρ es la densidad de fluido, P la presión del sistema, ν la viscosidad cinemática y ε_j la porosidad del dominio:

$$\frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon_j} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{\nu}{\varepsilon_j} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

El transporte de masa en el líquido para las especies de interés está dado por (2) considerando difusión y convección, donde $C_{i,j}$ es la concentración en el dominio, D_i la difusividad de la especie en el líquido y $r_{i,l}$ la velocidad de reacción; en el bioánodo y en el cátodo, solo consideran la difusión. Las velocidades de reacción se deducen estequiométricamente tomando (7), (8) y (9):

$$\frac{\partial C_{i,l}}{\partial t} = D_i \nabla^2 C_{i,l} - \mathbf{u} \nabla C_{i,l} + r_{i,l} \quad (2)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial C_{i,an}}{\partial t} = D_{i,f} \nabla^2 C_{i,an} + r_{i,an} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_{i,cat}}{\partial t} = D_{i,f} \nabla^2 C_{i,cat} + r_{i,cat} \quad (4)$$

La distribución de corriente secundaria en el ánodo (5) y cátodo (6) relacionan la densidad de corriente del electrodo con la conductividad κ_j y el potencial eléctrico ϕ_j del medio:

$$j_{an} = -\kappa_{an} \nabla \phi_{an} \quad (5)$$

$$j_{cat} = -\kappa_{cat} \nabla \phi_{cat} \quad (6)$$

La cinética de consumo de sustrato orgánico (7), por bacterias electroactivas (8) y de decaimiento bacteriano (9), donde k_l , k_2 y k_d son las constantes de velocidad, K_S es la

constante de saturación del sustrato, F es la constante de Faraday, R es la constante de gases ideales y T la temperatura del sistema:

$$r_1 = k_1 \frac{C_{S,j}}{C_{S,j} + K_S} [\exp[-\frac{F}{RT} \phi_{an}] + 1]^{-1} \quad (7)$$

$$r_2 = k_2 C_{X,j} \frac{C_{S,j}}{C_{S,j} + K_S} [\exp[-\frac{F}{RT} \phi_{an}] + 1]^{-1} \quad (8)$$

$$r_3 = k_d C_{X,an} \quad (9)$$

Las densidades de corriente para el bioánodo están relacionadas por el consumo de sustrato por los microorganismos electroactivos (10) y en el cátodo por la forma linealizada de la ecuación de Butler-Volmer (11), con corriente de intercambio característica para un electrodo de acero j_0 , α_j son coeficientes de transferencia de carga:

$$j_{an} = 2r_2 F \quad (10)$$

$$j_{cat} = j_0 \left(\frac{\alpha_{cat} + \alpha_{an}}{RT} \right) \phi_{cat} \quad (11)$$

El propósito del presente trabajo es encontrar las condiciones de operación óptimas para el diseño de celda propuesto, maximizando la siguiente función objetivo (12), donde η_{H_2} es la eficiencia eléctrica del sistema evaluada como la potencia teórica entregada por el H_2 : el flujo molar producido en el cátodo \dot{n}_{H_2} (en mol/s) por la entalpía molar de combustión ΔH_{H_2} (J/mol) dividida por la potencia eléctrica aportada con I_{MEC} como la corriente de celda (en A). La restricción (13) prueba los tiempos de residencia de 6 h a 48 h; (14) los intervalos comunes de DQO en agua residual y (15) el intervalo del voltaje teórico necesario para oxidar el sustrato hasta el voltaje donde se produce la electrólisis del agua:

$$\max \eta_{H_2} = \frac{\dot{n}_{H_2} \Delta H_{H_2}}{I_{MEC} V_{app}} \quad (12)$$

s. a.

$$\begin{aligned} & \text{Ecuaciones (1) – (11)} \\ & 7 \times 10^{-4} < v_0 < 7 \times 10^{-3} \left(\frac{m}{s} \right) \quad (13) \end{aligned}$$

$$3 < C_{S,0} < 21 \left(\frac{mol}{m^3} \right) \quad (14)$$

$$0.33 < V_{app} < 1.3 \text{ (V)} \quad (15)$$

El modelo se implementó con los módulos de Ingeniería de Reacciones Químicas, Flujo laminar, Transporte de especies diluidas y Distribución de corriente secundaria en COMSOL. La simulación del caso base toma la información de los experimentos realizados por Heidrich en 2013 en este diseño de reactor, en una operación con agua residual municipal a temperatura ambiente y tiempo de residencia de un día (Tabla 1)

Análisis de sensibilidad

Se realiza el análisis de sensibilidad global por el método de Sobol para cuantificar la influencia de las variables de diseño sobre \dot{n}_{H_2} y η_{H_2} . Este se realiza generando un modelo subrogado generado en el módulo de Cuantificación de Incertidumbre de COMSOL Multiphysics 6.0 utilizando un Proceso Gaussiano evaluado con 10,000 simulaciones

Monte Carlo con una tolerancia relativa de 0.05. En la Tabla 1 se muestran las variables de diseño evaluadas en el análisis de sensibilidad, evaluando los intervalos en (13) – (15).

Optimización

La solución del problema de optimización es implementada con la función objetivo (12) y restricciones (13)-(15) mediante el algoritmo BOBYQA disponible en COMSOL para la solución de problemas de optimización independiente de gradientes, considerando discontinuidad en las ecuaciones de distribución de corriente, con restricciones de acotamiento. El algoritmo se ejecuta con una tolerancia de 0.5, evaluando el modelo hasta en 200 iteraciones.

RESULTADOS

El modelo se ejecuta por un estudio en estado estacionario. Los resultados de la simulación del caso base se muestran en la Tabla 1. Los resultados de la eficiencia de remoción de contaminante orgánico son similares a los del estudio experimental, mas la eficiencia eléctrica está subestimada, contra el 70% reportado. Los índices de Sobol obtenidos del análisis de sensibilidad se encuentran en la Tabla 2. Se evidencia el efecto predominante de la velocidad de alimentación de fluido sobre la producción de hidrógeno y la eficiencia eléctrica. Se generaron gráficos de superficie de respuesta para ambas cantidades a través del modelo subrogado por el proceso Gaussiano (Figura 2), el experimento numérico arroja un voltaje óptimo de 0.97 V que sirve como estimación inicial para el estudio de optimización, se pueden ubicar visualmente las regiones donde se encuentran máximos.

Tabla 1. Valores de las variables de diseño y de respuesta en la simulación del caso base y óptimo

Caso	Variable de diseño			Variable de respuesta			
	v_0 (m/s)	$C_{S,0}$ (mol/m ³)	V_{app} (V)	n_{H2} (mol/s)	η_{H2} (%)	$C_{S,out}$ (mol/m ³)	η_{DGO} (%)
Base	1.44×10^{-3}	13	1.1	8.77×10^{-9}	25	5.31	60
Óptimo	3.32×10^{-3}	16.51	0.96	2.51×10^{-7}	267	11.61	30

A partir de la información provista por el análisis de sensibilidad se extrajeron los valores para las estimaciones iniciales de los valores óptimos alimentados al algoritmo BOBYQA. Esta prueba tuvo convergencia tras 38 evaluaciones del modelo en un tiempo de 552 min. La optimización mono-objetivo maximiza la eficiencia eléctrica de la celda, y los resultados de la simulación con los valores óptimos de las variables de diseño encuentran una considerable mejora en la producción de hidrógeno y en la eficiencia eléctrica de la celda. La eficiencia de remoción de materia orgánica se ve disminuida al maximizar la eficiencia eléctrica.

Tabla 2. Índices de Sobol de primer orden y totales para las variables de diseño.

Índices de Sobol				
Entrada	Primer orden, \dot{n}_{H2}	Total, \dot{n}_{H2}	Primer orden, η_{H2}	Total, η_{H2}

v_0	0.371518	0.89387	0.788685	0.928696
$C_{S,0}$	0.028957	0.545629	0.008238	0.035403
V_{app}	6.90E-04	0.002918	0.016713	0.153503

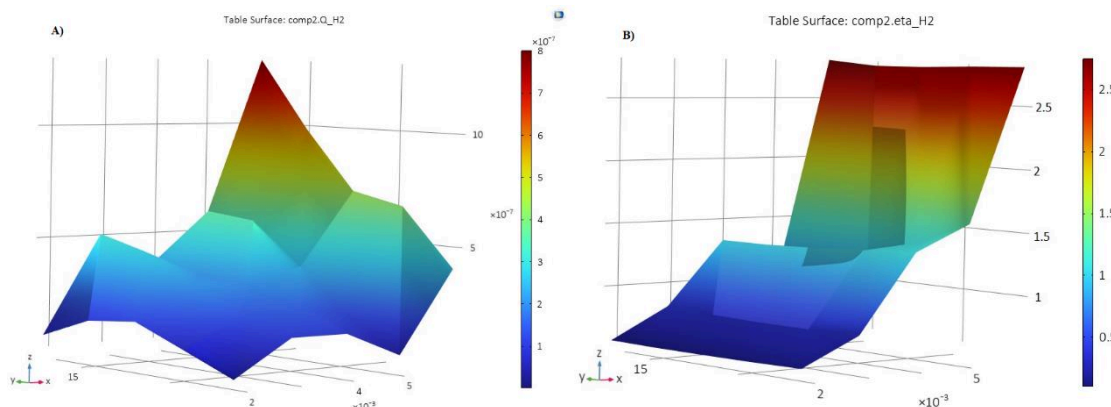


Figura 2. Gráficos de superficie de respuesta de las cantidades de interés a 0.97 V: A) Producción de hidrógeno. B) Eficiencia eléctrica de la celda.

CONCLUSIONES

El modelo de simulación multifísica describe adecuadamente el funcionamiento de la celda con el diseño propuesto. El análisis de sensibilidad identifica la velocidad de entrada de fluido como la variable de diseño de mayor influencia en la operación, mientras que la concentración inicial de sustrato tiene el segundo lugar en influencia para la producción de hidrógeno y el voltaje aplicado lo tiene en la eficiencia eléctrica. La solución del problema de optimización con la función objetivo evaluada encuentra valores óptimos aumentando la velocidad de entrada de fluido, disminuyendo el voltaje aplicado y aumentando levemente la concentración de sustrato en la alimentación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abu-Reesh, I. M. (2020). Single-and multi-objective optimization of a dual-chamber microbial fuel cell operating in continuous-flow mode at steady state. *Processes*, 8(7).
- Casula, E., Molognoni, D., Borràs, E., & Mascia, M. (2021a). 3D modelling of bioelectrochemical systems with brush anodes under fed-batch and flow conditions. *Journal of Power Sources*, 487.
- Gil-Carrera, L., Escapa, A., Carracedo, B. (2013). Performance of a semi-pilot tubular microbial electrolysis cell under several hydraulic retention times and applied voltages. *Bioresource Technology*, 146, 63–69.
- Heidrich, E. S., Jones, C. (2013). Production of hydrogen from domestic wastewater in a pilot-scale microbial electrolysis cell. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 97(15), 6979–6989.
- Hernández-García, K. M., Cercado, B., Rodríguez, F. A., Rivera, F. F., & Rivero, E. P. (2020a). Modeling 3D current and potential distribution in a microbial electrolysis cell with augmented anode surface and non-ideal flow pattern. *Biochemical Engineering Journal*, 162.
- Pinto, R. P., Tartakovsky, B., & Srinivasan, B. (2012). Optimizing energy productivity of microbial electrochemical cells. *Journal of Process Control*, 22(6), 1079–1086.
- Rousseau, R., Basséguy, R., & Bergel, A. (2020). Microbial electrolysis cell (MEC): Strengths, weaknesses and research needs from electrochemical engineering standpoint. En *Applied Energy*.

Soft-clustering para la gestión de conflictos con relación al Nexo Agua-Energía-Carbono y la Seguridad Energética

Luis Alberto Díaz-Trujillo^{a*}, Mauricio González Avilés^a, Luis Fabián Fuentes-Cortés^b

^a *Dirección Académica, Maestría en Ingeniería para la Sustentabilidad Energética, Universidad Intercultural Indígena de Michoacán, Domicilio conocido, Pátzcuaro, Michoacán, 61614, México.*

^b *Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México – Instituto Tecnológico de Celaya, Domicilio conocido, Celaya, Guanajuato, 38010, México.*

**albert11dt@gmail.com*

RESUMEN Este trabajo implementa un entorno de toma de decisiones multicriterio que toma en cuenta las prioridades sobre los objetivos económicos, ambientales y de seguridad energética para obtener una solución de compromiso que minimice la insatisfacción entre los tomadores de decisión para la gestión de una cadena de suministro energética.

PALABRAS CLAVE: Optimización multiobjetivo, Cadena de suministro energética, Energía renovable

1. INTRODUCCIÓN

Los tomadores de decisiones pueden tener conflictos de interés al implementar una cadena de suministro de energía. Por lo tanto, la resolución de conflictos entre las partes interesadas puede resultar en la implementación de nuevos proyectos, pero si no pueden llegar a un acuerdo, existe el riesgo de que las metas y objetivos no se cumplan y el proyecto se derrumbe. El desarrollo de estrategias que involucran a estos decisores es variado. Por ejemplo, se han desarrollado estructuras para minimizar la insatisfacción de las partes interesadas con el objetivo de encontrar políticas operativas óptimas en el rendimiento de los sistemas combinados de calor y energía (CHP) para satisfacer las necesidades de electricidad y agua caliente [1]. También se ha analizado la influencia de los grupos de interés en el diseño de sistemas de energía de generación distribuida en comunidades de bajos ingresos y cómo pueden crear alianzas que equilibren sus intereses [2]. En la operación general de las cadenas de suministro, se han implementado técnicas en entornos de múltiples partes interesadas y múltiples criterios utilizando una implementación de función de calidad de proceso de jerarquía analítica combinada y un enfoque de algoritmo de optimización con restricciones de probabilidad para optimizar la selección integrada de proveedores y la asignación de pedidos [3]. Los métodos de transformación difusa también se han utilizado para optimizar la asignación de carga de agua y desechos, considerando la participación de múltiples partes interesadas [4]. Sin embargo, el conflicto de las partes interesadas no se ha abordado desde la perspectiva de gestionar una cadena de suministro de energía de manera integrada, es decir, teniendo en cuenta múltiples criterios, múltiples sistemas de energía y múltiples tecnologías.

Una forma de evaluar la seguridad y la diversificación energéticas es utilizar el índice de Shannon-Wiener. La aplicación original de este índice era medir la biodiversidad específica de un ecosistema; sin embargo, recientemente ha proporcionado una solución para medir la diversificación de los sistemas energéticos para satisfacer las demandas [5] y reducir la incertidumbre en la planificación de la combinación energética óptima.

2. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

Dentro del concepto de la cadena de suministro (ver Figura 1), este trabajo pretende la interacción de los recursos disponibles entre distintas localidades, así como la interacción de la energía generada por cada una de ellas, es decir, una localidad puede satisfacer su demanda energética (W) con su propia disponibilidad de recursos (F) o bien, a alguna otra localidad. Los sistemas energéticos a analizar serán la red eléctrica, fotovoltaico, biogás y biomasa. La estrategia para resolver esta problemática es generar un modelo de optimización multiobjetivo, el cual se utilizará para determinar la localidad óptima para la instalación de las tecnologías de cada sistema energético, su dimensionamiento y tipo de tecnología a utilizar, todo esto dentro de un horizonte de tiempo. Por lo tanto, este trabajo desarrolla un entorno de toma de decisiones de criterios múltiples para la resolución de conflictos de las partes interesadas que evalúa el nexo carbono-energía- agua y la seguridad energética.

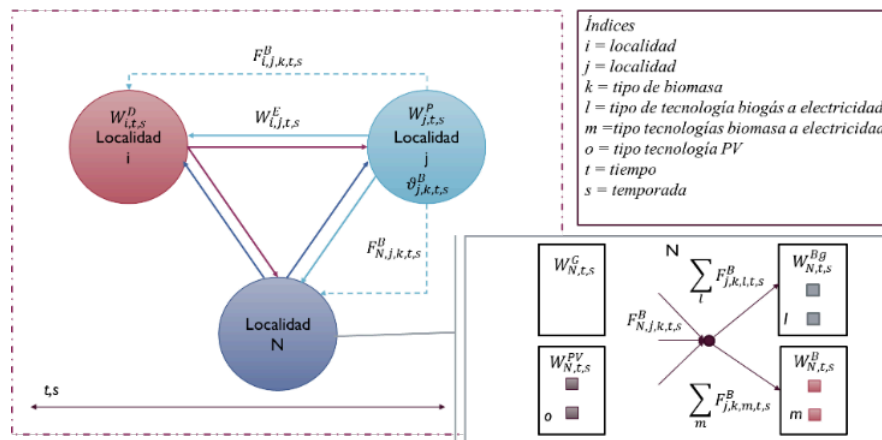


FIGURA 1. Superestructura para modelar una cadena de suministro energética.

3. FORMULACIÓN DEL MODELO

El objetivo es encontrar la configuración óptima de la cadena de suministro de energía, basada en la implantación de diversos sistemas de energías renovables, que logre un compromiso óptimo entre el coste total anual (TAC), el consumo de agua (TAWC), las emisiones de gases de efecto invernadero (TAE) y la seguridad energética (SWI). Así pues, el problema de optimización es un problema de optimización multiobjetivo. La ecuación (1) muestra la forma del problema de optimización.

$$\min\{TAC^{total}, TAE^{total}, TAWC^{total}\} \quad \max\{SWI^{total}\} \quad (1)$$

Para calcular una solución que a la vez minimice los objetivos a minimizar y maximice el objetivo a maximizar, es necesario que los objetivos tengan un tamaño tal que puedan

maximizarse o minimizarse conjuntamente. La reformulación del problema se presenta en las ecuaciones (2) a (5).

$$\phi^{TAC} = \frac{TAC^{total} - TAC^{LB}}{TAC^{UB} - TAC^{LB}} \quad (2)$$

$$\phi^{TAE} = \frac{TAE^{total} - TAE^{LB}}{TAE^{UB} - TAE^{LB}} \quad (3)$$

$$\phi^{TAWC} = \frac{TAWC^{total} - TAWC^{LB}}{TAWC^{UB} - TAWC^{LB}} \quad (4)$$

$$\phi^{SWI} = \frac{SWI^{UB} - SWI^{total}}{SWI^{UB} - SWI^{LB}} \quad (5)$$

Por lo general, cuando se ponen en marcha nuevos proyectos, especialmente en la cadena de suministro de energía, la evaluación de los mismos depende de múltiples responsables de la toma de decisiones. Para abordar este problema, se utilizó un marco de toma de decisiones, que equilibra la insatisfacción de las diferentes partes interesadas. La ecuación (6) aborda esta conceptualización.

$$\phi_s = w_s^{TAC} \cdot \phi^{TAC} + w_s^{TAE} \cdot \phi^{TAE} + w_s^{TAWC} \cdot \phi^{TAWC} + w_s^{SWI} \cdot \phi^{SWI} \quad \forall s \in S \quad (6)$$

Donde w son las ponderaciones dadas por las partes interesadas s basadas en las preferencias sobre los objetivos del diseño. La configuración óptima de la cadena de suministro energético que satisface la demanda requerida teniendo en cuenta las prioridades de cada una de las partes interesadas se obtiene resolviendo la ecuación (7) y (8).

$$\min \phi_s \quad \forall s \in S \quad (7)$$

$$CS = \min \sum |\phi^{CS} - \phi_s|^2_s \quad (8)$$

Las funciones de minimización están sujetas a balances de materia y energía correspondientes al uso de sistemas de energía fotovoltaica y de biomasa.

4. ESTUDIO DE CASO

Para demostrar la aplicabilidad del modelo propuesto, se seleccionaron 10 localidades de la Región del Lago de Pátzcuaro. Esta región se encuentra en la parte centro-norte del estado de Michoacán en México. Cabe mencionar que la región está compuesta por muchas comunidades indígenas pertenecientes a la cultura Purépecha. La principal

actividad económica de esta región es el turismo, por lo que se dedican a la fabricación de artesanías en madera, muebles, así como a la confección de prendas de vestir, herrería artística y otras actividades. Una de las principales razones para evaluar el modelo de cadena de suministro de energía es que, debido a las actividades de artesanía en madera y fabricación de muebles, se generan desechos de madera, lo que contribuye a la contaminación del medio ambiente, además es una región que se caracteriza por la disponibilidad de diversos recursos de biomasa que pueden ser utilizados y explotados para satisfacer sus necesidades energéticas.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Tabla 2 muestra las soluciones óptimas asociadas a cada uno de los criterios de las partes interesadas y las soluciones de compromiso óptimas. De acuerdo con las ecuaciones (2) - (5), el valor de utopía de cada uno de los objetivos se convierte en 0 y los puntos nadir en 1.

Los primeros cuatro escenarios presentan tomadores de decisiones que sólo se preocupan por el costo total anual, las emisiones totales anuales, el consumo total de agua o la seguridad energética. En otras palabras, sólo dan prioridad a una función objetivo. Estos cuatro escenarios convergen hacia soluciones utópicas para los objetivos prioritarios; sin embargo, los demás objetivos se alejan de sus puntos utópicos. De las partes interesadas mencionadas, el escenario 1 podría interesar a las localidades y al gobierno de la región de los lagos. El escenario 2 y el escenario 3 podrían ser de interés para la SEMARNAT, mientras que el escenario 4 podría ser de interés para la CFE.

Los escenarios 6 a 10 presentan prioridades en sólo dos funciones objetivo. El escenario 6 prioriza el coste total anual y las emisiones de GEI, el TAC está a sólo un 6,42% de la solución utópica, mientras que el TAE está a un 18,77%, aunque el TAWC no está priorizado, esta combinación está aceptablemente cerca del valor utópico mientras que el SWI está a un 20,13%. La tendencia general en este grupo de soluciones es que los objetivos priorizados tienden a acercarse a la solución utópica. Sin embargo, la solución del escenario 8 presenta algo interesante. El escenario 8 prioriza TAWC y SWI pero no prioriza TAC. Sin embargo, la distancia es mucho menor (37,38%) en comparación con los escenarios 7 y 9 que no priorizan el TAC (100% de distancia del punto de utopía). Esto se debe a que priorizar TAWC y SWI permite tomar menos demanda eléctrica del sistema de red convencional porque es el sistema que consume más agua para su generación, y a su vez es el sistema más costoso a largo plazo.

TABLA 2. Soluciones de cada parte interesada y solución de compromiso utilizando valores normalizados (ϕ).

	w_s^{TAC}	w_s^{TAE}	w_s^{TAWC}	w_s^{SWI}	Φ_s	TAC^{total}	TAE^{total}	$TAWC^{total}$	SWI^{total}
Utopia						0	0	0	0
Nadir						1	1	1	1
S									
1	1	0	0	0	0	0	0.3457	0.2468	0.1839

2	0	1	0	0	0	0.4205	0	0.3209	0.1985
3	0	0	1	0	0	0.2438	0.0942	0	0.1536
4	0	0	0	1	0	0.7939	0.4694	0.4455	0
5	0.25	0.25	0.25	0.25	0.07344509	0.1988	0.0927	0.0023	0
6	0.5	0.5	0	0	0.12595839	0.0642	0.1877	0.0973	0.2013
7	0	0.5	0.5	0	0.04445029	1.0000	0.0889	0	0.3442
8	0	0	0.5	0.5	0.00028949	0.3738	0.0940	0	0.0006
9	0	0.5	0	0.5	0	1.0000	0	0.3209	0
10	0.5	0	0	0.5	0.00005328	0.0001	0.3457	0.2468	0.0000
11	0.33	0.33	0.33	0	0.09557002	0.1991	0.0905	0	0.2395
12	0	0.33	0.33	0.33	0.02957947	1.0000	0.0890	0	0.0006
13	0.33	0	0.33	0.33	0.05338710	0.0644	0.1877	0.0973	0
14	0.33	0.33	0	0.33	0.08366351	0.0496	0.2039	0.1136	0
15	0.4	0.2	0.2	0.2	0.08278474	0.0645	0.1877	0.0973	0
16	0.2	0.4	0.2	0.2	0.07690229	0.2026	0.0905	0	0.0009
17	0.2	0.2	0.4	0.2	0.05883230	0.2026	0.0905	0	0.0010
18	0.2	0.2	0.2	0.4	0.05893944	0.2029	0.0905	0	0.0007
CS						0.1988	0.0926	0.0022	0

La solución CS es la solución de compromiso que minimiza la insatisfacción. Para nuestro caso de estudio, se consideraron todos los escenarios propuestos. La solución de compromiso presenta los menores valores de alejamiento de los puntos de utopía (considerando los cuatro objetivos estudiados) con valores de 19,88, 9,26, 0,22 y 0,00 % para TAC, TAE, TAWC y SWI, respectivamente. La solución de compromiso es prácticamente igual a cuando una de las partes interesadas prioriza con igual magnitud las funciones objetivo. Esto significa que, para que la insatisfacción sea menor, las prioridades de los objetivos deben ser iguales.

En la figura 2 que representa la distribución de energía para CS, sólo se presenta la solución para las comunidades de Tzintzuntzan y Puácuaro.

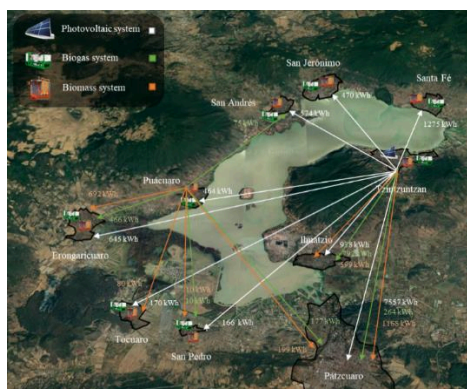


FIGURA 2. Región lacustre de Pátzcuaro. 6. CONCLUSION

La formulación del modelo propuesto puede emplearse para evaluar distintos casos prácticos, es decir, puede utilizarse como herramienta de toma de decisiones. Para el caso de estudio analizado, los resultados demostraron que, aplicando una estrategia de optimización multiobjetivo unida a la resolución de conflictos sobre las prioridades de las partes interesadas, se puede obtener una solución de compromiso que minimice la insatisfacción entre las partes interesadas reduciendo al mínimo los costes, las emisiones de GEI, el consumo de agua y maximizando la seguridad energética.

AGRADECIMIENTOS

Esta investigación fue apoyada por el Departamento de Ingeniería Química del Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Celaya, el programa de posgrado de la Universidad Intercultural Indígena de Michoacán y el Consejo Nacional de Humanidades Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT - México) a través del programa Estancias posdoctorales por México.

REFERENCIAS

- [1] L. F. Fuentes-Cortés, J. M. Ponce-Ortega, and V. M. Zavala, “Balancing stakeholder priorities in the operation of combined heat and power systems,” *Appl Therm Eng*, vol. 128, pp. 480–488, 2018, doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.09.052>.
- [2] J. García-Martínez, J. L. Reyes-Patiño, L. B. López-Sosa, and L. F. Fuentes-Cortés, “Anticipating alliances of stakeholders in the optimal design of community energy systems,” *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, vol. 54, p. 102880, 2022, doi: <https://doi.org/10.1016/j.seta.2022.102880>.
- [3] J. Scott, W. Ho, P. K. Dey, and S. Talluri, “A decision support system for supplier selection and order allocation in stochastic, multi-stakeholder and multi-criteria environments,” *Int J Prod Econ*, vol. 166, pp. 226–237, 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijpe.2014.11.008>.
- [4] M. Ghorbani Mooselu, M. R. Nikoo, and M. Sadegh, “A fuzzy multi-stakeholder socio-optimal model for water and waste load allocation,” *Environ Monit Assess*, vol. 191, no. 6, p. 359, 2019, doi: [10.1007/s10661-019-7504-2](https://doi.org/10.1007/s10661-019-7504-2).
- [5] A. Ranjan and L. Hughes, “Energy security and the diversity of energy flows in an energy system,” *Energy*, vol. 73, pp. 137–144, 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.05.108>.

Interfaz basada en GAMS - MIRO para la optimización de parámetros de interacción binaria

José Alfredo Paredes-Ortiz ^a, Úrsula Fabiola Rodríguez-Zúñiga ^b, Fernando Israel Gómez-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, Guanajuato, Guanajuato, México, 36050

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

**fgomez@ugto.mx*

RESUMEN

La presente investigación se centró en el desarrollo de una interfaz basada en GAMS (General Algebraic Modeling System) para la optimización de parámetros de interacción binaria, tales como los parámetros NRTL (Non-Random Two-Liquid) y UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical), utilizando algoritmos disponibles en GAMS. La interfaz propuesta permite a los usuarios utilizar una plantilla predefinida y aplicarla a conjuntos de datos experimentales para obtener los parámetros de interacción binaria deseados. Estos parámetros son de suma importancia en la modelización de sistemas de separación y mezcla en la industria química y de procesos. El enfoque propuesto proporciona una solución eficiente y automatizada para la optimización de estos parámetros, facilitando así la implementación y mejora de modelos termodinámicos en dichos sistemas. Este trabajo presenta una herramienta práctica y accesible para la obtención de parámetros de interacción binaria, con aplicaciones potenciales en el diseño y optimización de procesos químicos y de separación.

Palabras clave: GAMS-MIRO, Parámetros de interacción binaria, NRTL, UNIQUAC

INTRODUCCIÓN

Los parámetros de interacción binaria de modelos termodinámicos como NRTL y UNIQUAC son cruciales para modelar correctamente el equilibrio de fases en sistemas de mezcla y separación. Una predicción precisa de la interacción entre fases permite representar simulaciones de procesos de manera apropiada. Con frecuencia, los simuladores de procesos carecen de todos los parámetros de interacción binaria requeridos, por lo que el ajuste de datos experimentales es un paso fundamental para desarrollar modelos termodinámicos confiables. Tradicionalmente, la optimización de estos parámetros se ha realizado mediante programas comerciales como ASPEN Plus, lo que requiere licencias costosas, u optimización de funciones objetivo mediante programación, procesos que consumen mucho tiempo y esfuerzo del usuario.

El objetivo de este estudio fue crear una interfaz basada en el paquete de modelado matemático GAMS, que permita de manera automática y eficiente obtener los parámetros de interacción binaria a partir de conjuntos de datos experimentales proporcionados por el usuario. GAMS cuenta con potentes algoritmos de optimización no lineal que pueden aprovecharse para resolver los problemas de minimización involucrados en el ajuste de dichos parámetros, como BARON (Sahinidis, 1996), un algoritmo determinista de optimización no lineal que permite encontrar óptimos globales. La interfaz desarrollada proporciona una solución para determinar estos parámetros de forma automática mediante el uso de los algoritmos de optimización disponibles en GAMS, sin necesidad de programación personalizada. Esto reduce significativamente el tiempo necesario para la optimización paramétrica, haciendo el proceso más accesible y práctico. Los parámetros determinados con este enfoque mejoran la capacidad predictiva de los modelos termodinámicos utilizados en el diseño y operación de procesos de separación y mezcla. Por lo tanto, la herramienta desarrollada en este trabajo tiene potenciales aplicaciones valiosas en la industria química y de procesamiento.

METODOLOGÍA

Este estudio presenta el desarrollo de una interfaz computacional para modelar el equilibrio de fases en mezclas binarias no ideales a baja presión. Al diseñar la interfaz, se consideró su potencial aplicación en sistemas de simulación termodinámica, por lo que se incluyeron dos modelos comúnmente empleados: NRTL y UNIQUAC.

Para modelar la interacción entre las fases líquida y vapor, se utilizó la ley de Raoult modificada. El enfoque adoptado se basó en los coeficientes de actividad para representar el equilibrio de fases vapor-líquido, según la Ecuación 1. Esto involucra la fracción molar y la presión en fase vapor, y la fracción molar, el coeficiente de actividad y la presión de saturación en fase líquida, para cada componente.

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^S \quad (1)$$

Dado que el objetivo era simular sistemas a baja presión, se optó por modelos simplificados como NRTL y UNIQUAC, que solo consideran los coeficientes de actividad. Esto resultó adecuado para las condiciones del sistema, y permitió desarrollar una interfaz sencilla.

Los parámetros binarios de los modelos constan de un término independiente de la temperatura y otro dependiente, según la Ecuación 2. Para NRTL también se incluyó el parámetro alfa, el cual suele oscilar entre 0.2 y 0.47.

$$\tau_{ij} = \exp \left(a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T} \right) \quad (2)$$

La regresión de datos experimentales se realizó mediante la suma de cuadrados mínimos como función objetivo (Ecuación 3). Esto involucra el número de puntos de datos, componentes y fases reportadas.

$$F = \sum_{i=1}^{N_{VLE}} \sum_{j=1}^{N_C} (x_{e_{j,i}} - x_{t_{j,i}})^2 + \sum_{i=1}^{N_{VLE}} (T_{e_i} - T_{t_i})^2 \quad (3)$$

Para validar la interfaz, se seleccionaron como casos de estudio los sistemas binarios agua-etanol (Wang et. al, 2018) y agua-metanol (Zhang et. al, 2019). Estas mezclas representan interés industrial y operan a baja presión. La presión de saturación de los componentes se modeló usando la ecuación extendida de Antoine.

La interfaz desarrollada permite ingresar el sistema binario, seleccionar el modelo termodinámico, cargar datos experimentales de equilibrio de fases, elegir el algoritmo de optimización, y obtener los parámetros binarios óptimos que ajustan el modelo a los datos (Figura 1).

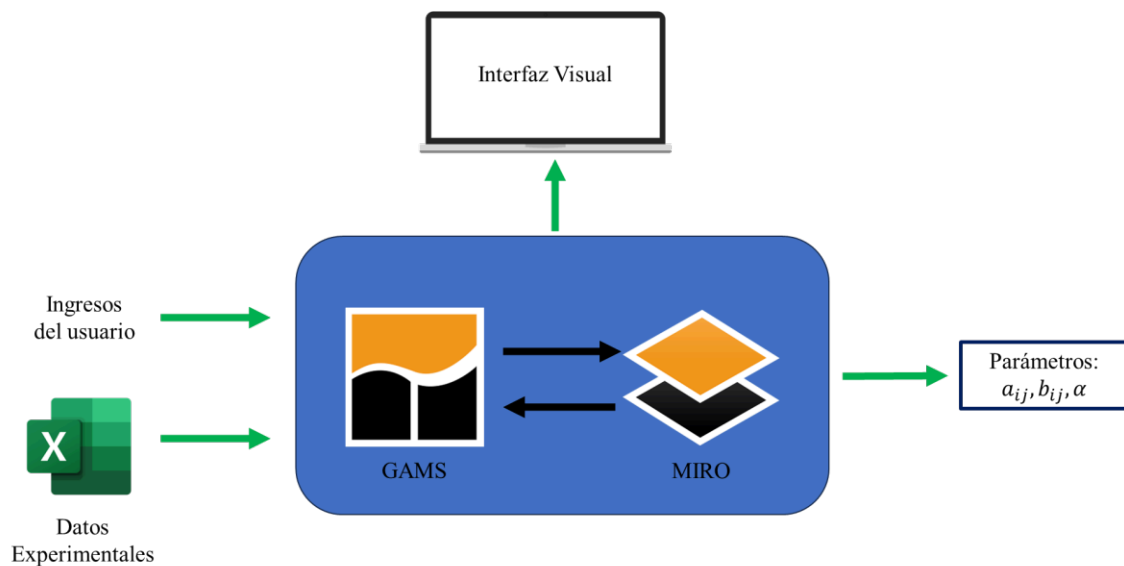


Figura 1. Modelo de interacción de la interfaz y conexión GAMS-MIRO

RESULTADOS

Los resultados muestran un buen ajuste de los modelos termodinámicos a los datos experimentales reportados. Para ambos sistemas binarios, se realizó la regresión no lineal utilizando el algoritmo predeterminado CONOPT en GAMS.

En el caso de la mezcla etanol-agua, se obtuvieron parámetros de interacción para NRTL y UNIQUAC. El modelo NRTL exhibió una mejor correlación, con un error cuadrático medio menor al 0.44%. Esto puede deberse a que considera el parámetro alfa adicional que no posee UNIQUAC.

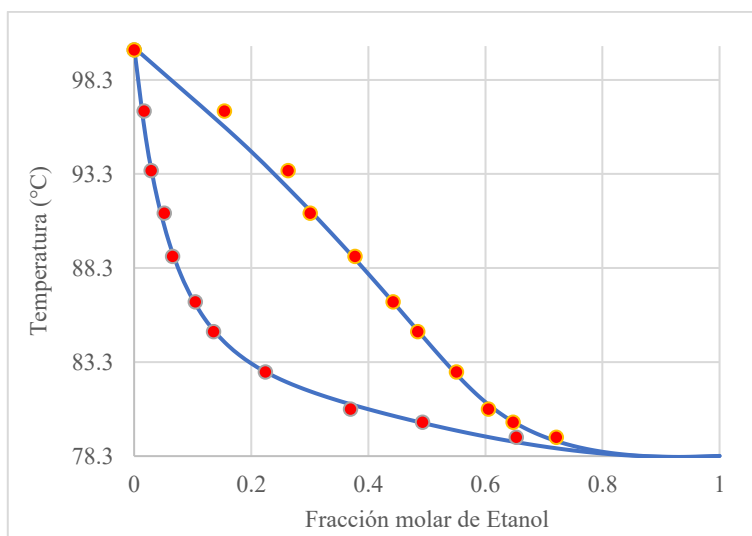


Figura 2. Equilibrio líquido vapor a 1atm etanol-agua con el modelo NRTL (azul – regresión y rojo – experimental)

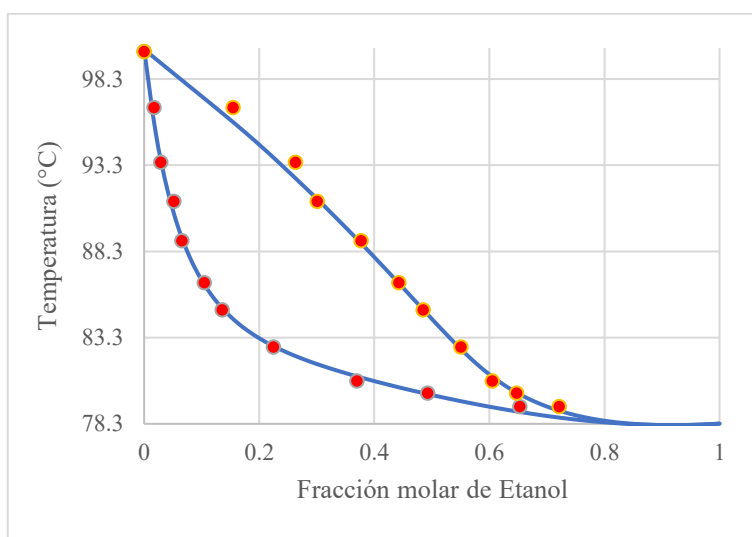


Figura 3. Equilibrio líquido vapor a 1atm etanol-agua con el modelo UNIQUAC (azul – regresión y rojo – experimental)

El sistema metanol-agua también fue modelado con ambos métodos. Aquí, ambos modelos mostraron un error cuadrático medio inferior al 0.41%, sin una diferencia notable entre ellos.

En general, los valores bajos de error cuadrático medio evidencian un ajuste adecuado de los modelos termodinámicos a la data experimental. Estos resultados validan el enfoque propuesto, indicando que la interfaz desarrollada puede ser efectiva en la simulación y modelado de equilibrios de fases en sistemas binarios no ideales. No obstante, serán necesarios más estudios con diferentes conjuntos de datos para consolidar estas

observaciones. Adicionalmente, la incorporación de más modelos termodinámicos permitiría realizar una comparativa más completa.

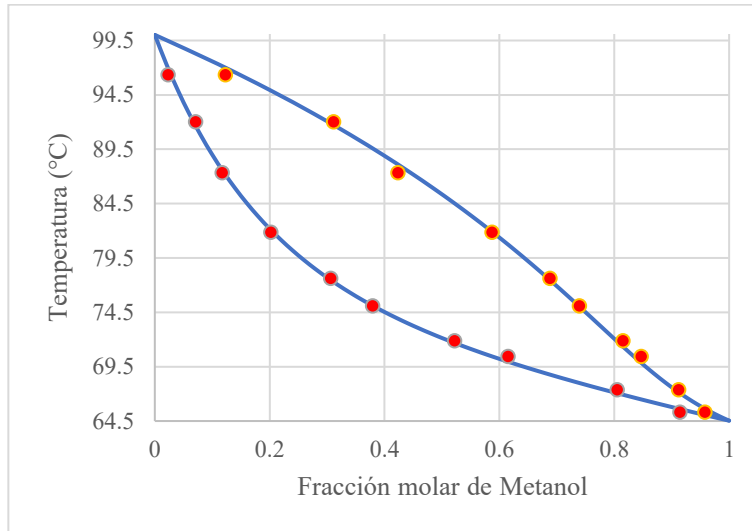


Figura 4. Equilibrio líquido vapor a 1atm metanol-agua con el modelo NRTL (azul – regresión y rojo – experimental)

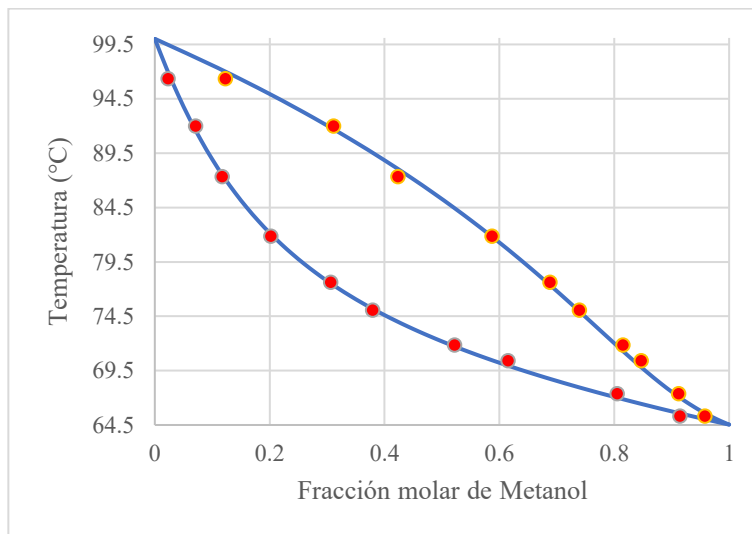


Figura 5. Equilibrio líquido vapor a 1atm metanol-agua con el modelo UNIQUAC (azul – regresión y rojo – experimental)

Tabla 1. Valores de los parámetros de los modelos NRTL y UNIQUAC para sistemas binarios de agua-metanol y agua-etanol.

			A_{ij}	A_{ji}	B_{ij}	B_{ji}	alfa
NRTL	Agua	Metanol	1.995	-3.881	-557.754	1465.391	0.247
UNIQUAC	Agua	Metanol	-1.570	5.213	656.347	-2000	-
NRTL	Etanol	Agua	-2.594	4.230	709.805	-664.690	0.2
UNIQUAC	Etanol	Agua	0.160	0.257	-50.185	-244.313	-

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó el desarrollo de una interfaz computacional aplicable al modelado termodinámico de equilibrios de fases en mezclas binarias no ideales a baja presión. La herramienta implementó dos modelos comunes, NRTL y UNIQUAC, para calcular coeficientes de actividad y representar la distribución de componentes entre fases. Los resultados demostraron que la interfaz permite determinar eficientemente los parámetros de interacción binaria que mejor ajustan dichos modelos a datos experimentales, mediante optimización determinística.

Los estudios de caso con sistemas agua-etanol y agua-metanol validaron satisfactoriamente el enfoque planteado. Ambos modelos lograron representar adecuadamente el equilibrio entre fases para dichas mezclas industriales. Además, se observó una ligera ventaja del modelo NRTL al incluir un parámetro adicional. La interfaz computacional desarrollada constituye una herramienta útil para simular equilibrios de mezclas no ideales aplicables a procesos operando a baja presión. No obstante, se requerirán más casos de estudio y el análisis de otros modelos termodinámicos para generalizar plenamente las conclusiones obtenidas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Doble, M. (2007). Perry's chemical engineers' handbook. *McGraw-Hill, New York, US*.
- Sahinidis, N. V. (1996). BARON: A general purpose global optimization software package. *Journal of global optimization*, 8, 201-205.
- Wang, Jun; Ou, Jie; Sun, Xueni; Tong, Xiangjun; Gao, Ben; Huang, Chunxiang; Shao, Hui; Leng, Yixin (2018). Experimental and Predicted Vapor-Liquid Equilibrium for Diisopropanolamine with-Cresol and 2,6-Dimethylphenol at 20.0 kPa. *Journal of Chemical & Engineering Data*.
- Zhang, Xuemei; Hao, Xin; Yang, Xiaojie; Jian, Chungui (2019). Experimental isobaric vapour-liquid equilibrium data for the binary system (N, N-dimethyl acetamide + dimethyl sulfoxide) and the quaternary system (sec-butyl acetate + sec-butyl alcohol + N, N-dimethyl acetamide + dimethyl sulfoxide) at 101.3 kPa. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 136, 132-140.

OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA APLICADA

ACADEMIA DE INGENIERÍA QUÍMICA
OPTIMIZACIÓN APLICADA
A LA INGENIERÍA QUÍMICA

AMQIA

Desarrollo de una Plataforma para la Optimización de Parámetros de Interacción Binaria para Modelo NRTL

Emilio Alba-Robles^a, Fernando I. Gómez-Castro^a, Oscar D. Lara-Montaña^{b,*}

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

^b *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Campus Amazcala, Carretera a Chichimequillas s/n km. 1, Amazcala, El Marqués, Qro., 76265, México *od.laramontano@gmail.com*

RESUMEN

El modelado termodinámico y los cálculos de equilibrio de fases son aspectos fundamentales en la formación de ingenieros químicos. En este trabajo, se desarrolló una plataforma para estimar parámetros binarios del modelo NRTL a partir de datos proporcionados por el usuario. El usuario puede elegir qué algoritmo de optimización desea utilizar. Las opciones actualmente disponibles son Evolución Diferencial y Optimizador Lobo. La calidad de las soluciones encontradas por estos algoritmos de optimización está relacionada con el tamaño de la población y el número de iteraciones. El usuario puede modificar estos parámetros para encontrar parámetros de interacción con mayor o menor calidad y visualizar gráficamente la importancia de contar con parámetros precisos.

Palabras clave: equilibrio de fases; parámetros de interacción binaria; plataforma virtual; estimación

INTRODUCCIÓN

La ingeniería química se apoya constantemente en técnicas de modelado termodinámico para llevar a cabo cálculos precisos relacionados con el equilibrio de fases. Una herramienta común en este ámbito son las ecuaciones de estado cúbicas, como Peng-Robinson, Redlich-Kwong y Soave-Redlich-Kwong, ampliamente utilizadas para describir el equilibrio líquido-vapor (ELV). Sin embargo, Tosun (2021) señala que estas ecuaciones frecuentemente encuentran dificultades al intentar representar el comportamiento que se observa en la fase líquida para mezclas no ideales.

Ante esta problemática, la industria y el ámbito académico han volteado hacia modelos de coeficientes binarios de actividad. El modelo Non-Random Two-Liquid (NRTL) ha emergido como un referente en esta área, siendo utilizado para predecir las interacciones en la fase líquida de dichas mezclas. Un elemento crucial para el correcto funcionamiento de este modelo es la determinación precisa de los parámetros de interacción binaria. Estos se obtienen principalmente ajustando datos experimentales, como las fracciones de vapor y líquido en el equilibrio de fases. En esta labor, el empleo de un procedimiento de optimización es esencial, siendo su objetivo principal minimizar la diferencia entre los valores experimentales y aquellos que el modelo calcula (Tosun, 2021).

Dentro del campo de la optimización, los algoritmos metaheurísticos han surgido como herramientas potentes. La no linealidad inherente de las ecuaciones de los modelos de coeficiente de actividad ha llevado a diversos investigadores a considerar estas técnicas para determinar parámetros binarios. Khansary y Sani (2014), por ejemplo, aplicaron técnicas como la optimización por enjambre de partículas (PSO) y algoritmos genéticos (GAs) en sistemas cuaternarios. Sus hallazgos indicaron la superioridad del PSO sobre los GAs y resaltaron la eficacia de los modelos NRTL y UNIQUAC en predecir el equilibrio líquido-líquido (LLE). De igual manera, Vakili-Nezhaad et al. (2013) y Jaime-Leal et al. (2015) emplearon técnicas metaheurísticas para determinar parámetros binarios en el modelo NRTL, obteniendo resultados prometedores.

Dada la importancia de este modelado y su relevancia en la formación de ingenieros químicos, hemos desarrollado una plataforma en Python que permite calcular de manera intuitiva los parámetros de interacción binaria para el modelo NRTL. Esta herramienta, diseñada tanto para estudiantes como para docentes, es compatible con los tres principales sistemas operativos (Windows, macOS y Linux). Además de su diseño educativo, ofrece flexibilidad al usuario, permitiendo seleccionar entre tres algoritmos metaheurísticos de renombre en el campo de la ingeniería: evolución diferencial (DE), optimizador lobo gris (GWO) y algoritmo Jaya (JA). La plataforma también da la opción de elegir entre dos diferentes funciones objetivo, brindando así una herramienta integral en el ámbito de la optimización de parámetros termodinámicos.

METODOLOGÍA

La plataforma fue diseñada utilizando Python, con el apoyo de la biblioteca PyQt5 para gestionar la interfaz del usuario. Se emplearon bibliotecas adicionales como numpy, Pandas y openpyxl para administrar información y realizar cálculos específicos, especialmente cuando se trabaja con datos de Excel. Esta configuración permitió que la determinación de los parámetros de interacción binaria se integrara como una rutina clave dentro de la plataforma.

Para calcular la composición de la muestra a diferentes temperaturas y presiones, se hizo uso de la ley de Raoult modificada. La dependencia con la temperatura se manifiesta en términos de presión de saturación y el coeficiente de actividad. La ecuación de Antoine, mostrada en la expresión (1), fue empleada para determinar la presión de saturación por Yaws (2007).

$$\log_{10} P = A - \frac{B}{T + C} \quad (1)$$

donde P es la presión de saturación en mmHg, T es la temperatura en °C y A , B y C son constantes específicas para cada compuesto.

El coeficiente de actividad, que indica la desviación del comportamiento ideal de una mezcla, se calcula utilizando las expresiones (2-4)

$$\frac{GE}{RT} = \frac{x_1 x_2}{(x_1 + x_2 G_{21})(x_2 + x_1 G_{12})} \quad (2)$$

$$\ln(\gamma_1) = x_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{G_{12} \tau_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (3)$$

$$\ln(\gamma_2) = x_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_1 + x_2 G_{12}} \right)^2 + \frac{G_{21} \tau_{21}}{(x_2 + x_1 G_{21})^2} \right] \quad (4)$$

Donde G_{12} y G_{21} se definen por las ecuaciones (5) y (6), respectivamente.

$$G_{12} = \exp(-\alpha \tau_{12}) \quad (5)$$

$$G_{21} = \exp(-\alpha \tau_{21}) \quad (6)$$

Los valores de τ_{12} y τ_{21} se determinan empleando las ecuaciones (7) y (8).

$$\tau_{12} = \frac{g_{12} - g_{22}}{RT} \quad (7)$$

$$\tau_{21} = \frac{g_{21} - g_{11}}{RT} \quad (8)$$

Para el objetivo de este trabajo, se adoptó uno de los modelos propuestos por Silverman y Tassios (1984). La ecuación (9) empleada es similar al error cuadrado medio pero sin normalizar por el número de datos experimentales.

$$F = \sum_{i=1}^N [y_{1,\text{exp}} - y_{1,\text{calc}}]^2 + [y_{2,\text{exp}} - y_{2,\text{calc}}]^2_i \quad (9)$$

Se integraron tres algoritmos metaheurísticos basados en poblaciones en la plataforma para la optimización. La variante del algoritmo de evolución diferencial empleada fue la DE/rand/1. En cuanto al algoritmo Optimizador del Lobo Gris, se empleó la versión original publicada por Mirjalili y col. (2014).

Los parámetros de interacción binaria y el parámetro τ_{12} y τ_{21} , así como el parámetro α son las variables de decisión que se emplean para encontrar el mejor ajuste del modelo NRTL a los datos experimentales. De condujeron 50 experimentos con cada optimizador para obtener información estadística como el promedio, la mediana y la desviación estándar. Las mezclas empleadas fueron ácido acético - N-metil-2-pirolidona (nmp) y ácido fluorhídrico – agua.

RESULTADOS

En la Tabla 1 y 2 se detallan los hallazgos respecto a las variables estadísticas derivados de los 50 experimentos realizados para cada tipo de mezcla. Es posible identificar que las desviaciones de los datos experimentales con los valores predichos por el modelo son menores para la mezcla ácido acético – nmp. Para ambas mezclas, el algoritmo que logró una menor diferencia entre los valores calculados y los experimentales, es decir, mejores valores en la función objetivo, fue la ED. Frente al OLG, la ED exhibe una desviación estándar considerablemente reducida, siendo de 0.00094 para la primera mezcla, en contraste con la generada por el OLG que es de 0.18206. Para la segunda mezcla, la tendencia se mantiene. En este caso, las soluciones derivadas de la ED presentan una desviación estándar de 0.01546, mientras que para el OLG es de 0.02732.

Tabla 1. Resultados estadísticos para el sistema ácido acético – nmp.

	Desviación estándar	Mediana	Promedio
ED	0.00094	0.01706	0.01733
OLG	0.18206	0.01722	0.08425

Tabla 2. Resultados estadísticos para el sistema HF-H2O

	Desviación estándar	Mediana	Promedio
ED	0.01546	0.03441	0.04082
OLG	0.02731	0.03448	0.05396

Las Figuras 1 y 2 muestran el comportamiento de la función objetivo a lo largo del proceso iterativo para ambos casos de estudio. Se observa que la convergencia del algoritmo OLG es más mucho más rápida que la de la ED en el primer caso de estudio, bastando seis iteraciones para converger. En el segundo caso de estudio ambos optimizadores presentan una tasa de convergencia similar, requieren cerca de 40 iteraciones para la convergencia total.

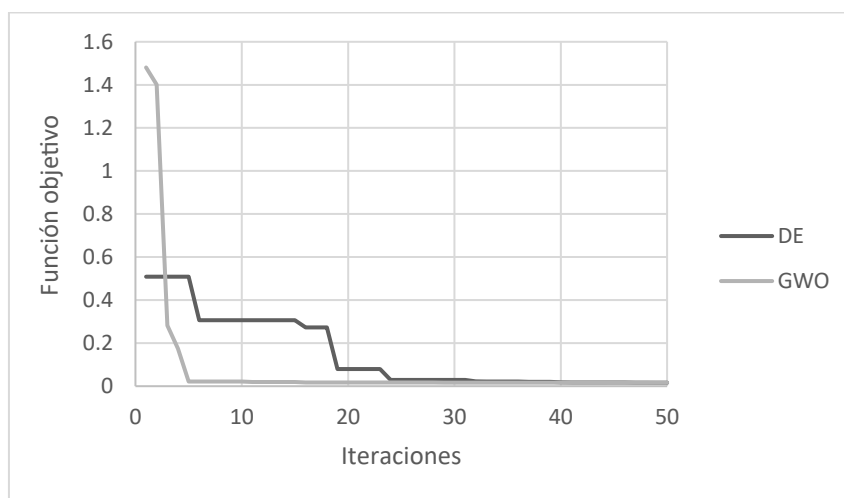


Figura 1. Comportamiento del valor de la función objetivo en a lo largo de las iteraciones, sistema ácido acético - nmp.

Los resultados para los parámetros de la ecuación NRTL encontrados como parte de la mejor solución se muestran en la Tabla 3 y 4, para cada uno de los sistemas estudiados. Es necesario indicar que, aunque los mejores valores estadísticos fueron generados por la ED, la mejor solución considerando todos los experimentos fue producida por el OLG.

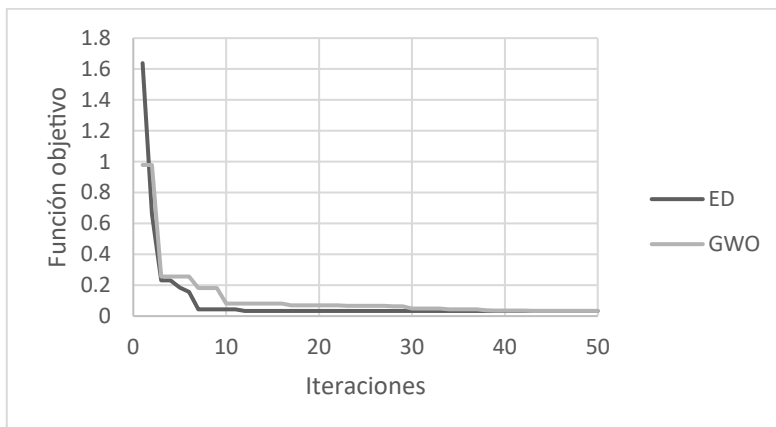


Figura 2. Comportamiento del valor de la función objetivo en a lo largo de las iteraciones, sistema ácido fluorhídrico - agua.

Tabla 3. Parámetros de la ecuación NRTL para el sistema ácido acético – nmp.

	Mínimo	α	g12-g22	g21-g11
ED	0.01625	0.18828	7230.28	-12439.22
GWO	0.01625	0.20219	5948.53	-11700.26

Tabla 4. Parámetros de la ecuación NRTL para el sistema HF – H₂O.

	Mínimo	α	g12-g22	g21-g11
ED	0.03339	0.1	3045.22	-17080.4721
GWO	0.03338	0.1	3012.02	-17061.7023

CONCLUSIONES

A partir de la investigación llevada a cabo se han obtenido hallazgos significativos que reflejan la eficacia de los algoritmos estudiados. De estas pruebas, es evidente que para la mezcla ácido acético – nmp, las discrepancias fueron mínimas. El algoritmo ED demostró ser superior en términos de precisión, presentando desviaciones estándar más bajas que el OLG para ambas mezclas. No obstante, es importante destacar que se identifica una notable rapidez en la tasa de convergencia del OLG, especialmente en el primer caso de estudio, donde sólo necesitó seis iteraciones para alcanzar la convergencia. En el segundo escenario, ambos algoritmos mostraron comportamientos convergentes similares, demandando cerca de 40 iteraciones para lograr una convergencia completa.

Si bien la ED sobresale en términos de indicadores estadísticos, es esencial recalcar, como se muestra en las Tablas 3 y 4, que la mejor solución global, teniendo en cuenta todos los experimentos realizados, fue alcanzada por el OLG. Esto sugiere que, aunque la precisión estadística es un indicador vital, otros factores, como la velocidad de convergencia y la capacidad de encontrar soluciones globales, también son cruciales al seleccionar el

III Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Octubre 4-6, 2023. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2023, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

algoritmo adecuado para modelar sistemas complejos como las mezclas químicas estudiadas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Tosun, I. (2021). *The Thermodynamics of Phase and Reaction Equilibria*, Elsevier Science Publishing.

Yang, X.-S. (2018). *Mathematical Analysis of Nature-Inspired Algorithms*. En X.-S. Yang (Ed.), *Nature-Inspired Algorithms and Applied Optimization* (pp. 1–26). Springer.

Yaws, C. L. (2007). *The Yaws Handbook of Vapor Pressure: Antoine Coefficients*. <http://cds.cern.ch/record/2317667>

Seader, J. D., Henley, E. J. y Roper, D. K. (2016). *Separation Process Principles With Applications Using Process Simulators*. Wiley.

Jaime-Leal, J.E., Bonilla-Petriciolet, A., Bhargava V., Fateen S.E.K. (2015). Nonlinear parameter estimation of e-NRTL model for quaternary ammonium ionic liquids using Cuckoo Search. *Chemical Engineering Research and Design*, 93, 464–472.

Khansary, M.A. y Sani, A.H. (2014). Using genetic algorithm (GA) and particle swarm optimization (PSO) methods for determination of interaction parameters in multicomponent systems of liquid–liquid equilibria. *Fluid Phase Equilibria*, 365, 141–145.

Mirjalili, S., Mirjalili, S.M., Lewis, A. (2014). Grey Wolf Optimizer, *Advances in Engineering Software*, 69, 46–61.

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

Storn R. (1996). On the usage of differential evolution for function optimization, *Proceedings of North American Fuzzy Information Processing*, 519–523.

Tosun, I. (2021). *The Thermodynamics of Phase and Reaction Equilibria*, Elsevier.

Vakili-Nezhaad, G., Vatani, M., Asghari, M. (2013). Calculation of the binary interaction and nonrandomness parameters of NRTL, NRTL1 and NRTL2 models using genetic algorithm for ternary ionic liquid systems. *Chemical Engineering Communications*, 200, 1102–1120.

Optimización metaheurística de intercambiadores de calor

Oscar D. Lara-Montaña^a, Fernando I. Gómez-Castro^{b*}, Claudia Gutiérrez-Antonio^a,
Salvador Hernández-Castro^b

^a *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Campus Amazcala, Carretera a Chichimequillas s/n km. 1, Amazcala, El Marques, Qro., 76265, Mexico*

^b *División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 76850, Mexico *fgomez@ugto.mx*

RESUMEN

En este estudio se aborda la optimización metaheurística de diferentes intercambiadores de calor utilizando tres algoritmos principales: Búsqueda Cuckoo (BC), Algoritmo de Optimización de la Ballena (AOB) y el Optimizador Basado en la Enseñanza y el Aprendizaje (OBEA). A partir de 30 experimentos, se verificó que el intercambiador de calor de tubos y coraza (ICTC) es el más complicado de optimizar. El algoritmo BC demostró ser el más eficiente para el ICTC, logrando un costo de 15,459.90 USD/año. Sin embargo, los resultados de la Búsqueda Cuckoo variaron considerablemente, apuntando a posibles problemas de reproducibilidad. A su vez, tanto AOB como OBEA presentaron inconvenientes: el AOB mostró una alta variabilidad en los resultados y el OBEA tuvo tendencias a la convergencia prematura. En contraste, para el diseño de los intercambiadores de calor de placas aletadas (ICPA), ambos algoritmos alcanzaron consistentemente las soluciones óptimas, con un costo anual de 3,969.97 USD. Respecto a los intercambiadores de calor de placas (ICP), el estudio reveló peculiaridades específicas en su optimización, resaltando la necesidad de estrategias diferenciadas para su diseño eficiente.

Palabras clave: Intercambiadores de calor; optimización de equipos; algoritmos metaheurísticos; diseño de equipos

INTRODUCCIÓN

Los intercambiadores de calor juegan un papel crucial en la industria, facilitando la transferencia de energía térmica entre diversas corrientes de fluido. Estos dispositivos no solo son fundamentales para asegurar procesos térmicos eficientes, sino que también proporcionan servicios esenciales de calefacción y refrigeración en diversas aplicaciones industriales. A lo largo de los años, se han desarrollado múltiples tecnologías y diseños de intercambiadores de calor, como los de tubo doble, tubos y coraza, placas, y placas aletadas, por mencionar algunos (Thulukkanam, 2013).

En el amplio campo de la optimización, los algoritmos metaheurísticos han demostrado ser herramientas de gran trascendencia. De acuerdo con Yang (2014), estos algoritmos se caracterizan por utilizar dos mecanismos fundamentales de búsqueda: la exploración y la explotación. La combinación de ambos garantiza una mayor probabilidad de convergencia hacia el óptimo global, resultando en soluciones más robustas y precisas para una amplia gama de problemas.

Dentro del marco de este estudio, se busca aprovechar el potencial de tres algoritmos metaheurísticos distintos para abordar los desafíos específicos asociados con diferentes tipos de intercambiadores de calor: el Intercambiador de Calor de Tubos y Coraza (ICTC), el Intercambiador de Calor de Placas (ICP) y el Intercambiador de Calor de Placas Aletadas (ICPA). Los algoritmos seleccionados fueron la Búsqueda Cuckoo (BC), Optimización Basada en la Enseñanza y el Aprendizaje (OBEA) y Algoritmo de Optimización de la Ballena (AOB). Cada uno de estos algoritmos se inspira en comportamientos naturales y fenómenos biológicos. Por ejemplo, la BC, propuesta por Yang y Deb (2009), se inspira en el peculiar comportamiento parasitario de los cuco, aves conocidas por depositar sus huevos en nidos ajenos. Por otra parte, el OBEA, concebido por Rao y col. (2011) simula la dinámica pedagógica de un aula, con la solución óptima actuando como el "profesor" que guía el proceso. Por su parte, el AOB, propuesto por Mirjalili y Lewis (2016), emula el intrincado patrón de caza de las ballenas jorobadas.

En las secciones subsiguientes se desentraña meticulosamente la metodología empleada, comenzando con el modelado de los intercambiadores de calor, pasando por los casos de estudio seleccionados, y culminando con la aplicación detallada de las estrategias de optimización. En la sección de resultados, se ofrece un análisis exhaustivo de los datos obtenidos, destacando hallazgos significativos relacionados con las distintas variables estadísticas estudiadas. Finalizando el estudio, las conclusiones se centran en brindar recomendaciones sobre la idoneidad y aplicabilidad de los algoritmos metaheurísticos en contextos específicos de optimización de intercambiadores de calor.

METODOLOGÍA

En esta sección se detalla el ambiente de optimización que se desarrolló con el propósito de diseñar equipos de transferencia de calor. El entorno permite al usuario escoger entre tres algoritmos optimizadores diferentes: el Algoritmo de Optimización de la Ballena, el Optimizador Basado en la Enseñanza y el Aprendizaje, y la Búsqueda Cuckoo. Además, el usuario tiene la libertad de seleccionar el tipo de intercambiador de calor que desea diseñar, ya sea un ICTC, un ICPA o un ICP. Todo este ambiente se implementó utilizando el lenguaje de programación Python.

Para la estimación de las variables termohidráulicas de los ICTC se empleó el método Bell-Delaware que considera no solo la corriente principal que avanza en zig-zag a través de intercambiador de calor, sino que también las corrientes secundarias que se forman, el modelo completo puede encontrarse en Shah y Sekulić (2003). El procedimiento para diseñar ICPA empleado se tomó de Mishra y col. (2009) y Rao y Patel (2010). La metodología para diseñar ICP se basa en Kakaç y col. (2002). Para los tres tipos de intercambiadores de calor se usa el costo total anual como función objetivo.

Casos de estudio

Se consideran dos casos de estudio. El primer caso de estudio, para ICTC y ICP, involucra metanol con una tasa de flujo de 27.8 kg/s y temperaturas de entrada y salida de 95°C y 40°C, respectivamente. El otro fluido es agua de mar con una tasa de flujo de 68.9 kg/s y temperaturas de entrada y salida de 25°C y 40°C, respectivamente. En el segundo estudio

de caso, para ICPA, ambos fluidos son aire. El fluido caliente tiene una temperatura de entrada y salida de 240°C y 171°C, respectivamente, y una tasa de flujo de 0.8962 kg/s. El fluido frío tiene temperaturas de entrada y salida de 4°C y 79.5°C, respectivamente, y una tasa de flujo de 0.8296 kg/s. Se utiliza una vida útil del proyecto de 20 años, una tasa de interés del 5%, 8,000 horas de operación por año, un costo de electricidad de 0.1 kWh y un CEPCI igual a 686.7 (Jenkins, 2021).

Se involucran once variables de decisión en el diseño de un ICTC, siete en el ICPA y ocho en el ICP. Los límites superior e inferior para las variables de decisión continuas se muestran en la Tabla 1. Los valores permitidos para las variables discretas se muestran en la Tabla 2.

Tabla 1. Límites de las variables de decisión continuas.

Intercambiador	Variable de decisión de calor		Límite inferior	Límite superior
ICTC	Diámetro de la coraza	D_s	300 mm	1,000 mm
	Espaciamento de los deflectores centrales	L_{bc}	$0.2D_s$	$0.55D_s$
	Espaciamento del deflector inicial y final	L_{bo}, L_{bi}	L_{bc}	$1.6L_{bc}$
	Espacio diamétrico entre deflectores y tubos	δ_{fb}	$0.01d_o$	$0.1d_o$
	Espacio diamétrico entre deflectores y coraza	δ_{sb}	$0.01D_s$	$0.1D_s$
	Diámetro externo del haz de tubos	D_{otl}	$0.8(D_s - \delta_{sb})$	$0.95(D_s - \delta_{sb})$
ICPA	Longitud del intercambiador de calor en el lado frío	L_{cold}	0.1m	1m
	Longitud del intercambiador de calor en el lado caliente	L_{hot}	0.1m	1m
	Altura de las aletas	H	2 mm	20 mm
	Espesor de las aletas	F_t	0.1mm	2 mm
	Longitud de lanza de la aleta	l	1mm	10 mm
ICP	Distancia horizontal entre los puertos	L_h	0.3m	0.7 m
	Distancia vertical entre los puertos	L_p	1.1m	2 m
	Diámetro de los puertos	D_p	0.1m	0.4 m
	Espesor de las placas	P_t	0.001m	0.0003 m
	Pitch de las placas	P	0.0015m	0.005 m
	Factor de alargamiento	E_f	1.15m	1.25 m

Table 1. Valores permitidos para las variables discretas.

Intercambiador de calor	Variable de diseño		Valores permitidos
ICTC	Diámetro interno y externo de los tubos	d_o, d_i	Valores de Flynn y col. (2019)
	Pitch de tubos	P_t	[1.25 d_o , 1.5 d_o]
	Ángulo del arreglo de tubos	TL	[30°, 45°, 90°]
	Corte de los deflectores	B_c	[25%, 30%, 40%, 45%]
	Número de pasos por tubos	s	[1,2,4]
PFHE	Frecuencia de las aletas	n	[200, 201, . . . ,1,000]
	Número de capas de aletas en el lado caliente	N_h	[2,3, . . . ,40]
ICPA			
PHE	Ángulo Chevron	D	[30°, 45°, 50°, 60°, 65°]
	Número de placas	N_p	[2,3, . . . ,700]

Para el ICTC, la caída de presión en el lado de la carcasa, ΔP_s , y en el lado del tubo, ΔP_t , debe ser menor o igual a 70,000 Pa. La velocidad del fluido en los tubos debe encontrarse entre 1 m/s y 3 m/s (Caputo y col., 2008). La relación entre el diámetro interno de la carcasa y la longitud de los tubos debe ser menor o igual a 15. Para ICPA, las caídas de presión máximas permitidas en el lado caliente, ΔP_h , y en el lado frío, ΔP_c , son 300 Pa y 2,000 Pa, respectivamente (Rao y Patel, 2010). Para ICP, la caída de presión máxima permitida es de 70,000 Pa en ambos lados. Para obtener información estadística, se realizaron 30 experimentos por problema de optimización y por algoritmo de optimización. Se emplearon 50 iteraciones y 50 soluciones candidato por experimento.

RESULTADOS

La Tabla 1 desglosa detalladamente los resultados obtenidos en relación con las variables estadísticas, derivadas de la realización de 30 experimentos individuales para cada situación de optimización. De estos análisis, se desprende que el escenario más desafiante a abordar involucra al diseño del Intercambiador de Calor de Tubos y Coraza (ICTC). En este contexto, el Algoritmo de Búsqueda Cuckoo (BC) se distingue notablemente, proponiendo un diseño óptimo que conlleva un costo anual de 15,459.90 USD. Sin embargo, es pertinente resaltar que, aunque el algoritmo CS exhibe resultados superiores en relación con las cuatro variables estadísticas estudiadas, su desviación estándar es notablemente alta. Esta significativa fluctuación, sumada a una mediana que difiere de la solución óptima, lo cual sugiere una falta de consistencia y reproducibilidad en las iteraciones del experimento, indicando una propensión a converger hacia soluciones no óptimas.

Por otro lado, el Algoritmo de Optimización de la Ballena (AOB) demostró ser el menos eficaz, reflejando una desviación estándar de 1,000.71 USD/año. De manera similar, el Optimizador Basado en la Enseñanza y el Aprendizaje (OBEA) presentó desafíos: aunque su desviación estándar no fue tan pronunciada como la del AOB, la mediana se desvió considerablemente de la mejor solución, sugiriendo una convergencia temprana o una incapacidad de superar máximos locales.

Finalmente, el problema de optimización asociado al Intercambiador de Calor de Placas Aletadas (ICPA) emergió como el más accesible para los algoritmos evaluados. En este escenario, tanto el AOB como el OBEA produjeron diseños óptimos, con un Costo Anual Total (TAC) de 3,969.97 USD/año y una desviación estándar nula, evidenciando una consistencia en la identificación de la solución óptima a través de todas las simulaciones.

Tabla 2. Resultados de las variables estadísticas.

Optimizador	Intercambiador de calor	Mediana (USD/año)	Promedio (USD/año)	Desviación estándar (USD/año)	Mínimo (USD/año)
BC	ICTC	15,707.11	15,743.17	224.60	15,459.90
	ICPA	3,969.98	3,973.55	7.76	3,969.97
	ICP	2,266.49	2,271.82	36.41	2,225.11
OBEA	ICTC	16,397.62	16,355.88	490.21	15,498.85
	ICPA	3,969.97	3,969.97	0	3,969.97
	ICP	2,231.20	2,227.85	5.24	2,221.19
AOB	ICTC	16,743.12	16,992.41	1,000.71	15,680.80
	ICPA	3,969.97	3,969.97	0	3,969.97
	ICP	2,249.30	2,402.80	243.65	2,221.19

Por último, el algoritmo OBEA obtiene los mejores resultados para el problema que implica al ICP, dado que genera la menor desviación estándar, mediana y promedio. En este intercambiador de calor, también el AOB fue capaz de encontrar el mejor diseño en al menos uno de los experimentos. Resulta interesante observar que la BC no obtuvo los mejores resultados en los problemas de optimización de menor complejidad.

CONCLUSIONES

A través del análisis del desempeño de metodologías de optimización metaheurística en intercambiadores de calor, se identificó que el diseño de intercambiadores de calor de tubos y coraza (ICTC) es particularmente desafiante, con el algoritmo de Búsqueda Cuckoo (BC) mostrando superioridad, pero con variabilidades que sugieren la necesidad de ajustes. Los algoritmos de Optimización de la Ballena (AOB) y Optimizador Basado en la Enseñanza y el Aprendizaje (OBEA) evidenciaron potenciales limitaciones, como la convergencia prematura y variaciones significativas, respectivamente. No obstante, mostraron excelencia en el diseño de intercambiadores de calor de placas aletadas (ICPA). La elección y aplicación de algoritmos deben adaptarse a las especificidades de cada intercambiador, y se sugiere explorar combinaciones de algoritmos y futuras adaptaciones especializadas para mejorar la eficacia en el diseño de estos equipos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo de la Universidad de Guanajuato y la Universidad Autónoma de Querétaro, así como la beca otorgada por CONACYT para respaldar los estudios de posgrado de O.D. Lara-Montaño.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Caputo, A.C, Pelagagge, P.M. y Salini, P. (2008). Heat exchanger design based on economic optimisation. *Applied Thermal Engineering* 28, 1151-1159.
- Flynn, A.M., Akashige, T. y Theodore L. (2019). *Kern's Process Heat Transfer*. 2ª edición, John Wiley & Sons.
- Jenkins, S. (2021). 2021 CEPCI UPDATES: JULY (PRELIM.) AND JUNE (FINAL). <https://www.chemengonline.com/2021-cepci-updates-july-prelim-and-june-final/>.
- Kakaç, S., Hongtan, L. y Pramuanjaroenkij A. (2002). *Heat Exchangers: Selection, Rating, and Thermal Design*. 2ª edición, CRC Press.
- Mirjalili, S. y Lewis A. (2016). The Whale Optimization Algorithm. *Advances in Engineering Software*, 95, 51-67.
- Mishra, M., Das P.K. y Sarangi S. (2009). Second law based optimisation of crossflow plate-fin heat exchanger design using genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 29, 2983-2989.
- Rao, R.V, Savsani V.J. y Vakharia D.P. (2011). Teaching-learning-based optimization: A novel method for constrained mechanical design optimization problems. *Computer-Aided Design*, 43, 303-315.
- Rao, R.V. y Patel V. (2010). Thermodynamic optimization of cross flow plate-fin heat exchanger using a particle swarm optimization algorithm. *International Journal of Thermal Sciences*, 49, 1712-1721.

III Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Octubre 4-6, 2023.
Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez
Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2023, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

Shah, R.K, y Sekulić, D.P. (2003). *Fundamentals of Heat Exchanger Design*. 1ª edición,
John Wiley & Sons.

Thulukkanam, K. (2013). *Heat Exchanger Design Handbook*. 2ª edición. CRC Press.

Yang, X., y Deb, S. (2009). Cuckoo Search via Lévy flights. *2009 World Congress on
Nature Biologically Inspired Computing (NaBIC)*, 210-214..

Yang, X.S. (2014). *Nature-Inspired Optimization Algorithms*. 1ª edición, Elsevier.

Optimización de una biorrefinería sostenible para la transformación de glucosa en productos de alto valor agregado

Carlos Rodrigo Caceres B^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

* Correo electrónico: gsegovia@ugto.mx

RESUMEN

La creciente importancia de las biorrefinerías como fuentes de productos químicos y combustibles a partir de recursos renovables plantea el desafío de diseñar biorrefinerías sostenibles que consideren aspectos económicos, ambientales y energéticos. Este trabajo se enfoca en el diseño y la optimización de una biorrefinería que utiliza rastrojo de maíz como materia prima para producir ácido levulínico (AL), gama valerolactona (GVL), 5-hidroximetil furfural (HMF) y furfural (FF). La complejidad radica en la necesidad de evaluar múltiples funciones objetivo, incluyendo el costo anual total (TAC), el eco-indicador 99 (Eco99) y el consumo de energía, en un entorno con múltiples productos. Para abordar esta complejidad, se optó por el método estocástico de evolución diferencial con lista tabú (EDTL). Este es uno de los primeros trabajos en cuanto al diseño y optimización de una biorrefinería para la producción simultánea del portafolio de productos mencionado. Los resultados demuestran que es posible encontrar un equilibrio entre la rentabilidad económica y el impacto ambiental generado, convirtiendo los residuos agrícolas en productos químicos valiosos. Además, se sienta un precedente importante para futuras investigaciones en el campo de la conversión de residuos en recursos sostenibles. La implementación de EDTL se llevó a cabo a través de una interacción entre Aspen Plus y Visual Basic, lo que permitió obtener un diseño óptimo que alcanza purzas superiores al 98% para los cuatro compuestos. El estudio consideró tres escenarios, y el escenario 2 demostró ser el más sostenible, con un TAC de 3.15710^7 dólares/año, un valor Eco99 de 7.71010^6 puntos/año y un consumo de energía de $1.756 \cdot 10^9$ MJ/año. **Palabras clave:** biorrefinerías; método DETL; sostenibilidad.

INTRODUCCIÓN

El enfoque de las biorrefinerías está ganando relevancia debido a su capacidad para producir productos químicos y combustibles a partir de fuentes renovables. Sin embargo, el diseño de una biorrefinería sostenible es un desafío complejo, ya que implica la evaluación de una variedad de indicadores, incluyendo aspectos económicos, ambientales, sociales y de seguridad. La dificultad radica en la complejidad de los modelos cinéticos y termodinámicos, que son no lineales y no convexos, así como en la gran cantidad de equipos y procesos involucrados en el sistema. La optimización de estos indicadores se convierte en un problema altamente complejo. En la literatura existen ejemplos de optimización de biorrefinerías para múltiples productos, aunque con una sola función objetivo, como se evidencia en el estudio de Cheali et al. en 2015. También se encuentran ejemplos de optimización multiobjetivo aplicados a la producción de un solo producto, como en el trabajo de Alcocer-García et al en 2019 y el de Contreras et al. en 2022

Este trabajo se enfoca en obtener el diseño de una biorrefinería para la producción de furfural, ácido levulínico, hidroximetil furfural y γ -valerolactona utilizando azúcares obtenidos del rastrojo de maíz. Las funciones objetivo consideradas son el costo anual total, el eco-indicador 99 y el requerimiento de energía del proceso. La complejidad de este problema radica en la presencia de múltiples productos y múltiples funciones objetivo. Dado que los métodos determinísticos a menudo requieren simplificaciones en modelos tan complejos, se ha optado por utilizar métodos estocásticos en este trabajo. Los métodos estocásticos son particularmente adecuados para modelos de "caja negra" como los utilizados en simuladores de procesos, donde se emplean ecuaciones rigurosas para el diseño. Entre los diversos métodos estocásticos disponibles, se ha seleccionado la evolución diferencial con lista tabú (DETL), que combina la evolución diferencial tradicional con el concepto de lista tabú para mejorar la eficiencia computacional (Srinivas et al.,2007). Este enfoque se ha aplicado exitosamente en la optimización de procesos relacionados con la producción de bioproductos. En resumen, este trabajo representa uno de los primeros intentos de optimizar una biorrefinería sostenible para la producción de un conjunto diverso de productos, abordando la complejidad del problema mediante el uso de métodos estocásticos, específicamente la evolución diferencial con lista tabú (DETL)

METODOLOGÍA

Materia prima. La materia prima es el rastrojo de maíz el cual tiene una alta disponibilidad en México como se ve en la tabla 1(Contreras et al ,2022). En Guanajuato la disponibilidad es 1.3 millones ton/año. El pretratamiento se realiza con ácido sulfúrico diluido. Se alimentan 15000 kg/h de rastrojo (10% de la disponibilidad en Guanajuato). La relación agua/biomasa es 2:1. El ácido se alimenta en una proporción de 0.77kg/1000 kg de agua. El diseño de la biorrefinería se realizó en el software Aspen Plus. con el modelo termodinámico NRTL-HOC, que es útil para predecir el equilibrio de mezclas de compuestos polares complejos (Alcocer-García,2019). Para los reactores se usó el modelo estequiométrico y para columnas de destilación se usó el modelo RADFRAC

Tabla 1. Disponibilidad y composición promedio del rastrojo de maíz.

Materia Prima	Celulosa	Hemicelulosa	Lignina	Disponibilidad(ton/año)
Rastrojo de maíz	44.38	33.63	22.37	48.2 millones

Diseño de la biorrefinería. En la figura 1 se muestra un diagrama de la biorrefinería. El reactor R1 es el reactor de pretratamiento, su efluente se neutraliza en el reactor R2. Mediante filtración se obtienen: la corriente líquida de hemicelulosa (10% de xilosa) que se dirige a la producción de FF y la corriente sólida de celulosa y lignina. En el reactor R3 se lleva a cabo la hidrólisis ácida de celulosa en glucosa, la lignina es filtrada del efluente del reactor. La columna 1 se usa para recuperar el ácido. En esta parte se tomó la decisión de diseño de dividir los fondos de la columna C1 (principalmente glucosa) en dos partes iguales. Una parte va hacia la producción de ácido levulínico en el reactor R4 al cual también se alimenta ácido sulfúrico y la otra se usa en la producción de HMF en el reactor R6. Por los fondos de la columna C2 se recupera el ácido sulfúrico

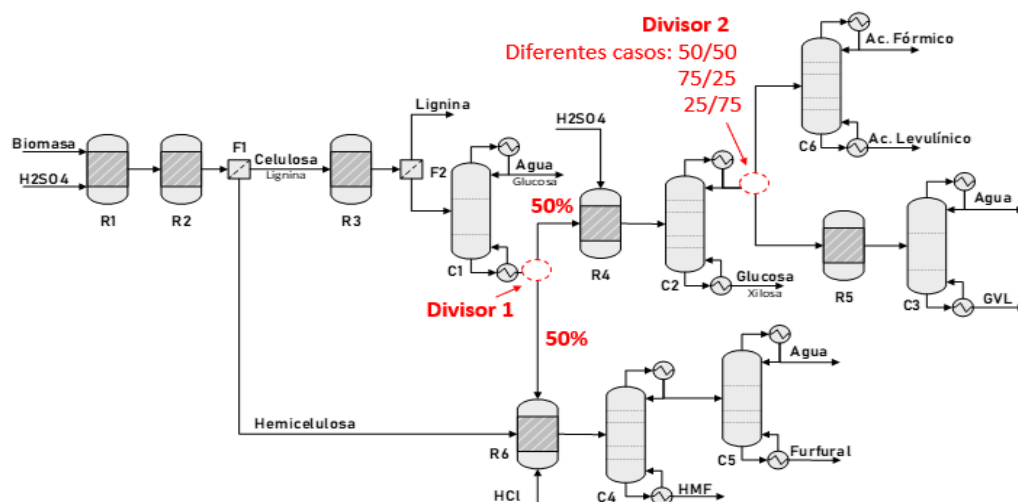


Figura 1. Diagrama simplificado de la biorrefinería y obtención de casos de estudio.

La corriente de destilado de la columna C2 compuesta de ácido levulínico (AL) y ácido fórmico (AF) se puede enviar a uno de dos procesos: la purificación de AL en la columna C6 o bien su transformación en gamma-valerolactona en el reactor R5 y su posterior purificación en la columna C3. En la parte inferior del diagrama, el reactor R6 es un reactor de deshidratación donde la xilosa se convierte en FF y la glucosa en HMF. Se usan las columnas C4 y C5 para la purificación de estos compuestos. Se consideraron 3 escenarios que se diferencian en la proporción en que se divide la corriente de destilado de C2 entre los dos procesos mencionados. Se plantearon 3 escenarios resultantes de dividir dicha corriente en las proporciones: 50/50, 25/75 y 75/25 (Tabla 2). Posteriormente se llevó a cabo la optimización para cada uno de los tres escenarios.

Tabla 2. Casos de estudio considerados para la división de la corriente de destilado de la columna C2

Escenario	Porcentaje enviado a Columna C6	Porcentaje enviado a reactor R5
1	50	50
2	25	75
3	75	25

Optimización. Las variables de decisión seleccionadas son fundamentalmente las variables de diseño de las columnas (Tabla 3). El método de optimización usado es evolución diferencial con lista tabú (DETL) propuesto por (Srinivas et al,2007). El método se adapta bien para casos con gran cantidad de ecuaciones altamente no lineales y se acopla bien a modelos de caja negra como el usado por Aspen. La implementación del método requiere una interacción entre Microsoft Excel y Aspen Plus. El vector de variables de decisión se envía de Excel a Aspen con las variables que el simulador evaluará, luego de la simulación el vector resultante es enviado de regreso a Excel donde se evalúan los valores de las funciones objetivo y se proponen nuevos valores de las variables de decisión de acuerdo con el método EDTL usado. Los parámetros usados para el método DETL fueron: 120 individuos para la generación inicial y 60 para la lista tabú, 400 generaciones, un radio tabú de 0.0001 y valores de 0.9 para el factor de cruce y de 0.3 para el factor de mutación. Estos parámetros fueron tomados de trabajos previos.

Tabla 3. Variables de decisión usadas en el proceso de optimización.

Variable	Rango de la variable	Tipo de variable
Número de etapas, C1 a C6	20-100	Discreta
Etapas de alimentación, C1 a C6	3-99	Discreta
Diámetro de la columna, C1 a C6 (m)	0.5-1.7	Continua
Relación molar de reflujo C1	0.02-0.5	Continua
Relación molar de reflujo C2	1.2-2.2	Continua
Relación molar de reflujo C3	0.02-0.12	Continua
Relación molar de reflujo C4	0.1-0.5	Continua
Relación másica de reflujo C5	10-15	Continua
Relación molar de reflujo C6	0.01-0.3	Continua
Flujo de destilado C1 (kmol/h)	130-144	Continua
Flujo de destilado C2 (kmol/h)	33-41	Continua
Flujo de destilado C3 (kmol/h)	8-10	Continua
Flujo de destilado C4 (kmol/h)	85-105	Continua
Flujo de destilado C5 (kg/h)	1400-1700	Continua
Flujo de destilado C6 (kmol/h)	10-14	Continua

Respecto al cálculo de las funciones objetivo, para el costo anual total se usa la metodología reportada por (Turton,2003), para el eco-indicador 99 la metodología reportada por (Goedkoop ,2001) donde se cuantifican los impactos de vapor, electricidad y acero; el requerimiento de energía total se obtiene directamente de Aspen. La optimización se llevó a cabo minimizando la función multiobjetivo:

$$\text{Min} (TAC, EI99, \text{Energía}) = f(N, Nf, RR, D, d). \text{ Sujeto a } y_i P_c \geq x_i P_c$$

Donde N es el número de etapas, Nf es la etapa de alimentación, R es la relación de reflujo, D es el flujo de destilado y d es el diámetro de las columnas de destilación. Entre las restricciones están los requerimientos de pureza requeridos, expresados como (%w/w): GVL (98.5%), HMF (98%), AL (99%), FF (99%). Adicionalmente los valores de flujos másicos de interconexión se determinaron de acuerdo con el balance de masa del proceso.

RESULTADOS

Para analizar los resultados, se utilizaron frentes de Pareto. Cada punto en el Pareto representa un diseño diferente El punto óptimo se selecciona usando la metodología del punto de utopía. Esta es una solución ideal, donde dos objetivos no pueden mejorar más, ya que mejorar uno implicaría deteriorar el otro. En la figura 2 se representan las funciones objetivo: TAC vs Eco-indicador 99 para los tres escenarios de este trabajo. Vemos que existe una relación competitiva entre dichas funciones objetivo. Por ejemplo, el caso donde se presenta el menor valor del eco-indicador es el que corresponde al mayor valor del TAC y viceversa. El escenario 2 (2575) es el que muestra valores menores del TAC ($3.156 * 10^7 - 3.159 * 10^7$ dólares/año). En la Figura 3 se graficaron el requerimiento de energía vs Eco-indicador 99. Podemos observar una relación lineal entre ambas funciones objetivo. Para columnas de destilación el eco-indicador consta de tres términos: vapor, acero y electricidad. De estos 3 el flujo de vapor es el que tiene el mayor peso. Por lo tanto, al aumentar el consumo de energía también lo hace el ECO-99. El escenario 2 (2575) es el que tiene menores requerimientos de energía con valores en el rango ($1.755 * 10^9 - 1.757 * 10^9$ MJ/año).

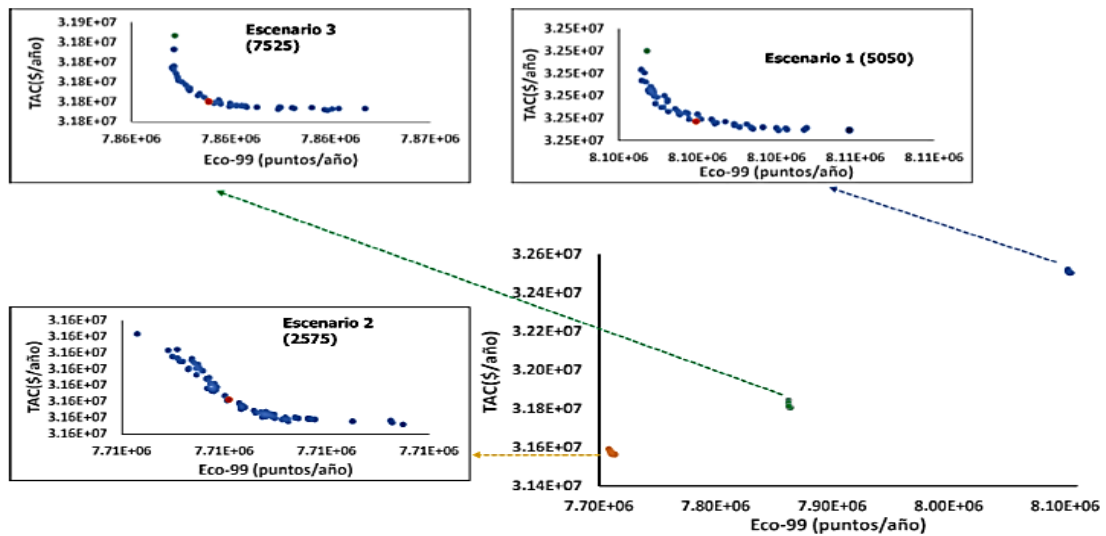


Figura.2 Frentes de Pareto TAC vs ECO-99 para los tres escenarios evaluados en este trabajo.

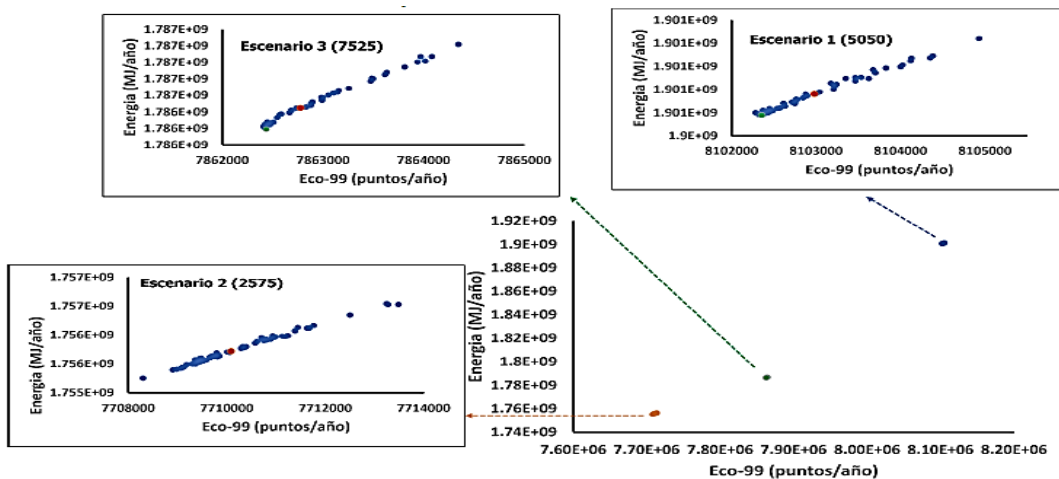


Figura .3 Frentes de Pareto Energía vs ECO-99 para los tres escenarios evaluados en este trabajo.

En la tabla 4 se muestran los valores de las funciones objetivo para los diseños óptimos. El caso óptimo del escenario 2 presenta el menor valor de todas las funciones objetivo. Este es el escenario que produce la mayor cantidad de GVL. También observamos que el costo de los servicios corresponde a un 63% del costo anual total de la planta.

Tabla.4 Valores de las funciones objetivo para la configuración óptima de cada escenario

Función objetivo	Escenario 1 (5050)	Escenario2 (2575)	Escenario3 (7525)
TAC (dólares/año)	3.250×10^7	3.157×10^7	3.180×10^7
Eco-indicador99 (puntos/año)	8.105×10^6	7.710×10^6	7.863×10^6
Requerimiento de energía (MJ/año)	1.901×10^9	1.756×10^9	1.786×10^9

Tabla.4 Valores de las funciones objetivo para la configuración óptima de cada escenario (continuación)

Parámetro	Escenario 1 (5050)	Escenario 2 (2575)	Escenario3 (7525)
Costo de equipos (dólares/año)	$1.158 * 10^7$	$1.170 * 10^7$	$1.171 * 10^7$
Costos servicios (dólares/año)	$2.092 * 10^7$	$1.987 * 10^7$	$2.009 * 10^7$

CONCLUSIONES

Se obtuvo el diseño de una biorrefinería para la producción de ácido levulínico, gamma-valerolactona, furfural e hidroximetil furfural con purezas superiores al 98%, usando rastrojo de maíz y el pretratamiento con ácido diluido. La técnica de optimización estocástica DETL fue usada para encontrar los diseños que permiten disminuir los costos, el consumo de energía del proceso global y el impacto ambiental. También se pudo encontrar una relación competitiva entre el costo total y el eco-indicador. También se encontró una relación directa entre los requerimientos energéticos del proceso y el impacto ambiental. Los mayores costos de la biorrefinería están asociados a los costos de energía particularmente al costo del vapor. Entre los escenarios evaluados, el escenario 2 tiene los menores valores de las 3 funciones objetivo. Este es el proceso donde se obtiene la mayor cantidad de GVL. Sus requerimientos energéticos están en el rango $(1.755 * 10^9 - 1.757 * 10^9 \text{ MJ/año})$. Tiene un TAC de $(3.156 * 10^7 - 3.159 * 10^7 \text{ dólares/año})$. También es el proceso menos contaminante con valores del eco-99 entre $(7.708 * 10^6 - 7.713 * 10^6 \text{ puntos/año})$.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alcocer-García, H., Segovia-Hernández, J. G., Prado-Rubio, O. A., Sánchez-Ramírez, E., & 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
- Cheali, P., Vivion, A., Gernaey, K. V., & Sin, G. (2015). Optimal design of algae biorefinery processing networks for the production of protein, ethanol and biodiesel. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 37, pp. 1151-1156). Elsevier.
- Contreras-Zarazúa, G., Martín-Martín, M., Sánchez-Ramírez, E., & Segovia-Hernández, J. G. (2022). Furfural production from agricultural residues using different intensified separation and pretreatment alternatives. Economic and environmental assessment. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 171
- Srinivas, M. and Rangaiah, G.P. (2007). Differential evolution with tabu list for global optimization and its application to phase equilibrium and parameter estimation problems. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 46: 3410–3421.

DISEÑO DE UN ESQUEMA DE BIORREFINERÍA PARA LA REVALORIZACIÓN DE EFLUENTES VINÍCOLAS MINIMIZANDO EL RIESGO INHERENTE

Carlos Eduardo Guzmán-Martínez, Araceli Guadalupe Romero-Izquierdo, Oscar Daniel Lara-Montaña, Sergio Iván Martínez-Guido, Claudia Gutiérrez-Antonio*

*Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Carretera Chichimequillas. s/n km 1, El Marques, Qro. CP: 76265, MÉXICO. [*claudia.gutierrez@uaq.mx](mailto:claudia.gutierrez@uaq.mx)*

RESUMEN

La industria vinícola produce una gran cantidad de agua residual, cuya inadecuada disposición es un fuerte problema social y ambiental. No obstante, estos efluentes se caracterizan por tener un gran contenido de carbohidratos y alcoholes; compuestos que pueden emplearse en la generación de bioenergía. En este sentido, la revalorización de efluentes vinícolas mediante esquemas de biorrefinería que generen biocombustibles y productos de valor agregado resulta una alternativa promisorio. Dada la naturaleza de los procesos y los productos obtenidos es necesario considerar la seguridad inherente desde la etapa de diseño. Es por ello que, en este trabajo se propone un esquema de biorefinación (en Aspen Plus V.11.0) a partir de efluentes vinícolas incorporando aspectos de seguridad inherente. Posteriormente, la propuesta es optimizada para la minimización de riesgo (mediante el índice de ruta de proceso, PRI) y carga térmica. El problema de optimización fue resuelto mediante la implementación de Algoritmos Genéticos a través de la liga Matlab–Visual Basic–Aspen Plus. De acuerdo con los resultados es posible la producción de ácido levulínico, bioturbosina, diésel verde, nafta y gases ligeros. Además, la biorrefinería disminuye en un 99.99% la DQO del efluente vinícola. A través de esta propuesta es posible observar la factibilidad técnica del esquema de biorefinación a partir de un efluente vinícola, minimizando el índice de riesgo de los procesos involucrados. Adicionalmente, se puede inferir que dada la reducción de la DQO es posible cumplir con las normas de descarga de aguas (NOM-001-SEMARNAT-2021).

Palabras clave: Biorrefinería; efluente vinícola; revalorización; optimización; algoritmos genéticos.

INTRODUCCIÓN

La producción de vino es una de las actividades agrícolas más importantes en el mundo. Entre los productores vinícolas a nivel global, México ocupa el lugar 32; con una producción anual de 400 000 hl [1]. Actualmente, la producción de vino en México se registra en 14 estados, en áreas que se conocen como rutas o regiones: Aguascalientes,

Baja California, Chihuahua, Coahuila, Guanajuato, Hidalgo, Jalisco, Michoacán, Nuevo León, Puebla, Querétaro, San Luis Potosí, Sonora y Zacatecas [2].

La industria vinícola había sido percibida, entre la población, como un proceso ambientalmente amigable. Desafortunadamente, el proceso genera grandes cantidades de agua residual; las cuales oscilan entre 0.2 y 4 l por litro de vino producido [3]. Las operaciones responsables de esta generación son: el lavado (incluye tanques, barriles, fermentadores), la fermentación y el embotellado.

Existen diversos daños a los ecosistemas, tanto terrestres, como acuáticos, causados por estos efluentes. En el caso de los cuerpos de agua, se reduce la penetración de luz solar y el oxígeno disuelto; con lo cual, se ve afectada directamente el desarrollo tanto de organismos fotótrofos, como el de aerobios [4]. En los ecosistemas terrestres, se tiene un efecto fitotóxico el cual resulta contraproducente para los cultivos; además, el aumento de la carga orgánica genera malos olores y un vector de riesgo por el aumento poblacional de patógenos [4].

Diferentes procesos han sido empleados para el tratamiento de estos efluentes, con la finalidad de disminuir la carga orgánica (la cual es medida mediante la Demanda Química de Oxígeno, DQO) y con ello, los efectos negativos al medio ambiente. Estos procedimientos pueden clasificarse en tratamientos fisicoquímicos y biológicos. Algunos de ellos son: adsorción, degradación foto catalítica, coagulación, digestión aerobia y digestión anaerobia [4].

Una biorrefinería puede definirse como un conjunto de procesos, tanto reactivos como de separación, para la transformación de la biomasa disponible en una amplia variedad de productos de valor agregado; además, el esquema debe estar integrado, ser eficiente y flexible [5].

La producción de bioturbosina, generada a partir de biomasa, tiene un potencial importante para ser considerada como una opción sustentable para abastecer la demanda de combustible de aviación. Actualmente, el proceso “*Alcohol a turbosina*” (Alcohol To Jetfuel, ATJ) ha sido certificado por la “*American Society of Testing Materials, (ASTM)*” [6].

El ácido levulínico es considerado entre el top 12 de químicos obtenidos de biomasa con un elevado potencial de mercado. La razón se fundamenta en los diversos procesos para los cuales funge como insumo, por ejemplo, la producción de: aditivos para combustibles, herbicidas biodegradables, agentes plastificantes, entre otros [7]. El ácido levulínico es obtenido a través de la hidrólisis ácida de glucosa utilizando ácido sulfúrico como catalizador.

En los inicios de la ingería de procesos, el aspecto de la seguridad era un tema que solía dejarse para el final del diseño; así mismo, la responsabilidad se descargaba únicamente en los sistemas de control. Con la propuesta que el concepto de seguridad inherente brinda, promoviendo la implementación de procesos seguros desde las etapas iniciales del diseño, se han desarrollado distintos índices para cuantificar el riesgo (PIIS, ISI, i-Safe). Los

índices mencionados utilizan las propiedades físicas y químicas de cada componente de manera individual, sin embargo, el único que considera la naturaleza de las corrientes y sus propiedades como mezclas es el PRI [8].

La caracterización de los efluentes vinícolas muestra tener una cantidad importante de carbohidratos y etanol [3]. Por lo tanto, su valorización a través de soluciones “residuo a energía”, en el contexto de economía circular, toma una gran relevancia como estrategia para el tratamiento de estas aguas residuales. Es por ello que, en este trabajo, se propone un esquema de biorefinación a partir de efluentes vinícolas incorporando aspectos de seguridad inherente.

METODOLOGÍA

El desarrollo de la investigación se divide en dos fases: Diseño/simulación y Optimización. En las Figuras 1 y 2 se muestran tanto el diagrama de bloques que corresponde al procedimiento de la primera etapa, como el algoritmo computacional empleado para el desarrollo de la segunda etapa, respectivamente.

A través del frente de Pareto obtenido se define el esquema óptimo. Como medida ambiental, se considera la DQO (calculada a través de Aspen Plus V11) en el agua tratada resultante.

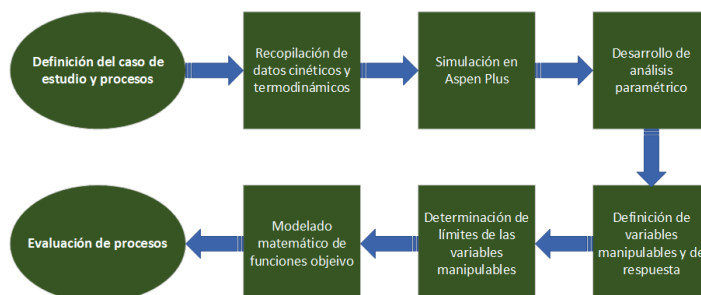


Figura 1. Diagrama de bloques fase Diseño/simulación

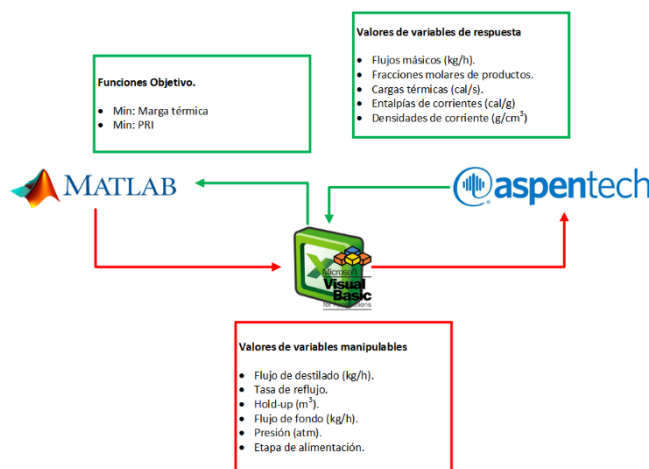


Figura 2. Algoritmo computacional fase optimización

$$UFL_{mix} = \sum_{z=1}^{z=c} \left[(x) \left(UFL_{25z} \left(1 + \frac{0.75 (T-25)}{H\Delta_{comb_z}} \right) \right) \right] \quad (6)$$

$$LFL_{mix} = \sum_{z=1}^{z=c} \left[(x) \left(LFL_{25z} \left(1 - \frac{0.75 (T-25)}{H\Delta_{comb_z}} \right) \right) \right] \quad (7)$$

$$x_{m_{agua}} > 0.9999 \quad (8)$$

$$\frac{Fm_{aguatratada}}{Fm_{aguaa\ limentada}} > 0.6 \quad (9)$$

HD_{Total}=Carga térmica total (cal/s), PRI= Índice de riesgo, RHD=Carga térmica del ebullidor (cal/s), n= Número de corrientes, h= Entalpía de la corriente (kJ/kg), δ= densidad de la corriente (kg/m³), p=presión de la corriente (bar), ΔF_{l_{mix}}=Diferencial del límite de flamabilidad de la mezcla, UFL_{l_{mix}}= Límite superior de flamabilidad de la mezcla, UFL_{25z}= Límite superior de flamabilidad del componente z a temperatura ambiente, LFL_{l_{mix}}= Límite inferior de flamabilidad de la mezcla, UFL_{25z}= Límite inferior de flamabilidad del componente z a temperatura ambiente, T= Temperatura de la corriente (°C), ΔH_{Comb} = Entalpía de combustión (kJ/mol), x= Fracción molar, c= Número de compuestos, n= Número corrientes, N= Número de columnas. Subíndices: i= Corrientes, j= Columnas, z= Compuestos. x_{magua}= fracción másica de agua en la corriente de agua tratada, Fm_{aguatratada}= Flujo másico de agua en la corriente de agua tratada (kg/h), Fm_{aguaaalimentada}= Flujo másico de agua en la corriente de alimentación (kg/h).

La Figura 4 representa el frente de Pareto obtenido. El punto marcado con color rojo define la configuración óptima seleccionada. En la Tabla 1 se realiza la comparación de los distintos parámetros de evaluación. En la configuración optimizada, como datos positivos, se logra una reducción del: 6.96% en el índice de seguridad, 7.18% en la carga térmica (lo que implicaría un menor costo de operación) y un aumento en la recuperación de agua tratada del 0.48%. Desafortunadamente, la producción de bioturbosina y ácido levulínico cae un 1.84% y 8.49%, respectivamente; además, la DQO aumenta un 21.25%. Sin embargo, este último dato no cuenta con una relevancia significativa debido a que el valor continúa por debajo de lo establecido en la NOM-001-SEMARNAT-2021

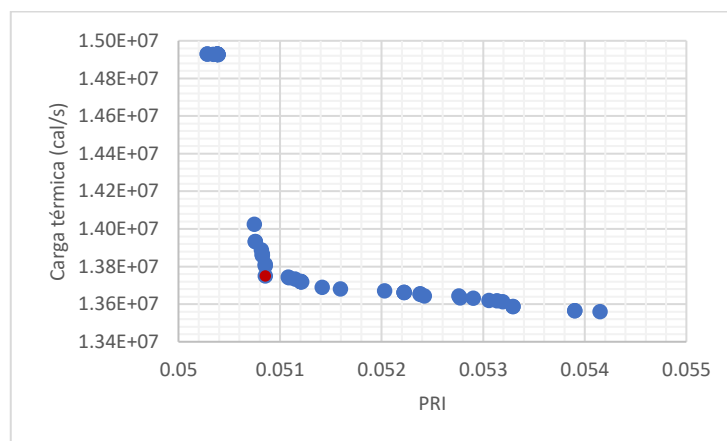


Figura 4. Frente de Pareto

Tabla 1. Parámetros de evaluación

	PRI	Carga térmica (cal/s)	DQO (PPM)	Porcentaje de recuperación de agua	Bioturbosina (kg/h)	Ác. Levulínico (Kg/h)
Simulación base	0.0546	14,938,423.76	28.7	68.67%	103.69	218.92
Óptimo	0.0508	13,865,535.78	34.8	68.98%	101.78	200.34

CONCLUSIONES

Mediante el esquema propuesto, es posible observar la factibilidad técnica de la producción de biocombustibles y ácido levulínico a partir de un efluente vinícola minimizando el índice de riesgo y la carga energética de los procesos involucrados. Conjuntamente, se logra cumplir con la norma de descarga de aguas (NOM-001- SEMARNAT-2021) dada la reducción del DQO.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero proporcionado por CONAHCyT a través de la beca de estancia postdoctoral de Carlos Eduardo Guzmán Martínez.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. <https://www.oiv.int/es/what-we-do/country-report?oiv> (Acceso: 29/08/2023)
2. Núñez, F. A., Cabrera, M. R., Sánchez, J. F., y Collins, R. (2022). La industria vitivinícola mexicana en el siglo xxi: retos económicos, sociales y ambientales. Acento Editores.
3. Buitrón, G., Martínez, F. J., y Ojeda, F. (2019). Biogas production from a highly organic loaded winery effluent through a two-stage process. *BioEnergy Research*, 12, 714-721.
4. Ratna, S., Rastogi, S., y Kumar, R. (2021). Current trends for distillery wastewater management and its emerging applications for sustainable environment. *Journal of Environmental Management*, 290, 112544.
5. Ahmad, B., Yadav, V., Yadav, A., Rahman, M. U., Yuan, W. Z., Li, Z., y Wang, X. (2020). Integrated biorefinery approach to valorize winery waste: A review from waste to energy perspectives. *Science of the Total Environment*, 719, 137315.
6. Romero, A., Gómez, F., Gutiérrez, C., Hernández, S., y Errico, M. (2021). Intensification of the alcohol-to-jet process to produce renewable aviation fuel. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 160, 108270.
7. Solís, J., Alcocer, H., Sánchez, E., y Segovia, J. (2022). Innovative reactive distillation process for levulinic acid production and purification. *Chemical Engineering Research and Design*, 183, 28-40.
8. Leong, C., y Shariff, A. (2009). Process route index (PRI) to assess level of explosiveness for inherent safety quantification. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 22(2), 216- 221.
9. Carlson, E. (1996). Don't gamble with physical properties for simulations. *Chemical engineering progress*, 92(10), 35-46.

Optimización de esquemas intensificados de destilación reactiva para producción de combustible sostenible para avión, considerando métricas sostenibles

Gabriel Contreras Zarazúa^{a,b*}, Juan José Quiroz Ramírez^a, Victor Alejandro Suarez Toriello^c, Eduardo Sánchez Ramírez^b, Juan Gabriel Segovia Hernández^b, Oscar Abel Luevano Rivas^a

^aCONACYT-CIATEC, A.C. Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas. Omega 201, Industrial Delta, León, GTO, México 37454.

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

^cUniversidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica (DIPH) Av. San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma Ira Secc, Iztapalapa, Ciudad de México, CDMX 09340. g.contreraszarazua@ugto.mx

RESUMEN

En este trabajo se diseñaron y optimizaron esquemas basados en destilación reactiva para el proceso alcohol to jet (ATJ) con el objetivo de mejorar las etapas de oligomerización e hidrogenación usando la técnica de evolución diferencial con lista tabú. Como funciones objetivo, se analizaron aspectos económicos, medioambientales, seguridad y control. Los resultados obtenidos indican que una columna de destilación reactiva doble catalítica presenta los costos más reducidos, menores repercusiones ambientales y una mejor seguridad inherente; como resultado, dicho proceso presenta ahorros en costo e impacto de hasta un 70% frente al proceso convencional ATJ. De igual manera, se observó que la columna doble catalítica tiene mejores propiedades de control, lo que la hace más resistente a disturbios y menos sensible a los mismos.

Palabras clave: Bioturbosina, Destilación Reactiva, Intensificación de Procesos, Evolución Diferencial, Optimización Estocástica.

INTRODUCCIÓN

El mundo actualmente enfrenta demandas energéticas crecientes. Este aumento en energía está asociado con un incremento en la producción de bienes y servicios, mejor calidad de vida, entre otros. Lamentablemente, la mayoría de la energía producida por los seres humanos proviene de la quema de combustibles fósiles como el carbón, gas natural, gasolina, etc., lo que genera graves problemas ambientales debido a la emisión de gases de efecto invernadero como el CO₂. El dióxido de carbono es el principal gas de efecto invernadero; estudios recientes revelan que para 2018 su concentración en la atmósfera había pasado de 280 a 408ppm, tomando el año 1900 como referencia. Este aumento representa un incremento de 0.8°C en la temperatura global de la tierra y se espera que para el año 2100 el aumento de temperatura alcance los 5°C (Ko et al., 2017). Para reducir sus emisiones, varias industrias como el sector de la aviación han comenzado a desarrollar

tecnologías para reducir sus emisiones de CO₂. La industria aeronáutica es responsable del 2.6% de las emisiones de CO₂ y se espera que para mediados de siglo esta industria emita el 20.2% de las emisiones de CO₂. Una alternativa interesante para reducir las emisiones contaminantes es reemplazar el combustible para aviones (también llamado biojet-fuel) que proviene de fuentes fósiles, por biojet-fuel, un combustible renovable derivado de residuos de biomasa, aceites vegetales, etc. Se han propuesto varios procesos y biomasa para producir biojet-fuel; sin embargo, una alternativa poco explorada es el proceso ATJ (Alcohol a Combustible de Avión), que consiste en convertir residuos lignocelulósicos en azúcares, que se transforman en hidrocarburos. Como con otras alternativas para producir biojet-fuel u otros biocombustibles, la viabilidad económica sigue siendo el principal desafío para este tipo de tecnología. En el caso del proceso ATJ, una etapa crítica y de alta demanda energética es la de oligomerización e hidrogenación, ya que es en esta etapa donde se producen y separan los hidrocarburos. Hasta la fecha, los esfuerzos de investigación se han dirigido a mejorar la etapa de separación y optimizar la etapa de oligomerización, explorando nuevos catalizadores y rutas químicas. Sin embargo, no se había considerado la aplicación de destilación reactiva en la etapa de oligomerización e hidrogenación.

La destilación reactiva integra los procesos de reacción y separación en un único equipo, ofreciendo ventajas como reducción de costos, ahorro energético y mayor seguridad por requerir menos equipos. En este trabajo se estudia la posibilidad de intensificar y optimizar el proceso ATJ a través de variados esquemas de destilación reactiva para optimizar la oligomerización e hidrogenación. Dada la complejidad de la destilación reactiva, los esquemas fueron diseñados y afinados simultáneamente usando el método de evolución diferencial con lista tabú (DETL). Se utilizaron criterios como coste anual, eco-indicador 99, riesgo individual y número de condición, que evalúan impactos económicos, medioambientales, de seguridad y control. Estos criterios se basan en los 12 principios de sostenibilidad establecidos por Jimenez Gonzales y Contanble en 2011.

METODOLOGÍA

El proceso de producción de bioturbosina ATJ consta de 3 etapas fundamentales, las cuales son: la deshidratación de alcoholes para producir alquenos, que son posteriormente introducidos a una etapa de oligomerización donde se incrementa el peso molecular de dichos alquenos. Finalmente, estos alquenos, también llamados olefinas, son convertidos en alcanos (parafinas) en una etapa de hidrogenación catalítica, para obtener como productos naftas, bioturbosina y diésel, los cuales son separados en un tren de destilación (Ver Figura 1). De entre estas etapas la oligomerización e hidrogenación son en términos de consumo energético, puesto que es en esta fase donde se generan y segregan los hidrocarburos. La intensificación de este proceso, junto con métodos de optimización meticulosos, tiene el potencial de disminuir tanto el consumo energético como los gastos operativos, con el objetivo de potenciar la rentabilidad y promover la implementación de estos procedimientos. En la presente investigación, proponemos la intensificación de la oligomerización, hidrogenación y separación a través de destilación reactiva catalítica. Ambos, los procesos intensificados y el convencional, se diseñaron y optimizaron de

manera simultánea, empleando el método estocástico de optimización de evolución diferencial con lista tabú (DETL), con un flujo de entrada de etileno de 2100kg/hr. Este diseño y optimización simultáneos se realizaron en una plataforma híbrida que integra Aspen Plus, Excel y Matlab. Se adoptó el modelo termodinámico SRK, siguiendo el algoritmo de Carlson. Los procesos estudiados en este trabajo se muestran en la Figura 1 y constan del proceso convencional, intensificación de la etapa de hidrogenación mediante una columna de destilación reactiva y finalmente la intensificación de las etapas de oligomerización, mediante una columna de destilación reactiva doble catalítica.

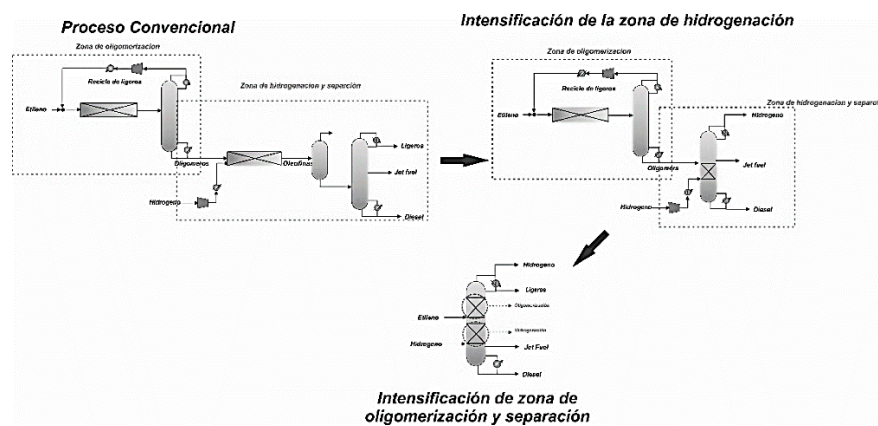


Figura 1. Intensificación del proceso ATJ, mediante destilación reactiva catalítica.

Para determinar el Costo Anual Total (TAC), se aplicó la metodología propuesta por Guthrie. Esta considera tanto el costo de capital de todos los equipos involucrados en el proceso, como los gastos operativos vinculados al uso de vapor para calentamiento, agua para enfriamiento y consumo eléctrico. Los parámetros esenciales para el cálculo del TAC se derivaron de la obra de Turton et al. (2008). Se estableció un horizonte de amortización de 10 años y se optó por el acero inoxidable como material predominante para la construcción de todos los equipos. Los gastos operativos se estimaron basándose en un funcionamiento anual de la planta de 8,500 horas, englobando los costos asociados al calentamiento, enfriamiento y consumo eléctrico. De manera matemática, el TAC se expresa a través de la ecuación (1).

$$TAC = \frac{\text{Costo de capital}}{\text{Tiempo de recuperación}} + \text{Costo de operación} \quad (1)$$

Se utilizó el Ecoindicador 99 (EI99) con el objetivo de evaluar las repercusiones ambientales correspondientes a cada proceso estudiado. Dicha métrica se fundamenta en un análisis de ciclo de vida ya consideración de tres categorías de impacto: repercusiones en la salud humana, influencia en la calidad del ecosistema y el agotamiento de recursos naturales.

Desde una perspectiva matemática, el Ecoindicador se formula de la siguiente manera:

$$EI99 = \sum_b \sum_d \sum_{k \in K} \delta_d \omega_d \beta_b \alpha_{b,k} \quad (2)$$

Donde, βb representa la cantidad total de químico liberado b por unidad de flujo de referencia debido a emisiones directas, $\alpha_{b,k}$ es el daño causado in la categoría k por unidad de químico liberado b al ambiente, ω_d es el factor de peso para el daño en la categoría d , y δ_d es el factor de normalización para el daño de la categoría d , respectivamente. Los valores de los pesos y de cada categoría de impacto fueron tomados de Quiroz-Ramirez et al 2017.

Respecto a la seguridad, se recurrió al Índice de Riesgo Individual (IRI). Este índice se obtiene a través de un análisis cuantitativo de riesgo, permitiendo identificar y cuantificar las consecuencias potenciales derivadas de un incidente adverso. Para la determinación del IRI, se tomó como referencia una distancia estandarizada de 50 metros.

La expresión matemática que describe el índice de riesgo individual se expresa como sigue:

$$IR = \sum f_i P_{x,y} \quad (3)$$

Donde f_i es la frecuencia con la que ocurre in incidente i , mientras $P_{x,y}$ es la probabilidad de lesión o deceso causado por el incidente i . Finalmente, el número de condición se usó como parámetro para medir la controlabilidad de los procesos. Este índice fue calculado, mediante la descomposición de valores singulares de la matriz de ganancias relativas, de acuerdo con la ecuación 4:

$$K = W \cdot S \cdot V^T \quad (4)$$

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:

$$\gamma = \frac{\sigma^*}{\sigma_*} \quad (5)$$

Cabe destacar que el número de condición es un indicador de la sensibilidad del sistema ante posibles perturbaciones. Un valor elevado de este número sugiere una alta susceptibilidad del sistema a dichas perturbaciones, lo cual podría derivar en inestabilidades en el comportamiento dinámico del mismo. Con base en estudios previos, se recomienda que el número de condición no exceda un valor de 1,000 para asegurar la estabilidad del sistema (Contreras-Zarazúa et al., 2017).

El problema de optimización multi-objetivo fue resuelto usando la técnica matemática conocida como evolución diferencial con lista tabú (DETL). Los valores de los parámetros requeridos por el método DETL son los siguientes: tamaño de población: 120 individuos, número de generaciones: 710, lista tabú: 60 individuos, radio tabú: 0.01, fracción de cruce: 0.8, factor de mutación: 0.3. El método DETL y las funciones objetivo fueron implementadas en una plataforma híbrida, la cual vincula ASPEN PLUS y Excel a través de Visual Basic.

Con base a los anterior, el problema de optimización puede plantearse matemáticamente conforme a las ecuaciones 6 y 7.

$$\min Z = \{TAC; Eco99; IR\} = \left\{ \frac{\text{Capital cost}}{\text{Payback period}} + \text{Operating cost}; \sum_b \sum_d \sum_{k \in K} \delta_d \omega_b \beta \alpha_{b,k} \cdot \sum_{i,x,y} f_{i,x,y} P_{i,x,y} \right\} \quad (6)$$

$$\text{Subject to: } \begin{aligned} & y_{i,F} \geq TE_{i,F} \\ & w \geq u \end{aligned} \quad (5)$$

Las funciones objetivo están restringidas a cumplir con las especificaciones de puntos de ebullición mínimos ($TE_{i,F}$) para cada uno de los productos, los cuales son 220°C para el jet fuel y 300°C para el diésel. Por otro lado, el problema de optimización también está sujeto a cumplir con cantidades mínimas de producción ($u_{i,F}$), las cuales son de 1000 kg/hr para el jet fuel y 100 kg/hr para el diésel. Las variables de decisión consideradas son el número de etapas, etapas de alimentación, número de etapas reactivas, valores de hold-up, relación de reflujo y carga térmica.

RESULTADOS

En el presente segmento, se exponen los hallazgos conseguidos a lo largo de la fase de diseño y optimización conjunta de la columna catalítica. Con el propósito de identificar la solución que manifiesta una armonía óptima entre las funciones objetivo propuestas, se recurrió a la metodología conocida como "Punto de Utopía". Esta técnica se fundamenta en el análisis del frente de Pareto, que se ilustra detalladamente en la Figura 2.

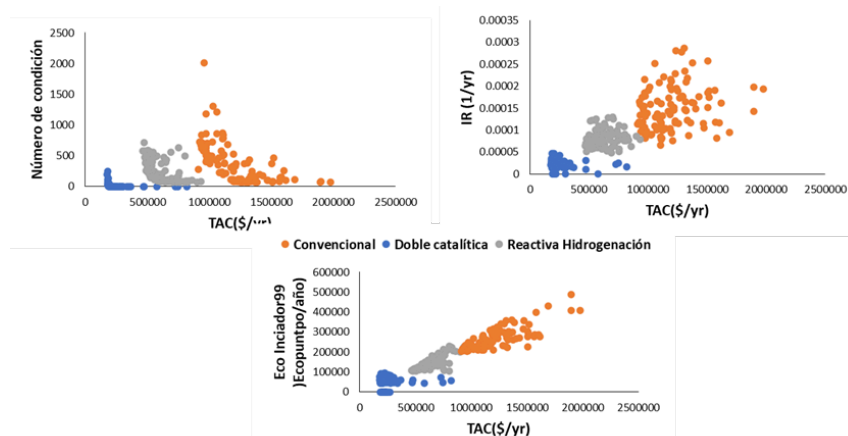


Figura 2. Frentes de Pareto para el proceso convencional y las alternativas intensificadas.

A partir de la Figura 2, se puede observar que la columna de destilación reactiva doble catalítica presenta los menores costos, impactos ambientales y mejor seguridad. Estos resultados previos arrojan que no solo es factible intensificar la etapa de oligomerización e hidrogenación, sino que se puede obtener ahorros significativos en costo e impacto de hasta un 70% en comparación con el proceso convencional. Estos ahorros se deben principalmente a ahorros en energía y costo de equipos. Es importante mencionar que las

mejoras en seguridad se deben a que el proceso requiere menor número de equipos. Al ser el riesgo un índice de riesgo inherente, la reducción en el número de equipos tiene un efecto importante, debido a esto, el proceso catalítico es considerado hasta 6 veces más seguro que su contra parte convencional. Finalmente, contrario a lo que se pensaba, los resultados preliminares de este estudio arrojan que la columna doble catalítica presenta mejores propiedades de control. Este resultado no era esperado, ya que al ser la columna doble catalítica un equipo mucho más complejo y que integra ambas etapas, se esperaba que el proceso fuera sensible a disturbios. Sin embargo, los resultados arrojan que no solo resiste disturbios, sino que es el proceso que menos sensible es a los mismos. Debido a que la columna catalítica presenta mejores costos, impacto ambiental, seguridad y control, se selecciona como el mejor proceso para producir bioturbosina. Sin embargo, es importante mencionar que, a pesar de que estos resultados son prometedores, son necesarios estudios de control a fin de determinar de mejor manera si dicho proceso es factible de operar ya de manera industrial.

CONCLUSIONES

En este estudio propone intensificar el proceso ATJ a través de esquemas avanzados de destilación reactiva, con el objetivo de optimizar las etapas de oligomerización e hidrogenación. Utilizando el método de evolución diferencial con lista tabú, se diseñaron y optimizaron varios esquemas, evaluándose en función de criterios económicos, ambientales, de seguridad y control, basados en los 12 principios de sustentabilidad para procesos químicos. Los hallazgos destacan que la columna de destilación reactiva doble catalítica ofrece una reducción en costos e impactos ambientales de hasta el 70% frente al proceso tradicional, y exhibe una superior resistencia a disturbios. En consecuencia, esta columna es identificada como la opción óptima para la producción de bioturbosina.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Ko, J. K., Lee, J. H., Jung, J. H., & Lee, S. M. (2020). Recent advances and future directions in plant and yeast engineering to improve lignocellulosic biofuel production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 134, 110390.
2. Jiménez-González, C., & Constable, D. J. (2011). *Green chemistry and engineering: a practical design approach*. John Wiley & Sons.
3. 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>
4. Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., 2018. *Analysis, synthesis and design of chemical processes*. Pearson Education., 1-1200.
5. Quiroz-Ramírez, J. J., Sánchez-Ramírez, E., Hernández-Castro, S., Segovia-Hernández, J. G., Ponce-Ortega, J. M.; (2017). Optimal planning of feedstock for butanol production considering economic and environmental aspects, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 5(5), 4018-4030.

Optimización de una columna de destilación reactiva para la producción de propilenglicol a partir de glicerol renovable

Jahaziel Alberto Sánchez-Gómez ^a, Fernando Israel Gómez-Castro ^{a,*}, Salvador Hernández ^a

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

RESUMEN

El glicerol es un importante derivado de la biomasa que actualmente es obtenido como subproducto en la producción de biodiésel. Debido al aumento en la producción del biocombustible, el glicerol crudo se ha vuelto muy competitivo para su uso como molécula plataforma en la generación de productos químicos de alto valor añadido, debido a su bajo precio. En el presente trabajo se realiza la intensificación y optimización de procesos para la producción de propilenglicol (PG) a partir de glicerol. Los parámetros de diseño del esquema de destilación reactiva se ajustan mediante optimización rigurosa utilizando algoritmos genéticos con transferencia de datos entre Python y Aspen Plus. El costo total anual obtenido para el esquema de destilación reactiva es de 1174.12 USD/año, con un costo de operación y capital de 979.79 USD/año y 971.66 USD, respectivamente.

Palabras clave: propilenglicol, glicerol renovable, destilación reactiva, algoritmo genético.

INTRODUCCIÓN

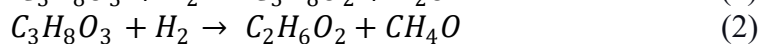
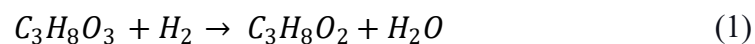
El glicerol renovable es un sub-producto que se genera en el proceso de producción de biodiésel por transesterificación de triglicéridos. En comparación con los combustibles fósiles, el biodiésel es un recurso renovable ya que puede reducir los gases de efecto invernadero al ser respetuoso con el medio ambiente y tener emisiones mínimas de carbono (Rasrendra et al., 2023). El aumento en la producción mundial del biodiésel ha tenido como consecuencia un incremento en la generación de glicerol; al año 2020 se ha reportado la obtención de más de 4.6 billones de litros de glicerol crudo derivado de la producción de biodiésel (REN 21, 2021).

Por otra parte, el glicerol tiene un gran potencial de valorización, siendo la base para la obtención de derivados de alto valor, tales como el 1,2-propilenglicol, el 1,3-propilenglicol, el etilenglicol, entre otros (Muraza, 2019). El propilenglicol es un derivado de gran interés, dadas sus diversas aplicaciones. La producción de propilenglicol a partir del glicerol renovable es una alternativa sostenible en comparación con la producción tradicional a partir de fuentes fósiles. Sin embargo, aún hay áreas de oportunidad en el esquema de procesamiento, principalmente en términos del mayor costo asociado a la ruta a partir de glicerol. Una estrategia que podría permitir reducir dicho costo es la implementación de esquemas de intensificación de procesos. El proceso convencional involucra un sistema de reacción y un tren de separación, por lo que se cuenta con diversas alternativas para intensificar.

En este trabajo se presenta una propuesta de intensificación al proceso convencional de producción de propilenglicol a partir de glicerol renovable. El proceso intensificado involucra la implementación de un sistema de destilación reactiva, en el cual se lleva a cabo la reacción química y la separación en el mismo equipo. El proceso propuesto se simula en el software Aspen Plus. Dada la gran cantidad de variables de decisión involucradas en el esquema de destilación reactiva, así como la no linealidad del modelo que representa a este tipo de sistemas, se lleva a cabo su optimización por medio del acoplamiento del software de simulación con un algoritmo genético codificado en Python, teniendo como objetivo la minimización del costo total anual (TAC).

METODOLOGÍA

La conversión de glicerol ($C_3H_8O_3$) en propilenglicol ($C_3H_8O_2$) se realiza de manera directa teniendo como subproductos etilenglicol ($C_2H_6O_2$), metanol (CH_4O) y agua (H_2O). Las reacciones consideradas en la obtención de propilenglicol se muestran en las Ecuaciones 1 y 2. La reacción de hidroxigenación tiene lugar en fase líquida sobre una superficie catalítica de Cu/ZrO₂. Para dicha reacción fueron utilizados los modelos cinéticos desarrollados por Gabrysh et al. (Gabrysch et al., 2019). La variación de las constantes cinéticas con la temperatura está dada por la Ecuación de Arrhenius mostrada en la Ecuación 3. En la dicha ecuación, $k_{0,i}$ y E_A representan el factor preexponencial y la energía de activación para la constante cinética. Los parámetros cinéticos requeridos para el cálculo de la velocidad de reacción son mostrados en la Tabla 1.



$$k_i = k_{0,i} e^{-E_A/RT} \quad (3)$$

Tabla 1. Factor preexponencial y energía de activación para las reacciones de hidroxigenación.

$k_{0,i}$	E_A (kJ/mol)
$2 \times 10^{10} \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	106
$9 \times 10^7 \text{ L mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	97

En la optimización de procesos, es necesaria la selección de criterios adecuados que permitan determinar el potencial de cada esquema de procesamiento. Entre estos criterios de desempeño, uno de los más utilizados es el costo total anual (TAC, por sus siglas en inglés), el cual considera los costos de capital y costos de operación requeridos en el diseño de procesos, Ecuación 4. Los costos de operación (CO) incluyen los costos de vapor de calentamiento, agua de enfriamiento, electricidad y catalizadores. En cuanto al costo de capital (CC) considera los costos de las columnas, platos, intercambiadores de calor, bombas y compresores. En la evaluación de dichos costos, se utilizó la metodología propuesta por Guthrie (Turton et al., 2003), con la expresiones actualizadas y normalizadas al 2022.

$$TAC = CO + CC/PP \quad (4)$$

En la determinación del costo base de la coraza de las columnas, la altura se determinó a partir del número de etapas necesarias con una separación entre etapas de 0.6096 m, el diámetro de la columna fue obtenido a partir de la hidráulica de la columna utilizando la herramienta “*Column Internals*” de Aspen Plus. En la evaluación del costo de los intercambiadores de calor necesarias en las columnas convencionales y de destilación reactivas, el área de transferencia de calor se calculó utilizando la Ecuación 5.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ML} \quad (5)$$

Donde U se consideró como 0.568 kW/K m² para el rehervidor y 0.852 kW/K m² para el condensador (Liu et al., 2023). ΔT_{ML} es la diferencia de temperatura media logarítmica. En la remoción y suministro de calor, se hizo el uso agua de enfriamiento y vapor de alta presión, respectivamente. Los costos unitarios de los servicios utilizados se presentan en la Tabla 2.

Tabla 2.- Costos unitarios utilizados.

Servicio	Costo
Vapor de Alta Presión (\$/GJ)	12.25
Agua de Enfriamiento (\$/GJ)	0.354
Electricidad (\$/kWh)	0.0775
Catalizador (\$/kg)	143.9

Las expresiones y parámetros presentados anteriormente fueron utilizadas como base para la codificación de funciones matemáticas dentro del lenguaje de programación Python, las cuales se utilizan para la evaluación de la función objetivo en el proceso de optimización. Los parámetros de diseño del esquema de proceso se ajustarán mediante la optimización rigurosa utilizando un algoritmo de optimización estocástica y la transferencia de datos entre Python y Aspen Plus. Una descripción del proceso de optimización se ilustra en la Figura 1.

La conexión entre Python y el simulador de procesos se realizó a través de un modelo de objetos componentes (COM, por sus siglas en inglés), en el cual un archivo de simulación de Aspen Plus es definido como un componente de software binario que permite ser controlado para leer y escribir datos en las corrientes/bloques de proceso. Se desarrolló un código en Python para realizar la evaluación automática del TAC a partir de la modificación de los parámetros de diseño dentro del modelo de optimización estocástica. Se ha seleccionado un algoritmo genético (GA) como algoritmo de optimización. El método de GA se implementó mediante la utilización de la librería Pymoo de acceso libre y codificada en el lenguaje de programación Python (*Pymoo: Multi-Objective Optimization in Python*, n.d.). La función objetivo y las restricciones para la optimización se muestran en la Ecuación, 6 donde TAC corresponde al costo total anual del esquema intensificado y x_{PG} a la fracción molar de PG. Las variables y rangos de optimización se presentan en la Tabla 3.

$$\begin{aligned} \min_{x \in R^n} f(x) &= TAC(N, N_{rea}, RR, FF, F_{PG}) \\ \text{sujeto a:} \\ x_{PG} &\geq 0.99 \end{aligned} \quad (6)$$

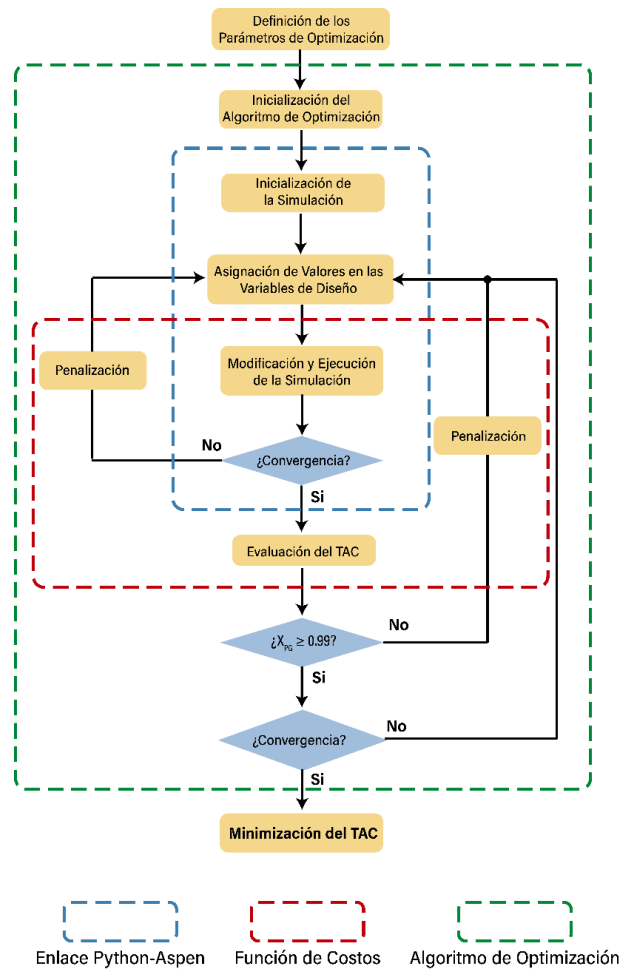


Figura 1.- Diagrama de flujo de la metodología de optimización utilizada.

Tabla 3.- Descripción del esquema de destilación reactiva y las variables de optimización.

Esquema de proceso	Variables	Tipo	Rango
	Número de etapas, N_I	Discreta	10-80
	Relación de reflujo, RR_I	Continua	0.2-5.0
	Flujo de fondos, FF_I	Continua	14-19, kmol/h
	Etapa reactiva, N_{rea}	Discreta	6-78
	Retención, H	Continua	0.1-0.7, m^3
	Número de etapas, N_{II}	Discreta	10-80
	Relación de reflujo, RR_{II}	Continua	0.2-5.0
	Flujo de destilado, FD_I	Continua	14-19, kmol/h

RESULTADOS

El diagrama optimizado del esquema de destilación reactiva se muestra en la Figura 2. En la Columna I, con 21 etapas, los caudales de glicerol e hidrógeno son alimentados en las etapas 13 y 18, respectivamente. Dichos reactivos son transformados en propilenglicol en la zona reactiva entre las etapas 14 a 17. El propilenglicol producido es purificado hasta una fracción molar de 0.94 y retirado en la corriente de fondos junto con restos de glicerol sin convertir y etilenglicol como subproducto de reacción. En la Columna II, con 47 etapas, la corriente de propilenglicol obtenido anteriormente es alimentado al centro de la columna (etapa 21). En el fondo de dicha columna se obtienen los restos de glicerol y etilenglicol, y propilenglicol con una pureza del 99% en mol como producto de domo.

Por otra parte, como se puede apreciar en la Figura 2, existe un mayor requerimiento energético en la Columna I (1430 kW) debido principalmente a las condiciones de presión y temperatura requeridas para poder realizarse la destilación reactiva. Así mismo, se puede observar una carga térmica considerable para la remoción de energía en el condensador de la Columna I (-1736 kW), lo cual se puede relacionar con la abundante cantidad de agua y de trazas de hidrógeno presentes en la corriente de destilado.

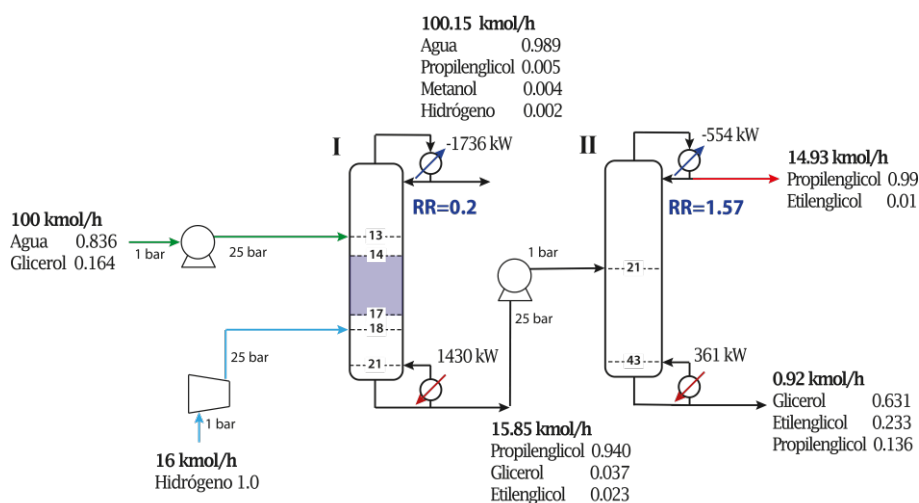


Figura 2.- Esquema de proceso optimizado para la producción de PG.

El valor del TAC obtenido para el esquema propuesto de destilación reactiva es de 1174.12 USD/año, con un costo de operación y capital de 979.79 USD/año y 971.66 USD, respectivamente. En las Figuras 3A y 3B se pueden observar las relaciones de los costos de servicios y equipamiento en los costos de operación (CO) y costos de capital (CC), respectivamente. Como se aprecia en la Figura 3 A), el servicio de vapor representa el mayor costo de operación (77.86%) debido principalmente a las condiciones de presión y temperatura requeridos en el sistema de destilación reactiva. En los costos de capital, Figura 3B), se puede observar que los costos más grandes están relacionados al costo de los condensadores y compresores.

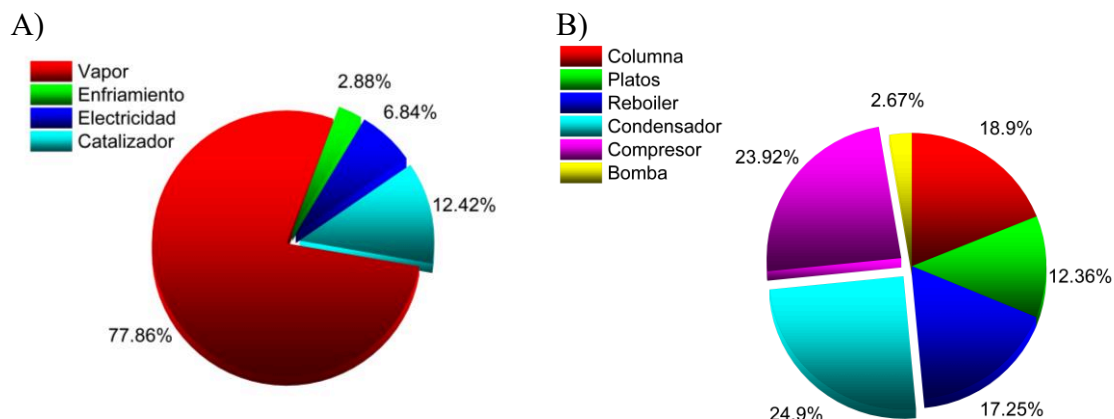


Figura 3.- A) Costos de operación y B) costos de capital obtenidos de la optimización del TAC en el esquema de destilación reactiva.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se realizó el diseño y la optimización del proceso intensificado para la obtención y purificación de propilenglicol con una pureza del 99% en mol, mediante un sistema de destilación reactiva. La optimización de dicho esquema permitió obtener una configuración del proceso optima con un TAC de 1174.12 USD/año, al cual se le atribuye un costo de operación de 979.79 USD/año y un costo de capital de 971.66 USD, respectivamente. Como trabajo futuro se realizará la comparación de los resultados obtenidos con el diseño optimizado del esquema de proceso convencional y otras propuestas de esquemas intensificados como sistemas de destilación con acoplamiento térmico.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Gabrysch, T., Muhler, M., y Peng, B. (2019). The kinetics of glycerol hydrodeoxygenation to 1,2-propanediol over Cu/ZrO₂ in the aqueous phase. *Applied Catalysis A: General*, 576(March), 47–53.
- Keller, T. (2014). Reactive Distillation. En A. Górak y Z. Olujic (Eds.), *Distillation: Equipment and Processes* (pp. 261–294). Academic Press.
- Liu, J., Zhang, Z., Sun, M., Kong, J., Dong, M., y Sun, L. (2023). Intensification and performance assessment of ethanol production process by hydrogenation of methyl acetate. *Chemical Engineering Research and Design*, 189, 619–635.
- Muraza, O. (2019). Peculiarities of glycerol conversion to chemicals over zeolite-based catalysts. *Frontiers in Chemistry*, 7(APR), 1–11.
- Pymoo: Multi-objective Optimization in Python. (n.d.). Última consulta el 31 de agosto de 2023, en <https://pymoo.org/index.html>
- Rasrendra, C. B., Culsum, N. T. U., Rafiani, A., y Kadja, G. T. M. (2023). Glycerol valorization for the generation of acrylic acid via oxidehydration over nanoporous catalyst: Current status and the way forward. *Bioresource Technology Reports*, 23, 101533.
- REN 21. (2021). Renewables 2021, Global Status Report - REN21. Última consulta el 08 de junio de 2023, en https://www.ren21.net/wp-content/uploads/2019/05/GSR2021_Full_Report.pdf.
- Turton, R., Bailie, R., y Whiting, W. (2003). Analysis, synthesis, and design of chemical processes. Prentice Hall, New Jersey.

Comparison between Differential Evolution algorithm and Boltzmann-based distribution algorithm coupled to constraints handling technique to optimize distillation processes

Jazmín Cortez-González¹, Rodolfo Murrieta-Dueñas^{1,*}, Roberto Gutiérrez-Guerra²,
Arturo Hernández-Aguirre³, Juan Gabriel Segovia-Hernández⁴

¹*Tecnológico Nacional de México/ ITS Irapuato, Silao-Irapuato km 12.5 El Copal, 36821 Irapuato, Gto., Mexico.*

²*Universidad Tecnológica de León, Campus I, Blvd. Universidad Tecnológica 225, Col. San Carlos. C.P. 37670, León, Gto., Mexico.*

³*Centro de Investigación en Matemáticas A.C., Callejón de Jalisco s/n, 36240, Mineral de Valenciana, Guanajuato, Gto., México.*

⁴*Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Noria Alta s/n, 36050, Guanajuato, Gto., Mexico.*

Corresponding: rodolfo.md@irapuato.tecnm.mx

ABSTRACT

In this paper, a comparison of the performance of stochastic algorithms is presented: the Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm (BUMDA), based on the Boltzmann distribution, and the Differential Evolution (DE) algorithm, which is frequently used in chemical engineering optimization. These algorithms are coupled with a self-adaptive constraints handling technique to optimize distillation processes. The problem statement for optimization consists of minimizing the total heat duty in three distillation schemes, subject to purity and recovery equality constraints. The results show that the BUMDA algorithm is better than the DE algorithm due to its reduction in computational effort, improved solution quality, short computing time, and its capability to avoid getting trapped in local minima. The BUMDA algorithm, coupled with the self-adaptive constraints handling technique, is an efficient optimization tool of general applicability for all types of separation processes

Keywords: Differential Evolution algorithm, Boltzmann-based algorithm, comparison of stochastic algorithms, distillation schemes optimization.

1. INTRODUCTION

In recent years, the performance comparison of some optimization algorithms has been performed to verify their efficiency and effectiveness in case studies such as water distribution networks, HiDic column optimization and exergic analysis (El-Ghandour, H. A., & Elbeltagi, E., 2018; Babaie, O., & Esfahany, M. N., 2020; Jahromi, F. S. et al., 2018; Gutiérrez-Guerra, R. et al., 2023). The results show that each algorithm is able to find an optimum, but in some cases the efficiency depends on the seed point in the search, others require large amount of function evaluations to find the feasible zone and some others are able to intensify their search. However, the performance of algorithms

based on the distribution has not been compared, so in this paper we propose to analyze different case studies of separation processes an algorithm based on the Boltzmann distribution, with respect to an algorithm that has been generally used in chemical engineering, ED.

2. METHODOLOGY

In this paper, a comparison of two evolutionary algorithms is presented: Differential Evolution (DE) and the Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm (BUMDA), coupled with a self-adaptive constraints handling technique, applied to the optimization of distillation schemes using a rigorous model (MESH equations). These algorithms were selected because DE is frequently applied in optimization and is respected in the community (Storn and Price, 1995). The BUMDA algorithm, which is based on the Boltzmann distribution, is less commonly applied in chemical engineering but is capable of escaping local optima and finding feasible zones due to the incorporation of a mechanism to re-initialize variance (Valdez et al., 2013). The optimization methodology employed in this work utilizes an interactive interface between the optimization algorithm, process simulator, and a database."

2.1 *Differential Evolution (DE)*

Differential Evolution was proposed by Storn and Price (1995). DE applies a stochastic search method in which the population is modified in each generation. DE initializes individuals randomly within the search space to form an initial population. Each individual contains decision variables or a decision vector. In each generation or iteration, all individuals are selected as parents. Each parent is processed as follows: The mutation process begins by choosing three individuals from the parents, excluding the parent under processing. The first chosen individual is the base vector. Subsequent individuals are paired to determinate difference vectors. These difference vectors are scaled by the scaling factor, denoted as F , and then added to the base vector. The resultant vector is recombined with the parent to generate a new test vector, referred to as 'trial vector'. The factor that controls this recombination is the crossover factor, denoted as CR. Finally, for survivor selection, the trial vector is included in the next generation if it is superior to the parent.

2.2 *Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm (BUMDA)*

Recently, a new area of evolutionary computation has been proposed, known as Estimation of Distribution Algorithms (EDAs), in which there are neither crossover nor mutation operators. The new population is generated by sampling a probability distribution estimated from a database containing selected individuals from the previous generation (BUMDA, Valdez et al., 2013). The first step in the BUMDA algorithm is to initialize the boundaries of the search space and determine the fitness function for each individual. Only the top 30% of individuals from each generation are selected, and their mean and variance are calculated. These parameters are then used to define a Normal Distribution, which is utilized to generate the next population.

2.3 Constraint handling technique

The case studies analyzed in this work are subject to both equality and inequality constraint, thus a self-adaptive constraints handling technique is implemented. The constraint handling approach begins by verifying if an individual is feasible; infeasible individuals are rejected, which is also referred to as a 'death penalty' approach. The fitness function is penalized based on the degree of constraint violation, proportionate to the amount of violation. Additionally, another aspect concerns the distance of achieved purity or recovery for each component from the set point. Furthermore, a dynamic threshold denoted as ' δ ' is introduced, which transforms an equality constraint into an inequality constraint.

3. CASE STUDIES

Mathematical models of distillation in chemical engineering are based on MESH equations. These equations present convergence difficulties due to their non-linear and non-convex nature. Additionally, they require significant computational effort to find solutions. For this work, three case studies were selected: a binary distillation column, a distillation train, and a quaternary column distillation.

3.1 Binary distillation column

We selected a binary mixture composed of butane and hexane, and employed the Chao-Seader thermodynamic model. The mixture is equimolar. The feed flowrate for the mixture is in the liquid saturated state and amounts to 100 kmol/h at 1 atm. The optimization problem is:

$$\min_{\mathbf{x}} \quad \left(\quad \right) \quad \left(\quad \right)$$

Where: N is total stage number, F feed stage and R reflux ratio of the column respectively. In this problem the goal is to minimize the amount of energy in the reboiler.

3.2 Distillation train

We studied a multicomponent mixture consisting of four linear aliphatic hydrocarbons (C4-C7) with a flow rate of 100kmol/h. The composition of the mixture is 0.05, 0.45, 0.45, 0.05 for n-butane, n-pentane, n-hexane, and n-heptane, respectively. The equilibrium between liquid and vapor phases was modeled using the Chao-Seader model, which is commonly recommended for hydrocarbon mixtures operating at low or medium pressure. In mathematical terms, the optimization problem statement is as follows:

$$\min_{\mathbf{x}} \quad \left(\quad \right) \quad \left(\quad \right)$$

3.3 Optimization of a intensified column

The intensified sequences consist of a feed stream and four outlet streams. The light component (C1) is obtained in the top column, while the intermediate components (C2 and C3) are withdrawn in the side streams. Conversely, the heavy component (C4) is separated in the bottom column. The intensified sequences are subject to several design conditions. For instance, the number of stages in the side stream outlets must not be the same as each other, nor should they match the stage of the feed stream. In mathematical terms, the optimization problem statement is as follows:

$$(\quad) \quad (\quad) \quad (\quad)$$

4. DISCUSSION OF RESULTS

The simulations were conducted on a PC computer with an i7 processor core, 16 GB of RAM, and a clock frequency of 2.8 GHz. The DE algorithm parameters used in all cases were CR=0.8 and F=0.75, with 100 individuals per generation and a total of 20,000 function evaluations. For the BUMDA algorithm, 60 individuals were used per generation with a total of 3,000 function evaluations, and the truncation population parameter was set at 1/3.

In the all cases, the procedure begins by generating the population through the master program (DE or BUMDA algorithm), and the resulting design variables are sent to and saved in Excel. The feasibility of the individuals is then verified. These design variables are used to call Aspen Plus, where the fitness function is evaluated. The obtained fitness value is returned to Excel to compute the constraints, and the resulting value is sent to Matlab, where the population is sorted. The information gathered is used as the basis for generating the subsequent population. This process continues until the stopping criterion is reached. In this case, the criterion is the number of function evaluations.

Table 1 shows the best results obtained for each of the algorithms, in each case of study. This table shows that in the three cases the optimal values found by the BUMDA algorithm reduce at least 2 GW/year.

Table 1. Results of the optimization process for the several case studies.

Q (GW/year)		
Case study	DE algorithm	BUMDA algorithm
Binary column	4.588	2.624
Distillation train	9.426	7.153
Intensified column	39.861	33.98

The obtained results are shown in Tables 2, 3, and 4, where the best individual from the cases: binary column, distillation train, and intensified column, respectively, for each algorithm is presented based on the best fitness function value. These individuals satisfy all constraints.

Table 2. Optimal design variables of binary column.

Design variables				Fitness function Q (GW/year)
ALGORITHM	NT	NF	RR	
DE	6	4	2.686	4.588
BUMDA	7	4	0.896	2.624

Table 3. Optimal design variables of distillation train.

Design variables										Fitness function Q (GW/year)
ALGORITHM	B1			B2			B3			
	NT	NF	RR	NT	NF	RR	NT	NF	RR	
DE	18	11	20	34	21	3.946	30	19	1.482	9.426
BUMDA	26	10	14.73	28	17	2	17	9	1.697	7.153

Table 4. Optimal design variables of intensified column.

Design variables						Fitness function Q (GW/year)
ALGORITHM	NT	NF	NS1	NS2	RR	
DE	68	36	23	52	70.232	39.861
BUMDA	84	47	40	55	59.55	33.98

According to the results shown in Tables 2, 3 and 4, the designs found by the BUMDA algorithm offer a lower total number of stages in most cases. Regarding the reflux ratio,

a similar behavior is presented. On the other hand, the computational requirement of the BUMDA algorithm is lower, with respect to ED.

5. CONCLUSIONS

This paper presents a comparison between the DE algorithm and the BUMDA algorithm. Both algorithms were tested to optimize three problems: the binary column, distillation train, and a single column for separating four components. In two cases, the stopping criterion is the total number of function evaluations.

The main aim of this paper is to compare the performance between the DE algorithm and the BUMDA algorithm. The first algorithm is inspired by natural phenomena, and the second algorithm is based on the estimation of the Boltzmann distribution. We will compare the computing time, solution quality, and the ability to avoid getting trapped by local minima.

- a) The total number of function evaluations, called computing effort, is the first parameter for comparison. According to the results, the BUMDA algorithm reduces the required number by 85% compared to the DE algorithm in finding a solution.
- b) The BUMDA algorithm is capable of explore other zones by a mechanism re-initialization of variance every time that achieves a threshold variance that allow get out of local optimums

According to the results, the BUMDA algorithm is capable of exploring the entire search space, identifying several feasible zones, and initiating the intensification process in the best feasible zone

REFERENCES

1. El-Ghandour, H. A., & Elbeltagi, E. (2018). Comparison of five evolutionary algorithms for optimization of water distribution networks. *Journal of Computing in Civil Engineering*, 32(1), 04017066.
2. Babaie, O., & Esfahany, M. N. (2020). Optimization and heat integration of hybrid R-HIDiC and pervaporation by combining GA and PSO algorithm in TAME synthesis. *Separation and Purification Technology*, 236, 116288.
3. Jahromi, F. S., Beheshti, M., & Rajabi, R. F. (2018). Comparison between differential evolution algorithms and response surface methodology in ethylene plant optimization based on an extended combined energy-exergy analysis. *Energy*, 164, 1114-1134.
4. Gutiérrez-Guerra, R., Segovia-Hernández, J. G., & Hernández, S. (2023). Study of dynamic performance of heat-integrated distillation columns considering the effect of relative volatility of the mixtures. *Chemical Engineering Research and Design*, 191, 446-461.
5. Valdez, S. I., Hernández, A., & Botello, S. (2013). A Boltzmann based estimation of distribution algorithm. *Information Sciences*, 236, 126-137.

Diseño de una interfaz gráfica de usuario para la optimización de columnas de destilación con métodos estocásticos

Rodolfo Murrieta-Dueñas^{1,*}, Jazmín Cortez-González¹, Yolanda Itzel Vargas Mendoza¹,
Dulce María Palma-Montoya¹, Roberto Gutiérrez-Guerra²

¹*Tecnológico Nacional de México/ ITS Irapuato, Silao-Irapuato km 12.5 El Copal, 36821 Irapuato, Gto., Mexico.*

²*Universidad Tecnológica de León, Campus I, Blvd. Universidad Tecnológica 225, Col. San Carlos. C.P. 37670, León, Gto., Mexico.*

Corresponding: rodolfo.md@irapuato.tecnm.mx

RESUMEN

En este trabajo se presenta una propuesta de una interfaz gráfica de usuario (GUI) desarrollada en Matlab capaz de optimizar columnas de destilación binaria a través de dos métodos estocásticos que son Evolución Diferencial (ED) y Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm (BUMDA). Dicho interfaz solo requiere elegir el algoritmo de optimización, dar como entrada los parámetros del algoritmo, los límites de las variables de diseño, el tipo de restricciones que desean aplicar y la dirección de los archivos para realizar la evaluación de la función objetivo. La GUI propuesta es amigable e intuitiva y además, considera una técnica de manejo de restricciones que favorece la búsqueda de la zona factible.

Keywords: Optimización, métodos estocásticos, GUI.

1. INTRODUCCIÓN

En el ámbito de la ingeniería química y la separación de componentes, la destilación por presión oscilante ha emergido como alternativa para la separación de mezclas azeotrópicas. Esta metodología se fundamenta en el aprovechamiento de las diferencias de presión para generar un desplazamiento del punto azeotrópico y realizar la purificación del componente de interés. Algunos autores han utilizado herramientas de optimización sofisticadas para encontrar las condiciones óptimas de operación de este tipo de esquemas de separación. En su mayoría, se han aplicado algoritmos estocásticos. Sin embargo, hasta la fecha no existe una interfaz que permita manejar ambos esquemas de separación de forma conjunta, ya que se establece la mejora sobre cada esquema. En este trabajo se desarrolló un software amigable con el usuario capaz de optimizar este tipo de esquemas, permitiendo que el usuario explore dos algoritmos evolutivos, ED y BUMDA, ambos acoplados a técnicas de manejo de restricciones (REFERENCIA). El software desarrollado permite la interacción entre un evaluador, una base de datos y el programa de optimización. Los resultados muestran que el software es capaz de encontrar condiciones óptimas para los esquemas de destilación con presión oscilante.

2. METODOLOGÍA

El desarrollo del software propuesto en este documento, considera dos etapas fundamentales: desarrollo de la interfaz de usuario y la implementación de los programas de optimización en la interfaz. En la Figura 1, se muestran las etapas requeridas para el desarrollo del presente trabajo.

En la primera etapa, se definió la forma, el estilo y la estructura de las diferentes ventanas que requería la interfaz para su implementación. Se inició con la basada en objetos para crear un ambiente visual idóneo para la interfaz. En la segunda etapa, se realizó la unión entre el software de optimización previamente programado en MatLab y la interfaz desarrollada en la primera fase. En las secciones 2.1 y 2.2 describe de forma más detallada cada una de estas etapas.

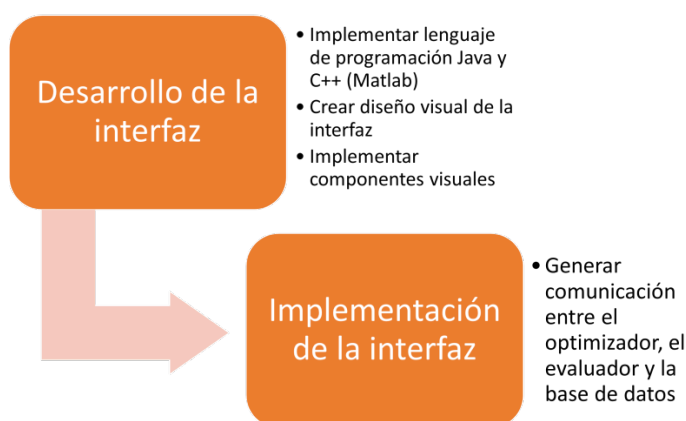


Figura 1. Etapas requeridas para el desarrollo de la interfaz gráfica de usuario (GUI).

2.1 Desarrollo de la interfaz gráfica de usuario (GUI)

Esta etapa del proyecto se enfocó en diseñar y construir la interfaz del sistema. Para decidir qué lenguaje de programación utilizar, se analizaron diversas opciones y finalmente se optó por utilizar dos lenguajes principales: Java y C++ (Matlab). Java fue elegido debido a su versatilidad y capacidad para desarrollar aplicaciones robustas y multiplataforma. Al utilizar Java, se asegura que la interfaz sea compatible con diferentes sistemas operativos y dispositivos, lo que facilita su implementación en diversos entornos. Además, Java ofrece una amplia gama de bibliotecas y herramientas que permiten la creación de componentes visuales y una interfaz de usuario atractiva y amigable.

Por otro lado, se optó por incorporar C++ para interactuar con Matlab, ya que Matlab es ampliamente utilizado en el ámbito científico y de ingeniería debido a su capacidad para realizar cálculos numéricos y análisis avanzados. Al utilizar C++ como conexión entre Java y Matlab, se facilita la comunicación y el intercambio de datos entre estos dos entornos.

En esta etapa, también se diseñó la interfaz visual del sistema. El diseño visual es una parte esencial de cualquier aplicación, ya que determina cómo los usuarios interactuarán con el sistema y cómo percibirán la información presentada. Se tuvieron en cuenta principios de usabilidad, accesibilidad y estética para asegurar que la interfaz sea fácil de usar y atractiva para los usuarios.

Además, se llevó a cabo la implementación de los componentes visuales de la interfaz. Esto implica la creación de botones, cuadros de texto, gráficos, tablas y otros elementos visuales que permiten a los usuarios interactuar con el sistema y recibir información de manera clara y efectiva. Se prestaron especial atención a la disposición y la organización de estos elementos para asegurar una experiencia de usuario fluida y satisfactoria.

2.2 Implementación de la interfaz

Esta fase, se centra en establecer la comunicación entre los diferentes componentes del sistema: el optimizador, el evaluador y la base de datos. El optimizador juega un papel crucial en el sistema, ya que es responsable de encontrar las soluciones óptimas para un problema determinado. Para lograr esto, el optimizador utiliza algoritmos y técnicas de optimización avanzadas como son Evolución Diferencial y Botlzmann Univariate Marginal Distribution. Además, el optimizador está programado en Matlab y es el responsable de la conexión entre Excel y el simulador secuencial modular.

Por otro lado, el optimizador también interactúa con Excel para importar y exportar datos. Excel es ampliamente utilizado para el manejo de hojas de cálculo y datos, por lo que se utilizó como una plataforma eficiente de intercambiar información y permitir a los usuarios trabajar con datos en un entorno familiar. Además, el optimizador se conecta con el simulador secuencial modular, lo que le permite obtener información sobre el rendimiento del sistema y evaluar la calidad de las soluciones propuestas a partir de la función objetivo. Esta evaluación se basa en métricas (carga térmica total) y criterios predefinidos (purezas y recuperaciones de cada componente), que ayudan a determinar qué soluciones son óptimas y cumplen con las restricciones establecidas.

Por último, la base de datos es utilizada para almacenar información relevante para el funcionamiento del sistema. En Excel, se evalúan las restricciones de cada individuo generado por el algoritmo de optimización. Además, es el responsable de la comunicación con el simulador modular secuencial. La implementación de la comunicación con la base de datos permite acceder y actualizar los datos de manera eficiente, asegurando que el sistema almacene toda la información posible de cada individuo generado por el optimizador.

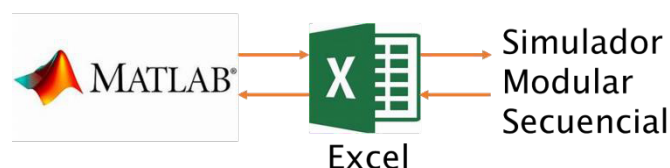


Figura 2. Interfaz de optimización.

3. CASO DE ESTUDIO

Para el desarrollo de interfaz, se eligió como caso de estudio los sistemas de destilación con presión oscilante. El sistema PSD utiliza la dependencia de la composición azeotrópica de la presión del sistema para romper el azeótropo. Cuando dicha composición de un azeótropo homogéneo binario cambia significativamente con la presión, los componentes químicos pueden separarse eficazmente utilizando dos columnas de destilación que funcionan a presiones diferentes. Este proceso se denomina destilación por presión oscilante. Dependiendo de la concentración inicial de la alimentación, son posibles dos entradas diferentes para la alimentación. Para una concentración de alimentación inferior al punto azeotrópico es útil alimentar la columna de baja presión (LP, ver Figura 1a); para una concentración de alimentación superior al punto azeotrópico, es útil alimentar la columna de alta presión (HP, ver Figura 1b). La concentración de ambos destilados (cerca del punto azeotrópico) depende de sus respectivas presiones. Cada corriente de destilado se alimenta en la otra columna, lo que provoca una situación de retroalimentación. Por lo tanto, este hecho supone un sistema de columna integrado en masa. Para una mezcla azeotrópica homogénea de alto punto de ebullición, las corrientes inferiores tienen que retroalimentarse respectivamente a la otra columna y los productos puros estarán en la parte superior.

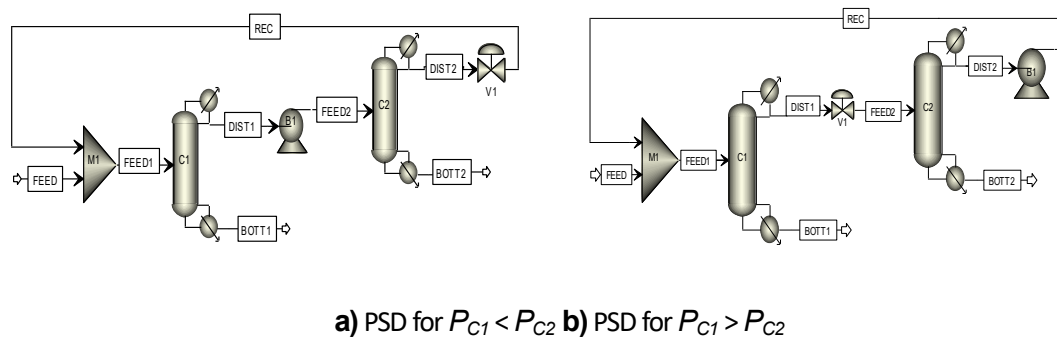


Figure 1. Esquemas para los sistemas de destilación por presión oscilante.

$$\begin{aligned} \text{Min } Q &= f(N_{T,C1}, N_{T,C2}, N_{F,C1}, N_{F,C2}, RR_{C1}, RR_{C2}, P_{C1}, P_{C2}) \\ \text{Subject to: } & \end{aligned} \quad \text{(Eq. 1)}$$

$$x_{\text{purity}} = x_{\text{recovery}} = 0.99 \pm \sigma; \quad N^F < N^T; \quad P^{C1} \neq P^{C2}$$

donde: $N_{T,C1}$ y $N_{T,C2}$ son el número total $N_{F,C1}$ y $N_{F,C2}$ son la etapa de alimentación, RR_{C1} y RR_{C2} son la relación de reflujo, P_{C1} y P_{C2} son las presiones de cada columna. El caso de estudio presentado es una mezcla azeotrópica de punto de ebullición mínimo a presión atmosférica cuyos componentes son alcohol *n-propílico* y éter *di-isopropílico* con 0,4 y 0,6 fracción molar, respectivamente. Las purezas requeridas en ambos componentes son del 99% en mol.

4. RESULTADOS

La interfaz gráfica de usuario (GUI) fue desarrollada en Matlab basada en el diagrama de flujo de la Figura 2. En esta figura, se muestra paso a paso cada una de las ventanas que tuvieron que ser desarrolladas para permitir que el ambiente del software de optimización fue versátil e intuitivo. Cada una de las entradas que se le pide al usuario está relacionada con datos que requiere la herramienta de optimización para iniciar el proceso.

En la primera etapa se muestra una ventana de inicio en la cual se agregaron botones de información para describir que requiere y cómo funciona el software. Para la siguiente ventana, se requiere alimentar al software las direcciones de los archivos de Excel y aspen con los que esta interactuando el programa, en cada una se proporciona información de cómo debe realizarse esta declaración. Posteriormente, se pide que el usuario identifique cada componente de acuerdo con su volatilidad.

En la siguiente ventana, se inicia la declaración de los límites que debe considerar el algoritmo para generar los individuos, para ello se le pide al usuario que ingrese los valores de acuerdo a cada una de los grados de libertad definidos para el caso de estudio. Debido a que se trabaja con el diagrama PSD, las variables que requieren estos datos son: número de etapas totales, presión, relación de reflujo y el valor de la diferencia mínima entre cada una de las presiones de operación de la columna.

Posteriormente, en la siguiente ventana se requiere la declaración de los parámetros tanto del algoritmo como de la técnica de manejo de restricciones. Los parámetros del algoritmo son tamaño de la población y número de evaluaciones de función, este último valor está relacionado con el criterio de paro del algoritmo de optimización. Respecto a la técnica de manejo de restricciones, se requiere que el usuario ingrese 4 valores que corresponden a: tipo de restricción (relajada o rígida), valor inicial del umbral dinámico y dos variables que son máximo número de etapas totales permitidas en el esquema PSD y la presión máxima de operación. Debido a la técnica de manejo de restricciones utilizada, las dos últimas variables son manejadas como objetivos adicionales al principal, pero se acoplan como restricciones del caso de estudio.



Figura 2.a Ventana de inicio de la interfaz gráfica de usuario.



Figura 2.b Ventana para colocar las direcciones de los archivos.



Figura 2c. Ventana para colocar los componentes de la mezcla.



Figura 2d. Ventana para colocar los límites de las variables.



Figura 2e. Ventana de Parámetros del algoritmo y Restricciones.



Figura 2f. Ventana para correr el programa.

Figura 2. Desarrollo de las ventanas desarrolladas para el software de optimización para esquemas PSD.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se presenta el desarrollo de una interfaz gráfica de usuario capaz de optimizar sistemas de destilación por presión oscilante, intuitiva y amigable. Esta interfaz fue diseñada para optimizar sistemas de separación de mezclas azeotrópicas sensibles a la presión. Debido a su versatilidad, le permite al usuario definir un evaluador independiente de la función objetivo y además, le ofrece al usuario aplicar una técnica de manejo de restricciones que puede manejar una restricción como un objetivo en el proceso de optimización.

REFERENCES

Lara-Montaña, O. D., & Gómez-Castro, F. I. (2019). Optimization of a shell-and-tube heat exchanger using the grey wolf algorithm. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 46, pp. 571-576). Elsevier.

Lara-Montaña, O. D., Gomez-Castro, F. I., & Gutiérrez-Antonio, C. (2021). Comparison of the performance of different metaheuristic methods for the optimization of shell-and-tube heat exchangers. *Computers & Chemical Engineering*, 152, 107403.

Optimización de sistemas de destilación por presión oscilante utilizando un algoritmo basado en la distribución de Boltzmann

Rodolfo Murrieta-Dueñas¹, Jazmín Cortez-González^{1,*}, Ingrid Paola Camarillo-Maciel¹,
Jocelyn Denisse Torres-Torres¹, Juan Gabriel Segovia-Hernández²

¹*Tecnológico Nacional de México/ ITS Irapuato, Silao-Irapuato km 12.5 El Copal,
36821 Irapuato, Gto., Mexico.*

²*Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Noria Alta s/n, 36050, Guanajuato,
Gto., Mexico.*

Corresponding: jazmin.cg@irapuato.tecnm.mx

RESUMEN

En la industria química y farmacéutica uno de los procesos de separación más utilizados es la destilación. Es común encontrar mezclas azeotrópicas de componentes de alto valor agregado que se desean purificar. A lo largo de la historia, se han encontrado diferentes alternativas para lograr purificar mezclas azeotrópicas como la destilación extractiva, la destilación azeotrópica homogénea o heterogénea, la destilación al vacío y la Destilación por Oscilación de Presión (PSD). Esta última es un tanto atractiva debido a que no se agregan sustancias ajenas que modifiquen las volatilidades de la mezcla y puedan causar impurezas en los productos. El uso de la PSD queda restringido a mezclas significativamente sensibles a los cambios de presión. En este trabajo se realiza la optimización de un esquema de PSD de una mezcla azeotrópica binaria sensible a cambios de presión. Se plantea un problema de optimización que integra la topología como una variable de diseño además de las variables propias de los sistemas de destilación. Se implementó el algoritmo evolutivo Boltzmann Univariate Marginal Distribution Algorithm (BUMDA) acoplado a una técnica de manejo de restricciones autoadaptativa que considera la presión como restricción de acuerdo con las condiciones de operación. Los resultados muestran que el algoritmo BUMDA acoplado a la técnica de manejo de restricciones permite encontrar la zona factible con un bajo esfuerzo de cómputo, es capaz de salir de óptimos locales y determinar los mejores diseños de la PSD.

Palabras clave: PSD, BUMDA, mezclas azeotrópicas, optimización estocástica

INTRODUCCIÓN

La destilación es ampliamente utilizada para purificar los componentes de una mezcla debido a que en comparación con otros métodos, ofrece flexibilidad, confiabilidad y bajo costo de inversión. A pesar de que es un proceso con una inherente baja eficiencia termodinámica, sigue siendo el proceso de separación más utilizado a nivel mundial en la industria química y farmacéutica para la purificación de sustancias.

A lo largo de la historia, la destilación ha sido objeto de investigación de forma que se han propuesto modificaciones encaminadas a mejorar su eficiencia.

Algunas de las modificaciones más conocidas son columnas con corrientes laterales, columnas de pared divisoria, rectificadores laterales con acoplamiento térmico, etc. En la industria, se han aplicado muchas de estas mejoras en los sistemas de separación.

Existe un particular interés en los sistemas de destilación usados en la purificación de mezclas azeotrópicas. Es bien sabido que se han realizado grandes esfuerzos por diseñar sistemas cada vez más eficientes, en este sentido, se han propuesto la destilación extractiva, la destilación azeotrópica heterogénea y en los últimos años la destilación por presión oscilante (PSD). Para mezclas binarias, la PSD utiliza dos columnas que operan a diferentes presiones y tienen reciclos entre ellas. El reciclo es la corriente de destilado si el azeótropo es de punto de ebullición mínimo o la corriente de fondo si el azeótropo es de máximo punto de ebullición. La PSD tiene un interés particular puesto que no se agrega ninguna sustancia que modifique las volatilidades relativas, de forma que evita problemas de impurezas en los productos finales. El uso de la PSD queda limitado a mezclas azeotrópicas que tengan sensibilidad a la presión.

Liang et al. [2017] ofrecen una revisión de los fundamentos de las oscilaciones de presión que pueden ayudar a establecer los límites en las presiones de operación de la PSD.

Con mucha frecuencia en la literatura se deja de lado la importancia de seleccionar la presión de operación óptima y basan su funcionamiento en la presión atmosférica para cumplir la condición de usar agua de enfriamiento en el condensador, sin embargo vale la pena realizar una exploración amplia en las presiones de operación de las columnas.

Ma. et al., [2018] presentó un método de optimización nuevo y mejorado que emplea un enfoque de pseudocontinuación elocuente. Los autores estudiaron el sistema THF/agua con integración de calor. Sin embargo, ajustaron arbitrariamente la presión en la columna de baja presión a 1,1 bar. A esta presión, la composición del azeótropo de THF-agua es 81,8% en moles de THF. La presión en la columna de alta presión se optimizó y se encontró que era de 15,5 bar, a la cual la composición azeotrópica es 56,6% molar de THF. Luyben, W. L. [2021] Destaca la importancia de evaluar rigurosamente la presión de operación de las columnas de destilación por presión oscilante ya que para algunos sistemas puede reducir el costo en un porcentaje importante.

En el campo de la optimización se han realizado esfuerzos para encontrar diseños que puedan ofrecer alguna ventaja sobre las metodologías tradicionales. En particular, la PSD puede plantearse como un problema de optimización que puede atacarse desde dos enfoques diferentes, el determinístico y el estocástico. Este último es de interés especial para los autores. S. I. Valdez, et. al., [2008] publican el algoritmo de optimización global Boltzmann Univariate Marginal Distribution algorithm (BUMDA) basado en la distribución de Boltzmann y capaz de salir de óptimos locales. En los procesos de optimización, un aspecto de suma importancia es el manejo de restricciones del problema de optimización, Cortez-González, et al., proponen una técnica de manejo de

restricciones autoadaptativa que logra tener un mejor desempeño del algoritmo de optimización.

En este trabajo se plantea la optimización de la PSD para la mezcla Diisopropil éter (DiPE)/Isopropil alcohol (iPA) que forma un azeotropo.

METODOLOGÍA

Se analizó una composición 40% mol de DiPE con un flujo de alimentación de 19.5 kmol/h. La pureza y recuperaciones tanto del DiPE como del iPA será de 99% mol. El modelo termodinámico para describir el comportamiento de la fase líquida fue UNIQUAC y se utilizaron los parámetros de interacción propuestos por Lladosa et. al., (2007).

Se reprodujo el diseño reportado por Montón et al., [2012], donde se proporcionan datos como número de etapas totales en cada columna, etapa de alimentación y presión de operación de cada columna. La relación de reflujo y la carga térmica no son reportadas en el trabajo; sin embargo, el diseño fue reproducido en Aspen Plus para conocer la relación de reflujo y la carga térmica, que cumple con las restricciones impuestas de pureza y recuperación. De acuerdo con lo reportado por Montón y col., 2012, realizaron la optimización especificando las variables de diseño: flujo, composición y temperatura de la corriente de alimentación; de esta manera, para que el sistema en estado estacionario converja, se fija el número de etapas tomando como herramienta de diseño los métodos cortos. En su optimización utilizó como variable crítica de diseño la corriente de destilado de la primera columna (flujo de interconexión).

La optimización de las columnas de destilación será rigurosa a través de las ecuaciones MESH. Estas ecuaciones se proponen etapa por etapa y convierte al modelo en un sistema altamente no lineal, debido a las relaciones de equilibrio de fases. En la Tabla 1 se presentan las variables de diseño para la optimización del PSD. Cabe destacar, que la topología, también será una variable de optimización; puesto que se tiene dos esquemas posibles para realizar la separación.

Tabla 1. Variables de optimización del PSD en flujo continuo.

Variables Discretas	Variables Continuas
Total de etapas de la columna C1 ($N_{T,C1}$)	Relación de reflujo C1 (RR_{C1})
Ubicación de la etapa de alimentación C1 ($N_{F,C1}$)	Presión de operación C1 (P_{C1})
Total de etapas de la columna C2 ($N_{T,C2}$)	Relación de reflujo C2 (RR_{C2})
Ubicación de la etapa de alimentación C2 ($N_{F,C2}$)	Presión de operación C2 (P_{C2})

la función objetivo que está descrita por la ecuación (1). Esta función tiene como principal objetivo la minimización de la cantidad de calor total suministrada en las columnas de destilación que conforman el sistema PSD.

$$Min(Q) = f(N_{T,C1}, N_{T,C2}, N_{F,C1}, N_{F,C2}, RR_{C1}, RR_{C2}, P_{C1}, P_{C2}) \quad (1)$$

Esta función de adaptación está sujeta a dos tipos de restricciones: las debidas a las especificaciones de los productos y las que corresponden al diseño y funcionamiento del equipo, tal como se muestra en la ecuación (2).

$$\begin{aligned}
 X_{pureza}^j &= X_{target} \pm \varepsilon \\
 X_{recuperacion}^j &= X_{target} \pm \varepsilon \\
 \varepsilon &= 1 E - \\
 N3 & N \\
 P_{Of} &\neq P_{C2}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Las primeras restricciones son de igualdad; sin embargo, se decidió manejarlas como restricciones de desigualdad, estableciendo un valor de tolerancia que permite al algoritmo encontrar soluciones factibles. Las dos restricciones siguientes se deben al diseño del PSD. Es importante resaltar que el proceso que se desea optimizar presenta una corriente de recirculación que aumenta la complejidad de la solución de las ecuaciones. Además, el espacio de búsqueda está restringido a los límites de variables como etapa de alimentación y la presión de cada columna.

El proceso de optimización de la PSD se realizó 30 veces para encontrar las mejores condiciones de operación; considerando que lo que se desea minimizar es la carga térmica requerida para la separación. Estos resultados fueron comparados con los obtenidos por Montón y col. (2010), a través de un análisis de sensibilidad.

RESULTADOS

Montón et al., (2010) basaron su diseño en métodos cortos para determinar el número de etapas de las columnas. Los diseños obtenidos por el algoritmo BUMDA fueron resueltos por métodos rigurosos, lo que implica más complejidad en el problema, pero a la vez mejor aproximación. Se requirieron 2000 evaluaciones de función para encontrar el mejor diseño, que termodinámicamente corresponde a las características de la mezcla y que coincide con la obtenida en la literatura, este número fue designado después de realizar algunos experimentos adicionales, donde el número de evaluaciones de función tomo valores de 3000, 5000, 10000 y 20000. Los resultados muestran que no hay una diferencia significativa en el valor de la función objetivo. Esto permite afirmar que tanto la técnica propuesta de manejo de restricciones acoplada al BUMDA son capaces de encontrar la zona factible y diseños óptimos, en la zona definida por el valor de tolerancia Épsilon.

En la Figura 1 se muestra el comportamiento típico del algoritmo BUMDA en la optimización del caso de estudio. Los valores graficados corresponden a todos los individuos de un experimento. Se observa que el valor de la función de adaptación va disminuyendo conforme aumenta el número de evaluaciones de función. Los puntos que se encuentran 1000 representan la reinicialización de la varianza. Adicionalmente, el algoritmo fue capaz de encontrar la zona factible a partir de la evaluación 800, lo que indica las evaluaciones posteriores sólo sirvieron para refinar la solución en la zona factible. La zona factible es aquella sección definida por las restricciones de igualdad y las propias restricciones del problema.

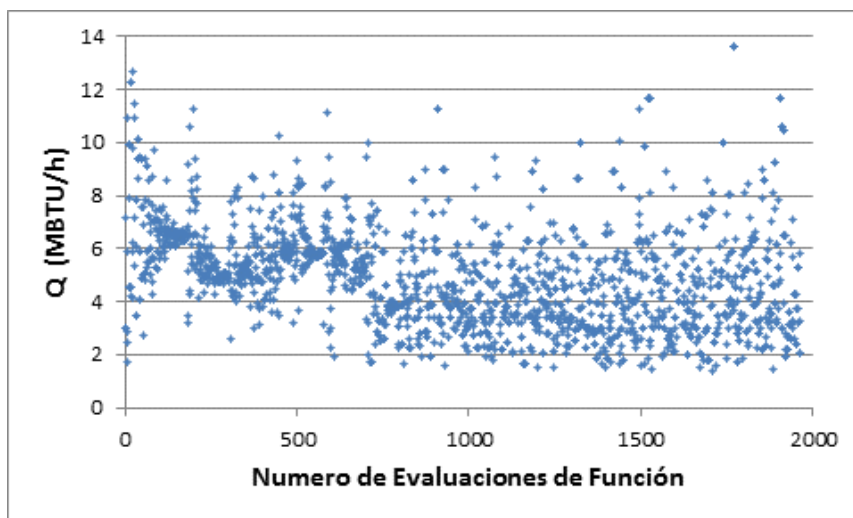


Figura 1. Comportamiento del BUMDA en la mezcla DiPE / iPA, 40%mol DiPE.

En la Tabla 2, se presentan 10 de los mejores diseños de las 30 corridas realizadas. La primera columna establece el número del experimento que se realizó. La segunda columna reporta las variables de optimización; es decir las variables que son consideradas como las dimensiones del problema y que representan el diseño del PSD. En esta columna tienen cuatro variables continuas: relación de reflujo y la presión y cuatro discretas: número total de etapas y la etapa de alimentación de cada columna. La tercera columna reporta los valores tanto de pureza como de recuperación de cada componente. La última columna reporta el valor de la función objetivo de cada uno de los diseños en MBTU/h, de manera que se puedan comparar con el valor reportado en la literatura que es de 7.11 MBTU/hr.

Tabla 2. Diseños optimizados para la mezcla DiPE / iPA, 40% mol DiPE y diseños encontrados por Monton.

No.	C1				C2				Q
Exp.	N_T	N_F	RR	P (KPa)	N_T	N_F	RR	P (KPa)	(MBTU/h)
1	19	17	4.1	103.49	22	9	2.89	309.20	5.24
2	21	18	3	100.79	16	5	9.18	300.55	7.15
3	25	11	2.02	103.72	15	10	2.85	308.89	3.82
4	25	14	1.83	105.95	18	5	10.84	320.81	7.04
5	18	9	2.96	102.33	25	16	3.12	310.79	4.57
6	18	12	1.55	100.07	24	10	2.48	318.16	3.35
7	19	15	2.54	103.43	16	10	3.02	312.31	4.24
8	17	11	2.45	101.00	15	9	1.53	314.94	3.56
9	16	10	4.18	129.19	19	15	3.66	414.07	5.58
10	17	10	6.85	130.42	16	14	3.84	413.14	7.45

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó la optimización de la PSD para una mezcla DiPE / iPA Utilizando el algoritmo evolutivo (BUMDA) acoplado a una técnica autoadaptativa de manejo de restricciones. Esta herramienta de optimización resulta robusta, eficiente y versátil, en la optimización de esquemas de destilación por presión oscilante

La herramienta de optimización propuesta presenta dos características importantes, la primera que es capaz de encontrar zonas promisorias con un bajo esfuerzo de computo por medio de un mecanismo de reinicialización de la varianza en el algoritmo evolutivo y la segunda que intensifica su búsqueda, el valor de ϵ se adapta para relajar o dar rigidez a las restricciones.

Los diseños óptimos en el sistema de destilación con presión oscilante fueron comparados con la literatura, obteniéndose que el 87% de los obtenidos por el algoritmo BUMDA son de menor requerimiento energético.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Cortez-González, J., Hernández-Aguirre, A., Murrieta-Dueñas, R., Gutiérrez-Guerra, R., Hernández, S., & Segovia-Hernández, J. G. (2023). Process optimization using a dynamic self-adaptive constraint handling technique coupled to a Differential Evolution algorithm. *Chemical Engineering Research and Design*, 189, 98-116.
- [2] Luyben, W. L. (2021). Importance of pressure-selection in pressure-swing distillation. *Computers & Chemical Engineering*, 149, 107279.
- [3] G. Modla and P. Lang (2010). Separation of acetone-methanol mixture by pressure swing batch distillation in double column system with and without thermal integration, *Ind. Eng. Chem. Res.*, under review.
- [4] W. L. Luyben (2008). Design and Control of a Fully Heat-Integrated Pressure- Swing azeotropic Distillation System, *Ind. Eng. Chem. Res.* 47, 2681-2695.
- [5] Montón J.B.; Burguet M.C.; Lladosa E.; Cháfer A., 2010. Separation of azeotropic mixture Diisopropyl ether + Isopropyl alcohol by pressure swing distillation: simulation and comparative economic evaluation. *European Symposium on Computer Aided Process Engineering-13, 36th European Symposium of the Working Party on Computer Aided Process Engineering*. Milano, Italia.

**Integración del nexo agua-energía y análisis del ciclo de vida:
Evaluación multiobjetivo e impacto en comunidades rurales Integration
of the water-energy nexus and life cycle analysis: Multi- objective
evaluation and impact for rural distributed energy systems**

Jesús Eduardo Rodríguez-Gutiérrez^a, Luis Fabian Fuentes Cortés^a, Brenda Ríos- Fuentes^a, Alejandro Estrada-Baltazar^a

Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Celaya, Departamento de Ingeniería Química, Celaya, Guanajuato, México, 38010.

eduardo.rod.gtz@gmail.com

RESUMEN

El presente estudio propone un enfoque multiobjetivo para evaluar el nexo entre el agua, energía, medio ambiente y alimentos en comunidades rurales sin conexión a la red y con bajos recursos. Se utilizan índices del Análisis de Ciclo de Vida (huella hídrica y huella de carbono) y de desempeño económico en torno al agua. Se emplea programación no lineal para minimizar el costo total anual y maximizar la eficiencia. Se estudia el caso de una comunidad en las montañas de México. La estrategia desarrollada permite identificar conflictos en el nexo agua-energía-alimentos- medio ambiente de manera más eficiente.

Palabras clave: Optimización multiobjetivo, Nexo agua-energía-alimentos, Análisis de Ciclo de Vida.

INTRODUCCIÓN

El equilibrio entre los recursos críticos como agua, energía, medio ambiente y alimentos (WEEF) y el desarrollo socioeconómico es un desafío apremiante en la era contemporánea [1]. Este reto se ve exacerbado por la compleja interconexión entre el agua, la energía, los alimentos y el cambio climático, cuyas tensiones se intensifican debido al crecimiento demográfico, la urbanización, el progreso económico y los cambios tecnológicos [2]–[4].

América Latina busca avanzar hacia sistemas de protección social universales, integrales, sostenibles y resilientes[5]. Se recomienda enfocar esfuerzos en el acceso a recursos en asentamientos informales y áreas remotas, promoviendo tecnologías de bajo consumo y estableciendo marcos regulatorios de eficiencia [6]

La generación distribuida (DG) es clave en la consecución de objetivos y planes climáticos nacionales y subnacionales, se han propuesto desarrollos que integran sistemas de suministro de agua y energía, incluyendo sistemas de bombeo que acoplan microrredes [7].

La evaluación de sistemas de generación a pequeña escala es esencial para avanzar hacia el acceso universal a la energía[8]. La factibilidad termo-económica es fundamental. Es importante considerar el equilibrio entre la conservación de tierras con alto potencial agrícola y la expansión de zonas rurales para la producción de energía renovable.

La expansión de la producción de alimentos puede entrar en conflicto con el objetivo de uso eficiente del agua. Se han propuesto cambios en el uso del suelo, como la promoción de estanques de peces para mejorar la seguridad alimentaria local.

Las energías renovables comunitarias son esenciales para la transición hacia sistemas energéticos sostenibles. La pobreza energética se comprende como un problema multidimensional [9].

Numerosos estudios han investigado la correlación entre el uso de recursos y la producción de alimentos. La provisión adecuada de agua y la garantía de seguridad alimentaria son desafíos críticos en comunidades rurales. Es importante evaluar estrategias para una gestión óptima de los recursos [10]

METODOLOGÍA

Se presenta el marco tecnológico empleado en el análisis. Se proporciona la definición del problema de optimización, y se detallan los desafíos y particularidades de la estrategia de modelado utilizada. Se describe la estrategia multiobjetivo y el método utilizado para evaluar el rendimiento del nexo.



Figura. 1. Superestructura tecnológica del sistema de suministro de agua y energía.

La Figura 1 ilustra la tecnología empleada para abastecer con servicios de agua y energía a áreas rurales remotas. La demanda de electricidad satisface las necesidades de calor para el consumo de agua caliente, agua fresca doméstica, riego de producción agrícola local y estanque de Tilapia. Este sistema abarca tecnologías como paneles solares, aerogeneradores, caldera de leña, sistema de bombeo, suministro de agua local, sistema de recolección de agua de lluvia, sistema de baterías y tanques de almacenamiento de agua caliente y fría.

La generación eléctrica se lleva a cabo mediante módulos fotovoltaicos y aerogeneradores, que operan un calentador eléctrico y cuentan con un colector solar para la demanda de agua caliente. La electricidad restante se almacena en baterías para periodos de baja producción. Es importante destacar que, debido a consideraciones culturales, la electricidad se considera un servicio secundario utilizado para preparar agua caliente y reducir el consumo de leña.

Las necesidades térmicas del usuario se satisfacen con tecnologías como calentadores eléctricos, colectores solares y calderas que funcionan con biomasa forestal. Estas tecnologías están conectadas a un tanque de almacenamiento de agua caliente. El suministro de agua proviene de dos fuentes: un cuerpo de agua cercano y la recolección de agua de lluvia. Ambos sistemas están conectados al tanque principal, y el excedente se almacena para su uso en períodos de escasez.

Se presenta un problema de optimización que identifica objetivos y restricciones del sistema. Se detallan los criterios de selección de variables e indicadores de rendimiento. La estrategia de modelado aborda las complejidades de las relaciones agua-ambiente-alimentos. Fórmulas y componentes del modelo se describen en detalle, demostrando su precisión para capturar la complejidad del sistema. A continuación de muestran las funciones a maximizar y minimizar respectivamente.

$$\phi_i = \frac{f_i - f_i^{LB}}{f_i^{UB} - f_i^{LB}}, 0 \leq \phi_i \leq 1, \forall i \in f = \{TAC, WatC, Emi_{CO_2}, LU, CO_2FP, WatSF\}$$

$$\varphi_j = 1 - \frac{f_j - f_j^{LB}}{f_j^{UB} - f_j^{LB}}, 0 \leq \varphi_j \leq 1, \forall j \in F = \{\eta G, FoodP\}$$

Para los criterios de la evaluación del nexo agua energía alimentos se eligieron los siguientes indicadores.

$$\Phi_{water-nex} = \phi_{WatC}$$

$$\Phi_{energy-nex} = \varphi_{\eta G}$$

$$\Phi_{env-nex} = \frac{\phi_{LU} + \phi_{Emi_{CO_2}} N_{environmental}}{\phi_{food-nex} = \varphi_{FoodP}}$$

Por otra parte, para los indicadores para la evaluación del ciclo de vida se eligieron los siguientes.

$$\Phi_{water-LCA} = \phi_{WatSF}$$

$$\Phi_{env-LCA} = \phi_{CO_2PF}$$

Para la evaluación económica se ha tomado en cuenta los costos capitales de las tecnologías, así como sus costos de operación y mantenimiento.

$$TAC = CCost + OMCost + FCost + kL * LCost + ECost - Inc^W - Inc^Q - Inc^G$$

Por otro lado, se ha decidido evaluar los siguientes subconjuntos.

$$\min \Phi_{WEEF} = \frac{\Phi_{water-nex} + \Phi_{energy-nex} + \Phi_{env-nex} + \Phi_{food-nex}}{N_{WEEF}}$$

$$\min \Phi_{LCA} = \frac{\Phi_{water-LCA} + \Phi_{env-LCA}}{N_{LCA}}$$

$$\min \Phi_{WEEF-LCA} = \Phi_{WEEF} + \Phi_{LCA}$$

RESULTADOS

La evaluación del Costo Anual Total (TAC) es esencial en la determinación de la viabilidad económica de cualquier sistema energético. Este indicador se compone de varios elementos, incluyendo los costos anuales de capital, los gastos de operación y mantenimiento, los costos relacionados con el suministro de combustible, las pérdidas de energía y los costos ligados al cambio de uso de tierra. Además, se consideran los ingresos generados por la venta de servicios de agua, electricidad y energía térmica.

Tabla. 1. Resultado de la optimización de la superestructura tecnológica del sistema de suministro de agua y energía.

	WEEF	LCA	WEEF-LCA
Costo anual total (\$)	113,089.54	113,085.94	113,100.28
Paneles fotovoltaicos (kW)	36.31	37.95	37.29
Turbina de viento (kW)	3.88	5.47	-
Baterías (kWh)	366.86	292.10	428.14
Colector pluvial (m ²)	67.77	37.56	72.60
Tanque agua (m ³)	15.82	19.93	0.10
Bomba (kW)	4.94	4.94	0.19
Uso de tierra (m ²)	838.38	869.68	769.75
Costo capital (\$)	136,411.53	120,527.99	147,222.80
eficiencia energética (%)	78.71	69.58	78.71
Consumo de agua (m ³)	3,957.83	3,996.33	3,957.83
Colector solar (m ²)	52.80	48.13	44.63
Calentador eléctrico (kW)	8.28	8.23	9.56
Boiler (kW)	1.70	1.75	0.05
Emisiones totales (Ton)	0.09	0.26	0.09
Producción de alimentos (kg)	726.55	726.67	726.55
Tanque de agua caliente (m ³)	2.97	2.97	0.10
Huella de agua- ACV (m ³)	6,053.16	4,272.99	4,272.99
Huella de carbono - ACV (Ton)	0.49	0.48	0.48

Los análisis indican que las decisiones estratégicas de diseño tienen un impacto sustancial en los valores del Costo Anual Total (TAC). Específicamente, la inversión inicial en tecnologías de generación de energía renovable, como los módulos fotovoltaicos y las turbinas eólicas, resulta en una significativa reducción del TAC con el tiempo. Esta reducción se atribuye a la producción constante de electricidad a partir de fuentes limpias, reduciendo la dependencia de combustibles fósiles y, por ende, disminuyendo los costos operativos y de mantenimiento.

La estrategia de almacenamiento de energía mediante baterías desempeña un papel crucial en la minimización de pérdidas de energía y, en última instancia, en la disminución del TAC, como se muestra en los resultados de optimización en la tabla 1. Las baterías permiten una gestión eficiente de la energía generada, almacenando excedentes para su uso en periodos de baja generación, optimizando así la utilización de los recursos.

La eficiencia energética, medida fundamental para la sostenibilidad y efectividad del sistema, se define como la relación entre la energía entregada a los consumidores finales y la energía total ingresada al sistema. En este estudio, el sistema propuesto logra una eficiencia energética destacada al aprovechar fuentes renovables para la generación de electricidad y al utilizar eficientemente una caldera para necesidades térmicas, reduciendo así la dependencia de combustibles no renovables.

La eficiencia energética se revela como un componente crucial para la sostenibilidad a largo plazo, ya que reduce las pérdidas de energía y disminuye la dependencia de fuentes no renovables, impactando directamente en la reducción del TAC y en la huella ambiental del sistema.

Los resultados indican que la combinación estratégica de tecnologías de generación de energía renovable, almacenamiento y gestión eficiente de recursos puede llevar a una reducción significativa del TAC y a una alta eficiencia energética en sistemas locales. Esta estrategia no solo mejora la viabilidad económica a largo plazo, sino que también contribuye positivamente a la sostenibilidad ambiental al reducir emisiones de gases de efecto invernadero y disminuir la dependencia de combustibles fósiles.

Estos hallazgos subrayan la importancia de considerar enfoques integrales y sostenibles al diseñar sistemas de suministro de agua y energía para comunidades rurales aisladas. Además, destacan la necesidad de políticas que promuevan la inversión en tecnologías de energía renovable y almacenamiento como parte de estrategias más amplias de desarrollo sostenible.

En esta evaluación, observamos que, aunque el Análisis del Ciclo de Vida (ACV) es valioso para evaluar la sostenibilidad ambiental, los indicadores directos del sistema ofrecen una interpretación más práctica y relevante en comparación con los derivados del ACV. A pesar de proporcionar una visión integral de las implicaciones ambientales, los indicadores directos, al centrarse en los aspectos económicos y de rendimiento, ofrecen una percepción más inmediata y práctica de la viabilidad y eficacia del sistema, lo que podría ser más relevante en la toma de decisiones estratégicas y formulación de políticas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] R. , N. D. , L.-P. A. , H. T. , M. R. H. , D. B. , . . . & K. M. Ferroukhi, "Renewable energy in the water, energy & food nexus.," *IRENA, Abu Dhabi*, pp. 1–125, 2015.
- [2] W. A. Hussien, F. A. Memon, and D. A. Savic, "A risk-based assessment of the household water-energy-food nexus under the impact of seasonal variability," *J Clean Prod*, vol. 171, pp. 1275–1289, Jan. 2018, doi: 10.1016/j.jclepro.2017.10.094.
- [3] W. A. Hussien, F. A. Memon, and D. A. Savic, "An integrated model to evaluate water-energy-food nexus at a household scale," *Environmental Modelling and Software*, vol. 93, pp. 366–380, 2017, doi: 10.1016/j.envsoft.2017.03.034.
- [4] M. Mannan, T. Al-Ansari, H. R. Mackey, and S. G. Al-Ghamdi, "Quantifying the energy, water and food nexus: A review of the latest developments based on life-cycle assessment," *Journal of Cleaner Production*, vol. 193. Elsevier Ltd, pp. 300–314, Aug. 20, 2018. doi: 10.1016/j.jclepro.2018.05.050.
- [5] A. Arenas de Mesa, "Social Panorama of Latin America," 2022. Accessed: Jul. 26, 2023. [Online]. Available: https://oig.cepal.org/sites/default/files/social_panorama_latam_2021.pdf
- [6] N. Unidas and U. Nations, "ECLAC Statistical Briefings No. 5. Energy in Latin America and the Caribbean: access, renewability and efficiency," 2022. [Online]. Available: <https://cepalstat-prod.cepal.org/cepalstat/tabulador/ConsultaIntegrada>.
- [7] J. E. Rodríguez-Gutiérrez, A. Castillo-Molar, and L. F. Fuentes-Cortés, "A multi-objective assessment for the water-energy-food nexus for rural distributed energy systems," *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, vol. 51, Jun. 2022, doi: 10.1016/j.seta.2022.101956.
- [8] S. Mandelli, J. Barbieri, R. Mereu, and E. Colombo, "Off-grid systems for rural electrification in developing countries: Definitions, classification and a comprehensive literature review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 58. Elsevier Ltd, pp. 1621–1646, May 01, 2016. doi: 10.1016/j.rser.2015.12.338.
- [9] D. Streimikiene and G. L. Kyriakopoulos, "Energy Poverty and Low Carbon Energy Transition," *Energies (Basel)*, vol. 16, no. 2, Jan. 2023, doi: 10.3390/en16020610.
- [10] L. Batlle-Bayer, R. Aldaco, A. Bala, and P. Fullana-i-Palmer, "Toward sustainable dietary patterns under a water–energy–food nexus life cycle thinking approach," *Current Opinion in Environmental Science and Health*, vol. 13. Elsevier B.V., pp. 61–67, Feb. 01, 2020. doi: 10.1016/j.coesh.2019.11.001.

Producción de Acroleína como producto de interés industrial involucrando procesos intensificados de reacción y separación

*Mónica Itzel Martínez-Canseco, Shue Carolina Pinal-Martínez *,
Ana Cecilia Díaz-Ramos⁺, Rocio Casas-Flores*

*Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey Av. Eugenio Garza Sada 2501,
CP 64849 Monterrey, Nuevo León, México.*

**A01283081@tec.mx, ⁺A01284031@tec.mx*

RESUMEN

La intensificación de un proceso consiste en el desarrollo de equipos y técnicas novedosas que, en comparación con los que se usan comúnmente en la actualidad, conduzcan a tecnologías sustancialmente más pequeñas, de menor costo, sostenibles, así como más eficientes energéticamente (Stankiewicz & Moulijn, 2000) motivando el desarrollo de procesos y tecnologías de menor costo y más eficientes energéticamente. El contexto actual, en el cual la necesidad de ofrecer procesos de producción de menor costo y más eficientes energéticamente, ha motivado el desarrollo de este trabajo, en el cual se presenta una propuesta para la producción de acroleína a partir de propileno, considerando estrategias de intensificación y optimización de procesos químicos con el objetivo de mejorar el rendimiento de la reacción, disminuir el consumo energético, aumentar la pureza del producto y reducir las dimensiones así como el número de equipos necesarios. El diseño propuesto consiste en una primera etapa de reacción, para la cual se considera un reactor tubular en fase gaseosa (PFR), así como una segunda etapa destinada a la secuencia de separación y purificación del producto final. Se empleó el software de simulación *Aspen Plus V10* para el diseño de los equipos, así como la herramienta de *Microsoft Excel* para la aplicación de una estrategia multiobjetivo de optimización. Los resultados muestran que se logró disminuir las dimensiones un 50% de los equipos mayores aumentando la conversión del propileno de 30% a **65%** reduciendo el **consumo energético** de cada uno. El producto final de acroleína resultó con una **pureza de 93.8%** la cual tiene aplicaciones en la industria para la obtención de microbicidas y la niacinamida.

Palabras clave: producción de acroleína; optimización; cinética LHHW.

INTRODUCCIÓN

La industria química engloba un enorme panorama de sectores y ramas que se encargan de la creación de productos de alta calidad que tengan un bajo costo e impacten al medio ambiente en la menor medida posible, con la finalidad de satisfacer necesidades tanto de la industria como del mercado y las personas. Dentro de los procesos químicos que deben ser llevados a cabo en un procedimiento industrial, una de las operaciones unitarias más implementadas es la transformación de materias primas en productos deseados. Generalmente, los reactores químicos son acompañados de equipos de separación para remover remanentes de materia prima. El número de equipos de separación se relaciona con la pureza del producto.

Una vez que los procesos químicos para la manufactura de un determinado producto son diseñados a partir de estudios, cálculos e investigación, estos pueden ser llevados a un segundo nivel donde se pueden intensificar. La intensificación de procesos permite mejorar el rendimiento, disminuir el número de equipos utilizados y su tamaño, mejorar condiciones de operación como temperaturas y presiones, reducir el impacto ambiental, entre otros. Dentro de la industria existe una inmensa variedad de sustancias químicas que funcionan como productos por sí solas y/o como intermediarias para la producción de un producto de mayor valor. Una de estas sustancias es la acroleína; de manera comercial, es utilizado como un biocida y empleada en la producción de metionina, ácido acrílico, piridinas, entre otros (Arntz et al., 2017). El presente trabajo estudia el proceso de producción de acroleína a partir de propileno incorporando fases de reacción y separación efectuando la optimización en estado estacionario de dicho proceso químico. Lo anterior se realiza con el objetivo de obtener un producto final de acroleína pura aún cuando existe la formación de un azeótropo entre la acroleína y el agua.

METODOLOGÍA

El simulador de procesos químicos *Aspen Plus V10* funciona como una herramienta de simulación donde es posible integrar diversas operaciones unitarias que son parte de un mismo proceso, permite el dimensionamiento de los equipos, optimizar procesos, estimar propiedades físicas, realizar análisis de sensibilidad, así como otros análisis. Para el presente trabajo resultó fundamental su uso, pues dentro de este se configuró la combinación de equipos necesarios para obtener una pureza final de acroleína mayor al 90% (pureza esperada para la aplicación de la acroleína en la producción de microbicidas y niacinamida) a partir de la reacción de propileno con oxígeno. De la misma manera, se realizaron análisis de sensibilidad a partir de los cuales fue posible realizar la optimización del proceso completo, por medio del uso de la herramienta *Microsoft Excel*.

La simulación del proceso se realizó empleando como modelo termodinámico Peng-Robinson debido a la naturaleza de los componentes, considerando sus propiedades físicas la volatilidad de la acroleína resulta una propiedad de interés dado el azeótropo que presenta con el agua (97.4%-2.6%) a una temperatura de 52.4 °C (American Industrial Hygiene Association Journal, 1963).

Posteriormente, se definió la topología del proceso a fin de establecer una configuración del proceso de producción adecuada. Esta consiste en una primera etapa de reacción, para la cual se considera un reactor tubular en fase gaseosa (PFR), así como una segunda etapa destinada a la secuencia de separación y purificación del producto final, la cual involucra dos torres de destilación (Figura 2). En la simulación realizada, se configuró el reactor con ecuaciones de cinética LHHW (modelo implementado por Langmuir-Hinselwood-Hougen-Watson).

Se propone inicialmente un reactor (R-101) isotérmico operando a una temperatura constante de 300 °C a fin de evitar la formación de coque en el catalizador. Con el fin de llevar a cabo la

conversión requerida las dimensiones del reactor fueron 2 m de diámetro y 20 m de largo. La corriente de alimentación se da en la Tabla 1.

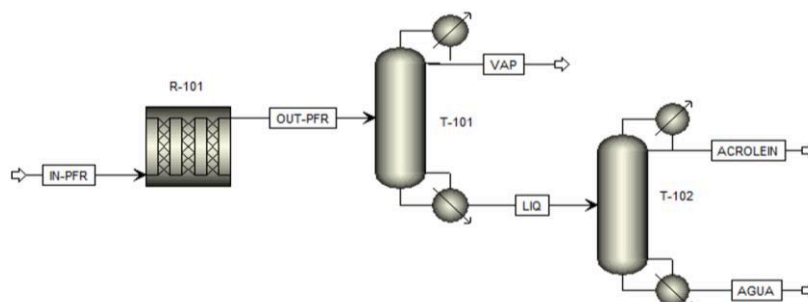
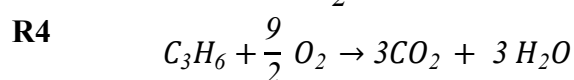
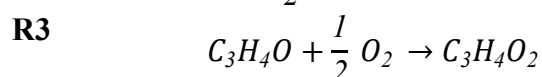
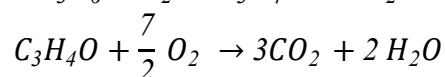
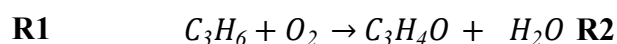


Figura 2. Diagrama de flujo propuesto para producción de acroleína.

Tabla 1. Especificaciones de corriente de alimentación al reactor.

Componente	Flujo molar (kmol/h)	Fracción mol
Nitrógeno	1,158	0.411
Oxígeno	315	0.111
Agua	1,100	0.391
Propileno	240	0.085
Total	2,813	1.0

La secuencia de reacciones químicas que propician la formación de la acroleína son las que se indican a continuación, estas ocurren en fase vapor en el reactor.



En la corriente de salida del reactor se obtienen 126.61 kmol/h de acroleína, formando el azeótropo esperado con el agua, el cual representa un problema para la posterior purificación del producto final, para poder romper dicho azeótropo, y recuperar acroleína pura en un porcentaje mayor a 90%, se diseñó una red de separación compuesta por dos columnas de destilación. La configuración de diseño preliminar del primer destilador (T-101) consiste en una torre de 20 etapas con un condensador total, con una razón de reflujo de 15 operando a 103 °C y 4.5 bar de presión. En esta se separa la acroleína y el agua del resto de los componentes más volátiles incluido el propileno, los cuales se recuperan en el destilado, mientras que en el fondo se obtiene una corriente líquida de acroleína y agua en mayor proporción. En el segundo destilador (T-102), en el cual ocurre la purificación del producto de interés se establece una

razón de reflujo de 20, se mantiene la misma presión de operación a una temperatura de 148.9 °C, 20 etapas, un condensador total, así como dimensiones similares.

Una vez que se realizó el caso base, se procede con la optimización de los equipos del proceso, como primer paso se realizaron análisis de sensibilidad para cada equipo empleando *Aspen Plus V10*. Para el caso del reactor, se variaron los parámetros de presión, temperatura, diámetro y largo del equipo con el objetivo de observar el comportamiento del calor, la pureza del flujo de salida (respecto a la acroleína) y el flujo de salida de propileno ante dichos cambios. Para el caso de los destiladores, se varió el parámetro de la relación del reflujo molar con la finalidad de observar el comportamiento tanto del flujo de salida como la fracción molar de acroleína por fondos, el calor en el reboiler, así como el condensador ante dicho cambio.

Los conjuntos de datos obtenidos para los tres análisis de sensibilidad fueron transferidos a la herramienta de *Microsoft Excel* donde se calcularon las variables normalizadas de los parámetros de calor (1), conversión (2), volumen del reactor (3), presión (4) y pureza (5) para el reactor, así como para los parámetros de calor del condensador y del reboiler para las columnas de destilación (1).

$$Q_{norm} = \frac{Q_{m\acute{a}x} - |Q|}{Q_{m\acute{a}x} - Q_{m\acute{i}n}} \quad (1) \quad X_{norm} = \frac{X - X_{m\acute{i}n}}{X_{m\acute{a}x} - X_{m\acute{i}n}} \quad (2)$$

$$V_{norm} = \frac{V_{m\acute{a}x} - V}{V_{m\acute{a}x} - V_{m\acute{i}n}} \quad (3) \quad P_{norm} = \frac{P_{m\acute{a}x} - P}{P_{m\acute{a}x} - P_{m\acute{i}n}} \quad (4)$$

$$Pu_{norm} = \frac{Pu - Pu_{m\acute{i}n}}{Pu_{m\acute{a}x} - Pu_{m\acute{i}n}} \quad (5)$$

Las variables normalizadas, a diferencia de las variables puras no tienen dimensiones y están acotadas entre los límites de 0 y 1 por lo que permite hacer comparaciones entre ellas de manera más eficiente como mostrado por Santibañez et al. (2018). Para este trabajo en particular, el objetivo es minimizar el calor (menor costo de operación), la presión (mayor seguridad) y el volumen (menor costo de equipo); por otro lado, se buscó maximizar la conversión y pureza. Esto fue expresado en una sola función objetivo formada por la suma de cada una de las variables normalizadas. Donde el valor más cercano a la unidad de la nueva función objetivo comprende un conjunto de datos que representan la opción óptima. Este conjunto se transfiere en la simulación realizada en *Aspen Plus V10* para establecer las configuraciones de diseño, dimensionamiento y condiciones de operación de los equipos adecuadas para el proceso, las cuales se comparan con las del proceso convencional.

RESULTADOS

Las configuraciones de diseño, dimensionamientos, así como condiciones de operación obtenidas a partir de la optimización del proceso permitieron reducir significativamente el tamaño de los equipos, así como aumentar la pureza de la acroleína recuperada. En cuanto al reactor, resulta relevante la disminución de un 45% del volumen del equipo con respecto al

proceso convencional, así como el aumento de la conversión de propileno de 30% a **65%** (Tabla 2).

Tabla 2. Configuración de diseño del PFR en proceso convencional y optimizado.

Parámetro	Convencional	Optimización	Diferencia
Diámetro (m)	2	2	-
Largo (m)	20	11	(-) 45%
Volumen (m³)	62.83	34.55	(-) 45%
Modo de operación	Isotérmico	Isotérmico	-
Presión (bar)	1	10	(+) 9
Temperatura (°C)	300	240	(-) 60
Conversión C₃H₆	0.153	0.6515	(+) 0.49
Energía (kW)	-4,203.85	-26,057	(-) 21,853.15

Una de las principales razones por las que resultó posible lograr el mejoramiento de la conversión del propileno fue gracias al aumento de la presión de operación del PFR y la disminución del volumen de dicho equipo, este decremento se da por la disminución en su longitud. Si bien, los cambios realizados en el reactor permiten tener mejores resultados de conversión, es importante considerar que el aumento significativo en presión exige una actualización en las medidas de seguridad y automatización para los equipos, lo cual demanda una mayor inversión de capital económico.

En la etapa de separación y purificación igualmente fue posible reducir las dimensiones de las columnas de destilación, lo cual se traduce a menores costos de inversión y mantenimiento de los equipos (Tabla 4). La relación del diámetro y la altura en ambas columnas disminuye, donde en la primera se obtiene casi el **50%** de reducción, mientras que en la segunda un 38% para el diámetro y 58% para la altura.

Tabla 4. Configuración de diseño de columnas de destilación en proceso convencional y optimizado.

Parámetro	1° Destilación		2° Destilación	
	Convencional	Optimización	Convencional	Optimización
Temperatura (°C)	103.3	100.7	148.9	148.9
Presión (bar)	4.5	4.5	4.5	4.5
Diámetro (m)	7.71	4.15	2.18	1.35
Altura (m)	10.97	6.096	10.36	4.26
No. Etapas	20	15	20	9
Reflujo	15	7	20	2
Pureza (%)^[1]	16.5	20.29	84.3	93.8
Energía (kW)	-91,932	-40,473.8	-22,918.3	-2,885.16
Energía Reboiler (kW)	53,604.4	5,423.08	33,859.2	11,105.5

[1] Pureza de acroleína.

Resulta importante resaltar que, la energía necesaria para la operación del reboiler de las columnas de destilación fue reducida gracias al proceso de optimización.

CONCLUSIONES

Se logró disminuir las dimensiones un 50% de los equipos mayores aumentando la conversión del propileno de 30% a **65%** reduciendo el **consumo energético** de cada uno. El producto final de acroleína se logra recuperar con una **pureza de 93.8%**, la cual tiene aplicaciones en la industria para la producción de microbicidas como el Magnacide® (EPA, 2011) y la niacinamida.

La combinación de herramientas como *Microsoft Excel* y *Aspen Plus V10* permitió realizar la resolución rigurosa de un modelo termodinámico complejo aplicando estrategias de optimización para implementar mejoras en el proceso de producción de acroleína propuesto. Cabe resaltar que una de las limitaciones principales del presente trabajo es la consideración de un proceso isotérmico, lo cual implica que no se tomaron en cuenta los posibles efectos que las fluctuaciones de temperatura podrían tener en los equipos involucrados en el proceso en un escenario real. Como parte de las recomendaciones para la continuación del trabajo en un futuro, se sugiere desarrollar propuestas de mejora para el proceso tomando en consideración estrategias de recirculación de reactivos no convertidos para disminuir costos de operación y aumento de la purificación del producto deseado.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey por proveer las licencias de software requeridas. Así mismo, se agradece a la Academia Mexicana de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (AMOAIQ) por haber dado las especificaciones del caso de estudio. Se agradece al Dr. José Ezequiel Santibañez Aguilar y al Dr. Enrique Alfonso López Guajardo por su acompañamiento durante la realización del trabajo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIHA. "Acrolein (Acrylaldehyde, Propenal)". *American Industrial Hygiene Association Journal*, 24:3, 286-287. (1963). DOI: [10.1080/00028896309342966](https://doi.org/10.1080/00028896309342966)

Arntz, D., Fischer A., Hôpp, M., Jacobi, S., Sauer, J., Ohara, T., Sato, T., Shimizu, N., Schwind, H. et al. "Acrolein and Methacrolein". *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. (2007) https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/14356007.a01_149.pub2 (Accesado 31 Agosto 2023)

EPA. (2011). "Magnacide B Microbiocide"

https://www3.epa.gov/pesticides/chem_search/ppls/010707-00010-20110818.pdf (Accesado 31 Agosto 2023).

Castellanos, S., Santibañez-Aguilar, J. E., Shapiro, B. B., Powell, D. M., Peters, I. M., Buonassisi, T., Kammen, T., Flores-Tlacuahuac, "A. Sustainable silicon photovoltaics manufacturing in a global market: A techno-economic, tariff and transportation framework". *Applied Energy*, 212, 704-719. (2018).

Diseño conceptual, evaluación y optimización de una biorrefinería basada en aceite de Ricino considerando aspectos económicos y ambientales

Berenice Acevedo-García ^a, José Ezequiel Santibanez-Aguilar ^a, Alejandro J. Alvarez ^{a,*}

^a *Tecnologico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Ave. Eugenio Garza Sada 2501, Monterrey, N.L. 64849, Mexico. alejandro.alvarez@tec.mx*

RESUMEN Las biorrefinerías tienen el potencial de reemplazar a las refinerías tradicionales de petróleo. Sin embargo, se requiere que las biorrefinerías sean capaces de producir de forma integral múltiples bioproductos de valor agregado para ser rentables. El aceite de ricino, extraído de la planta *Ricinus communis*, es una valiosa materia prima de biorrefinería para producir una amplia gama de productos bioquímicos, además de biocombustibles. Sin embargo, una biorrefinería basada en la planta de *Ricinus communis* requiere más investigación para determinar su viabilidad. De esta manera, este estudio tiene como objetivo diseñar, evaluar y optimizar una biorrefinería multiproducto integrada basada en *Ricinus communis* en México. Los bioproductos producidos a partir del aceite de ricino fueron ácido azelaico, ácido sebáico, ácido undecilénico, biodiesel, lubricante, 2-octanol, 2-octanona, heptanal, glicerol, metanol y aceite de calefacción. Mientras que, los bioproductos producidos utilizando los residuos de plantas y semillas fueron biogás, calor y energía. La metodología incluyó diseño conceptual, modelado de procesos, evaluación ambiental a través de Análisis de Ciclo de Vida (ACV) y evaluación económica de la biorrefinería y tres escenarios. Además, se utilizaron herramientas de optimización multiobjetivo basadas en los métodos de restricción ϵ y punto utópico para encontrar cómo dividir el aceite de ricino con el fin de mejorar el rendimiento ambiental y económico de la biorrefinería. Los resultados óptimos indicaron que el 42% del aceite de ricino se debe utilizar para producir biodiesel, el 38% para ácido azelaico, el 7% para ácido undecilénico y el 13% para ácido sebáico. Como resultado, se obtuvo un diseño de biorrefinería con mejor desempeño ambiental y económico, lo que resulta en un proceso más sostenible. Finalmente, este enfoque puede emplearse en otros contextos en todo el mundo para el desarrollo de biorrefinerías y tecnologías sostenibles innovadoras.

Palabras clave: Bioeconomía circular, valorización de aceite de ricino, optimización multiobjetivo, evaluación del ciclo de vida.

INTRODUCCIÓN

Las biorrefinerías son instalaciones en las que la biomasa se puede transformar de manera sostenible en un conjunto de productos de valor agregado, incluidos productos químicos, biocombustibles y energía. Las biorrefinerías se han propuesto como una alternativa para reemplazar a las refinerías de petróleo (Cardona-Alzate et al., 2020), y para reducir el consumo de combustibles fósiles y los problemas ambientales globales. Sin embargo, a pesar del alto potencial de las biorrefinerías, actualmente faltan diseños de biorrefinerías económica y sosteniblemente viables (Cardona-Alzate et al., 2020). Estudios recientes sugieren que la producción simultánea de una gama de bioproductos puede aumentar la viabilidad económica de las biorrefinerías (Cardona-Alzate et al., 2020; Gifuni et al., 2019). El aceite de ricino, es una biomasa renovable adecuada para la

producción de biodiesel y una gama de compuestos químicos de alto valor en una biorrefinería (Dimian et al., 2019) como el ácido azelaico, ácido sebácico y ácido undecilénico

En México, el aceite de ricino, el ácido azelaico, el ácido sebácico, el ácido undecilénico, sus derivados y un alto porcentaje del biodiesel consumido se importan del extranjero (SAGARPA, 2017; SE, 2020). Por lo tanto, México puede ser un lugar potencial para la implementación de una biorrefinería basada en una planta de aceite de ricino. Sin embargo, es necesario realizar más investigaciones para determinar su posible viabilidad y rendimiento. Con respecto a las biorrefinerías basadas en aceite de ricino, Dimian, et al. (2019) han realizado un diseño de biorrefinería de aceite de ricino y han analizado su rendimiento económico. Sin embargo, para obtener un diseño más sostenible, es importante integrar ambos aspectos de rendimiento en el diseño de la biorrefinería.

En este marco, este estudio tiene como objetivo diseñar, evaluar y optimizar una biorrefinería multiproducto e integrada basada en la planta de aceite de ricino en el contexto mexicano. La optimización está sujeta a criterios ambientales y económicos. Para ello, se realiza un diseño conceptual, modelado de procesos, evaluación ambiental a través de metodología LCA, evaluación económica y análisis de optimización. Hasta donde sabemos, no se dispone de ningún estudio previo sobre el análisis de optimización basado en la distribución de la materia prima de biomasa para mejorar el rendimiento de la biorrefinería teniendo en cuenta criterios económicos y ambientales.

METODOLOGÍA

Ubicación geográfica de la biorrefinería: La ubicación geográfica seleccionada para este estudio es el Estado de Michoacán, en México. Específicamente, en los municipios de Apatzingan y Aguililla por su amplio potencial acorde a la producción del cultivo de ricino. Se estima que se podría producir al menos 4000 kg/h de aceite de ricino (Valencia et al., 2019). Esta cantidad se considera para la determinación de la unidad funcional en el ACV.

Análisis del ciclo de vida ambiental: La evaluación ambiental se realiza de acuerdo con los principios de ACV (ISO 14040/44) utilizando el software Open LCA V1.10.3. El objetivo es evaluar los posibles impactos ambientales de la producción de múltiples bioproductos en una biorrefinería integrada basada en la planta de aceite de ricino (es decir, aceite de ricino y residuos de plantas de ricino). Los productos son biodiesel, biogás, ácido azelaico, ácido undecilénico, ácido sebácico, glicerol, metanol, heptanal, 2-octanol, 2-octanona, lubricantes, aceite de calefacción y calor y energía. La unidad funcional es de 4000 kg/h de aceite de ricino extraído de la planta de ricino. Se define como un sistema de la cuna a la puerta. Los límites del sistema incluyen el cultivo de plantas de ricino, la extracción de aceite de ricino, la producción de energía, la producción de biodiesel, la producción de ácido azelaico y lubricante, y las fases de producción de ácido undecilénico y sebácico, así como el transporte desde la tierra de cultivo hasta la biorrefinería. En el estado de Michoacán, la electricidad se genera a partir de fuentes geotérmicas (11.66%) e hidroeléctricas (88.33%) (SENER, 2020). Por esta razón, la electricidad consumida por la biorrefinería es producida por estas fuentes, en las proporciones indicadas.

Inventario del ciclo de vida: Los datos de inventario se obtienen de la literatura y la simulación por ordenador en el software Aspen Plus V11. Este software se utiliza para el modelado de los procesos de producción de lubricante y ácido sebácico debido a la falta de datos en la literatura. Los datos del inventario pueden consultarse en Acevedo et al. (2022). Los procesos se simularon en el software Aspen Plus.

Evaluación del impacto del ciclo de vida: Una vez que se ha creado el inventario del ciclo de vida, los datos del inventario se analizan utilizando el software Open LCA V1.10.3 para cuantificar los impactos ambientales. La base de datos utilizada es Agribalyse V3.0.1 (Chung et al., 2019) y el método de evaluación de impacto es CML 2001. Las categorías de impacto evaluadas son el potencial de acidificación (Kg SO₂ eq/h), cambio climático (kg CO₂ eq/h), agotamiento de los recursos abióticos (kg antimonio eq/h), potencial de eutrofización (kg NO_x eq/h), ecotoxicidad acuática en agua dulce (kg 1,4-DCB eq/h), ecotoxicidad acuática marina (kg 1,4-DCB eq/h), ecotoxicidad de sedimentos de agua dulce (kg 1,4-DCB eq/h), ecotoxicidad de sedimentos marinos (kg 1,4-DCB eq/h), oxidación fotoquímica (kg etileno eq), ecotoxicidad terrestre (kg 1,4-DCB eq/h), toxicidad humana (kg 1,4-DCB eq/h) y uso del suelo (m²*año).

Evaluación económica: El desempeño económico de la biorrefinería se analiza estimando la generación de ingresos. Los ingresos se generarán a partir de las ventas potenciales de los productos y subproductos finales de biorrefinería en el mercado

Optimización del proceso: Se generaron 3 escenarios y un caso base con el fin de observar el comportamiento de las distintas variables del sistema con diferente distribución de acetite de ricino en las tecnologías de procesamiento de la biorrefinería para después generar varias soluciones factibles para el modelo de la biorrefinería, e identificar los puntos factibles del sistema. Se analizaron como objetivo el impacto ambiental y la ganancia neta anual (ver Ecuación (1))

Función objetivo: [maximizar las Ganancias; minimizar el Impacto Ambiental] (1)

A partir de las soluciones factibles se aplicó el método epsilon-constraint para poder obtener la curva Pareto considerando los objetivos económico y ambiental posteriormente, se seleccionó una de las soluciones óptimas, como alternativa de solución. Esta metodología es ampliamente utilizada para resolver problemas de optimización multiobjetivo. La solución óptima seleccionada corresponde a aquella solución que se encuentre más cercana del punto utópico, que representa la solución ideal con máxima ganancia y mínimo impacto ambiental. Para determinar la distancia relativa al punto utópico se utilizó la siguiente ecuación, en la que EI es el impacto ambiental y R es la ganancia similar a la metodología mostrada por Santibañez-Aguilar et al., 2019).

$$D_{u.p.} = \sqrt{[1 - (EI_{max} - EI / EI_{max} - EI_{min})]^2 + [1 - (R - R_{min} / R_{max} - R_{min})]^2} \quad (2)$$

RESULTADOS

Resultados del ACV: Figura 1A muestra los resultados del ACV. El escenario 2 tiene los mayores impactos ambientales en casi todas las categorías, excepto oxidación fotoquímica y ecotoxicidad terrestre. Por el contrario, el escenario 1 presenta el menor impacto ambiental en todas las categorías. El escenario 3 tiene los mayores impactos en las categorías de oxidación fotoquímica y categorías de ecotoxicidad terrestre, y presenta

impactos mayores que el escenario 1 en el resto de las categorías. El caso base tiene impactos menores que el escenario 3 en la oxidación fotoquímica y categorías de ecotoxicidad terrestre.

Contribuciones de los precursores a las categorías de impacto: Figura 1B muestra las contribuciones de los precursores. Como se puede observar, en todos los casos se tiene que los mayores impactos son a causa de la fase de cultivo y la electricidad. Particularmente, en los escenarios 2 y 3 el uso de hidróxidos representa una parte significativa en las categorías de impacto.

Resultados de impacto a la categoría de cambio climático: Figura 1C muestra los resultados para la categoría de cambio climático, Como puede ser notado, el escenario 2 libera 187,096 kg CO₂ eq/h. Este es el escenario que se ve más afectado en esta categoría. Le sigue el caso base, que emite 101.938 kg CO₂ eq/h, el escenario 3 libera 81.773 kg CO₂ eq/h, y el escenario 1 emite 60.313 kg CO₂ eq/h. Los resultados indican que la categoría de cambio climático se ve afectada por el CO₂ emisiones y metano liberado por la producción de insumos de cultivo, producción de electricidad, uso de vapor e hidróxido de sodio para todos los escenarios y el caso base.

Comparación económica ambiental: Figura 1D muestra los resultados de la comparación de los ingresos y el impacto ambiental de cada escenario y el caso base. Los resultados muestran que el escenario 1 causa la menor impactos ambientales y también genera los menores ingresos. Escenario 2 causa los mayores impactos ambientales y también genera los mayores ingresos. El caso base de biorrefinería presenta una reducción de aproximadamente el 40 % en los impactos ambientales en comparación con el escenario 2 y también genera aproximadamente un 50 % más de ingresos que escenarios 1 y 3. Según los resultados, los escenarios con mayor rentabilidad económica desempeño tuvo un menor desempeño ambiental. Por el contrario, los escenarios con menor desempeño económico tenían el mejor ambiente. desempeño ambiental. Estos resultados se pueden abordar con un enfoque de optimización para encontrar las condiciones del sistema que permitan obteniendo un mayor rendimiento ambiental y económico, simultáneamente.

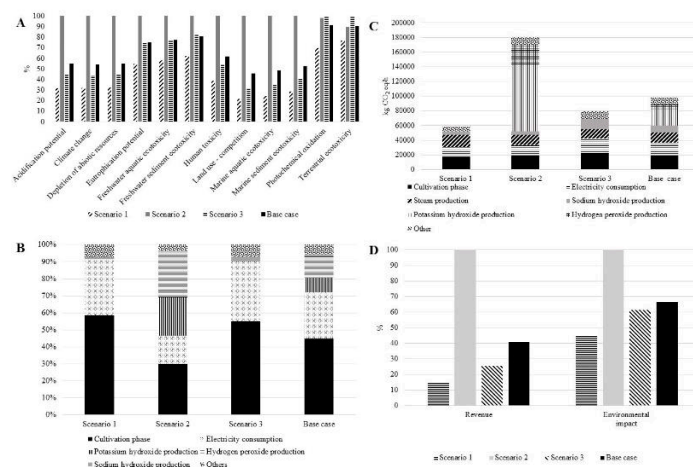


Figura 1. (A) Comparación general de los resultados de impacto, (B) Contribución de precursores a cada categoría de impacto, (C) Resultados para la categoría de cambio climático, (D) Comparación económica-ambiental.

Resultados de la evaluación de optimización: La categoría de cambio climático se seleccionó para la evaluación de optimización. Las figuras 2A y B muestran diferentes soluciones a destacar. El punto A es la solución con el mínimo impacto ambiental, el punto B corresponde a la solución con mayor ingreso, el punto E es el punto utópico, el punto C es el más cercano a la solución utópica y el punto D es una solución subóptima. Cabe señalar que los puntos A, B y D son soluciones obtenidas previamente durante la evaluación del escenario; cual han sido discutidos en detalle antes. De hecho, la solución D es el resultado del caso base que es una solución subóptima. Además, el punto C es la solución óptima seleccionada. Ésta representa una ganancia de 11.068 USD/h y un impacto ambiental de 112.623 Kg CO₂ eq/h. Los ingresos por las ventas potenciales de biocombustibles y energía (bio diésel, biogás, calor y electricidad) contribuyen con el 17 % del total ingresos. Los bio-químicos (ácidos azelaico, undecilénico, sebácico, heptanal, 2- octanol y 2-octanona) contribuyen con el 74 %, y los subproductos (metanol, glicerol, biolubricante y gasóleo) contribuyen con el 9 %. Como se puede observar, el mayor beneficio de la biorrefinería de *Ricinus communis* proviene de las ventas potenciales de productos bioquímicos, lo que significa que la producción de bio-químicos soporta la rentabilidad de la biorrefinería. Es importante señalar que, a diferencia del trabajo de Dimian et al. (2019), el proceso de optimización reportado en nuestro trabajo aumenta 1,77 veces los ingresos totales de la biorrefinería. Finalmente, la distribución óptima de los flujos de materia prima es de 1704 kg/h para biodiésel (X1), 1519 kg/h para el ácido azelaico (X2), 266 kg/h para undecilénico (X3), y 511 kg/h para el ácido sebácico (X4). La cantidad de bioproductos y los subproductos producidos se pueden consultar en Acevedo et al. (2022).

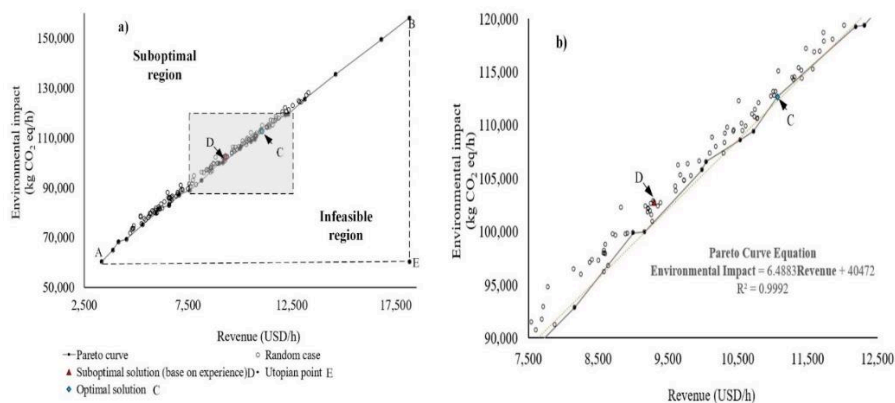


Figura 2. (A) Resultados de la curva de pareto, punto utópico, y solución óptima (B) Curva de Pareto entre solución subóptima y solución óptima)

CONCLUSIONES

Los resultados demuestran que el aceite de ricino es una alternativa muy prometedora como materia prima para una biorrefinería que permita reemplazar el uso de combustibles fósiles. Estos resultados muestran además que al utilizar una estrategia óptima de aprovechamiento del aceite de ricino se puede mejorar el desempeño económico y ambiental de la biorrefinería. La distribución óptima de flujos de biomasa como materia prima resultó de la siguiente manera: 42% del aceite de ricino para utilizarse en la producción de biodiesel, 38% para producir ácido azelaico, 7% para ácido undecilénico y 13% para ácido sebácico. Finalmente, este enfoque metodológico se puede extender

III Simposio de Optimización Aplicada a la Ingeniería Química (SOAIQ). Octubre 4-6, 2023. Editores: Fernando Israel Gómez Castro, Juan Gabriel Segovia Hernández, Claudia Gutiérrez Antonio, Eduardo Sánchez Ramírez, José Ezequiel Santibañez Aguilar
© 2023, AMOAIQ. Todos los derechos reservados.

para hacer una evaluación en un contexto internacional que incluya aspectos sociales y otros parámetros de sustentabilidad.

REFERENCIAS

Acevedo-García, B., Santibañez-Aguilar, J. E., & Alvarez, A. J. (2022). Integrated multiproduct biorefinery from *Ricinus communis* in Mexico: Conceptual design, evaluation, and optimization, based on environmental and economic aspects. *Bioresource Technology Reports*, 19, 101201.

Cardona-Alzate, C.A., Serna-Loaiza, S., Ortiz-Sanchez, M., 2020. Sustainable biorefineries: what was learned from the design, analysis and implementation. *J. Sustain. Dev. Energy, Water Environ. Syst.* 8, 88–117.

Dimian, A.C., Iancu, P., Plesu, V., Bonet-Ruiz, A.E., Bonet-Ruiz, J., 2019. Castor oil biorefinery: conceptual process design, simulation and economic analysis. *Chem. Eng. Res. Des.* 141, 198–219.

Gifuni, I., Pollio, A., Safi, C., Marzocchella, A., Olivieri, G., 2019. Current bottlenecks and challenges of the microalgal biorefinery. *Trends Biotechnol.* 37, 242–252.

SAGARPA, 2017. Bioenergéticos: Higuierilla, jatropha curcas, sorgo dulce mexicanos. *Planeación Agrícola Nacional 2017-2030*. México.

Santibañez-aguilar, J.E., Flores-Tlacuahuac, A., Lozano-Gracia, D.F., Lozano, F.J., 2019. Novel approach for weighting in the geographic information system focused on a multistakeholder problem: case for the residual biomass processing. *Ind. Eng. Chem. Res.* 58 (51), 23249–23260.

SE, 2020. 'Acido azelaico, 'acido seb'acico, sus sales y 'esteres. [WWW Document]. URL.

Secr. Econ. <https://datamexico.org/es/profile/product/azelaic-acid-sebacic-acid-their-salts-and-esters>. (Accessed 12 August 2021).

SENER, 2020. Programa de desarrollo del sistema eléctrico nacional 2020-2034. Secretaría de energía, México.

SENER, 2017. Mapa de ruta tecnológica: Biodiesel. México.

Valencia, G.L., Borbon Gracia, A., Ochoa Espinoza, X.M., Antuna Grijalva, O., Hernández Hernández, A., Coyac Rodríguez, J.L., 2019. Productividad de higuierilla (*Ricinus communis* L.) en el norte de Sinaloa. *Rev. Mex. Ciencias Agrícolas* 10, 1011–1022.

Diseño y optimización de una columna reactiva con pared divisoria para la producción de etil metil carbonato y dietil carbonato

Gloria Azucena Buitimea-Cerón^a, Nancy Medina-Herrera^b, Arturo Jiménez-Gutiérrez^c, Salvador Tututi-Ávila^{a*}

^aUniversidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad S/N, San Nicolás de los Garza, NL, Mexico..

^bUniversidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Agronomía, Francisco Villa S/N, ExHacienda el Canadá, General Escobedo, NL, Mexico

^cDepartamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Celaya, Av. Tecnológico y García Cubas S/N, 38010, Celaya, Gto., Mexico. salvador.tututivl@uanl.edu.mx

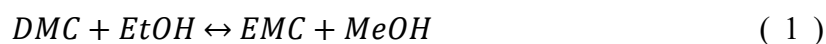
RESUMEN

Las columnas de destilación reactivas (RC) son equipos intensificados donde se pueden llevar a cabo en el mismo equipo reacciones químicas y la separación de los productos simultáneamente, las RC han demostrado tener un gran potencial en aumentar conversiones de reactivos a productos y la obtención de productos de alta pureza. Por otra parte, las columnas destilación con pared divisoria son columnas intensificadas que pueden separar mezclas de más de tres componentes en el mismo equipo. Un proceso multi-producto es aquel capaz de producir más de un producto en un mismo equipo o serie de equipos (planta), la idea principal en estos procesos es modificar la selectividad de los reactivos hacia más de un producto de interés. En el presente proyecto se diseña y se optimiza una columna reactiva con pared divisoria multi-producto, capaz de obtener como productos etil metil carbonato (EMC) o dietil carbonato (DEC), el diseño se obtiene utilizando Aspen Plus y Matlab para la optimización con algoritmos genéticos, La función objetivo de la optimización fue minimizar el costo total anual (TAC). Los resultados demostraron tener un ahorro del 10 % en el costo total anual en el diseño de la columna reactiva con pared divisoria, respecto a un diseño de dos columnas.

Palabras clave: Multi-producto, columna reactiva, columna con pared divisoria.

INTRODUCCIÓN

El dietil carbonato (DEC) y el etil metil carbonato (EMC) son compuestos con variedad de aplicaciones en la industria. El DEC es un excelente aditivo para combustibles [1], también es un intermediario de reacción para la producción de fármacos como fenobarbital y norfloxacin [2]–[5]. Por otro lado, el EMC se puede utilizar como aditivo para revestimientos, pinturas [6] y como solvente en soluciones electrolíticas de baterías ion litio [7]. Las reacciones para producir DEC son las siguientes:



El subproducto de ambas reacciones es el metanol (MeOH), el EMC es el intermediario en este sistema de reacciones, debido a las aplicaciones de este último compuesto y a que tiene un costo mayor en el mercado que el del DEC, se considera importante el estudio de la obtención de este compuesto mediante las reacciones que se muestran arriba. Existen muchos trabajos que estudian el diseño de columnas reactivas para la producción del DEC [2]–[5], pero solo un estudio para la obtención de ambos compuestos DEC y EMC[7], sin embargo este diseño no se obtiene desde un principio con el objetivo de producir ambos compuestos, ni es optimizado. En el presente trabajo se obtuvo un diseño óptimo de columna reactiva con pared divisoria (RDWC) en la cual se pueden obtener dos productos de interés (DEC ó EMC), para la obtención de este diseño se parte de un diseño de dos columnas, que consiste en una columna de destilación reactiva (RC) y una columna de destilación (DC) en la cual se recupera el reactivo en exceso. El diseño de dos columnas también es optimizado para hacer un análisis comparativo de ambos diseños.

METODOLOGÍA

El sistema fue simulado en el software Aspen Plus, el método termodinámico que se utilizó fue UNIQU-RK, se requieren introducir los parámetros de interacción binaria de los compuestos, estos fueron tomados del apéndice A-2 de Keller et al. [7]. El diseño base de dos columnas (RCDC) del cual se partió es el reportado por nuestro grupo de investigación en trabajos anteriores [8]. En Aspen la RDWC se simula como dos columnas *RADFRAC* térmicamente acopladas. La primera columna con achurado (PRE-RC) en la Figura 1 representa el lado de la RDWC en donde se encuentra la zona reactiva. Esta columna se especifica sin condensador y con un rehervidor. La segunda columna en color morado (MAIN-DC) del sistema acoplado mostrado en la Figura 1 representa a las etapas superiores de la RDWC hasta el inicio de la pared y a las etapas del lado de la pared donde no hay reacción, esta segunda columna se especifica con un condensador y un rehervidor

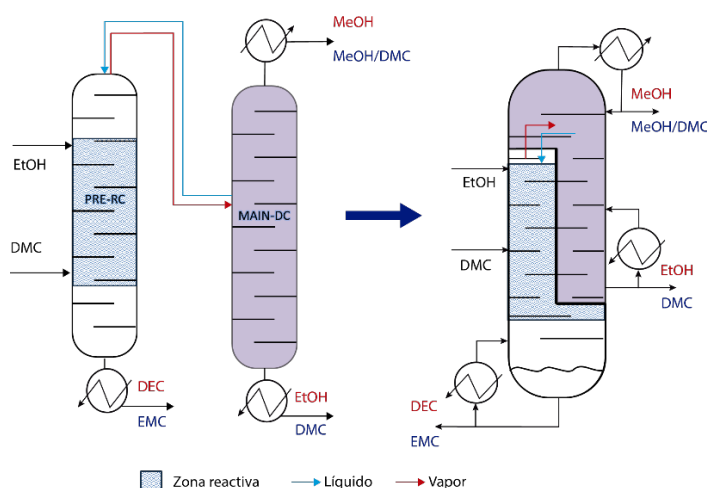


Figura 1. Diseño con acoplamiento térmico equivalente a la RDWC.

La RDWC será una columna con dos rehervidores y un condensador. Para obtener el diseño preliminar, es decir, sin optimizar; las etapas de alimentación, el número de etapas

de la columna, el inicio y fin de la zona reactiva PRE-RC son las mismas que la columna reactiva del diseño de dos columnas. La columna PRE-RC no cuenta con condensador, por lo tanto, se les quita una etapa a todas las variables mencionadas anteriormente. La columna PRE-RC se especifica con la relación de boilup del diseño de la columna reactiva del diseño RCDC, esto sólo para inicializar la simulación. Por otro lado, el flujo del líquido que retorna de la MAIN-DC a la PRE-RC se especifica con el reflujo que requiere la columna reactiva del diseño RCDC. La MAIN-DC se especifica con las mismas etapas que la columna de separación del diseño RCDC. La etapa de alimentación de la columna de separación es la etapa de interconexión del acoplamiento térmico. En la MAIN-DC para inicializar la simulación se especifica el boilup de la columna de separación del diseño RCDC. Para especificar el reflujo de la RDWC, se toma el reflujo requerido de esta columna reactiva más el que requiere la columna de separación del diseño RCDC. Con la suma de los reflujos se calcula una relación de reflujo respecto al destilado de la columna de separación para especificar esta relación de reflujo en la MAIN-DC. El procedimiento descrito anteriormente es para la inicialización de la simulación.

Enseguida en la PRE-RC se especifica la pureza en fracción molar de los productos DEC o EMC en la corriente de los fondos según sea el caso, la variable manipulada es la relación de boilup. En la MAIN-DC se especifica la pureza en el destilado de 0.996 fracción mol de MeOH cuando se produce DEC o la pureza más cercana posible al azeótropo formado por el MeOH y el DMC cuando se produce EMC, la variable manipulada para cumplir con esta pureza es la relación de reflujo. Por último, se especifica la pureza del reactivo en exceso en los fondos de la MAIN-DC, de EtOH cuando se produce DEC o de DMC cuando se produce EMC. Esta corriente de los reactivos en exceso se recircula y se conecta a la corriente de alimentación.

La optimización de la RDWC se lleva a cabo vinculando Aspen plus y Matlab, minimizando el costo total anual (TAC) con algoritmos genéticos. Las variables que se optimizan son el número de etapas de PRE-RC (N_{PRERC}), etapa de inicio de la zona reactiva (N_{RZ1PRE}), etapa final de la zona reactiva (N_{RZ2PRE}), número de etapas de la columna MAIN-DC (N_{MAINDC}), etapa de interconexión (N_{FINTER}), etapa de alimentación de EtOH para producir DEC ($N_{FE_{DEC}PRE}$), etapa de alimentación de DMC para producir DEC ($N_{FD_{DEC}PRE}$), etapa de alimentación de EtOH para producir EMC ($N_{FE_{EMC}PRE}$), etapa de alimentación de DMC para producir EMC ($N_{FD_{EMC}PRE}$), flujo de alimentación de EtOH para producir DEC ($MF_{EtOH,RDWC}$), holdup en la columna reactiva (HU_{RDWC}), flujo del líquido que retorna la PRE-RC para producir DEC (IF_{DEC}), flujo del líquido que retorna la PRE-RC para producir EMC (IF_{EMC}), flujo de alimentación de DMC para producir EMC ($MF_{DMC,RDWC}$).

$$TAC = TIC + TOC \quad (3)$$

$$TIC = \frac{Cost_{shell,RDWC} + Cost_{reboiler,PRE-RC} + Cost_{condenser,MAINDC} + Cost_{reboiler,MAINDC}}{(4) \text{ Payback period}}$$

$$TOC = P_{vapor} * (0.5Q_{r,PRE}^{DEC} + 0.5Q_{r,PRE}^{EMC}) + P_{vapor} * (0.5Q_{r,MAIN}^{DEC} + 0.5Q_{r,MAIN}^{EMC}) + P_{catalyst} * m_{catalyst} \quad (5)$$

$$\text{MinTAC} = f(N_{PRERC}, N_{RZ1PRE}, N_{RZ2PRE}, NFE_{EMCPRE}, NFD_{EMCPRE}, NFE_{DECPRE}, NFD_{DECPRE}, N_{MAINDC}, NF_{INTER}, MF_{EtOH,RDWC}, MF_{DMC,RDWC}, HU_{RDWC}, IF_{DEC}, IF_{EMC}) \quad (6)$$

Ecuaciones de costos {Ecuacion (3 – 5)}

Ecuaciones MESH (Modelo de Aspen Plus)

Purezas de los productos (Especificaciones de diseño en Aspen Plus)

$$0 \leq N_{PRERC}, N_{RZ1PRE}, N_{RZ2PRE}, NFE_{EMCPRE}, NFD_{EMCPRE}, NFE_{DECPRE}, NFD_{DECPRE}, N_{MAINDC}, NF_{INTER}, MF_{EtOH,RDWC}, MF_{DMC,RDWC}, HU_{RDWC}, IF_{DEC}, IF_{EMC} \leq X^{upper} \quad (7)$$

$$N_{PRERC}, N_{RZ1PRE}, N_{RZ2PRE}, NFE_{EMCPRE}, NFD_{EMCPRE}, NFE_{DECPRE}, NFD_{DECPRE}, N_{MAINDC}, NF_{INTER} \in \mathbb{Z} \quad (8)$$

$$MF_{EtOH,RDWC}, MF_{DMC,RDWC}, HU_{RDWC}, IF_{DEC}, IF_{EMC} \in \mathbb{R} \quad (9)$$

Este problema de optimización es un modelo de optimización mixto entero no-lineal. Para la optimización se considera que la mitad del año se produce DEC y la otra mitad se produce EMC. Los parámetros considerados en el algoritmo genético fueron 100 individuos, 250 generaciones y factores de cruce y mutación de 0.8 y 0.2, respectivamente.

Las relaciones de tamaño y los factores económicos se tomaron de Luyben [9] para los cálculos del TAC, se consideró un periodo de retorno de la planta de tres años [10]. El costo del catalizador utilizado es de 2,989 MXN/kg. Para el cálculo del diámetro de la RDWC se utiliza un diámetro equivalente (Ec. 10). La premisa del diámetro equivalente es que el área de la base de la columna sea equivalente a la suma del área de la MAIN- RC y la PRE-DC.

$$D_{eq} = \sqrt{\frac{D_{PRE}^2 + D_{MAIN}^2}{2}} \quad (10)$$

RESULTADOS

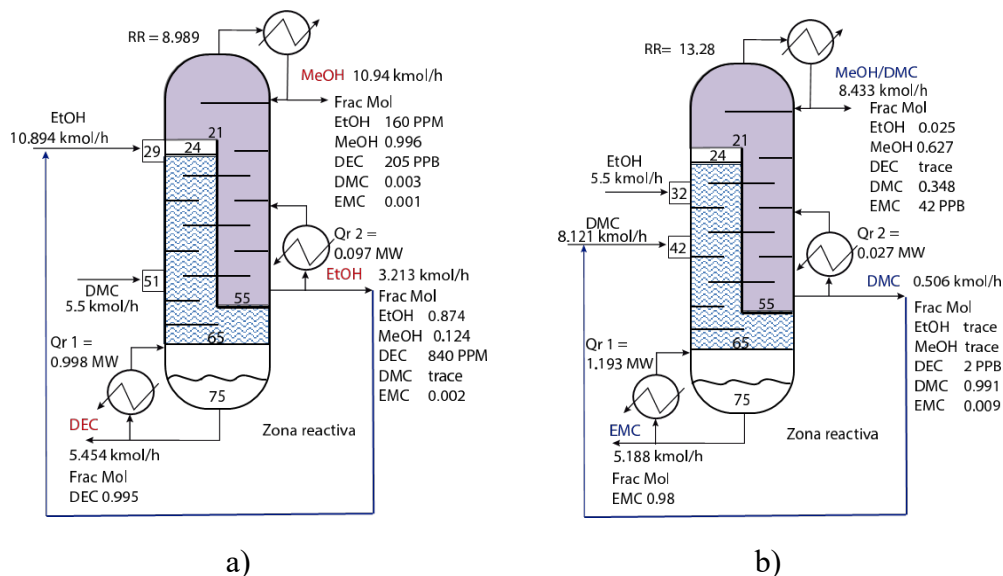


Figura 2. a) Diseño óptimo (RDWC) cuando se produce DEC. b) Diseño óptimo (RDWC) cuando se produce EMC.

El diseño óptimo cuando se produce DEC requiere una carga térmica menor en el rehervidor 1 que cuando se produce EMC. Mientras que, en el rehervidor 2 sucede lo opuesto, cuando se produce EMC se requiere una carga menor que cuando se produce DEC. Respecto a las relaciones de reflujos, se tiene una relación de reflujo mayor cuando se desea producir EMC.

Tabla 1. Resultados comparativos de los diseños óptimos RCDC y RDWC.

	Diseño óptimo RCDC		Diseño óptimo RDWC	
	RC	DC	PRE-RC	MAIN-DC
<i>Número de etapas</i>	53	60	50	56
<i>Interconexión</i>	-		21	
<i>Número total de etapas</i>	113		69	
<i>Diámetro [m]</i>	0.904	0.540	1.293	
<i>Q_r [MW] DEC</i>	1.0211	0.6198	0.9989	0.0977
<i>Q_r [MW] EMC</i>	0.947	0.1474	1.1935	0.0276
<i>Costo decatalizador [USD/año]</i>	11484		12889	
<i>Costo de energía [USD/año]</i>	354130		304140	
<i>Costo de capital [USD]</i>	703050		701470	
<i>TAC [USD/año]</i>	588480		529620	

CONCLUSIONES

El diseño de RDWC óptimo de este estudio es capaz de producir de forma independiente ambos productos de interés con las purezas deseadas para su comercialización. De acuerdo con los resultados este diseño tiene un TAC 10 % menor que el diseño óptimo RCDC. La diferencia es principalmente debida a los costos de energía.

Producir DEC en la RDWC óptima todo el año tiene un TAC 20 % menor que producirlo en el diseño óptimo RCDC. Esta diferencia se debe principalmente al costo energético en el cual se tiene un ahorro de 30 % aproximadamente al producir DEC en la RDWC óptima. Sin embargo, la diferencia es opuesta en el caso en que se produce EMC. De acuerdo con los resultados producir EMC en el diseño óptimo RCDC se tiene un ahorro energético de 10 % aproximadamente comparado a producirlo en el diseño óptimo RDWC.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el apoyo financiero brindado por la Universidad Autónoma de Nuevo León y CONACyT (México).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] B. C. Dunn *et al.*, “Production of Diethyl Carbonate from Ethanol and Carbon Monoxide over a Heterogeneous Catalyst,” no. 8, pp. 177–181, 2002.
- [2] H. P. Luo and W. De Xiao, “A reactive distillation process for a cascade and azeotropic reaction system: Carbonylation of ethanol with dimethyl carbonate,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 56, no. 2, pp. 403–410, 2001.
- [3] L. Zheng, W. Cai, X. Zhang, and Y. Wang, “Design and control of reactive dividing-wall column for the synthesis of diethyl carbonate,” *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 111, pp. 127–140, 2017.
- [4] H. Y. Wei, A. Rokhmah, R. Handogo, and I. L. Chien, “Design and control of reactive-distillation process for the production of diethyl carbonate via two consecutive transesterification reactions,” *J. Process Control*, vol. 21, no. 8, pp. 1193–1207, 2011.
- [5] I. Müller and E. Y. Kenig, “Reactive and non-reactive distillation sequences : Energy saving by process integration Reactive and non-reactive distillation sequences : Energy saving by process integration Estimation of feasible column set-ups,” no. May, 2014.
- [6] “National Center for Biotechnology Information,” *PubChem Compound Summary for CID 522046, Ethyl methyl carbonate*, 2020. .
- [7] T. Keller, B. Dreisewerd, and A. Górak, “Reactive distillation for multiple-reaction systems: Optimisation study using an evolutionary algorithm,” *Chem. Process Eng. - Inz. Chem. i Proces.*, vol. 34, no. 1, pp. 17–38, 2013.
- [8] G. A. Buitimea-Cerón, N. Medina-Herrera, A. Jiménez-Gutiérrez, and S. Tututi-Avila, “Design of a multiproduct reactive distillation system for DEC and EMC production,” *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 192, no. August, 2023.
- [9] W. L. Luyben, “Comparison of extractive distillation and pressure-swing distillation for acetone/chloroform separation,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 50, pp. 1–7, 2013.
- [10] W. L. Luyben, *Distillation Design and Control Using AspenTM Simulation*. 2013.



**NUEVAS
TÉCNICAS DE
OPTIMIZACIÓN**

Optimización de la estructura mecánica de un pantógrafo tipo Gantry para corte laser

Eduardo Francisco Ovando Figueroa^a, Juan José Quiroz-Ramírez^{a*}, Eduardo Sánchez-Ramírez^b, Juan Gabriel Segovia-Hernández^b, Gabriel Contreras-Zarazua^b

a Catedra CONACYT, Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC AC), Omega No. 201, Col. Industrial Delta C.P., 37545, León, Gto, México.

b Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 36050, México. jquiroz@ciatec.mx, jjqr111@hotmail.com.

RESUMEN

El diseño y construcción de un pantógrafo tipo Gantry para el proceso de corte por láser de fibra tiene especificaciones de diseño de mayor velocidad y precisión que otros procesos térmicos de corte. La maximización de las especificaciones está dirigida en sentidos divergentes por lo que se ejecuta una optimización de múltiples objetivos. Un pantógrafo Gantry es una estructura con dimensiones físicas variables en un rango. Si se seleccionan las dimensiones con los objetivos de minimizar la masa, deformación y maximizar frecuencias de resonancia, entonces se obtiene la mejor estructura mecánica para un control de posicionamiento, lo cual se logra con un proceso de optimización. Este trabajo describe el proceso de optimización y la selección de un individuo para su fabricación de acuerdo con un análisis Jerárquico. utilizando el frente de Pareto, y se muestra el diseño resultante con mejoras significativas en masa, deformación y frecuencias en comparación con el diseño inicial.

Palabras clave: Diseño paramétrico, Optimización, Pantógrafo Gantry, Frecuencias de resonancia.

INTRODUCCIÓN

El corte de materiales metálicos planos se ha realizado con procesos térmicos como el corte por oxidación, plasma y láser. El proceso de corte por láser tiene nuevas tecnologías que han aumentado el alcance de la velocidad de proceso (40 m/min) en los últimos años y es controlado completamente por máquinas de control numérico (CNC) que dadas sus condiciones de velocidad exige una máquina con dinámica rápida y control suficiente para generar trayectorias con precisión y velocidad [1]. Pero maximizar precisión y velocidad son especificaciones de diseño en sentidos opuestos [2] entonces se recurre a la optimización del CNC.

Los robots cartesianos, Gantry o pórtico son útiles en aplicaciones para el corte de materiales planos ya que se extienden varios metros en largo y ancho. La precisión del posicionamiento de la herramienta es función de múltiples factores siendo los más significativos las tolerancias mecánicas de su construcción, la deformación y el tiempo de respuesta a la posición que se le comande. Por ello Stan et al. [3] concluyen que los ejes cinemáticos que toman parte en la interpolación de las trayectorias deberán tener aceleraciones tan altas como sean posibles para disminuir el error de trayectoria y esto requiere de la optimización en la estructura mecánica desde el diseño. Se han desarrollado

métodos de la optimización de la estructura de un Gantry tomando en cuenta las variables de dimensión en el diseño de los cuales Besharati et al. y Liu son representativos [4,5].

Kamaldin [6] apuntó que conforme se reduce la masa de una estructura mecánica su dinámica es más flexible y la acción de control excita modos de vibración conforme se mueve a mayor velocidad, por lo que las frecuencias de resonancia de la estructura deben ser maximizadas.

METODOLOGÍA

El sistema CNC de corte por láser funciona bajo el esquema mostrado en Figura 1, los sistemas físicos se representan en bloques y las señales que se manejan en las flechas. El alcance del trabajo es determinar la estructura mecánica óptima por medio de un algoritmo de búsqueda.

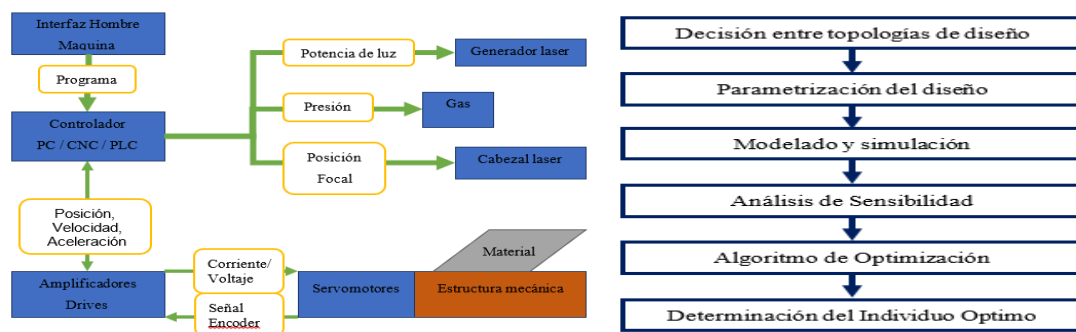


Figura 1 Sistema de corte por laser, Figura 2 Etapas de la metodología de solución

En la figura 2 se resume la metodología realizada para obtener el diseño óptimo del pantógrafo Gantry. La metodología inicia con el experimento para determinar la topología de diseño y termina con la convergencia al individuo óptimo. La topología de la estructura, estudio de las propiedades de la forma de la sección transversal del puente, evalúa el perfil periférico y las ramas interiores insertadas para aumentar su rigidez, algunos ejemplos de ellos son presentados en la Figura 3. El diseño experimental factorial a dos niveles propuesto es la base para inferir el perfil más afín a los objetivos buscados con los 5 factores de construcción descritos en la Tabla 1.

Factor	Nombre	Bajo	Alto	Característica
A	Forma	Rectangular	Triangular	Forma perimetral
B	Niveles	1	3	Nivel de división, indica la cantidad de ramas
C	Angulo	45	90	Angulo relativo al eje vertical Z
D	PIH	Inicio	Enmedio	Posición Inicial Horizontal referente al nivel
E	PIV	Enmedio	Final	Posición Inicial Vertical referente al nivel

Figura 3 Ejemplos de topología de la sección transversal de la estructura puente **Tabla 1.** Factores de construcción en la estructura puente

Se busca optimizar un pantógrafo Gantry evaluando masa, deformación y las primeras 4 frecuencias de resonancia. Los modelos derivados de estas evaluaciones guían la optimización estructural. Dado que no todas las respuestas son igualmente importantes, se usa el método AHP para asignarles pesos basados en comparaciones cuantitativas.

Para el diseño, se parametrizan variables dimensionales como alturas, espesores y separaciones, derivadas de un modelo heurístico y su factibilidad, tomando en cuenta restricciones geométricas. El diseño se simula en un software CAD, representando conexiones estructurales como uniones rígidas.

Las Funciones Objetivo (FO) del problema multiobjetivo incluyen minimizar la masa, el error por deformación elástica y maximizar las frecuencias de resonancia. Para comprender cómo afectan las variables de diseño a las FO, se realiza un análisis de sensibilidad usando el método de muestreo individual.

la minimización de la masa (ecuación 1) cuya evaluación es la suma del producto de densidad y volumen de los elementos que forman la estructura.

$$\min f_m(X_i) = \sum_{i=1}^n (\text{densidad})(\text{Area extendida})(\text{espesor}) \text{ [kg]} \quad (1)$$

minimizar el error por la deformación elástica del material δ_e calculada por EF (ecuación 2).

$$\min \delta(X_i) = \delta_e \text{ [mm]} \quad (2)$$

frecuencia de resonancia son función de las dimensiones geométricas (ecuación 3).

$$\max f_k(X_i) = f, k = 1, 2, 3, 4 \text{ [Hz]} \quad (3)$$

El algoritmo de optimización Multi-Objetivo (DETL) se plantea matemáticamente con restricciones para garantizar la factibilidad del diseño, usando como base las 6 FO: Masa, Deformación y 4 frecuencias naturales. Con el frente de Pareto de MOO se identifican soluciones no dominadas. Para seleccionar la solución óptima, se normalizan los resultados de las FO y se combinan usando los pesos del AHP. Se elige el individuo con el valor más bajo como el óptimo.

RESULTADOS

Se empleó AHP con las matrices de comparación en tabla 4 y 5. La matriz de frecuencias resume la aportación al criterio de Frecuencia. Se reportan el índice de consistencia IC y la relación de inconsistencia RI válidos por debajo del 10%. Se observa que es más importante el criterio de Deformación y naturalmente las frecuencias toman valores descendentes de importancia.

Tabla 4 Matriz de los criterios

	Deformación	Frecuencia	Masa	Pesos
Deformación	1	2	2	0.490
Frecuencia	1/2	1	2	0.312
Masa	1/2	1/2	1	0.198

Tabla 5 Matriz de las frecuencias

	F1	F2	F3	F4	Pesos
F1	1	2	2	2	0.380
F2	1/2	1	2	3	0.292
F3	1/2	1/2	1	3	0.213
F4	1/2	1/3	1/3	1	0.115

Los juicios de comparación se homologaron a la literatura existente con esta herramienta [4,7] que dio como resultado una partición como se muestra en Figura 1.

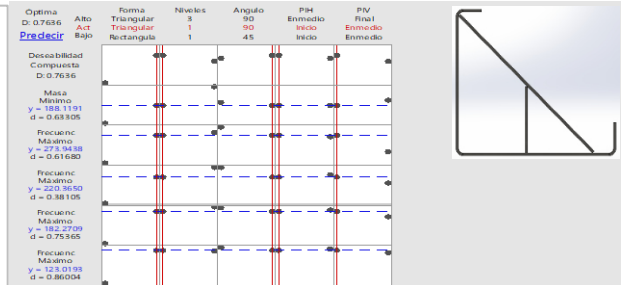
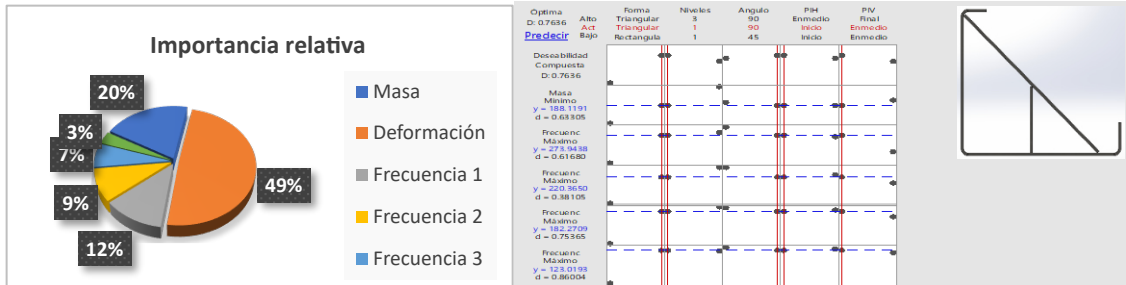


Figura 1 Importancia relativa de las respuestas Figura 2 Resultado óptimo del experimento factorial

Los modelos de regresión lineal en conjunto con los pesos de importancia establecen la Deseabilidad Compuesta. La alternativa óptima de esta exploración del diseño general se muestra en Figura 2. Los datos en la primera columna establecen en 5 y la respuesta esperada y con d el valor relativo al rango encontrado en los datos, 0 para el mínimo y 1 para el máximo.

Esta alternativa fue dibujada (Figura 6) con partes de un pantógrafo funcional en un modelo 3D con 24 Dimensiones sujetas a restricciones de construcción que se muestran en tabla 5

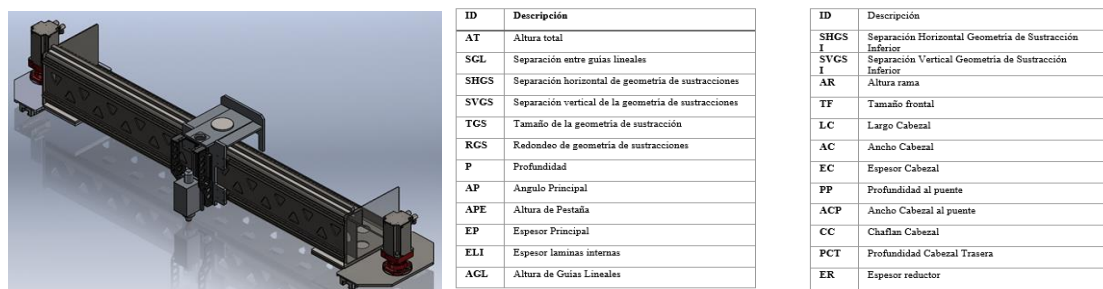


Figura 3 Modelo 3D óptimo del experimento factorial

La sensibilidad de los parámetros fue analizada para distinguir las VD de mayor contribución a las FO. La Figura 9 muestra que la contribución es multivariada y la dirección que toman en su rango.

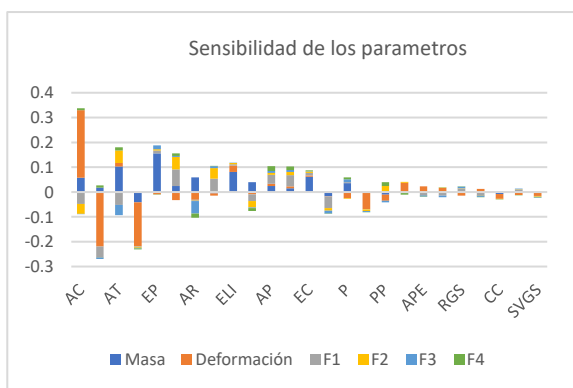


Figura 4 Sensibilidad de los parámetros

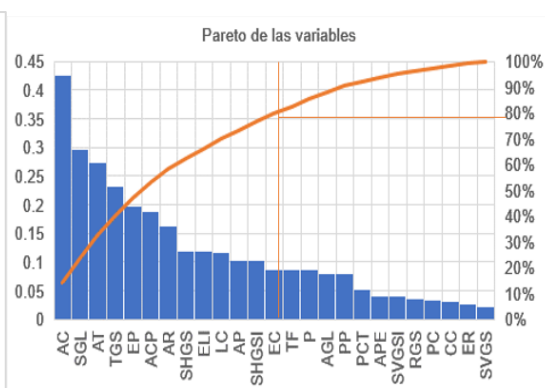


Figura 5 Pareto de las VD

La Figura 5 indica que son 12 parámetros de los 25 elegidos a variar los que aportan el 80% a la respuesta de los objetivos

El diseño paramétrico fue desarrollado en SolidWorks®. En seguida se procedió a ejecutar el algoritmo MODE-TL programado en Excel® Visual Basic donde se establecen las VD y se ejecutan las evaluaciones de las FO. Los parámetros de configuración se reportan en la Tabla en una computadora (procesador y memoria). Se evaluaron 7656 combinaciones de VD de las cuales 4188 fueron validas ya que cumplieron con los limites de rango en VD y las restricciones geométricas de la estructura mecánica. La evolución del algoritmo muestra en la Figura 11 que solo las primeras generaciones están dispersas y hay una mayor densidad en el espacio de trabajo conforme avanza el algoritmo.

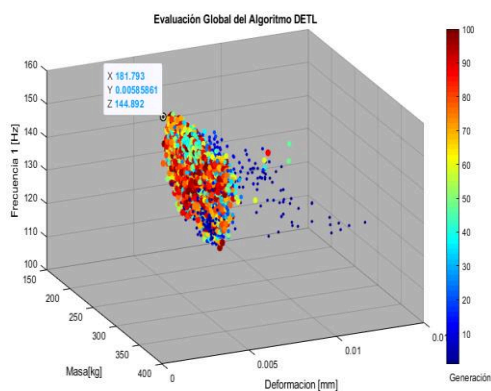
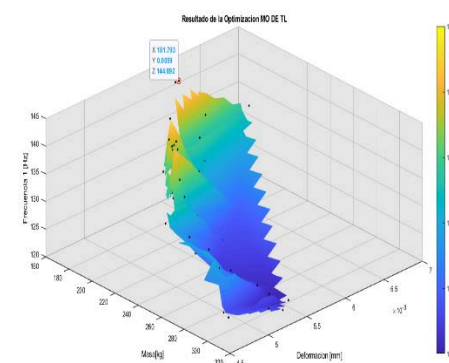


Figura 6 Espacio de resultados Figura



7 Representación del frente de Pareto

En esta grafica de dispersión muestra el subespacio de las principales FO resultantes de la aplicación del conjunto VD que el algoritmo colocó. De esta nube de puntos los resultados que arroja el algoritmo son una muestra representativa del frente de Pareto que se muestra en la Figura 6. El algoritmo por su definición elige conjuntos de VD separadas por la distancia normalizada TR, lo cual también se reflejó en el espacio de las FO.

De este grupo la selección del individuo más apto se realiza con la combinación lineal de sus FO y el vector de valores de los criterios AHP, resultado el individuo del punto Negro y Rojo en la figura 11 y 12

El diseño resultante de las VD del punto óptimo representa una mejora en los términos de la Tabla 6. Tabla 1 Comparación del resultado de la Optimización

	Unidad	Ponderación	Inicial	Final	Mejora
Masa	kg	19.8%	303.15	181.79	40%
Deformación	mm	49.0%	0.0087	0.0059	32%
1ra Frecuencia	Hz	31.2%	114	144	25%

El diseño optimizado destaca cambios esenciales, evidenciados en las figuras 13, 14 y 15: la rama interior ajusta el peso en la parte frontal del pantógrafo; las guías lineales no se extienden a lo largo de todo el alto frontal; las geometrías de sustracción se centralizan ampliamente en la cara frontal; la conexión entre los motores se aproxima a

la boquilla de corte, y la primera frecuencia de resonancia, centrada en el cabezal, se ve mayormente afectada por el movimiento de los rieles.

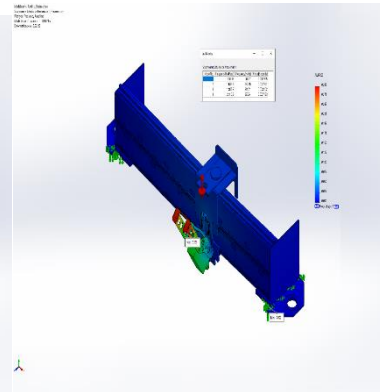
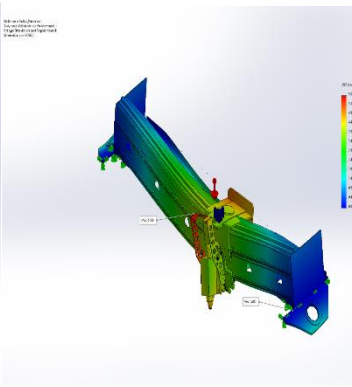
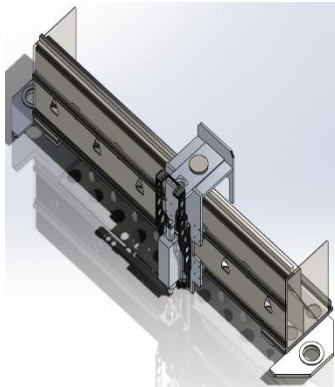


Figura 8 Diseño del Individuo Optimo Figura 9 Deformación Estática Figura 10 Frecuencias de Resonancia

CONCLUSIONES

Se elaboró un diseño paramétrico con múltiples variables de decisión para la formación de una estructura mecánica compleja, la cual fue optimizada usando el algoritmo de Múltiple Objetivo de Diferenciación Evolutiva con uso de Lista Tabú. El algoritmo determinó un subconjunto de individuos óptimos del cual fue elegido uno solo por la ponderación del análisis jerárquico. La estructura mecánica resultante presenta mejoras significativas que podrán ser evaluadas en un trabajo posterior.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- J. Powell, D. Petring, J. Pocorni, and A. Kaplan, *LIA Guide to High Power Laser Cutting*. Laser Institute of America, 2017.
- M. R. Katebi and M. J. Grimble, "Process and control design for fast coordinate measuring machines," *Diagnostic, Reliab. Control Syst.*, vol. 3, no. 3, pp. 263–305, 2000, doi: 10.1201/b16995-7.
- G. Stan, G. Lazar, and C. Miron, "Optimization of the response times of the feed kinematical linkages of the numerical control machine tools in order to minimize the path error," *Meccanica*, vol. 47, no. 5, pp. 1217–1227, 2012, doi: 10.1007/s11012-011-9506-1.
- S. R. Besharati *et al.*, "Multi-objective selection and structural optimization of the gantry in a gantry machine tool for improving static, dynamic, and weight and cost performance," *Concurr. Eng. Res. Appl.*, vol. 24, no. 1, pp. 83–93, 2016, doi: 10.1177/1063293X15597047.
- S. Liu, Y. Du, and M. Lin, "Study on lightweight structural optimization design system for gantry machine tool," *Concurr. Eng. Res. Appl.*, vol. 27, no. 2, pp. 170–185, 2019, doi: 10.1177/1063293X19832940.
- N. Kamaldin, "Robust adaptive control of high precision mechatronic systems" National University of Singapore, 2018.

Incorporación Simultánea de Modelos de Machine Learning en la Programación Matemática para la Óptima Producción de Gas y Gestión de Agua en Yacimientos de Shale Gas

Francisco Javier López-Flores^a, Luis F. Lira-Barragán^a, Eusiel Rubio-Castro^b and José M. Ponce-Ortega^a

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

^b *Facultad de Ciencias Químico Biológicas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Blvd. Las Americas y Josefa Ortiz de Domínguez, Culiacán, Sin., 80013, México.*

RESUMEN

En este trabajo se presenta un nuevo enfoque de optimización matemática basado en un modelo de programación mixta entera no lineal (MINLP), donde por primera vez se integra simultáneamente modelos de machine learning (redes neuronales artificiales) para determinar las condiciones de explotación, la producción de gas y la gestión óptima del agua para la fase de terminación en yacimientos de shale gas. El conjunto de datos considera ocho variables de importancia (latitud, longitud, profundidad vertical, longitud lateral, apuntalante suministrado, agua de fractura, agua de retorno y producción de gas) para el desarrollo de un modelo de red neuronal artificial, el cual se ha recolectado de la formación Eagle Ford de Texas. Como variables de salida se han seleccionado la producción total acumulada de gas y el agua de retorno generada en los pozos de shale gas. Además, se ha realizado una optimización de los hiperparámetros asociados al modelo de redes neuronales para obtener un modelo competitivo. El modelo matemático fue programado en Python usando la librería Pyomo y considera los modelos de redes neuronales para cada pozo, balances de masas, opciones de tratamiento, almacenamiento, reutilización y eliminación, así como los costos e ingresos asociados de la venta del shale gas producido. Para un caso de estudio en México la solución compromiso muestra que es posible reutilizar un total de 93,631 m³ del agua de retorno (lo que representa un 27% del total de agua de fractura necesaria) con indicadores económicos atractivos (295,147,421 \$/año). Además, la solución compromiso ofrece un consumo de agua por energía producida de 6.71 L/GJ.

Palabras clave: Machine learning, Agua de retorno, Producción de shale gas, Fracturación hidráulica, Redes neuronales artificiales.

INTRODUCCIÓN

El uso del gas natural se ha convertido en una opción atractiva debido a que libera menores cantidades de emisiones de gases de efecto invernadero en comparación con el resto de combustibles fósiles. El shale gas es un tipo de gas natural no convencional que puede ser un complemento eficaz para las energías renovables hacia una transición energética sostenible. Además, el shale gas es abundante en todo el mundo, con una

cantidad de recursos recuperables equivalente a 7,299 Tcf, así como unos costos de explotación relativamente bajos. Sin embargo, la fracturación hidráulica se considera peligrosa y perjudicial para el medio ambiente porque requiere enormes cantidades de agua dulce y produce corrientes de agua de retorno muy contaminadas, lo que provoca la contaminación de las aguas superficiales y subterránea. Además de los anterior, se necesitan enfoques de toma de decisiones para la explotación de shale gas que sean precisos y puedan aportar soluciones que reduzcan la contaminación ambiental. Por lo tanto, este proyecto presenta un enfoque de optimización mediante la integración simultánea de modelos de machine learning para predecir el agua de retorno y la producción total acumulada de gas, determinando las condiciones óptimas de fracturación y la gestión óptima del agua en términos de necesidades de agua y cantidad de agua de retorno que vuelve a la superficie para la explotación de yacimientos de shale gas. El conjunto de datos recolectados para el desarrollo del modelo de machine learning tiene en cuenta la información sobre los pozos (ubicación geológica), la fracturación hidráulica y la producción. Maximizar la ganancia total anual (*TAP*) y minimizar el consumo total de agua dulce son los objetivos económicos y medioambientales establecidos en este proyecto. Por último, se presenta un caso de estudio situado en México para mostrar la aplicabilidad del enfoque propuesto.

METODOLOGÍA

La metodología aplicada se divide en distintas etapas, que se presentan a continuación. Se desarrolla la RNA para predecir el agua de retorno y el gas producido. En primer lugar, se lleva a cabo la recolección del conjunto de datos y su preprocesamiento. A continuación, se normaliza el conjunto de datos y se divide en un conjunto de entrenamiento y un conjunto de validación, que se utilizan para entrenar y evaluar/validar el modelo RNA. Además, se lleva a cabo la optimización de los hiperparámetros asociados al modelo RNA para obtener un modelo competitivo. Tras obtener el mejor modelo RNA con los hiperparámetros optimizados, se genera un modelo sustituto en un lenguaje de modelado algebraico, que se incorpora al modelo matemático propuesto. El modelo matemático incluye el modelo sustituto del modelo RNA, balances de materiales, generación temporal de agua de retorno, opciones de tratamiento, almacenamiento, reutilización y eliminación, así como la producción de gas shale. Asimismo, se considera una calendarización de un año para la explotación de los pozos. Además, se utiliza el método ϵ -constraint para encontrar soluciones compromiso mediante las funciones objetivo propuestas.

Modelo matemático

La formulación matemática propuesta contiene las ecuaciones matemáticas necesarias para modelar todas las iteraciones presentadas en la superestructura propuesta (ver **Figura 1**), también considera las limitaciones en la disponibilidad de agua fresca, así como los costos asociados a la gestión del agua que conlleva la industria del gas shale. En general el modelo se subdivide en los siguientes apartados: ilustración matemática del

modelo RNA para cada pozo, balances de materiales, restricciones de capacidad y diseño, necesidades totales de agua fresca, costos de capital y operación, costos de perforación y terminación, ingresos por venta de gas, restricciones de ubicación y, por último, la función objetivo. A continuación, se describen algunas de las principales ecuaciones del modelo matemático:

Con fines ilustrativos, la ecuación 1 representa matemáticamente el modelo RNA; donde, a través de las diferentes variables de entrada con las que se entrenó el modelo RNA, es posible predecir el agua de retorno (FBK_n) y el gas total acumulado (CGA_n) en cada pozo.

$$\begin{bmatrix} FBK_n \\ CGA_n \end{bmatrix} = ANN^{MLP} [LAD_n, LND_n, TVD_n, LLE_n, TPP_n, TFW_n] \quad (1)$$

donde LAD_n es la latitud del pozo n , LND_n es la longitud del pozo n , TVD_n es la profundidad vertical verdadera del pozo n , LLE_n es la longitud lateral del pozo n , TPP_n es el total de apuntalante suministrado al pozo n , y TFW_n es el total de agua de fractura para el pozo n .

La función objetivo consiste en maximizar la ganancia total anual (TAP) y minimizar el agua fresca total necesaria (TWR), que se define del siguiente modo:

$$OF = \{ \max TAP, \min TWR \}$$

Este modelo propuesto es un problema de programación mixta entera no lineal (MINLP).

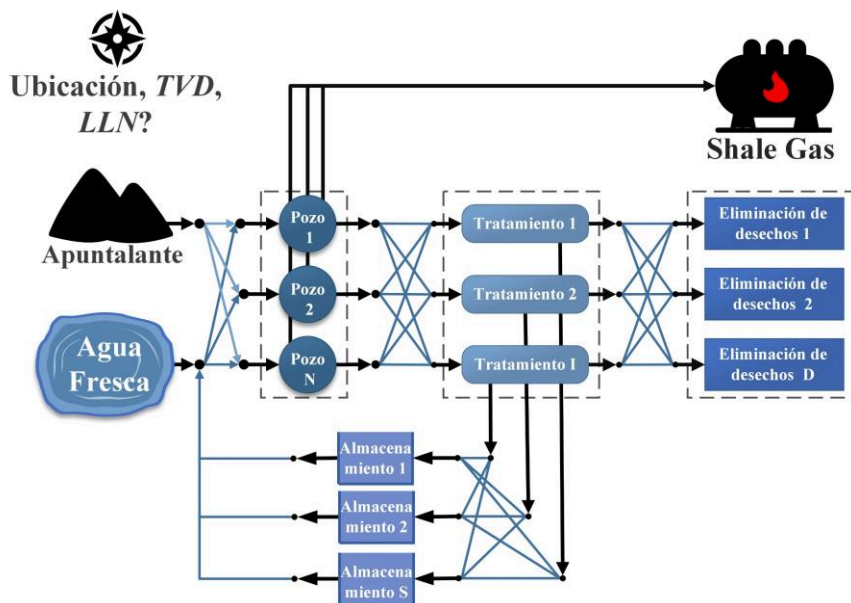


Figura 1. Superestructura propuesta para optimizar el proceso de fracturación hidráulica.

RESULTADOS

La realización de este proyecto se llevó a cabo bajo el lenguaje de programación Python. Mientras que, el modelo MINLP propuesto se codificó implementando la librería Pyomo (Hart et al., 2011), utilizando un ordenador con un AMD Ryzen 7 a 2,3 GHz con 16 GB de RAM.

En este trabajo para el desarrollo del modelo RNA, se seleccionó un área de estudio dentro de la formación Eagle Ford, los más cerca posible de la frontera con México, donde se recolectaron un total de 508 datos de pozos horizontales de la base de datos de pozos de Texas (Well-Finder). Durante el proceso de optimización (algoritmo Hyperband) de los hiperparámetros se realizaron un total de 19,049 experimentos en un tiempo de computación de 16.4 horas. En general, se obtienen resultados más precisos para el agua de retorno, ya que se obtienen valores más bajos para el MSE y el MAE, y valores más altos para el R^2 . Sin embargo, un aspecto importante a descartar es que los valores de las métricas son muy similares tanto para el conjunto de entrenamiento como para el conjunto de validación, esto indica que el modelo ha sido desarrollado correctamente ya que ha aprendido el comportamiento de los datos.

A partir del modelo RNA se generó un modelo sustituto el cual es igual a un problema de optimización no lineal que consta de 570 variables y 744 restricciones, este modelo sustituto es equivalente a la ilustración matemática de la RNA mostrada en la ecuación 1. En total, el modelo matemático MINLP propuesto consta de 23,941 variables continuas, 10 variables binarias y 21,998 restricciones. Para resolver este problema se implementó el solucionador DICOPT junto con los solucionadores CONOPT y CPLEX. El tiempo medio para la solución de cada punto de la curva de Pareto fue de 660 s.

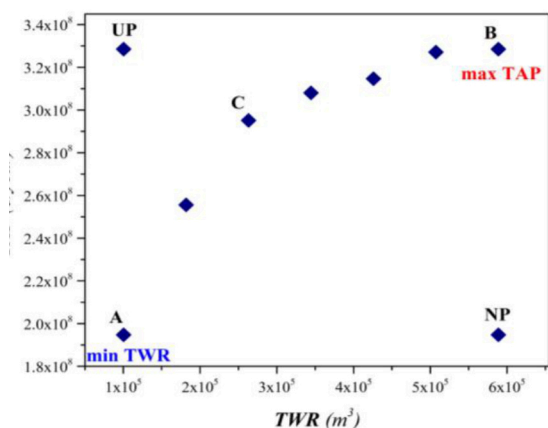


Figura 2. Curva Pareto para TAP y TWR

Tabla 1. Resultados detallados del caso de estudio.

Concepto	Solución compromiso
Unidades de tratamiento requeridas	Unidades de almacenamiento requeridas
	2
Número de vertidos necesarios	1
Costo del agua fresca	526,486
Costo de operación de las unidades de tratamiento	1,402,909
Costo total de operación (TOC), \$/año	3,937,198
Costo de capital de las unidades de tratamiento	28,570
Costo de capital de los vertidos	9,288
Costo de capital para almacenamiento/pozos	3,084
Costo total de capital (TCC), \$/año	40,941
Costo de perforación y acabado (DCC), \$/año	17,260,479
Ingresos por venta de gas, \$/año	316,386,041
Ganancia total anual (TAP), \$/año	295,147,421
Requerimiento total de agua fresca (TWR), m ³	263,243
Agua total reutilizada, m ³	93,631

Mientras que, para la optimización del modelo matemático se identificaron diferentes soluciones importante (ver Figura 2), donde en el punto C el *TWR* (agua fresca total requerida) es igual a 263,243 m³, lo que equivale a un aumento del 161.93% con respecto al punto A y a una disminución del 55.30% con respecto al punto B, mientras que el *TAP* obtenido es igual a 295,147,421 \$/año, lo que equivale a un aumento del 51.53% con respecto al punto A y a una disminución de sólo el 10.17% con respecto al punto B. Después de un análisis profundo se concluyó que la solución compromiso es el Punto C.

En la **Tabla 1** se presentan resultados importantes para la solución compromiso donde se encontró que el total de agua reutilizada corresponde al 27% (93,631 m³) del *TFW* requerido. Adicionalmente, en la literatura se han reportado diferentes trabajos donde se considera el mismo caso de estudio fijando la cantidad de agua total de fractura y han alcanzado porcentajes de agua total reutilizada de entre 20-22%. Además, para las tres soluciones (puntos A, B y C) se ha obtenido un costo promedio de perforación y terminación por pozo de 7,917,047 \$/pozo, 8,700,973 \$/pozo y 8.630.239 \$/pozo para los puntos A, B y C respectivamente; estos costos por pozo se encuentran entre los costos reportados en la Formación Eagle Ford. La **Figura 3** muestra la cantidad de *TWR* y de agua reutilizada suministrada a cada pozo en la solución compromiso (punto C). El pozo 4 es el que requiere la mayor cantidad de agua y toda el agua suministrada corresponde a agua fresca. Por otro lado, el pozo que menos agua consume es el pozo 8, donde el 20% agua reutilizada. Además, los pozos 19 y 20 se abastece completamente de agua reutilizada. También se puede concluir que el agua de retorno obtenida en las primeras 25 semanas del programa de fracturación hidráulica se reutilizó en los pozos 12, 16, 17 y 18. Mientras tanto, el agua de retorno obtenida durante el resto de la semana se reutiliza en los pozos 8, 13, 15, 19 y 20. En la **Figura 4** se presenta el gas total producido y agua de retorno por pozo. La producción de gas de casi todos los pozos se sitúa entre 45×10⁶ m³ (pozo 14) y 68×10⁶ m³ (pozo 16). Los pozos que producen menos gas son el pozo 4, con un valor igual a 15.72×10⁶ m³, y el pozo 10, con 4.47×10⁶ m³. Sin embargo, en el pozo 4 se obtiene una mayor cantidad de agua de retorno, igual a 12.63×10⁶ m³ que representa el 33% de *TFW* suministrado (Figura 3). Mientras que en el pozo 8 se adquiere la menor cantidad de agua de retorno con una cantidad igual a 1.08×10³ m³ que corresponde al 15% del agua total de fractura.

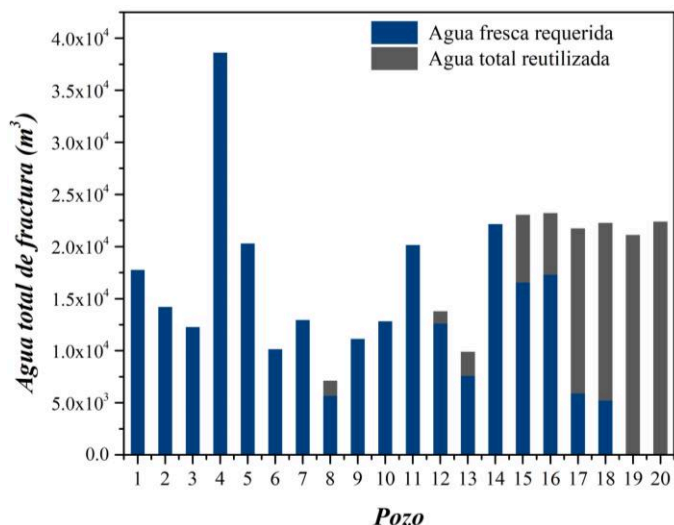


Figura 3. Agua fresca total requerida y agua reutilizada

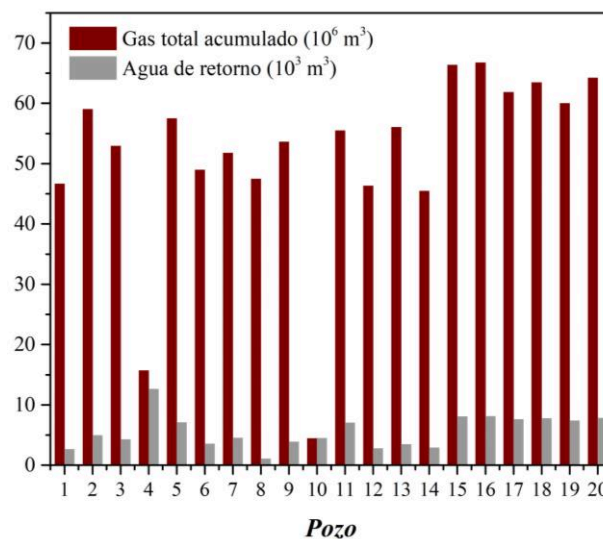


Figura 4. Producción de gas y agua de retorno

CONCLUSIONES

Mediante un espacio de búsqueda de hiperparámetros utilizando el algoritmo Hyperband, se encontraron los mejores valores para la cantidad de capas ocultas, las neuronas por capa y la tasa de aprendizaje para el modelo RNA. En la evaluación del modelo (conjunto de validación) para las variables de salida (agua de retorno y gas acumulado), el MSE se mantuvo por debajo de 0.065 y R^2 fue superior a 0.92. Valores similares a los obtenidos en la etapa de entrenamiento, lo que se traduce en un buen entrenamiento del modelo RNA. Es importante mencionar que estos valores podrían mejorarse con una mejor base de datos, así como con la inclusión de otras variables de entrada.

Tras la integración de los modelos RNA en la formulación matemática se desarrolló un modelo MINLP muy complejo; este se resolvió mediante solucionadores comerciales. Además, se comprobó que un aumento significativo de TWR no garantiza un aumento de la TAP , ya que la producción de shale gas también está relacionada con otras variables. En el caso de estudio, se ha comprobado que es posible reducir el consumo de agua fresca donde se puede reutilizar hasta el 27% del TFW con un TAP de 295,147,421 \$/año. Asimismo, algunos pozos se completan sólo con agua reutilizada. Por lo tanto, gracias al enfoque de optimización propuesto, fue posible reducir el número de suposiciones, satisfacer las necesidades energéticas y optimizar la gestión del agua en los yacimientos de gas shale. Por último, el enfoque propuesto es general y puede aplicarse a cualquier proceso o problema que resulte complejo de modelar mediante métodos tradicionales y en el que suelen considerarse variables inciertas o parámetros constantes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Lira-Barragán, L.F., Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M., El-Halwagi, M.M. (2016). Optimal reuse of flowback wastewater in hydraulic fracturing including seasonal and environmental constraints. *AIChE Journal*, 62, 1634–1645, 2016.
2. Gao, J., You, F. (2017). Design and optimization of shale gas energy systems: Overview, research challenges, and future directions. *Computer and Chemical Engineering*, 106, 699–718.
3. Well Finder | WellDatabase. <https://app.welldatabase.com/browse/Wells#> (Acceso Julio 26, 2022).

Optimización de cadenas de suministro a través de herramientas híbridas

Jesús Manuel Núñez-López ^{a*}, Juan Gabriel Segovia-Hernández ^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.*

Contacto: jesus_2392@hotmail.com

RESUMEN

Actualmente, el uso de las cadenas de suministro en la ingeniería de procesos ha ido aumentando de una manera considerable, esto para lograr satisfacer de manera adecuada la demanda de ciertos recursos en alguna región particular [1]. La implementación de estas cadenas de suministro se han estado abordando mediante programación matemática, utilizando modelos determinísticos de optimización, sin embargo, uno de los problemas más prescindibles que se tienen al usar estos modelos de optimización, es la simplificación que se hace en el diseño de los equipos para la producción o generación de los recursos que se desean distribuir a través de las cadenas planteadas. Por lo cual, para obtener el diseño óptimo de las unidades de proceso requeridas para la generación de materias primas utilizadas en dicho proceso; se han utilizado distintas técnicas de programación matemática mediante modelos estocásticos, entre ellas, la evolución diferencial y los algoritmos genéticos [2].

Debido a esto, en este trabajo se plantea una metodología general, la cual no ha sido previamente considerada en otros trabajos. La metodología consiste en una estrategia híbrida que combina la optimización determinística con la optimización estocástica, para resolver el problema que se tiene en el diseño de los equipos utilizados en las cadenas de suministro, lo cual nos garantiza que se conserve la rigurosidad de estos diseños. La interacción entre los softwares utilizados para la optimización determinística y estocástica se realizó mediante el intercambio de datos, y algunas subrutinas programadas a través de Visual Basic [3].

A través del enfoque propuesto es posible obtener diferentes escenarios, donde se observan distintos beneficios en aspectos económicos, ambientales y sociales; convirtiéndola en una herramienta eficiente en la toma de decisiones.

Palabras clave: Optimización Híbrida, Cadena de Suministro, Diseño de Proceso.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, se han reportado diversos avances en el área de la ingeniería de procesos químicos, tanto en la parte del diseño, como en la simulación y la optimización. Dichos avances han permitido que se tengan grandes mejoras en distintos sectores

importantes en el país; entre ellos el sector industrial, el sector energético, el sector agrícola, entre otros. Lo cual ha traído consigo beneficios económicos, ambientales y sociales. Debido a que estas aportaciones han ayudado a disminuir costos de producción y operación, reducción de materia prima, disminución de emisiones al medio ambiente, así como también la generación de distintos empleos.

Usualmente se utiliza optimización determinística para diseñar la distribución de los productos generados en un proceso, mientras que se hace uso de la optimización estocástica para obtener los parámetros de diseño de los equipos de operación de estos procesos, debido a que la formulación matemática del diseño de los equipos presenta un gran número de ecuaciones, donde algunas presentan altas no linealidades, y hasta términos no convexos, los cuales son muy difíciles de resolver por métodos determinísticos.

Hace algunos años se realizaban simplificaciones en el diseño de las unidades de procesos, donde estas se trataban como cajas negras, para resolver los modelos matemáticos mediante técnicas determinísticas; sin embargo, los resultados obtenidos se encuentran un poco alejados de la realidad. Por lo cual, recientemente se implementó el uso de estrategias híbridas, donde se optimizan las unidades de proceso de forma estocástica, y secuencialmente se realiza la optimización de la cadena de suministro de forma determinística. El uso de estas estrategias permite obtener mejores resultados, pero al hacerse de manera secuencial, el tiempo de cómputo se vuelve un poco elevado. Por lo cual, en este trabajo, se propone la implementación de un vínculo, a través de subrutinas programadas en Visual Basic, para uso de estas estrategias híbridas de manera simultánea.

METODOLOGÍA

Se propuso la siguiente metodología (**Figura 1**), en donde se presenta un algoritmo general para la optimización híbrida (determinística y estocástica) de procesos. A continuación, se enlista la metodología paso a paso:

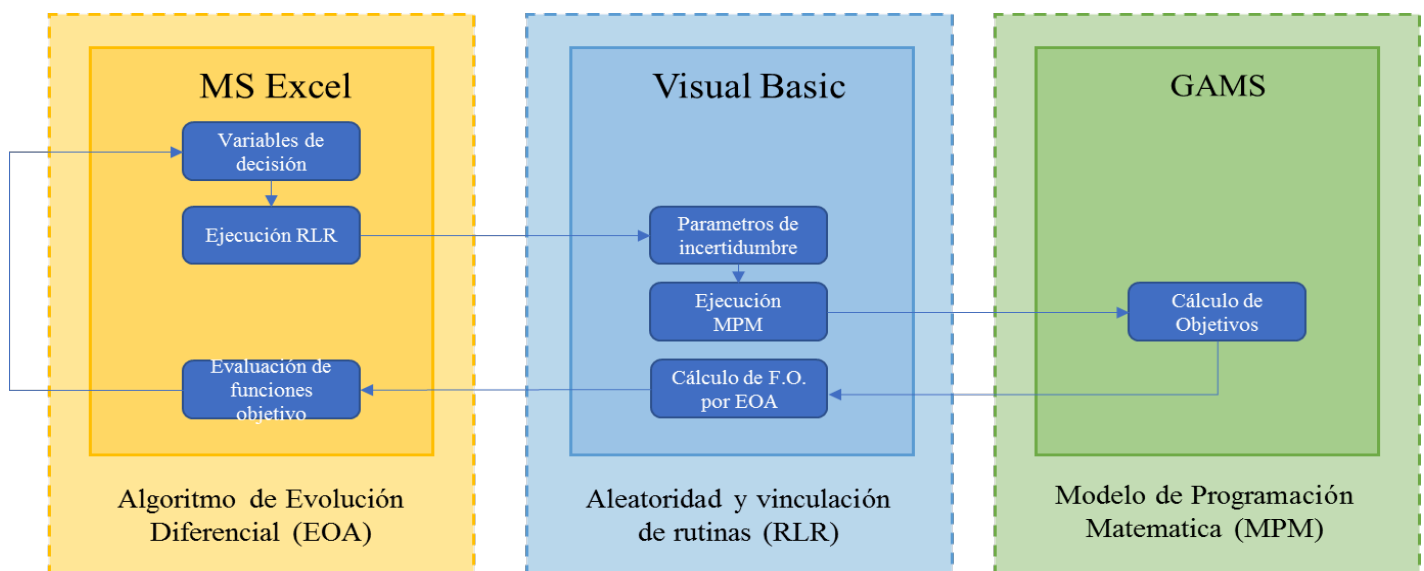


Figura 1. Metodología general del algoritmo para la optimización híbrida.

1. Generación de valores de variables de decisión por parte del algoritmo de optimización metaheurístico.
2. Creación de valores para los parámetros de incertidumbre en un generador de valores aleatorios.
3. Enviar los valores de las variables de decisión mediante el programa de vinculación.
4. Cálculo de las funciones objetivo por el algoritmo de optimización determinístico
5. Importación de los valores de las funciones objetivo por parte del programa de vinculación
6. Análisis de los valores de las funciones objetivo por el algoritmo de optimización estocástico.

Para la parte de la optimización estocástica (**Figura 2**), se realiza la interacción El diseño del proceso se hace mediante el *software* Aspen Plus y las herramientas programadas de Visual Basic en Excel, el cual envía variables de decisión a Aspen Plus, y este le regresa variables de respuesta al algoritmo metaheurístico, hasta encontrar el óptimo del objetivo planteado.

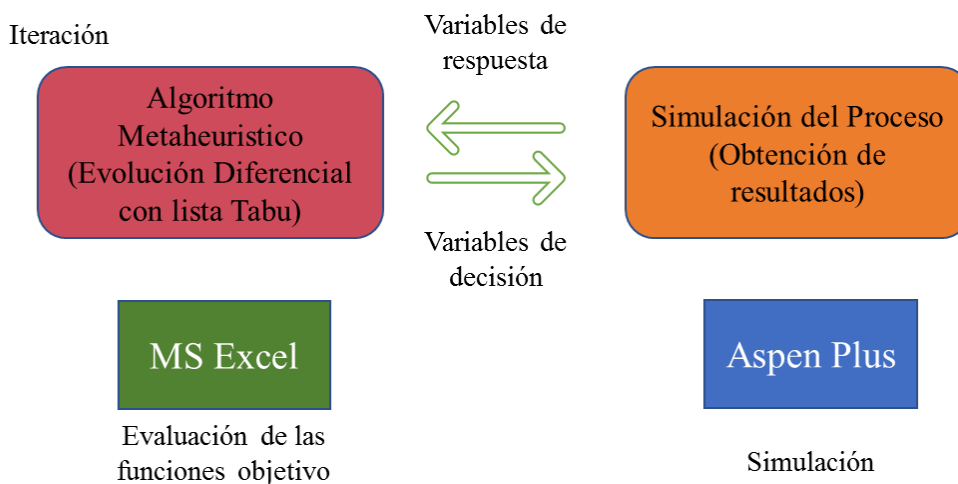


Figura 2. Interfaz entre Excel y Aspen Plus

Mientras que la parte de la optimización determinística, se programa en el *software* GAMS (General Algebraic Modelling System), donde se busca encontrar el óptimo de cierta función objetivo, cumpliendo las restricciones a las cuales se encuentra sujeta.

RESULTADOS

Se implementó la metodología propuesta para el diseño y la distribución de un proceso de producción de poliestireno. En la **Figura 3** se muestra la superestructura que representa la cadena de suministro del poliestireno, donde se consideran todas las combinaciones

posibles para la distribución de este producto. Se tomaron en cuenta las 5 industrias de poliestireno más importantes del centro de México, las cuales cuentan con 5 opciones en esta misma región para obtener su materia prima que es el estireno, y a su vez, las industrias de estireno, cuentan con 3 industrias donde se realiza la síntesis y separación de etilbenceno.

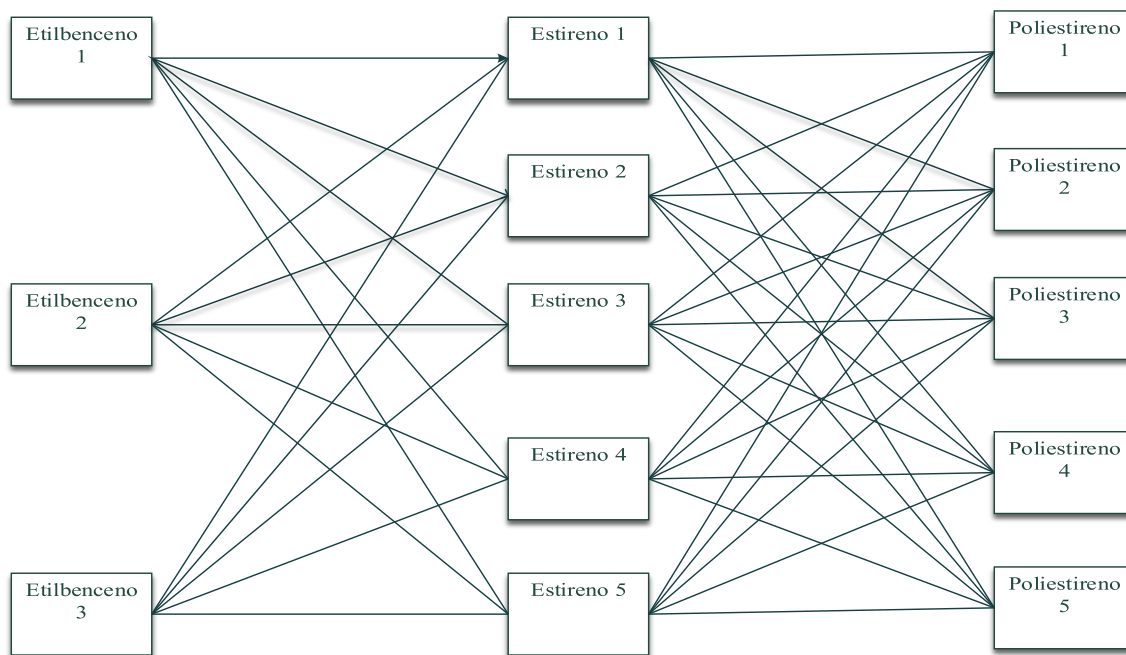
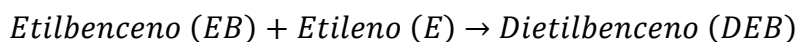
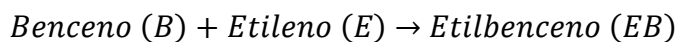


Figura 3. Superestructura para la producción y distribución de materias primas del proceso.

Se buscó satisfacer la demanda de poliestireno en México, que es de 600,000 Toneladas por año, para producir 1 kg de poliestireno se requiere de 1.032 kg de estireno; y para producir 1 kg de estireno se requiere de 1.043 kg de etilbenceno. Por lo cual se requiere aproximadamente de 646,000 toneladas de etilbenceno por año, para poder producir la cantidad de poliestireno requerido por el país.

El caso base considerado en este trabajo es una planta simplificada para producir etilbenceno a partir de etileno y benceno. El proceso contiene una sección de reacción con dos CSTR en serie (con reacciones que tienen lugar en fase líquida), una secuencia de separación directa con dos columnas de destilación convencionales y dos corrientes de reciclaje. Todos los parámetros cinéticos y de diseño para este caso base fueron tomados de Luyben, 2002 [4].

La reacción del sistema es la siguiente:



Al primer reactor, que funciona de forma isotérmica e isobárica, se alimenta benceno fresco y una corriente de benceno reciclado. El efluente del primer reactor y una corriente de dietilbenceno reciclado (DEB) se alimentan al segundo reactor, que funciona adiabáticamente. El efluente del segundo reactor se alimenta a una primera columna de destilación, donde el benceno reciclado pasa a la cabeza, y una mezcla de DEB y etilbenceno (producto del fondo) se alimenta a la segunda columna en la que se recupera el etilbenceno (EB) como producto destilado; la corriente de fondo, con un alto contenido en DEB, se recicla de nuevo al segundo reactor.

Para la parte de separación del proceso, se consideró la implementación de dos secuencias de destilación: una secuencia directa convencional (SD) (**Figura 4a**) y una secuencia indirecta convencional (SI) (**Figura 4b**). Las secuencias convencionales se diseñaron mediante métodos abreviados (Seader y Henley, 2006) [5] utilizando el módulo DSTW Aspen Plus.

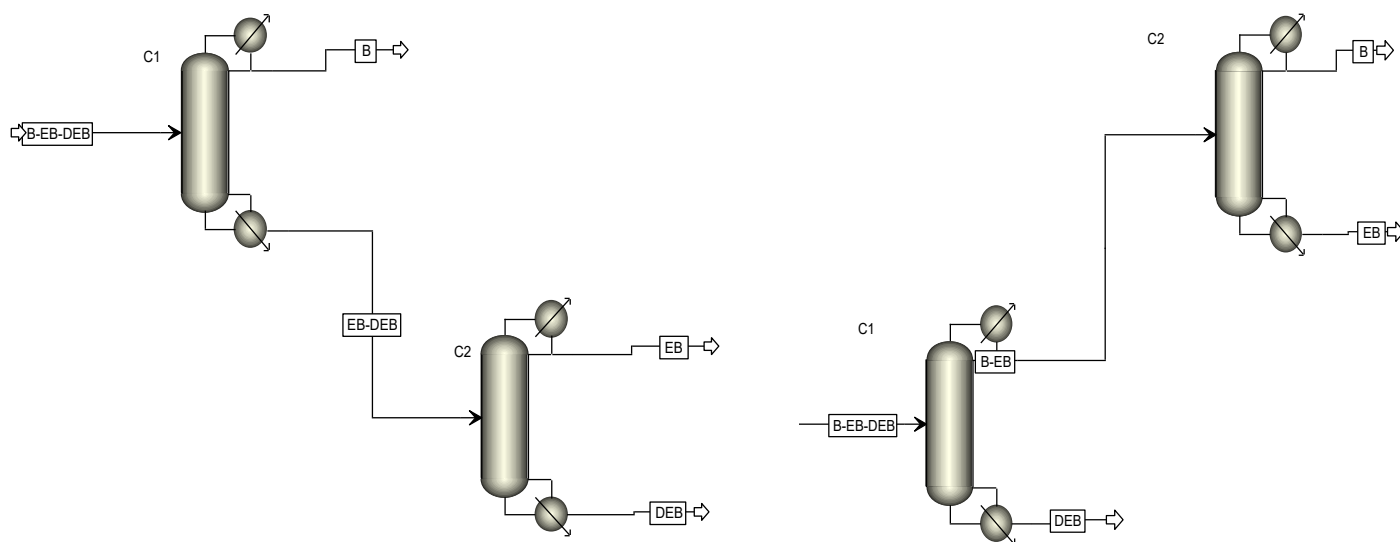


Figura 4a. Secuencia convencional directa

Figura 4b. Secuencia convencional indirecta

Las relaciones de reflujo se establecieron en 2 veces los valores mínimos y las presiones en ambas columnas se tomaron del caso original reportado por Luyben (2002), de modo que una de las columnas opera a 4,5 atm y la otra a 2 atm. Los parámetros de diseño finales para cada secuencia de destilación se muestran en la **Tabla 1**.

La **Tabla 1** muestra los resultados bajo la implementación de las secuencias directas e indirectas convencionales. El número total de pasantías requeridas para el DS es mayor que las requeridas para el IS. Sin embargo, el consumo de energía suele constituir el componente dominante del coste anual de la destilación. Por lo tanto, se selecciona el DS como la mejor opción debido a su menor requerimiento energético (el IS requiere un 36% más de energía para la tarea de separación). Observe que el DS separa primero el benceno, el componente más abundante.

Tabla 1. Parámetros de diseños para destilación convencional

	SD	SI
Etapas/Etapa de alimentación de columna 1	35/10	35/10
Etapas/Etapa de alimentación de columna 2	25/10	37/30
Presión columna 1/columna 2 (atm)	4.5/2	4.5/2
Relación reflujo 1/Relación reflujo 2	2.0/2.0	2.0/1.8
Flujo de alimentación (kmol/h)	1738	1738
Flujo de destilado 1 (kmol/h)	973	1668
Flujo de fondo 1 (kmol/h)	765	70
Flujo de destilado 2 (kmol/h)	696	973
Flujo de fondo 2 (kmol/h)	69	695
Servicios de calentamiento (Mcal/h)	21,172	28,789

CONCLUSIONES

A través del enfoque propuesto es posible utilizar las ventajas que tienen los métodos de optimización estocásticos y determinísticos. Utilizar ambos métodos de forma híbrida nos permite minimizar las desventajas que presentan cada uno de ellos. Mediante el caso de estudio propuesto se puede observar como es posible modelar la distribución de los recursos mediante una cadena de suministros utilizando herramientas determinísticas, y al mismo tiempo diseñar de forma rigurosa los equipos para la generación de estos recursos con estrategias metaheurísticas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Núñez-López JM, Rubio-Castro E, Ponce-Ortega JM (2021) Involving resilience in optimizing the water-energy-food nexus at macroscopic level. *Proc Saf Environ Prot* 147:259- 273.
- [2] Soui, M, Gasmi, I, Smiti, S, Ghédira, K. (2019). Rule-based credit risk assessment model using multi-objective evolutionary algorithms. *Expert systems with applications*, 126, 144-157.
- [3] Hernández-Pérez, LG, Ponce-Ortega, JM. (2021). Multi-objective optimization approach based on deterministic and metaheuristic techniques to resource management in health crisis scenarios under uncertainty. *Process Integration and Optimization for Sustainability*, 1-15.
- [4] Luyben, WL, (2002). *Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control*, 1st ed. Marcel Dekker, New York.
- [5] Seader, JD, Henley, EJ, (2006). *Separation Process Principles*. Wiley & Sons, Inc., John New York, EUA.

Ajuste y predicción de datos experimentales de cinéticas microbianas a través de redes neuronales

Rodolfo Murrieta-Dueñas¹, Jazmín Cortez-González^{1,*}, Edgar Sánchez-Contreras¹,
Claudia García-Segoviano¹, Varinia López-Ramírez¹, Roberto Gutiérrez-Guerra²

¹Tecnológico Nacional de México/ ITS Irapuato, Silao-Irapuato km 12.5 El Copal,
36821 Irapuato, Gto., Mexico.

²Universidad Tecnológica de León, Campus I, Blvd. Universidad Tecnológica 225, Col.
San Carlos. C.P. 37670, León, Gto., Mexico.

Corresponding: jazmin.cg@irapuato.tecnm.mx

RESUMEN

El diseño de reactores biológicos requiere controlar las condiciones de crecimiento para obtener los metabolitos de interés (productos generados por microorganismos). Tradicionalmente, se utiliza el modelo de Monod para ajustar los datos experimentales en la fase de crecimiento exponencial lo que limita su aplicación fuera de este rango. En este sentido, en este trabajo se presenta una aplicación de redes neuronales como a j a negra, para ajustar cinéticas microbianas y de caja blanca para ajustar parámetros a modelos predeterminados. En este sentido, este trabajo se divide en dos partes, la aplicación de redes neuronales para predecir curvas de crecimiento microbiano y para predecir condiciones puntuales de crecimiento. Para ello, se entrenó una red neuronal cuya función de activación fue RELU para describir las trayectorias y una regresión lineal para determinar los parámetros del modelo. Los casos de estudio abordados fueron: crecimiento microbiano de la bacteria *Pseudomonas aeruginosa* y de la levadura *Candida guilliermondii*. Cada una de estas cepas fue determinada en un rango específico de crecimiento monitoreando, el tipo de sustrato, la concentración del sustrato y el pH, durante un periodo que oscila entre 8 y 24 horas. Las cepas en estudio fueron aisladas de suelo expuesto a hidrocarburos y frutas tropicales, para *Pseudomonas aeruginosa* y *Candida guilliermondii*, respectivamente. A partir de estos datos experimentales, se realizó el entrenamiento, la validación y la prueba de las redes neuronales propuestas. Los resultados muestran que es posible predecir los valores puntuales de crecimiento microbiano y las trayectorias completas de la cinética microbiana que presentan las cepas seleccionadas. Por lo que el estudio puede extenderse para cualquier cepa.

Keywords: Ajuste datos, cinética microbiana, redes neuronales.

1. INTRODUCCIÓN

En el diseño de reactores biológicos debe considerarse las cinéticas microbianas como punto de partida para definir las condiciones de operación de este equipo. Por lo que se requiere de ensayos experimentales donde sea posible conocer la curva de crecimiento

microbiano, bajo condiciones específicas y poder determinar modelos cinéticos que traten de representar lo que está sucediendo. En este sentido, cada vez que las condiciones de crecimiento cambian, esos parámetros deben recalcularse, lo que implica un aumento considerable en los costos de operación. En el área de biotecnología se ha analizado poco respecto a proponer modelos de caja negra para predecir comportamiento cinético, sin embargo en el área de microbiología de alimentos, esto ha promovido la generación de algunos puntos. De acuerdo con la literatura, algunos autores han implementado redes neuronales, tanto como modelos de caja negra para predecir cuanto tiempo tarda un alimento en el anaquel, como la propuesta de la determinación de parámetros de un modelo específico. Ambos enfoques han logrado predecir el tiempo de retardo en el crecimiento microbiano con bastante exactitud. Por lo que en este trabajo, se presentan dos propuestas para predecir datos cinéticos de cepas microbianas, de manera que pueda describir la trayectoria de crecimiento o conocer una condición de crecimiento específica, conociendo como datos el pH, el tipo de sustrato, la concentración de sustrato y el tiempo.

2. METODOLOGÍA

A partir de cinéticas microbianas experimentales previamente determinados en el laboratorio de Biotecnología de ITESI, de las cepas *Pseudomonas aeruginosa* y *Candida guillermordii*, a diferentes condiciones de operación; se realizó el ajuste de datos experimentales con dos enfoques distintos (Figura 1).

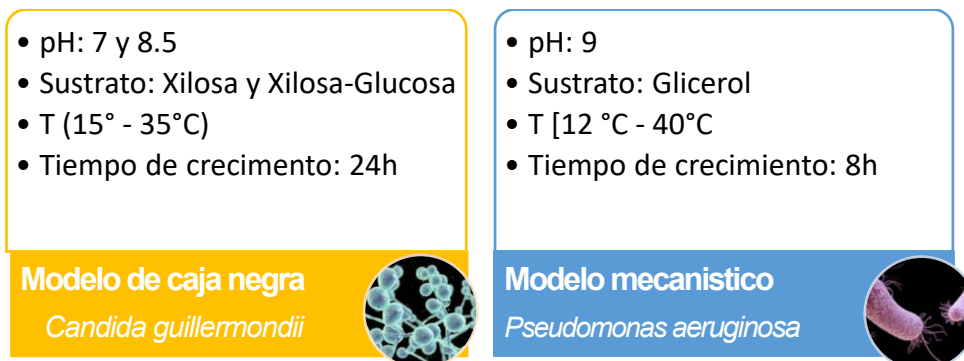


Figura 1. Enfoques del ajuste de datos experimentales de cinéticas microbianas.

2.1 Modelo de caja negra

El primer enfoque está basado en utilizar las redes neuronales como una caja negra, para ello se utilizaron los datos experimentales de la cepa *Candida guillermordii*. En este enfoque las redes neuronales fueron activadas a partir de diversas funciones, definiéndose que la función sigmoide presento el mejor ajuste. Este tipo de enfoque permite describir toda la trayectoria de la cinética microbiana, y puede ser implementada de forma efectiva cuando la cinética microbiana tenga un comportamiento similar a la presentada por *Candida*.

Debido a la naturaleza de la cinética de *Candida guillermordii* fue necesario determinar una función de activación que permitiera describir el comportamiento adecuado de la

cepa. Se probaron dos funciones, la función ReLu y la función sigmoide, siendo esta última la elegida para la activación de la red neural. La función sigmoide, es una función diferenciable y además no importa la magnitud del dato a ajustar, el resultado sólo varía entre 0 y 1 (Figura 2).

La sintonización de los parámetros se realizó a prueba y error para definir el valor adecuado para la sigmoide. Además, para mejorar la predicción, se realizó una normalización de los datos y se utilizó una rutina para ajustar por mínimos cuadrados no lineales. Respecto a la validación de la red, se utilizó el 80% de forma aleatoria y el resto es para el *testing*.

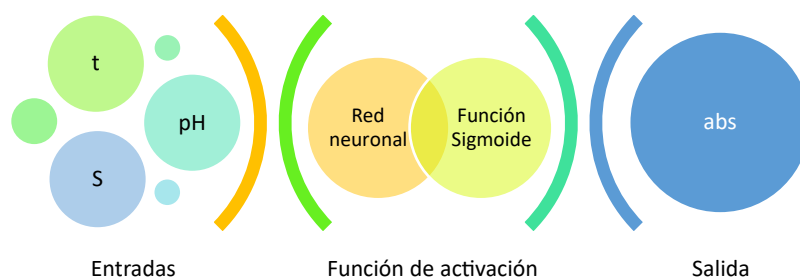


Figura 2. Red neuronal de caja negra.

2.2 2.2 Modelo mecanístico

El segundo enfoque es un modelo mecanístico o también llamado de caja blanca, donde se conoce el modelos matemático al que se desea llegar y la red neuronal ajusta el valor de los parámetros presentes en el modelo elegido. De acuerdo con la cinética presentada en la cepa *Pseudomonas aeruginosa*, este modelo es el que mejor se adapta. Este enfoque permite conocer una ecuación matemática sobre la que es posible sustituir valores y predecir el dato experimental.

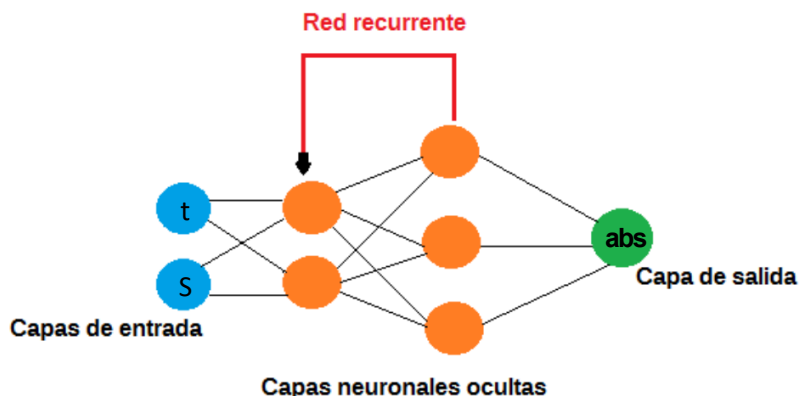


Figura 3. Red neuronal recurrente.

Se desarrolló un programa para realizar ajuste de datos con funciones polinómicas, se definió 80% de los datos ingresados para definir el entrenamiento y el resto para el

testing. La elección de los datos para entrenamiento fue definida de forma aleatoria, para corroborar la eficacia del método. El tipo de red que se eligió para este caso de estudio fue una red recurrente, ya que el valor del parámetro definido en la función polinómica en la iteración “t”, se fue actualizando con lo obtenido en la iteración “t-1” (Figura 3).

3. RESULTADOS

Para comparar los resultados obtenidos con la red neuronal en los dos casos de estudio, fue necesario determinar el error de predicción, este error se calculó a partir de la ecuación 1, para el modelo mecanístico y para el modelo de caja negra se determinó la media de la suma de los errores MSE.

Ec. (1)

En la Tabla 1, se presentan los resultados obtenidos de la predicción realizada por la red neuronal de caja negra y la de modelo mecanístico (caja blanca), de *Pseudomonas aeruginosa* y *Candida guilliermondii*, respectivamente. En esta tabla se observa que para el caso mecanístico, el error de predicción se encuentra en ordenes de magnitud entre E-4 y E-6. Esto significa que este modelo es capaz de predecir un valor puntual en el crecimiento microbiano, en función del t y sustrato. Respecto al modelo de caja negra, los órdenes de magnitud del error se encuentran entre E-2 y E-4, esta variación es más significativa que para el caso 1 de *Pseudomonas aeruginosa*, ya que la gráfica de crecimiento microbiano experimental no tiene una tendencia lineal, por lo que al momento de ajustar la trayectoria, los errores puntuales son de mayor magnitud que el caso 1, sin embargo, el error cuadrático medio (MSE) es de 4.232E-03.

Tabla 1. Dato cinético experimental vs predicción en los modelos de caja negra y modelo mecanístico.

<i>Pseudomonasaeruginosa</i> pH9				<i>Candida guilliermondii</i> pH7			
Modelo mecanístico				Modelo Caja negra			
Tiempo (h)	Dato experimental	Predicción	Error	Tiempo (h)	Dato experimental	Predicción	Error
0.0	0.026	0.028	2.414E-06	0	0.015	-0.027	1.775E-03
0.5	0.059	0.052	5.313E-05	1.0	0.075	0.051	5.823E-04
1.0	0.084	0.095	1.117E-04	4.0	0.245	0.265	4.135E-04
1.5	0.137	0.136	9.082E-07	7.5	0.576	0.598	4.643E-04
2.0	0.177	0.168	7.728E-05	9.5	1.017	0.907	1.208E-02
2.5	0.186	0.191	2.276E-05	11.0	1.066	1.122	3.163E-03
3.0	0.204	0.207	1.179E-05	12.5	1.08	1.176	9.191E-03
3.3	0.233	0.215	3.212E-04	14.0	1.12	1.094	6.667E-04
3.5	0.208	0.223	2.256E-04	16.0	1.149	1.149	2.304E-07
3.8	0.223	0.232	7.571E-05	17.5	1.178	1.144	1.164E-03
4.0	0.241	0.241	1.823E-07	19.0	1.185	1.112	5.386E-03
4.3	0.262	0.252	9.333E-05	20.5	1.108	1.054	2.970E-03
4.5	0.265	0.264	3.457E-07	22.0	0.749	0.880	1.716E-02

En la Figura 4, se presentan la gráfica de la cinética microbiana obtenida de forma experimental de la cepa *Pseudomonas aeruginosa* a pH9, en esta gráfica es evidente que el comportamiento de la cepa no se aleja tanto de una función lineal, por lo que el ajuste a través de una función polinómica permite captar la esencia de la forma en la que se comportan los datos cinéticos. Es evidente que hay mayor desviación en los datos que se presentan durante las 3 y 4 horas, sin embargo, de forma global el ajuste de datos es adecuado para la forma de los datos cinéticos.

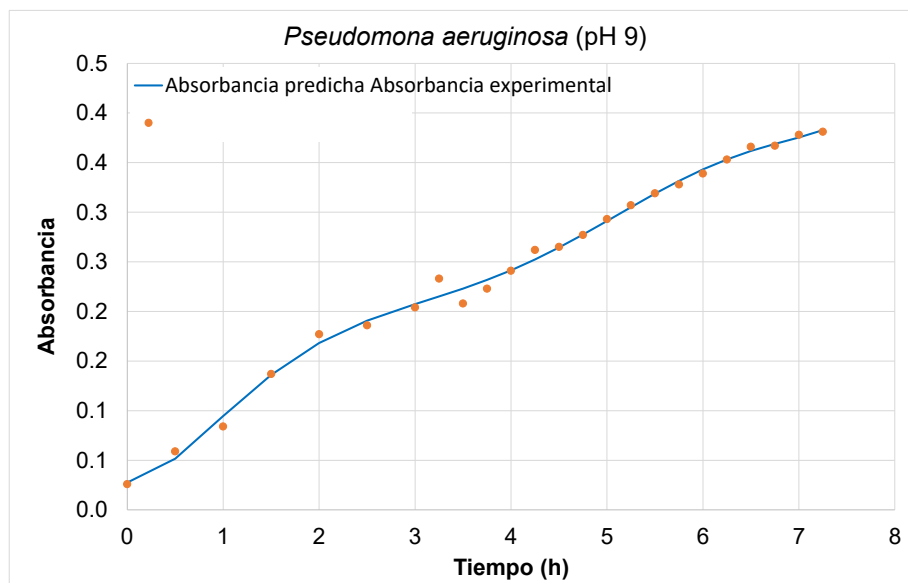


Figura 4. Cinética microbiana de la cepa *Pseudomonas aeruginosa* a pH9.

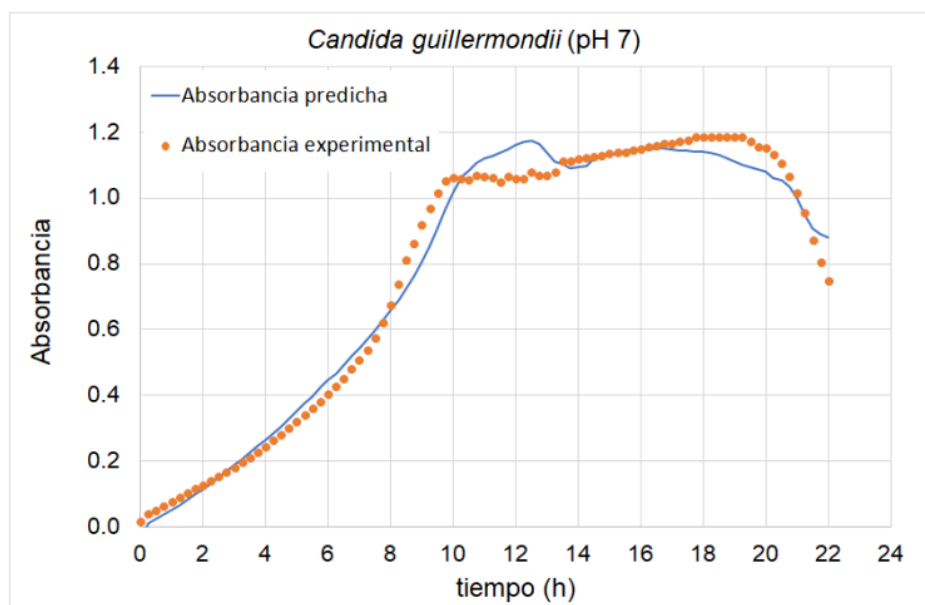


Figura 5. Cinética microbiana de la cepa *Candida guilliermondii* a pH7.

En la Figura 5, se presentan los resultados del ajuste de datos experimentales de la cinética microbiana de la cepa *Candida guilliermondii* a pH7. En esta grafica se puede observar que los datos experimentales describen una trayectoria distinta a la mostrada por la cepa *Pseudomonas aeruginosa*, por lo que se requirió aplicar las redes neuronales como un modelo de caja negra, que permitiera a partir de la función de activación, predecir de forma adecuada el comportamiento cinético de la cepa. En esta gráfica, se presenta una diferencia entre las 10 y 14 horas, esto se debe a que en este punto se encuentra la concentración máxima de biomasa y a partir de ahí, termina la fase de crecimiento exponencial e inicia la fase estacionaria, lo que complica la predicción en esta zona, sin embargo la media del error se encuentra en el orden de magnitud E-3, que se considera un valor aceptable de acuerdo a la sensibilidad del equipo con el que fue medida la absorbancia.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentan dos enfoques capaces de predecir trayectorias y condiciones puntuales de crecimiento microbiano de las cepas *Pseudomonas aeruginosa* y *Candida guilliermondii*. De acuerdo con los resultados obtenidos, para el caso 1, se utilizó una red neuronal para hacer un ajuste de datos con funciones polinómicas, obteniendo que el mejor ajuste fue con un polinomio de 6to orden. Para el caso 2, la red neuronal fue utilizada como un modelo de caja negra y el valor obtenido del ajuste fue de MSE 4.232E-03, debido a la complejidad del comportamiento cinético de la cepa *Candida guilliermondii*, se impelentó como función de activación la función sigmoide, obteniendo un ajuste adecuado durante el periodo en el que se realizó el experimento.

REFERENCES

- Murrieta-Dueñas, R., Serrano-Rubio, J. P., López-Ramírez, V., Segovia-Dominguez, I., & Cortez-González, J. (2022). Prediction of microbial growth via the hyperconic neural network approach. *Chemical Engineering Research and Design*, 186, 525-540.
- Calderón J. Ajuste de un modelo cinético para el crecimiento de *Lactobacillus acidophillus* en la fermentación de un sustrato complejo. *Universidad de América, Bogotá* (2017).
- Ocampo C., Colorado S. y Ramírez M. (2015). Modeling of microbial growth and ammonia consumption at different temperatures in the production of a polyhydroxyalkanoate (PHA) biopolymer. *Journal of Applied Research and Technology*. 498-503.
- Hernández-Pérez, A. F., Costa, I. A. L., Silva, D. D. V., Dussán, K. J., Villela, T. R., Canettieri, E. V., & Felipe, M. G. A. (2016). Biochemical conversion of sugarcane straw hemicellulosic hydrolyzate supplemented with co-substrates for xylitol production. *Bioresource Technology*, 200, 1085-1088.