



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

División de Estudios de Posgrado

Facultad de Ingeniería Química

TESIS DE INVESTIGACIÓN

**Optimización multiobjetivo de un sistema sostenible para la
producción de hidrógeno y dimetil éter: modelado con
inteligencia artificial y simulación de procesos**

PRESENTA

I. Q. Bannih Teresita Zamora Aguirre

Tesis que se presenta como requisito parcial para obtener el grado de
Maestra en Ciencias en Ingeniería Química

Director: Dr. José María Ponce Ortega

Codirector: Dr. Fabricio Nápoles Rivera

Línea de Investigación: **Ingeniería de Procesos Sustentables**

Morelia, Michoacán, agosto de 2025

OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO DE UN SISTEMA SOSTENIBLE PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO Y DIMETIL ÉTER: MODELADO CON INTELIGENCIA ARTIFICIAL Y SIMULACIÓN DE PROCESOS

I. Q. Bannih Teresita Zamora Aguirre

Resumen

El modelado y la optimización matemática de procesos convergen con el aprendizaje automático creando soluciones para el desarrollo sostenible. En este contexto, las tecnologías *Power-to-Liquid* son soluciones prometedoras que integran sistemas de energía neutrales en carbono, y que generan beneficios económicos y ambientales. Esta investigación desarrolla la simulación, el modelado y la optimización multiobjetivo de una planta integrada para la producción de hidrógeno verde y dimetil éter sostenible (DME). Mediante el software Aspen Plus, se modelaron las unidades clave del proceso: desalinización de agua salina, la captura de carbono, electrólisis alcalina, hidrogenación de CO₂ para la síntesis de metanol, y producción de DME. Se implementó un modelo subrogado basado en redes neuronales artificiales para predecir con alta precisión el desempeño del sistema integrado. La optimización multiobjetivo se orientó a maximizar la productividad y la eficiencia energética, mientras minimizó los costos operativos, las emisiones y el consumo de recursos. Un análisis comparativo entre enfoques metaheurísticos, bayesianos y deterministas demostró que la optimización determinista logra el mejor balance entre producción, consumo energético y viabilidad económica, destacando también por su eficiencia computacional. La configuración óptima alcanzó una producción de 3,035.7 kg DME/h, junto con reducciones significativas en el consumo energético y el costo anual. Estos hallazgos confirman que la integración de inteligencia artificial en la optimización de procesos es clave para impulsar la sostenibilidad en la industria química y acelerar la transición hacia una economía baja en carbono.

Palabras clave: *Ingeniería de Procesos, Modelado Subrogado con IA, Optimización de Sistemas Sostenibles, Power-to-X, Transición Energética Sostenible.*

Asesores: Dr. José María Ponce Ortega, Dr. Fabricio Nápoles Rivera

MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION OF A SUSTAINABLE SYSTEM FOR HYDROGEN AND DIMETHYL ETHER PRODUCTION VIA ARTIFICIAL INTELLIGENCE MODELING AND PROCESS SIMULATION

Bannih Teresita Zamora Aguirre, B. Sc.

Abstract

Mathematical modelling and process optimization converge with machine learning to create innovative solutions for sustainable development. In this context, Power-to-Liquid technologies emerge as promising pathways that integrate carbon-neutral energy systems while delivering both economic and environmental benefits. This study presents the simulation, modelling, and multi-objective optimization of an integrated plant for green hydrogen and sustainable dimethyl ether (DME) production. Using the software Aspen Plus, key process units were modelled, including saline water desalination, carbon capture, alkaline electrolysis, CO₂ hydrogenation for methanol synthesis, and DME production. A surrogate model based on artificial neural networks was implemented to accurately predict the performance of the integrated system. The multi-objective optimization aimed to maximize productivity and energy efficiency, while minimizing operating costs, emissions, and resource consumption. A comparative analysis of metaheuristic, Bayesian, and deterministic approaches revealed that the deterministic optimization provided the best trade-off among production, energy consumption, and economic feasibility, also standing out for its computational efficiency. The optimal configuration achieved a production of 3,035.7 kg DME/h, along with significant reductions in energy consumption and annual costs. These findings confirm that integrating artificial intelligence into process optimization is essential to advancing sustainability in the chemical industry and accelerating the transition toward a low-carbon economy.

Keywords: *Process Engineering, Surrogate Modeling with AI, Integrated System Optimization, Power-to-X, Sustainable Energy Transition.*

Advisors: José María Ponce-Ortega, Ph. D., Fabricio Nápoles Rivera, Ph. D.

Agradecimientos

Expreso mi sincero agradecimiento al Dr. José María Ponce Ortega y al Dr. Fabricio Nápoles Rivera por su confianza y guía académica, que impulsaron mi crecimiento profesional en cada etapa de este proyecto.

Agradezco al grupo de investigación *Sustainable Technologies for Process Systems Engineering Research Group*, cuya visión científica y compromiso con el desarrollo sostenible han sido una inspiración constante durante esta investigación. Su acompañamiento y sus aportaciones han sido invaluable en mi formación como investigadora.

Reconozco la guía y disposición del M. C. Francisco Javier López Flores, de quien aprendí parte del trabajo que aquí se presenta.

Agradezco profundamente a mi madre, cuya generosidad y cuidado cotidiano sostuvieron el avance de este proyecto.

Este trabajo fue financiado por la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), a través del programa de becas de posgrado.

Índice de Contenido

Resumen.....	1
Abstract	2
Índice de Contenido	4
Índice de Ilustraciones	7
Índice de Tablas	8
CAPÍTULO 1. Introducción.....	9
1.1 Organización de la Tesis y Contribuciones Principales	9
1.2 Antecedentes	9
1.3 Alcance y Objetivos	13
1.3.1 Objetivo General.....	13
1.3.2 Objetivos Particulares	13
1.4 Justificación	14
1.5 Planteamiento del Problema.....	14
1.6 Hipótesis	14
CAPÍTULO 2. Marco Teórico	16
2.1 Aprendizaje Automático	16
2.1.1 Red Neuronal Artificial	16
2.1.2 Función de pérdida y retro propagación: Cómo aprende una RNA.....	18
2.1.3 Optimización de hiperparámetros	18
2.1.4 Evaluación del modelo	19
2.2 Sostenibilidad en Ingeniería Química	20
2.2.1 Procesos sostenibles	20
2.2.2 Planeación Estratégica en Problemas de Optimización de Procesos	20
2.2.3 Química verde (Green Chemistry)	21
2.2.4 Simulación de procesos.....	23
2.2.5 Optimización matemática.....	23
CAPÍTULO 3. Metodología de la optimización multiobjetivo con aprendizaje automático aplicada a procesos sostenibles	25

3.1 Simulación y modelado de procesos en Aspen Plus	25
3.2 Identificación de variables críticas y generación de datos.....	25
3.3 Desarrollo de modelos subrogados con Redes Neuronales Artificiales	26
3.4 Planteamiento y resolución del problema de optimización multiobjetivo	26
3.5 Selección y validación de soluciones óptimas	27
CAPÍTULO 4. Caso de Estudio	28
4.1 Descripción del Sistema Integrado: Simulación de Procesos	28
4.1.1 Desalinización con Destilación de Múltiple Efecto (MED)	28
4.1.2 Electrólisis alcalina de agua.....	29
4.1.3 Sistema de Cogeneración de Energía de Ciclo Combinado.....	31
4.1.4 Captura de Carbono	32
4.1.5 Síntesis de metanol	33
4.1.5.1 Modelo Cinético	35
4.1.5.2 Factor Cinético.....	35
4.1.5.3 Expresiones de fuerza impulsora y de adsorción	36
4.1.6 Síntesis de DME	37
4.1.6.1 Cinética de la Síntesis de DME	38
4.2 Diseño del Análisis de Sensibilidad y Recolección de Datos	39
4.2.1 Análisis de Sensibilidad Local.....	39
4.2.1.1 Cogeneración	40
4.2.1.2 Desalinización de Agua de Mar por Evaporación de Múltiples Efectos	41
4.2.1.3 Electrólisis Alcalina de Agua	42
4.2.1.4 Síntesis de Metanol	43
4.2.1.5 Síntesis de DME	44
4.2.1.6 Captura de Carbono	45
4.2.2 Evaluación Económica	45
4.3 Diseño del Modelo Subrogado con Redes Neuronales Artificiales.....	46
4.3.1 Preprocesamiento de datos	46
4.3.2 Entrenamiento del modelo	46
4.3.3 Optimización de hiperparámetros	46

4.3.4 Evaluación de los modelos	47
4.4 Optimización Multiobjetivo del Sistema Integral	48
4.4.1 Planteamiento del Modelo Matemático	48
4.4.1.1 Normalización	50
4.4.1.2 Índice de Eficiencia Multiobjetivo	51
4.4.2 Enfoques de Optimización Matemática Utilizados	51
4.4.2.1 Optimización metaheurística	51
4.4.2.2 Optimización bayesiana	51
4.4.2.3 Optimización determinista	52
CAPÍTULO 5. Discusión de Resultados	53
5.1 Redes Neuronales Artificiales	53
5.2 Optimización Multiobjetivo del Sistema Integrado	55
5.2.1 Optimización metaheurística	57
5.2.2 Optimización bayesiana	59
5.2.3 Optimización determinista	60
5.3 Validación de Resultados	61
5.4 Resultados de la optimización matemática del sistema integrado	62
CAPÍTULO 6. Conclusiones	65
6.1 Recomendaciones a Futuro	65
Referencias Bibliográficas	67
Anexos	71
Anexo A	71

Índice de Ilustraciones

Figura 1. Diagrama Conceptual de la Optimización Multiobjetivo de la Producción Sostenible de Hidrógeno y Dimetil Éter Mediante Aprendizaje Automático y Simulación de Procesos. Imagen Adaptada de AKrasov/stock.adobe.com, utilizada bajo licencia.....	9
Figura 2. Arquitectura del Modelo de Red Neuronal Artificial Perceptrón Multicapa.	17
Figura 3. Metodología de Optimización Multiobjetivo del Sistema Integrado de Procesos Sostenibles para la Producción de DME Mediante Aprendizaje Automático.	25
Figura 4. Esquema del Proceso de Desalinización de Agua de Mar.	28
Figura 5. Representación Esquemática de la Electrólisis Alcalina de Agua Sostenible.....	30
Figura 6. Diagrama del Proceso de Cogeneración de Energía en un Ciclo de Potencia Combinado.	31
Figura 7. Diagrama Conceptual del Proceso de Captura de Carbono basado en MEA.	32
Figura 8. Diagrama Esquemático del Proceso de Síntesis de Metanol.	34
Figura 9. Diagrama de Flujo del Proceso de Síntesis de DME.....	37
Figura 10. Diagramas de Dispersión de Valores Reales Frente a los Valores Predichos de las Variables Clave para los Conjuntos de Prueba de Cada Proceso.	55
Figura 11. Representación Tridimensional de la Frontera de Pareto que Muestra los Tres Objetivos en Conflicto para las Estrategias de Optimización Multiobjetivo Metaheurística, Bayesiana y Determinista.	56
Figura 12. Proyecciones Bidimensionales del Frente de Pareto. a) $F_{dme} - TAC^{overall}$, b) $F_{dme} - ELC^{overall}$, y c) $TAC^{overall} - ELC^{overall}$	58
Figura 13. Sistema Integrado de Producción de DME Bajo Condiciones Óptimas de Operación.....	63

Índice de Tablas

Tabla 1. Resumen del factor cinético para las reacciones 1, 2 y 3. Adaptado de Kiss et al. (2016).	35
Tabla 2. Coeficientes para la constante de fuerza impulsora en el modelo cinético de Aspen Plus.	36
Tabla 3. Constantes de adsorción adaptadas empleadas en el modelo cinético de Aspen Plus.	37
Tabla 4. Resumen de los factores cinéticos para la reacción 1 (Bercic y Levec, 1993).	38
Tabla 5. Parámetros de Sensibilidad Seleccionados y Límites Viables de Operación para los Análisis de Sensibilidad.	40
Tabla 6. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad del proceso de cogeneración.	41
Tabla 7. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad del proceso de desalinización.	42
Tabla 8. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la electrólisis alcalina.	43
Tabla 9. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la síntesis de metanol.	44
Tabla 10. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la síntesis de DME.	45
Tabla 11. Rangos de Búsqueda de los Hiperparámetros en la Optimización Bayesiana Mediante Keras-Tuner.	47
Tabla 12. Hiperparámetros optimizados para cada modelo de RNA.	47
Tabla 13. Métricas de Estadísticas para la Evaluación de los Modelos de Redes Neuronales Artificiales en el Sistema Integrado de Producción de DME.	54
Tabla 14. Comparación Cuantitativa de los Mejores Resultados Obtenidos en Cada Estrategia de Optimización Multiobjetivo y Eficiencia Computacional de Cada Enfoque.	60
Tabla 15. Resultados de las Variables Clave para las Predicciones del Modelo de RNA y las Simulaciones de Validación en Aspen Plus.	61
Tabla 16. Resultados de la Optimización: Valores Óptimos para el Diagrama Integrado del Sistema de Producción de Hidrógeno Verde y DME.	64

CAPÍTULO 1. Introducción

1.1 Organización de la Tesis y Contribuciones Principales

El Capítulo 1 introduce la metodología científica que guía esta investigación y que se aplica al caso de estudio desarrollado en el Capítulo 4. En el Capítulo 2 se establece el marco teórico, proporcionando los conceptos necesarios para comprender el enfoque y las herramientas utilizadas en esta investigación.

El Capítulo 3 describe la metodología seguida para realizar la optimización matemática multiobjetivo de un sistema integrado de procesos químicos sostenibles, mediante modelos subrogados basados en redes neuronales artificiales.

El Capítulo 4 aborda el caso de estudio, que integra la simulación de los procesos sostenibles en el software Aspen Plus, la construcción de un modelo subrogado basado en redes neuronales artificiales, y la implementación de estrategias de optimización multiobjetivo para un sistema de producción sostenible de DME.

Finalmente, el Capítulo 5 presenta los resultados obtenidos y el Capítulo 6 concluye con el mejor enfoque, que logró un mejor equilibrio entre producción, costos y consumo energético.



Figura 1. Diagrama Conceptual de la Optimización Multiobjetivo de la Producción Sostenible de Hidrógeno y Dimetil Éter Mediante Aprendizaje Automático y Simulación de Procesos. Imagen Adaptada de AKrasov/stock.adobe.com, utilizada bajo licencia.

1.2 Antecedentes

El desarrollo de químicos sintéticos a partir de fuentes que no provienen de hidrocarburos no solo permite diversificar las cadenas de suministro, sino que también responde a la creciente presión por adoptar procesos industriales con menores emisiones

de carbono. Esta transición hacia fuentes más sostenibles podría aliviar la presión sobre las reservas de petróleo, cuyos inventarios globales están disminuyendo constantemente. Además, con los costos de los hidrocarburos fluctuando considerablemente, la innovación en químicos no fósiles representa una solución estratégica y económica para la industria química.

El constante crecimiento de la demanda de petróleo ha impulsado el desarrollo de tecnologías innovadoras como MTO (*Methanol-to-olefins*), que satisfacen la creciente demanda de químicos primarios. En el trabajo hecho por León et al. (2024) analizaron el proceso de una planta de producción de metanol a partir de la hidrogenación de dióxido de carbono capturado de una planta de producción de cemento, y utilizando hidrógeno verde.

Para asegurar la producción sostenible en las plantas de refinación, las mejores prácticas hasta ahora incluyen enfoques sistemáticos de planeación para la optimización de sistemas integrados de producción de combustibles y captura simultánea de emisiones de carbono mientras se consideran esquemas de equidad y métricas de sostenibilidad (Munguía-López et al., 2021); enfoques como integración optimizada de biorefinerías y refinerías de petróleo para utilizar biomasa como materia prima, permitiendo abordar las desventajas inherentes a cada tipo de proceso y manejar incertidumbres asociadas a la producción o a variaciones en los niveles de demanda y costos (Prasetyo et al., 2020).

Por otro lado, para la implementación intensiva de tecnologías sostenibles basadas en fuentes de energía renovable, se ha impulsado el uso de hidrógeno como vector energético. El desafío principal para la comercialización de hidrógeno a gran escala reside en encontrar métodos seguros para su almacenamiento y transporte.

Actualmente se utilizan procesos como la compresión y licuefacción para el almacenamiento de hidrógeno, estos procesos requieren alta presión (30-70 MPa) y baja temperatura (-253°C) (Wijayanta et al., 2019). Ya que la compresión es un proceso energéticamente intensivo, el costo de operación domina el costo final en la cadena de suministro de este gas (Risco-Bravo et al., 2024).

Una alternativa prometedora es el almacenamiento químico de hidrógeno, que convierte el gas en compuestos ricos en hidrógeno y que son seguros de almacenar a temperatura ambiente, sin embargo, algunos compuestos no son viables para su comercialización a gran escala. Se han comparado tres portadores de hidrógeno para su uso en el almacenamiento de energía y transporte: DME, metanol (MeOH) y dibenciltolueno (DBT). Se muestra que el MeOH tiene la mayor densidad volumétrica de hidrógeno, con 99 kg-H₂/m³, 1.4 veces más que el hidrógeno líquido pero su alta toxicidad e inflamabilidad presenta dificultades en su manejo. A diferencia del metanol, el DME no es tóxico y en condiciones normales se encuentra en forma gaseosa, pero puede licuarse fácilmente. Por otro lado, el DBT tiene la menor densidad gravimétrica y volumétrica de hidrógeno, 6.2%

en peso y 58 kg-H₂/m³, respectivamente. Sus ventajas son la no toxicidad y la no inflamabilidad. El DME y DBT son portadores de hidrógeno compatibles con la infraestructura de transporte de combustibles fósiles existente (Pawelczyk et al., 2022).

Por otro lado, DME es un combustible oxigenado alternativo que podría favorecer la transición del sector del transporte pesado hacia la neutralidad de carbono debido a la similitud con el diésel convencional en sus propiedades termodinámicas, y además facilitando el ajuste de estructuras ya establecidas (Schirru et al., 2023). Además, el DME como combustible oxigenado ofrece ventajas en motores de combustión de baja temperatura (LTC), haciéndolo un candidato estratégico para combustible limpio. El aumento del contenido de oxígeno en el combustible, similar a las características del DME, permite operar con una buena eficiencia de combustión, alcanzando simultáneamente bajas emisiones de NO_x y de hollín (Zhu et al., 2013). Además, su capacidad para convertirse en hidrógeno a temperaturas relativamente bajas amplía sus aplicaciones más allá del transporte hacia la generación de energía y la calefacción residencial.

Más allá del uso de DME como combustible directo, Rojas (2018) exploró el potencial del DME como intermediario clave en la producción de combustibles sostenibles, subrayando su papel estratégico en la transición hacia energías renovables. Al incorporarse en rutas de síntesis de combustibles, el DME contribuye al desarrollo de un sistema energético diversificado, resiliente y con bajas emisiones de carbono.

La producción de DME sigue principalmente dos rutas: la síntesis indirecta a través de la deshidratación de metanol y la síntesis directa a partir de gas de síntesis utilizando catalizadores bifuncionales. Si bien la deshidratación de metanol está establecida comercialmente, la síntesis directa ofrece ahorros potenciales de energía y simplificaciones de procesos (Azizi et al., 2014).

Hankin y Shah (2017) exploraron la viabilidad de la síntesis de metanol y DME basada en gas de síntesis utilizando CO y CO₂ como materias primas, identificando configuraciones que mejoran la utilización del CO₂ y mejoran la sostenibilidad general. Este proceso contrasta con las rutas convencionales basadas en metanol, ya que la síntesis directa de DME facilita la captura de carbono y contribuye a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero. Los análisis de viabilidad económica, como los realizados por Karagoz (2014) sugieren que, en condiciones de mercado favorables, el uso del gas de esquisto como materia prima podría proporcionar ventajas de costos, particularmente en regiones con abundantes reservas de gas natural. Otros estudios de modelado de la producción de DME utilizando la ruta indirecta, enfatizan la importancia de la integración y optimización de procesos (Fortin et al., 2020).

Las estrategias de optimización de los procesos de purificación han sido ampliamente investigadas para mejorar la viabilidad económica y ambiental de la

producción de DME. Fedeli et al. (2024) realizaron simulaciones detalladas de la producción directa de DME a partir de biogás en Aspen Plus, evaluando técnicas de purificación que mejoran la eficiencia energética al tiempo que reducen los costos operativos. Su investigación destaca cómo el refinamiento de los procesos de separación a través de métodos avanzados de destilación y adsorción afecta significativamente la viabilidad del proceso. Además, Fortin et al. (2020) desarrollaron un marco de modelado integral para mejorar la integración del calor y la selección de catalizadores, mostrando que estos factores juegan un papel crítico en la minimización de las demandas de energía. Estos estudios subrayan que una combinación de intensificación del proceso y estrategias de separación optimizadas puede aumentar la producción de DME al tiempo que se mantienen los objetivos de sostenibilidad.

El aprendizaje automático ha emergido como una herramienta eficaz para el modelado y la optimización en ingeniería de procesos. Al integrarlo con técnicas de optimización tradicionales, es posible desarrollar modelos que no solo mejoran significativamente el desempeño de los procesos, sino que también facilitan la toma de decisiones operativas.

Entre las aplicaciones más relevantes en ingeniería química, destaca el uso de algoritmos de redes neuronales recurrentes para optimizar las variables de diseño de procesos como la destilación de hidrocarburos o en la producción de etilbenceno (Ishikawa y Kaneko, 2025) (Oh et al., 2024). Estos modelos permiten abordar la complejidad inherente al análisis de procesos y superan las limitaciones de los métodos tradicionales. En este contexto, la optimización bayesiana emerge como una herramienta poderosa para optimizar procesos industriales complejos y de alto costo computacional, como la producción de DME sostenible (Frazier, 2018).

Los avances en simulación de procesos e inteligencia artificial (IA) han impulsado notablemente la eficiencia en la producción de DME. Aklilu y Bounahmidi (2024) demostraron que las redes neuronales artificiales (ANN) son herramientas eficaces para modelar y optimizar procesos de hidrogenación catalítica de CO_2 , al predecir con precisión el comportamiento de las reacciones, optimizar las condiciones operativas y reducir el consumo energético. Por su parte, Yasari (2017) aplicó técnicas de aprendizaje automático para modelar un reactor industrial de DME con enfoque sostenible, y utilizando estrategias de optimización multiobjetivo con las variables de diseño del reactor para minimizar emisiones de CO_2 y maximizar el rendimiento del reactor.

Complementando estas investigaciones, Michailos et al. (2019) evaluaron la viabilidad tecno-económica de la síntesis de DME a partir de CO_2 capturado dentro del esquema *power-to-liquids*, reafirmando el papel clave de la optimización basada en IA para avanzar hacia un sistema energético descarbonizado. A su vez, Fedeli et al. (2022)

exploraron la síntesis directa de DME a partir de biogás, concluyendo que la intensificación de procesos y la integración reacción-separación son esenciales para reducir costos y mejorar la eficiencia, acercando la producción sostenible de DME a escala industrial.

Sin embargo, persisten desafíos significativos para escalar la producción de DME sin comprometer la viabilidad económica ni la sostenibilidad. Fedeli et al. (2022) evidenciaron que, aunque es posible alcanzar la rentabilidad económica, el respaldo normativo y la implementación de mecanismos de precios al carbono son determinantes para garantizar el éxito a largo plazo. Además, la adopción generalizada de DME requiere una adaptación sustancial de la infraestructura existente, dado que sus propiedades físicas exigen modificaciones en las redes de distribución de combustibles. En este sentido, Shokrian y High (2014) propusieron un marco de optimización multicriterio que combina estrategias avanzadas de control y la intensificación de procesos, logrando mejoras simultáneas en el desempeño ambiental y económico en el proceso de producción sostenible de DME.

1.3 Alcance y Objetivos

La investigación se centra en la simulación y optimización de una planta conceptual para la producción de hidrógeno verde y dimetil éter, por medio del modelado de los procesos en Aspen Plus y el desarrollo de un modelo subrogado basado en redes neuronales artificiales. Se evaluaron tres enfoques de optimización multiobjetivo para determinar el más efectivo según la productividad y eficiencia de los procesos. Este estudio no contempla la implementación a escala industrial, aunque los resultados ofrecen una base valiosa para futuros desarrollos tecnológicos.

1.3.1 Objetivo General

Desarrollar una metodología de optimización multiobjetivo integrada con modelos subrogados basados en redes neuronales artificiales, para maximizar la eficiencia de operación y minimizar el consumo energético y costos de operación del sistema integrado para la producción sostenible de hidrógeno y dimetil éter mediante procesos *Power-to-Liquid*.

1.3.2 Objetivos Particulares

1. Diseñar y modelar el sistema integrado para la producción de hidrógeno verde y dimetil éter utilizando el software de simulación Aspen Plus, incorporando unidades clave como desalinización de agua salina, captura de carbono, electrólisis alcalina, y síntesis de metanol y dimetil éter.

2. Implementar un modelo subrogado basado en redes neuronales artificiales para predecir el comportamiento del sistema integrado bajo diferentes condiciones de operación.
3. Implementar estrategias de optimización multiobjetivo, determinista, metaheurístico y bayesiano, al sistema integrado para maximizar la productividad y eficiencia energética, y minimizar costos operativos.
4. Comparar enfoques de optimización determinista, metaheurístico y bayesiano, evaluando su efectividad para alcanzar el equilibrio óptimo entre rendimiento económico y ambiental.

1.4 Justificación

Esta investigación aporta un enfoque integral que combina la simulación de procesos, técnicas de aprendizaje automático y estrategias de optimización para el diseño de sistemas *Power-to-Liquid*. Al identificar las condiciones óptimas de operación, se promueve la eficiencia de producción, la reducción del consumo energético y de los costos. Los hallazgos son una guía valiosa para la implementación industrial de procesos neutrales de carbono, acelerando la transición hacia una industria sostenible y económicamente competitiva.

1.5 Planteamiento del Problema

La transición de la industria química hacia una economía baja en carbono requiere implementar estrategias que integren aspectos de sostenibilidad y que sean económicamente viables. Los procesos *Power-to-Liquid* son soluciones prometedoras para la producción de intermediarios y combustibles sostenibles. Sin embargo, el diseño y la operación de estos sistemas complejos y energéticamente intensivos requieren estrategias de optimización integral.

Actualmente, no existe un enfoque que integre el modelado de procesos, técnicas de aprendizaje automático y estrategias de optimización multiobjetivo para maximizar la eficiencia de operación en un conjunto de procesos como el propuesto en esta investigación.

1.6 Hipótesis

Si se entrena un modelo sustituto híbrido (redes neuronales artificiales) con datos de simulación rigurosa (Aspen Plus), entonces la optimización multiobjetivo del sistema integrado de producción de H₂ y DME logrará los siguientes objetivos:

- Un error relativo $<10\%$ en variables técnicas, económicas y energéticas, dentro y fuera del rango de entrenamiento.
- Reducción del tiempo de optimización al comparar algoritmos (determinista, metaheurístico y bayesiano).

Esta hipótesis se validará mediante la comparación con nuevas simulaciones en Aspen Plus utilizando las variables óptimas obtenidas.

CAPÍTULO 2. Marco Teórico

Para describir procesos químicos, la ingeniería de procesos emplea modelos tradicionales que se basan en los principios que se observan en el sistema, como leyes de conservación de masa, energía o momentum, y ecuaciones termodinámicas. Sin embargo, mientras puede ser poco práctico describir un sistema grande o complejo con modelos basados en los principios que se observan en el sistema, las técnicas de Aprendizaje Automático ofrecen dos ventajas sobre los modelos tradicionales basados en principios: respuestas precisas y reducción del tiempo de cómputo.

El Aprendizaje Automático crea modelos precisos calculando variables a través de su capacidad para encontrar patrones complejos sin necesidad de una programación explícita de ellos (Bikmukhametov y Jäschke, 2020) aun cuando no considera los mecanismos subyacentes.

2.1 Aprendizaje Automático

El aprendizaje automático es un subconjunto de la inteligencia artificial que utiliza algoritmos que no requieren ser programados de manera explícita para que un sistema aprenda y haga predicciones de datos.

Las técnicas de aprendizaje automático se categorizan en aprendizaje supervisado, no supervisado y aprendizaje de refuerzo. En el aprendizaje supervisado el modelo se entrena con datos etiquetados, aprendiendo las relaciones entre los datos de entrada y de salida. Por otro lado, el aprendizaje no supervisado entrena el modelo con datos no etiquetados. Las técnicas de aprendizaje no supervisado detectan patrones por medio de técnicas como *clustering*, extracción de características, detección de anomalías, etc. Finalmente, en el aprendizaje de refuerzo el algoritmo aprende de los datos de entrada e interactuando al recibir retroalimentación en forma de recompensas o penalizaciones.

2.1.1 Red Neuronal Artificial

Dentro del aprendizaje automático, una Red Neuronal Artificial (RNA) es un modelo computacional inspirado en el cerebro humano. Está compuesta por capas de neuronas interconectadas que procesan y transforman información. Su objetivo es aprender patrones a partir de datos, y se emplean en tareas de regresión, clasificación y reconocimiento de patrones.

Uno de los modelos más utilizados es el perceptrón multicapa (MLP, por sus siglas en inglés), una red de propagación hacia adelante en la cual la información fluye desde la capa de entrada hasta la salida (ver **Figura 2**).

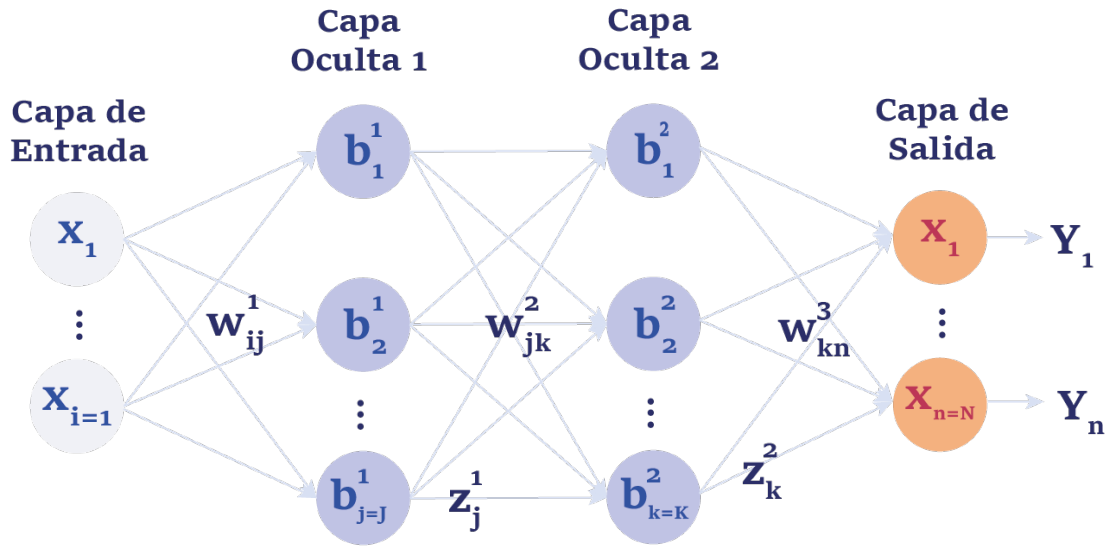


Figura 2. Arquitectura del Modelo de Red Neuronal Artificial Perceptrón Multicapa.

El MLP está organizado en tres capas fundamentales: capa de entrada, que recibe la información del problema, una o más capas ocultas en donde ocurre el procesamiento de información y la capa de salida que produce la respuesta del modelo.

En la capa de entrada, cada neurona representa una característica o variable del problema. Si el conjunto de entrada del problema tiene m variables, el vector de entrada se define como $x_i = [x_1, x_2, \dots, x_m]$, donde cada componente alimenta una neurona. La función de esta capa es recibir los datos del problema y distribuir los datos hacia la siguiente capa de la red para que sean procesados.

Las capas ocultas están formadas por neuronas intermedias que procesan la información por medio de transformaciones ponderadas: las capas intermedias toman la información de la capa anterior y cada entrada se multiplica por un peso, luego suma los resultados y después suma un sesgo, y al resultado le introduce una función de activación, como reLU, tanh o sigmoide, que introduce no linealidad (ver **Ecuaciones 1 a 3**).

Finalmente, la capa de salida transforma las señales de la última capa oculta en una o más salidas Y , que pueden ser valores continuos en problemas de regresión o categorías o etiquetas en problemas de clasificación.

El proceso de propagación hacia adelante puede expresarse matemáticamente como:

$$z_j^1 = f_1 \left(\sum_{i=1}^I w_{ij}^{(1)} x_i + b_j^{(1)} \right) \quad (1)$$

En la **Ecuación 1**, z_j^1 es la salida de la neurona j en la primera capa oculta. En este modelo, la matriz de pesos (w) representan un número ajustable que define la importancia de cada entrada, y los sesgos (b) ajustan la posición de la función de activación. Las

funciones f_1 y f_2 representan las funciones de activación que introducen la no linealidad requerida para que la red aproxime funciones complejas.

$$Z_k^2 = f_2 \left(\sum_{j=1}^J w_{jk}^{(2)} Z1_j + b_k^{(2)} \right) \quad (2)$$

En la **Ecuación 2**, Z_k^2 es la salida en la neurona k en la segunda capa oculta.

$$Y_n = \sum_{k=1}^K w_{kn}^{(3)} Z2_k + b_n^{(3)} \quad (3)$$

En la **Ecuación 3**, Y_n es la salida de la neurona n en la capa de salida.

No se considera ninguna función de activación para la capa de salida, ya que los modelos de regresión de construcción no requieren la adición de una función de activación en esta capa.

2.1.2 Función de pérdida y retro propagación: Cómo aprende una RNA

Las predicciones iniciales de una RNA podrían ser erróneas, ya que no se han ajustado sus parámetros. Durante el proceso de aprendizaje, la RNA modifica de forma iterativa sus pesos y sesgos en función del error cometido, el cual es evaluado con una función de pérdida. Esta función, como el error cuadrático medio (MSE), cuantifica la diferencia entre las predicciones del modelo y los valores reales, mostrando qué tan alejadas están las predicciones del resultado esperado. En el ajuste de los pesos del modelo se emplean algoritmos como el optimizador Adam, que adapta la tasa de aprendizaje de cada parámetro, acelerando la convergencia del modelo.

Para minimizar el error, la RNA utiliza un método llamado retro propagación por medio de la iteración de algoritmos de optimización como el descenso del gradiente, que ajusta los pesos y sesgos en la dirección que reduce la pérdida. Este ajuste se realiza mediante la derivada de la función de pérdida con respecto de cada peso. La RNA mejora su capacidad de predecir correctamente mediante iteraciones (épocas de entrenamiento) de aprendizaje con ejemplos de entrada y salida esperados.

2.1.3 Optimización de hiperparámetros

En el entrenamiento de una RNA, los pesos y sesgos se ajustan automáticamente para minimizar el error. Por otro lado, otros parámetros clave llamados hiperparámetros, deben configurarse antes del entrenamiento y pueden influir significativamente en el rendimiento del modelo.

Encontrar la arquitectura óptima de la RNA que se desempeñe con el mejor rendimiento puede diseñarse definiendo aspectos clave, llamados hiperparámetros, que

definen cómo debe entrenarse la red. Algunos ejemplos de hiperparámetros son: tasa de aprendizaje, que controla la magnitud de los ajustes en los pesos, número de capas y neuronas, tamaño de batch, número de épocas, etc.

Un mal ajuste puede llevar a sobreajuste donde el modelo aprende demasiado bien los datos de entrenamiento, pero falla en nuevos datos, o subajuste donde la red no logra captar la estructura del problema.

Para encontrar la mejor configuración hiperparámetros en un modelo de aprendizaje automático se utilizan estrategias como la Búsqueda en rejilla (Grid Search), que evalúa todas las combinaciones de hiperparámetros posibles dentro de un conjunto definido, aunque haciéndola computacionalmente costosa conforme aumenta el número de hiperparámetros. Alternativamente, la Búsqueda aleatoria (Random Search) prueba valores al azar dentro de un rango especificado, y que puede encontrar buenas estimaciones sin probar todas las combinaciones, aunque puede desperdiciar tiempo de cómputo probando regiones que no serán favorables. Por otro lado, la optimización bayesiana ajusta los hiperparámetros basándose en modelos probabilísticos para mejorar la eficiencia de la búsqueda.

La optimización bayesiana es un método eficiente que usa un modelo sustituto para la búsqueda del mejor conjunto de hiperparámetros. Este es un método iterativo que forma un modelo probabilístico, como los procesos gaussianos, modelos de regresión o los árboles de decisión, considerando los resultados de evaluaciones previas, reduciendo el número de iteraciones. De esta manera, la optimización bayesiana de hiperparámetros equilibra eficazmente la exploración mediante una función de adquisición, que guía la exploración del espacio al determinar cuáles serán los siguientes puntos en los que se evaluará la función objetivo, lo que facilita la optimización en problemas de alta dimensión y no convexos (Joy et al., 2020) (Cho et al., 2020).

2.1.4 Evaluación del modelo

La evaluación de la habilidad de predicción de los modelos se realiza con el conjunto de datos de prueba y utilizando métricas estadísticas como las siguientes: La Raíz del Error Cuadrático Medio, RMSE, (**Ecuación 4**) mide la desviación estándar de los errores de predicción, destacando las desviaciones mayores y proporcionando información sobre la magnitud general del error, aunque puede ser sensible a valores atípicos. El Error Absoluto Medio MAE (**Ecuación 5**) representa la diferencia absoluta promedio entre los valores predichos y los reales, lo que ofrece una evaluación más equilibrada del rendimiento del modelo sin sobreestimar los errores extremos. El Error Absoluto Medio Porcentual MAPE (**Ecuación 6**) expresa los errores de predicción como un porcentaje de los valores reales, lo que permite una evaluación independiente de la escala, pero puede volverse inestable

cuando los valores reales se aproximan a cero. Finalmente, el Coeficiente de Correlación de Pearson R^2 (**Ecuación 7**) cuantifica la proporción de varianza en la variable dependiente explicada por el modelo. Valores cercanos a 1 indican una mayor precisión predictiva, aunque su interpretación puede verse afectada por una alta varianza en la variable objetivo.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2} \quad (4)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i - y_i| \quad (5)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \cdot 100 \quad (6)$$

$$R^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right) \quad (7)$$

2.2 Sostenibilidad en Ingeniería Química

2.2.1 Procesos sostenibles

La Comisión Brundtland de las Naciones Unidas definió en 1987 la sostenibilidad como lo que permite satisfacer las necesidades del presente sin comprometer la habilidad de las futuras generaciones de satisfacer sus necesidades propias; con lo anterior, el diseño de un proceso sostenible implicará considerar lo siguiente:

1. Eficiencia energética en cada etapa del proceso, con la adopción de sistemas de recuperación de energía y aprovechamiento de fuentes de energía renovables.
2. Gestión responsable de recursos no renovables con la integración másica de agua de proceso, así como la implementación de prácticas que minimicen la generación de residuos y emisiones de contaminantes al medio ambiente.
3. Planificación de un diseño que facilite la adaptabilidad del proceso a cambios futuros en la demanda, así como la integración de tecnologías innovadoras que promuevan una mejora constante según los objetivos del proceso.

2.2.2 Planeación Estratégica en Problemas de Optimización de Procesos

La planeación estratégica, según la literatura académica sobre Optimización, Análisis y Diseño de Procesos, abarca las siguientes etapas según sea el tipo de proyecto:

1. Evaluación y Definición Objetivos del Proyecto: Consiste en un análisis de las proyecciones de la industria en el futuro, así como una evaluación de los posibles objetivos del proyecto, considerando factores económicos, ambientales y regulatorios.

2. Diseño de la Cadena de Suministro: Se determinan aspectos como selección y gestión de recursos, el diseño y distribución de la planta de procesamiento y la configuración de redes de distribución de productos.

3. Optimización de procesos: Un problema de optimización es descrito con un modelo matemático que contiene restricciones, como la capacidad del proceso y disponibilidad de recursos, balances de materia, funciones objetivo que consideran la alineación del proyecto con objetivos económicos, sociales y de sostenibilidad.

4. Planificación financiera: Las proyecciones financieras se utilizan para evaluar la viabilidad del proyecto; incluyen costos de inversión, costos operativos y estimaciones de ingresos.

5. Ejecución: La implementación del plan consiste en el comienzo de la construcción de infraestructura e inicio de operaciones.

6. Monitoreo de operaciones: Después de la implementación, se realiza una evaluación continua para mejorar la eficiencia y adaptarse a posibles cambios. La integración de herramientas de Manufactura inteligente puede facilitar la eficiencia operativa y responder de forma ágil a los cambios no previstos en las dinámicas del mercado.

2.2.3 Química verde (Green Chemistry)

La química verde aborda cuestiones como el uso de materias primas alternativas que mejoren el desempeño ambiental del proceso y reducir el agotamiento de recursos no renovables en comparación con los procesos tradicionales. Además, se centra en la implementación de nuevas vías de síntesis que eviten intermediarios y/o subproductos peligrosos (Turton et al., 2003).

Los Doce Principios de la Química Verde fueron introducidos en 1998 por Paul Anastas y John Warner. Estos principios son un marco de referencia para el diseño de procesos químicos sostenibles; consideran todos los aspectos del ciclo de vida, desde la materia prima utilizada hasta la eficiencia y la seguridad en el procesamiento, la toxicidad y la biodegradabilidad de productos y reactivos empleados (Anastas y Eghbali, 2009).

Según la American Chemical Society, los Doce Principios de la Química Verde son (ACS, 2023):

1. Prevención: Es mejor prevenir la producción de residuos que tratarlos o limpiarlos después de que se hayan creado.

2. Economía de Átomos: Los métodos de síntesis deben diseñarse para maximizar la incorporación de todos los materiales utilizados en el proceso en el producto final.

3. Síntesis de Químicos menos Peligrosos: Siempre que sea posible, el diseño de los métodos de síntesis debería utilizar y generar sustancias que posean poca o ninguna toxicidad para la salud humana y el medio ambiente.

4. Diseño de Productos Químicos más Seguros: Los productos químicos deben diseñarse para preservar la eficacia de la función y reducir al mismo tiempo la toxicidad.

5. Disolventes y Auxiliares más Seguros: El uso de sustancias auxiliares (por ejemplo, disolventes, agentes de separación, etc.) debe ser innecesario siempre que sea posible e inocuo cuando se utilice.

6. Diseño para la Eficiencia Energética: Las necesidades energéticas deben reconocerse por sus impactos ambientales y económicos y deben reducirse al mínimo. Los métodos sintéticos deben realizarse a temperatura y presión ambiente.

7. Uso de Materias Primas Renovables: Una materia prima debe ser renovable en lugar de agotarse siempre que sea técnica y económicamente factible.

8. Reducir los Productos Derivados: El uso innecesario de grupos de bloqueo, protección/desprotección, modificación temporal de procesos físicos/químicos, debe minimizarse o evitarse en la medida de lo posible, ya que tales pasos requieren reactivos adicionales y pueden generar residuos.

9. Catálisis: Los reactivos catalíticos (lo más selectivos posible) son superiores a los reactivos estequiométricos.

10. Diseño para la Degradación: Los productos químicos deben diseñarse de tal manera, que al final de su función se descompongan en productos de degradación inocuos y no persistan en el medio ambiente.

11. Análisis en Tiempo Real para la Prevención de la Contaminación: Es necesario seguir desarrollando metodologías analíticas para permitir la vigilancia y el control en tiempo real durante el proceso antes de la formación de sustancias peligrosas.

12. Química inherentemente más segura para la prevención de accidentes: Las sustancias, y la forma de una sustancia, utilizada en un proceso químico deben elegirse para minimizar el potencial de accidentes químicos, incluidas las liberaciones, las explosiones y los incendios.

2.2.4 Simulación de procesos

El Modelado de Orden Reducido es una técnica de representación simplificada de sistemas complejos que conservan las características del sistema original y que poseen un error aceptable. Como parte de la estrategia de optimización, la simulación de procesos químicos permite evaluarlos de forma rápida manteniendo la precisión.

Un modelo matemático que representa el comportamiento de un proceso puede emplearse para realizar análisis “¿qué pasaría si...?”, estudiando cómo el sistema respondería a ciertos cambios en las variables de entrada, para así estimar el comportamiento bajo diferentes escenarios y condiciones de operación. En el contexto de optimización, los modelos matemáticos que describen el comportamiento de un sistema y que buscan el mejor diseño o curso de acción, se les llama modelos prescriptivos.

Existen tres tipos de algoritmos de solución para los simuladores de procesos (Turton et al., 2003):

Secuencial modular: En el enfoque secuencial modular, las ecuaciones que describen el desempeño de las unidades equipo se agrupan y se resuelven en módulos. Cada equipo es resuelto en secuencia, iniciando con el primero seguido por el segundo y así sucesivamente. Aquí, se asume que se ha proporcionado toda la información de entrada requerida para resolver cada equipo. Por lo tanto, la respuesta de un equipo junto con las especificaciones de este, serán la información de entrada para el siguiente equipo en el proceso. Un proceso sin corrientes de recirculación solo requerirá una iteración para encontrar la solución convergente.

Simultáneo no modular: En el algoritmo de resolución de ecuaciones, o simultáneo no modular, todas las relaciones matemáticas para el proceso se escriben juntas, y después es resuelta la matriz de ecuaciones simultáneas no lineales para encontrar la solución. En términos de tiempo de cómputo, esta técnica es la más eficiente, pero requiere mucho tiempo para establecer el problema y es pesado.

Simultáneo modular: Este enfoque combina la modularización de las ecuaciones relacionadas a un equipo específico con la solución eficiente de los algoritmos de la técnica de solución de ecuaciones simultáneas.

2.2.5 Optimización matemática

Optimización es un término matemático utilizado para describir algunos tipos de problemas y técnicas de solución que buscan determinar el mejor resultado, o solución óptima, en un problema. Los problemas típicos de optimización se relacionan con la planeación y toma de decisiones.

La optimización de un problema consiste en elegir los valores de las variables de control, $x_1, \dots, x_n$, que hacen que la función objetivo alcance un máximo o un mínimo. La función objetivo es una expresión matemática que depende de varias variables ($x_1, \dots, x_n$), que son llamadas variables de control y son variables independientes. Puede haber más de una función objetivo en un problema de optimización. Además, los problemas de optimización pueden volverse complejos, debido a la interacción entre múltiples variables y restricciones.

En algunos problemas, llamados problemas de optimización restringidos, la elección de los valores de las variables de control está sujeta a restricciones que provienen de la naturaleza del problema y de las mismas variables. Las restricciones para aquellas variables que no pueden asumir valores negativos como el costo, tiempo y distancia recorrida, pueden verse como la desigualdad: $x_1 \geq 0$. Las restricciones también pueden presentarse en forma de ecuaciones (Kreyszig, 2011). Las restricciones permiten limitar el número de soluciones verdaderas en el problema de optimización.

Por definición, la función objetivo f tiene un mínimo en un punto $x_1 \geq x_0$, en una región R en donde f está definida, si $f(x) \geq f(x_0)$ para toda x en R . De manera semejante, f tiene un máximo x_0 si $f(x) \leq f(x_0)$ para toda x en R . Los máximos y los mínimos en conjunto se llaman extremos. Además, se dice que f tiene un extremo local en x_0 si $f(x) \geq f(x_0)$ para toda x en una vecindad de x_0 . Un máximo local se define de manera semejante (Kreyszig, 2011).

Un óptimo global es aquel punto en el cual la función objetivo es la mejor para todos los valores permisibles de las variables de decisión. Un óptimo local es el punto que representa la mejor solución para una región específica en el dominio.

CAPÍTULO 3. Metodología de la optimización multiobjetivo con aprendizaje automático aplicada a procesos sostenibles

En el presente capítulo, se presenta una estrategia para realizar una optimización matemática multiobjetivo de un sistema integrado de procesos químicos sostenibles, mediante el uso de modelos subrogados basados en redes neuronales artificiales (ver **Figura 3**). La metodología combina simulación de procesos, análisis de sensibilidad, técnicas de aprendizaje automático y enfoques de optimización.

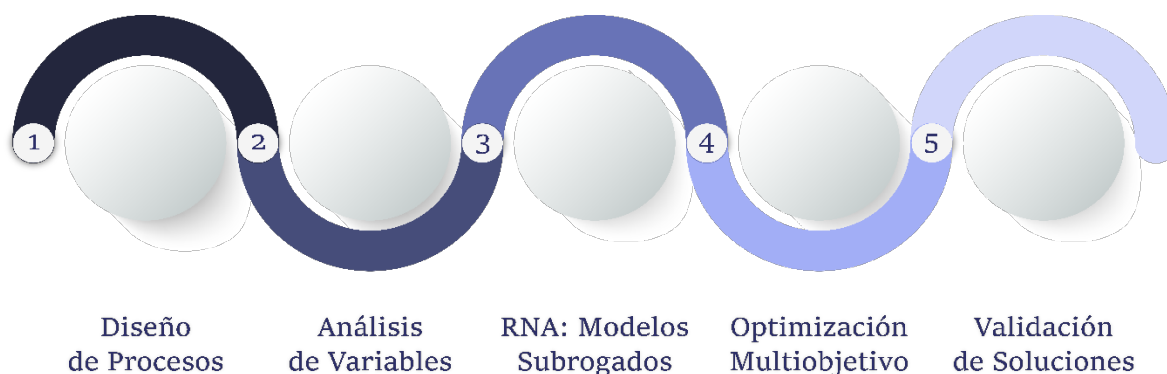


Figura 3. Metodología de Optimización Multiobjetivo del Sistema Integrado de Procesos Sostenibles para la Producción de DME Mediante Aprendizaje Automático.

3.1 Simulación y modelado de procesos en Aspen Plus

Cada proceso que conforma el sistema integrado, como la electrólisis alcalina de agua, la desalinización de agua de mar, la cogeneración con gas natural, la captura de carbono, la síntesis de metanol y DME, fue diseñado y simulado individualmente en el software Aspen Plus.

Aspen Plus permite predecir el comportamiento de los procesos con un alto grado de confiabilidad cuando se parte de condiciones de operación realistas. Para acotar el espacio de diseño de cada modelo, se consideraron los rangos operativos reportados en la literatura científica, como en estudios experimentales realizados para las reacciones de síntesis de metanol y DME.

3.2 Identificación de variables críticas y generación de datos

Para reducir las dimensiones del problema y aumentar la eficiencia computacional, se realizó un análisis de sensibilidad local utilizando el método *One-At-a Time* (OAT). Este

análisis identificó las variables de entrada con mayor impacto sobre las salidas clave de cada proceso: eficiencia, el consumo de energía, y los costos operativos.

Las variables más influyentes se utilizaron para definir las condiciones de operación en Aspen Plus. A partir de estas simulaciones se generaron las bases de datos que alimentan el entrenamiento del modelo subrogado.

3.3 Desarrollo de modelos subrogados con Redes Neuronales Artificiales

Los modelos subrogados se desarrollaron entrenando RNA con los datos obtenidos en las simulaciones de Aspen Plus, con el objetivo de predecir el comportamiento del sistema bajo condiciones de operación no simuladas previamente.

Antes del entrenamiento, los datos fueron normalizados para evitar que variables con distintas escalas afecten el desempeño del modelo. La arquitectura de las redes se optimizó utilizando validación cruzada (80% entrenamiento, 20% validación), el algoritmo de optimización de Adam y la función de pérdida MSE. La optimización de hiperparámetros se realizó mediante Keras-Tuner y se aplicó un mecanismo de detención temprana que previene el sobreajuste del modelo.

Las redes fueron evaluadas utilizando las métricas estadísticas RMSE, MAE, MAPE y R^2 , y validadas mediante la comparación entre las predicciones del modelo y resultados de nuevas simulaciones en Aspen Plus.

3.4 Planteamiento y resolución del problema de optimización multiobjetivo

El modelo matemático de optimización representa las interacciones entre procesos a través de funciones que dependen de las variables de entrada, e incorpora balances de masa y energía, costos anuales totales y suministro energético que proviene de fuentes renovables.

El objetivo fue encontrar soluciones que maximizaran la producción de DME, mientras minimizaran los costos anuales totales y el consumo energético. La función objetivo fue formulada a partir del modelo subrogado; además el modelo incluyó una restricción de operación relacionada con el suministro de energía renovable.

Para resolver el problema multiobjetivo se implementaron tres enfoques de optimización: determinista, metaheurístico y bayesiano. Se utilizó un Índice de Eficiencia Multiobjetivo como criterio de comparación entre las estrategias.

3.5 Selección y validación de soluciones óptimas

Se aplicó un análisis multicriterio sobre las soluciones del frente de Pareto para identificar las alternativas óptimas. Posteriormente, las soluciones seleccionadas fueron validadas con nuevas simulaciones en Aspen Plus para verificar su viabilidad técnica y la precisión de las predicciones del modelo subrogado.

CAPÍTULO 4. Caso de Estudio

4.1 Descripción del Sistema Integrado: Simulación de Procesos

Los procesos del sistema integrado en la producción de DME sostenible son modelados usando el Simulador Aspen Plus V.14. Los modelos de desalinización por destilación flash multietapa, síntesis de metanol y DME fueron desarrollados basados en cinéticas validadas y balances termodinámicos. Los modelos de electrólisis alcalina de agua, cogeneración de energía con un ciclo combinado y captura de CO₂ se basaron en ejemplos estándar del software, pero con modificaciones clave para evitar sobre especificaciones y garantizar la convergencia. Los diagramas de flujo y especificaciones de los seis modelos se encuentran en el **Anexo A**.

4.1.1 Desalinización con Destilación de Múltiple Efecto (MED)

La **Figura 4** ilustra el proceso de desalinización de agua de mar por medio de destilación flash multietapa. La desalinización térmica representa tecnología clave para el aprovechamiento de recursos hídricos no convencionales, especialmente en regiones con escasez de agua dulce. En esta investigación, el sistema de desalinización se incorpora dentro del esquema integrado de producción de DME, con el propósito de satisfacer los requerimientos de agua en las diversas etapas del proceso, como separación, reacción y enfriamiento.

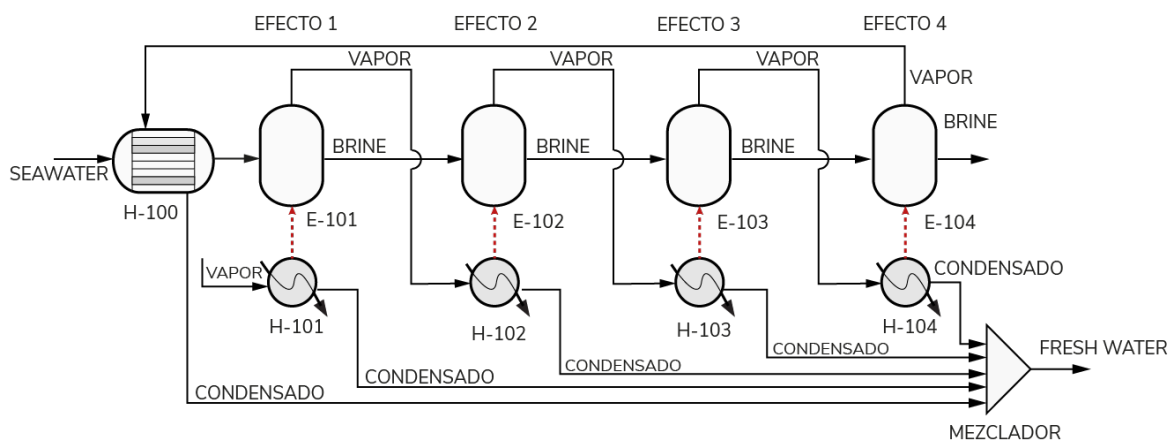


Figura 4. Esquema del Proceso de Desalinización de Agua de Mar.

En este sistema, el agua salina (Corriente *SEAWATER*) se precalienta en el intercambiador de calor H-100 hasta alcanzar una temperatura de 38 °C. El precalentamiento del agua de mar mejora la eficiencia energética al reciclar la energía térmica que de otro modo se desperdiciaría. El agua precalentada se introduce en una serie

de cuatro cámaras o efectos modelados con bloques “Flash 2” en Aspen Plus y nombrados como: E-101, E-102, E-103, y E-104; estos bloques están especificados con las temperaturas decrecientes a las que ocurre la separación de fases: $50.3\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 47.2\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 45\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 41.1\text{ }^{\circ}\text{C}$. En un proceso *flash*, la reducción de presión provoca una vaporización súbita (*flash*) del agua caliente, generando vapor de baja salinidad.

La simulación en Aspen Plus utiliza los bloques “Heater” para simular el calentamiento de la corriente. En el primer efecto (E-101), el vapor de la corriente STEAM transfiere calor al evaporador E-101 a través del calentador H-101, donde el agua salina es evaporada para producir vapor de agua desalinizada. El vapor del primer efecto se recupera y se utiliza como fuente de calor en el calentador H-102, en el cual, mientras el vapor del primer efecto se condensa, se precalienta el agua de mar entrante en el segundo efecto (E-102).

La condensación produce agua desalinizada, que se recoge como producto final en la corriente FRESH WATER. A medida que se extrae agua dulce en cada etapa, el agua de mar restante se vuelve cada vez más salina. Esta salmuera concentrada sale de cada efecto a través de la corriente B1. Este paso se repite en las etapas subsiguientes (efectos 2, 3 y 4), cada una operando a presiones y temperaturas progresivamente más bajas para facilitar la evaporación con un menor consumo de energía. Finalmente, las corrientes de salmuera (B1, B2, B3, y B4) se mezclan en la corriente *BRINE*, que se descarga finalmente del sistema.

Esta simulación emplea el método ELECNRTL para el cálculo de propiedades, ideal para modelar procesos que involucren electrolitos líquidos, como los procesos de desalinización de agua salada. Dado que las soluciones salinas presentan un comportamiento no ideal debido a las interacciones iónicas, un modelo como ELECNRTL resulta muy útil. Este método maneja eficazmente un amplio rango de concentraciones de sal (tanto bajas como altas), lo cual es crucial para las salmueras concentradas presentes en las etapas finales de la desalinización por evaporación multi efecto.

4.1.2 Electrólisis alcalina de agua

El agua desalinizada se introduce en un proceso de electrólisis de agua alcalina para producir hidrógeno verde alimentado con energía renovable. La **Figura 5** ofrece una visión general del proceso de producción de hidrógeno verde mediante electrólisis alcalina.

La unidad central es el electrolizador alcalino STACK, donde las moléculas de agua se dividen en hidrógeno en el cátodo y oxígeno en el ánodo a través de reacciones electroquímicas, como se muestra a continuación:

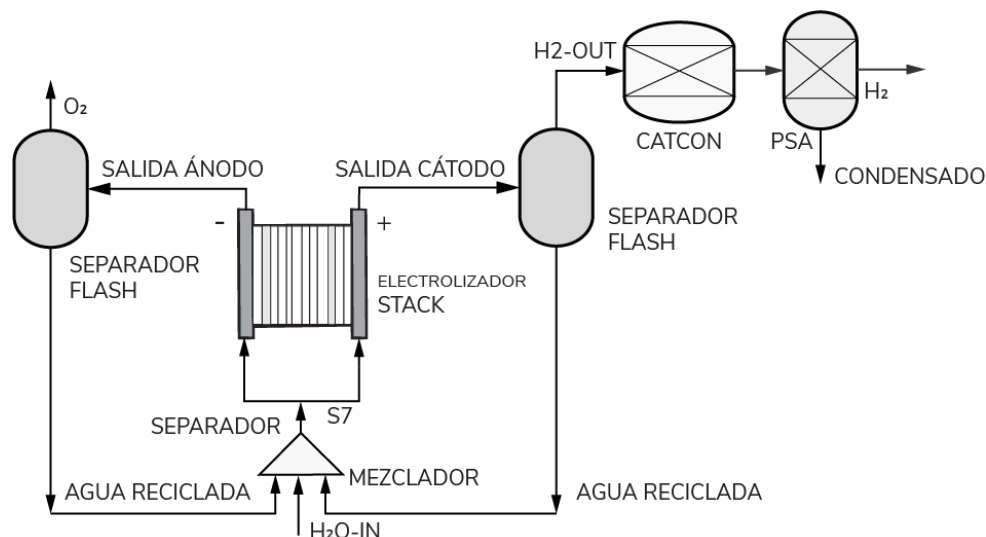
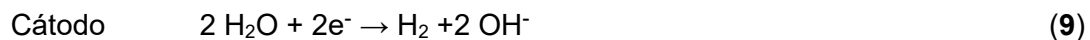
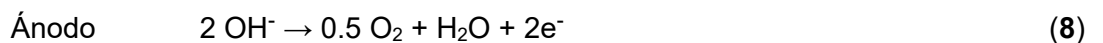


Figura 5. Representación Esquemática de la Electrólisis Alcalina de Agua Sostenible.

Esta reacción se impulsa mediante una corriente eléctrica, y el electrolito alcalino mejora el transporte de iones. El agua que sale de ambos electrodos se recicla y se combina con una corriente de reposición de agua fresca ($\text{H}_2\text{O-IN}$) antes de reintroducirse en el electrolizador. Los efluentes del electrolizador, compuestos por una mezcla de hidrógeno, oxígeno y agua residual, se dirigen a separadores flash, donde el hidrógeno y el oxígeno se separan del agua, que posteriormente se recicla de nuevo en el proceso. Para garantizar la pureza de la corriente de hidrógeno, un reactor estequiométrico (CATCON) convierte todo el oxígeno residual de la corriente de hidrógeno ($\text{H}_2\text{-OUT}$) en agua. El reactor está especificado con una fracción de conversión de 1 para el O_2 , logrando una eficiencia de conversión del 100%. Finalmente, se utiliza una unidad de adsorción por oscilación de presión (PSA) para obtener hidrógeno de alta pureza, modelado con un bloque “Sep” y especificado como 1 en la fracción de salida del H_2 . El modelo de proceso emplea el método de propiedades ENRTL-RK para describir el comportamiento de componentes puros y mezclas en sistemas electrolíticos.

Las especificaciones del modelo riguroso del Electrolizador en Aspen Plus se encuentran en la **Tabla A** del **Anexo A** de este documento.

4.1.3 Sistema de Cogeneración de Energía de Ciclo Combinado

El proceso de cogeneración de energía integra la producción de energía y la recuperación de calor utilizando gas natural como materia prima principal, compuesto por metano (83.62 % en peso), etano (7.33 % en peso), propano (7.25 % en peso) y argón (1.8 % en peso). El sistema de cogeneración consta de tres secciones principales: (1) Sección de Expansión, (2) Sección de Turbina de Gas y (3) Sección de Generación de Vapor (ver **Figura 6**).

En la Sección de Expansión, la energía interna del gas natural se aprovecha mediante la turbina E-101, reduciendo la presión del gas de 19.5 bar a 8 bar y generando 0.60 MW de energía eléctrica. Las eficiencias de todas las turbinas de este modelo fueron especificadas como 0.8 para eficiencia isentrópica y 0.95 para eficiencia mecánica. En la Sección de Turbinas de Gas, el gas natural expandido se mezcla con vapor (8 bar) y aire que ha pasado a través de un compresor isentrópico con eficiencia de 0.9 y eficiencia mecánica de 0.95 (8 bar, 1,324,000 kg/h) y se quema en un reactor modelado como uno estequiométrico “RGibbs” para producir gases calientes a 979 °C. Este gas a alta temperatura en la corriente HOT GAS se dirige a la turbina de gas E-102, donde genera 103.4 MW de potencia (POWER), reduciendo la presión del gas de 8 bar a 1.1 bar y la temperatura a 551 °C. El gas caliente HOT GAS que sale de la turbina aún contiene una cantidad significativa de energía térmica, que se recupera en la siguiente sección.

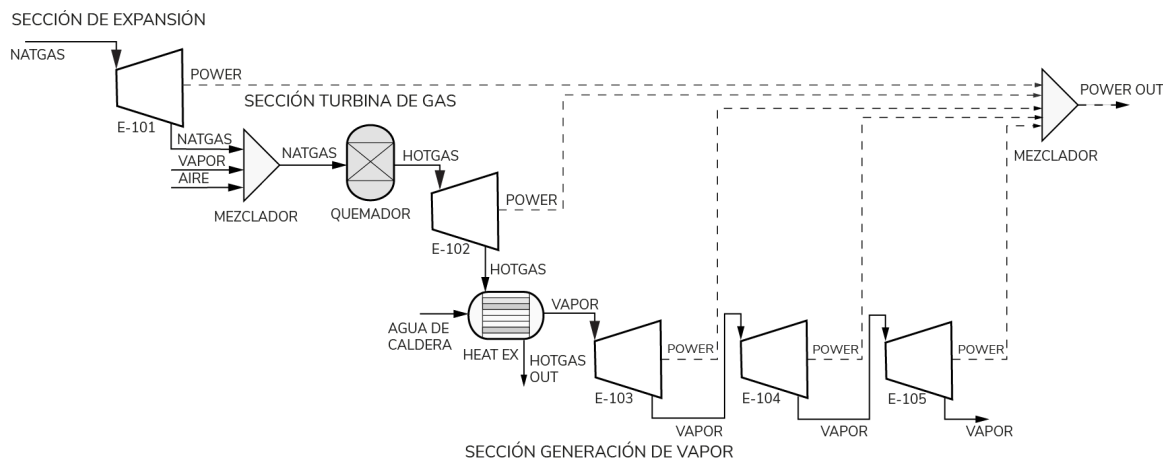


Figura 6. Diagrama del Proceso de Cogeneración de Energía en un Ciclo de Potencia Combinado.

La Sección de Generación de Vapor maximiza la recuperación de energía utilizando el calor de los gases de combustión para producir vapor por medio del agua de caldera. El gas de escape caliente que sale de la turbina E-102 pasa por una serie de intercambiadores de calor, colectivamente nombrados HEAT EX en la **Figura 6**, donde se enfría progresivamente de la siguiente manera: 551 °C → 492 °C → 320 °C → 238 °C → 234 °C

→ 175 °C. Finalmente, el gas enfriado es descargado del proceso en la corriente HOT GAS OUT.

Mientras los gases de combustión son enfriados gradualmente, su energía térmica es recuperada para calentar la corriente del agua de caldera, que es alimentada a dos niveles de presión (76.5 bar y 6.9 bar), para producir vapor. Este vapor se expande en tres turbinas (E-103, E-104 y E-105), generando 37.6 MW de energía adicional. El proceso produce tres productos de vapor a diferentes niveles de presión, que pueden reutilizarse.

Las propiedades termodinámicas del gas natural y los productos de combustión se describen mediante la ecuación de estado de Peng-Robinson con modificaciones de Boston-Mathias (PR-BM). El único reactor de este sistema es el quemador BURNER, modelado mediante el método RGibbs, que emplea la minimización de la energía libre de Gibbs para determinar la composición de equilibrio de los productos de combustión dadas las múltiples reacciones involucradas.

4.1.4 Captura de Carbono

Los gases de combustión emitidos durante el proceso de cogeneración (sección 3.1.3) contienen cantidades significativas de CO₂ y son dirigidos a la unidad de captura de carbono, que utiliza una técnica de absorción basada en disolvente de mono etanolamina (MEA), logrando una corriente de CO₂ puro mediante absorción química (ver **Figura 7**).

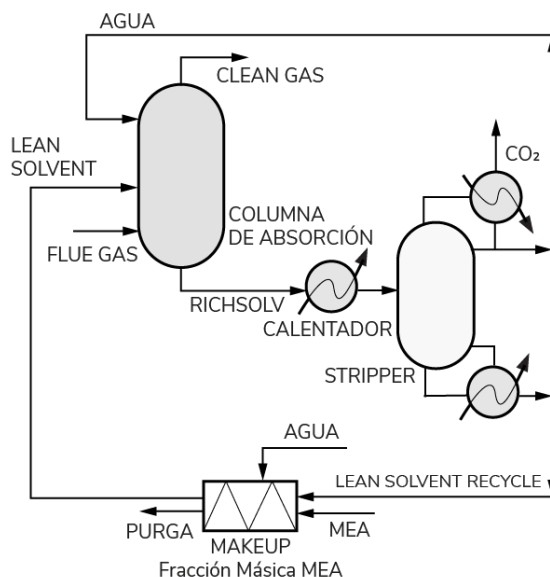


Figura 7. Diagrama Conceptual del Proceso de Captura de Carbono basado en MEA.

Este gas de combustión seco FLUE GAS, compuesto de CO₂, O₂ y N₂, se satura primero con agua para prepararlo para el proceso de absorción. El gas de combustión saturado se introduce en la parte inferior de una columna de absorción empacada, donde

entra en contacto con el disolvente de MEA pobre en CO₂ (LEAN SOLVENT) que se alimenta a la columna en la etapa 6. A medida que el gas de combustión asciende por la columna empacada de 30 etapas, el MEA absorbe el CO₂, dejando una corriente de gas purificada (CLEAN GAS) que sale por la parte superior de la columna. Para minimizar la pérdida de disolvente, se introduce agua en la parte superior del absorbedor, eliminando cualquier residuo de MEA de la corriente de gas. El disolvente rico en CO₂ que sale del absorbedor (RICH SOLV) se recoge en la parte inferior y se envía al calentador HX1 (ver **Figura G** en el **Apéndice A**) para elevar su temperatura a 70 °C, preparándolo para el proceso de desorción.

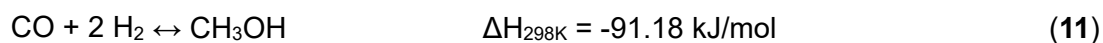
En la columna de desorción (STRIPPER), dividida en 22 etapas, el disolvente rico precalentado libera el CO₂ capturado. Dentro del desorbedor el CO₂ se desorbe del disolvente rico, mientras que el MEA se regenera y se recoge en la parte inferior. Mientras tanto, el CO₂ liberado se recoge en la parte superior del desorbedor (STRIPPER).

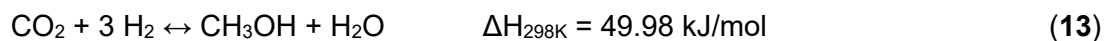
El disolvente pobre recuperado en el desorbedor (LEAN SOLVENT RECYCLE) se recicla de vuelta al absorbedor, y se añade el MEA necesario para mantener la concentración del disolvente de MEA en una fracción másica de 0.23. Este proceso de recuperación minimiza el consumo de disolvente. El solvente MEA es enfriado hasta 37 °C antes de ser reutilizado en ABSORBER.

Las propiedades físicas de este proceso se calcularon mediante el método de propiedades ENRTL-RK, que modela con precisión el sistema electrolítico. Este método integra la ecuación de estado de Redlich-Kwong para las propiedades en fase de vapor con el modelo NRTL de electrolitos asimétricos para gestionar con precisión las especies iónicas. En sistemas electrolíticos mixtos, ENRTL-RK aplica reglas de mezclado para calcular los parámetros de interacción, lo que garantiza predicciones termodinámicas precisas en el proceso de captura de carbono. También se modelan las reacciones cinéticas entre el CO₂ y el MEA para describir con precisión la dinámica de absorción y desorción.

4.1.5 Síntesis de metanol

La producción de metanol sintético implica la hidrogenación del CO₂ capturado (León et al., 2024) utilizando hidrógeno sostenible producido mediante electrólisis alcalina de agua (ver **Figura 8**). La simulación fue realizada modelando un reactor de flujo pistón (R-101) utilizando las expresiones cinéticas propuestas en la investigación de Kiss et al. (2016). Las reacciones para el modelo cinético de la síntesis de metanol, incorporado en Aspen Plus son las siguientes:





El reactor R-101 tiene 12 metros de longitud y 8100 tubos, cada uno con un diámetro de 0.06 metros. El reactor está equipado con 8650 kg de catalizador y presenta una fracción de vacío de lecho de 0.98.

El reactor de síntesis de metanol emplea el catalizador MK-151 FENCE™ desarrollado por Haldor Topsoe, como fue utilizado en el estudio de viabilidad técnico económica realizado por Nyári (2018). Este catalizador es caracterizado por un diámetro de 6 mm y una fracción de vacío de lecho de 0.98. Esta simulación emplea la misma fracción de vacío de lecho, consistente con An et al. (2009), quien analizó catalizadores fibrosos soportados con Cu/Zn/Al/Zr. Este valor de fracción de vacío de lecho refleja el vacío típico observado en los reactores de lecho empacado que utilizan este tipo de catalizador estructurado, donde solo el 2% del volumen del reactor está ocupado por el material catalítico activo (Kiss et al., 2016).

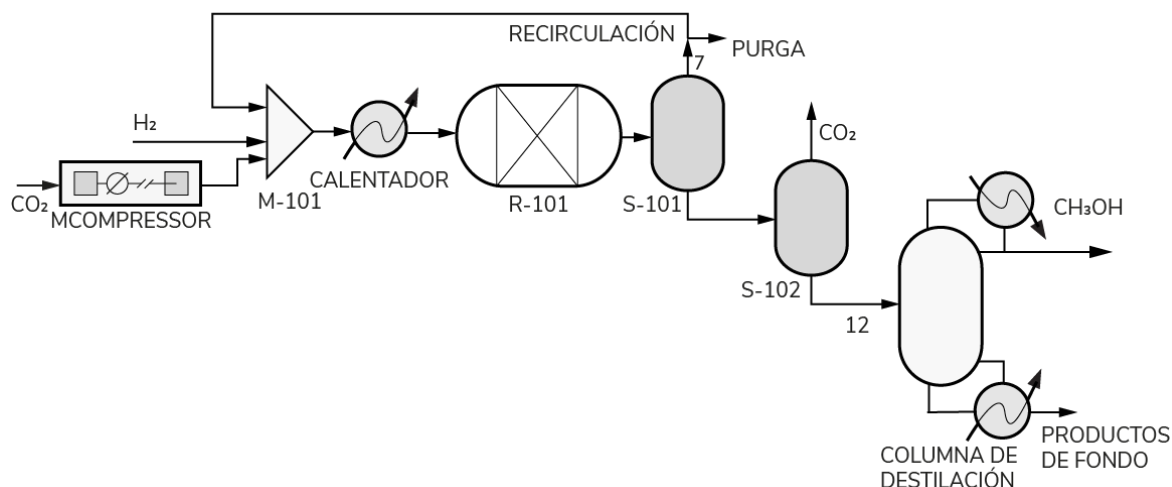


Figura 8. Diagrama Esquemático del Proceso de Síntesis de Metanol.

La corriente de CO₂ capturado pasa a través de un tren de compresión, modelado con el bloque MCOMPRESSOR de 4 etapas y una presión de descarga de 49 bar, con el objetivo de alcanzar las condiciones operativas requeridas por el reactor de síntesis de metanol. El CO₂ entra al proceso a 32 °C y 1 bar, y posteriormente se comprime a 49 bar. Simultáneamente, se suministra hidrógeno del electrolizador a 62 °C y 50 bar. Estas corrientes se mezclan en M-101 y se calientan a 250 °C antes de entrar en el reactor a 50 bar y 250 °C.

Los productos del reactor se enfrían a 30 °C en el intercambiador de calor E-102 (ver **Figura H** del **Apéndice A**) y se separan en un separador flash (S-101), que opera a 30°C y 44 atm, en dos corrientes: una corriente líquida que contiene metanol y una corriente gaseosa de componentes que no reaccionaron (7) y que serán recirculados. El líquido rico

en metanol se expande aún más a 1 bar en un segundo separador flash (S-102), que opera a 30 °C y 1 atm, para eliminar el CO₂ y otros subproductos, simplificando así el proceso de destilación. La corriente resultante (12) se calienta a 86.6 °C en el calentador E-104 y se alimenta a una columna de destilación (S-104), donde se recupera metanol (CH₃OH) con una pureza del 99 % en la parte superior (ver **Figura H del Apéndice A**). La columna S-104 fue modelada como una DSTW que emplea cálculos con métodos cortos de diseño de columnas de destilación; la columna está especificada con un radio de reflujo de -1.33 y presión de 14.7 psia en el condensador y 24.7 psia en el *reboiler*.

4.1.5.1 Modelo Cinético

El modelo cinético implementado en Aspen Plus se basa en el modelo de Langmuir–Hinshelwood-Hougen-Watson, propuesto por Kiss et al. (2016). Los parámetros cinéticos, incluyendo las constantes de adsorción, los exponentes de concentración, y las expresiones de potencial o fuerza impulsora, fueron extraídas de las Tablas 1, 3 y 4 del mismo estudio de referencia.

En Aspen Plus, para las reacciones controladas por la velocidad de reacción, la expresión de velocidad se escribe de la siguiente manera:

$$\gamma = \frac{(\text{Factor cinético})(\text{Expresión de la fuerza impulsora})}{(\text{Expresión de adsorción})} \quad (14)$$

Donde:

Factor Cinético = $kT^n \exp^{-E_a/RT}$, si T_0 no está especificado.

Expresión de la fuerza impulsora = $k_1 \left(\prod C_j^{v_i} \right) - k_2 \left(\prod C_j^{v_i} \right)$

Expresión de adsorción = $\left\{ \sum k_i \left(\prod C_j^{v_i} \right) \right\}^m$

4.1.5.2 Factor Cinético

Los parámetros del factor pre-exponencial (k), el exponente de temperatura (n), y la energía de activación (E) para la expresión cinética están enlistados en la **Tabla 1**.

Tabla 1. Resumen del factor cinético para las reacciones 1, 2 y 3. Adaptado de Kiss et al. (2016).

Reacción	k	n	Ea [J/mol K]
1	2,625.20	0	74,175.81
2	2,661.83	0	132,995.00
3	3,035.71	0	95,299.45

4.1.5.3 Expresiones de fuerza impulsora y de adsorción

Para los términos de concentración en las expresiones de fuerza impulsora y adsorción, se seleccionó la base de fugacidad. Los exponentes de concentración para reactivos y productos se implementaron en Aspen Plus conforme a las ecuaciones de velocidad 24, 25, y 26 del estudio de Kiss et al. (2016):

$$r_{CH_3OH} = k_A \frac{K_{CO} [f_{CO} f_{H_2}^{3/2} - f_{CH_3OH} / (K_A \sqrt{f_{H_2}})]}{(1 + K_{CO} f_{CO} + K_{CO_2} f_{CO_2}) [\sqrt{f_{H_2}} + (K_{H_2O} / \sqrt{K_H}) f_{H_2O}]} \quad (15)$$

$$r_{CO} = r_{H_2O} = k_B \frac{K_{CO_2} [f_{CO_2} f_{H_2} - f_{H_2O} f_{CO} / K_B]}{(1 + K_{CO} f_{CO} + K_{CO_2} f_{CO_2}) [\sqrt{f_{H_2}} + (K_{H_2O} / \sqrt{K_H}) f_{H_2O}]} \quad (16)$$

$$r_{CH_3OH} = r_{H_2O} = k_C \frac{K_{CO_2} [f_{CO_2} f_{H_2}^{3/2} - f_{H_2O} f_{CH_3OH} / (f_{H_2}^{3/2} K_C)]}{(1 + K_{CO} f_{CO} + K_{CO_2} f_{CO_2}) [\sqrt{f_{H_2}} + (K_{H_2O} / \sqrt{K_H}) f_{H_2O}]} \quad (17)$$

Los coeficientes A y B para la constante de fuerza impulsora, resumidos en la **Tabla 2**, fueron obtenidos de la Tabla 3 en Kiss et al. (2016).

Tabla 2. Coeficientes para la constante de fuerza impulsora en el modelo cinético de Aspen Plus.

	k1		k2	
	Reacción A	B	A	B
1	-23.200	14 225	28.895	2 385
2	-22.480	9 777	-28.120	15 062
3	-22.480	9 777	23.974	3 222

En la expresión de adsorción implementada en Aspen Plus, los exponentes de concentración forman parte del término de adsorción en la ecuación de velocidad, y son iguales para las tres reacciones. Kiss et al. (2016) formuló dicha expresión en Aspen Plus de la siguiente manera:

$$(1 + K_{CO} f_{CO} + K_{CO_2} f_{CO_2}) \left[\sqrt{f_{H_2}} + (K_{H_2O} / \sqrt{K_H}) f_{H_2O} \right] \\ = \sqrt{f_{H_2}} + \frac{K_{H_2O}}{\sqrt{K_H}} f_{H_2O} + K_{CO} f_{CO} \sqrt{f_{H_2}} + \frac{K_{CO} K_{H_2O}}{\sqrt{K_H}} f_{CO} f_{H_2O} + K_{CO_2} f_{CO_2} \sqrt{f_{H_2}} + \frac{K_{CO_2} K_{H_2O}}{\sqrt{K_H}} f_{CO_2} f_{H_2O} \quad (18)$$

Las constantes de adsorción utilizadas se presentan en la **Tabla 3**, adaptadas de la Tabla 4 del mismo estudio.

Tabla 3. Constantes de adsorción adaptadas empleadas en el modelo cinético de Aspen Plus.

	Término A	B
1	0	0
2	-26.1568	13 842
3	-23.2006	14 225
4	-49.3574	28 067
5	-22.4827	9 777
6	-48.6395	23 619

4.1.6 Síntesis de DME

La simulación del proceso de producción de DME en Aspen Plus (**Figura 9**) se modeló a partir de las expresiones cinéticas investigadas por Bercic y Levec (1992) que investigaron la deshidratación catalítica de metanol sobre $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

La reacción principal (**Ecuación 19**) sigue el mecanismo cinético Langmuir-Hinshelwood, que describe cómo dos moléculas se adsorben en la superficie del catalizador y reaccionan para formar un producto. La síntesis de DME se produce mediante la reacción de equilibrio del metanol, que produce DME y agua:

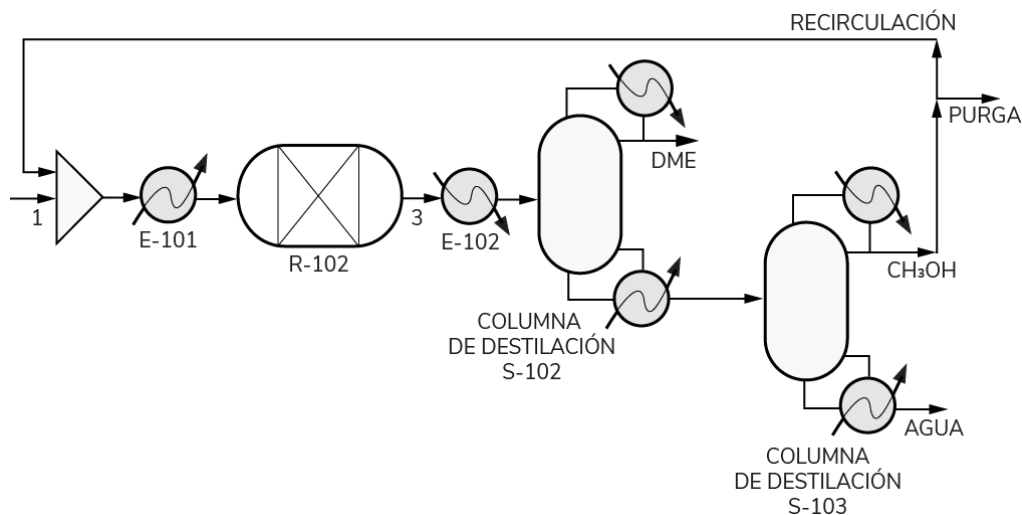
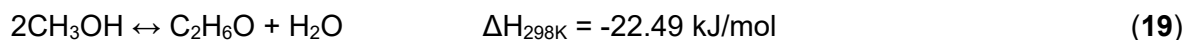


Figura 9. Diagrama de Flujo del Proceso de Síntesis de DME.

Este proceso se lleva a cabo en un reactor de flujo pistón (R-102) de 14.5 metros de longitud y 400 tubos de 2.9 metros de diámetro cada uno, y opera a una temperatura especificada de 290 °C y presión de 1.36 bar. El reactor contiene 50 toneladas de

catalizador, con una fracción de vacíos de lecho de 0.4 (Bercic y Levec, 1992). El reactor fue diseñado basándose en la carga del catalizador presente en el reactor y considerando pellets de $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ de 3 mm de diámetro.

El metanol como materia prima (1) entra en el proceso a 53 °C y 1 atm y se precalienta a 290 °C en el calentador E-101 antes de entrar en el reactor. El efluente del reactor se enfría en E-102 hasta 60 °C y se separa en la columna de destilación S-102, modelada con un bloque DSTW y un radio de reflujo de -1.33, donde se recupera el DME con 99% de pureza en la corriente de vapor. La presión del condensador de la columna S-102 es de 14.7 atm y la presión del *reboiler* es de 24.7 psia. La corriente líquida que sale de la columna S-102 se dirige a una segunda columna DSTW (S-103) para separar el metanol no reaccionado con 99% de pureza, y es reciclado al proceso. La presión del condensador de la columna S-103 es de 14.7 atm y la presión del *reboiler* es de 24.7 psia.

4.1.6.1 Cinética de la Síntesis de DME

El modelo implementado en Aspen Plus se especificó como una reacción cinética del tipo Langmuir–Hinshelwood-Hougen-Watson generalizado. El factor pre-exponencial (k), el exponente de temperatura (n), y la energía de activación para el modelo cinético se presentan en la **Tabla 4**.

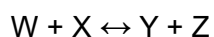
Tabla 4. Resumen de los factores cinéticos para la reacción 1 (Bercic y Levec, 1993).

Reacción	k	n	Ea [J/mol K]
1	5.35×10^{13}	0	17 280

Para la reacción, se seleccionó el peso del catalizador como base para los términos de concentración en la expresión de fuerza impulsora. Los exponentes de concentración para los reactivos y productos se implementaron en Aspen Plus conforme a la ecuación de velocidad de Bercic y Levec (1993).

$$r_M = k_B \frac{K_M^2 (C_M^2 - C_W C_E / K)}{(1 + 2\sqrt{K_M C_M + K_W C_W})^4} \quad (20)$$

Los coeficientes A y B para la constante de fuerza impulsora se calcularon con base en dicha expresión, considerando una reacción genérica del tipo:



$$rate = \frac{k \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \{K_f [W][X] - K_b [Y][Z]\}}{Adsorption\ expression} \quad (21)$$

4.2 Diseño del Análisis de Sensibilidad y Recolección de Datos

La eficiencia de un modelo de aprendizaje automático depende directamente de la calidad y de la cantidad de datos utilizados para su entrenamiento. Por ello, la generación del conjunto de datos para la optimización del sistema se llevó a cabo mediante simulaciones de procesos en Aspen Plus, empleando el módulo de Análisis de Sensibilidad de la Herramienta de Análisis de Modelos para cada uno de los modelos desarrollados.

Se realizaron análisis de sensibilidad enfocados en tres aspectos clave: el rendimiento del proceso, el requerimiento energético y los costos económicos asociados. Cada análisis evaluó el impacto de las variables de operación seleccionadas en cada una de las plantas que conforman la producción integrada de H₂ y DME, y asegurando que todas las condiciones evaluadas permanecieran dentro de los rangos de operación viables.

La identificación de las variables más influyentes permitió reducir la dimensionalidad del sistema, al descartar aquellas con impacto despreciable o con comportamiento redundante o invariable, lo que permitió simplificar el análisis posterior.

Cada entrada fue modificada de forma sistemática mediante un análisis exploratorio preliminar dentro de su rango de operación factible, con el objetivo de evaluar su efecto sobre las variables clave del proceso. Este procedimiento evidenció correlaciones significativas y relaciones de compromiso entre variables.

Cabe destacar que el número de conjuntos de datos refleja únicamente las simulaciones que convergieron satisfactoriamente. La **Tabla 5** resume las variables seleccionadas y sus respectivos límites de operación.

4.2.1 Análisis de Sensibilidad Local

Para evaluar la influencia relativa de cada variable de entrada sobre las salidas del modelo, se realizó un análisis de sensibilidad local utilizando el método de *One-At-a-Time* (OAT), según lo descrito por Campolongo et al., (2000). Este enfoque consiste en calcular la derivada parcial de la salida del modelo respecto a cada variable de entrada, escalada por su valor nominal correspondiente:

$$S_j = \frac{x_{0j}}{Y_0} \cdot \frac{\partial Y}{\partial X_j} \quad (22)$$

Donde x_{0j} es el valor nominal de la variable de entrada, Y_0 es la salida nominal, y $\frac{\partial Y}{\partial X_j}$ representa la derivada local de la salida respecto a la entrada. Este índice adimensional permite interpretar el efecto porcentual relativo que tiene un cambio unitario en la entrada sobre la salida, bajo el supuesto de una relación lineal.

Tabla 5. Parámetros de Sensibilidad Seleccionados y Límites Viables de Operación para los Análisis de Sensibilidad.

Proceso	Bloque/Corriente	Parámetro	Unidades	Límite Inferior	Límite Superior
Desalinización	Corriente SEAWATER	Flujo Másico	kg/h	400,000.00	600,000.00
	Interc. de Calor H-101	Temperatura	°C	35.00	50.00
	Interc. de Calor H-102	Temperatura	°C	30.00	50.00
	Interc. de Calor H-103	Temperatura	°C	30.00	50.00
	Evaporador E-101	Temperatura	°C	30.00	50.30
	Evaporador E-102	Temperatura	°C	30.00	47.20
	Evaporador E-103	Temperatura	°C	30.00	45.00
Electrólisis Alcalina	Stack	Corriente Total	Ampere	1,200.00	50,000.00
	Corriente S7	Flujo Másico	kg/h	200,000.00	650,000.00
	Corriente H2O-IN	Flujo Másico	kg/h	30,000.00	50,000.00
Cogeneración	Corriente NATGAS	Flujo Másico	kg/h	25,000.00	40,000.00
	Corriente NATGAS	Presión	bar	15.00	23.00
	Tubina E-101	Presión de Descarga	bar	6.00	10.00
	Tubina E-102	Presión de Descarga	bar	1.10	3.00
	Tubina E-103	Presión de Descarga	bar	19.00	29.00
	Tubina E-104	Presión de Descarga	bar	4.20	6.00
	Tubina E-105	Presión de Descarga	bar	0.50	1.50
Captura de Carbono	Corriente FLUEGAS	Flujo Másico	kg/h	225,000	278,607
	Corriente OUTMASS	Flujo Másico	kg/h	22,500	27,500
	Stripper	Presión	bar	0.80	1.30
	MAKEUP	Frac. Másica MEA	-	0.10	0.35
Síntesis de Metanol	Reactor R-101	Temperatura	°C	166.85	349.85
	Reactor R-101	Presión	bar	40.00	100.00
	Corriente 9	Flujo Másico	kg/h	1,000.00	2,200
	Corriente H2	Flujo Másico	kg/h	2,000	4,100
	Corriente CO ₂	Flujo Másico	kg/h	15,400	21,400
Síntesis de DME	Reactor R-101	Temperatura	°C	250.00	360.00
	Corriente 13	Flujo Másico	kg/h	100	300
	Corriente 1	Flujo Másico	kg/h	2,500	9,500

A continuación, se muestran las conclusiones obtenidas para cada proceso:

4.2.1.1 Cogeneración

La **Tabla 6** resume los índices de sensibilidad calculados para variables manipuladas seleccionadas. Estos índices están codificados por colores según su influencia sobre los resultados del modelo: verde indica alta influencia, amarillo influencia moderada y naranja impacto bajo o nulo. El análisis consideró nueve variables manipuladas y su efecto

sobre cuatro métricas clave: generación neta de potencia (POWEROUT), flujo de gases de combustión (FLUEGAS), consumo eléctrico (kW) y costo anual total (TAC).

Las variables manipuladas incluyeron: condiciones de alimentación de gas natural (flujo másico, temperatura y presión), flujo másico de aire comprimido y caídas de presión a través de las turbinas E-101 a E-105.

El análisis reveló que el flujo másico de gas natural y el de aire comprimido fueron las variables más influyentes, afectando significativamente la generación de energía y los costos operativos. No obstante, a pesar del elevado índice numérico para el flujo de aire, su valor permaneció constante en todas las simulaciones, por lo que fue descartada por su invarianza operativa.

La potencia generada por las turbinas mostró sensibilidad a la diferencia de presión entre entrada y salida, como se sabe a partir de principios termodinámicos. Una mayor caída de presión permite extraer un mayor trabajo útil del fluido.

En contraste, variables como la presión y temperatura del gas natural, así como algunas presiones de salida de turbinas, mostraron baja sensibilidad. Las variables más influyentes fueron: flujo másico de gas natural, temperatura de alimentación del gas natural y presiones de descarga de las turbinas E-101 a E-105. El análisis generó 866 conjuntos de datos.

Tabla 6. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad del proceso de cogeneración.

	Variables de Respuesta Observadas			
	POWEROUT	FLUEGAS	kWh	TAC
Flujo másico NATGAS	4565.402	-448.183	-5339888.775	-241.027
Temperatura NATGAS	0.019	-0.002	-20.356	-0.001
Presión NATGAS	0.003	0.000	-2.223	0.009
Flujo másico AIR	8670439.572	-948344.761	-9481053427.367	-422613.212
Presión E-101	0.140	0.000	-0.373	0.048
Presión E-102	-0.665	0.000	-0.018	-0.215
Presión E-103	-0.001	0.000	-3.542	0.000
Presión E-104	-0.004	0.000	-0.166	0.000
Presión E-105	-0.032	0.000	-0.004	-0.011

Nota: los valores negativos de sensibilidad indican relaciones inversas.

4.2.1.2 Desalinización de Agua de Mar por Evaporación de Múltiples Efectos

Las variables de respuesta analizadas incluyeron: tasa de producción de agua dulce (SEAWATER), consumo energético (kW) y TAC. Las variables manipuladas fueron: flujo

másico de entrada de agua de mar, temperaturas de los intercambiadores de calor H-101 a H-104, y temperaturas de los evaporadores E-101 a E-104.

El flujo másico de agua de mar fue la variable con mayor impacto sobre todas las métricas. Un aumento en este flujo mejora la capacidad térmica del sistema, incrementando la producción de agua, pero también eleva el consumo eléctrico por mayor requerimiento de bombeo, y, en consecuencia, el TAC.

Entre las variables térmicas, la temperatura del intercambiador H-101 mostró una influencia destacada. Las temperaturas de H-102, H-103 y de los evaporadores E-101 a E-103 tuvieron sensibilidad moderada, en tanto se conforma el perfil térmico en cascada del sistema. En cambio, la temperatura del efecto final (E-104) y del intercambiador H-104 presentaron un impacto despreciable (ver **Tabla 7**).

Con base en estos hallazgos, se seleccionaron siete variables para su optimización: flujo másico de agua de mar, temperaturas de H-101 a H-103 y de los evaporadores E-101 a E-103. El análisis generó 782 conjuntos de datos.

Tabla 7. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad del proceso de desalinización.

		Variables de Respuesta Observadas		
		FRESH WATER	kW	TAC
Variables Manipuladas	Flujo másico SEAWATER	-5507361.067	-1910430354.920	-72731.709
	Temperatura H-101	-0.682	-20.877	-0.716
	Temperatura H-102	-0.062	-13.390	-0.022
	Temperatura H-103	-0.054	-13.390	-0.084
	Temperatura H-104	-0.041	-12.386	-0.028
	Temperatura E-101	-0.118	-22.343	-0.054
	Temperatura E-102	-0.070	-13.202	-0.009
	Temperatura E-103	-0.058	-12.995	0.067
	Temperatura E-104	-0.078	-21.654	-0.019

4.2.1.3 Electrólisis Alcalina de Agua

Se analizaron cuatro variables de salida: flujo másico de hidrógeno puro producido (PURE H₂), eficiencia del sistema basada en el poder calorífico superior (Higher Heating Value, HHV), consumo eléctrico (kW) y TAC. La eficiencia basada en HHV asume una recuperación total del calor, incluyendo el calor latente de condensación del vapor de agua.

Las variables manipuladas fueron la densidad de la corriente a la celda, flujo másico de agua de alimentación (H₂O IN), flujo másico de recirculación (S7), las temperaturas de los calentadores B2 y B14 que elevan la temperatura de las corrientes recirculadas a la celda electroquímica y el número de celdas.

Los resultados mostraron el comportamiento electroquímico típico de una celda de electrólisis: a mayor densidad de corriente, se observa un aumento significativo en el voltaje de celda y una disminución en la eficiencia. Este comportamiento se atribuye a pérdidas térmicas y sobrepotenciales (overpotentials), asociadas a resistencias óhmicas y limitaciones de transporte de masa a altas densidades de corriente, lo que exige mayor voltaje para mantener las reacciones y reduce la eficiencia.

De las seis variables manipuladas, tres tuvieron mayor impacto: la corriente del stack, que afecta directamente la producción de hidrógeno y las pérdidas térmicas; el flujo másico de agua de alimentación (H₂O IN), que determina la disponibilidad de reactivos; y el flujo másico de la corriente recirculada (S7), que influye en el balance global de masa (ver **Tabla 8**).

En contraste, las temperaturas de los calentadores B2 y B14, y el número de celdas del stack, generaron cambios menores, con índices de sensibilidad bajos. El análisis generó 818 conjuntos de datos.

Tabla 8. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la electrólisis alcalina.

	Variables de Respuesta Observadas			
	PURE H ₂	HHV	kW	TAC
Densidad de Corriente	-138966.10	-35143454.41	-519066.23	-21.39
Flujo másico H ₂ O IN	-28464.83	-15995772.91	-205742.70	-8.64
Flujo másico S7	-196696856.00	-114545641949.37	-1421880227.50	-148422.59
Temperatura B2	-7.42	-3766.31	-53.63	-0.37
Temperatura B14	-7.23	-3748.66	-52.28	-0.34
Número de celdas	-226.11	-54727.32	-789.56	-226.11

4.2.1.4 Síntesis de Metanol

El análisis exploratorio previo demostró que se logra un mayor rendimiento en la producción a temperaturas bajas y presión alta, debido al carácter exotérmico de las reacciones de síntesis. Además, se observó que aumentar la carga del catalizador no produce cambios significativos en la conversión, debido a que el sistema opera cerca del equilibrio químico bajo las condiciones observadas.

Se analizaron como variables de respuesta el caudal de metanol producido, el caudal de CO₂ no utilizado, el costo anual total y el consumo total de energía. Se evaluaron siete variables en el análisis de sensibilidad local del proceso de hidrogenación de CO₂: temperatura y presión del reactor, flujo másico de la corriente PURGE, flujo másico de H₂, flujo másico de CO₂, temperatura y presión de la corriente de H₂.

Las variables del reactor fueron seleccionadas siguiendo el enfoque de León et al. (2024), y los parámetros de la columna de destilación se definieron para obtener metanol con una pureza del 99 %.

Las condiciones de la corriente de CO₂ en la entrada no se incluyeron, ya que están determinadas por el diseño del tren de compresión. Si bien estos parámetros pueden influir en el consumo energético y los costos operativos del sistema, sus valores no son libremente ajustables, sino que están definidos por restricciones de diseño para asegurar una integración adecuada del sistema. Por ello, su inclusión no aportaría información adicional útil para identificar las variables más influyentes del proceso.

Este análisis permitió generar 1025 conjuntos de datos. Los resultados se resumen en la **Tabla 9**. Las cinco variables seleccionadas fueron: flujo másico de CO₂, flujo másico de H₂, flujo másico de PURGE, y temperatura y presión del reactor.

Tabla 9. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la síntesis de metanol.

		Variables de Respuesta Observadas				
		CH ₃ OH	CO ₂ RICH	CO ₂ PURGE	kW	TAC
Variables Manipuladas	Temperatura Reactor	-1.78	-39.34	-0.32	-3.43	-0.04
	Presión Reactor	0.53	-2.99	-0.18	-0.24	0.05
	Flujo Másico PURGE	-3341.37	-137143.82	-1395.30	-12622.51	-8.65
	Flujo Másico H ₂	-14059.17	-514217.26	-4902.14	-47676.04	-33.03
	Flujo Másico CO ₂	-607158.70	-28740684.28	-279220.03	-2449456.47	-1622.24
	Temperatura H ₂	-0.03	-1.34	-0.01	-0.11	0.00
	Presión H ₂	-0.04	-1.76	-0.02	-0.16	0.00

4.2.1.5 Síntesis de DME

Las variables estudiadas incluyeron: temperatura del reactor, flujo másico de la corriente de metanol en la alimentación (1), flujo másico de la corriente de recirculación (13) y temperatura de salida del precalentador E-101. Se analizaron tres variables de salida: flujo másico de DME, consumo energético (kW) y TAC (ver **Tabla 10**).

El análisis reveló que la temperatura del reactor y el flujo de alimentación de metanol fueron las variables dominantes. Aumentar la temperatura del reactor acelera la reacción, aunque temperaturas excesivas pueden desplazar el equilibrio y disminuir el rendimiento de DME, dado su carácter exotérmico. La recirculación mostró un impacto moderado por su efecto en la concentración de reactivos y estabilización térmica. La temperatura de salida del E-101 tuvo una influencia menor.

Se identificaron como las variables más influyentes la temperatura del reactor, flujo másico de CH₃OH (Corriente 1) y flujo de la corriente de recirculación. El análisis generó 1002 conjuntos de datos.

Tabla 10. Resumen de los resultados del análisis de sensibilidad de la síntesis de DME.

		Variables de Respuesta Observadas		
		DME	kW	TAC
Variables Manipuladas	Temperatura Reactor	-4.28	-1463.22	-0.01
	Flujo másico 1	-39075.11	-26041666.67	-701.85
	Flujo másico 13	-113.67	-38226.30	-1.19
	Temperatura E-101	-4.16	-1445.43	-0.03

4.2.1.6 Captura de Carbono

A pesar de las variaciones introducidas mediante el análisis de sensibilidad local (OAT), el flujo másico de CO₂ a la salida de la unidad STRIPPER se mantuvo constante, aproximadamente en 120,150 kg/h en todas las simulaciones. Las variables manipuladas incluyeron: (i) flujo másico de los gases de combustión que ingresan al absorbedor, (ii) caudal de solvente regenerado (Lean Solvent), (iii) fracción másica de monoetanolamina (MEA) en la corriente de reposición, y (iv) temperatura de la corriente de alimentación al stripper. Este análisis generó 625 conjuntos de datos.

4.2.2 Evaluación Económica

Los costos anuales totales (CAT) y el consumo energético se estimaron utilizando Aspen Economic Analyzer (APEA), una herramienta que permite generar evaluaciones tanto conceptuales como detalladas.

Dado que cada evaluación económica requiere una simulación independiente, y considerando que el número de los conjuntos de datos para cada proceso está en el orden de miles, se seleccionó una muestra del 20% de los datos obtenidos en las simulaciones de Aspen Plus para reducir el tiempo de cómputo.

Esta proporción de la muestra fue considerada suficiente debido a la baja complejidad de las relaciones entre las variables del proceso, incluso dentro de un amplio rango de los datos. La selección de las muestras se realizó mediante un muestreo proporcional estratificado, lo que aseguró una representación adecuada y una distribución uniforme en el espacio de diseño.

A partir del subconjunto del 20%, se entrenó un algoritmo de imputación basado en aprendizaje automático para predecir los resultados económicos del resto de las condiciones. De esta manera fue posible extender de manera confiable la evaluación a todo el conjunto de datos, reduciendo el tiempo de cómputo.

4.3 Diseño del Modelo Subrogado con Redes Neuronales Artificiales

4.3.1 Preprocesamiento de datos

Antes de entrenar el modelo se realiza un preprocesamiento de los datos de entrada, que fueron obtenidos con las simulaciones en Aspen Plus, para garantizar la consistencia de los datos y mejorar la precisión del modelo.

Se utilizó la técnica de estandarización por medio de z-score, que escala todos los datos de entrada y salida a una distribución con media cero y desviación estándar uno. Esta técnica facilita la convergencia del modelo durante el entrenamiento. Esto previene que algunas variables dominen sobre otras debido a sus diferentes escalas.

Los datos que previamente preprocesados se dividieron aleatoriamente en subconjuntos, asignando el 80% al conjunto de entrenamiento y el 20 % al conjunto de validación.

4.3.2 Entrenamiento del modelo

Una vez definida la arquitectura inicial, se procedió al entrenamiento del modelo, durante el cual los pesos se ajustaron de forma iterativa por medio del optimizador Adam para minimizar la función de pérdida. Se utilizó el error cuadrático medio (MSE) como función de pérdida, que proporcionó una medida del desempeño del modelo y que guía el proceso de optimización.

4.3.3 Optimización de hiperparámetros

Se empleó optimización bayesiana utilizando la biblioteca Keras-Tuner con un máximo de 200 épocas de entrenamiento y un máximo de 200 iteraciones, para identificar los hiperparámetros óptimos que mejor minimizaron la función de pérdida en la etapa de validación.

El espacio de búsqueda de los hiperparámetros se definió a partir de experimentos preliminares que exploraron diferentes configuraciones mediante prueba y error. Los hiperparámetros del modelo se exploraron dentro de los rangos definidos en la **Tabla 11**, la cual resume tanto los parámetros discretos ajustados, como el número de capas ocultas y neuronas por capa, como los parámetros continuos, ajustados en una escala logarítmica, como la tasa de aprendizaje y la regularización L2.

Para evitar el sobreajuste se incorporó un mecanismo de detención temprana con un criterio de paciencia de 10 épocas, que interrumpe el entrenamiento si el rendimiento

sobre los datos de validación deja de mejorar después de varias iteraciones. También se incluyó la regularización L2 como una de las variables ajustadas.

Tabla 11. Rangos de Búsqueda de los Hiperparámetros en la Optimización Bayesiana Mediante Keras-Tuner.

Hiperparámetro	Escala	Mínimo	Máximo	Paso
Capas ocultas	Entero	1	5	1
Neuronas por capa	Entero	5	50	1
Tasa de aprendizaje	Logarítmica	1e-05	1e-01	-
Regularización L2	Logarítmica	1e-04	1e-01	-

4.3.4 Evaluación de los modelos

La evaluación del rendimiento final con el conjunto de prueba se realizó utilizando métricas estadísticas, como el Error Cuadrático Medio (RMSE), el Error Absoluto Medio (MAE), el Error Porcentual Absoluto Medio (MAPE) y el Coeficiente de Determinación (R^2) (ver **Tabla 13**).

La arquitectura óptima de los modelos de RNA que se desempeñe con el mejor rendimiento fue determinada a partir de la habilidad de los modelos para minimizar la función de pérdida en el conjunto de validación, evitando el sobreajuste.

La **Tabla 12** resume los parámetros que resultaron de la optimización bayesiana y que fueron seleccionados para cada modelo de RNA, los cuales variaron en las diferentes unidades de proceso con diferentes números de capas ocultas, número de neuronas por capa, parámetros de regularización L2.

Cada modelo de RNA fue seleccionado manteniéndolo lo suficientemente preciso para representar el sistema, pero también lo más compacto posible para mantener la eficiencia del proceso de optimización multiobjetivo.

Tabla 12. Hiperparámetros optimizados para cada modelo de RNA.

Unidades de Proceso	Número de capas ocultas	Hiperparámetros Óptimos		
		Número de neuronas por capa	Tasa de aprendizaje	Regularización L2
Síntesis de metanol	2	100-100	0.0018	0.0008
Captura de Carbono	3	40-35-40	0.0052	0.0003
Planta de Cogeneración	2	65-65	0.0031	0.0009
Desalinización	5	10-10-100-10-80	0.0043	0.0001
Síntesis de DME	2	100-10	0.0002	0.0014
Electrólisis Alcalina	2	30-50	0.0076	0.0001

4.4 Optimización Multiobjetivo del Sistema Integral

4.4.1 Planteamiento del Modelo Matemático

Para realizar una optimización multiobjetivo, se estableció el modelo matemático que representa las interacciones entre todas las unidades de proceso mediante RNA. El objetivo de la optimización es equilibrar la productividad, la eficiencia energética y los costos operativos, mientras se minimizan las emisiones y el consumo de recursos.

En el ámbito del aprendizaje automático los modelos predictivos se construyen a partir de conjuntos de datos que permiten definir una función f , que estima las variables de salida a partir de un conjunto dado de entradas. Matemáticamente, esta relación se expresa como $[y_1, y_2, \dots, y_m] = f(x_1, x_2, \dots, x_i)$, donde m representa el número de variables de salida e i el número de variables de entrada en el modelo.

En este contexto, cada unidad del proceso integrado de producción de DME sostenible se modela mediante RNA, formulando ecuaciones que describen las relaciones entre las variables operativas de entrada y los parámetros clave de salida. Estas ecuaciones capturan las interacciones dentro de cada planta y su integración en el esquema de producción general. La **Tabla 5** detalla los parámetros utilizados en la formulación del modelo, lo que garantiza una representación precisa del sistema y proporciona una base sólida para la posterior optimización del rendimiento del proceso. Las ecuaciones que describen el proceso integrado se describen a continuación:

$$\begin{bmatrix} power \\ F_{gas_flue} \\ TAC^{cog} \end{bmatrix} = f^{ANN}(F^{nat_gas}, p^{nat_gas}, P^{E-101}, P^{E-102}, P^{E-103}, P^{E-104}, P^{E-105}) \quad (23)$$

La **Ecuación 23** corresponde a la planta de cogeneración de energía y predice la energía generada ($power$), los gases de combustión emitidos (F_{gas_flue}) y el costo anual total (TAC^{cog}), en función de siete variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{water_des} \\ F^{brine} \\ TAC^{des} \\ ELC^{des} \end{bmatrix} = f^{ANN}(F^{seawater}, T^{H-101}, T^{H-102}, T^{H-103}, T^{E-101}, T^{E-102}, T^{E-103}) \quad (24)$$

La **Ecuación 24** corresponde a la planta de desalinización de agua de mar y predice el caudal de agua desalinizada (F^{water_des}), el caudal de salmuera producida (F^{brine}), el costo anual total (TAC^{des}) y la electricidad consumida (ELC^{des}) en función de siete variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{CO_2} \\ TAC^{CO_2-cap} \\ ELC^{CO_2-cap} \end{bmatrix} = f^{ANN}(F_{gas_flue}, Makeup^{Outmass}, Makeup^{MassFrac}, p_{stripper_column}) \quad (25)$$

La **Ecuación 25** describe la planta de captura de CO₂, modelando el caudal de CO₂ capturado (F^{CO_2}), el costo anual total (TAC^{CO_2-cap}) y el consumo total de electricidad (ELC^{CO_2-cap}) a partir de cuatro variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{H_2} \\ F^{water_elec} \\ F^{O_2} \\ TAC^{elec} \\ ELC^{elec} \end{bmatrix} = f^{ANN}(Stack^{elec}, F^{S7_elec}, F^{water-des}) \quad (26)$$

Por otro lado, la **Ecuación 26** corresponde a la planta de electrólisis alcalina y predice el caudal de hidrógeno producido (F^{H_2}), el caudal de agua desechada/no utilizada (F^{water_elec}), el caudal de O₂ producido (F^{O_2}), el costo anual total (TAC^{elec}) y la electricidad consumida (ELC^{elec}) en función de tres variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{CH_3OH} \\ F^{CO_2-met} \\ TAC^{met} \\ ELC^{met} \end{bmatrix} = f^{ANN}(T^{R-101}, P^{R-101}, F^{S9}, F^{H_2}, F^{CO_2}) \quad (27)$$

La **Ecuación 27** corresponde a la planta de metanol y predice el flujo de metanol producido (F^{CH_3OH}), el flujo de CO₂ descartado/no utilizado (F^{CO_2-met}), el costo anual total (TAC^{met}) y la electricidad consumida (ELC^{met}) en función de cinco variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{dme} \\ F^{CH_3OH^{dme_purge}} \\ TAC^{dme} \\ ELC^{dme} \end{bmatrix} = f^{ANN}(T^{R-101}, F^{S13}, F^{CH_3OH}) \quad (28)$$

Finalmente, la **Ecuación 28** corresponde a la planta de DME y predice el flujo de DME producido (F^{dme}), el flujo de metanol descartado/no utilizado ($F^{CH_3OH^{dme_purge}}$), el costo anual total (TAC^{dme}) y la electricidad consumida (ELC^{dme}) en función de tres variables de entrada.

El consumo total de energía eléctrica ($ELC^{overall}$) del esquema integrado se determina sumando las necesidades energéticas individuales de cada planta del sistema. Este enfoque permite evaluar la demanda global del proceso, considerando la contribución de cada unidad operativa. La expresión matemática correspondiente se presenta a continuación:

$$ELC^{overall} = ELC^{des} + ELC^{capture} + ELC^{elec} + ELC^{met} + ELC^{dme} \quad (29)$$

La **Ecuación 30** representa el balance del suministro de energía, y debe ser igual al consumo total. Si la energía generada por la planta de cogeneración es insuficiente para satisfacer la demanda total del esquema integrado, se pueden utilizar fuentes renovables como la solar y la eólica para complementar el suministro. Con esta consideración se garantiza la estabilidad energética del sistema a la vez que promueve la sostenibilidad. La relación matemática que describe esta compensación se expresa de la siguiente manera:

$$power + power^{renew} = ELC^{overall} \quad (30)$$

El costo anual total ($TAC^{overall}$) del esquema integrado se determina agregando los costos individuales de cada planta del sistema. Este cálculo se expresa matemáticamente como la suma de los costos específicos de cada planta, lo que proporciona una evaluación completa de los costos operativos y de inversión asociados a la producción. La formulación correspondiente se detalla a continuación:

$$TAC^{overall} = TAC^{cog} + TAC^{des} + TAC^{CO_2\text{-capture}} + TAC^{elec} + TAC^{met} + TAC^{dme} \quad (31)$$

El modelo de optimización multiobjetivo está diseñado para encontrar las mejores condiciones de operación que maximicen la producción sostenible de DME, mientras se minimizan los costos anuales totales ($TAC^{overall}$) y el consumo eléctrico global ($ELC^{overall}$).

La función objetivo se define como:

$$O. F. = \{ \max F^{dme}, \min TAC^{overall}, \min ELC^{overall} \} \quad (32)$$

4.4.1.1 Normalización

Para comparar objetivos con diferentes unidades y escalas (kg/h, USD/año y kWh), se aplicó una técnica de normalización Min-Máx, que transforma todos los valores a un mismo rango de 0 a 1. Esto asegura una comparación justa entre las variables y evita que un objetivo domine a los demás debido a su escala numérica. Las **Ecuaciones 33, 34 y 35** fueron utilizadas para este procedimiento:

$$F^{dme_scaled} = \frac{F^{dme} - \min(F^{dme})}{\max(F^{dme}) - \min(F^{dme})} \quad (33)$$

$$TAC^{overall_scaled} = \frac{TAC^{overall} - \min(TAC^{overall})}{\max(TAC^{overall}) - \min(TAC^{overall})} \quad (34)$$

$$ELC^{overall_scaled} = \frac{ELC^{overall} - \min(ELC^{overall})}{\max(ELC^{overall}) - \min(ELC^{overall})} \quad (35)$$

Por ejemplo, la producción de DME sostenible (F^{dme_scaled}) se ajusta en función de los valores mínimo ($X_{\min}$) y máximo ($X_{\max}$) obtenidos en las soluciones, lo que garantiza una evaluación justa de los objetivos del modelo.

4.4.1.2 Índice de Eficiencia Multiobjetivo

Mientras los enfoques metaheurístico y bayesiano permiten realizar una optimización multiobjetivo donde se maximiza la producción de DME mientras se minimiza el consumo energético y el costo anual total, en el enfoque determinista se minimiza el IME como una sola función objetivo ya que no permite realizar directamente una optimización multiobjetivo.

Como una métrica de evaluación posterior para identificar la mejor solución entre el conjunto de alternativas optimizadas, se calculó un indicador denominado Índice de Eficiencia Multiobjetivo (IME) que permite representar los tres objetivos de la optimización. El IME se obtiene sumando los valores normalizados de las variables objetivo, según la siguiente fórmula matemática:

$$IME = (1 - F^{dme_scaled}) + TAC^{overall_scaled} + ELEC^{overall_scaled} \quad (36)$$

Donde el término $(1 - F^{dme_scaled})$ introduce una penalización para las soluciones con baja producción de DME sostenible, mientras que $TAC^{overall_scaled}$ representa los costos anuales totales en su escala normalizada, y $ELC^{overall_scaled}$ denota el consumo total de energía en su forma normalizada.

Un IME más bajo indica una mejor solución global, ya que refleja un equilibrio entre los tres objetivos del sistema.

4.4.2 Enfoques de Optimización Matemática Utilizados

Para determinar la mejor solución dentro del esquema integrado de producción de H₂ y DME, se implementaron tres estrategias de optimización: metaheurística, determinista y bayesiana.

4.4.2.1 Optimización metaheurística

Se utilizó el algoritmo NSGA-III (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm III), un enfoque evolutivo diseñado para resolver problemas de optimización multiobjetivo (Deb y Jain, 2014). Este método imita los procesos de evolución natural mediante operadores como cruce, mutación y selección, permitiendo mejorar progresivamente un conjunto inicial de soluciones. Su capacidad para manejar objetivos en conflicto permite explorar múltiples alternativas balanceadas.

4.4.2.2 Optimización bayesiana

Se empleó el algoritmo MOTPE (*Multi-objective Tree-structured Parzen Estimator*), que construye modelos sustitutos probabilísticos internos como estructuras jerárquicas tipo

árbol para explorar eficientemente el espacio de búsqueda (Ozaki et al., 2020) (Watanabe, 2023).

A diferencia de los métodos tradicionales, MOTPE utiliza distribuciones de probabilidad para identificar y priorizar las regiones más prometedoras dentro del conjunto de soluciones, reduciendo significativamente la cantidad de evaluaciones necesarias para alcanzar configuraciones óptimas.

4.4.2.3 Optimización determinista

Se utilizó la herramienta OMLT (Optimization and Machine Learning Toolkit), que permite integrar modelos de aprendizaje automático (Ceccon et al., 2022), como las RNA en problemas de optimización determinista (López-Flores et al., 2024). Este enfoque se basa en la formulación de modelos matemáticos precisos que describen el comportamiento del sistema, utilizando RNA para capturar relaciones complejas entre variables de entrada y salida. La optimización determinista es especialmente útil cuando se requiere alta confiabilidad, ya que garantiza el cumplimiento estricto de las restricciones y objetivos específicos del sistema.

CAPÍTULO 5. Discusión de Resultados

5.1 Redes Neuronales Artificiales

Como se muestra en la **Tabla 13**, la mayoría de los modelos mostraron una precisión predictiva excepcional, en particular en la síntesis de metanol, la síntesis de DME y la cogeneración, alcanzando valores de R^2 superiores a 0.99. Esto confirma su eficacia para capturar relaciones no lineales dentro del sistema. Sin embargo, se observaron valores de MAPE más altos en ciertas variables, en particular en las unidades de captura de carbono y desalinización, lo que sugiere dificultades para predecir las fluctuaciones del consumo energético.

Los modelos de RNA para la síntesis de metanol y DME mostraron un rendimiento predictivo muy bueno, con errores mínimos en todos los conjuntos de datos. Los caudales de metanol (F^{CH_3OH}) y DME (F^{dme}) previstos coincidieron estrechamente con los valores reales, como se muestra en los diagramas de dispersión (ver **Figura 10**). Sin embargo, los valores de MAPE más altos para el caudal de metanol indican una posible dispersión de los datos o variaciones del proceso no modeladas. Si bien el modelo de captura de CO_2 predijo con precisión el caudal de CO_2 capturado ($R^2 > 0.98$), las predicciones de consumo de energía presentaron valores de MAPE más altos en el conjunto de prueba. Esta discrepancia, evidente en la **Figura 10**, sugiere una variabilidad en la demanda de energía que podría mitigarse incorporando restricciones operativas adicionales en los modelos futuros. El modelo de la planta de cogeneración demostró una precisión predictiva casi perfecta ($R^2 \approx 0.999$), lo que confirma su fiabilidad para el pronóstico de la generación de energía.

Los diagramas de dispersión en la **Figura 10** que comparan los valores reales con los predichos, validan aún más la robustez de los modelos RNA. La estrecha alineación de los puntos de datos con la línea de predicción ideal confirma una desviación mínima para la mayoría de las variables del proceso. No obstante, las discrepancias observadas en las unidades de captura de CO_2 y de desalinización indican áreas de mejora, posiblemente mediante la integración de técnicas de modelado híbrido. Por lo tanto, los modelos RNA predicen con éxito las variables clave en cada respectivo proceso en la producción integrada de DME. Si bien se observaron pequeñas discrepancias en las predicciones del consumo energético, el rendimiento general valida su aplicabilidad en la optimización de procesos industriales.

Tabla 13. Métricas de Estadísticas para la Evaluación de los Modelos de Redes Neuronales Artificiales en el Sistema Integrado de Producción de DME.

Variables	Conjunto de entrenamiento				Conjunto de prueba			
	RMSE	MAE	MAPE	R ²	RMSE	MAE	MAPE	R ²
Síntesis de metanol								
F^{CH_3OH}	0.027	0.022	0.104	0.999	0.030	0.023	0.110	0.999
F^{CO_2-met}	0.022	0.018	0.095	0.999	0.024	0.019	0.096	0.999
TAC^{met}	0.169	0.112	0.791	0.971	0.211	0.133	1.426	0.954
ELC^{met}	0.052	0.028	0.043	0.997	0.078	0.036	0.050	0.993
Captura de Carbono								
F^{CO_2}	0.089	0.068	0.152	0.990	0.103	0.079	0.680	0.988
TAC^{CO_2-cap}	0.179	0.104	0.175	0.967	0.200	0.115	0.181	0.956
ELC^{CO_2-cap}	0.275	0.152	0.431	0.925	0.245	0.148	0.351	0.936
Cogeneración de energía								
$power$	0.010	0.008	0.010	0.999	0.010	0.008	0.010	0.999
TAC^{cog}	0.025	0.017	0.018	0.999	0.030	0.019	0.020	0.999
Desalinización MED								
$F^{water-des}$	0.066	0.052	0.083	0.995	0.064	0.052	0.085	0.995
F^{brine}	0.044	0.033	0.394	0.998	0.043	0.033	0.162	0.998
TAC^{des}	0.288	0.179	0.465	0.917	0.349	0.207	0.449	0.895
ELC^{des}	0.062	0.051	0.271	0.996	0.059	0.048	0.265	0.996
Síntesis de DME								
F^{dme}	0.009	0.007	0.014	0.999	0.008	0.007	0.017	0.999
$F^{CH_3OH^{dme-purge}}$	0.010	0.008	0.040	0.999	0.011	0.009	0.026	0.999
TAC^{dme}	0.054	0.038	0.254	0.996	0.129	0.051	0.122	0.983
Electrólisis alcalina								
F^{H_2}	0.024	0.019	0.059	0.999	0.025	0.021	0.057	0.999
$F^{water-elec}$	0.024	0.019	0.061	0.999	0.024	0.020	0.057	0.999
F^{O_2}	0.024	0.020	0.062	0.999	0.025	0.021	0.060	0.999
TAC^{elec}	0.216	0.163	0.910	0.957	0.206	0.158	0.812	0.960
ELC^{elec}	0.026	0.022	0.133	0.999	0.027	0.023	0.091	0.999

De forma similar, el modelo de la planta de desalinización estimó eficazmente los caudales de agua desalinizada y salmuera. Sin embargo, algunas variables de salida mostraron valores de MAPE elevados, posiblemente debido a inestabilidades del proceso. El modelo RNA para la electrólisis alcalina predijo de forma consistente las tasas de producción de hidrógeno y oxígeno con valores de R² superiores a 0.99. Sin embargo, la variabilidad observada en las predicciones del consumo energético sugiere que las fluctuaciones en la demanda energética deben analizarse con mayor profundidad mediante estrategias refinadas de selección de características.

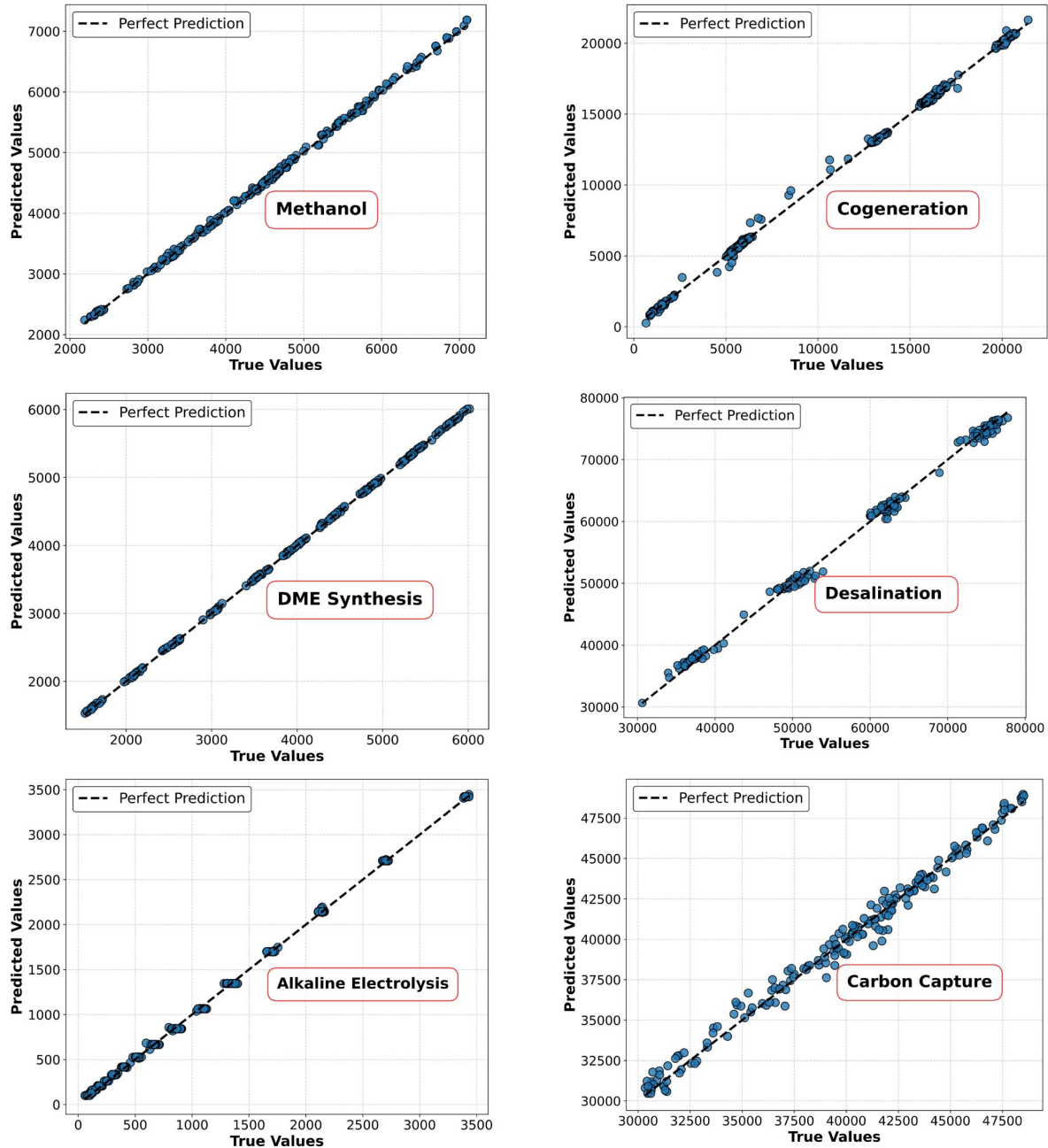


Figura 10. Diagramas de Dispersión de Valores Reales Frente a los Valores Predichos de las Variables Clave para los Conjuntos de Prueba de Cada Proceso.

5.2 Optimización Multiobjetivo del Sistema Integrado

Los algoritmos de optimización multiobjetivo permitieron identificar las condiciones óptimas de operación en el sistema integrado. La **Figura 11** presenta las soluciones obtenidas mediante enfoques metaheurísticos, bayesianos y deterministas, mostrando la

capacidad de cada una de las estrategias para aproximarse a la frontera de Pareto, reflejando la eficiencia de cada algoritmo en el espacio de soluciones.

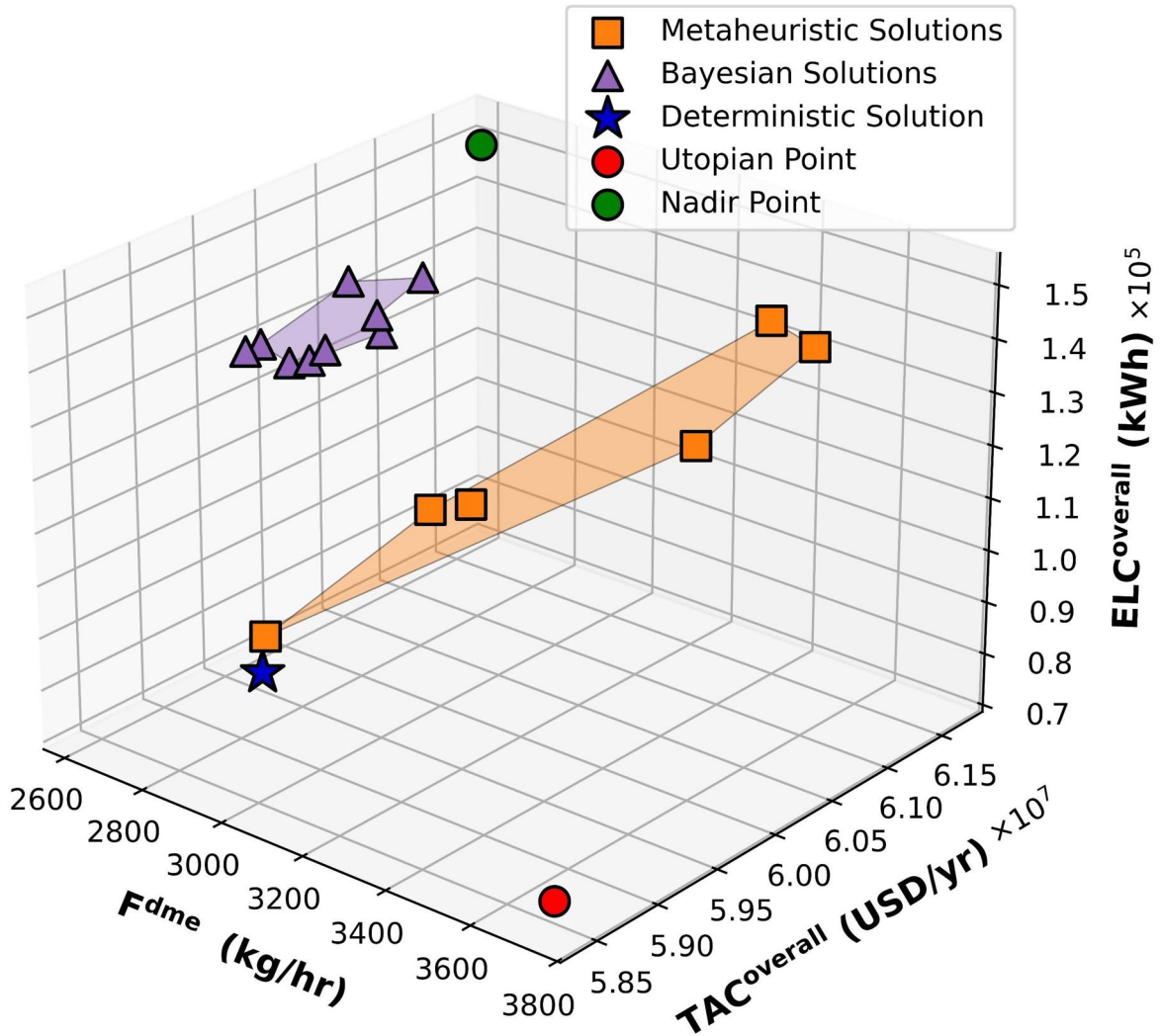


Figura 11. Representación Tridimensional de la Frontera de Pareto que Muestra los Tres Objetivos en Conflicto para las Estrategias de Optimización Multiobjetivo Metaheurística, Bayesiana y Determinista.

La frontera de Pareto tridimensional que ilustra los compromisos entre tres objetivos en conflicto: la producción de DME (F^{dme} , kg/h), el costo total anualizado ($TAC^{overall}$, USD/año) y el consumo energético total ($ELC^{overall}$, kWh). Como es habitual en la optimización multiobjetivo, no existe una solución única que optimice simultáneamente todos los objetivos, lo que da lugar a un conjunto de soluciones no dominadas, donde la mejora de un objetivo implica sacrificios en los demás.

La **Figura 12** muestra las proyecciones bidimensionales del frente de Pareto en los planos de los siguientes objetivos: **a)** Flujo másico de DME (F^{dme}) – Costo Total Anual del

sistema integrado ($TAC^{overall}$), **b)** F^{dme} – Consumo energético del sistema integrado ($ELC^{overall}$), y **c)** $TAC^{overall} - ELC^{overall}$.

Es importante mencionar que los resultados del frente de Pareto fueron generados para las estrategias metaheurística y bayesiana, ya que estos permiten optimización multiobjetivo. La solución determinista no produce una frontera de Pareto, sino un único punto optimizado; en este enfoque se minimizó el índice IME como una función escalar.

Para hacer una comparación justa entre las estrategias, se construyó una frontera de Pareto unificada en la que pueden analizarse los compromisos entre producción, costo y consumo energético entre las estrategias de optimización utilizadas.

5.2.1 Optimización metaheurística

Las soluciones metaheurísticas (cuadrados naranjas) presentan una mayor dispersión a lo largo de la frontera, explorando tanto los extremos como los compromisos intermedios. Por otro lado, las soluciones bayesianas (triángulos morados) se concentran en una región específica, lo que refleja una preferencia por compromisos moderados. La solución determinista (estrella azul), estratégicamente ubicada cerca del centro de Pareto, demuestra un equilibrio entre todos los objetivos considerados.

Para evaluar la calidad de las soluciones, se utilizan dos puntos de referencia: el Punto Utópico (UP) y el Punto Nadir (NP). El UP representa una configuración ideal pero inalcanzable, donde la producción se maximiza mientras que el $TAC^{overall}$ y el $ELC^{overall}$ se minimizan. En este estudio, los valores del UP son 3,727 kg/h de producción, $\$5.8439 \times 10^7$ USD/año para el $TAC^{overall}$ y 7.4176×10^4 kWh para el $ELC^{overall}$. Por su parte, el NP define el peor escenario dentro del conjunto de Pareto, con valores de 2,625.20 kg/h para F^{dme} , $\$6.1647 \times 10^7$ USD/año ($TAC^{overall}$) y 1.5032×10^5 kWh ($ELC^{overall}$).

Estos puntos proporcionan un marco de referencia para normalizar las soluciones y comparar objetivamente los compromisos entre objetivos. Al normalizar las soluciones respecto a estos puntos, se obtiene una evaluación más clara de la eficiencia relativa de cada alternativa. Las soluciones que se acercan al UP en la **Figura 11** representan configuraciones óptimas, mientras que aquellas próximas al NP indican alternativas menos favorables. Esta metodología de normalización resulta especialmente útil en la toma de decisiones industriales, ya que permite cuantificar la eficiencia de cada solución en relación con los escenarios teóricos óptimo y desfavorable.

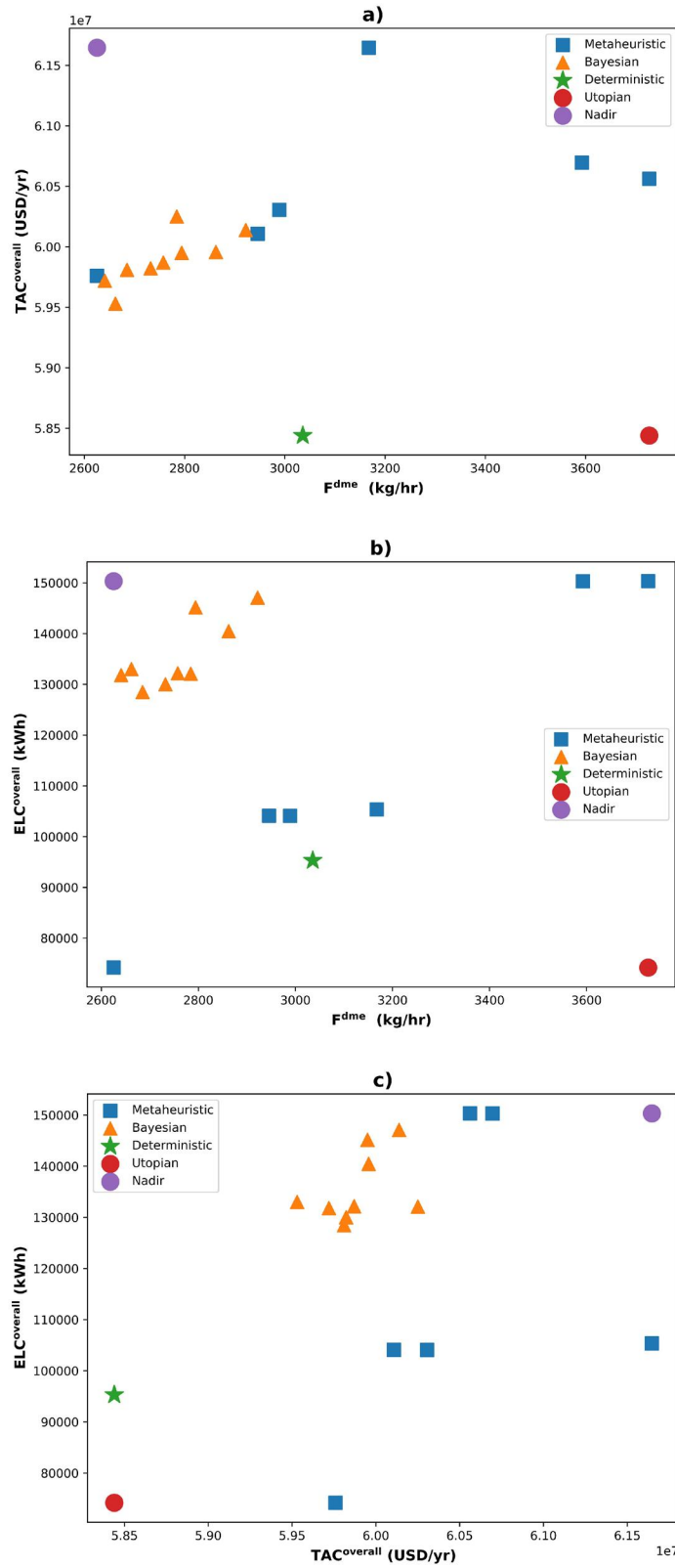


Figura 12. Proyecciones Bidimensionales del Frente de Pareto. a) F_{dme} – $TAC_{overall}$, b) F_{dme} – $ELC_{overall}$, y c) $TAC_{overall}$ – $ELC_{overall}$.

Las soluciones metaheurísticas exhiben una alta variabilidad a lo largo de la frontera de Pareto (ver **Figura 11**), abarcando tanto los extremos como los compromisos intermedios. Por ejemplo, una de las soluciones alcanzó la máxima producción F^{dme} (3,727 kg/h), pero con un $TAC^{overall}$ y un $ELC^{overall}$ considerablemente altos, lo que la hace menos viable para operaciones sensibles a los costos. En contraste, otra solución metaheurística minimizó el $ELC^{overall}$ (7.42×10^4 kWh), pero a costa de una menor producción F^{dme} (2,625 kg/h). Si bien estas soluciones ofrecen un conjunto diverso de alternativas, su naturaleza estocástica da lugar a algunas soluciones dominadas que no están completamente optimizadas en los tres objetivos. La flexibilidad de los enfoques metaheurísticos es especialmente ventajosa en las etapas tempranas del diseño de procesos, donde resulta valioso identificar una amplia gama de alternativas viables. Sin embargo, el costo computacional asociado a estos métodos es considerable. Como se observa en la **Tabla 14**, las mejores soluciones metaheurísticas requirieron 133 minutos de tiempo computacional, significativamente más que el enfoque determinista. Esto sugiere que, si bien los métodos metaheurísticos favorecen la exploración del espacio de soluciones, podrían no ser los más eficientes para la toma de decisiones rápida.

5.2.2 Optimización bayesiana

Por su parte, las soluciones obtenidas mediante optimización bayesiana se concentran en una zona intermedia de la frontera de Pareto (**Figura 11**), priorizando la optimización del $TAC^{overall}$ mientras mantienen un equilibrio entre la producción y el consumo energético. Estas soluciones tienden a presentar un desempeño más estable, aunque carecen de soluciones extremas que logren los mejores resultados absolutos en alguno de los objetivos.

Una ventaja clave de la optimización bayesiana es su eficiencia computacional, ya que requiere menos evaluaciones para converger gracias a que aprovecha modelos probabilísticos para predecir regiones prometedoras dentro del espacio de soluciones, reduciendo la necesidad de evaluaciones costosas de la función objetivo. No obstante, como se indica en la **Tabla 14**, las soluciones bayesianas demandaron 267 minutos de tiempo computacional, el más elevado entre todos los enfoques analizados. Aunque este método explora eficazmente las regiones de compromiso, su dependencia de modelos sustitutos puede limitar su capacidad para identificar soluciones extremas. Por ello, se considera ideal cuando se prefieren compromisos moderados, pero menos adecuado para problemas que requieran una exploración exhaustiva de la frontera de Pareto. El enfoque secuencial del método de optimización bayesiana, que utiliza un modelo sustituto para hacer predicciones internas, puede ser menos eficiente para cubrir regiones extremas de la frontera de Pareto en problemas complejos.

5.2.3 Optimización determinista

La solución determinista (ver **Figura 11**) surge como la alternativa más equilibrada, alcanzando una producción de F^{dme} de 3,035.7 kg/h, un $TAC^{overall}$ de $\$5.8439 \times 10^7$ USD/año y un $ELC^{overall}$ de 9.5299×10^4 kWh. Esta solución se encuentra más próxima al Punto Utópico (UP), evitando compromisos excesivos entre los objetivos. A diferencia de los otros métodos, el enfoque determinista proporciona una única configuración óptima en lugar de un conjunto de posibilidades, lo que lo convierte en una excelente opción cuando se requiere una condición operativa precisa y bien balanceada. Además, es el método más eficiente desde el punto de vista computacional, requiriendo solo 5 minutos, frente a los 133 minutos de la optimización metaheurística y los 267 minutos de la optimización bayesiana (ver **Tabla 14**). Esto demuestra la solidez del enfoque determinista para proporcionar soluciones rápidas y equilibradas.

Tabla 14. Comparación Cuantitativa de los Mejores Resultados Obtenidos en Cada Estrategia de Optimización Multiobjetivo y Eficiencia Computacional de Cada Enfoque.

Enfoque	F^{dme} (kg/h)	$TAC^{overall}$, (USD/año)	$ELC^{overall}$ (kWh)	IME	Tiempo computacional (min)
Metaheurístico	2,625.20	59,759,341.00	74,175.8	1.56	133
Bayesiano	2,661.83	59,529,962.00	132,995.0	1.85	267
Determinista	3,035.7	58,439,207.00	95,299.45	1.37	5

La **Tabla 14** presenta una comparación cuantitativa de las mejores soluciones obtenidas mediante cada enfoque. El índice IME, que normaliza el desempeño en función de los tres objetivos evaluados, confirma que la solución determinista es la más eficiente, al registrar el valor de IME más bajo (1.374). En contraste, las soluciones metaheurísticas muestran valores de IME más elevados (1.560), mientras que las soluciones bayesianas resultan ser las menos eficientes (1.854). Esto resalta la superioridad del enfoque determinista para encontrar una configuración bien equilibrada.

Adicionalmente, el análisis del costo computacional es cuantificado como una métrica práctica para comparar las estrategias de optimización en esta investigación. Mientras que los enfoques metaheurístico y bayesiano requieren un elevado número de evaluaciones para explorar adecuadamente el espacio de soluciones, el método determinista converge rápidamente, lo que lo posiciona como la opción preferida en aplicaciones industriales donde el tiempo de respuesta es crucial.

Los resultados demuestran que cada estrategia de optimización ofrece distintos compromisos. Los métodos metaheurísticos permiten una exploración amplia de la frontera de Pareto, siendo útiles para identificar soluciones extremas. Por otro lado, la optimización bayesiana localiza de manera eficiente soluciones de compromiso aceptables, aunque con

una capacidad limitada para explorar completamente los extremos de la frontera. En cambio, la optimización determinista entrega una solución óptima de forma rápida y equilibrada, lo que la convierte en la alternativa más práctica para la optimización de procesos, especialmente cuando se requiere eficiencia computacional y un desempeño globalmente sólido.

5.3 Validación de Resultados

La **Tabla 15** compara las predicciones del modelo subrogado basado en RNA con las simulaciones rigurosas en Aspen Plus utilizando los valores óptimos obtenidos.

Tabla 15. Resultados de las Variables Clave para las Predicciones del Modelo de RNA y las Simulaciones de Validación en Aspen Plus.

Variable	Resultados del Modelo de RNA	Resultados de Aspen Plus	Error Absoluto	Error Porcentual
Cogeneración con Ciclo Combinado				
$power$	95,299.45	92,204.85	3,095	3%
Desalinización MED				
F^{water_des}	30,000.00	33,304.62	3,305	10%
F^{brine}	46,964.90	45,677.55	1,287	3%
TAC^{des}	2,145,349.49	2,085,162.80	60,187	3%
ELC^{des}	81.25	82.16	1	1%
Electrólisis alcalina de agua				
F^{H_2}	2,000.00	2003.29	3	0%
F^{O_2}	16,672.30	16,906.60	234	1%
TAC^{elec}	13,688,691.10	14,283,238.50	594,547	4%
ELC^{elec}	94,131.60	93,888.40	243	0%
Captura de Carbono				
$TAC^{CO_2_cap}$	37,506,704.00	43,939,567.11	6,432,863	15%
$ELC^{CO_2_cap}$	100.34	83.70	17	20%
Síntesis de metanol				
F^{CH_3OH}	4,624.93	4,825.59	201	4%
$F^{CO_2_met}$	10,285.72	11,519.94	1,234	11%
TAC^{met}	1,427,518.15	1,838,695.26	411,177	22%
ELC^{met}	981.04	1,261.79	281	22%
Síntesis de dimetil éter				
F^{dme}	3,035.70	2,878.07	158	5%
TAC^{dme}	180,159.94	180,978.93	819	0%
ELC^{dme}	52.40	52.40	0	0%

Los resultados demuestran una alta precisión en las variables técnicas como en los flujos de H_2 , CH_3OH y DME que muestran errores porcentuales <5%.

Además, las desviaciones en las variables económicas que se observan en los modelos de captura de carbono y metanol se atribuyen a limitaciones de datos, donde el conjunto de entrenamiento no cubre suficientes escenarios económicos.

El modelo subrogado demostró ser robusto para la predicción del 72% de las variables, que cumplen con un <10% de error, aceptable para etapas conceptuales.

Para mejorar la precisión en estimaciones económicas, se recomienda ampliar el conjunto de entrenamiento de costos de operación. Además, la incorporación de enfoques de modelado híbrido, que integren métodos basados en datos con análisis tecno económicos rigurosos, podría incrementar aún más la fiabilidad de las estimaciones de costos.

5.4 Resultados de la optimización matemática del sistema integrado

La **Tabla 16** resume las condiciones de operación óptimas que han resultado del análisis de optimización matemática y la **Figura 13** muestra el esquema del sistema integrado para la producción de DME.

El esquema incluye unidades clave como la síntesis de metanol, el reactor de síntesis de DME, el proceso de captura de carbono, la planta de desalinización de agua salina, el sistema de electrólisis alcalina de agua y la central de cogeneración. Este diagrama ilustra las interconexiones entre los procesos, destacando las condiciones operativas óptimas identificadas en este estudio.

La unidad de síntesis de metanol convierte la mezcla del CO_2 capturado y el H_2 verde en metanol mediante un reactor de flujo pistón (PFR) operando a $269.5^\circ C$ y 100 bar, seguido de etapas de separación y purificación. Posteriormente, el metanol se alimenta a la unidad de síntesis de DME, donde la materia prima se somete a deshidratación catalítica a $250^\circ C$, complementada con etapas de destilación para recuperar el producto final. La planta de captura de carbono, que opera a 1.3 bar, elimina el CO_2 de los gases de combustión mediante absorción con aminas, contribuyendo a la reducción de emisiones y a su reutilización.

Por su parte, la unidad de desalinización por múltiple efecto trata 400,000 kg/h de agua de mar, produciendo 30,000 kg/h de agua desalinizada que posteriormente será utilizada en el proceso de electrólisis alcalina y otras operaciones, con un costo total anualizado (TAC) de 2.15 millones de USD anuales y un consumo eléctrico de 81.25 kWh.

La planta de electrólisis alcalina, con un consumo anual de 94,131.59 kWh, genera 2,000 kg/h del hidrógeno necesario para la producción de metanol.

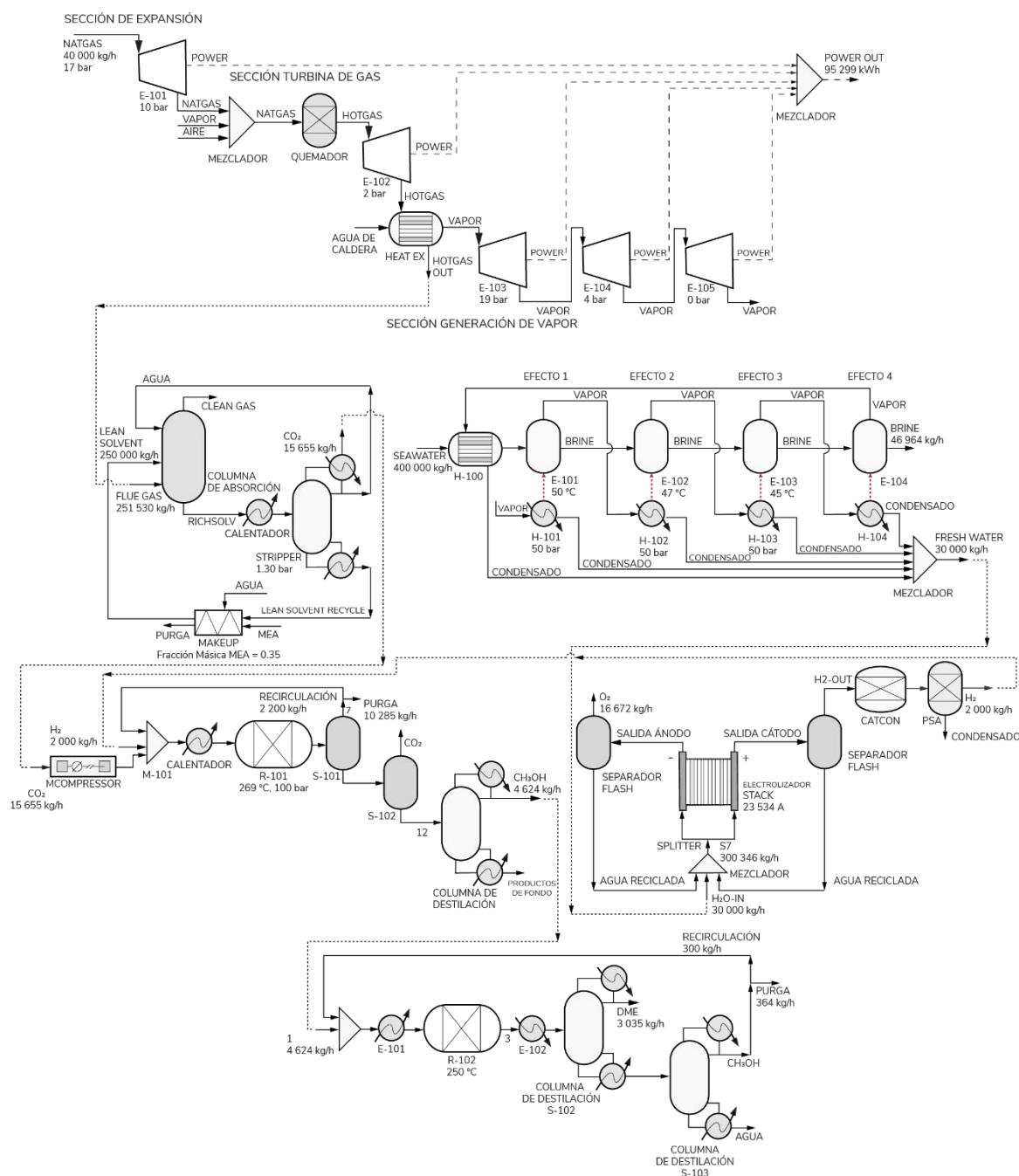


Figura 13. Sistema Integrado de Producción de DME Bajo Condiciones Óptimas de Operación.

Para maximizar la eficiencia energética, el sistema de cogeneración recupera calor residual, generando 95,299.45 kW de potencia, lo que optimiza el uso de energía y reduce la dependencia de servicios externos, con un TAC de 3.49 millones de USD anuales. Esta

configuración optimizada, resultado de una estrategia de optimización multiobjetivo, equilibra la producción de DME, la eficiencia energética y la viabilidad económica, ofreciendo una solución sostenible y rentable para la producción de DME verde, y que al tiempo minimiza el impacto ambiental.

Tabla 16. Resultados de la Optimización: Valores Óptimos para el Diagrama Integrado del Sistema de Producción de Hidrógeno Verde y DME.

	Block	Variable	Unidades	Valores Óptimos
Cogeneración	Corriente NATGAS	Flujo másico	kg/h	40,000.00
	Corriente NATGAS	Presión	bar	17.89
	Turbina E-101	Presión de descarga	bar	10.00
	Turbina E-102	Presión de descarga	bar	2.44
	Turbina E-103	Presión de descarga	bar	19.00
	Turbina E-104	Presión de descarga	bar	4.51
	Turbina E-105	Presión de descarga	bar	0.98
Desalinización Múltiple Efecto	Corriente SEAWATER	Flujo másico	kg/h	400,000.00
	Interc. Calor H-101	Temperatura	°C	50.56
	Interc. Calor H-102	Temperatura	°C	50.00
	Interc. Calor H-103	Temperatura	°C	50.00
	Evaporador E-101	Temperatura	°C	50.30
	Evaporador E-102	Temperatura	°C	47.20
	Evaporador E-103	Temperatura	°C	45.00
Electrólisis Alcalina de Agua	Stack	Corriente	Ampere	23,534.14
	Corriente S7	Flujo másico	kg/h	300,346.61
	Corriente H2O-IN	Flujo másico	kg/h	30,000.00
Captura de Carbono	Corriente FLUEGAS	Flujo másico	kg/h	503,060.86
	Corriente LEAN SOLVENT	Flujo másico	kg/h	500,000.00
	MAKEUP	Fracción Másica MEA	-	0.35
Síntesis de Metanol	Reactor R-101	Temperatura	°C	269.55
	Reactor R-101	Presión	bar	100.00
	Corriente PURGE	Flujo másico	kg/h	10,285.72
	Corriente H2	Flujo másico	kg/h	2,000.00
	Corriente CO ₂	Flujo másico	kg/h	15,655.64
Síntesis de Dimetil Éter	Reactor R-101	Temperatura	°C	250.00
	Corriente RECIRCULATION	Flujo másico	kg/h	300.00
	Corriente 1	Flujo másico	kg/h	3,035.71

CAPÍTULO 6. Conclusiones

Este estudio presenta una metodología integral para optimizar la producción de DME sostenible, combinando herramientas de simulación de procesos, modelos de redes neuronales artificiales y estrategias de optimización multiobjetivo. Mediante la simulación en Aspen Plus, se diseñó un sistema que integra unidades clave como cogeneración de energía, captura de CO₂, desalinización de agua, producción de hidrógeno verde por electrólisis, síntesis de metanol y su posterior conversión a DME. Esta integración permitió evaluar el desempeño del sistema bajo distintos escenarios operativos, identificando las condiciones óptimas para mejorar la eficiencia y la sostenibilidad del proceso.

Uno de los aportes principales de este trabajo es la aplicación de modelos de RNA para describir las relaciones entre las variables operativas y los resultados críticos del proceso. Estos modelos demostraron una alta precisión predictiva, con valores de R² superiores a 0.99 en la mayoría de los casos, lo que confirma su eficacia para optimizar la producción de DME. Esta estrategia basada en inteligencia artificial supera las limitaciones de los modelos empíricos tradicionales y de las simulaciones estáticas, haciéndola eficiente para la optimización de procesos.

El estudio comparó tres enfoques de optimización: determinista, metaheurístico y bayesiano. Los resultados muestran que la optimización determinista logró el mejor equilibrio entre producción, costos y consumo energético. En concreto, se alcanzó una producción de DME de 3 035.7 kg/h, con un costo total anual de 58.44 millones de USD y un consumo energético de 95 299 kWh, superando las soluciones obtenidas mediante métodos metaheurísticos y bayesianos, que, si bien exploraron un rango más amplio de soluciones, no lograron igualar este equilibrio entre los objetivos de optimización.

Desde una perspectiva económica y energética, la integración del sistema de cogeneración con la producción de DME mejora notablemente la eficiencia del proceso. La cogeneración permitió recuperar energía de los gases de combustión, reduciendo la dependencia de fuentes externas de electricidad y minimizando el impacto ambiental del sistema. Asimismo, la incorporación de la captura de CO₂ junto con la producción de metanol y su posterior conversión a DME refuerza la sostenibilidad del proceso, facilitando la reutilización eficiente del carbono y alineándose con los objetivos globales de reducción de gases de efecto invernadero.

6.1 Recomendaciones a Futuro

Este estudio abre nuevas oportunidades para mejorar la producción de DME mediante enfoques avanzados. Se propone el desarrollo de modelos híbridos que combinen inteligencia artificial con simulaciones fenomenológicas, para mejorar tanto la precisión

como la interpretabilidad de los resultados. Además, se recomienda integrar métricas de sostenibilidad, como la huella de carbono y la eficiencia de captura de CO₂ en futuras optimizaciones, para evaluar de forma más integral el impacto ambiental del proceso. Finalmente, explorar técnicas de optimización robusta permitirá gestionar la incertidumbre de las condiciones operativas, algo crucial para la integración de fuentes renovables en la producción de DME. La validación experimental en plantas piloto será clave para transferir estas estrategias de optimización al entorno industrial.

Referencias Bibliográficas

- ACS. (2023). *12 Principles of Green Chemistry*. Obtenido de <https://www.acs.org/greenchemistry/principles/12-principles-of-green-chemistry.html>
- Aklilu, E., & Bounahmidi, T. (2024). Machine learning applications in catalytic hydrogenation of carbon dioxide to methanol: A comprehensive review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 578-602. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.02.309>.
- Anastas, P., & Eghbali, N. (2009). Green Chemistry: Principles and Practice. *Chemical Society Reviews*. doi:10.1039/b918763b
- Azizi, Z., Rezaeimanesh, M., Tohidian, T., & Rahimpour, M. (2014). Dimethyl ether: A review of technologies and production challenges. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 150-172. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2014.06.007>.
- Bercic, G., & Levec, J. (1992). Intrinsic and Global Reaction Rate of Methanol Dehydration over Gamma-Al₂O₃ Pellets. *University of Ljubljana*, 1035-1040.
- Bikmukhametov, T., & Jäschke, J. (2020). Combining machine learning and process engineering physics towards enhanced accuracy and explainability of data-driven models. *Computers & Chemical Engineering*.
- Ceccon, F., Jalving, J., Haddad, J., Thebelt, A., Tsay, C., Laird, C., & Misener, R. (2022). OMLT: Optimization and Machine Learning Toolkit. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2202.02414>.
- Cho, H., Kim, Y., Lee, D., Choi, D., Lee, Y., & Rhee, W. (2020). Basic enhancement strategies when using Bayesian optimization for hyperparameter tuning of deep neural networks. *IEEE Access*, 52588-52608. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2981072>.
- Deb, K., & Jain, H. (2014). An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, Part I: Solving problems with box constraints. *IEEE Trans. Evol. Comput.*, 577-601. <https://doi.org/10.1109/TEVC.2013.2281535>.
- Fedeli, M., Negri, F., & Manenti, F. (2022). Biogas to advanced biofuels: Techno-economic analysis of one-step dimethyl ether synthesis. *Journal of Cleaner Production*, <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.134076>.

- Fedeli, M., Negri, F., Bornazzini, A., Montastruc, L., Manenti, F., & Kiss, A. (2024). Process design and downstream optimization of the direct synthesis route for cleaner production of dimethyl ether from biogas. *Journal of Cleaner Production*, 141060. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141060>.
- Fortin, C., Gianfolcaro, N., Gonzalez, R., Lohest, J., Lonneux, A., Mordant, P., . . . Schmitz, C. (2020). Dimethyl ether, A review of production processes. *Liege University*, 1-20.
- Frazier, P. (2018). Bayesian optimization. In Recent advances in optimization and modeling of contemporary problems. *Informatics*, 255-278. <https://doi.org/10.1287/educ.2018.0188>.
- Hankin, A., & Shah, N. (2017). Process exploration and assessment for the production of methanol and dimethyl ether from carbon dioxide and water. *Sustainable Energy & Fuels*, 1541–1556. <https://doi.org/10.1039/C7SE00206H>.
- Ishikawa, E., & Kaneko, H. (2025). Design of the Ethylbenzene production process using machine learning. *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2025.101157>.
- Joy, T., Rana, S., Gupta, S., & Venkatesh, S. (2020). Fast hyperparameter tuning using Bayesian optimization with directional derivatives. *Knowledge-Based Systems*, 106247. <https://doi.org/10.1016/j.knosys.2020.106247>.
- Karagoz, S. (2014). Process Design, Simulation and Integration of Dimethyl Ether (DME) Production from Shale Gas by Direct and Indirect Methods. *Doctoral Dissertation*, <https://hdl.handle.net/1969.1/153529>.
- Kiss, A., Pragt, J., Vos, H., Bargeman, G., & de Groot, M. (2016). Novel efficient process for methanol synthesis by CO₂ hydrogenation. *Chemical Engineering Journal*, 260-269. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2015.08.101>.
- Kreyszig, E. (2011). *Advanced Engineering Mathematics*. John Wiley & Sons, Inc.
- León, D., Amez, I., Castells, B., Ortega, M. F., & Bolonio, D. (2024). Techno-economic analysis of the production of synthetic fuels using CO₂ generated by the cement industry and green hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 406-417. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.138>.
- López-Flores, F., Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. (2024). Process Systems Engineering Tools for Optimization of Trained Machine Learning Models: Comparative and Perspective. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 13966-13979. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00632>.

- Michailos, S., Mccord, S., Sick, V., & Stokes, G. (2019). Dimethyl ether synthesis via captured CO₂ hydrogenation within the power to liquids concept: A techno-economic assessment. *Energy Conversion and Management*, 262-276. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.01.046>.
- Munguía-López, A., Sánchez-Bautista, A., El-Halwagi, M., & Ponce-Ortega, J. (2021). Strategic Planning of an Integrated Fuel Production System with a Fair-Sustainable Approach. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 5116-5127. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c00137>.
- Nyári, J. (2018). Techno-economic feasibility study of a methanol plant using carbon dioxide and hydrogen. *Master of Science Thesis [Online]*. Available: <https://kth.diva-portal.org/smash/get/diva2:1290829/FULLTEXT01.pdf> [Accessed April 2025].
- Oh, K., Kwon, H., Park, S., & Kim, S. (2024). Hyperparameter Optimization of the Machine Learning Model for Distillation Processes. *International Journal of Intelligent Systems*, <https://doi.org/10.1155/2024/5564380>.
- Ozaki, Y., Tanigaki, Y., Watanabe, S., & Onishi, M. (2020). Multiobjective tree-structured parzen estimator for computationally expensive optimization problems. *Proc.*, 533-541. <https://doi.org/10.1145/3377930.3389817>.
- Pawelczyk, E., Lukasik, N., Wysocka, I., Rogala, A., & Gebicki, J. (2022). Recent Progress on Hydrogen Storage and Production Using Chemical Hydrogen Carriers. *Energies*, 4964. <https://doi.org/10.3390/en15144964>.
- Prasetyo, D., Putra, Z., Bilad, M., Mahlia, T., Wibisono, Y., Nordin, N., & Wirzal, M. (2020). Insight into the sustainable integration of bio- and petroleum refineries for the production of fuels and chemicals. *Polymers*, 1091. <https://doi.org/10.3390/polym12051091>.
- Risco-Bravo, A., Valera, C., Bartels, J., & Zondervan, E. (2024). From green hydrogen to electricity: A review on recent advances, challenges, and opportunities on power-to-hydrogen-to-power systems. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113930>.
- Rojas, C. (2018). Dimethyl Ether as Building Block for the Production of Green Fuels. *Environmental Science*.
- Schirru, A., Lucchini, T., D'Errico, G., Mehl, M., Hilfiker, T., & Soltic, P. (2023). Numerical investigation on the use of Dimethyl Ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines. *Fuel*, 129434. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129434>.

- Shokrian, M., & High, K. (2014). An efficient multi criteria process optimization framework: Sustainable improvement of the Dimethyl Ether Process. *Computers & Chemical Engineering*, 213-230. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2013.09.011>.
- Turton, R., Bailie, R., Whiting, W., & Shaeiwitz, J. (2003). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Process*. Upper Saddle River, New Jersey: Pearson Education Inc.
- Watanabe, S. (2023). Tree-Structured Parzen Estimator: Understanding Its Algorithm Components and Their Roles for Better Empirical Performance. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.2304.11127>.
- Wijayanta, A., Oda, T., Purnomo, C., Kashiwagi, T., & Aziz, M. (2019). Liquid hydrogen, methylcyclohexane, and ammonia as potential hydrogen storage: Comparison review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 15026-15044. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.04.112>.
- Yasari, E. (2017). A Green Industrial Scale Di-methyl Ether Reactor with Aiming to CO₂ Reduction: Staging and Multi-Objective optimization approach. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 110-118. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2017.09.046>.
- Zhu, H., Bohac, S., Nakashima, K., Hagen, L., Huang, Z., & Assanis, D. (2013). Effect of fuel oxygen on the trade-offs between soot, NO_x and combustion efficiency in premixed low-temperature diesel engine combustion. *Fuel*, 459-465. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.05.023>.

Tabla A. Especificaciones del modelo riguroso del electrolizador en Aspen Plus para la electrólisis alcalina de agua.

Parámetro	Valor	Unidades
Condiciones de operación		
Número de pilas	8	-
Número de celdas por stack	230	-
Corriente total	50000	A
Geometría: electrodo		
Área activa	4	m ²
Alto	2	m
Ancho	2	m
Distancia entre electrodos	0.00125	m
Grosor	0.002	m
Geometría: membrana		
Área activa	4	m ²
Grosor	0.0005	m
Difusividad del oxígeno	1.81E-05	cm ² /s
Difusividad del hidrógeno	5.63E-05	cm ² /s
Parámetros eléctricos		
Densidad de corriente de intercambio	1.00E+09	A/cm ²
Resistividad	7.00E+08	Ohm-cm
Coefficiente de transferencia de carga	1.15E+00	-

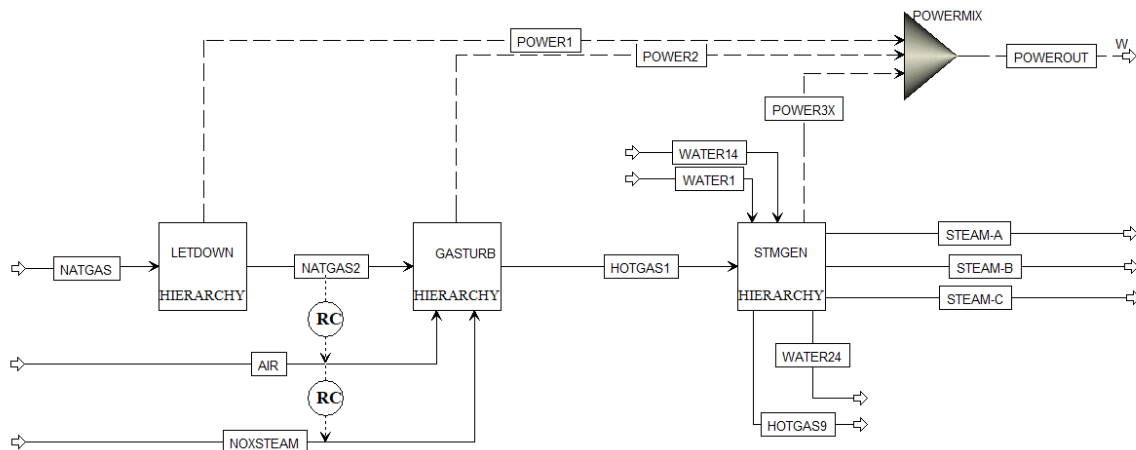


Figura C. Diagrama del proceso de cogeneración de energía a partir de gas natural en el software Aspen Plus.

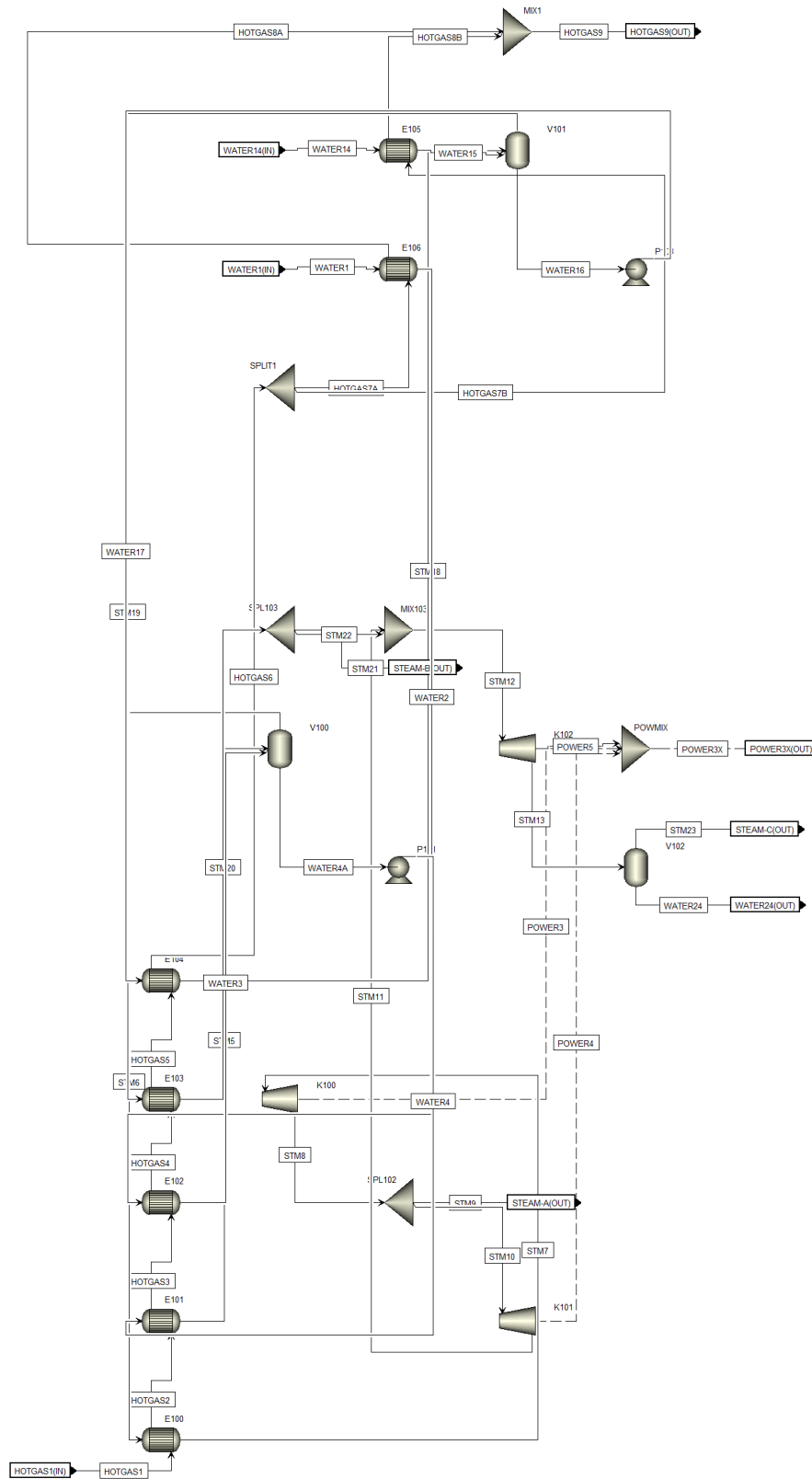


Figura D. Sección de la generación de vapor del modelo de cogeneración de energía en Aspen Plus.

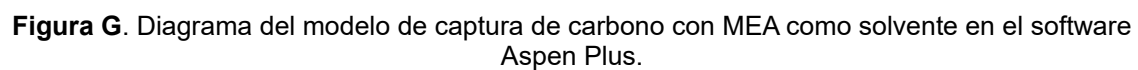
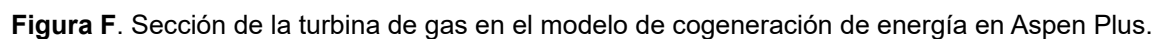
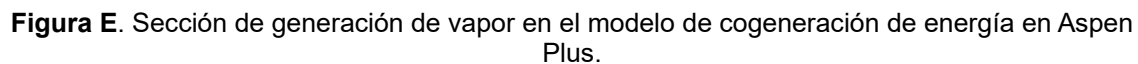


Tabla B. Especificaciones de los bloques ABSORBER y STRIPPER del modelo de captura de carbono en Aspen Plus.

Parámetro	Valor	Unidades
ABSORBER		
Número de etapas	30	-
Etapas de alimentación - WATER	1	-
Etapas de alimentación - FLUEGAS	30	
Etapas de alimentación - LEANSOLV	6	
Presión condensador	100	kPa
Caída de presión	5	kPa
STRIPPER		
Número de etapas	22	-
Etapas de alimentación - WATER	2	-
Presión condensador	100	kPa
Caída de presión	5	kPa

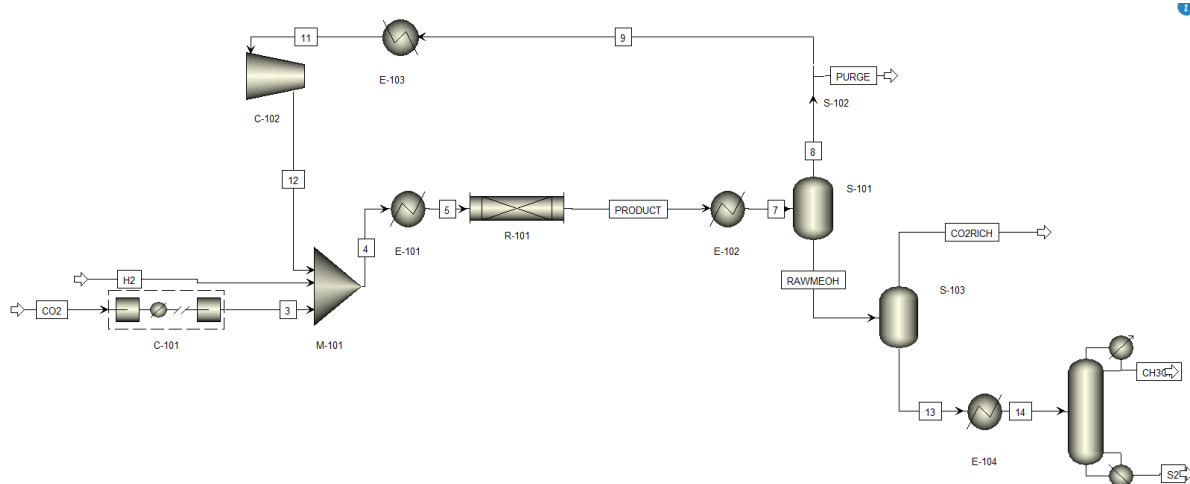


Figura H. Diagrama del modelo de síntesis de metanol por hidrogenación de CO₂ en el software Aspen Plus.

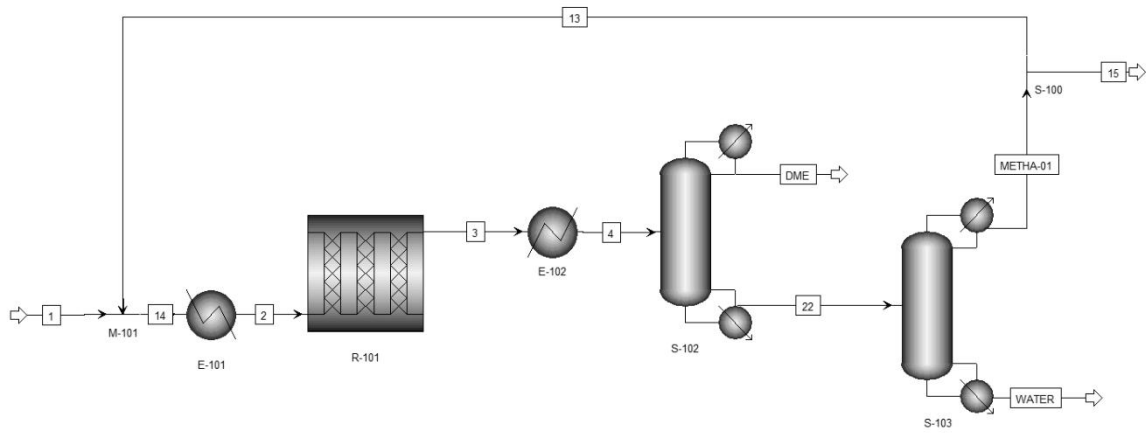
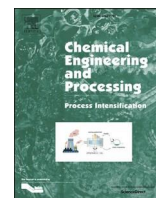


Figura I. Diagrama del modelo de síntesis de dimetil éter sostenible a partir de metanol en el software Aspen Plus.



Modeling and optimization of an integrated system for the green dimethyl ether production: Process simulation, modeling with artificial intelligence, and optimization methods

Bannih Teresita Zamora-Aguirre, Francisco Javier López-Flores, César Ramírez-Márquez, Fabricio Nápoles-Rivera^{*}, José María Ponce-Ortega

Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58060, México

ARTICLE INFO

Keywords:

Green dimethyl ether
Artificial neural networks
Process optimization
Sustainable energy
Multi-objective optimization

ABSTRACT

Green dimethyl ether is emerging as a promising alternative fuel due to its environmental benefits and potential integration into carbon-neutral energy systems. This study presents a comprehensive workflow for modeling, simulation, and optimization of green dimethyl ether production using an integrated approach that combines artificial neural networks and multi-objective optimization. Process simulation in Aspen Plus was employed to model key units, including methanol synthesis, CO₂ capture, desalination, electrolysis, and cogeneration. Artificial neural networks were trained to predict system performance, achieving high accuracy across multiple process units. A comparative analysis of deterministic, Bayesian, and metaheuristic optimization approaches showed that deterministic optimization offered the best balance between economic feasibility and energy efficiency. The optimized configuration achieved a green dimethyl ether production rate of 3035.7 kg/h, reducing total annual costs and energy consumption. These findings highlight the effectiveness of AI-driven optimization in enhancing sustainable fuel production. The proposed methodology contributes to the transition toward a low-carbon economy by improving green dimethyl ether process efficiency and economic viability.

1. Introduction

Dimethyl ether (DME) has gained increasing attention as an alternative fuel due to its favorable combustion properties and environmental benefits. It offers significant reductions in NO_x, SO_x, and particulate emissions compared to conventional diesel, making it an attractive option for sustainable transportation and energy applications [1,2]. Additionally, its capacity to be reformed into hydrogen at relatively low temperatures expands its applications beyond transportation to power generation and residential heating. The urgency of transitioning to sustainable energy sources has driven extensive research on optimizing DME production pathways, aiming to integrate it into a carbon-neutral energy system.

DME production primarily follows two routes: indirect synthesis via methanol dehydration and direct synthesis from syngas. While methanol dehydration is commercially established, direct synthesis offers potential energy savings and process simplifications [3,4]. Hankin and Shah [5] explored the viability of syngas-based synthesis using CO and CO₂ as

feedstocks, identifying configurations that enhance CO₂ utilization and improve overall sustainability. This process contrasts with conventional methanol-based routes, as direct DME synthesis facilitates carbon capture and contributes to reducing greenhouse gas emissions.

Economic feasibility analyses, such as those conducted by Karagoz [6], suggest that under favorable market conditions, using shale gas as a feedstock could provide cost advantages, particularly in regions with abundant natural gas reserves. Further modeling studies emphasize the importance of process integration and optimization in DME production, particularly for the indirect route [7]. In recent years, several techno-economic evaluations have expanded this analysis by proposing novel process configurations for sustainable DME production. Gierse et al. [8] examined four intensified liquid-phase synthesis routes using reactive distillation and side reactors, achieving up to 39 % cost reduction compared to conventional gas-phase systems. Similarly, Alo-taibi and Alturki [9] investigated the integration of hydrogen and DME production within a renewable-powered microgrid, demonstrating significant gains in energy efficiency and a 99% reduction in CO₂ emissions.

^{*} Corresponding author.

E-mail address: fabricio.napoles@umich.mx (F. Nápoles-Rivera).

<https://doi.org/10.1016/j.cep.2025.110383>

Received 19 March 2025; Received in revised form 6 May 2025; Accepted 28 May 2025

Available online 29 May 2025

0255-2701/© 2025 Elsevier B.V. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.

Bannih Teresita Zamora Aguirre

Optimización multiobjetivo de un sistema sostenible para la producción de hidrógeno y dimetil éter modelado con intelige...

 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid:::3117:474239439

Fecha de entrega

16 jul 2025, 10:18 a.m. GMT-6

Fecha de descarga

16 jul 2025, 10:27 a.m. GMT-6

Nombre de archivo

Optimización multiobjetivo de un sistema sostenible para la producción de hidrógeno y dimetil é....pdf

Tamaño de archivo

3.4 MB

72 Páginas

21.507 Palabras

119.099 Caracteres

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Maestría en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	Optimización multiobjetivo de un sistema sostenible para la producción de hidrógeno y dimetil éter: modelado con inteligencia artificial y simulación de procesos.	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Bannih Teresita Zamora Aguirre	1440624e@umich.mx
Director	José María Ponce Ortega	jose.ponce@umich.mx
Codirector	Fabrizio Nápoles Rivera	fabrizio.napoles@umich.mx
Coordinador del programa	Ma. del Carmen Chavez Parga	mae.cs.ingenieria.quimica@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	No	N/A

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Traducción al español	No	N/A
Traducción a otra lengua	No	N/A
Revisión y corrección de estilo	No	N/A
Análisis de datos	No	N/A
Búsqueda y organización de información	No	N/A
Formateo de las referencias bibliográficas	No	N/A
Generación de contenido multimedia	No	N/A
Otro	No	N/A

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Bannih Teresita Zamora Aguirre
Lugar y fecha	Morelia, Michoacán a 15 de julio de 2025.