



# UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

## DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

*“Diseño Óptimo de Redes CHOSYN a Través de Herramientas Híbridas de Programación Matemática y Aprendizaje Automático”.*

### TESIS

**Presenta:**

**I.Q. HUGO EDUARDO MEDRANO MINET**

**A la división de estudios de posgrado de la Facultad de Ingeniería Química como requisito parcial para obtener el grado de:**

**MAESTRO EN CIENCIAS**

**EN**

**INGENIERÍA QUÍMICA**

**Director de Tesis: Dr. Fabricio Nápoles Rivera**

**Codirector de Tesis: Dr. José María Ponce Ortega**



Morelia, Michoacán, agosto de 2025



## AGRADECIMIENTOS

*A mi director de Tesis el Dr. Fabricio Nápoles Rivera quien desde la primera clase que me impartió en esta institución logró contagiarme la pasión por el entendimiento profundo de los temas en cuanto a Ingeniería de Procesos se refiere, específicamente Optimización de Procesos Químicos, por siempre ser un modelo a seguir no solo para mí sino para todos sus estudiantes y a pesar de poseer una capacidad intelectual tremenda siempre darnos un trato humano, sencillo y sincero.*

*A mi co-director de Tesis el Dr. José María Ponce Ortega quien al igual que el Dr. Fabricio es una persona extremadamente brillante y con un sentido del liderazgo nato, pero a pesar de eso muy sencilla y amable. Le agradezco al doctor por aceptarme en su equipo de trabajo, tenerme paciencia, llevarme de la mano y sobre todo siempre brindarnos apoyo con el increíble bagaje de conocimientos que posee en esta rama tan bonita de la Ingeniería Química.*

*Al Dr. Francisco Javier López Flores quien es una persona increíblemente talentosa, amistosa y siempre accesible para el trabajo, me compartió un sinfín de conocimientos nuevos en cuanto las herramientas de Inteligencia Artificial en su modalidad de Machine Learning y por supuesto la pasión por continuar con el entendimiento, estudio y dominio de dichas herramientas. A mis profesores de maestría y a mis sinodales quienes han sido muy puntuales y amables con sus consejos y recomendaciones en las presentaciones. A la universidad michoacana y a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), por el apoyo recibido para cursar estos estudios de Maestría.*

## INDICE

### Tabla de contenido

|                                                                     |    |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| RESUMEN .....                                                       | 6  |
| ABSTRACT .....                                                      | 7  |
| INTRODUCCIÓN .....                                                  | 8  |
| 2.1. Generalidades .....                                            | 9  |
| 2.2. Antecedentes .....                                             | 10 |
| 2.3. Justificación de la investigación .....                        | 14 |
| 2.4. Objetivos .....                                                | 15 |
| 2.4.1. Objetivo general .....                                       | 15 |
| 2.4.2. Objetivos específicos .....                                  | 15 |
| 2.4.3. Hipótesis .....                                              | 16 |
| MARCO TEÓRICO .....                                                 | 17 |
| 3.1. Generalidades .....                                            | 18 |
| 3.1.1. Intensificación de procesos .....                            | 18 |
| 3.1.2. Integración másica y energética .....                        | 19 |
| 3.1.3. Parque Eco-Industrial .....                                  | 21 |
| 3.1.4. Redes de Carbono-Hidrógeno-Oxígeno ( <i>CHOSYN'S</i> ) ..... | 22 |
| 3.1.5. Simulación modular secuencial .....                          | 23 |
| 3.1.6. Machine learning .....                                       | 24 |
| 3.1.7. Aprendizaje supervisado .....                                | 25 |
| 3.1.8. Regresión lineal .....                                       | 28 |
| 3.1.9. Redes neuronales artificiales .....                          | 29 |
| 3.1.10. Hiperparámetros de una red neuronal .....                   | 29 |
| 3.1.11. Formulación matemática .....                                | 30 |
| 3.1.12. Programación matemática .....                               | 32 |
| METODOLOGÍA .....                                                   | 36 |
| PLANTEAMIENTO .....                                                 | 39 |
| 4.1. Descripción de los procesos .....                              | 40 |
| 4.1.1. Reformado autotérmico de metano .....                        | 40 |
| 4.1.2. Deshidrogenación de propano .....                            | 41 |
| 4.1.3. Craqueo de etano a etileno .....                             | 41 |
| 4.1.4. Monómero de acetato de vinilo .....                          | 42 |

|                                                                     |    |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| 4.1.5. Reformado de metano con vapor $\text{CO}_2/\text{H}_2$ ..... | 43 |
| 4.1.6. Reformado de metano con vapor a syngas .....                 | 44 |
| 4.1.7. Reformado seco de metano .....                               | 44 |
| 4.1.8. Metanol a propileno .....                                    | 45 |
| 4.1.9. Metanol a partir de syngas .....                             | 46 |
| 4.1.10. Metanol a partir de $\text{CO}_2$ .....                     | 47 |
| 4.1.11. Reacción de desplazamiento del gas de agua .....            | 47 |
| 4.1.12. Carbonilación de metano a ácido acético .....               | 48 |
| 4.2. Análisis de sensibilidad y recolección de datos .....          | 49 |
| 4.2.1. Redes neuronales artificiales .....                          | 56 |
| 4.1.2. Optimización de hiperparámetros .....                        | 57 |
| DESARROLLO .....                                                    | 60 |
| PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....                                    | 61 |
| 5.1. Modelo matemático .....                                        | 62 |
| 5.2. Resultados y discusión .....                                   | 66 |
| 5.2.1. Redes neuronales artificiales .....                          | 66 |
| 5.2.2. Resultados de la optimización multiobjetivo .....            | 71 |
| 5.2.3. Conclusiones .....                                           | 80 |
| BIBLIOGRAFÍA .....                                                  | 8  |

## I. RESUMEN

Las redes simbióticas de Carbono-Hidrógeno-Oxígeno (CHOSYN) pertenecen al último avance dentro del diseño sostenible de procesos químicos, cuyo principal propósito es el uso eficiente de recursos importantes tales como la masa y la energía. La Red CHOSYN es un concepto dentro de la ingeniería de procesos que obedece a la síntesis y diseño de complejos de transformación química altamente integrados a través de esquemas y formulaciones matemáticas de optimización. Mediante las Redes CHOSYN podemos identificar el manejo óptimo de recursos en parques Eco-Industriales totalmente integrados. Modelar matemáticamente complejos industriales de transformación química puede llegar a ser una tarea complicada debido a la complejidad de las operaciones y procesos unitarios desarrollados que regularmente conducen a problemas de optimización con la particularidad de ser altamente no convexos, por esta razón, en este proyecto de investigación se propone el desarrollo de un modelo híbrido general que permita implementar herramientas propias de la simulación modular secuencial en conjunto con estrategias de Machine Learning y programación matemática, con el propósito de usar modelos detallados de los procesos químicos, y que a su vez puedan ser integrados mediante algoritmos de optimización para la síntesis óptima de parques Eco-Industriales que en principio manejan en su operación diaria especies hidrocarbonadas.

En base a lo anterior, en el presente trabajo se realizará el diseño y síntesis teórico de la configuración óptima para un complejo de transformación química que involucra en su operación diaria el manejo de especies provenientes de los hidrocarburos, empleando simuladores modulares secuenciales, herramientas de aprendizaje automático (Machine Learning) y algoritmos propios de la optimización determinista (Programación LP, NLP, MILP, MINLP), de esta manera el trabajo se circunscribe en el área computacional-experimental.

**Palabras clave:** Redes Carbono-Hidrógeno-Oxígeno, Parques Eco-Industriales, Integración de Procesos, Optimización, Machine Learning.

## ABSTRACT

This study presents a hybrid machine learning and mathematical programming framework for the sustainable synthesis of Carbon-Hydrogen-Oxygen Symbiosis Networks (CHOSYN), which promote the internal reuse of hydrocarbon-rich residuals across process units to enhance resource efficiency and reduce environmental impact in eco-industrial systems. A superstructure-based formulation is developed to represent all feasible interconnections between processing units, enabling a systematic exploration of network configurations. Artificial neural networks (ANN), trained on process simulation data, are employed as surrogate models to approximate the operational behaviour of complex unit operations. These surrogate models are seamlessly embedded within a superstructure-based optimization framework implemented via the Optimization and Machine Learning Toolkit (OMLT) and solved using Pyomo. A multi-objective optimization approach balances economic profitability and environmental performance. This study is the first to explicitly optimize internal recirculation, chemical species reuse, and operating conditions within the CHOSYN network, yielding an optimal configuration that demonstrates extensive inter-unit integration. Numerous material exchanges enable the internal reuse of hydrogen, light hydrocarbons, carbon oxides, water, and other valuable streams. Analysis further indicates that high-margin products such as dimethyl ether and propylene contribute significantly to profitability despite lower production volumes, highlighting strategic product selection in integrated networks. Overall, this study establishes a robust and versatile methodology for integrating data-driven models into process network design, offering a promising path toward greener and economically viable chemical manufacturing.

**Keywords:** Chosyn networks; Hybrid optimization; Artificial neural networks; Surrogate modelling; Eco-industrial systems.

# INTRODUCCIÓN

## **II. Generalidades.**

### **2.1. Generalidades**

Ingeniería de Procesos, rama perteneciente a la disciplina de la Ingeniería Química, es un subcampo integrado por diversas etapas de estudio cimentadas en materias fundamentales que constituyen la columna vertebral de lo que hoy en día se concibe como Ingeniería Química. Síntesis y/o Diseño, Análisis y/o Simulación, Optimización, Dinámica y Control de procesos, son etapas fundamentales que constituyen el quehacer de la Ingeniería de Procesos. En las etapas más tempranas o preliminares de la Ingeniería de Procesos, es decir, lo referente a Síntesis y Diseño, se conocen las materias primas y también se sabe con certeza que productos finales se quiere obtener, los cuales pueden estar condicionados a ciertas especificaciones determinadas por el cliente o el interesado en esos productos finales, entonces lo que buscamos en esta etapa preliminar es identificar la estructura del proceso que precisamente nos llevará de esas materias primas a los productos finales de interés. En una segunda etapa de la Ingeniería de Procesos conocida como Análisis o Simulación, conocemos las materias primas con sus condiciones iniciales, el proceso con todas sus características, condiciones de operación, su estructura y a partir de esta información entonces tratamos de identificar que productos es posible obtener. En una tercera etapa conocida como Optimización de Procesos nosotros buscamos determinar los mejores valores de nuestras variables de diseño o decisión para lograr la maximización o minimización de índices de desempeño determinados manipulando grados de libertad asociados a las variables del proceso, el siguiente trabajo se circunscribe precisamente en esta etapa de la Ingeniería de Procesos, Optimización.

El diseño y síntesis de Redes CHOSYN es entonces un concepto que se aborda y trabaja adecuadamente en el campo de la Optimización de Procesos, la Red CHOSYN involucra equipos de proceso y plantas de transformación química que principalmente trabajan materia prima procedente de especies hidrocarbonadas y su principal propósito es el reciclaje interno de corrientes entre unidades de procesamiento o complejos industriales completos con la finalidad de lograr la minimización de aspectos tales como emisiones, residuos y cualquier otro impacto negativo. Por la naturaleza compleja de estas operaciones surge entonces el interés de formular modelos matemáticos de optimización en conjunto con estrategias

propias de la inteligencia artificial en su modalidad de Machine Learning con la intención de facilitar la resolución de dichos modelos de optimización planteados.

## 2.2. ANTECEDENTES

El esquema de Redes CHOSYN ha sido trabajado de formas diversas. Por su importancia, relevancia y adaptabilidad, diversos autores han trabajado y aplicado el concepto a diferentes casos de estudio implementando artificios algebraicos como los balances atómicos y estequiométricos de especies químicas, herramientas propias de la programación matemática como decisiones lógicas y disyunciones, consideraciones referentes a la equidad, justicia social y reparto equitativo de obligaciones y utilidades para todas las partes involucradas dentro de un complejo de transformación industrial. De igual manera, aspectos referentes a los conceptos de integración másica y energética han sido abordados en diversos casos de estudio en lo que concierne al diseño óptimo de Redes CHOSYN.

**El-Halwagi et al. (2014)** introducen el concepto de “Redes CHOSYN” el cual presenta características particulares de gran importancia para esquemas industriales de transformación química donde su día a día involucra la operación y manejo de especies químicas compuestas principalmente por átomos de Carbono, Hidrógeno y Oxígeno. Sintetizan una red macroscópica, Red CHOSYN, a partir de balances atómicos y estequiométricos de especies químicas. Se desarrollan varias representaciones estructurales, evaluaciones comparativas y formulaciones matemáticas de optimización para sintetizar e incorporar posibles configuraciones de Red CHOSYN de una manera rentable. Posteriormente, **Topolski et al. (2017)** adoptaron el modelo de inquilino-arrendador en la síntesis de una Red CHOSYN. Emplean un enfoque multi-escala de optimización para identificar y apuntar a los participantes arrendatarios dentro del complejo industrial para determinar puntos de referencia para plantas individuales y para la totalidad del Parque Eco-Industrial. Examinan distintos escenarios cooperativos y no cooperativos. Por último, tratan de extender el alcance del estudio a la inclusión de químicas basadas en el nitrógeno. Adicionalmente, **Al-Fadhli et al. (2018)** incorporaron un esquema de multi operación de un complejo químico en función de la disponibilidad estacional de algunas variables, encuentran necesaria la idea de implementar múltiples modos de operación. Cada modo de operación esta caracterizado por

diferentes flujos y composiciones de corrientes integradas. Centran su trabajo en elaborar un enfoque multi período al diseño de una Red CHOSYN considerando múltiples modos de operación durante el año.

**El-Halwagi et al. (2018)** abordaron el desafío que suponen las fluctuaciones en el rendimiento de las plantas participantes enfatizando en la incertidumbre involucrada en las corrientes intercambiadas en una Red CHOSYN. Emplean un enfoque estocástico para la caracterización de las corrientes y la evaluación de la confiabilidad en el diseño de un Parque Eco-Industrial. Realizan un análisis de confiabilidad empleando una función de estado limite, como el método de confiabilidad de primer orden bajo restricciones relevantes para el caso de estudio. Por otra parte, **Panu et al. (2018)** direccionaron el diseño de un parque Eco-Industrial mediante la síntesis de una Red CHOSYN con enfoque en la conversión de CO<sub>2</sub> en productos químicos de valor agregado manteniendo restricciones ambientales para todo el sistema. El estudio se enfoca en la identificación de principales reacciones que conviertan corrientes de CO<sub>2</sub> en productos de valor agregado con la finalidad de monetizar estas corrientes de desecho y generar un sistema simplificado y sistemático para la selección y diseño de procesos de separación característicos que son aplicables para cierta fuente de CO<sub>2</sub>. Árboles de búsqueda son incorporados para guiar la selección del diseño y los sistemas de separación dados ciertos indicadores clave del desempeño del complejo e indicadores económicos. De igual manera, **Juárez-García et al. (2018)** implementaron el diseño de una Red CHOSYN para el conjunto de 5 plantas químicas apuntando a objetivos tales como, minimización de recursos frescos, minimización de descargas residuales al ambiente, minimización de costos de operación y maximización de ganancias además de determinar la posible instalación de nuevas plantas de procesamiento empleando 2 enfoques de optimización. Un primer enfoque mediante un modelo de programación lineal incorporando balances atómicos de especies para determinar el mínimo uso de recursos frescos y descargas. Un segundo enfoque que involucra un método simultaneo empleando decisiones lógicas y programación disyuntiva para determinar la configuración óptima de la red de intercepción. **Topolski et al. (2019)** abordaron el diseño de una Red CHOSYN mediante la inclusión de integración másica y energética en la evaluación comparativa y la síntesis de las

configuraciones de la red. Además de los beneficios de la integración de masa y calor se explora una mayor reducción del uso de recursos mediante la incorporación de una instalación de trigeneración integrada, por último, el resultado del estudio de caso muestra la relación sinérgica entre cada planta participante.

**Panu et al. (2019)** integraron un esquema de Red CHOSYN orientando la problemática de la generación de CO<sub>2</sub> en conversión de productos de valor agregado reduciendo de manera simultánea la huella de carbono en todo el sistema. Proponen un enfoque de optimización y síntesis multi escala. Emplean información estequiométrica y atómica de especies en conjunto con información económica para establecer referencias acerca de la utilización de corrientes de proceso, adquisición de fuentes externas de materia y descargas de CO<sub>2</sub>. Utilizan esquemas de pre-síntesis para desarrollar políticas optimas en el diseño de tecnología para secuencias de separación de CO<sub>2</sub>.

**Juárez-García et al. (2020)** presentaron un algoritmo de optimización basado en programación matemática para el diseño teórico de una Red CHOSYN en un complejo de transformación química, enfatizando en esquemas de equidad y bienestar social, teoría de la justicia y enfoques de Nash, para comparar diferentes esquemas de localización para la red de intercambio de materiales e identificar cual esquema provee una solución más adecuada y justa para las distintas partes involucradas en la operación de un complejo químico.

Adicionalmente, **Juárez-García et al. (2021)** proponen un enfoque sistemático para incorporar simulaciones detalladas de procesos a lo largo de las distintas etapas de la síntesis de una Red CHOSYN. Este enfoque propuesto implica el uso de simuladores de proceso asistidos por computadora y optimización simultánea para la síntesis de una Red CHOSYN, el trabajo se centra en un caso de estudio que involucra 5 plantas existentes y un conjunto de 7 plantas candidatas que se pueden incorporar al esquema de simbiosis industrial. Los resultados esquematizan diferentes arreglos y configuraciones con las nuevas plantas integradas, minimización en el uso de materia prima, asignación de corrientes externas e internas e información de los costos totales de operación.

**El-Halwagi et al. (2021)** incorporaron conceptos de sostenibilidad y seguridad industrial como parte del criterio multiobjetivo para el diseño de una Red CHOSYN. Elaboran un modelo universal y riguroso para el diseño óptimo de una Red CHOSYN relacionando objetivos económicos, sostenibles y referentes a la seguridad industrial, utilizan un cuadro económico para conciliar múltiples criterios utilizando la métrica de retorno de la inversión ponderada por seguridad y sostenibilidad.

Referente al empleo de herramientas pertenecientes al campo de la Inteligencia Artificial en su modalidad de Machine Learning aplicado al diseño y síntesis de procesos, **López-Flores et al. (2021)** elaboraron esquemas para la integración de corrientes industriales de calor residuales y aprovecharlo para la generación de refrigeración y electricidad a través de redes de intercambio de calor en conjunto con ciclos Rankine orgánicos, ciclos de refrigeración por absorción y ciclos de reformado de vapor. Basan el enfoque de solución en la interacción entre estrategias de optimización metaheurísticas y deterministas. El enfoque de solución metaheurístico se desarrolla a través de paquetería como Excel en conjunto con Aspen Plus. El enfoque de optimización determinista se realiza empleando la plataforma de modelado general algebraico GAMS. Desarrollan un modelo matemático basado en una superestructura que considera todas las interconexiones en la red de intercambio de calor, además de incorporar objetivos referentes al impacto económico, ambiental y social.

Adicionalmente, **López-Flores et al. (2023)** proponen una herramienta novedosa de optimización para incorporar herramientas de machine learning al concepto conocido como el nexo agua-energía-alimentos. El enfoque incorpora tecnologías convencionales y no convencionales para la regeneración de recursos, uso y distribución, considerando análisis de ciclo de vida, seguridad en el nexo, y beneficios económicos orientados a la sostenibilidad como principales objetivos. Corroboran entonces la utilidad de los modelos de machine learning para predecir resultados de modelos mixtos enteros no lineales.

### 2.3. JUSTIFICACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

La RED CHOSYN es un esquema orientado a complejos de transformación química en donde su operación diaria involucra compuestos provenientes de los hidrocarburos. El apropiado uso de los recursos tales como masa y energía en este tipo de complejos de transformación es un factor crítico al momento de evaluar costos y la sustentabilidad de los procesos. Es por ello que en los últimos años se ha vuelto atractiva la idea de incorporar esquemas de “simbiosis industrial”, mediante la síntesis y diseño de parques Eco-Industriales que poseen como principal característica el reciclaje y compartimiento de recursos naturales, precursores químicos, desechos e incluso infraestructura relacionada con las operaciones y procesos unitarios que se involucran en la operación diaria de dichos complejos de transformación química, sin embargo, debido a la naturaleza “compleja” de las operaciones unitarias y procesos unitarios desarrollados en estos parques industriales frecuentemente las formulaciones de modelos matemáticos de optimización propuestos recaen en la clasificación de modelos “altamente no convexos” por las características de no linealidad de las expresiones matemáticas que modelan el comportamiento de la infraestructura necesaria para desempeñar las actividades en planta. Por lo anterior, surge la necesidad de elaborar esquemas de optimización empleando herramientas híbridas de simulación, inteligencia artificial y programación matemática que aporten a la resolución de dichas problemáticas industriales haciendo énfasis en la simplificación de los modelos matemáticos de optimización. Hasta este momento, los algoritmos de optimización que se han reportado para la síntesis de redes CHOSYN requieren de hacer simplificaciones considerables a los modelos, con el fin de poder formular y resolver problemas de optimización convexos. Esto conlleva un error significativo en los resultados. Es por ello por lo que en este proyecto de investigación se propone integrar modelos de Machine Learning empleando perfiles de datos de simulaciones de proceso rigurosas para producir modelos de optimización generales que puedan aplicarse y resolverse de manera eficiente y conducir a resultados óptimos globales de los problemas rigurosamente planteados.

## **2.4. OBJETIVOS**

### **2.4.1. OBJETIVO GENERAL**

Este proyecto de investigación tiene por objetivo general el desarrollo de una herramienta híbrida de optimización combinada con inteligencia artificial y programación matemática que permita la síntesis y diseño de la configuración óptima de un complejo de transformación química basado en redes CHOSYN mediante esquemas de reciclaje e integración másica y energética, empleando herramientas propias de los campos simulación modular secuencial, inteligencia artificial y optimización.

### **2.4.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Desarrollar una estrategia general que permita el diseño óptimo de parques eco-industriales a través de Redes CHOSYN utilizando herramientas de inteligencia artificial integradas con programación matemática.
- Analizar el caso de estudio de un complejo petroquímico convencional donde intervengan procesos de relevancia para la industria química.
- Considerar la integración de nuevos procesos sostenibles que se puedan integrar a los procesos existentes a través de un esquema de inquilino-arrendador.
- Desarrollar métricas de sustentabilidad adecuados para poder evaluar correctamente estos nuevos esquemas integrados a través de Redes CHOSYN.
- Implementar herramientas de Machine-Learning para modelar matemáticamente el complejo de transformación en conjunto con modelos clásicos propios de la Ingeniería Química y Optimización Determinista.

### **2.4.3. HIPÓTESIS**

El diseño de una estrategia híbrida que integre el uso de herramientas pertenecientes al campo de la inteligencia artificial en su modalidad de Machine Learning en conjunto con algoritmos propios de la optimización determinista nos permitirá capturar el comportamiento de variables de proceso importantes a través de perfiles de datos para modelar dichos comportamientos, capturarlos e incorporarlos a modelos matemáticos deterministas de optimización empleando diversas plataformas de codificación y por tanto, obtener valores óptimos para nuestras variables de decisión y lograr generar escenarios óptimos dentro de un esquema que exige la utilización y gestión adecuada de recursos limitados generando mayores ingresos económicos así como disminuyendo el impacto ambiental.

# MARCO TEÓRICO

### **III. MARCO TEÓRICO**

Recientemente, la síntesis de Redes CHOSYN ha sido propuesta para integración multiescala de industrias de proceso que en su operación diaria involucran el procesamiento de diversas especies químicas. Dicha integración (máscica/energética) involucra el diseño óptimo de la configuración y arreglo de la infraestructura necesaria para realizar las operaciones y/o procesos unitarios necesarios para el correcto funcionamiento del complejo industrial. Tales operaciones pueden involucrar en su seno etapas de mezclado, calentamiento/enfriamiento, reacción, separación, presurización, asignación de especies y corrientes participantes, etc. Por la naturaleza “compleja” de las operaciones unitarias y procesos unitarios desarrollados dentro de un parque Eco-Industrial los modelos matemáticos que representan el comportamiento de dichos procesos generalmente tienen características de alta no linealidad por tanto llegan a ser difíciles en su solución, debido esta razón las herramientas actuales de inteligencia artificial pueden ser implementadas con objeto de simplificar los modelos que representan el comportamiento de los equipos involucrados y formular modelos teóricos de optimización.

#### **3.1. GENERALIDADES**

##### **3.1.1. INTENSIFICACIÓN DE PROCESOS**

Desde hace algunos años en Ingeniería Química se maneja un concepto llamado intensificación de procesos (IP), dicho concepto busca desarrollar procesos más seguros, con altas eficiencias en los equipos involucrados, reducir el tamaño de estos y costos de operación, además de generar la menor cantidad posible de residuos y obtener la mayor cantidad de productos con menor consumo de materia prima. En intensificación de procesos se busca el desarrollo de nuevas tecnologías con aplicación inmediata en la industria, desde luego esta requiere tiempo de investigación y la conformación de equipos de ingeniosos de trabajo. Al diseñar equipos altamente eficientes y de tamaños reducidos, la seguridad mejora bastante ya que, en lugar de tener dos o tres equipos, se tiene uno solo y los riesgos potenciales se reducen en este mismo orden, de igual manera al compactar las operaciones en un solo equipo la generación de residuos, gases, emisiones, costos de operación y consumos energéticos se ven reducidos de manera considerable.

La intensificación de procesos químicos se refiere a la combinación y optimización de diversas etapas u operaciones en una planta química para mejorar la eficiencia, reducir costos y minimizar impactos ambientales. Su objetivo principal es obtener mejores resultados utilizando menos recursos, ya sea en términos de tiempo, energía, materias primas o costos.

En ingeniería química, los procesos reactivos son por excelencia la madre de la intensificación de procesos ya que están diseñados para ser capaces de realizar de manera simultánea operaciones y procesos unitarios, un ejemplo clásico de proceso intensificado es la columna de destilación reactiva, donde su diseño permite incorporar etapas de reacción y etapas de destilación en un mismo equipo, es decir, realiza dos tareas en un solo equipo de proceso, desde luego la intensificación de procesos no se limita solo a procesos reactivos, todo aquel diseño que resulte en una simplificación de las tareas en una industria química se puede considerar como un ejemplo de intensificación de procesos.

La Intensificación de procesos entonces es una disciplina que enfrenta y busca desarrollar tecnologías que revolucionen el ámbito de la transformación industrial.

### **3.1.2. INTEGRACIÓN MÁSCA Y ENERGÉTICA**

La integración de procesos se define como una herramienta de diseño, reajuste y optimización. Se divide en integración másica y energética. La integración másica es una herramienta general enfocada en la distribución y manipulación de corrientes de proceso y equipos de proceso que transportan y procesan materiales precursores e incluso productos diversos. Debido a que la integración másica y energética proporcionan una visión integral y completa que nos permite entender de forma general los flujos globales de masa y calor dentro de los procesos la síntesis de redes de reciclaje y reúso constituye una de las herramientas más poderosas que nos permite la minimización simultánea del uso de recursos frescos y descargas de desechos y calores residuales mediante el empleo de ciclos internos de corrientes, es necesario resaltar que antes de cualquier reciclaje estas corrientes de desecho

son tratadas para colocarlas en condiciones adecuadas de operación y reintegrarlas a alguna corriente de proceso (El-Halwagi, 2006).

Las principales técnicas de integración másica se enfocan generalmente en la minimización de flujos y corrientes dentro del proceso. Integración energética hace referencia principalmente a esquemas trabajados a partir de redes de intercambio de calor, cuyo propósito es la reutilización de flujos de calor residual generados al interior del proceso debido a las operaciones desarrolladas.

Diversos autores han contribuido en investigación relevante en este tópico, se han presentado revisiones bibliográficas de diversas metodologías propuestas para la síntesis y reúso de redes de reciclo e intercambio, principales metodologías se clasifican en técnicas gráficas, técnicas algebraicas y basadas en modelos de programación matemática (Dunn y El-Halwagi, 2003).

Técnicas llamadas análisis de cascada de agua (WCA) (Manan et al., 2004) han sido reportadas y empleadas en esquemas de integración másica para minimizar flujos de desecho y consumo de agua en plantas de proceso de forma análoga al método de Pinch Point para la minimización de calores residuales. De igual manera, se han propuesto métodos gráficos para determinar objetivos de regeneración de un solo contaminante en sistemas de reciclo e integración, Feng et al. (2007) reportan que este tipo de sistemas minimizan el consumo de agua y descargas de desechos industriales. Métodos gráficos basados en curvas compuestas y diagramas de exceso de agua para la minimización del uso del agua y desechos emitidos al ambiente han sido también generados y aplicados en esquemas de integración másica (Hallale et al., 2002).

Dentro de las técnicas algebraicas reportadas, se han realizado trabajos que hacen referencia a algoritmos heurísticos para minimización de efluentes industriales que contienen un solo contaminante en una red de reciclo de agua (Gomes et al., 2007).

Modelos basados en programación matemática para el diseño de redes de intercepción de recursos dentro del proceso y reúso de materiales mediante superestructuras que permiten establecer un modelo de programación lineal, han sido generados y aplicados en esquemas relacionados a la integración másica y de procesos (Gabriel et al., 2005).

### **3.1.3. PARQUE ECO-INDUSTRIAL**

En general, los parques eco-industriales son comunidades de empresas que comparten un sitio en común y cuyos residentes no solo buscan lograr un mejor desempeño económico sino también ambiental y social. Como el objetivo de un Parque Eco-Industrial va más allá de la maximización de las ganancias económicas los elementos o participantes dentro de un (IEP) trabajan en conjunto y en estrecha cooperación para lograr beneficios colectivos.

Un Parque Eco-Industrial presenta ventajas importantes a nivel empresa pues sus soluciones están orientadas a la mejora de la productividad, eficientar el uso de recursos y materiales, implementación de tecnologías que faciliten la sinergia y simbiosis industrial además de incorporar practicas socialmente responsables que mejoren el ámbito laboral y minimicen las externalidades negativas.

Un parque Eco-Industrial se define como la integración de múltiples plantas en la misma zona a fin de compartir de manera eficiente recursos como agua y otros materiales, energía e infraestructura de una manera tal que mejoren los beneficios con respecto de los esquemas tradicionales de integración (Rubio-Castro et al., 2012).

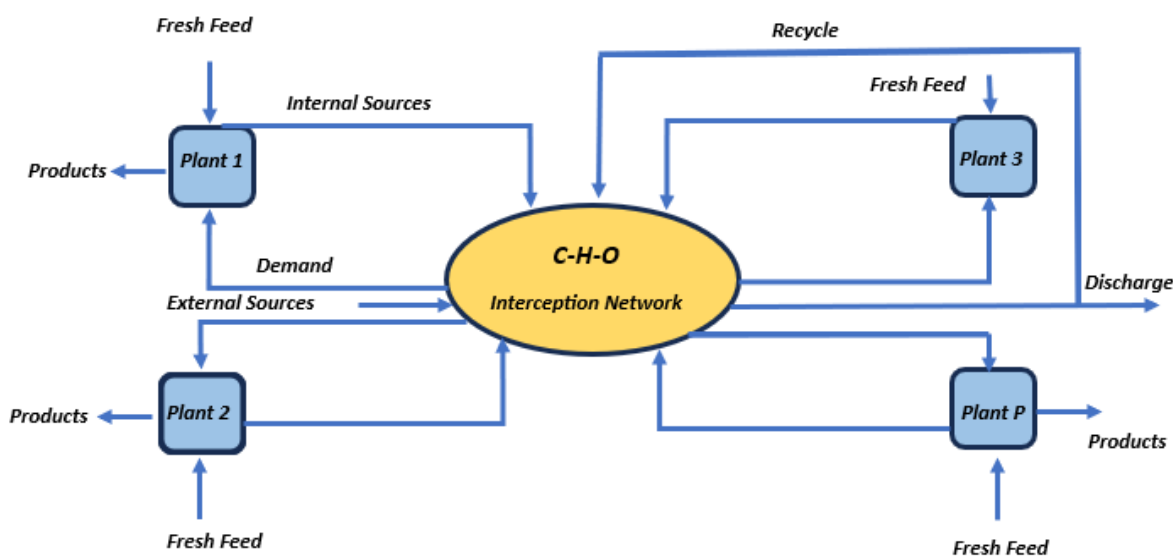
Se han realizado revisiones bibliográficas acerca de los distintos tipos de redes encontradas en los parques Eco-Industriales, diferentes métodos y funciones objetivo que se formulan para diseñar óptimamente un parque Eco-Industrial en conjunto con análisis crítico del estado del arte proponiendo algunas rutas para mejorar las metodologías encontradas en la literatura.

Algunos otros modelos de programación matemática para la síntesis de un Parques-Eco-Industriales integrando corrientes de agua con el propósito de minimizar el impacto negativo de efluentes industriales descargados en cuencas y otros cuerpos de agua naturales, estos modelos han considerado la creación de múltiples parques, localización, tamaño y tareas, además integran el análisis de flujo de material en conjunto con estrategias de reciclaje de corrientes de agua (López-Díaz et al., 2015).

### **3.1.4. REDES DE CARBONO-HIDRÓGENO-OXÍGENO (CHOSYN'S)**

Las redes CHOSYN son esquemas orientados al diseño óptimo de complejos de transformación química los cuales en su día a día desarrollan procesos de transformación

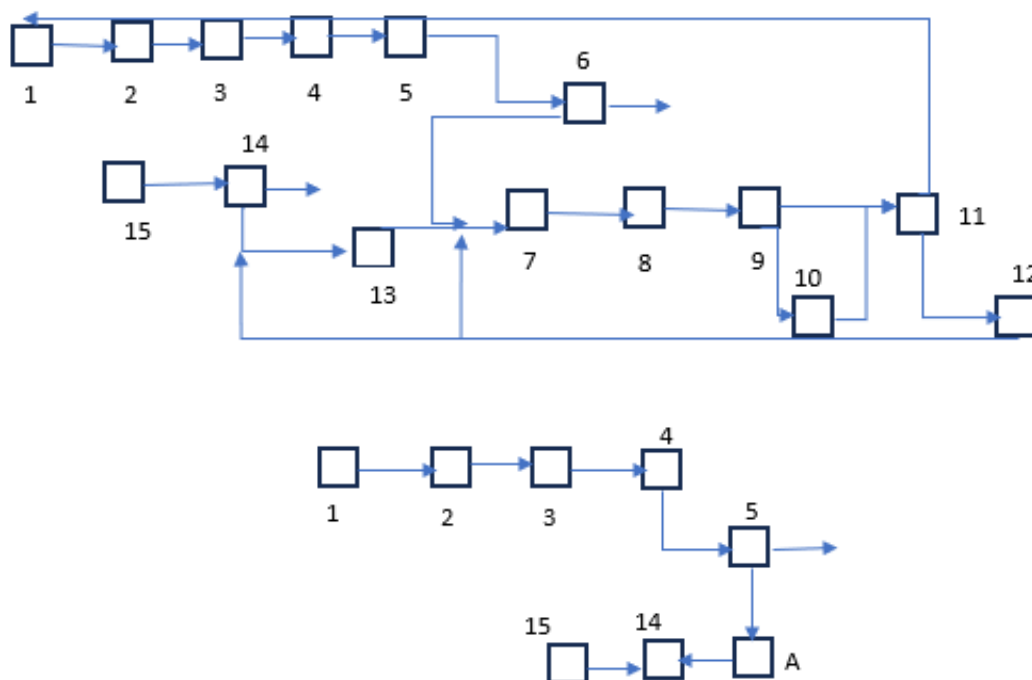
involucrando corrientes de diversa naturaleza química principalmente hidrocarbonados (C-H-O). El concepto de Red CHOSYN como base para la integración tiene muchas ventajas para inducir la sinergia industrial puesto que elementos como carbono, hidrógeno y oxígeno son bloques primarios fundamentales para la conformación de una infinidad de compuestos de interés industrial los cuales pueden ser integrados en los procesos e intercambiados entre ellos. Una característica particular de la Red CHOSYN es la posibilidad de establecer objetivos a través de artificios algebraicos como los balances atómicos y estequiométricos de especies, con los cuales podemos configurar puntos de referencia para el diseño macroscópico de complejos de transformación química que involucran múltiples procesos. Tienen como principal objetivo la minimización de los costos asociados al funcionamiento y operación de los complejos industriales empleando en su interior redes de intercepción conformadas por equipos de proceso con lo cual se busca lograr el reciclo de corrientes de material entre las plantas involucradas, eficientar el uso de los equipos industriales involucrados, reducir consumos de materiales y servicios externos, así como minimizar descargas y emisiones al medio ambiente.



**Figura 1.** Ejemplo de una Red CHOSYN.

### 3.1.5. SIMULACIÓN MODULAR SECUENCIAL

También conocida como simulación en modo análisis, corresponde a un enfoque de la simulación computacional de procesos, donde el usuario ingresa o alimenta información al sistema (datos de entrada) y el sistema (módulos) devuelve una determinada respuesta a esos grados de libertad alimentados (datos de salida). Este tipo de simulación resuelve de manera secuencial cada uno de los módulos propuestos en el diagrama de flujo de proceso hasta lograr convergencia total en todo el esquema. Para ello emplea diversas estrategias de resolución las cuales se encuentran programadas a manera de rutinas de cálculo en cada uno de los módulos y obedecen o están en función de los grados de libertad alimentados al sistema, es decir, en función de los grados de libertad el sistema diseña matrices de incidencia con las cuales selecciona la o las mejores rutas de solución para los sistemas de ecuaciones que se generan en cada uno de los equipos de proceso.



**Figura 2.** Dígrafo dirigido y condensado, filosofía modular secuencial.

### 3.1.6. MACHINE LEARNING

Machine Learning representa un campo amplio en tecnología de la información, estadística, probabilidad, inteligencia artificial, psicología, neurobiología y muchas otras disciplinas científicas. Empleando Machine Learning los problemas pueden ser resueltos simplemente construyendo un modelo que represente de forma adecuada un conjunto seleccionado de datos. Machine Learning se ha convertido en un área especializada en enseñar a las computadoras a emular el pensamiento humano y ha llevado el campo de la estadística a una amplia disciplina que produce teorías estadísticas fundamentales de los procesos de aprendizaje computacional. Machine Learning es acerca de la creación de algoritmos que son capaces de enseñar a los ordenadores. Los algoritmos de Machine Learning son creados entonces para ser capaces de representar el enfoque del cerebro humano al momento de aprender alguna herramienta o conocimiento. Hoy en día estos algoritmos de Machine Learning han sido desarrollados, actualizados y mejorados para aplicar una variedad de complejos cálculos matemáticos a un set amplio de datos seleccionados (Big Data), los cuales calculan más rápido los resultados. Los algoritmos de Machine Learning se organizan de acuerdo al tipo de salida que se desea después del entrenamiento, esta organización se clasifica en:

- Aprendizaje Supervisado.
- Aprendizaje No supervisado.
- Aprendizaje Semi Supervisado.
- Aprendizaje Reforzado.
- Transducción.

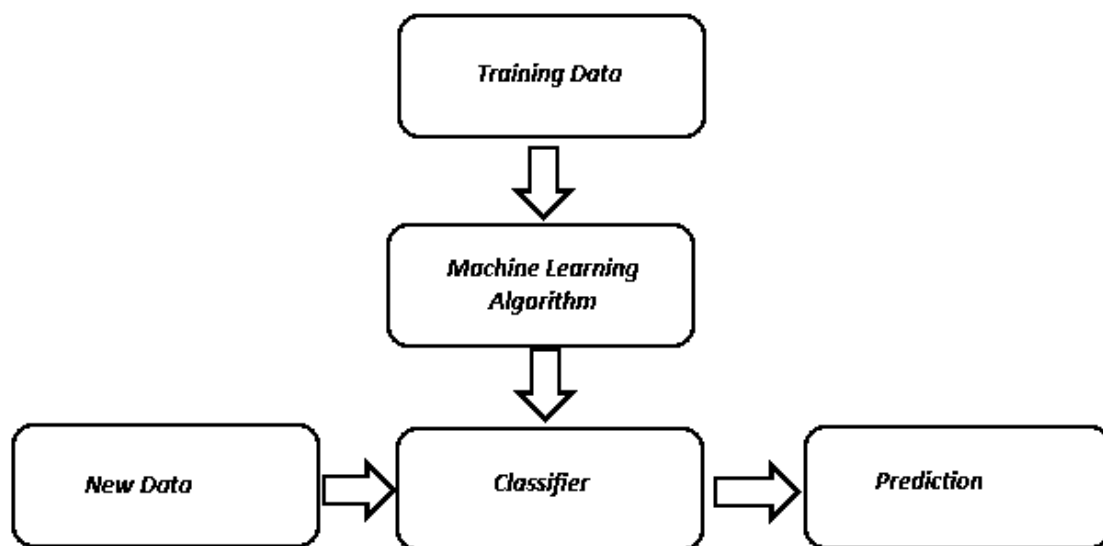
Machine Learning es una disciplina del campo de la inteligencia artificial que a través de algoritmos dota a los ordenadores de la capacidad de identificar patrones en datos masivos y elaborar predicciones. Este aprendizaje permite a los computadores realizar tareas específicas de forma autónoma, es decir, sin necesidad de ser programados. El termino fue usado por primera vez en 1959. Sin embargo, ha ganado relevancia en los últimos años debido al aumento de la capacidad de computación y al boom de los datos.

### **3.1.7. APRENDIZAJE SUPERVISADO**

El aprendizaje supervisado requiere datos de entrada y salida etiquetados durante la fase de entrenamiento del ciclo de vida del Machine Learning. Estos datos son a menudo etiquetados por un científico de datos en la fase de preparación antes de usarse para entrenar y probar el modelo. Se llama aprendizaje supervisado porque al menos parte de este modelo requiere supervisión humana. La gran mayoría de datos disponibles son datos brutos sin etiquetar y por lo general se requiere interacción humana para etiquetar con precisión los datos. En los algoritmos de entrenamiento supervisado las clases son predeterminadas. Estas clases son creadas a manera de set finito de datos definido por el humano, lo que en la práctica significa que un cierto segmento de datos será etiquetado con estas clasificaciones, la tarea del algoritmo de Machine Learning es encontrar patrones en estos datos y construir modelos matemáticos, estos modelos se evalúan en base a su capacidad de predicción en relación con las medidas de variación en los datos mismos.

Es importante marcar la diferencia entre los dos principales modelos de entrenamiento supervisado, modelos de clasificación y de regresión. Los modelos de regresión mapean las entradas a un dominio de valores real. Los clasificadores mapean las entradas en clases predefinidas. La clasificación es uno de los modelos de entrenamiento más estudiados, posiblemente uno con la mayor relevancia práctica. EL proceso de aprendizaje o entrenamiento en un modelo simple de Machine Learning se divide en 2 etapas principalmente, entrenamiento y prueba o validación.

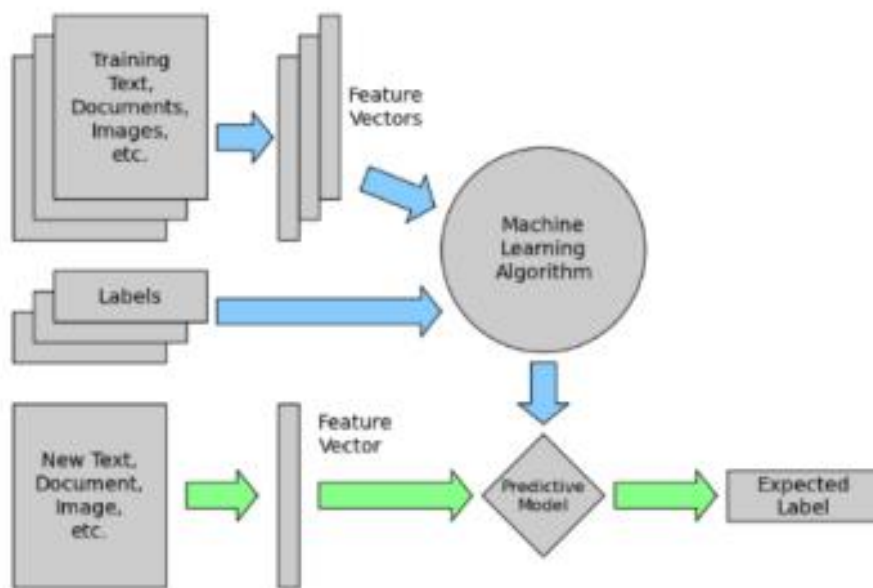
En el proceso de entrenamiento las muestras o los datos etiquetados son tomados como entradas y sus características son aprendidas por el algoritmo de entrenamiento y entonces construye el modelo matemático. En la etapa de prueba, el modelo utiliza un motor de ejecución para generar la predicción de los datos etiquetados y estos datos etiquetados son la salida del modelo.



**Figura 3.** Proceso de entrenamiento supervisado.

El aprendizaje supervisado es la técnica de entrenamiento más común en problemas de clasificación ya que el propósito es enseñarle a la máquina un sistema de clasificación que hemos creado anteriormente. Comúnmente en el aprendizaje supervisado se deja la entrada indefinida como una entrada en donde se conocen las salidas esperadas. La tarea principal es construir un estimador capaz de predecir la clasificación de un objeto dadas por un conjunto de características.

Después el algoritmo de entrenamiento recibe un set de características como entradas junto con las salidas correctas y entonces aprende comparando su salida actual con las salidas corregidas para encontrar errores (de forma similar a las corrientes de reciclo en la filosofía modular secuencial) y modifica el modelo de acuerdo con esto.



**Figura 4.** Modelo de aprendizaje supervisado.

Dependiendo de la naturaleza del objetivo “Y”, el aprendizaje supervisado puede ser clasificado:

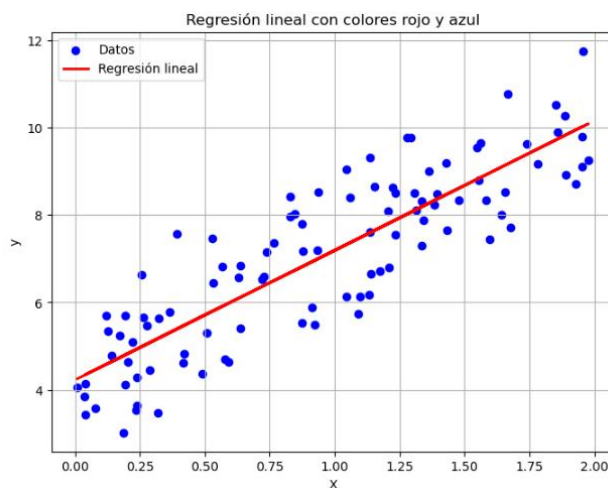
- Si “Y” tiene valores en un set fijo de salidas categorizadas (enteras), la tarea de predecir “Y” se denomina clasificación.
- Si “Y” tiene valores puntuales flotantes, la tarea de predecir “Y” se denomina regresión.

### 3.1.8. REGRESIÓN LINEAL

El objetivo de la regresión lineal, como parte de la familia de los algoritmos de regresión, es encontrar relaciones y dependencias entre variables. Representa una relación de modelado entre una variable dependiente escalar continua “Y” y una o más variables explicativas, como, variables independientes, variables de entrada, características, datos observados, atributos, dimensiones, etc., denotada como “X” mediante una función lineal. En el análisis de regresión el objetivo es predecir una variable continua objetivo, mientras que en la clasificación se busca predecir una etiqueta a partir de un conjunto finito.

El modelo para una regresión múltiple que involucra combinaciones lineales de variables de entrada toma la forma:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + e$$



**Figura 5.** Representación gráfica de la regresión lineal

La regresión lineal también pertenece a la categoría de algoritmos de aprendizaje supervisado. Esto significa que entrenamos el modelo en un set de datos etiquetados (datos de entrenamiento) y después usamos el modelo para predecir etiquetas en datos sin etiquetar (datos de validación). Como se observa en la Figura 5, el modelo (línea roja) es calculado usando datos de entrenamiento (puntos azules) donde cada punto tiene etiqueta conocida (eje y) para ajustar los puntos con la mayor precisión posible minimizando el valor de una función

de pérdida elegida. Después podemos utilizar el modelo para predecir etiquetas desconocidas (solo se conoce  $x$  y se busca predecir el valor de  $y$ ).

### **3.1.9. REDES NEURONALES ARTIFICIALES**

Una red neuronal artificial (ANN en inglés ó RNA en español) consiste en una serie de unidades de procesamiento interconectadas de manera densa, llamadas neuronas, por tener un comportamiento similar y ser un artificio que emula el interaccionar de las neuronas biológicas (Varela et al., 2011). Las Unidades de procesamiento reciben y procesan y transmiten señales, tal como las neuronas biológicas.

Los componentes principales del funcionamiento de una red neuronal son:

- Un conjunto de unidades de procesamiento (neuronas).
- Un estado de activación (variable de estado).
- Una función de salida para cada unidad.
- Un conjunto de conexiones (patrón de conectividad).
- Un conjunto de reglas para propagar las señales de salida a través de la RNA.
- Una regla de combinación.
- Una regla de activación.
- Una regla de modificación.
- Un ambiente en el cual opera la RNA.

### **3.1.10. HIPERPARÁMETROS DE UNA RED NEURONAL**

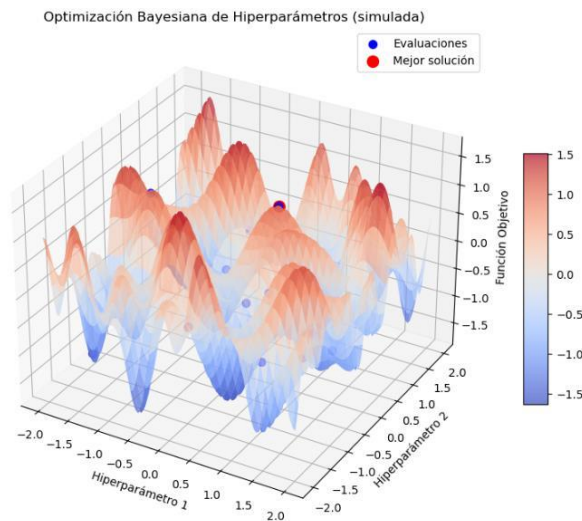
Los hiperparámetros de una red neuronal se refieren a configuraciones externas al modelo que se configuran y establecen antes de iniciar el proceso de entrenamiento y que influyen directamente en el rendimiento, la velocidad de aprendizaje y la capacidad de generalización del modelo. No se aprenden automáticamente, es decir, no son características que se extraigan de las bases de datos alimentadas al modelo, sino que deben definirse manualmente o mediante técnicas de búsqueda (como grid search o Bayesian optimization).

**Principales hiperparámetros en una red neuronal:**

- Tasa de aprendizaje (learning rate).

- Número de capas ocultas y numero de neuronas por capa.
- Funcion de activación.
- Numero de épocas (epochs).
- Tamaño del batch (batch size).
- Optimizador.
- Regularización.

La mayor parte de los modelos de Machine Learning tienen una serie de parámetros que no pueden aprenderse de los datos, sino que tienen que ser establecidos previo entrenamiento. Dado que no existe forma de conocer de antemano cuáles son los valores adecuados, la única forma de identificarlos es probando diferentes combinaciones y evaluarlas mediante métodos de validación por resampling (cross-validation, bootstrapping). A este proceso se le conoce como model tuning.



**Figura 6.** Optimización de hiperparámetros.

### 3.1.11. FORMULACIÓN MATEMÁTICA

El apartado de formulación matemática resulta ser un apartado o una parte del proceso de optimización muy importante y mucho muy interesante pues es en esta parte del trabajo en donde se busca modelar la realidad a manera de o auxiliándonos de expresiones matemáticas o ecuaciones de conservación (Entradas = Salidas). En la formulación matemática se busca modelar la realidad de los procesos químicos industriales, en específico, el problema de optimización planteado haciendo uso de la matemática técnica y las reglas fundamentales del cálculo.

Es por esto por lo que expresiones tradicionales y clásicas de las materias fundamentales en Ingeniería Química toman papel, pues a través de balances de materia, balances de energía, restricciones de operatividad de los procesos, restricciones de sumatoria, restricciones referentes a los diversos tipos de equilibrio que encontramos en las operaciones y procesos unitarios nos ayudarán a modelar matemáticamente el problema de optimización en nuestro complejo de transformación químico.

La formulación matemática de un problema de optimización implica la construcción de un modelo matemático que represente el problema de optimización planteado, generalmente en ingeniería química estas formulaciones parten de la modelación de un súper diagrama de flujo de proceso o superestructura en donde se representa de forma algebraica todas las posibles soluciones mediante funciones regularmente del tipo lineal (Zimmerman et al., 1993). Entonces, para formular un modelo matemático de optimización se requiere representar el o los objetivos mediante sus respectivas funciones objetivo, también se requiere delimitar las regiones de búsqueda de la solución óptima mediante restricciones al modelo, estas restricciones igualmente son funciones matemáticas que interrelacionan variables de decisión que tienen efecto en la o las funciones objetivo construidas y están orientadas a la minimización y/o maximización de la función objetivo.

$$\begin{aligned}
\min Z &= \sum_k c_k + f(x) + d^T y \\
&\text{s. t.} \\
&g(x) \leq 0 \\
&r(x) \leq 0 \\
&r(x) + Dy \leq 0 \\
&Ay \geq 0 \\
&\forall \left[ \begin{array}{c} Y_{i,k} \\ h_{i,k}(x) \leq 0 \\ c_k = Y_{i,k} \end{array} \right] k \in SD \\
&\Omega(Y) = \text{True} \\
&x \in R, y \in \{0,1\} \\
&Y \in \{\text{True}, \text{False}\}, c_k \geq 0
\end{aligned}$$

**Figura 7.** Modelo matemático de optimización, restricciones y decisiones lógicas.

### 3.1.12. PROGRAMACIÓN MATEMÁTICA

La programación matemática es una técnica ampliamente utilizada en la toma de decisiones adecuadas para la gestión de planeación productiva en conjunto con modelos matemáticos de optimización los cuales son herramientas normativas basadas en teoría marginalista y calculan el plan óptimo a partir del concepto del mejor uso alternativo de los factores productivos.

La programación matemática se clasifica en:

- Programación Lineal.
- Programación No lineal.
- Programación Mixta-Entera.
- Programación Dinámica y Estocástica.

La programación matemática en su forma más popular, la programación lineal, es una herramienta ampliamente utilizada en campos diversos de la ingeniería, economía y manejo de los recursos provenientes de la naturaleza, problemas de transporte y de planificación productiva son objetos típicos de análisis en esta disciplina. Economistas rurales emplean programación lineal para determinar la distribución óptima de recursos disponibles, costos mínimos de la formulación de raciones, equilibrio espacial en la producción de bienes agrícolas y almacenamiento.

En ingeniería química existen esquemas de principal importancia donde la programación lineal tiene gran influencia, modelos clásicos como transporte, asignación y mezclado (Pooling problem), Plant Layout, entre otros.

La programación lineal no es una técnica reciente. Se aplicó por primera vez en la época de la segunda guerra mundial para la resolución de problemas de transporte y dieta de soldados. En 1947 el Dr. George Dantzing y sus colaboradores desarrollaron el método “simplex” como un procedimiento de solución que permite reducir el número de pasos necesarios para optimizar un modelo de programación lineal. Dantzing aplicó este enfoque para resolver el programa de abastecimiento de la Fuerza Aérea Norteamericana, resaltando su posible aplicación a diversos campos de la ingeniería y decisiones empresariales.

Esta metodología permite entonces elegir un plan óptimo correspondiente al valor extremo de un determinado objetivo, expresado mediante la forma de una función lineal que representa las actividades posibles, respetando o sujeta a restricciones lineales, ya sean de igualdad o desigualdad y que limitan la región de búsqueda. La programación lineal tiene en su haber 3 componentes principales:

- Función Objetivo.
- Actividades (Variables de decisión).
- Restricciones.

Las funciones objetivo generalmente son representaciones matemáticas lineales de los objetivos plasmados en la realidad, dichas funciones objetivo están relacionadas con las variables de decisión del problema en cuestión y están orientadas a la maximización o

minimización de alguno de estos criterios de valor (variables de decisión). Las actividades posibles corresponden a cada uno de los procesos alternativos que se pueden efectuar en el desarrollo de una actividad, como, por ejemplo: producción de bienes y servicios, compra de insumos, contratación de personal, distribución de tiempos, venta de productos, entre otras actividades. Las actividades necesariamente tendrán que ser numerosas para que tenga sentido el uso de la programación lineal, de no ser así la solución al problema sería trivial, cuanto mayor sea el número de alternativas mejor y más útil será el empleo del método. Un tercer componente son las restricciones. Las alternativas se hallan sujetas a restricciones o limitaciones dadas por condiciones que se deben cumplir, como, por ejemplo, no sobrepasar los recursos disponibles o cumplir con determinados requisitos mínimos. Para existir una mejor solución dentro de un conjunto de soluciones, los recursos deben hallarse disponibles en cantidades limitadas. Tratándose de un método de optimización, se considera el mejor uso de los recursos en relación con la función objetivo.

# **METODOLOGÍA**

#### IV. METODOLOGÍA

Debido al interés de implementar el esquema de Red CHOSYN en un complejo de transformación empleando herramientas híbridas de simulación modular secuencial, Machine Learning y programación matemática, se vuelve necesaria una propuesta metodológica específica para abordar el caso de estudio incorporando las herramientas antes mencionadas por lo cual se proponen las siguientes etapas de ejecución.

La metodología propuesta sigue un enfoque sistemático que integra el modelado y la simulación de equipos de proceso, la construcción de modelos sustitutos de ML y la optimización de la red CHOSYN (véase la **Figura 8**). Esta metodología comprende cinco pasos clave, que se describen a continuación:

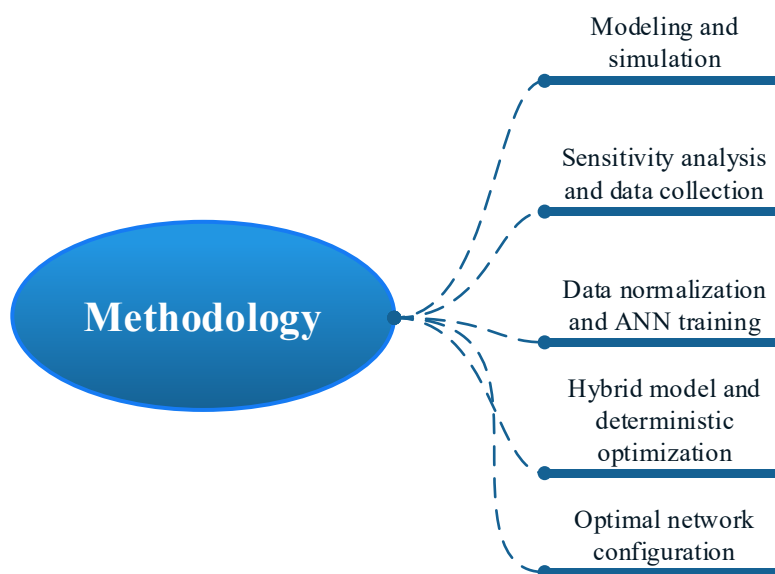
1. Modelado y Simulación: El enfoque metodológico comienza con la simulación de las unidades implicadas en la red CHOSYN. Estas unidades representan diversos procesos industriales, como el reformado autotérmico del metano, la deshidrogenación del propano, el craqueo del etano para obtener etileno, la producción de monómeros de acetato de vinilo, el reformado del metano con vapor para obtener CO<sub>2</sub>, el reformado del metano con vapor /H<sub>2</sub> para obtener gas de síntesis, el reformado en seco del metano, la conversión de metanol en propileno, la síntesis de metanol a partir de gas de síntesis, la síntesis de metanol a partir de CO<sub>2</sub>, la reacción de cambio agua-gas y la carbonilación de metanol para obtener ácido acético.
2. Análisis de Sensibilidad y recolección de datos: Una vez finalizadas las simulaciones, se realizan análisis de sensibilidad con las herramientas de Aspen Plus para cada proceso, con el fin de generar bases de datos que caractericen su comportamiento operativo dentro de rangos de parámetros definidos. Se identifican los grados de libertad clave y se especifican las variables objetivo-relevantes, incluida la producción de diversos hidrocarburos de valor añadido, los costes operativos totales, las emisiones de CO<sub>2</sub> y el consumo de energía. Este paso proporciona los datos esenciales necesarios para el análisis y la optimización posteriores.

3. Entrenamiento de Redes Neuronales Artificiales: Los conjuntos de datos seleccionados se normalizan para garantizar consistencia en la escala y la distribución de todas las variables. A continuación, los datos normalizados se dividen en subconjuntos de entrenamiento y validación para desarrollar y evaluar el rendimiento del modelo de RNA. La optimización de los hiperparámetros se lleva a cabo para mejorar la precisión predictiva del modelo y garantizar una generalización robusta. Este paso permite a la RNA aprender eficazmente y captar las complejas relaciones no lineales inherentes a los datos del proceso, facilitando un modelado fiable del proceso y la construcción de modelos surrogados.
4. Optimización Multi-Objetivo del modelo Híbrido: En primer lugar, se propone una superestructura integrada para definir las interconexiones lógicas y funcionales entre los procesos que componen la red CHOSYN. Posteriormente, esta superestructura se formula como un modelo matemático que incorpora las RNA previamente entrenadas para cada proceso. Estas RNA se integran en el marco global mediante flujos de materiales, energía e información, que captan las interacciones entre los distintos componentes del sistema. Una vez establecida la formulación matemática completa, incluidas las variables de decisión, las restricciones operativas y las funciones objetivo, se aplica un enfoque de optimización multiobjetivo. Esta optimización persigue simultáneamente maximizar el rendimiento económico y minimizar el impacto ambiental, dando lugar a una curva de Pareto que permite identificar configuraciones operativas equilibradas desde el punto de vista técnico, económico y ambiental. Por otra parte, la reformulación de los modelos subrogados de redes neuronales artificiales también nos permite conocer los valores óptimos para las condiciones operativas de las unidades de proceso.
5. Configuración Óptima de la red: Una vez determinados los valores óptimos de las variables de decisión y las condiciones de funcionamiento de cada unidad de proceso, se establece la configuración óptima de la red CHOSYN. Esta configuración define la disposición más eficaz para integrar los flujos de hidrocarburos dentro del sistema. Garantiza una utilización eficaz de las interconexiones entre procesos, optimizando

el flujo de materias primas, productos intermedios y energía de acuerdo con los objetivos económicos y medioambientales previamente definidos.

Los resultados de la metodología se analizan y discuten para evaluar la eficacia y el enfoque del esquema propuesto para diseñar y establecer la integración masiva de flujos de procesos en la red.

#### DIAGRAMA METODOLÓGICO:



**Figura 8.** Representación esquemática de la metodología propuesta.

# PLANTEAMIENTO

## 4.1. Descripción de los procesos

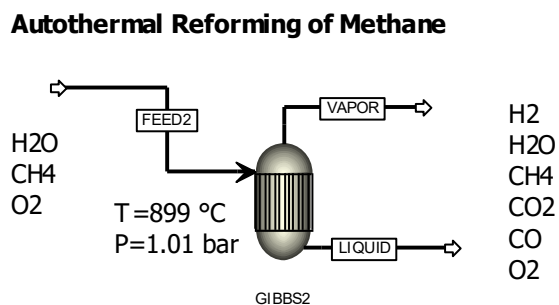
En esta sección se describen los distintos procesos que intervienen en la red CHOSYN.

### 4.1.1. Reformado autotérmico de metano

Tres corrientes bifásicas, metano, agua y aire (como fuente de oxígeno) se mezclan a fondo a temperatura ambiente con proporciones molares especificadas de agua/metano ( $H_2O/CH_4$ ) y oxígeno/metano ( $O_2/CH_4$ ). La mezcla resultante se introduce en el reactor de reformado autotérmico (ATR) a una temperatura de entrada prescrita ( $T^{ATR}$ ). Suponiendo que el sistema se comporte como un reactor adiabático de lecho compacto, las principales reacciones implicadas se describen a continuación (Wu et al., 2012).



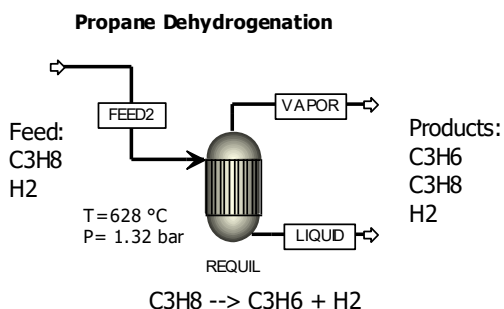
El reactor produce dos flujos de salida (véase la **Figura 9**), siendo la fase de vapor rica en hidrógeno, agua y monóxido de carbono.



**Figure 9.** Sección de reacción para el reformado autotérmico de metano.

#### 4.1.2. Deshidrogenación de propano

La deshidrogenación del propano (PDH) es un proceso clave para producir propileno (véase la **Figura 10**), un monómero esencial en la industria petroquímica. La reacción es endotérmica y reversible, lo que significa que su rendimiento está limitado por el equilibrio termodinámico. Para mejorar la conversión y la selectividad, se han desarrollado varias configuraciones de reactores, incluidos los reactores de doble zona de lecho fluidizado (DFBZR) y los reactores equipados con membranas permeables al hidrógeno. La reacción principal puede describirse como sigue:

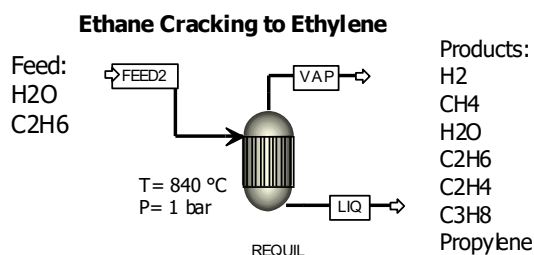


**Figura 10.** Sección de deshidrogenación de propano.

#### 4.1.3. Craqueo de etano a etileno

El craqueo al vapor es la tecnología más utilizada y consolidada para la producción de etileno (véase la Figura 4). Más del 85% del etileno mundial se fabrica a partir de líquidos de gas natural (LGN) coproducidos con gas de esquisto (Swift et al., 2011). El proceso implica calentar el etano a altas temperaturas, normalmente en el rango de 750-850 °C, a bajas presiones de aproximadamente 1,5-3,5 bares. En estas condiciones, se producen reacciones de deshidrogenación que producen principalmente etileno e hidrógeno (Takaoka, 1967). Otros productos importantes son metano, etano, propileno, propano, hidrógeno y butadieno. El tiempo de permanencia de la mezcla de reacción en los serpentines de craqueo es de aproximadamente 0,1-0,5 segundos (Takaoka, 1967). Se inyecta vapor en el reactor para reducir la presión parcial

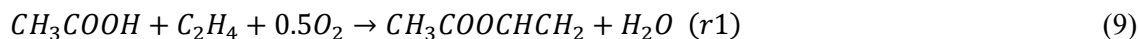
de los hidrocarburos, lo que a su vez disminuye la velocidad de formación de coque a altas temperaturas. La química del proceso se rige por las cuatro reacciones principales siguientes:

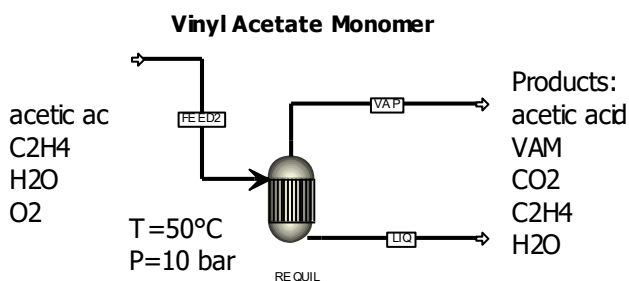


**Figura 11.** Sección de reacción para el craqueo de etano a etileno.

#### 4.1.4. Monómero de acetato de vinilo

El proceso industrial en fase vapor para producir monómero de acetato de vinilo (VAM) está bien establecido y se basa en materias primas ampliamente disponibles (Daniels, 1989). El acetato de vinilo se utiliza principalmente como monómero en la síntesis de acetato de polivinilo y diversos copolímeros. Entre los principales fabricantes estadounidenses se encuentran Hoechst-Celanese, Union Carbide y Quantum Chemical. DuPont cuenta actualmente con una planta de producción de VAM en LaPorte (Texas). Tres materias primas, etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), oxígeno (O<sub>2</sub>) y ácido acético (HAC), se convierten en acetato de vinilo (VAM), generándose agua (H<sub>2</sub>O) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) como subproductos (véase la **Figura 12**). El proceso implica las dos reacciones químicas siguientes:





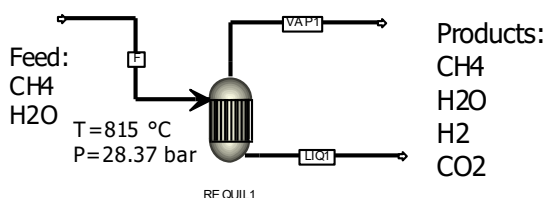
**Figura 12.** Sección de reacción para el monómero de acetato de vinilo.

#### 4.1.5. Reformado de metano con vapor $CO_2/H_2$

La mayor parte del hidrógeno que se produce hoy en día en Estados Unidos se obtiene mediante el reformado con vapor de metano, un proceso de producción maduro en el que se utiliza vapor a alta temperatura (700 -1000°C) para producir hidrógeno a partir de una fuente de metano, como el gas natural. En este proceso, el metano reacciona con el vapor a una presión de entre 3 y 30 bares en presencia de un catalizador para producir hidrógeno, metano, agua y una cantidad relativamente pequeña de dióxido de carbono. El reformado con vapor es endotérmico, es decir, hay que suministrar calor al proceso para que se produzca la reacción (véase la **Figura 13**). La principal reacción que se produce en esta unidad es la siguiente:



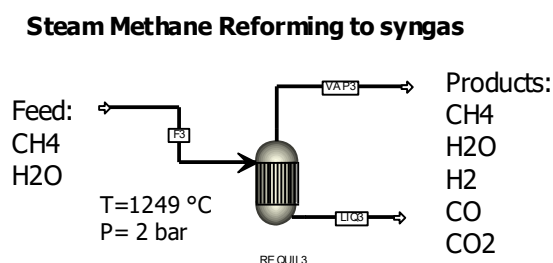
#### Steam Methane Reforming to $CO_2$ , $H_2$



**Figure 13.** sección de reformado de metano con vapor a  $CO_2/H_2$

#### 4.1.6. Reformado de metano con vapor a Syngas

El reformado de metano con vapor, o (SMR), procesa materias primas, que van desde el gas natural a la nafta ligera, mezcladas con vapor para producir un efluente de gas de síntesis rico en hidrógeno, con una relación típica ( $H_2/CO$ ) de 3:1 a 5:1. Las plantas basadas en SMR se utilizan más comúnmente para producir hidrógeno u otro producto de gas de síntesis. Las plantas basadas en SMR se utilizan normalmente para producir un producto de hidrógeno o una combinación de una corriente de hidrógeno y otro producto de gas de síntesis. En una planta basada en SMR, una mezcla calentada de hidrocarburos y vapor fluye a través de tubos llenos de catalizador dentro de un horno llamado reformador. En presencia de un catalizador de níquel, la mezcla reacciona con el vapor para producir hidrógeno y óxidos de carbono mediante las siguientes reacciones:

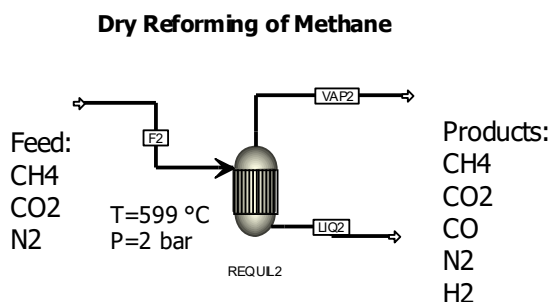


**Figura 14.** Sección de reformado de metano con vapor a syngas.

#### 4.1.7. Reformado seco de metano

En el proceso de reformado seco de metano (DMR), el metano  $CH_4$  reacciona con el dióxido de carbono  $CO_2$  para producir monóxido de carbono (CO) e hidrógeno ( $H_2$ ) en una proporción molar 1:1 (véase la **Figura 15**). Dado que esta reacción consume el gas de efecto invernadero ( $CO_2$ ), se considera atractiva tanto desde el punto de vista de la sostenibilidad como de la protección del medio ambiente (Asif et al., 2018; Kiss et al., 2011). Además, la

DMR genera gas de síntesis (syngas) con una relación ( $H_2/CO$ ) cercana a 1, que es deseable cuando se mezcla con fuentes de syngas de alto contenido en hidrógeno, como las procedentes del reformado de metano con vapor (SMR), para equilibrar la alimentación de la síntesis de Fischer-Tropsch (FT). La reacción es altamente endotérmica y requiere un aporte de calor significativo. Las altas temperaturas no sólo favorecen la conversión, sino que también ayudan a reducir la formación de coque. Por ello, el reactor suele diseñarse como un horno con tubos cargados de catalizador. Dado que la reacción DMR es muy sensible a la presión, la presión de funcionamiento suele mantenerse baja (en torno a 2 bar). La reacción principal es la siguiente:

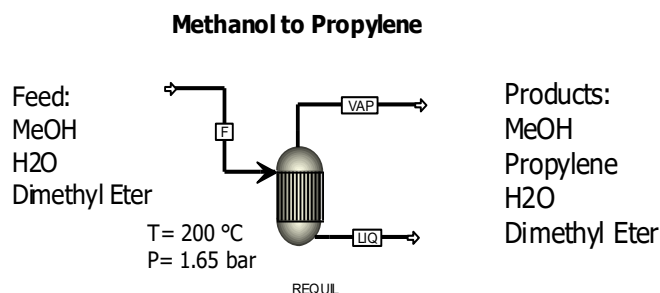


**Figura 15.** Sección de reformado seco de metano.

#### 4.1.8. Metanol a propileno

En el reactor de metanol a propileno (MTP), el metanol y el dimetiléter (DME) se convierten en olefinas, principalmente propileno (véase la Figura 8). El reactor funciona a una temperatura de 200 °C y a una presión de 1,65 bar para conseguir una alta selectividad de propileno y una elevada conversión metanol/DME. La corriente de salida del reactor MTP consiste principalmente en propileno, dimetiléter, metanol y agua. La etapa final del mecanismo de reacción consiste en el craqueo de los hidrocarburos superiores para convertirlos de nuevo en propileno. Para evitar la formación de coque, que provoca la

desactivación del catalizador, el reactor MTP funciona en condiciones isotérmicas. La reacción principal puede representarse de la siguiente manera:

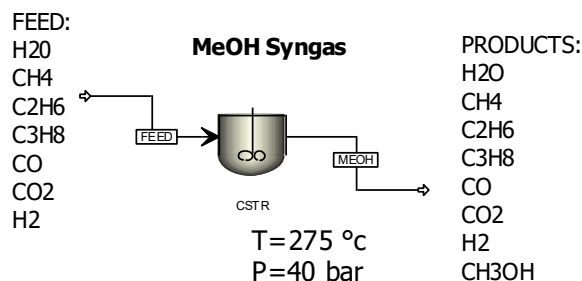


**Figura 16.** Sección de metanol a propileno.

#### **4.1.9. Metanol a partir de syngas**

En el reactor de metanol a partir de gas de síntesis (MFS), el gas de síntesis (syngas) y el dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) se convierten principalmente en metanol (véase la **Figura 17**). El reactor funciona a una temperatura de 275 °C y a una presión de 40 bar para conseguir tanto una alta selectividad de metanol como una alta conversión de metanol/H<sub>2</sub>. La corriente de salida del reactor MFS se compone de metanol, hidrógeno, etano, metano, propano, dióxido de carbono, monóxido de carbono y agua. Para evitar la formación de coque, que conduce a la desactivación del catalizador, el reactor funciona en condiciones isotérmicas. En esta unidad de proceso tienen lugar las dos reacciones siguientes:

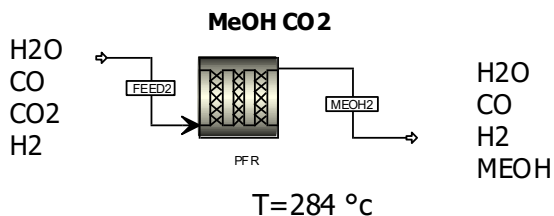




**Figura 17.** Sección de reacción de metanol a partir de syngas.

#### 4.1.10. Metanol a partir de $CO_2$

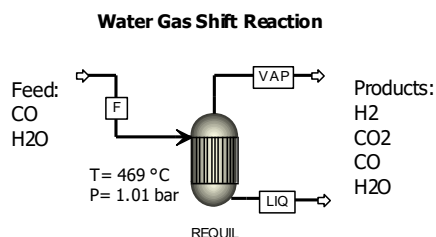
Las vías de reacción para la síntesis de metanol a partir de ( $CO_2/CO$ ) y  $H_2$  en un catalizador metálico de Cu (véase la **Figura 18**) se describen en Kondratenko et al. (2013). La química real de la hidrogenación de  $CO_2$  implica tres reacciones de equilibrio principales (r1, r2 y r3), que conducen a la formación de metanol y agua. La conversión de  $CO_2$  a  $CO$  (r2) es endotérmica; por lo tanto, un aumento de la temperatura favorece el equilibrio en este caso. Por el contrario, las conversiones de  $CO$  y  $CO_2$  en metanol (r1 y r3) son exotérmicas, lo que significa que un aumento de la temperatura desplaza el equilibrio desfavorablemente.



**Figura 18.** Sección de reacción de metanol a partir de  $CO_2$ .

#### 4.1.11. Desplazamiento del gas de agua

En las refinerías, las unidades de generación de hidrógeno son esenciales para suministrar el hidrógeno que requieren diversos procesos. La tecnología más adoptada para este fin es el reformado con vapor, que ofrece la mayor eficiencia energética y la mejor relación coste-beneficio a gran escala (Hiblot et al., 2016). La producción de hidrógeno mediante reformado con vapor suele llevarse a cabo en dos etapas secuenciales. En la primera, el vapor y un hidrocarburo se convierten en gas de síntesis (syngas). En la segunda etapa, un reactor de cambio agua-gas (WGSR) convierte el monóxido de carbono del gas de síntesis en dióxido de carbono, generando así hidrógeno adicional (véase la **Figura 19**). Aunque el WGSR es un paso intermedio en el proceso de producción de hidrógeno, desempeña un papel crucial en las plantas petroquímicas debido a la creciente demanda de hidrógeno (Olateju et al., 2017). La reacción principal puede describirse como sigue:

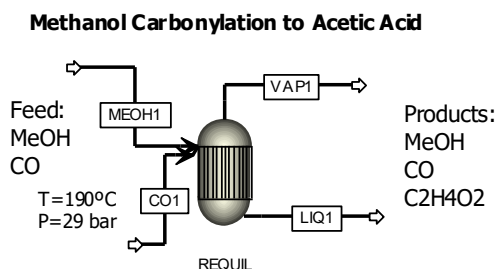


**Figura 19.** Sección de reacción para WGSR.

#### 4.1.12. Carbonilación de metano a ácido acético

El ácido acético es un importante producto químico y un reactivo esencial utilizado principalmente en la producción de acetato de celulosa, monómero de acetato de vinilo, acetato de polivinilo, anhídrido acético, ácido monocloroacético, ésteres de acetato, ácido tereftálico y diversas fibras y tejidos sintéticos (Le Berre et al., 2014). La reacción es moderadamente exotérmica y se favorece termodinámicamente a temperaturas más bajas. Las operaciones industriales suelen realizarse en un rango de temperaturas de 15-200 °C y presiones de 30-60 bar (Le Berre et al., 2014). La carbonilación del metanol se representa mediante la siguiente ecuación estequiométrica, con un rendimiento teórico de carbono de

del 100%:



**Figure 20.** Sección de carbonilación de metano a ácido acético.

#### 4.2. Análisis de sensibilidad y recolección de datos

Las **Tablas 1-3** resumen los rangos de parámetros obtenidos a partir del análisis de sensibilidad realizado durante la simulación de los procesos individuales que componen la red CHOSYN propuesta. Este análisis desempeña un papel fundamental en la identificación de los grados de libertad más influyentes asociados a cada proceso, estableciendo así ventanas operativas clave y generando conjuntos de datos robustos para el desarrollo de modelos de RNA precisos y eficientes. Además, el análisis de sensibilidad apoya la selección de las relaciones relevantes entre las variables de entrada y salida, aumentando la capacidad de la RNA para captar el comportamiento no lineal de cada operación unitaria y mejorando la capacidad de generalización de los modelos sustitutos utilizados en la optimización.

**Tabla 1.** Variables y parámetros para las unidades de proceso ATR, PDH, ECE, and VAM.

| <i>Procesos</i> | <i>Variables</i>          | <i>Símbolos</i> | <i>Rangos</i>         |
|-----------------|---------------------------|-----------------|-----------------------|
| <i>ATR</i>      | Flujo de metano (kmol/h)  | $F^{CH_4}$      | 8,856.04 - 8,887.04   |
|                 | Flujo de oxígeno (kmol/h) | $F^{O_2}$       | 4,823.05 - 4,856.62   |
|                 | Flujo de agua (kmol/h)    | $F^{H_2O}$      | 13,156.12 - 13,194.01 |
|                 | Temperatura (°C)          | $T^{ATR}$       | 857.26 - 947.73       |
|                 | Presión (bar)             | $P^{ATR}$       | 0.65 - 1.47           |

|                                      |                                 |              |                      |
|--------------------------------------|---------------------------------|--------------|----------------------|
| <i>Deshidrogenación de Propano</i>   | Flujo de propano (kmol/h)       | $F^{C_3H_8}$ | 5,568.65 - 5,625.65  |
|                                      | Flujo de hidrógeno (kmol/h)     | $F^{H_2}$    | 2,769.82 - 2,826.82  |
|                                      | Temperatura (°C)                | $T^{PDH}$    | 599 - 656            |
|                                      | Presión (bar)                   | $P^{PDH}$    | 1.06 - 1.59          |
| <i>Craqueo de Etano a Etileno</i>    | Flujo de etano (kmol/h)         | $F^{C_2H_6}$ | 220.4 - 276.4        |
|                                      | Flujo de agua (kmol/h)          | $F^{H_2O}$   | 183.6 - 239.6        |
|                                      | Temperatura (°C)                | $T^{ECE}$    | 814 - 868            |
|                                      | Presión (bar)                   | $P^{ECE}$    | 0.72 - 1.28          |
| <i>Monomero de acetato de vinilo</i> | Flujo de ácido acético (kmol/h) | $F^{HAC}$    | 2,279.98 - 2,335.984 |
|                                      | Flujo de etileno (kmol/h)       | $F^{C_2H_6}$ | 245.76 - 302.76      |
|                                      | Flujo de agua (kmol/h)          | $F^{H_2O}$   | 8.47 - 46.47         |
|                                      | Flujo de oxígeno (kmol/hr)      | $F^{O_2}$    | 109.38 - 165.38      |
|                                      | Temperatura (°C)                | $T^{VAM}$    | 22 - 77              |
|                                      | Presión (bar)                   | $P^{VAM}$    | 7.21 - 12.90         |

**Tabla 2.** Variables y parámetros para las unidades de proceso SMRCO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>, SMRTS, DRM and MTP.

| <i>Procesos</i>                               | <i>Variables</i>                     | <i>Símbolos</i>   | <i>Rangos</i> |
|-----------------------------------------------|--------------------------------------|-------------------|---------------|
| <i>Reformado de metano con vapor a CO2/H2</i> | Flujo de metano (kmol/h)             | $F^{CH_4}$        | 248 - 308     |
|                                               | Flujo de agua (kmol/h)               | $F^{H_2O}$        | 1,082 - 1,142 |
|                                               | Temperatura (°C)                     | $T^{SMRCO_2/H_2}$ | 785 - 845     |
|                                               | Presión (bar)                        | $P^{SMRCO_2/H_2}$ | 8.37 - 48.37  |
| <i>Reformado de metano con vapor a syngas</i> | Flujo de metano (kmol/h)             | $F^{CH_4}$        | 248 - 308     |
|                                               | Flujo de agua (kmol/h)               | $F^{H_2O}$        | 804 - 864     |
|                                               | Temperatura (°C)                     | $T^{SMRS}$        | 1,219 - 1,279 |
|                                               | Presión (bar)                        | $P^{SMRS}$        | 1.5 - 2.5     |
| <i>Reformado seco de metano</i>               | Flujo de metano (kmol/h)             | $F^{CH_4}$        | 230.7 - 287.7 |
|                                               | Flujo de dióxido de carbono (kmol/h) | $F^{CO_2}$        | 236 - 293     |
|                                               | Flujo de nitrógeno (kmol/h)          | $F^{N_2}$         | 5.04 - 5.57   |

|                           |                                |            |               |
|---------------------------|--------------------------------|------------|---------------|
| <i>Metano a propileno</i> | Temperatura (°C)               | $T^{DRM}$  | 571 - 626     |
|                           | Presión (bar)                  | $p^{DRM}$  | 1.54 - 2.46   |
|                           | Flujo de metanol (kmol/h)      | $F^{HAC}$  | 622 - 677     |
|                           | Flujo de agua (kmol/h)         | $F^{H_2O}$ | 2,897 - 2,954 |
|                           | Flujo de dimetil éter (kmol/h) | $F^{DME}$  | 2,897 - 2,954 |
|                           | Temperatura (°C)               | $T^{DME}$  | 172 - 227     |
|                           | Presión (bar)                  | $p^{DME}$  | 1.36 - 1.94   |

**Tabla 3.** Variables y parámetros para las unidades de proceso MFS,  $MFCO_2$ , WGSR, MCHAC.

| <i>Procesos</i>                                  | <i>Variables</i>                      | <i>Simbolos</i>  | <i>Rangos</i>         |
|--------------------------------------------------|---------------------------------------|------------------|-----------------------|
| <i>Metanol a partir de syngas</i>                | Flujo de agua (kmol/h)                | $F^{H_2O}$       | 2,120.3 - 2,180.3     |
|                                                  | Flujo de metano (kmol/h)              | $F^{CH_4}$       | 289 - 329             |
|                                                  | Flujo de etano (kmol/h)               | $F^{C_2H_6}$     | 9.5 - 69.5            |
|                                                  | Flujo de propano (kmol/h)             | $F^{C_3H_8}$     | 1.2 - 41.2            |
|                                                  | Flujo de monóxido de carbono (kmol/h) | $F^{CO}$         | 637.1 - 697.1         |
|                                                  | Flujo de dióxido de carbono (kmol/h)  | $F^{CO_2}$       | 61.3 - 121.3          |
|                                                  | Flujo de hidrógeno (kmol/h)           | $F^{H_2}$        | 2,211.55 - 2,268.4    |
|                                                  | Temperatura (°C)                      | $T^{MFS}$        | 245 - 305             |
|                                                  | Presión (bar)                         | $p^{MFS}$        | 10 - 70               |
| <i>Metanol a partir de CO2</i>                   | Flujo de dióxido de carbono (kmol/h)  | $F^{CO_2}$       | 10 - 68               |
|                                                  | Flujo de monóxido de carbono (kmol/h) | $F^{CO}$         | 2 - 58                |
|                                                  | Flujo de hidrógeno (kmol/h)           | $F^{H_2}$        | 24,379.91 - 24,435.91 |
| <i>Reacción de desplazamiento de gas de agua</i> | Flujo de agua (kmol/h)                | $F^{H_2O}$       | 7.61 - 2140.3         |
|                                                  | Temperatura (°C)                      | $T^{MFCO_2}$     | 256 - 313             |
|                                                  | Masa de catalizador (kg)              | $CATWT^{MFCO_2}$ | 5,953 - 6,047         |
|                                                  | Flujo de monóxido de carbono (kmol/h) | $F^{CO}$         | 26 - 83               |
|                                                  | Flujo de agua (kmol/h)                | $F^{H_2O}$       | 41 - 97               |

|                                         |                                       |              |             |
|-----------------------------------------|---------------------------------------|--------------|-------------|
| Carbonilación de metano a ácido acético | Temperatura (°C)                      | $T^{WGSR}$   | 440 - 497   |
|                                         | Presión (bar)                         | $P^{WGSR}$   | 0.59 - 1.49 |
|                                         | Flujo de metanol (kmol/h)             | $F^{CH_3OH}$ | 115 - 175   |
|                                         | Flujo de monóxido de carbono (kmol/h) | $F^{CO}$     | 132 - 188   |
|                                         | Temperatura (°C)                      | $T^{MCHAC}$  | 144 - 238   |
|                                         | Presión (bar)                         | $P^{MCHAC}$  | 10 - 48     |

El análisis de sensibilidad se realizó utilizando Aspen Plus V14 a través de las herramientas integradas disponibles en la sección Herramientas de análisis de modelos. Esta funcionalidad permite la variación sistemática de los grados de libertad seleccionados para cada reactor y permite visualizar sus efectos sobre las variables operativas muestreadas para la producción de diversos hidrocarburos objetivo. Las **Tablas 1-3** presentan las variables de decisión seleccionadas para el análisis, que sirven de base para definir el espacio de entrada en el posterior desarrollo del modelo RNA.

En la simulación del proceso de Reformado Autotérmico del Metano (ATR), se consideran cinco variables de decisión, incluyendo los flujos molares de  $CH_4$ ,  $O_2$  and  $H_2O$  [kmol/h], la temperatura en el interior del reactor ( $T^{ATR}$ ) [°C] y la presión de operación ( $P^{ATR}$ ) [bar]. Las principales variables de respuesta son los flujos de producto de hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), metano ( $P^{CH_4}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ), agua ( $P^{H_2O}$ ) [kmol/h], carga térmica neta ( $QNET^{ATR}$ ) [kWh], dióxido de carbono equivalente ( $CO_{2eq}^{ATR}$ ) [kg/año], y costos totales anuales de operación ( $TAC^{ATR}$ ) [USD/año]. Este análisis generó un total de 138 conjuntos de datos.

Para la simulación correspondiente al proceso de Deshidrogenación de Propano, se seleccionan cuatro variables de decisión en las que intervienen: flujos molares de propano ( $F^{C_3H_8}$ ) e hidrógeno ( $F^{H_2}$ ) [kmol/hr], la temperatura ( $T^{PDH}$ ) [°C], y la presión ( $P^{PDH}$ ) [bar] del equipo. Como en la simulación anterior, las principales variables de respuesta son los caudales de producto de propano ( $P^{C_3H_8}$ ), propileno ( $P^{C_3H_6}$ ), hidrógeno ( $P^{H_2}$ ) [kmol/h], y condiciones de operación como carga térmica neta ( $QNET^{PDH}$ ) [kWh], las emisiones

equivalentes de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{PDH}$ ) [kg/año] y los costos totales anuales de operación ( $TAC^{PDH}$ ) [USD /año]. Este análisis generó un total de 165 conjuntos de datos.

El análisis de sensibilidad realizado durante la simulación del proceso de craqueo de etano a etileno se llevó a cabo seleccionando cuatro variables de decisión dentro de las cuales intervienen los caudales molares de etano ( $F^{C_2H_6}$ ) y agua ( $F^{H_2O}$ ) [kmol/h], la temperatura de operación ( $T^{ECE}$ ) [°C] y la presión ( $P^{ECE}$ ) [bar]. Las variables de respuesta están compuestas por los flujos molares de productos de especies de hidrocarburos como hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), metano ( $P^{CH_4}$ ), etileno ( $P^{C_2H_4}$ ), etano ( $P^{C_2H_6}$ ), propano ( $P^{C_3H_8}$ ), agua ( $P^{H_2O}$ ), carga térmica neta asociada a los servicios de calentamiento ( $QNET^{ECE}$ ) [kwh], dióxido de carbono equivalente ( $CO_{2eq}^{ECE}$ ) [kg/año] y costes totales anuales ( $TAC^{ECE}$ ) [USD/año]. El análisis anterior proporciona un total de 140 conjuntos de datos.

El análisis de sensibilidad relativo al proceso de monómero de acetato de vinilo se llevó a cabo seleccionando seis variables de decisión que incluían flujos molares de especies como ácido acético ( $F^{HAC}$ ), etileno ( $F^{C_2H_4}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ) y oxígeno ( $F^{O_2}$ ). [kmol/h], variables operativas como la temperatura del reactor ( $T^{VAM}$ ) [°C] y la presión de funcionamiento en el equipo ( $P^{VAM}$ ) [bar]. Las variables de respuesta son las siguientes especies de productos en flujo molar, ácido acético ( $P^{HAC}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), etileno sin reaccionar ( $P^{C_2H_4}$ ), oxígeno ( $P^{O_2}$ ), monómero de acetato de vinilo ( $P^{VAM}$ ), agua ( $P^{H_2O}$ ), carga térmica neta del equipo ( $QNET^{VAM}$ ) [kWh], emisiones equivalentes de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{VAM}$ ) [kg/año], y costes totales anuales de funcionamiento del reactor ( $TAC^{VAM}$ ) [USD/año]. El análisis de sensibilidad para esta unidad de reacción arroja un total de 857 conjuntos de datos.

En la simulación referente al proceso de reformado de metano por vapor a  $CO_2/H_2$ , se seleccionan cuatro variables de decisión para realizar sus respectivos análisis de sensibilidad, estas variables incluyen los flujos molares de metano ( $F^{CH_4}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ) [kmol/h], temperatura en el interior del reactor ( $T^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ) [°C] y presión de funcionamiento ( $P^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ) [bar]. Sus variables de respuesta consisten en los flujos de producto de hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), metano ( $P^{CH_4}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), agua ( $P^{H_2O}$ ), trabajo térmico neto del reactor ( $QNET^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ) [kWh], emisiones equivalentes de dióxido de carbono

$(CO_{2eq}^{SMR_{CO_2/H_2}})$  [kg/año], y costes de operación anualizados  $(TAC^{SMR_{CO_2/H_2}})$  [usd/año]. El análisis de estos equipos de proceso arroja un total de 166 conjuntos de datos.

En cuanto al proceso de reformado de metano por vapor a syngas, se eligieron cuatro variables de decisión para realizar el correspondiente análisis de sensibilidad, dentro de las cuales se configuran flujos molares individuales de las siguientes especies, metano ( $F^{CH_4}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ) [kmol/h], temperatura ( $T^{SMRS}$ ) [°C] y presión del reactor ( $P^{SMRS}$ ) [bar]. Como variables de respuesta se siguieron los flujos de productos de especies como metano ( $P^{CH_4}$ ), ( $P^{H_2O}$ ), hidrógeno ( $P^{H_2}$ ) y monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) [kmol/hora], además de la carga térmica neta del reactor ( $QNET^{SMRS}$ ) [kWh], las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{SMRS}$ ) [kg/año] y los costes totales de explotación anualizados ( $TAC^{SMRS}$ ) [USD/año]. De este análisis se obtuvieron un total de 166 conjuntos de datos.

En cuanto al proceso de reformado en seco de metano, se eligieron 5 variables de decisión para realizar el correspondiente análisis de sensibilidad, entre las que intervienen flujos molares individuales de las siguientes especies, metano ( $F^{CH_4}$ ), dióxido de carbono ( $F^{CO_2}$ ) y nitrógeno ( $F^{N_2}$ ). [kmol/hr], así como 2 variables operativas como temperatura ( $T^{DRM}$ ) [°C] y la presión del reactor ( $P^{DRM}$ ) [bar]. Como variables de respuesta, los flujos de producto de especies como hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), metano ( $P^{CH_4}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), nitrógeno ( $P^{N_2}$ ) y monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) [kmol/h], por otro lado, también se realiza un seguimiento de la carga térmica del reactor ( $QNET^{DRM}$ ) [kWh], las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{DRM}$ ) [kg/año] y los costes totales de funcionamiento anualizados ( $TAC^{DRM}$ ) [USD/año]. De este análisis se obtuvo un total de 349 conjuntos de datos.

Para la simulación y análisis de sensibilidad del proceso de Metanol a Propileno, se eligieron cinco variables de decisión para realizar el correspondiente análisis de sensibilidad, entre las que intervienen flujos molares individuales de las siguientes especies, metanol ( $F^{MeOH}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ) y dimetiléter ( $F^{DME}$ ) [kmol/h], así como 2 variables operativas como son la temperatura ( $T^{MTP}$ ) [°C] y la presión del reactor ( $P^{MTP}$ ) [bar]. Las variables de respuesta se establecen como seguimiento de los flujos de producto de especies como metanol ( $P^{MeOH}$ ), propileno ( $F^{C_3H_6}$ ), agua ( $P^{H_2O}$ ) y dimetiléter ( $P^{DME}$ ) [kmol/h], por otro lado, también se controlan la carga térmica neta de calor en el reactor ( $QNET^{MTP}$ ) [kWh], las emisiones de

dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{MTP}$ ) [kg/año] y los costes totales de operación anualizados ( $TAC^{MTP}$ ) [USD/año]. De este análisis se obtuvo un total de 349 conjuntos de datos.

En la simulación y análisis de sensibilidad del proceso relacionado con Metanol a partir de Syngas, se seleccionaron nueve variables de decisión para realizar el análisis correspondiente, entre las que intervienen flujos molares individuales de las siguientes especies, metano ( $F^{CH_4}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ), etano ( $F^{C_2H_6}$ ), propano ( $F^{C_3H_8}$ ), monóxido de carbono ( $F^{CO}$ ), dióxido de carbono ( $F^{CO_2}$ ), hidrógeno ( $F^{H_2}$ ). [kmol/h] y variables operativas como la temperatura ( $T^{MFS}$ ) [°C] y la presión del reactor ( $P^{MFS}$ ) [bar]. Las variables de respuesta se establecen como el seguimiento de los flujos de productos de especies como agua ( $P^{H_2O}$ ), metano ( $P^{CH_4}$ ), etano ( $P^{C_2H_6}$ ), propano ( $P^{C_3H_8}$ ), monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), hidrógeno ( $P^{H_2}$ ) y metanol ( $P^{MeOH}$ ) [kmol/h], por otro lado, también se hace un seguimiento de la carga térmica del reactor ( $QNET^{MFS}$ ) [kWh] y de los costes totales de explotación anualizados ( $TAC^{MFS}$ ) [USD/año]. Este análisis arroja un total de 702 conjuntos de datos.

En la simulación y análisis de sensibilidad del proceso relacionado con Metanol a partir de  $CO_2$ , se seleccionaron seis variables de decisión para realizar el correspondiente análisis de sensibilidad, entre las que intervienen flujos molares individuales de las siguientes especies, dióxido de carbono ( $F^{CO_2}$ ), monóxido de carbono ( $F^{CO}$ ), hidrógeno ( $F^{H_2}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ) [kmol/h] y variables operativas como la temperatura ( $T^{MFCO_2}$ ) [°C], la presión del reactor ( $P^{MFCO_2}$ ) [bar] y masa del catalizador ( $CATWT^{MFCO_2}$ ) [kg]. Dentro de las variables de respuesta, se siguen los flujos de productos de especies como metanol ( $P^{MeOH}$ ), hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) y agua ( $P^{H_2O}$ ) [kmol/h]. Por otro lado, también se realiza el seguimiento de la carga térmica neta en el reactor ( $QNET^{MFCO_2}$ ) [kwh], las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{MFCO_2}$ ) [kg/año] y los costes operativos totales anualizados ( $TAC^{MTP}$ ) [USD/año]. Este análisis arroja un total de 856 conjuntos de datos.

Para la simulación del proceso de Reacción de desplazamiento del Gas de Agua, se seleccionaron cuatro variables de decisión para realizar el correspondiente análisis de sensibilidad, incluyendo flujos molares individuales de las siguientes especies, monóxido de carbono ( $F^{CO}$ ), agua ( $F^{H_2O}$ ). [kmol/h] y variables operativas como la temperatura ( $T^{WGSR}$ )

[°C] y la presión del reactor ( $P^{WGSR}$ ) [bar]. Las variables de respuesta incluyen el monitoreo de los flujos de producto de especies como hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) y agua ( $P^{H_2O}$ ). [kmol/h]. Por otro lado, también se siguen el consumo neto de calor del reactor ( $QNET^{WGSR}$ ) [kWh], las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{WGSR}$ ) [kg/año] y los costes totales de explotación anualizados ( $TAC^{WGSR}$ ) [USD/año]. De este análisis se obtuvo un total de 166 conjuntos de datos.

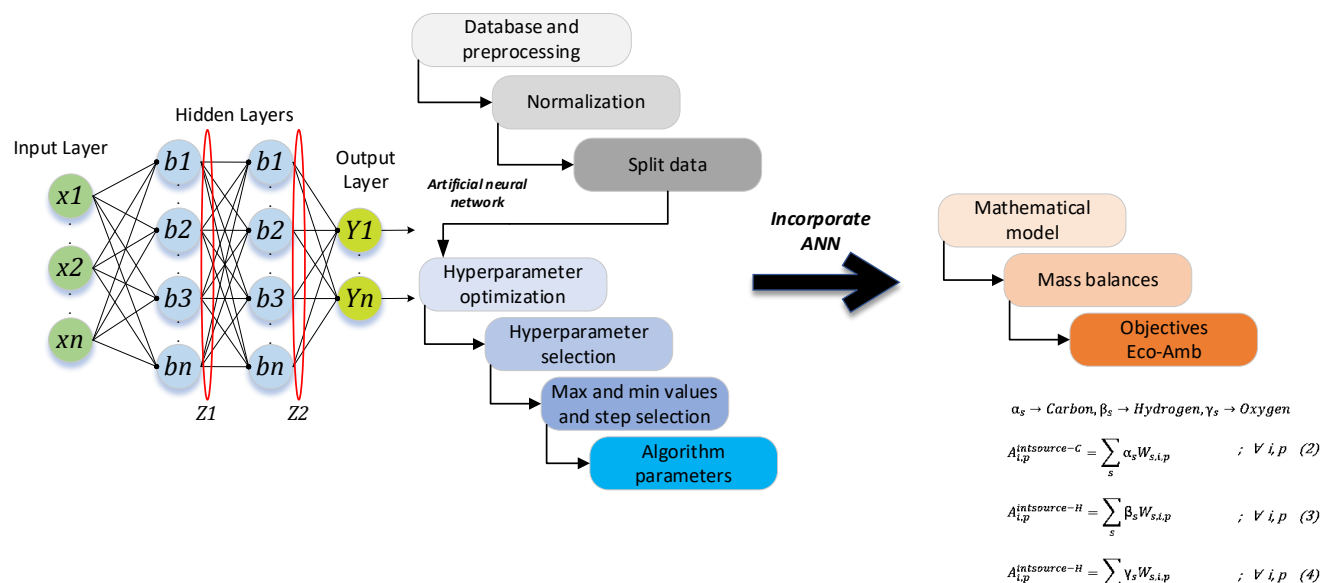
Para la simulación correspondiente al proceso de Carbonilación de Metanol a Ácido Acético, se seleccionan cuatro variables de decisión que implican, flujos molares de metanol ( $F^{MeOH}$ ) y monóxido de carbono ( $F^{CO}$ ) [kmol/h], temperatura ( $T^{MCHAC}$ ) [°C] y presión ( $P^{MCHAC}$ ) [bar] del equipo. Las principales variables de respuesta son los flujos molares de productos como metanol ( $P^{MeOH}$ ), monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) y ácido acético ( $P^{HAC}$ ) [kmol/h], consumo neto de calor en el reactor ( $QNET^{MCHAC}$ ) [kWh] y costes totales anuales de funcionamiento ( $TAC^{MCHAC}$ ) [USD/año]. Este análisis generó un total de 166 conjuntos de datos.

Es importante mencionar que cada conjunto de datos corresponde a un conjunto completo de variables de entrada y respuestas de salida generadas a través del análisis de sensibilidad, y sólo las simulaciones que convergieron con éxito y produjeron resultados factibles se retuvieron para el entrenamiento del modelo RNA (modelos sustitutos).

#### **4.2.1. Redes neuronales artificiales.**

Las RNA son una rama del aprendizaje automático dentro de la IA cuyo objetivo es imitar el comportamiento del cerebro, lo que les permite captar patrones no lineales complejos (Saeed et al., 2021; Wang et al., 2022; Malekian y Chitsaz, 2021). Una RNA básica consta de tres partes, una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida, mientras que un perceptrón multicapa (MLP) profundiza en la arquitectura introduciendo múltiples capas ocultas. Gracias a esta profundidad añadida, los MLP destacan en la resolución de problemas fuertemente no lineales, se adaptan a grandes conjuntos de datos, proporcionan predicciones rápidas tras el entrenamiento y, en general, logran una alta precisión predictiva.

La Figura 14 ilustra el flujo de trabajo desarrollado para construir e integrar el modelo de RNA en el marco de optimización. Muestra la secuencia desde el preprocesamiento de datos, la normalización y el ajuste de hiperparámetros hasta la incorporación de la RNA entrenada en el modelo matemático, que incluye balances de masas y objetivos de sostenibilidad. Esta estructura garantiza que la RNA capte eficazmente el complejo comportamiento del proceso, al tiempo que permite su perfecta integración en el problema de optimización.



**Figura 21.** Flujo de trabajo para desarrollar e integrar la RNA en el marco de optimización.

#### 4.2.2. Optimización de hiperparámetros

Está bien establecido que la selección de hiperparámetros tiene un impacto significativo en el rendimiento de los modelos de RNA. Por lo tanto, el ajuste efectivo de los hiperparámetros constituye un paso crítico durante la fase de entrenamiento (Nakata y Shimazaki, 2017). Los enfoques tradicionales, como el ensayo y error, se han empleado ampliamente para ajustar estos hiperparámetros (Li et al., 2019). Sin embargo, estos métodos a menudo son ineficientes y consumen mucho tiempo, especialmente para modelos complejos con espacios de hiperparámetros de alta dimensión. Para superar estas limitaciones, se han desarrollado y aplicado diversas estrategias de optimización, como la búsqueda aleatoria, los algoritmos

genéticos, la búsqueda en cuadrícula y la optimización bayesiana (Wu et al., 2019; Alibrahim y Ludwig, 2021). Entre estas, la optimización bayesiana ha surgido como un método particularmente potente y eficiente, ya que explora sistemáticamente el espacio de búsqueda e identifica configuraciones óptimas más rápidamente que las técnicas tradicionales.

La optimización bayesiana es muy adecuada para optimizar funciones objetivo de alta dimensión, no convexas y ruidosas, que suelen encontrarse en tareas de ML (Cho et al., 2020; Joy et al., 2020). Construye un modelo probabilístico sustituto, normalmente basado en procesos gaussianos o métodos basados en árboles, para aproximar la función objetivo y proponer iterativamente nuevos conjuntos de hiperparámetros equilibrando la exploración y la explotación mediante una función de adquisición. En este estudio, se aplicó la optimización bayesiana para el ajuste de hiperparámetros utilizando la biblioteca Keras Tuner.

La **Tabla 4** presenta los hiperparámetros optimizados junto con sus respectivos valores mínimo y máximo, así como los tamaños de paso definidos para cada parámetro. Estos rangos se determinaron a partir de experimentos de entrenamiento preliminares realizados mediante un método de ensayo y error. En particular, la tasa de aprendizaje no está limitada por un tamaño de paso fijo, sino que se muestrea aleatoriamente dentro de un rango predefinido en una escala logarítmica, lo que permite una exploración más amplia y eficaz de los valores potenciales.

Para mitigar el sobreajuste, se aplicaron dos técnicas de regularización: Regularización L2 y parada anticipada. El mecanismo de parada temprana, configurado con un parámetro de paciencia de 10, detiene el entrenamiento cuando no se observa ninguna mejora significativa en el rendimiento del modelo en épocas consecutivas. Este proceso sistemático de optimización de hiperparámetros, en el que la regularización L2 también se incluye como variable ajustable, mejora la alineación del modelo con los datos de entrenamiento. Ajustando parámetros clave como la regularización L2, el proceso logra un equilibrio óptimo entre precisión predictiva y generalización, reduciendo aún más el riesgo de sobreajuste.

**Tabla 4.** Espacio de búsqueda de hiperparámetros para el algoritmo de hiperbanda.

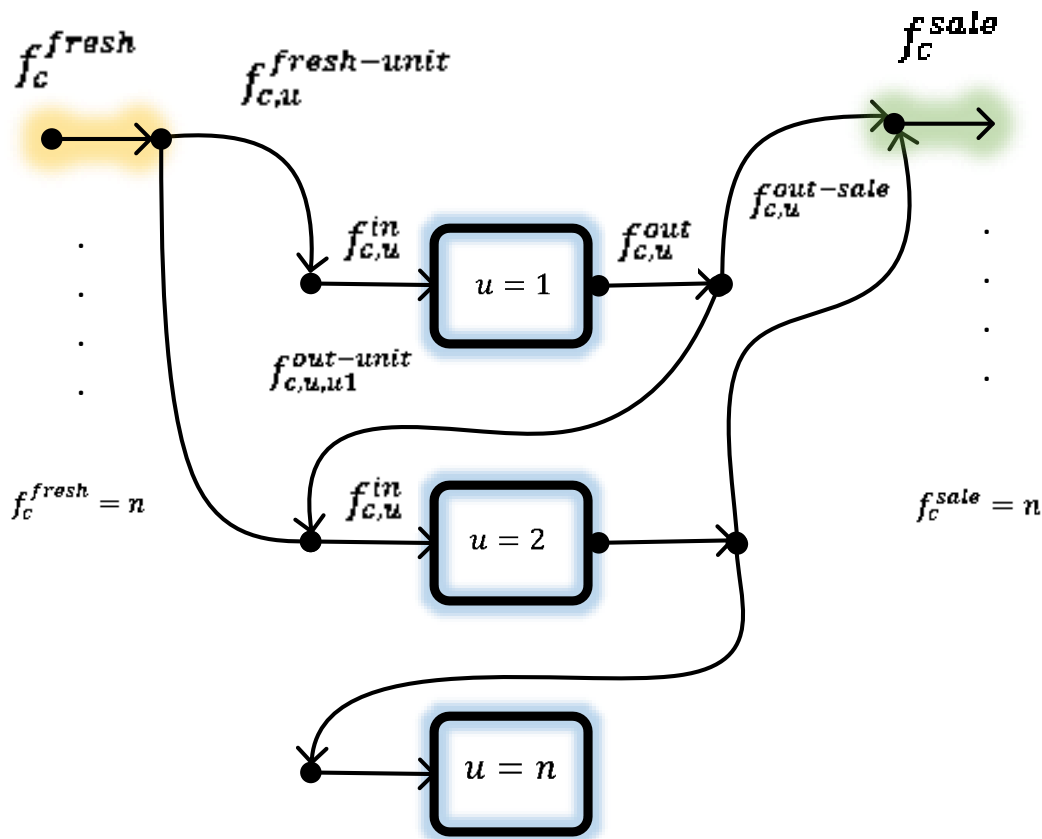
| <i>Hyperparametro</i> | <i>Scala</i> | <i>Min</i> | <i>Max</i> | <i>Paso</i> |
|-----------------------|--------------|------------|------------|-------------|
| Hidden layers         | Integer      | 1          | 5          | 1           |
| Neuron per layer      | Integer      | 5          | 50         | 1           |
| Learning rate         | Log          | 1e-5       | 1e-1       | -           |
| L2 regularization     | Log          | 1e-4       | 1e-1       | -           |

# DESARROLLO

## V. Planteamiento del problema

El problema abordado puede enunciarse formalmente como sigue: Dado un conjunto de unidades de proceso  $(u_1, u_2 \dots, u_n)$ , integradas dentro de un mismo complejo de transformación química, cada unidad es capaz de procesar, reutilizar y descargar múltiples especies de hidrocarburos  $(c_1, c_2 \dots, c_n)$ . Estas especies pueden dirigirse a diferentes puntos de venta, representados por las variables de flujo  $f_c^{sale}$ , o recircularse internamente ( $f_{c,u,u_1}^{out-unit}$ ) cuando las corrientes residuales contienen componentes valiosos, principalmente carbono, hidrógeno y oxígeno, que se requieren como materia prima en otras unidades. Para satisfacer la demanda de entrada de especies de hidrocarburos en cada unidad de procesamiento, se introduce un suministro externo fresco, representado por  $f_c^{fresh}$ . El sistema también permite la asignación selectiva de estos flujos frescos y residuales entre unidades, optimizando su distribución para satisfacer tanto los requisitos operativos como los objetivos económicos.

**La Figura 22** ilustra la superestructura propuesta para la distribución de flujos, en la que se representa explícitamente cada flujo, incluido el suministro fresco, los flujos entre unidades y los puntos de venta. El diagrama destaca la conectividad entre las unidades de procesamiento y las decisiones de enrutamiento de flujos, mostrando cómo las especies  $c$  se asignan a las unidades  $u$  a través de flujos como,  $f_{c,u}^{in}$ ,  $f_{c,u}^{out}$ ,  $f_{c,u,u_1}^{out-unit}$ , y  $f_{c,u}^{fresh-unit}$  y posteriormente se dirigen a los puntos de venta a través de  $f_{c,u}^{out-sale}$ . Esta estructura proporciona la base matemática para desarrollar un modelo de optimización híbrido que integra la simulación de procesos, la asignación de flujos de materiales y el análisis de compensaciones económico-ambientales.



**Figura 22.** Superestructura propuesta para la distribución de flujos.

### 5.1. Modelo matemático

Basándose en la superestructura propuesta, el modelo matemático se formula como sigue. En primer lugar, se define un conjunto de flujos de hidrocarburos frescos ( $f_c^{fresh}$ ) para satisfacer la demanda en las entradas de las unidades de proceso ( $f_{c,u}^{in}$ ). Estos flujos dan cuenta tanto de la compra de materiales frescos ( $f_{c,u}^{fresh-unit}$ ) como del reciclaje de especies procedentes de distintas unidades de proceso ( $f_{c,u,u1}^{out-unit}$ ). En consecuencia, la entrada a cada punto de mezcla se determina de la siguiente manera:

$$f_{c,u}^{in} = f_{c,u}^{fresh-unit} + \sum_{u1} f_{c,u,u1}^{out-unit} ; \forall c, u \quad (22)$$

Las salidas de las unidades de proceso  $f_{c,u}^{out}$  se calculan considerando tanto los flujos de salida directos de cada especie enviados a salidas externas ( $f_{c,u}^{out-sale}$ ), como los flujos residuales

reciclados dirigidos a otras unidades de proceso  $f_{c,u,u_1}^{out-unit}$ . En consecuencia, la producción total de cada unidad de proceso se determina del siguiente modo:

$$f_{c,u}^{out} = f_{c,u}^{out-sale} + \sum_{u_1} f_{c,u,u_1}^{out-unit} ; \forall c, u \quad (23)$$

Los consumos de material fresco  $f_c^{fresh}$  se calculan sumando los flujos dirigidos a las entradas de las unidades de proceso que requieren un material específico  $f_{c,u}^{fresh-unit}$ . En consecuencia, el flujo total de material fresco se obtiene de la siguiente manera:

$$f_c^{fresh} = \sum_u f_{c,u}^{fresh-unit} ; \forall c \quad (24)$$

El balance en las salidas donde se demandan las especies de hidrocarburos  $f_c^{sale}$  se calcula sumando los caudales de cada especie expedidos desde las salidas de las unidades de proceso  $f_{c,u}^{out-sale}$ . En consecuencia, el flujo total de venta de cada especie se determina de la siguiente manera:

$$f_c^{sale} = \sum_u f_{c,u}^{out-sale} ; \forall c \quad (25)$$

Las demandas de productos de especies de hidrocarburos ( $f_c^{sale}$ ), se configuran de la siguiente manera:

$$f_c^{sale} \leq f_c^{demand} ; \forall c \quad (26)$$

Se presentan las expresiones matemáticas que modelan el comportamiento operacional de las unidades de reacción para cada uno de los procesos mediante modelos sustitutos de RNA. Es bien conocido que cualquier modelo predictivo basado en ML utiliza un conjunto de datos para encontrar un modelo  $f$  que permita realizar predicciones sobre las variables deseadas, representado como  $[y_1, y_2, \dots, y_m] = f(x_1, x_2, \dots, x_i)$ , donde  $m$  corresponde al número de variables de salida e  $i$  al número de variables de entrada del modelo. En este contexto, los reactores modelados por RNA pueden describirse matemáticamente mediante las ecuaciones presentadas. Estas ecuaciones representan los modelos desarrollados para cada unidad de proceso dentro del esquema integral de CHOSYN, estableciendo la relación entre las

variables clave de salida y sus correspondientes variables de entrada, cuyo detalle se presenta en la **Tabla 1-3**.

$$\begin{bmatrix} P^{H_2} \\ P^{CH_4} \\ P^{CO_2} \\ P^{CO} \\ P^{H_2O} \\ QNET^{ATR} \\ CO_{2eq}^{ATR} \\ TAC^{ATR} \end{bmatrix} = f_{ATR}^{ANN}(F^{CH_4}, F^{O_2}, F^{H_2O}, T^{ATR}, P^{ATR}) \quad (27)$$

En concreto, la ecuación (27) corresponde a la sección de reacción del proceso de reformado autotérmico (ATR) del metano y se utiliza para predecir los caudales de salida de varios compuestos de hidrocarburos, incluidos el hidrógeno ( $P^{H_2}$ ), el metano ( $P^{CH_4}$ ), el dióxido de carbono ( $P^{CO_2}$ ), el monóxido de carbono ( $P^{CO}$ ) y el agua ( $P^{H_2O}$ ). Además, calcula el trabajo térmico neto dentro del reactor ( $QNET^{ATR}$ ), las emisiones de dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{ATR}$ ) y los costes totales anuales de funcionamiento del equipo ( $TAC^{ATR}$ ).

Análogamente, para cada una de las unidades de proceso ( $u_1, u_2 \dots, u_n$ ), pertenecientes a cada uno de los procesos implicados en el diagrama de red CHOSYN, se deriva la siguiente expresión generalizada:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_m \end{bmatrix}_u = f^{ANN}(x_1, x_2 \dots, x_i)_u \quad ; \forall u \quad (28)$$

Además, la conexión entre los modelos RNA y el modelo matemático que representa la superestructura se establece mediante las siguientes ecuaciones de igualación,

$$y_{m,u} = f_{c,u}^{out} \quad ; \forall m = c, u \quad (29)$$

$$x_{i,u} = f_{c,u}^{in} \quad ; \forall i = c, u \quad (30)$$

Cabe señalar que las variables de salida  $y_{m,u}$ , cuando  $m = c$ , son iguales a los flujos de salida  $f_{c,u}^{out}$ ; mientras que las variables de entrada  $x_{i,u}$ , cuando  $i = c$ , corresponden a los flujos de entrada  $f_{c,u}^{in}$ . Estas igualdades establecen un vínculo directo entre los modelos RNA y el

modelo matemático de la superestructura CHOSYN, dando lugar a un modelo híbrido totalmente integrado. En esta formulación, las salidas de las RNA alimentan el modelo global, y sus entradas se definen en consonancia con los flujos de materiales y energía del sistema, garantizando así la coherencia entre las predicciones generadas por los componentes ML y las ecuaciones de balance de masa y energía que rigen el comportamiento de la red.

Para calcular el coste total anual del esquema integral, se utiliza la suma de los costes de explotación de las unidades de proceso individuales y se expresa matemáticamente del siguiente modo:

$$TAC^{overall} = TAC^{ATR} + TAC^{PDH} + TAC^{ECE} + TAC^{VAM} + TAC^{SMRCO_2/H_2} + TAC^{SMRS} + TAC^{DRM} + TAC^{MTP} + TAC^{MFS} + TAC^{MFCO_2} + TAC^{WGSR} + TAC^{MCHAC} \quad (31)$$

El beneficio total anual ( $TAP$ ) se configura considerando el beneficio de la venta de productos, los costes de flujo de materiales frescos y los costes de funcionamiento de los equipos:

$$TAP = H_y \left( \sum_c f_c^{sale} * cost^{sale} - \sum_c f_c^{fresh} * cost^{fresh} \right) - \sum TAC^{overall} \quad (32)$$

donde  $cost^{sale}$  y  $cost^{fresh}$  representan los costes asociados a la venta de producto y a la compra de materia prima fresca, respectivamente, y  $H_y$  denota el número de horas anuales de funcionamiento.

Las emisiones globales de dióxido de carbono  $CO_{2eq}^{overall}$  se determinan sumando las emisiones individuales generadas por cada unidad de proceso.

$$CO_{2eq}^{overall} = CO_{2eq}^{ATR} + CO_{2eq}^{PDH} + CO_{2eq}^{ECE} + CO_{2eq}^{VAM} + CO_{2eq}^{SMRCO_2/H_2} + CO_{2eq}^{SMRS} + CO_{2eq}^{DRM} + CO_{2eq}^{MTP} + CO_{2eq}^{MFS} + CO_{2eq}^{MFCO_2} + CO_{2eq}^{WGSR} + CO_{2eq}^{MCHAC} \quad (33)$$

En consecuencia, la función objetivo considera la maximización del  $TAP$  junto con la minimización del  $CO_{2eq}^{overall}$  procedente de la combustión de combustibles fósiles.

$$O.F. = \{ \max TAP, \min CO_{2eq}^{overall} \} \quad (34)$$

Cabe señalar que esta función objetivo corresponde a un modelo de optimización multiobjetivo, diseñado para equilibrar eficazmente los distintos objetivos operativos del sistema.

Para este enfoque híbrido se utiliza la herramienta OMLT (Optimization and Machine Learning Toolkit), que permite integrar modelos de ML, como las redes neuronales, en problemas de optimización determinista (Ceccon et al., 2022). Este enfoque se basa en la construcción de modelos matemáticos precisos que representan el sistema, utilizando RNA para capturar relaciones complejas entre variables de entrada y salida (López-Flores et al., 2024a). La optimización determinista es especialmente ventajosa cuando se requiere precisión y fiabilidad, ya que permite asegurar que las soluciones obtenidas cumplen con estrictas restricciones y objetivos específicos del sistema.

## **5.2. Resultados y discusión**

### **5.2.1. Redes Neuronales Artificiales**

Los conjuntos de datos correspondientes a las doce unidades de proceso (**véanse las Tablas 1-3**) se dividieron aleatoriamente, asignando el 80% al conjunto de entrenamiento y el 20% al conjunto de validación. Los modelos de RNA se entrenaron utilizando la función de activación ReLU, el optimizador Adam (estimación adaptativa de momentos) y el error cuadrático medio (MSE) como función de pérdida. En el marco de Keras Tuner, el número máximo de épocas de entrenamiento se fijó en 200, y el algoritmo de optimización bayesiano se configuró para realizar hasta 500 ensayos. Se seleccionó la pérdida de validación (MSE) como función objetivo a minimizar, lo que ayudó a mitigar el posible sobreajuste en los modelos.

A continuación, se presentan las arquitecturas de los mejores modelos obtenidos mediante la optimización de hiperparámetros:

- Reformado autotérmico de metano: cinco entradas, ocho salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 40, 15 y 90, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,0016 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,0001, 4,21692 y 0,0001.

- Deshidrogenación de propano: Cuatro entradas, seis salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 85 y 10, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,0142 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00013 y 0,00001.
- Craqueo de etano a etileno: Cuatro entradas, nueve salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 80 y 85, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00038 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00109 y 0,03254.
- Monómero de acetato de vinilo: Seis entradas, ocho salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 75 y 40, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00017 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00190 y 0,00078.
- Reformado de metano por vapor a  $\text{CO}_2/\text{H}_2$ : Cuatro entradas, siete salidas y una capa oculta. El número de neuronas en la primera capa oculta es de 40. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00171 y la regularización L2 es igual a 0,00110.
- Reformado de metano por vapor a gas de síntesis: Seis entradas, siete salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 85 y 40, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00129 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00382 y 0,00163.
- Reformado en seco del metano: cinco entradas, ocho salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 70 y 35, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00033 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00982 y 0,00006.
- Metanol a propileno: Cinco entradas, seis salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 15 y 30, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00453 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00013, y 0,00280.
- Metanol a partir de gas de síntesis: Nueve entradas, diez salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 65 y 50,

respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00408 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00429 y 0,00080.

- Metanol a partir de CO<sub>2</sub>: Seis entradas, siete salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 65, 10 y 10, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 3,89546 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,01217, 0,00001 y 0,00001.
- Reacción de desplazamiento de gas de agua: Cuatro entradas, siete salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 20, 10 y 10, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00428 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00209, 0,00001 y 0,00001.
- Carbonilación del metanol en ácido acético: Cuatro entradas, cinco salidas y dos capas ocultas. El número de neuronas en la primera y segunda capas ocultas es de 65 y 10, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,00135 y las regularizaciones L2 son iguales a 0,00131 y 0,00001.

Las **Tablas 5, 6, y 7** presentan las métricas de evaluación de los doce modelos RNA desarrollados para predecir todos los flujos de productos de especies ( $P^{H_2}$ ,  $P^{CH_4}$ ,  $P^{CO_2}$ ,  $P^{CO}$ ,  $P^{H_2O}$ ,  $P^{C_2H_4}$ ,  $P^{C_3H_8}$ ,  $P^{C_3H_6}$ ,  $P^{C_2H_6}$ ,  $P^{HAC}$ ,  $P^{O_2}$ ,  $P^{VAM}$ ,  $P^{MeOH}$ ,  $P^{DME}$ ,  $P^{N_2}$ ), así como los costes anuales totales ( $TAC^{ATR}$ ,  $TAC^{PDH}$ ,  $TAC^{ECE}$ ,  $TAC^{VAM}$ ,  $TAC^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ,  $TAC^{SMRS}$ ,  $TAC^{DRM}$ ,  $TAC^{MTP}$ ,  $TAC^{MFS}$ ,  $TAC^{MFCO_2}$ ,  $TAC^{WGS}$ ,  $TAC^{MCHAC}$ ), consumos totales de energía ( $QNET^{ATR}$ ,  $QNET^{PDH}$ ,  $QNET^{ECE}$ ,  $QNET^{VAM}$ ,  $QNET^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ,  $QNET^{SMRS}$ ,  $QNET^{DRM}$ ,  $QNET^{MTP}$ ,  $QNET^{MFS}$ ,  $QNET^{MFCO_2}$ ,  $QNET^{WGS}$ ,  $QNET^{MCHAC}$ ), y emisiones totales por dióxido de carbono ( $CO_{2eq}^{ATR}$ ,  $CO_{2eq}^{PDH}$ ,  $CO_{2eq}^{ECE}$ ,  $CO_{2eq}^{SMR_{CO_2/H_2}}$ ,  $CO_{2eq}^{SMRS}$ ,  $CO_{2eq}^{DRM}$ ,  $CO_{2eq}^{MFCO_2}$ ,  $CO_{2eq}^{WGS}$ ), en cada proceso. Para evaluar el rendimiento del modelo, se aplican varias métricas, como el error cuadrático medio (RMSE), el error medio absoluto (MAE), el error medio porcentual absoluto (MAPE) y el coeficiente de determinación ( $R^2$ ), cada una de ellas evaluada en el conjunto de pruebas. Como se muestra en las **Tablas 5-7**, los modelos muestran en general un buen rendimiento predictivo, caracterizado por valores bajos de RMSE, MAE y MAPE, junto con puntuaciones elevadas de  $R^2$ . Estos resultados indican que los modelos captan eficazmente las relaciones subyacentes de entrada-salida y predicen con precisión las variables objetivo tanto en la fase de entrenamiento como en la de prueba. Además, la consistencia del rendimiento en ambos conjuntos de datos sugiere que los modelos están bien

generalizados y no son propensos al sobreajuste. Esta solidez puede atribuirse a las estrategias metodológicas empleadas en este estudio, como la regularización L2, la detención temprana y la optimización bayesiana para el ajuste de hiperparámetros. En general, el enfoque integrado adoptado en este estudio resulta eficaz para desarrollar modelos predictivos fiables y generalizables.

**Tabla 5.** Métricas de evaluación de los modelos de RNA para los procesos ATR, PDH, ECE y VAM en el esquema CHOSYN.

| Process                                | Variables/Metrics | Test Set |        |        |                |
|----------------------------------------|-------------------|----------|--------|--------|----------------|
|                                        |                   | RMSE     | MAE    | MAPE   | R <sup>2</sup> |
| <i>Reformado Autotérmico de Metano</i> | $p^{H_2}$         | 0.0687   | 0.0518 | 1.8191 | <b>0.9955</b>  |
|                                        | $p^{CH_4}$        | 0.0874   | 0.0645 | 0.1757 | <b>0.9953</b>  |
|                                        | $p^{CO_2}$        | 0.0855   | 0.0525 | 4.5166 | <b>0.9926</b>  |
|                                        | $p^{CO}$          | 0.1018   | 0.0588 | 0.8501 | <b>0.9897</b>  |
|                                        | $p^{H_2O}$        | 0.0871   | 0.0492 | 0.3310 | <b>0.9930</b>  |
|                                        | $QNET^{ATR}$      | 0.1263   | 0.0777 | 0.3708 | <b>0.9836</b>  |
|                                        | $CO_{2eq}^{ATR}$  | 0.0770   | 0.0547 | 0.4125 | <b>0.9944</b>  |
|                                        | $TAC^{ATR}$       | 0.1225   | 0.0816 | 0.1778 | <b>0.9865</b>  |
| <i>Deshidrogenación de Propano</i>     | $p^{C_3H_8}$      | 0.0661   | 0.0547 | 0.5372 | <b>0.9955</b>  |
|                                        | $p^{H_2}$         | 0.0861   | 0.0676 | 0.3704 | <b>0.9923</b>  |
|                                        | $p^{C_3H_6}$      | 0.0796   | 0.0617 | 0.5193 | <b>0.9935</b>  |
|                                        | $QNET^{PDH}$      | 0.0492   | 0.0384 | 1.6280 | <b>0.9974</b>  |
|                                        | $CO_{2eq}^{PDH}$  | 0.0492   | 0.0388 | 1.8034 | <b>0.9974</b>  |
|                                        | $TAC^{PDH}$       | 0.0507   | 0.0383 | 0.9668 | <b>0.9972</b>  |
| <i>Craqueo de Etano a Etileno</i>      | $p^{H_2}$         | 0.1147   | 0.0695 | 4.8280 | <b>0.9685</b>  |
|                                        | $p^{CH_4}$        | 0.1445   | 0.0821 | 0.4565 | <b>0.9680</b>  |
|                                        | $p^{C_2H_4}$      | 0.2705   | 0.1472 | 0.5067 | <b>0.8440</b>  |
|                                        | $p^{C_2H_6}$      | 0.2247   | 0.1279 | 4.3923 | <b>0.9270</b>  |
|                                        | $p^{C_3H_8}$      | 0.2270   | 0.1386 | 0.4740 | <b>0.9242</b>  |
|                                        | $p^{H_2O}$        | 0.0547   | 0.0409 | 0.3261 | <b>0.9947</b>  |
|                                        | $QNET^{ECE}$      | 0.1834   | 0.0995 | 0.7000 | <b>0.9253</b>  |
|                                        | $CO_{2eq}^{ECE}$  | 0.1778   | 0.0970 | 0.6693 | <b>0.9298</b>  |
|                                        | $TAC^{ECE}$       | 0.1787   | 0.0983 | 0.6631 | <b>0.9290</b>  |
| <i>Monómero de Vinyl Acetato</i>       | $p^{HAC}$         | 0.0446   | 0.0327 | 0.1078 | <b>0.9979</b>  |
|                                        | $p^{CO_2}$        | 0.0574   | 0.0382 | 0.1628 | <b>0.9965</b>  |
|                                        | $p^{C_2H_4}$      | 0.0613   | 0.0406 | 0.1041 | <b>0.9959</b>  |
|                                        | $p^{O_2}$         | 0.0799   | 0.0507 | 0.0507 | <b>0.9927</b>  |
|                                        | $p^{VAM}$         | 0.0522   | 0.0360 | 0.2996 | <b>0.9970</b>  |
|                                        | $p^{H_2O}$        | 0.0535   | 0.0361 | 0.6358 | <b>0.9970</b>  |
|                                        | $QNET^{VAM}$      | 0.0334   | 0.0248 | 0.1805 | <b>0.9987</b>  |

**Tabla 6.** Métricas de evaluación para los modelos de RNA de los procesos SMRCO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>, SMRS, DRM, MTP y MFS en el esquema CHOSYN.

| Process                                                             | Variables/Metrics        | Test Set |        |         |                |
|---------------------------------------------------------------------|--------------------------|----------|--------|---------|----------------|
|                                                                     |                          | RMSE     | MAE    | MAPE    | R <sup>2</sup> |
| <i>Reformado de Metano con vapor a CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub></i> | $p^{H_2}$                | 0.0391   | 0.0318 | 0.2147  | <b>0.9980</b>  |
|                                                                     | $p^{CH_4}$               | 0.0298   | 0.0195 | 0.1387  | <b>0.9990</b>  |
|                                                                     | $p^{CO_2}$               | 0.0378   | 0.0319 | 0.2237  | <b>0.9981</b>  |
|                                                                     | $p^{H_2O}$               | 0.0647   | 0.0428 | 0.2196  | <b>0.9942</b>  |
|                                                                     | $QNET^{SMRCO_2/H_2}$     | 0.0368   | 0.0302 | 0.3156  | <b>0.9980</b>  |
|                                                                     | $CO_{2eq}^{SMRCO_2/H_2}$ | 0.0367   | 0.0311 | 0.3212  | <b>0.9980</b>  |
|                                                                     | $TAC^{SMRCO_2/H_2}$      | 0.0394   | 0.0351 | 0.3866  | <b>0.9978</b>  |
| <i>Reformado de Metano con vapor a Syngas</i>                       | $p^{CH_4}$               | 0.0833   | 0.0660 | 0.2964  | <b>0.9844</b>  |
|                                                                     | $p^{H_2O}$               | 0.0846   | 0.0629 | 3141.98 | <b>0.9917</b>  |
|                                                                     | $p^{H_2}$                | 0.0370   | 0.0253 | 645.73  | <b>0.9986</b>  |
|                                                                     | $p^{CO}$                 | 0.0377   | 0.0281 | 1475.51 | <b>0.9986</b>  |
|                                                                     | $QNET^{SMRS}$            | 0.0461   | 0.0332 | 0.4952  | <b>0.9978</b>  |
|                                                                     | $CO_{2eq}^{SMRS}$        | 0.0450   | 0.0325 | 0.4959  | <b>0.9979</b>  |
|                                                                     | $TAC^{SMRS}$             | 0.0463   | 0.0333 | 0.5140  | <b>0.9978</b>  |
| <i>Reformado seco de Metano</i>                                     | $p^{H_2}$                | 0.0549   | 0.0408 | 0.1745  | <b>0.9974</b>  |
|                                                                     | $p^{CH_4}$               | 0.0527   | 0.0408 | 0.1499  | <b>0.9968</b>  |
|                                                                     | $p^{CO_2}$               | 0.0723   | 0.0467 | 0.1165  | <b>0.9951</b>  |
|                                                                     | $p^{N_2}$                | 0.0574   | 0.0496 | 1.7307  | <b>0.9966</b>  |
|                                                                     | $p^{CO}$                 | 0.0537   | 0.0395 | 0.1580  | <b>0.9975</b>  |
|                                                                     | $QNET^{DRM}$             | 0.0485   | 0.0355 | 0.1215  | <b>0.9980</b>  |
|                                                                     | $CO_{2eq}^{DRM}$         | 0.0486   | 0.0353 | 0.1194  | <b>0.9980</b>  |
|                                                                     | $TAC^{DRM}$              | 0.0494   | 0.0358 | 0.1269  | <b>0.9979</b>  |
| <i>Metanol a Propileno</i>                                          | $p^{MeOH}$               | 0.0635   | 0.0537 | 0.5083  | <b>0.9964</b>  |
|                                                                     | $p^{C_3H_6}$             | 0.0451   | 0.0346 | 0.8294  | <b>0.9981</b>  |
|                                                                     | $p^{H_2O}$               | 0.0671   | 0.0527 | 2045.46 | <b>0.9962</b>  |
|                                                                     | $p^{DME}$                | 0.0897   | 0.0675 | 2.9263  | <b>0.9919</b>  |
|                                                                     | $QNET^{MTP}$             | 0.0439   | 0.0335 | 0.6918  | <b>0.9982</b>  |
|                                                                     | $TAC^{MTP}$              | 0.0487   | 0.0379 | 0.8539  | <b>0.9977</b>  |
| <i>Metanol a partir de Syngas</i>                                   | $p^{H_2O}$               | 0.0491   | 0.0366 | 0.2725  | <b>0.9972</b>  |
|                                                                     | $p^{CH_4}$               | 0.0760   | 0.0565 | 0.1771  | <b>0.9937</b>  |
|                                                                     | $p^{C_2H_6}$             | 0.0499   | 0.0411 | 1.9321  | <b>0.9973</b>  |
|                                                                     | $p^{C_3H_8}$             | 0.0621   | 0.0521 | 0.1675  | <b>0.9958</b>  |
|                                                                     | $p^{CO}$                 | 0.0451   | 0.0315 | 0.0439  | <b>0.9978</b>  |
|                                                                     | $p^{CO_2}$               | 0.0522   | 0.0392 | 0.1438  | <b>0.9969</b>  |
|                                                                     | $p^{H_2}$                | 0.0484   | 0.0375 | 0.0651  | <b>0.9974</b>  |
|                                                                     | $p^{MeOH}$               | 0.0391   | 0.0272 | 0.0411  | <b>0.9983</b>  |
|                                                                     |                          | 0.0446   | 0.0302 | 0.0424  | <b>0.9979</b>  |

**Tabla 7.** Métricas de evaluación de los modelos de RNA para los procesos MFCO<sub>2</sub>, WGSR y MCHAC en el esquema CHOSYN.

| Process                                          | Variables/Metrics   | Test Set |        |        |                |
|--------------------------------------------------|---------------------|----------|--------|--------|----------------|
|                                                  |                     | RMSE     | MAE    | MAPE   | R <sup>2</sup> |
| <i>Methanol a partir de CO<sub>2</sub></i>       | $p^{MeOH}$          | 0.0711   | 0.0567 | 3.1806 | <b>0.9943</b>  |
|                                                  | $p^{H_2}$           | 0.0727   | 0.0538 | 0.4326 | <b>0.9944</b>  |
|                                                  | $p^{CO}$            | 0.0959   | 0.0678 | 0.4170 | <b>0.9902</b>  |
|                                                  | $p^{H_2O}$          | 0.1041   | 0.0823 | 0.2307 | <b>0.9893</b>  |
|                                                  | $QNET^{MFCO_2}$     | 0.0569   | 0.0476 | 0.1608 | <b>0.9964</b>  |
|                                                  | $CO_{2eq}^{MFCO_2}$ | 0.0558   | 0.0463 | 0.1219 | <b>0.9965</b>  |
|                                                  | $TAC^{MFCO_2}$      | 0.0483   | 0.0404 | 0.0940 | <b>0.9974</b>  |
| <i>Reacción de desplazamiento de gas de agua</i> | $p^{H_2}$           | 0.0733   | 0.0562 | 0.0854 | <b>0.9948</b>  |
|                                                  | $p^{CO_2}$          | 0.0793   | 0.0628 | 0.0835 | <b>0.9939</b>  |
|                                                  | $p^{CO}$            | 0.0498   | 0.0391 | 0.0999 | <b>0.9957</b>  |
|                                                  | $p^{H_2O}$          | 0.1313   | 0.1046 | 0.2325 | <b>0.9841</b>  |
|                                                  | $QNET^{WGSR}$       | 0.0937   | 0.0702 | 0.1538 | <b>0.9933</b>  |
|                                                  | $CO_{2eq}^{WGSR}$   | 0.0883   | 0.0618 | 0.1395 | <b>0.9941</b>  |
|                                                  | $TAC^{WGSR}$        | 0.0882   | 0.0599 | 0.1223 | <b>0.9941</b>  |
| <i>Carbonilación de metanol a ácido acético</i>  | $p^{MeOH}$          | 0.0432   | 0.0300 | 0.0569 | <b>0.9914</b>  |
|                                                  | $p^{CO}$            | 0.1004   | 0.0881 | 0.2401 | <b>0.9912</b>  |
|                                                  | $p^{HAC}$           | 0.0614   | 0.0547 | 0.1091 | <b>0.9963</b>  |
|                                                  | $QNET^{MCHAC}$      | 0.0711   | 0.0558 | 0.1261 | <b>0.9953</b>  |
|                                                  | $TAC^{MCHAC}$       | 0.0676   | 0.0539 | 0.1146 | <b>0.9957</b>  |

## 5.2.2. Resultados de la optimización multiobjetivo

Para evaluar el rendimiento de la red CHOSYN integrada (véase la sección 3.1. Modelo matemático), se llevó a cabo una optimización multiobjetivo utilizando Pyomo junto con OMLT, considerando dos objetivos contrapuestos: (i) la maximización del  $TAP$  (\$/año) y (ii) la reducción de las emisiones de CO<sub>2</sub> (kg/año). En el marco de optimización se incorporaron modelos sustitutos derivados de RNA para garantizar una evaluación precisa y eficiente desde el punto de vista computacional de las compensaciones entre el rendimiento económico y el medioambiental. Es importante señalar que la frontera de Pareto se generó utilizando el método de la restricción  $\epsilon$ , una técnica muy utilizada en la optimización multiobjetivo que

transforma un objetivo en una restricción mientras varía sistemáticamente su límite para explorar el espacio de compensaciones.

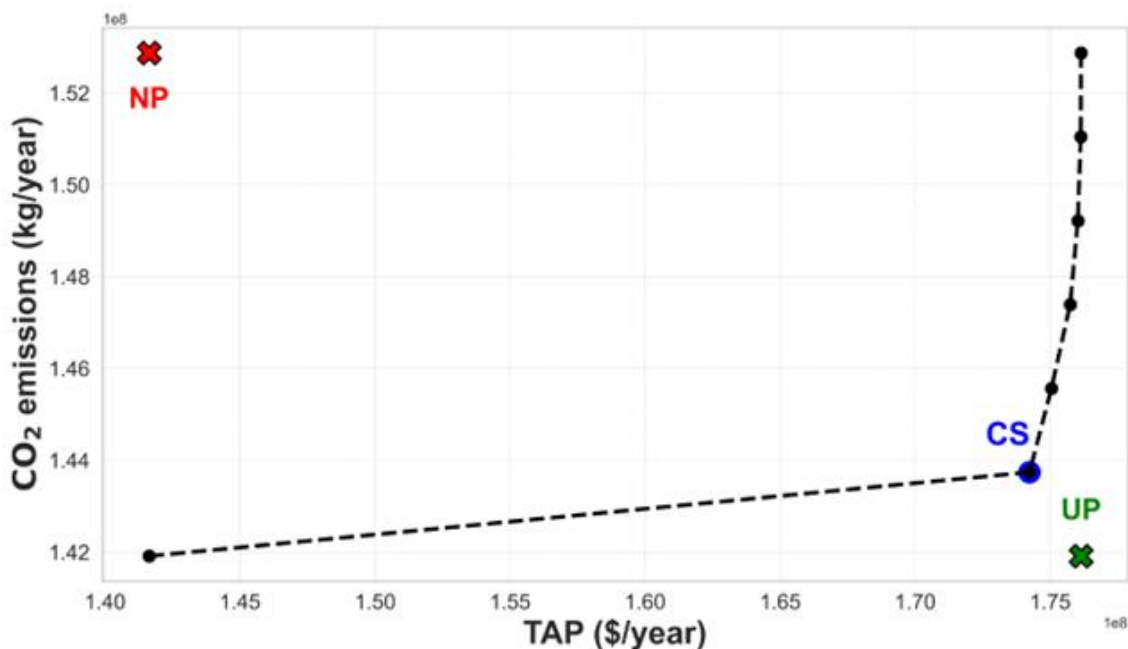
Es importante destacar que el modelo matemático se formuló como un problema de Programación No Lineal (PNL) y se resolvió utilizando el solucionador IPOPT. El modelo resultante consta de 7.992 variables de decisión y 7.258 restricciones. La solución se realizó en una estación de trabajo HP ZBook 17 G3 equipada con una CPU Intel Core i7-6700HQ (2,60 GHz), 32 GB de RAM y una GPU AMD FirePro W6150M de 4 GB. El tiempo medio de solución para cada solución presentada en la curva de Pareto fue de aproximadamente 128 minutos.

Para interpretar mejor la región de compromiso, se presentan dos diagramas de Pareto. El primero ilustra (**Figura 16**) todo el espacio objetivo, incluida la solución de coste extremadamente bajo, que comprime visualmente el resto de la curva. Para superar esta distorsión y resaltar la curvatura y densidad de las soluciones intermedias, un segundo gráfico (Figura 17) excluye este valor atípico, lo que permite una identificación más clara de la región de compromiso y una evaluación visual más precisa de las compensaciones.

En la figura 16, todo el frente de Pareto ilustra la compensación fundamental entre costes y emisiones de la red industrial CHOSYN. A medida que aumenta el TAP, también aumentan las emisiones de CO<sub>2</sub>, lo que revela una clara compensación: los diseños más rentables tienden a ser más intensivos en carbono. Esto pone de relieve la necesidad de equilibrar la rentabilidad económica y el impacto ambiental a la hora de identificar la solución de compromiso óptima dentro de la red CHOSYN. El punto utópico y el punto nadir mostrados son extremos teóricos de referencia utilizados para evaluar y normalizar los objetivos. El punto utópico (UP) representa un escenario ideal que combina la mayor TAP posible con las menores emisiones de CO<sub>2</sub> posibles, un punto de referencia que ningún diseño real puede alcanzar, pero que sirve de referencia para un rendimiento óptimo. Por el contrario, el punto nadir (NP) refleja la combinación del TAP más bajo con las emisiones más altas, lo que representa el peor compromiso entre los resultados económicos y medioambientales. Todas las soluciones viables se sitúan entre estos extremos conceptuales de la curva de Pareto, lo que ilustra el conflicto inherente: la mejora de los resultados medioambientales suele reducir

la rentabilidad, y viceversa. El frente de Pareto capta este espacio de compromiso, donde ninguna solución es óptima en ambos objetivos simultáneamente.

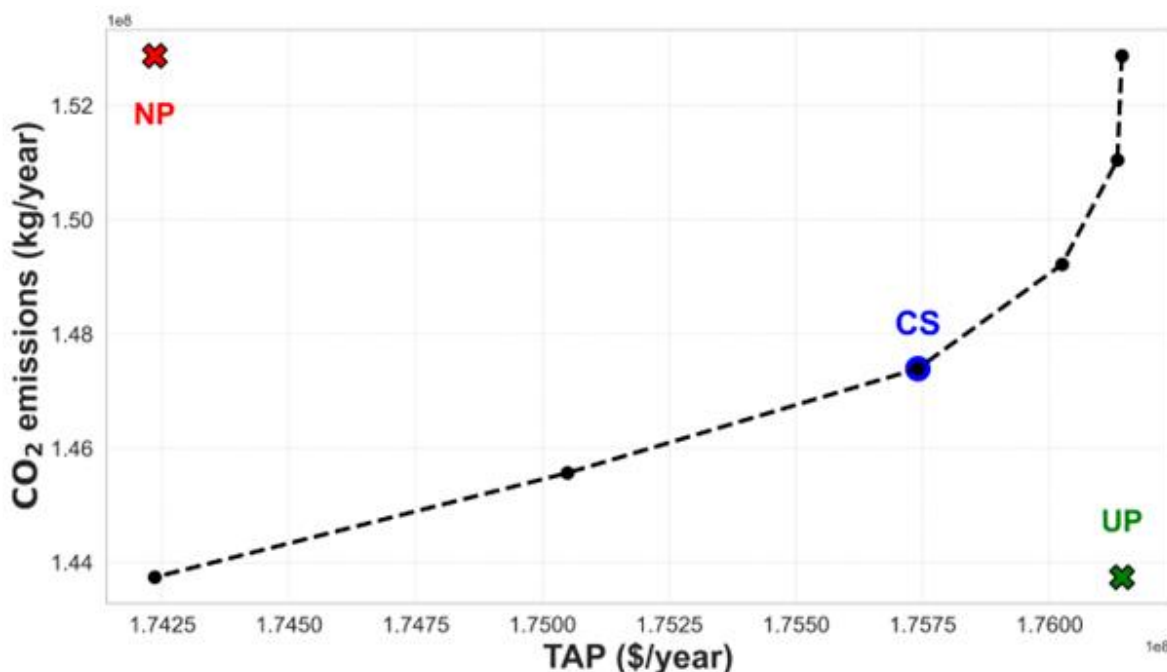
La **Figura 23** nos permite identificar tres soluciones representativas para un análisis más profundo: (1) la solución económicamente óptima (punto de mayor *TAP*, en un extremo de la curva), (2) la solución medioambientalmente óptima (punto de menores emisiones de  $\text{CO}_2$ , en el extremo opuesto), y (3) la solución de compromiso más cercana al ideal utópico. El diseño óptimo desde el punto de vista económico alcanza el máximo *TAP* (176.142.861 \$/año), lo que significa que la red funciona con el mayor beneficio anual, pero este punto también presenta las mayores emisiones de  $\text{CO}_2$  (152.873.295 kg  $\text{CO}_2\text{eq/año}$ ) de la frontera (ya que cualquier reducción adicional de las emisiones reduciría los beneficios económicos). Por el contrario, el diseño óptimo desde el punto de vista medioambiental minimiza las emisiones anuales de  $\text{CO}_2$  (141.913.778 kg/año), pero incurre en el *TAP* más bajo (141.638.553 \$/año), lo que indica una rentabilidad sustancialmente reducida para reducir las emisiones hasta este nivel mínimo. Entre estos extremos se encuentra la solución de compromiso (CS); esta configuración presenta un *TAP* de 174.235.347 \$/año, asociado a emisiones de 143.740.364 kg/año, lo que equilibra más el beneficio y las emisiones. Al normalizar los objetivos utilizando los valores utópico y nadir y hallar la distancia más corta a la utopía, este diseño de compromiso se identifica como la solución que equilibra de forma óptima el beneficio con la reducción de emisiones. En otras palabras, es la solución de Pareto en la que ninguno de los dos objetivos se sacrifica de forma desproporcionada, ofreciendo una mejora más equilibrada de la sostenibilidad por unidad de rentabilidad económica a la que se renuncia.



**Figura 23.** Primera frontera de Pareto que muestra el compromiso entre *TAP* y emisiones de CO<sub>2</sub> para la red CHOSYN.

La **Figura 24** ofrece una visión más cercana de la región de la curva de Pareto omitiendo el valor atípico más lejano basado en los costes. Esta vista ampliada pone de relieve cómo aumentan las emisiones de CO<sub>2</sub> a medida que se avanza hacia la derecha (a mayor *TAP*) a lo largo de la frontera. Las reducciones de emisiones pueden obtenerse con disminuciones relativamente pequeñas del *TAP*, mientras que más allá del *CS* la curva se aplana, lo que indica rendimientos decrecientes: sacrificios económicos cada vez mayores sólo producen reducciones adicionales marginales de las emisiones. Por ejemplo, comparando las soluciones extremas, el diseño de emisiones más bajas (extremo derecho de la curva) consigue aproximadamente una reducción del 5,97% de las emisiones de CO<sub>2</sub> en relación con la configuración económicamente óptima, pero a expensas de una disminución del 1,1% del *TAP*, lo que indica que puede lograrse una mejora medioambiental significativa con un sacrificio económico mínimo. Situado cerca del centro de la Figura 2, el *CS* representa una estrategia eficiente que permite retener la mayor parte de la reducción de emisiones, con un aumento económico moderado. En concreto, esta configuración consigue un *TAP* de 175.740.357 \$/año y unas emisiones de 147.393.536 kg CO<sub>2eq</sub>/año. Además, este diseño de

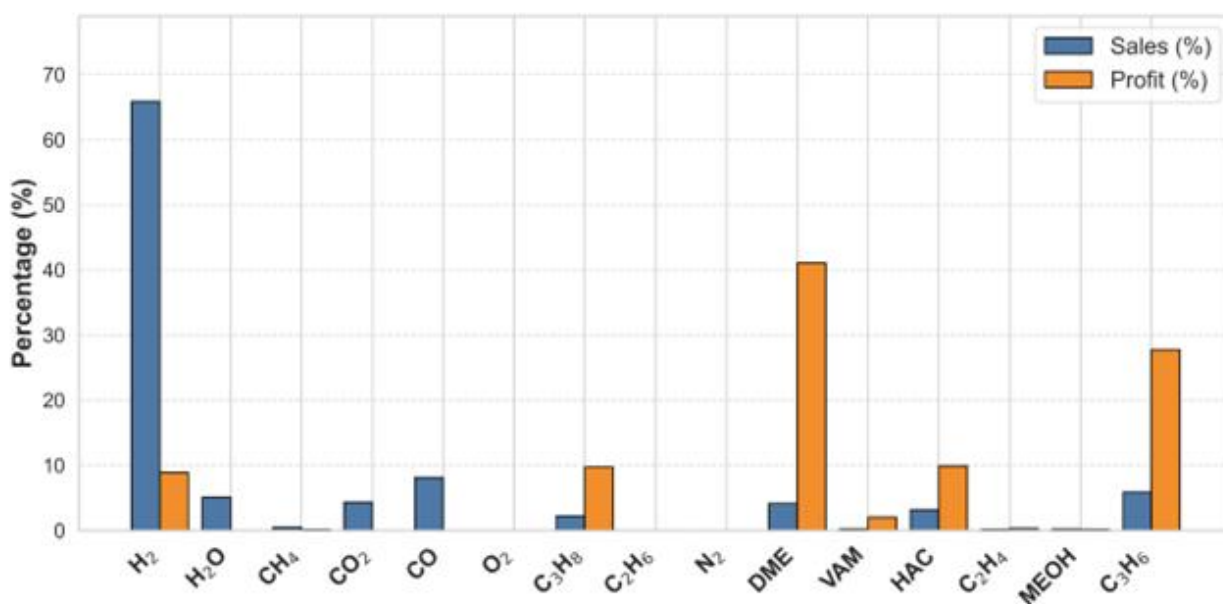
compromiso logra aproximadamente el 60% de la reducción total de CO<sub>2</sub> alcanzable, sacrificando sólo el 21,1% del TAP máximo alcanzable. Así pues, ofrece el equilibrio más favorable entre rendimiento económico e impacto ambiental.



**Figura 24.** Segunda frontera de Pareto que muestra el equilibrio entre TAP y emisiones de CO<sub>2</sub> para la red CHOSYN.

El CS adopta una estrategia más equilibrada: integra la mitigación rentable y las sinergias de proceso que reducen significativamente las emisiones sin una escalada excesiva de costes. Esto refleja una priorización racional de las tecnologías con mayor impacto ambiental por dólar invertido. Situada cerca de la «rodilla» de la curva de Pareto, encarna el principio de los rendimientos decrecientes, ofreciendo una mejora medioambiental sustancial con compensaciones económicas moderadas. En última instancia, esta configuración de compromiso resulta ser la opción más viable desde el punto de vista técnico y económico. Maximiza la sostenibilidad por coste unitario, demostrando que la red CHOSYN puede funcionar de una manera más responsable con el medio ambiente sin sacrificar la viabilidad económica. Así pues, el análisis de Pareto respalda su selección como estrategia óptima alineada con el diseño de procesos sostenibles.

Por otro lado, la **Figura 25** compara el porcentaje de ventas totales y la contribución económica (beneficios) de cada especie dentro de la configuración óptima de la red CHOSYN correspondiente al CS. En particular, mientras que el hidrógeno ( $H_2$ ) representa más del 65% del volumen total de ventas, su contribución a los beneficios es desproporcionadamente baja (menos del 10%), lo que indica un bajo valor económico por unidad. En cambio, especies como el DME, el propileno ( $C_3H_6$ ) y el ácido acético (HAC) generan beneficios sustanciales a pesar de sus modestos volúmenes de ventas, lo que pone de relieve su elevada rentabilidad unitaria. Por ejemplo, el DME representa sólo ~4,5% de las ventas totales, pero aporta más del 40% del beneficio total. Del mismo modo, el  $C_3H_8$  y el VAM presentan elevadas contribuciones a los beneficios con cuotas de ventas relativamente pequeñas. Estos resultados subrayan la importancia de centrarse no sólo en los productos de gran volumen, sino también en los de alto margen, a la hora de optimizar las redes industriales. Además, varias especies, como  $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $O_2$  y  $N_2$ , intervienen en los flujos internos o en los balances de reacción, pero no contribuyen directamente a los ingresos, lo que refleja su papel de apoyo en el proceso más que su valor comercial.



**Figura 25.** Comparación de las ventas de productos y la contribución económica por especies en la red CHOSYN.

La **Figura 26** ilustra la configuración óptima correspondiente a la solución de compromiso (SC) de la red CHOSYN, identificada mediante el marco de optimización híbrido propuesto. Además, la Tabla 8 presenta las condiciones de funcionamiento óptimas determinadas para cada unidad de proceso. Cada nodo de la **Figura 26** representa una planta química o unidad de proceso, mientras que las líneas de conexión denotan los intercambios de materiales, incluyendo tanto la alimentación fresca como los reciclados entre plantas de productos intermedios, subproductos y flujos de utilidad. La configuración óptima demuestra un alto grado de integración de la red, con numerosas interconexiones activas que facilitan la reutilización interna de hidrógeno, hidrocarburos ligeros (por ejemplo,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_6$ ,  $C_3H_8$ ), óxidos de carbono ( $CO$ ,  $CO_2$ ), agua y otros flujos valiosos. Este comportamiento de bucle cerrado mejora la eficiencia global de los recursos al tiempo que reduce la dependencia de materias primas externas y la huella de emisiones.

Además, la figura también muestra flujos multidireccionales entre procesos, lo que permite un encaminamiento flexible de productos intermedios como el  $CO_2$  y los hidrocarburos. Esta flexibilidad mejora la robustez operativa y la adaptabilidad a los cambios del mercado o de las materias primas, lo que refleja el equilibrio entre los objetivos económicos y medioambientales logrado por la optimización multiobjetivo.

En conjunto, la configuración óptima de CHOSYN subraya las ventajas de combinar el modelado subrogado basado en datos con la optimización determinista. La red resultante no solo logra una redistribución eficiente de los recursos, sino que también ejemplifica los principios de la simbiosis industrial y el diseño eco-industrial, lo que sitúa a las redes CHOSYN como una solución prometedora para la fabricación sostenible de productos químicos.

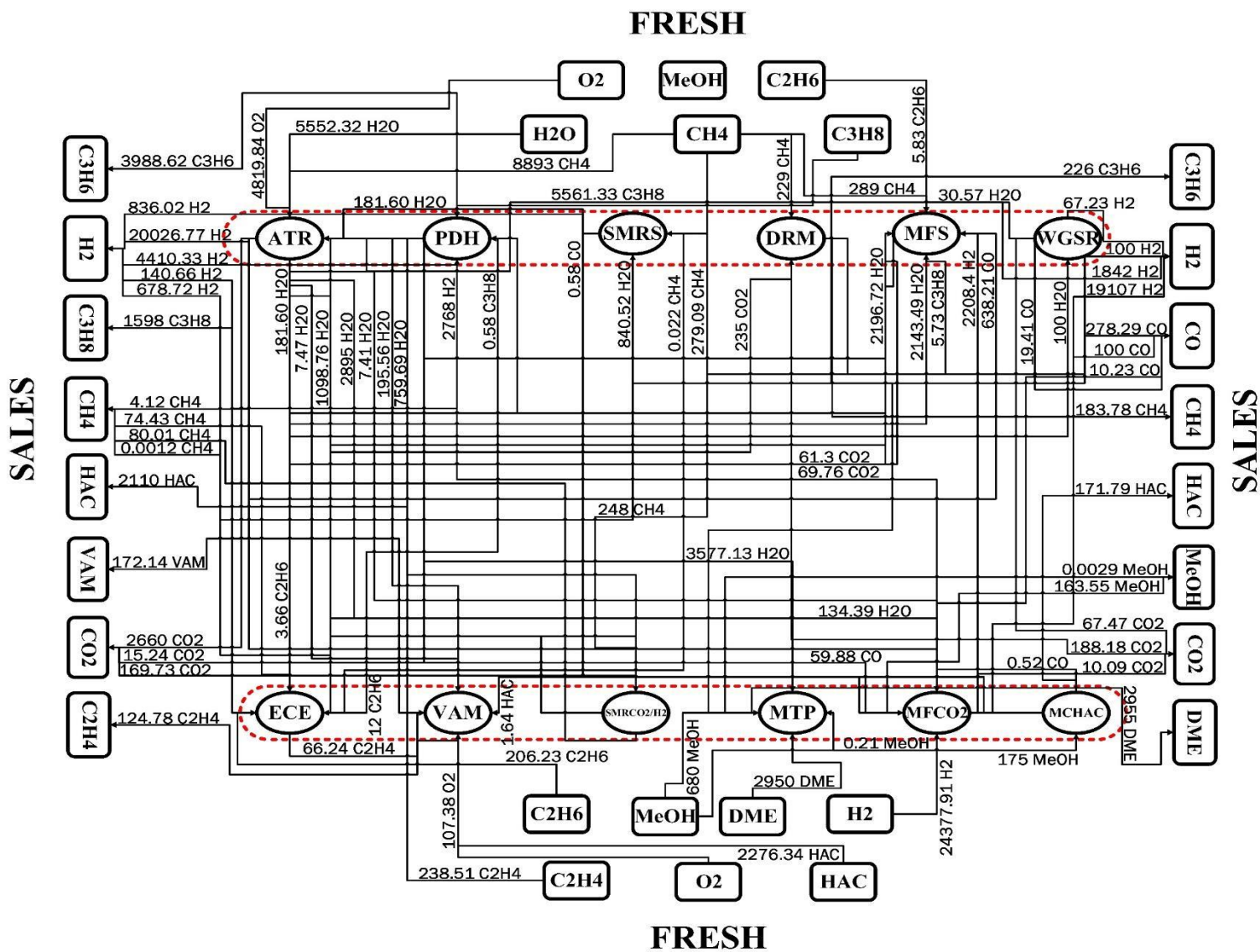


Figura 26. Diagrama detallado del flujo de materiales de la red CHOSYN optimizada.

**Tabla 8.** Condiciones óptimas de funcionamiento de las unidades de proceso.

| Procesos                                                     | Variables            | Unidades | Valores óptimos |
|--------------------------------------------------------------|----------------------|----------|-----------------|
| <i>Reformado autotérmico de metano</i>                       | $T^{ATR}$            | °C       | 849             |
|                                                              | $p^{ATR}$            | bar      | 0.8151          |
| <i>Deshidrogenación de propano</i>                           | $T^{PDH}$            | °C       | 598.00          |
|                                                              | $p^{PDH}$            | bar      | 1.61            |
| <i>Craqueo de etano a etileno</i>                            | $T^{ECE}$            | °C       | 869.99          |
|                                                              | $p^{ECE}$            | bar      | 0.7             |
| <i>monómero de acetato de vinilo</i>                         | $T^{VAM}$            | °C       | 20              |
|                                                              | $p^{VAM}$            | bar      | 7.05            |
| <i>Reformado de metano con vapor a <math>CO_2/H_2</math></i> | $T^{SMR_{CO_2/H_2}}$ | °C       | 809.92          |
|                                                              | $p^{SMR_{CO_2/H_2}}$ | bar      | 2               |
| <i>Reformado de metano con vapor a Syngas</i>                | $T^{SMRS}$           | °C       | 1,219           |
|                                                              | $p^{SMRS}$           | bar      | 1.61            |
| <i>Reformado seco de metano</i>                              | $T^{DRM}$            | °C       | 569             |
|                                                              | $p^{DRM}$            | bar      | 2.5             |
| <i>Metanol a propileno</i>                                   | $T^{MTP}$            | °C       | 213.09          |
|                                                              | $p^{MTP}$            | bar      | 1.95            |
| <i>Metanol a partir de Syngas</i>                            | $T^{MFS}$            | °C       | 245             |
|                                                              | $p^{MFS}$            | bar      | 10              |
| <i>Metanol a partir de <math>CO_2</math></i>                 | $T^{MFCO_2}$         | °C       | 312.34          |
|                                                              | $CATWT^{MFCO_2}$     | kg       | 5,950           |
| <i>Reacción de desplazamiento de gas de agua</i>             | $T^{WGSR}$           | °C       | 439             |
|                                                              | $p^{WGSR}$           | bar      | 0.51            |
| <i>Carbonilación de metanol a ácido acético</i>              | $T^{MCHAC}$          | °C       | 216.15          |
|                                                              | $p^{MCHAC}$          | bar      | 9               |

### 5.2.3. CONCLUSIONES

Este estudio ha demostrado la viabilidad y el potencial de integrar RNA como modelos sustitutos dentro de un marco de optimización híbrido para la síntesis sostenible de CHOSYN en sistemas eco industriales. Mediante la sustitución de modelos mecanicistas detallados por sustitutos basados en RNA, la metodología propuesta reduce significativamente la complejidad computacional, manteniendo al mismo tiempo una alta precisión predictiva, como lo demuestran los consistentes bajos errores de predicción y los altos valores  $R^2$  a través de diversas unidades de proceso. El marco híbrido, implementado a través de OMLT y Pyomo, captura con éxito las complejas interdependencias entre múltiples procesos químicos, permitiendo la optimización multiobjetivo para equilibrar la rentabilidad económica y el impacto ambiental.

Los resultados ponen de relieve las compensaciones inherentes al diseño de procesos sostenibles. La frontera de Pareto revela que se pueden lograr reducciones sustanciales de las emisiones de  $\text{CO}_2$  con sacrificios relativamente modestos en el TAP, lo que sugiere que los objetivos económicos y medioambientales no tienen por qué excluirse mutuamente. La solución de compromiso identificada ejemplifica una estrategia operativa equilibrada, que logra reducciones significativas de las emisiones al tiempo que preserva la mayor parte del rendimiento económico. Además, el análisis de las contribuciones de los productos subraya la importancia de centrarse no sólo en los productos de gran volumen, sino también en las especies de alto margen que impulsan desproporcionadamente la rentabilidad dentro de las redes integradas. Por ejemplo, mientras que el hidrógeno representa más del 65% del volumen total de ventas, su contribución a los beneficios se mantiene por debajo del 10%, en contraste con productos como el dimetiléter y el propileno, que aportan importantes rendimientos económicos a pesar de sus menores volúmenes.

Además, el marco de trabajo actual considera condiciones estacionarias y escenarios deterministas; aún no incorpora comportamientos dinámicos, incertidumbres operativas ni fluctuaciones en la demanda del mercado y la disponibilidad de materias primas, factores todos ellos que pueden influir sustancialmente en la viabilidad de la simbiosis eco-industrial en la práctica. Por tanto, los trabajos futuros deberían explorar la integración de la

optimización estocástica, la modelización dinámica y la asimilación de datos en tiempo real para mejorar la solidez y la aplicabilidad práctica de los diseños de la red CHOSYN.

En conjunto, este trabajo proporciona una base sólida para emplear la optimización híbrida basada en el aprendizaje automático en sistemas industriales complejos. Se avanza en la comprensión metodológica y práctica de cómo los modelos basados en datos pueden apoyar la integración de procesos sostenibles, y ofrece una plataforma versátil que puede ser adaptada y ampliada para aplicaciones más amplias en el panorama en evolución de la fabricación de productos químicos ecológicos.

## BIBLIOGRAFÍA

- Al-Fadhli, M., Mukherjee, R., Wang, W., El-Halwagi, M., 2018. Design of multiperiod C-H-O symbiosis networks. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 6, 9130–9136. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.8b01462>
- Asif, M., Gao, X., Lv, H., Xi, X., Dong, P., 2018. Catalytic hydrogenation of CO<sub>2</sub> from a 600 MW supercritical coal power plant to produce methanol: A techno-economic analysis. *Int. J. Hydrogen Energy* 43, 2726–2741. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.12.086>
- Baltrusaitis, J., Luyben, W.L., 2015. Methane conversion to syngas for gas-to-liquids (GTL): Is sustainable CO<sub>2</sub> reuse via dry methane reforming cost competitive with SMR and ATR processes? *ACS Sustain. Chem. Eng.* 3, 2100–2111. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b00368>
- Boix, M., Montastruc, L., Azzaro-Pantel, C., Domenech, S., 2015. Optimization methods applied to the design of eco-industrial parks: A literature review. *J. Clean. Prod.* 87, 303–317. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2014.09.032>
- Chew, I.M.L., Tan, R., Ng, D.K.S., Foo, D.C.Y., Majozi, T., Gouws, J., 2008. Synthesis of direct and indirect interplant water network. *Ind. Eng. Chem. Res.* 47, 9485–9496. <https://doi.org/10.1021/ie800072r>
- Daoutidis, P., Lee, J.H., Rangarajan, S., Chiang, L., Gopaluni, B., Schweidtmann, A.M., Georgakis, C., 2024. Machine learning in process systems engineering: Challenges and opportunities. *Comput. Chem. Eng.* 181, 108523. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108523>
- De María, R., Díaz, I., Rodríguez, M., Sáiz, A., 2013. Industrial methanol from syngas: Kinetic study and process simulation. *Int. J. Chem. React. Eng.* 11, 469–477. <https://doi.org/10.1515/ijcre-2013-0061>
- Decardi-Nelson, B., Alshehri, A.S., Ajagekar, A., You, F., 2024. Generative AI and process systems engineering: The next frontier. *Comput. Chem. Eng.* 108723. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108723>
- Dimian, A.C., Kiss, A.A., 2020. Novel energy-efficient process for acetic acid production by methanol carbonylation. *Chem. Eng. Res. Des.* 159, 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2020.04.013>

- Farouk, A., El-Halwagi, M., Foo, D., Leng-Chew, I.M., 2021. Development of a C-H-O symbiosis network during conceptual design via economic, sustainability and safety metrics. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 9, 3735–3749. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.0c08553>
- Grossmann, I.E., Harjunkski, I., 2019. Process systems engineering: Academic and industrial perspectives. *Comput. Chem. Eng.* 126, 474–484. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.04.028>
- Hiblot, H., Ziegler-Devin, I., Fournet, R., Glaude, P.A., 2016. Steam reforming of methane in a synthesis gas from biomass gasification. *Int. J. Hydrogen Energy* 41, 18329–18338. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.07.226>
- Jasper, S., El-Halwagi, M.M., 2015. A techno-economic comparison between two methanol-to-propylene processes. *Processes* 3, 684–698. <https://doi.org/10.3390/pr3030684>
- Juárez-García, M., Mungía-López, A.C., Ponce-Ortega, J.M., 2020. Optimization approach to identify fair solutions in the synthesis of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* 59, 5985–5995. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b06993>
- Juárez-García, M., Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M., 2018. A disjunctive programming approach for optimizing carbon, hydrogen and oxygen symbiosis networks. *Process Integr. Optim. Sustain.* 3, 199–212. <https://doi.org/10.1007/s41660-018-0065-y>
- Juárez-García, M., Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M., 2021. Systematic approach for synthesizing carbon-hydrogen-oxygen networks involving detailed process simulations. *Ind. Eng. Chem. Res.* 60, 16378–16393. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c02738>
- Kiss, A.A., Pragt, J.J., Vos, H.J., Bargeman, G., de Groot, M.T., 2016. Novel efficient process for methanol synthesis by CO<sub>2</sub> hydrogenation. *Chem. Eng. J.* 284, 260–269. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.08.101>
- Kondratenko, E.V., Mul, G., Baltrusaitis, J., Larrazábal, G.O., Pérez-Ramírez, J., 2013. Status and perspectives of CO<sub>2</sub> conversion into fuels and chemicals by catalytic, photocatalytic and electrocatalytic processes. *Energy Environ. Sci.* 6, 3112–3135. <https://doi.org/10.1039/C3EE41272E>

- Leonzio, G., 2018. State of art and perspectives about the production of methanol, dimethyl ether and syngas by carbon dioxide hydrogenation. *J. CO2 Util.* 27, 326–354. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2018.08.005>
- Lima, D.F.B., Zanella, F.A., Lenzi, M.K., Ndiaye, P.M., 2012. Modeling and simulation of water-gas shift reactor: An industrial case, in: *Petrochemicals*. InTech. <https://www.intechopen.com/chapters/34193>
- López-Díaz, D.C., Lira-Barragán, L.F., Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M., 2015. Synthesis of eco-industrial parks interacting with a surrounding watershed. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 3, 1564–1578. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.5b00276>
- López-Flores, F.J., Lira-Barragán, L.F., Rubio-Castro, E., El-Halwagi, M.M., Ponce-Ortega, J.M., 2023. Hybrid machine learning–mathematical programming approach for optimizing gas production and water management in shale gas fields. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 11, 6043–6056. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c00569>
- López-Flores, F.J., Ramírez-Márquez, C., Ponce-Ortega, J.M., 2024a. Process systems engineering tools for optimization of trained machine learning models: Comparative and perspective. *Ind. Eng. Chem. Res.* 63, 13966–13979. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00632>
- López-Flores, F.J., Ramírez-Márquez, C., Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., 2024b. Solar photovoltaic panel production in Mexico: A novel machine learning approach. *Environ. Res.* 246, 118047. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.118047>
- Lowe, E.A., 1997. Creating by-product resource exchanges: Strategies for eco-industrial parks. *J. Clean. Prod.* 5, 57–65. [https://doi.org/10.1016/S0959-6526\(97\)00017-6](https://doi.org/10.1016/S0959-6526(97)00017-6)
- Lueg, L., Grimstad, B., Mitsos, A., Schweidtmann, A.M., 2021. reluMIP: Open source tool for MILP optimization of ReLU neural networks (Version 1.0.0) [software]. Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.5601907>
- Luyben, M.L., Tyréus, B.D., 1998. An industrial design/control study for the vinyl acetate monomer process. *Comput. Chem. Eng.* 22, 867–877. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(98\)00030-1](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(98)00030-1)
- Luyben, W.L., 2011. Design and control of a modified vinyl acetate monomer process. *Ind. Eng. Chem. Res.* 50, 10136–10147. <https://doi.org/10.1021/ie201131m>

- Molburg, J.C., Doctor, R.D., 2003. Hydrogen from steam-methane reforming with CO<sub>2</sub> capture, in: *Proc. 20th Annu. Int. Pittsburgh Coal Conf.* Pittsburgh, pp. 40–41.
- Morlet-Espinosa, J., Flores-Tlacuahuac, A., Fuentes-Cortés, L.F., 2023. A combined variational encoding and optimization framework for design of the water–energy–food nexus. *Comput. Chem. Eng.* 170, 108076. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.108076>
- Mukherjee, R., El-Halwagi, M., 2018. Reliability of C-H-O symbiosis networks under source stream uncertainty. *Smart Sustain. Manuf. Syst.* 2, 132–153. <https://doi.org/10.1520/SSMS20180022>
- Noureldin, M.M.B., El-Halwagi, M.M., 2015. Synthesis of C-H-O symbiosis networks. *AIChE J.* 61, 1242–1262. <https://doi.org/10.1002/aic.14714>
- Olateju, I.I., Gibson-Dick, C., Egede, S.C.O., Giwa, A., 2017. Process development for S29 hydrogen production via water-gas shift reaction using Aspen HYSYS. *Int. J. Eng. Res. Afr.* 30, 144–153. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JERA.30.144>
- Padilla-Esquivel, C.A., López-Flores, F.J., Hernández-Pérez, L.G., Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., 2025. Optimizing green urea production: Integration of process simulation, artificial intelligence and sustainable technologies. *J. Clean. Prod.* 501, 145371. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2025.145371>
- Panu, M., Topolski, K., Abrash, S., El-Halwagi, M., 2019. CO<sub>2</sub> footprint reduction via the optimal design of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks (CHOSYNs). *Chem. Eng. Sci.* 203, 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.03.066>
- Perez-Uresti, S.I., Lima, R.M., Martin, M., Jimenez-Gutierrez, A., 2023. On the design of renewable-based utility plants using time series clustering. *Comput. Chem. Eng.* 170, 108124. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.108124>
- Pistikopoulos, E.N., Barbosa-Póvoa, A., Lee, J.H., Misener, R., Mitsos, A., Reklaitis, G.V., Gani, R., 2021. Process systems engineering – the generation next? *Comput. Chem. Eng.* 147, 107252. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107252>
- Rodríguez-Vallejo, D.F., Guillén-Gosálbez, G., Chachuat, B., 2020. What is the true cost of producing propylene from methanol? The role of externalities. *ACS Sustain. Chem. Eng.* 8, 3072–3081. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b05516>

- Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., Nápoles-Rivera, F., El-Halwagi, M.M., Serna-González, M., Jiménez-Gutiérrez, A., 2010. Water integration of eco-industrial parks using a global optimization approach. *Ind. Eng. Chem. Res.* 49, 9945–9960. <https://doi.org/10.1021/ie100762u>
- Rubio-Castro, E., Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M., El-Halwagi, M.M., Pham, V., 2013. Global optimization in property-based inter-plant water integration. *AIChE J.* 59, 813–833. <https://doi.org/10.1002/aic.13874>
- Thiruvengkataswamy, P., Eljack, F.T., Roy, N., Mannan, M.S., El-Halwagi, M.M., 2016. Safety and techno-economic analysis of ethylene technologies. *J. Loss Prev. Process Ind.* 39, 74–84. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2015.11.019>
- Thomas, K., Swift, M.G., Sanchez, E., 2011. *Shale Gas and New Petrochemicals Investment: Benefits for the Economy, Jobs and US Manufacturing*. American Chemistry Council. [http://www.chemwinfoc.com/private\\_folder/UploadFile2013May/ACC-Shale-Report\\_by\\_ACC\\_March\\_2013.pdf](http://www.chemwinfoc.com/private_folder/UploadFile2013May/ACC-Shale-Report_by_ACC_March_2013.pdf)
- Topolski, K., Noureldin, M.B., Eljack, F.T., El-Halwagi, M., 2018. Anchor-tenant approach to the synthesis of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks. *Comput. Chem. Eng.* 116, 80–90. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.02.024>
- Topolski, K., Lira-Barragán, L.F., Panu, M., Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M., 2019. Integrating mass and energy through the anchor-tenant approach for the synthesis of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* 58, 16761–16776. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b02622>
- Torres, A.I., Ferreira, J., Pedemonte, M., 2024. Machine learning and process systems engineering for sustainable chemical processes – a short review. *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* 51, 100982. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2024.100982>
- Turner, M., Chmiela, A., Koch, T., Winkler, M., 2024. PySCIPOpt-ML: Embedding trained machine learning models into mixed-integer programs. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2312.08074>
- Wu, W., Tunngpanututh, C., 2012. Optimization of a methane autothermal reforming-based hydrogen production system with low CO<sub>2</sub> emissions. *IFAC Proc.* Vol. 45, 661–666. <https://doi.org/10.3182/20120710-4-SG-2026.00023>

Zamora-Aguirre, B.T., López-Flores, F.J., Ramírez-Márquez, C., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J.M., 2025. Modeling and optimization of an integrated system for green dimethyl ether production: Process simulation, modeling with artificial intelligence and optimization methods. Chem. Eng. Process. Process Intensif. 216, 110383. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2025.110383>

# Hugo Eduardo Medrano Minet

## Diseño Óptimo de Redes CHOSYN a Través de Herramientas Híbridas de Programación Matemática y Aprendizaje Automát...

 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

### Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid:::3117:474240695

Fecha de entrega

16 jul 2025, 10:44 a.m. GMT-6

Fecha de descarga

16 jul 2025, 10:57 a.m. GMT-6

Nombre de archivo

Diseño Óptimo de Redes CHOSYN a Través de Herramientas Híbridas de Programación Matemática....pdf

Tamaño de archivo

1.8 MB

87 Páginas

21.778 Palabras

121.998 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 |                                                                                                                     |                                    |
|-------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|
| <b>Programa educativo</b>                       | Maestría en Ciencias en Ingeniería Química                                                                          |                                    |
| <b>Título del trabajo</b>                       | Diseño Óptimo de Redes CHOSYN a Través de Herramientas Híbridas de Programación Matemática y Aprendizaje Automático |                                    |
|                                                 | <b>Nombre</b>                                                                                                       | <b>Correo electrónico</b>          |
| <b>Autor/es</b>                                 | Hugo Eduardo Medrano Minet                                                                                          | 1547874a@umich.mx                  |
| <b>Director</b>                                 | Fabrizio Nápoles Rivera                                                                                             | fabrizio.napoles@umich.mx          |
| <b>Codirector</b>                               | José María Ponce Ortega                                                                                             | Jose.ponce@umich.mx                |
| <b>Coordinador del programa</b>                 | María del Carmen Chávez Parga                                                                                       | mae.cs.ingenieria.quimica@umich.mx |

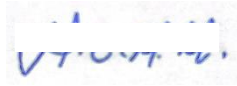
| Uso de Inteligencia Artificial    |                    |                    |
|-----------------------------------|--------------------|--------------------|
| <b>Rubro</b>                      | <b>Uso (sí/no)</b> | <b>Descripción</b> |
| <b>Asistencia en la redacción</b> | No                 |                    |

# 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          |             |
| Traducción a otra lengua                   | No          |             |
| Revisión y corrección de estilo            | No          |             |
| Análisis de datos                          | No          |             |
| Búsqueda y organización de información     | No          |             |
| Formateo de las referencias bibliográficas | No          |             |
| Generación de contenido multimedia         | No          |             |
| Otro                                       | No          |             |

| Datos del solicitante |                                                                                                                     |
|-----------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Nombre y firma        | Hugo Eduardo Medrano Minet<br> |
| Lugar y fecha         | Morelia, Michoacán 15/07/2025                                                                                       |