



**UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



**DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

TESIS

“Enfoque Híbrido de Aprendizaje Automático y Técnicas de Optimización Aplicado a Sistemas Energéticos Sostenibles”

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA

M.C.I.Q. Francisco Javier López Flores

DIRECTOR

Dr. José María Ponce Ortega

Co-DIRECTOR

Dr. Eusiel Rubio Castro

Morelia, Michoacán, Agosto de 2025

CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	iv
ÍNDICE DE FIGURAS	v
ABSTRACT	viii
RESUMEN	ix
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Marco contextual	1
1.2. Justificación	4
1.3. Planteamiento del problema	5
1.4. Hipótesis	5
1.5. Objetivos	6
1.5.1. Objetivo General	6
1.5.2. Objetivos Particulares	6
Capítulo 2. MARCO TEÓRICO	7
2.1. Aprendizaje Automático	7
2.1.1. Clasificación	8
2.1.2. Etapas del Aprendizaje Automático	10
2.2. Algoritmos del aprendizaje supervisado	11
2.2.1. Regresión lineal (LiR) y Regresión logística (LoR)	12
2.2.2. Árboles de decisión (DT)	13
2.2.3. Bosques Aleatorios (RF)	14
2.2.4. Proceso gaussiano (GP)	15
2.2.5. Redes Neuronales Artificiales (RNA)	16
2.2.5.1. Entrenamiento de RNA	19
2.2.6. Optimización de hiperparámetros	21
2.3. Optimización	23
2.3.1. Optimización metaheurística	24
2.3.2. Optimización determinista	25
Capítulo 3. PLANTEAMIENTO 1	28
3.1. Generalidades	29
3.2. Planteamiento del Problema	31

3.3.	Metodología.....	32
3.3.1.	Simulaciones de motores térmicos	33
3.3.2.	Modelo global.....	35
3.4.	Resultados.....	38
3.4.1.	Caso práctico	38
3.4.2.	Análisis Pinch.....	41
3.4.3.	Resultados de los modelos MLP	42
3.4.4.	Resultados de la optimización	45
Capítulo 4.	PLANTEAMIENTO 2.....	51
4.1.	Generalidades	52
4.2.	Metodología.....	54
4.2.1.	Preparación de los datos	55
4.2.2.	Análisis de sensibilidad de los hiperparámetros.....	59
4.2.3.	Optimización de las variables.....	60
4.3.	Resultados.....	61
4.3.1.	Resultados de los modelos MLP	61
4.3.2.	Evaluación de un área de estudio y optimización multiobjetivo	63
Capítulo 5.	PLANTEAMIENTO 3.....	70
5.1.	Generalidades	71
5.2.	Metodología.....	72
5.2.1.	Optimización de Hiperparámetros.....	73
5.2.2.	Modelo global.....	74
5.2.2.1.	Ilustración matemática del modelo RNA	75
5.2.2.2.	Balances de masa.....	76
5.2.2.3.	Capacidad y limitaciones de diseño	79
5.2.2.4.	Agua fresca total utilizada	80
5.2.2.5.	Costos de operación.....	80
5.2.2.6.	Costos de capital.....	82
5.2.2.7.	Costo de perforación y terminación.....	84
5.2.2.8.	Restricciones de ubicación	84
5.2.2.9.	Función objetivo	84

5.3.	Resultados y Discusión.....	85
5.3.1.	Modelo RNA	85
5.3.2.	Caso practico	87
5.3.3.	Resultados de la optimización	89
Capítulo 6.	PLANTEAMIENTO 4.....	96
6.1.	Generalidades	97
6.2.	Metodología.....	98
6.2.1.	Conjunto de datos	99
6.2.2.	Modelo Global.....	101
6.3.	Caso Practico	110
6.4.	Resultados y Discusion.....	111
6.4.1.	Modelo RNA	111
6.4.2.	Optimización Multiobjetivo	112
6.4.3.	Residuos de Paneles Solares Fotovoltaicos en México	119
Capítulo 7.	CONCLUSIONES	122
7.1.	Trabajos futuros.....	124
CONTRIBUCIONES		126
ARTÍCULOS PUBLICADOS		126
ARTÍCULOS BAJO REVISIÓN		129
LIBROS PUBLICADOS		130
Apéndice I.	Portadas de las Publicaciones	131
Bibliografía.....		153

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla	Página
2.1 Algunos hiperparámetros asociados a RF y ANN.	22
3.1 Condiciones de cálculo de los motores térmicos.	34
3.2 Datos de las corrientes del caso práctico.	40
3.3 Datos unitarios de los combustibles para el caso práctico.	40
3.4 Especificación de los conjuntos de datos.	42
3.5 Errores de predicción del conjunto de validación.	45
3.6 Resultados detallados de la evaluación del SRC y de la precisión.	49
3.7 Resultados detallados de la evaluación del ORC y de la precisión.	49
3.8 Resultados detallados de la evaluación del ciclo AR y de la precisión.	50
4.1 Lista de las características de los parámetros del conjunto de datos.	58
4.2 Hiperparámetros y rangos utilizados en el análisis de sensibilidad.	60
4.3 Valores de los hiperparámetros de los mejores modelos obtenidos mediante el análisis de sensibilidad.	61
4.4 Errores obtenidos para los modelos mejor entrenados.	62
5.1 Espacio de búsqueda de hiperparámetros para el algoritmo de Hyperband.	85
5.2 Errores obtenidos para los datos de entrenamiento y validación.	86
5.3 Resultados detallados del caso de estudio.	91
6.1 Lista de parámetros de la base de datos.	100
6.2 Errores obtenidos para los datos de validación errores obtenidos para los datos de validación.	112
6.3 Producción de emisiones y consumo de agua por capacidad instalada y potencia generada.	116
6.4 Resultados detallados de la solución de compromiso.	118
6.5 Condiciones óptimas de operación de las plantas de producción de silicio policristalino.	119
6.6 Cantidad de residuos que generarán en México las instalaciones solares actuales.	120

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura		Página
1.1	Propuesta de estrategia de solución	3
2.1	Jerarquía e iteración de la inteligencia artificial, aprendizaje automático, aprendizaje profundo y ciencia de datos.	7
2.2	Proceso de aprendizaje automático	8
2.3	Representación esquemática de la regresión logística.	12
2.4	Representación esquemática de un árbol de decisión.	14
2.5	Representación esquemática de bosques aleatorios.	15
2.6	Representación de proceso gaussiano.	16
2.7	Representación de la estructura de una RNA de tipo MLP y de la operación de una neurona.	17
2.8	Ilustración grafica de las principales funciones de activación.	19
2.9	Representación esquemática del proceso de entrenamiento (optimización).	19
3.1	Superestructura propuesta para el sistema energético integrado	32
3.2	Representación esquemática de la metodología propuesta.	33
3.3	Diagrama de flujo de la planta farmacéutica.	40
3.4	GCC para el caso de estudio.	41
3.5	Resultados de predicción en la etapa de validación de los modelos MLP para las salidas deseadas de SRC (a), ORC (b) y ciclo AR (c).	44
3.6	Curva de Pareto para TAP, GEI y Empleos.	45
3.7	Combustibles utilizados por las diferentes soluciones.	47
3.8	Solución óptima para la energía de integración.	49
4.1	Representación esquemática de la estrategia implementada para el desarrollo de este estudio.	54
4.2	La metodología general utilizada para el desarrollo de este proyecto.	56
4.3	Ubicación de la zona de estudio donde se recopilaron los datos de los pozos de gas shale.	58

4.4	Gráficos de dispersión y matriz del coeficiente de correlación de Pearson que muestran las correlaciones por pares de los parámetros y los histogramas de cada parámetro.	59
4.5	Comparación de los valores reales frente a los calculados por los modelos para el conjunto de entrenamiento y el conjunto de validación; modelo de agua de retorno a 90 días (a) modelo de gas acumulado a 12 meses (b).	63
4.6	Curvas de Pareto para el total de gas acumulado en 12 meses y el total de agua de fractura para los escenarios 1 y 2.	66
4.7	Ubicación de cada pozo dentro del área de estudio propuesta en la cuenca de Burgos.	67
4.8	TFW consumido para completar cada pozo y pronóstico de 12CGA para cada pozo en ambos escenarios; TFW se representa con puntos azules y 12CGA con puntos rojos.	68
4.9	Pronóstico de flujo de retorno a 90 días para cada pozo en ambos escenarios	69
5.1	Estrategia de solución propuesta para modelos RNA y optimización determinista	72
5.2	Descripción general de la metodología propuesta.	73
5.3	Superestructura propuesta para optimizar el proceso de fracturación hidráulica.	75
5.4	Comparación de los valores reales frente a los valores pronosticados por el modelo; agua de retorno (a) y el gas acumulado total producido (b).	87
5.5	Programación de la fase de terminación de los pozos.	88
5.6	Curva Pareto para <i>TAP</i> y <i>TWR</i> .	90
5.7	Agua fresca total requerida y agua reutilizada para cada pozo en la solución C.	93
5.8	Producción acumulada de gas y agua de retorno en cada pozo de la solución C.	94
5.9	Ubicación óptima de cada pozo en el área de estudio.	95

6.1	Representación esquemática de la metodología propuesta.	99
6.2	Superestructura propuesta para la producción de paneles solares fotovoltaicos	101
6.3	Evolución de la capacidad agregada y capacidad instalada de tecnología solar fotovoltaica en México 2015-2022	111
6.4	Curva de Pareto para <i>TOP</i> , emisiones generadas y <i>TWC</i> .	114
6.5	Distribución del beneficio, el consumo de energía y el consumo de agua para las distintas plantas de producción en la solución de compromiso.	117
6.6	Módulos producidos cada año en la solución de compromiso.	118

ABSTRACT

This thesis lays the foundation for a quantitative approach that synergistically integrates machine learning models with optimization techniques to improve decision-making in sustainable energy systems. Four representative case studies are evaluated. In Approach 1, thermal machines (SRC, ORC, and absorption cycle) for waste heat recovery are modeled and optimized. In Approach 2, production and water management of shale gas wells are predicted and optimized using artificial neural networks (ANN); both cases are solved using multi-objective genetic algorithms, generating Pareto fronts that balance economic benefits, emissions, and social metrics. Approach 3 employs ANN integrated into a MINLP model to simultaneously optimize gas production and water reuse in unconventional reservoirs, while Approach 4 integrates ANN models into an NLP scheme to maximize profitability and minimize resource consumption in the manufacture of photovoltaic panels in Mexico. These two cases are solved using deterministic methods (MINLP and NLP), which guarantee convergence and reproducibility. The results confirm that the explicit incorporation of machine learning models into optimization formulations enables a more faithful representation of process behavior and leads to feasible solutions that outperform conventional designs in terms of economic and environmental indicators. Furthermore, a substantial reduction in computational effort is observed compared to detailed simulations, without sacrificing predictive accuracy. Overall, the research demonstrates the feasibility and competitive advantage of integrating machine learning with optimization strategies to design and operate cleaner, more efficient, and more resilient energy processes. The proposed methodology also offers transferable guidelines applicable to other process engineering contexts.

Keywords: Machine Learning; Mathematical Optimization; Artificial Neural Networks; Energy Systems; Hybrid Approach.

RESUMEN

Esta tesis sienta las bases de un enfoque cuantitativo que integra de forma sinérgica modelos de aprendizaje automático y técnicas de optimización para mejorar la toma de decisiones en sistemas de energía sostenible. Se evalúan cuatro casos de estudio representativos. En el Planteamiento 1, se modelan y optimizan ciclos térmicos (SRC, ORC y ciclo de absorción) para recuperación de calor residual; en el Planteamiento 2, se predicen y optimizan la producción y gestión hídrica de pozos de gas de lutitas mediante redes neuronales artificiales (RNA); ambos se resuelven con algoritmos genéticos multiobjetivo, trazando frentes de Pareto para identificar el equilibrio en términos del beneficio económico, emisiones y métricas sociales. En el Planteamiento 3 se emplean RNA integradas en un modelo MINLP para optimizar simultáneamente la producción de gas y el reúso de agua en yacimientos no convencionales, mientras que en el Planteamiento 4 se integran modelos RNA en un esquema NLP para maximizar la rentabilidad y minimizar recursos en la manufactura de paneles fotovoltaicos en México; los Planteamientos 3 y 4 se resuelven con métodos deterministas (MINLP y NLP) que garantizan convergencia y reproducibilidad. Los resultados confirman que la incorporación explícita de modelos de aprendizaje automático en las formulaciones de optimización permite capturar con mayor fidelidad el comportamiento de los procesos y obtener soluciones factibles que superan a los diseños convencionales en cuanto a indicadores económicos y ambientales. Además, se observa una reducción sustancial del esfuerzo computacional frente a simulaciones detalladas, sin sacrificar precisión predictiva. En conjunto, la investigación demuestra la viabilidad y ventaja competitiva de la estrategia aprendizaje automático y optimización para diseñar y operar procesos energéticos más limpios, eficientes y resilientes, ofreciendo lineamientos metodológicos transferibles a otros contextos de la ingeniería de procesos.

Palabras Clave: Aprendizaje Automático; Programación Matemática; Redes Neuronales Artificiales; Sistemas Energéticos; Enfoque Híbrido.

Capítulo 1. INTRODUCCIÓN

1.1. Marco contextual

En las últimas décadas, la demanda mundial de energía ha crecido de forma sostenida, a la par del desarrollo industrial y poblacional. Este incremento, sumado a la volatilidad geopolítica reciente, ha detonado una crisis energética global sin precedentes (International Energy Agency, 2022). Al mismo tiempo, el cambio climático se ha convertido en una amenaza apremiante: la continua emisión de gases de efecto invernadero está elevando las temperaturas promedio del planeta y desencadenando fenómenos meteorológicos extremos, según lo documentado por el Panel Intergubernamental de Cambio Climático (IPCC, 2023). Frente a esta situación, la sostenibilidad ha emergido como principio rector en el diseño de políticas y tecnologías energéticas. Se exige a los sistemas energéticos actuales una transformación profunda para dejar atrás la dependencia de combustibles fósiles y transitar hacia matrices más limpias y renovables (Fuso Nerini et al., 2018). De hecho, numerosos países se han comprometido en foros internacionales a acelerar el despliegue de energías renovables y mejorar la eficiencia energética en todos los sectores, reconociendo que solo así se podrá satisfacer la demanda global de energía de forma segura, económica y ambientalmente responsable (Rahman et al., 2022). Este contexto global de crisis y conciencia climática ejerce una presión significativa sobre la ingeniería de sistemas energéticos, la cual debe proveer soluciones innovadoras que equilibren seguridad energética, competitividad económica y mitigación del impacto ambiental en un marco de desarrollo sostenible (Banik and Sengupta, 2021).

La magnitud y complejidad de los desafíos energéticos actuales demandan enfoques innovadores en la planificación, diseño y operación de sistemas. En particular, la integración de técnicas de aprendizaje automático (Daoutidis et al., 2024) con métodos de optimización basados en programación matemática se vislumbra como una estrategia promisorio para afrontar dichos desafíos (Ceccon et al., 2022). Tradicionalmente, las decisiones en ingeniería de procesos energéticos se apoyaron en modelos mecánicos (basados en primeros principios) y en métodos de optimización determinísticos; sin embargo, estos enfoques presentan limitaciones cuando se aplican a sistemas de gran escala con múltiples variables, no linealidades marcadas y datos heterogéneos.

Por un lado, la Inteligencia Artificial (IA) mediante el aprendizaje automático ofrece herramientas para construir modelos predictivos o subrogados a partir de datos masivos, capaces de capturar comportamientos complejos que los modelos fenomenológicos clásicos no logran describir con facilidad (Decardi-Nelson et al., 2024; Torres et al., 2024). Estos modelos basados en datos pueden reemplazar, con alta fidelidad y menor costo computacional, a simulaciones detalladas de componentes o procesos específicos. Por otro lado, la optimización proporciona un marco riguroso de decisión, permitiendo identificar configuraciones óptimas de operación o diseño conforme a uno o varios objetivos (p. ej., minimizar costos y emisiones, maximizar eficiencia energética, etc.), bajo las restricciones impuestas por la tecnología y el entorno.

Aunque por separado el aprendizaje automático y la optimización basada en programación matemática han sido ampliamente aplicados sistemas energéticos, son escasos los trabajos que abordan una integración metodológica sólida de ambos. Históricamente, muchas aplicaciones de aprendizaje automático en ingeniería se han centrado en la predicción de propiedades o el modelado de comportamiento de procesos, mientras que la optimización de procesos ha operado mayormente con modelos determinísticos fijos (lineales o no lineales obtenidos de balances y ecuaciones físicas). La intersección (es decir, el uso de modelos de aprendizaje automático entrenados dentro de esquemas de optimización para mejorar la toma de decisiones) permanece relativamente incipiente. Recientemente han surgido herramientas computacionales específicas que facilitan esta tarea (López-Flores et al., 2024), pero su adopción en casos de estudio reales aún es limitada. En particular, en el dominio de ingeniería de procesos energéticos sostenibles, la literatura reporta pocos ejemplos donde algoritmos de optimización multiobjetivo incorporan directamente modelos de redes neuronales, árboles de decisión u otras técnicas de aprendizaje automático previamente entrenadas para representar fenómenos complejos. Esta carencia metodológica representa una oportunidad: desarrollar y formalizar esquemas híbridos que llenen el vacío entre las capacidades predictivas del aprendizaje automático y el rigor prescriptivo de la optimización. La presente investigación busca cerrar esta brecha, proporcionando un marco unificado y demostraciones concretas de su utilidad en diversos contextos energéticos (ver **Figura 1.1**).

Asimismo, el impacto práctico esperado es significativo: las metodologías y herramientas derivadas de esta investigación pueden ayudar a la industria energética y manufacturera a tomar decisiones más informadas y eficientes, reduciendo costos y emisiones, y mejorando la sostenibilidad de sus operaciones. Por ejemplo, los resultados de los casos de estudios abordados en este proyecto ilustran beneficios tangibles como ahorros de recursos hídricos, reducciones de huella de carbono y mejoras en rentabilidad al adoptar enfoques híbridos de aprendizaje automático y optimización.

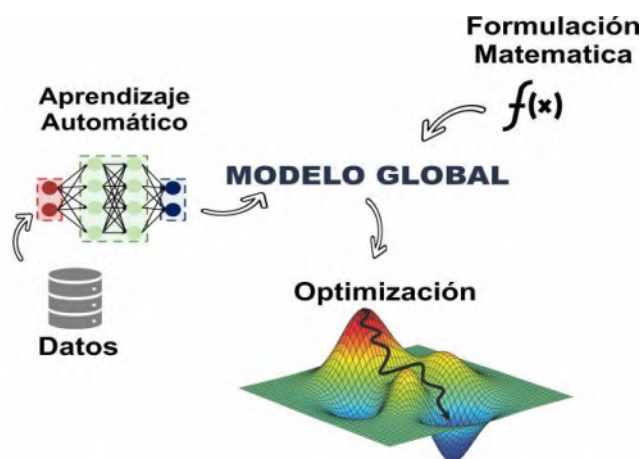


Figura 1.1. Propuesta de un enfoque híbrido para la solución de problemas mediante aprendizaje automático y herramientas de optimización.

1.2. Justificación

En los sistemas de energía sostenible y, en general, en los procesos industriales modernos, la toma de decisiones involucra variables altamente interdependientes, comportamientos no lineales y múltiples objetivos de naturaleza económica, ambiental y social. Esta complejidad dificulta la construcción de modelos matemáticos basados estrictamente en primeros principios capaces de predecir todas las trayectorias operativas con la precisión y la velocidad requeridas en la práctica industrial.

Durante la última década, la IA, y en particular el aprendizaje automático, ha demostrado una capacidad sobresaliente para extraer patrones a partir de grandes volúmenes de datos históricos y generar modelos predictivos con elevado poder explicativo y bajo costo computacional. Sin embargo, si bien estos modelos son óptimos para describir un sistema, no ofrecen por sí mismos un mecanismo sistemático para prescribir condiciones de operación o diseño óptimas. En contraste, la optimización matemática proporciona un marco riguroso para identificar configuraciones óptimas bajo restricciones técnicas y normativas, pero su desempeño se ve limitado cuando incorpora simulaciones de alta fidelidad costosas o cuando enfrenta incertidumbre inherente en datos y parámetros. Por tanto, este proyecto propone integrar modelos de aprendizaje automático directamente en esquemas de optimización y multiobjetivo, sintetizando las fortalezas de ambos enfoques. El enfoque híbrido aprendizaje automático y optimización propuesto combina modelos basados en datos con técnicas prescriptivas para representar con mayor precisión la complejidad de los procesos energéticos, subrogados simulaciones costosas por aproximaciones predictivas más ágiles y, en consecuencia, facilitar decisiones que integren eficiencia, rentabilidad y mitigación ambiental.

1.3. Planteamiento del problema

Los sistemas de energía sostenible exigen decisiones óptimas que consideren simultáneamente criterios económicos, ambientales y operativos. Los modelos fenomenológicos convencionales son costosos y, con frecuencia, inexactos en entornos de alta complejidad. Por su parte, los modelos de IA describen con precisión el comportamiento del proceso, pero no proporcionan reglas formales para seleccionar las mejores condiciones de operación o diseño. Por tanto, se carece de un marco integrado que combine el poder predictivo del aprendizaje automático con la rigurosidad prescriptiva de la optimización basada en programación matemática. Esta tesis aborda el desarrollo y validación de ese enfoque híbrido para mejorar la toma de decisiones en sistemas energéticos sostenibles.

1.4. Hipótesis

Si los modelos de aprendizaje automático se integran formalmente con técnicas de optimización, entonces las predicciones del comportamiento de los sistemas energéticos y las decisiones de operación o diseño serán más precisas y eficientes que las obtenidas con métodos convencionales.

1.5. Objetivos

1.5.1. Objetivo General

Desarrollar un enfoque híbrido que integre modelos de aprendizaje automático con técnicas de optimización matemática, con el fin de mejorar la precisión de las predicciones y la eficiencia de la toma de decisiones en sistemas energéticos sostenibles.

1.5.2. Objetivos Particulares

- Identificar casos de estudio representativos de sistemas energéticos en los que la toma de decisiones resulte crítica.
- Desarrollar modelos predictivos basados en aprendizaje automático que describan con fidelidad el comportamiento de los procesos seleccionados.
- Integrar dichos modelos en formulaciones de optimización multiobjetivo que permitan evaluar configuraciones de operación o diseño.
- Aplicar y contrastar el enfoque híbrido aprendizaje automático y optimización en los casos de estudio, determinando su impacto sobre la calidad de las predicciones y la eficiencia de las decisiones.
- Diseñar lineamientos metodológicos que faciliten la transferencia del marco propuesto a otros problemas de ingeniería energética.

Capítulo 2. MARCO TEÓRICO

2.1. Aprendizaje Automático

En el amplio campo de la IA, la disciplina que busca dotar a las máquinas de capacidades de razonamiento, aprendizaje y toma de decisiones, el aprendizaje automático (*machine learning*) destaca como una de sus ramas más dinámicas y aplicadas, ya que desarrolla algoritmos capaces de extraer patrones de los datos y perfeccionar continuamente su rendimiento. Además, el aprendizaje automático es fundamental dentro de la ciencia de datos (**Figura 2.1**). Asimismo, el aprendizaje automático se puede denominar métodos computacionales que utilizan la experiencia para mejorar el rendimiento o hacer predicciones precisas. En este caso, la experiencia se refiere a la información pasada de la que dispone el aprendiz, que suele adoptar la forma de datos electrónicos recogidos y puestos a disposición para su análisis. Estos datos pueden adoptar la forma de conjuntos de entrenamiento digitalizados y etiquetados por humanos, o de otros tipos de información obtenidos mediante la interacción con el entorno. En todos los casos, su calidad y tamaño son cruciales para el éxito de las predicciones realizadas por el aprendizaje (Mohri et al., 2018).

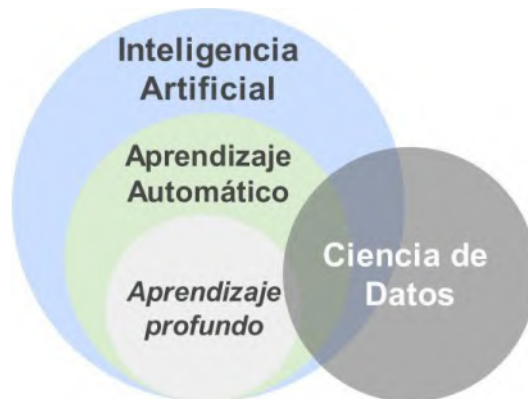


Figura 2.1. Jerarquía e iteración de la inteligencia artificial, aprendizaje automático, aprendizaje profundo y ciencia de datos.

Unos ejemplos a considerar del problema de aprendizaje son el aprendizaje natural de los animales. Algunos fundamentos del aprendizaje automático surgen en este contexto.

En relación a lo anterior, podemos mencionar el caso de la timidez del cebo; las ratas aprenden a evitar los cebos venenosos: Cuando las ratas se encuentran con alimentos de aspecto u olor novedosos, primero comerán cantidades muy pequeñas, y la alimentación

posterior dependerá del sabor del alimento y de su efecto fisiológico. Si el alimento produce un efecto negativo, el nuevo alimento se asociará a menudo con la enfermedad y, por tanto, las ratas no lo comerán. Está claro que hay un mecanismo de aprendizaje en juego: el animal utilizó la experiencia pasada con algún alimento para adquirir experiencia en la detección de la seguridad de este alimento. Si la experiencia pasada con el alimento tuvo una etiqueta negativa, el animal predice que también tendrá un efecto negativo cuando lo encuentre en el futuro. Además, después de que las ratas encuentren un ejemplo de un determinado tipo de comida, aplican su actitud hacia ella en nuevos ejemplos no vistos de comida de olor y sabor similares (Shalev-Shwartz y Ben-David, 2014).

Un algoritmo de aprendizaje depende de los datos utilizados, el aprendizaje automático está intrínsecamente relacionado con el análisis de datos y la estadística. En general, las técnicas de aprendizaje son métodos basados en datos que combinan conceptos fundamentales de la informática con ideas de la estadística, la probabilidad y la optimización. En otras palabras, se denomina aprendizaje por que el proceso se asemeja a ser entrenado con los datos para encontrar un modelo (programa) de predicción altamente eficiente. Por lo tanto, los datos usados que el aprendizaje automático usa en el proceso se denominan, datos de entrenamiento (Kim, 2017). La **Figura 2.2** ilustra lo que ocurre en el proceso de Aprendizaje Automático.



Figura 2.2. Proceso de aprendizaje automático

2.1.1. Clasificación

Se han desarrollados muchos tipos de técnicas de aprendizaje automático para resolver problemas en diversos campos. Estas técnicas de aprendizaje automático se pueden

clasificar en tres tipos según el método de entrenamiento (Kim, 2017; Guido, 2016; Russell, 2018).

1. **Aprendizaje Supervisado:** se proporciona un conjunto de ejemplos etiquetados como datos de entrenamiento, con las respuestas correctas (objetivos), y basándose en este conjunto de datos de entrenamiento, el algoritmo generaliza para responder correctamente a todas las entradas posibles, además, se consideran datos de pruebas. Este es el escenario más común asociado a los problemas de clasificación, y regresión. Un ejemplo claro del aprendizaje supervisado es el problema de detección de *spam*, donde se considera un escenario en el que el aprendiz recibe correos electrónicos de entrenamiento para los que se proporciona la etiqueta *spam/no spam*. En base a este entrenamiento, el aprendiz tiene que averiguar una regla para etiquetar un mensaje de correo electrónico recién llegado. Por ello, el aprendizaje supervisado describe un escenario en el que un ejemplo de entrenamiento (la experiencia), contiene información significativa (etiquetas), la cual está ausente en los ejemplos de prueba no vistos a los que se les aplica la experiencia aprendida. La experiencia obtenida tiene como objetivo predecir información que falta en los datos de prueba. En estos casos, se puede considerar el entorno como un profesor que “supervisa” al estudiante proporcionándole información adicional (etiquetas).

2. **Aprendizaje no Supervisado:** El aprendiz recibe exclusivamente datos de entrenamiento no etiquetados y realiza predicciones para todos los puntos no vistos. Por ello, no se proporcionan respuestas correctas, sino que el algoritmo trata de identificar similitudes entre los datos recibidos, de modo que las entradas que tienen algo (características) en común se clasifican juntas. Dado que, en general, no se dispone de ningún ejemplo etiquetado, puede resultar difícil evaluar cuantitativamente el rendimiento de un aprendiz. Un ejemplo del aprendizaje no supervisado es el problema de detección de anomalías, donde todo lo que el aprendiz recibe como entrenamiento es un gran conjunto de mensajes de correo electrónico (sin etiquetas) y la tarea del aprendiz es detectar mensajes inusuales. Cabe señalar que en el aprendizaje no supervisado no hay distinción entre los datos de entrenamiento y los de prueba. El aprendiz procesa los datos de entrada con el objetivo de obtener un resumen o una versión comprimida de esos datos. La agrupación de un conjunto de datos en subconjuntos de objetos similares es un ejemplo típico de esta tarea.

3. **Aprendizaje por Reforzamiento:** Es un paradigma en el que un agente autónomo aprende a tomar decisiones mediante la interacción continua con un entorno. En cada paso, el agente observa el estado del sistema, ejecuta una acción siguiendo una política (determinística o estocástica) y recibe una señal escalar de recompensa que cuantifica lo “buena” o “mala” que fue su acción a la luz de un objetivo global. A diferencia del aprendizaje supervisado, el agente no dispone de un conjunto de pares entrada-salida correctos; y, a diferencia del no supervisado, la señal de recompensa orienta explícitamente la búsqueda de comportamientos óptimos. El aprendizaje consiste en ajustar su política para maximizar la recompensa acumulada a largo plazo, equilibrando exploración (probar acciones nuevas) y explotación (aprovechar el conocimiento actual). Por ello se alude con frecuencia al aprendizaje con crítico: el entorno o un “crítico” solo emite la puntuación (recompensa o castigo) sin ofrecer indicaciones directas sobre cómo corregir o mejorar las acciones, de modo que el agente debe descubrir por sí mismo la estrategia óptima a través de ensayo y error sofisticado.

2.1.2. Etapas del Aprendizaje Automático

A continuación, se explica brevemente el proceso por el que se pueden seleccionar, aplicar y evaluar los algoritmos de aprendizaje automático para un problema en específico (Marsland, 2014).

1. **Recolección y preparación de Datos:** en un problema completamente nuevo para poder elegir los datos apropiados, este proceso debe de fusionarse con el paso de selección de características, por lo que solo se recolecten los datos necesarios. Esto suele hacerse reuniendo un conjunto de datos razonablemente pequeño con todas las características que se consideren útiles, y experimentando con él antes de elegir las mejores características y recoger y analizar el conjunto de datos completo. A menudo, los datos son difíciles de recolectar, ya sea por que requieren la realización de mediciones, o porque se encuentran en una gran variedad de lugares y formatos, y fusionarlos adecuadamente es difícil, al igual que se debe de asegurar que estén limpios; que no contengan erros significativos, datos perdidos, entre otras. También, hay que tener en cuenta la cantidad de datos. Los algoritmos de aprendizaje automático necesitan cantidades importantes de datos, sin demasiado ruido, pero el aumento del tamaño de los conjuntos de datos conlleva un aumento de los costos de

cálculo, y el punto óptimo en el que hay suficientes datos, sin una excesiva sobrecarga, normalmente es imposible de predecir.

2. **Selección de Características:** consta en identificar las características más útiles para el problema que se está examinando. Por lo que se requiere un conocimiento previo del problema y de los datos; en algunos problemas se puede usar el sentido común para identificar algunas características potencialmente útiles y excluir otras. También, es necesario que las características puedan recolectarse sin gastos ni tiempos significativos.

3. **Elección del Algoritmo:** Dado el conjunto de datos, la elección de un algoritmo (o algoritmos) apropiado es fundamenta, por lo que se debe de adquirir conocimientos previos de los principios subyacentes de cada algoritmo y por ende determinar con cuales problemas es posible aplicarlos.

4. **Selección de Parámetros y Modelos:** En muchos algoritmos hay parámetros que deben ajustarse manualmente, o que requieren experimentación para identificar los valores adecuados.

5. **Entrenamiento:** Dado el conjunto de datos, el algoritmo y los parámetros, el entrenamiento debería ser simplemente el uso de recursos computacionales para construir un modelo de los datos con el fin de predecir los resultados en nuevos datos.

6. **Evaluación:** Antes de implementar un sistema, es necesario probarlo y evaluar su precisión con datos en los que no ha sido entrenado. Esto puede incluir a menudo una comparación con expertos humanos en la materia, y la selección de métricas adecuadas para esta comparación.

2.2. Algoritmos del aprendizaje supervisado

A continuación, se presentan varios modelos de aprendizaje supervisado (López-Flores et al., 2024), como la regresión lineal (LiR), la regresión logística (LoR), los árboles de decisión (DT), los bosques aleatorios (RF), los procesos gaussianos (GP) y las redes neuronales artificiales (ANN). Se discuten sus representaciones matemáticas, así como las ventajas, desventajas y complejidades inherentes a cada uno de estos modelos. Es importante señalar que los modelos de aprendizaje automático también se conocen como “modelos subrogados”.

2.2.1. Regresión lineal (LiR) y Regresión logística (LoR)

LiR es un método estadístico que pretende modelar la relación entre variables dependientes e independientes. Es una de las técnicas de modelado más básicas del aprendizaje supervisado. LiR supone una relación lineal entre la variable dependiente (respuesta) y las variables independientes. Se representa de la siguiente manera:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n + \epsilon \quad (2.1)$$

donde y es la variable dependiente (respuesta), x son las variables independientes, β son los coeficientes que representan la pendiente de la regresión y ϵ es el término de error, que recolecta la variabilidad no explicada por el modelo.

Por otro lado, LoR es la técnica más sencilla utilizada cuando la variable dependiente es binaria. LoR es una técnica de clasificación binaria que transforma la ecuación LiR en un modelo de probabilidad utilizando la función sigmoidea, que devuelve valores de 0 o 1 para la variable dependiente (**Figura 2.3**). LoR se formula de la siguiente manera:

$$P = \frac{1}{1 + e^{-(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n)}} \quad (2.2)$$

donde P es la probabilidad de la clase positiva, la cual es simplemente la categoría que el modelo considera como el “evento de interés” o el valor que codificamos como 1 en el conjunto de datos.

LiR y LoR presentan múltiples ventajas, como ecuaciones matemáticas sencillas y bien definidas, facilidad de interpretación y capacidad para procesar grandes volúmenes de datos de forma eficiente (Montgomery y Peck, 2021; Hosmer y Lemeshow, 2000).

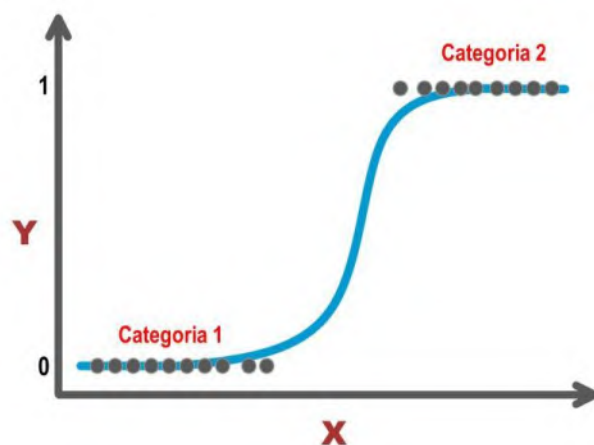


Figura 2.3. Representación esquemática de la regresión logística.

2.2.2. Árboles de decisión (DT)

Los DT tienen una estructura compleja y no lineal, y se utilizan para la clasificación y la regresión. Se denominan así porque, visualmente, se asemejan a un árbol invertido (**Figura 2.4**) y, por lo tanto, presentan una estructura jerárquica (Han et al., 2021a). Se componen de un nodo raíz que representa la característica o variable inicial de los datos, ramas que conectan los nodos y representan las posibles decisiones basadas en esa característica, nodos de decisión que representan puntos de división basados en características adicionales y nodos hoja que representan las predicciones del modelo (Hastie et al., 2009). Sin embargo, representar matemáticamente los DT puede suponer un reto debido a su naturaleza jerárquica y a la estructura de las reglas de decisión. Pueden describirse algorítmicamente o mediante una serie de condiciones *if-then*. Por ejemplo, suponiendo que existe un árbol de decisión que toma decisiones basándose en dos variables (x_1 y x_2) para clasificar en tres clases (A, B y C). Esto se representa de la siguiente manera:

$$\text{if } x_1 \leq 10: \quad (2.3)$$

$$\quad \text{if } x_2 \leq 5: \quad (2.4)$$

$$\quad \quad \text{Clase A} \quad (2.5)$$

$$\quad \text{if } x_2 > 5: \quad (2.6)$$

$$\quad \quad \text{Clase B} \quad (2.7)$$

$$\text{if } x_1 > 10: \quad (2.8)$$

$$\quad \quad \text{Clase C} \quad (2.9)$$

Las ecuaciones 2.3 a 2.9 describen un modelo DT muy sencillo con una profundidad de dos, que consta sólo de dos nodos de decisión y tres nodos de hoja. Hoy en día, los modelos DT se utilizan para abordar problemas complejos, incorporando numerosas variables de entrada y de respuesta. Esto da lugar a modelos muy profundos con un gran número de nodos de decisión. Por lo tanto, representar estos modelos mediante condicionales resulta cada vez más complicado a medida que aumenta la profundidad del árbol y el número de variables implicadas.

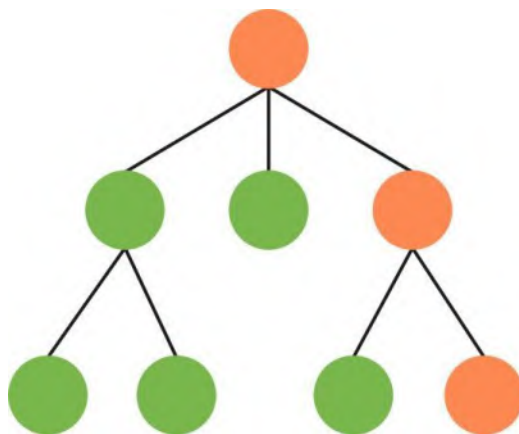


Figura 2.4. Representación esquemática de un árbol de decisión.

2.2.3. Bosques Aleatorios (RF)

El método RF es una técnica de aprendizaje automático por conjuntos basada en el uso de múltiples DT (ver **Figura 2.5**). La notable precisión de los bosques aleatorios procede de la integración de las respuestas generadas por una serie de DT individuales (Kuhn y Johnson, 2013). En este enfoque, cada DT se entrena con diferentes subconjuntos aleatorios del conjunto original de datos, en un proceso conocido como agregación *bootstrap* o *bagging*. Una vez entrenados, estos árboles operan conjuntamente para realizar predicciones. El RF combina las predicciones de los árboles individuales mediante un proceso de votación o promediado (Aria et al., 2021). Esta combinación de múltiples modelos ayuda a reducir la varianza y mejora la generalización del modelo, haciéndolo robusto ante problemas como el sobreajuste.

Al igual que el DT, los RF no pueden representarse matemáticamente. Expresarlas mediante condicionales *if-then*, como se muestra en las ecuaciones 2.3–2.9, sería extremadamente complicado y poco práctico debido a la naturaleza del algoritmo. Esta complejidad se ve aumentada por varios factores clave. En primer lugar, los RF suelen constar de cientos o incluso miles de DT individuales. En segundo lugar, cada DT puede tener una profundidad considerable. Por último, las predicciones de todos los árboles individuales se combinan utilizando métodos como el voto por mayoría en clasificación o el promedio en regresión. Estos factores subrayan por qué una representación matemática detallada y manual de los bosques aleatorios es prácticamente inviable.

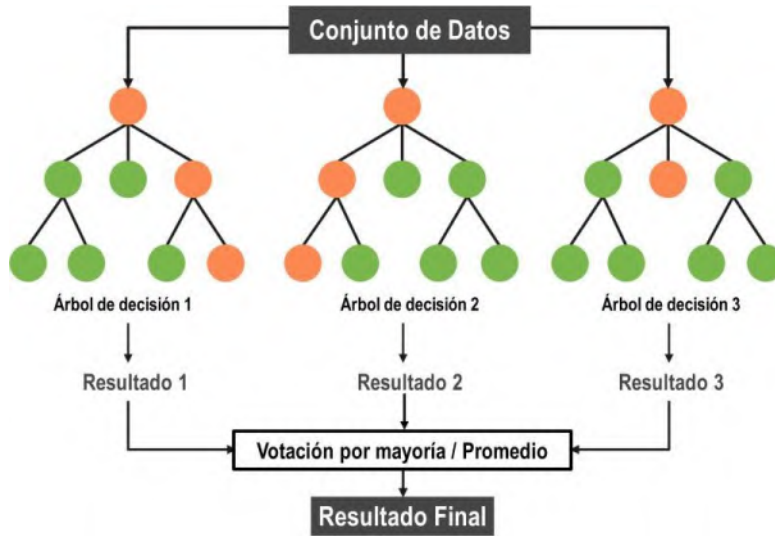


Figura 2.5. Representación esquemática de bosques aleatorios.

2.2.4. Proceso gaussiano (GP)

Un GP es una herramienta fundamental en el campo del aprendizaje automático y la estadística no paramétrica (Liu et al., 2020). Se utiliza principalmente para modelar distribuciones sobre funciones, lo que permite capturar la incertidumbre y las relaciones complejas entre variables (ver **Figura 2.6**). Conceptualmente, un GP es una colección de variables aleatorias, donde cualquier subconjunto finito de estas variables tiene una distribución gaussiana conjunta (Rasmussen y Williams 2021). Esto implica que está completamente definida por su media y su función de covarianza. El proceso gaussiano se describe del siguiente modo:

$$f(x) \sim GP(m(x), k(x, x')) \quad (2.10)$$

donde $m(x)$ es la media y en muchos casos se supone que la media es cero, y $k(x, x')$ es la función de covarianza y define la correlación de los valores de la función en diferentes puntos (x, x') . $k(x, x')$ también se conoce como kernel, que puede ser Kernel Gaussiano, Kernel Polinómico y Kernel Exponencial.

Para un conjunto finito de puntos x , el vector de valores de la función sigue una distribución gaussiana multivariante:

$$\mathbf{f} = N(\mathbf{0}, K(x_i, x_j)) \quad (2.11)$$

donde $\mathbf{f}$ es el vector de la función latente $[f(x_1), \dots, f(x_n)]^T$, y $K(x_i, x_j)$ es la matriz de covarianza con elementos (x_i, x_j) .

En términos generales, un proceso gaussiano puede considerarse una distribución de funciones, en la que cada punto del dominio tiene asociada una distribución normal. Además, resulta especialmente útil cuando se dispone de datos limitados y se necesita estimar no sólo el valor esperado de la función (regresión), sino también su incertidumbre. Gracias a esta capacidad de cuantificar simultáneamente predicción e incertidumbre, los procesos gaussianos se han convertido en la piedra angular de la optimización bayesiana, donde actúan como modelos subrogados que, mediante funciones de adquisición, guían de forma eficiente la exploración-explotación del espacio de búsqueda y permiten localizar óptimos globales con un número reducido de evaluaciones experimentales o simuladas.

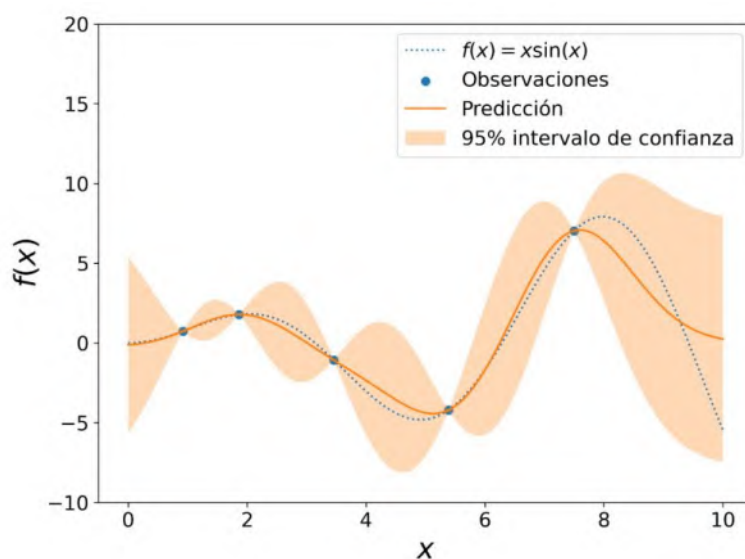


Figura 2.6. Representación de proceso gaussiano.

2.2.5. Redes Neuronales Artificiales (RNA)

Las RNA replican de forma simplificada el funcionamiento del cerebro humano, por lo que pueden captar relaciones altamente no lineales (Malekian y Chitsaz, 2021). Los modelos de RNA se representan como un conjunto de nodos (neuronas) conectados por una serie de conexiones ponderadas (Park y Lek, 2016). En la RNA tradicional (ver **Figura 2.7**), cada nodo calcula una combinación lineal ponderada de valores de la capa anterior y suele aplicar una función no lineal (conocida como función de activación) para producir una salida que se pasa a la capa siguiente. Las RNA se organizan en una capa de entrada, una o varias capas ocultas y una capa de salida; a esta arquitectura también se le conoce como perceptrón multicapa (MLP) (Park y Lek, 2016; Haghighat, 2021). El número de nodos de la capa de

entrada es igual al número de variables de entrada, el número de nodos de la capa de salida es igual al número de variables de salida, y el número de capas ocultas, así como el número de nodos de cada capa oculta, puede variar de pocos a muchos (ver **Figura 2.7**). Las arquitecturas de las RNA pueden representarse matemáticamente. Como ejemplo ilustrativo, una RNA con dos capas ocultas puede representarse de la siguiente manera:

$$y^{(1)} = W^{(1)}x + b^{(1)}, \quad z^{(1)} = \varphi(y^{(1)}) \quad (2.12)$$

$$y^{(2)} = W^{(2)}z^{(1)} + b^{(2)}, \quad z^{(2)} = \varphi(y^{(2)}) \quad (2.13)$$

$$y^{(3)} = W^{(3)}z^{(2)} + b^{(3)}, \quad Y = y^{(3)} \quad (2.14)$$

donde x es el vector de entrada, W representa a las matrices de pesos, b representa los vectores de sesgo, y representa a los vectores de salida de las capas ocultas, φ es la función de activación, z representa los resultados obtenidos al aplicar la función de activación y Y es el vector de las variables de salida de la RNA. Observe que se podría incluir otra función de activación en la última capa.

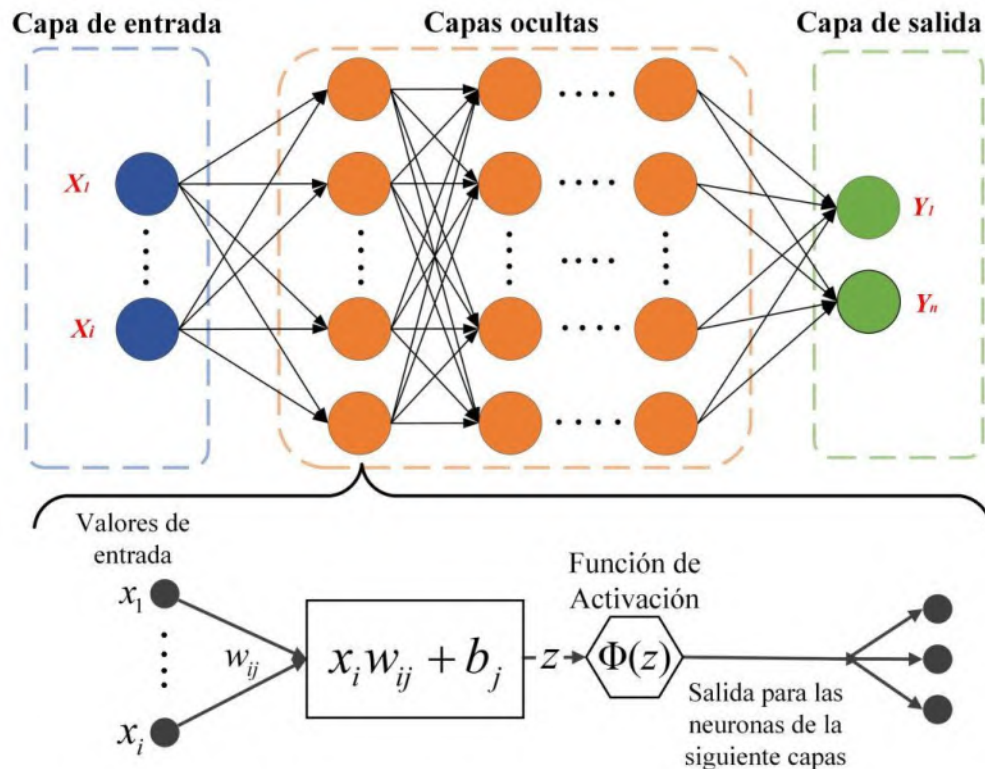


Figura 2.7. Representación de la estructura de una RNA de tipo MLP y de la operación de una neurona.

Actualmente existe un gran número de funciones de activación, pero las funciones no lineales más utilizadas son la función sigmoide, la tangente hiperbólica (Tanh), unidad lineal rectificadora (ReLU) y softmax, la cual sirve para modelos multiclase. Si se anidan las ecuaciones 2.15 a 2.17 y se aplica la función sigmoide, se genera una representación matemática como la siguiente:

$$Y = \left[w^{(3)} \left(\frac{1}{1 + e^{-\left(w^{(2)} \left(\frac{1}{1 + e^{-\left(w^{(1)} x + b^{(1)} \right)}} \right) + b^{(2)}} \right)} \right) + b^{(3)} \right] \quad (2.15)$$

Observe que la ecuación anterior es la representación matemática de una RNA muy sencilla, con solo dos capas ocultas y la función sigmoidea. Aumentar significativamente el número de capas ocultas, neuronas, variables de entrada y salida, y utilizar mezclas de funciones de activación hace prácticamente imposible generar una representación matemática explícita. Las redes neuronales modernas pueden tener entre 100 y 1,000 capas ocultas y miles o incluso millones de parámetros entrenables (W y b). Esta complejidad hace que la representación matemática sea extremadamente difícil debido al número y a la interdependencia de los parámetros que intervienen en la red. Además, las funciones de activación Tanh y ReLU se representan de la siguiente manera:

$$\text{Tanh}(y) = \frac{e^y - e^{-y}}{e^y + e^{-y}}, \quad \text{ReLU}(y) = \begin{cases} 0 & \text{if } y \leq 0 \\ y & \text{if } y > 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

donde Tanh es mucho más compleja que sigmoide y ReLU se representa mediante una condicional, lo que añade complejidad a la representación matemática. Es importante mencionar que ReLU es la función más utilizada, ya que hace que el proceso de formación sea más eficiente.

Existen, numerosas arquitecturas mucho más sofisticadas, entre las que destacan: Redes neuronales convolucionales (CNN); Redes neuronales recurrentes (RNN) y sus variantes LSTM y GRU; Autocodificadores y Autocodificadores variacionales (VAE); Redes generativas adversariales (GAN); Transformers y sus derivados (p. ej., BERT, GPT); Redes neuronales gráficas como GCN y GAT.

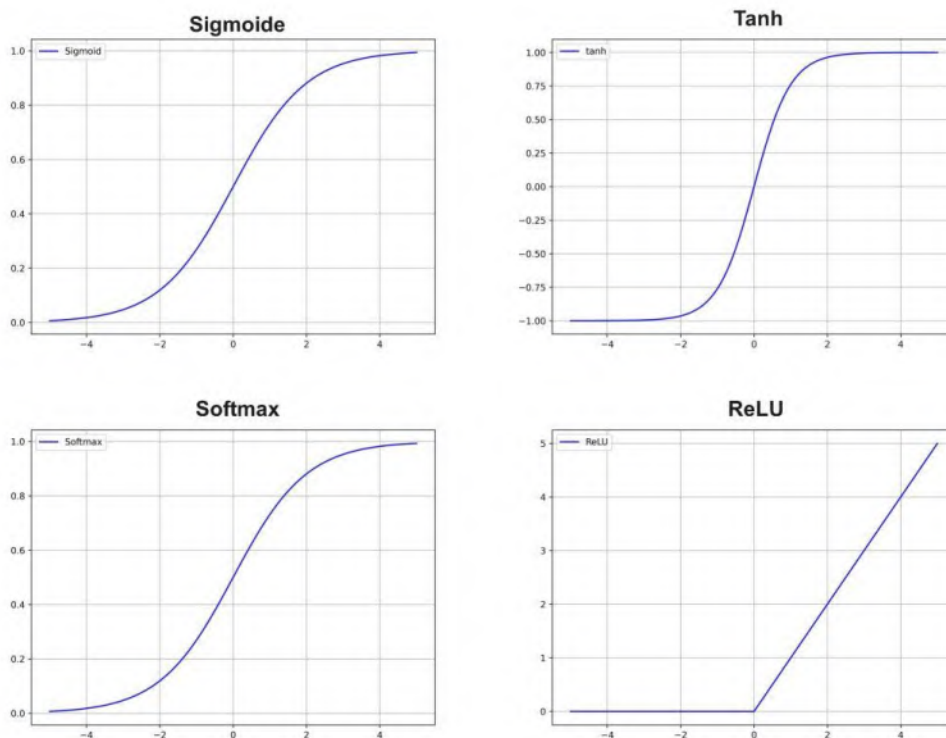


Figura 2.8. Ilustración grafica de las principales funciones de activación.

2.2.5.1. Entrenamiento de RNA

Los optimizadores son algoritmos o métodos utilizados para minimizar o maximizar una función objetivo. En las RNA, los optimizadores se utilizan para minimizar la función de pérdida durante el proceso de entrenamiento. Los optimizadores permiten a las RNA aprender de los datos ajustando iterativamente los parámetros (es decir, pesos y sesgo) hasta que convergen a un valor de pérdida mínimo (**Figura 2.9**).

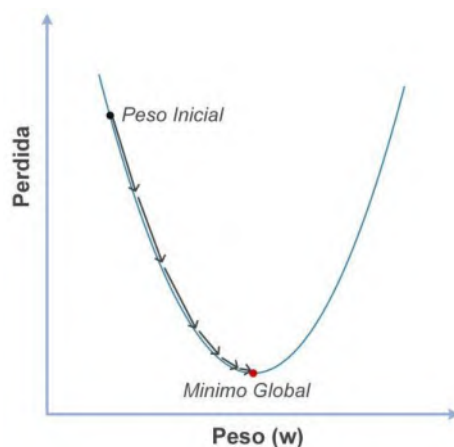


Figura 2.9. Representación esquemática del proceso de entrenamiento (optimización).

La función de pérdida calcula el error (distancia) entre la salida predicha por el modelo y la salida correcta/deseada. Por lo tanto, el objetivo es minimizar la función de pérdida. Cuanto menor sea el valor de la función de pérdida, mejores serán las predicciones del modelo, lo que indica que el modelo ha aprendido correctamente. A continuación, se presentan las funciones de pérdidas comúnmente usadas:

Error cuadrático medio (MSE): Se trata de la función de pérdida más sencilla y común en los problemas de regresión. Para calcular el MSE, se toma la media de las diferencias al cuadrado entre los valores reales y los predichos. Al elevar al cuadrado la diferencia, nunca se obtendrán valores negativos del MSE. El MSE penaliza al modelo por cometer grandes errores elevándolos al cuadrado. Cuando nuestro modelo hace muy malas predicciones de valores atípicos, la parte cuadrada de la función magnifica el error. Por lo tanto, no debe utilizarla si los datos son propensos a tener muchos valores atípicos.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2.17)$$

Error medio absoluto (MAE): sólo difiere ligeramente en su definición del MSE, pero curiosamente ofrece propiedades casi exactamente opuestas. Para calcular el MAE, se toma la media de las diferencias absolutas entre los valores reales y los predichos. El MAE nunca será negativo, ya que siempre toma el valor absoluto de los errores. El MAE cubre la desventaja del MSE, ya que es más robusto frente a valores atípicos. Al tomar todos los valores absolutos, todos los errores se ponderarán en la misma escala. Por lo tanto, no daremos demasiada importancia a los valores atípicos y nuestra función de pérdida proporciona una medida genérica y uniforme del rendimiento de nuestro modelo. Por lo tanto, debería utilizarla si sus datos son propensos a tener muchos valores atípicos.

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i| \quad (2.18)$$

La optimización de RNA ha ido evolucionando a lo largo del tiempo, iniciando con el algoritmo Descenso del Gradiente (GD), que ajusta los pesos moviéndose en dirección opuesta al gradiente de la función de pérdida. Para grandes conjuntos de datos, el GD Estocástico (SGD) acelera el proceso calculando el gradiente sobre lotes aleatorios, aunque introduce ruido. El SGD con *momento* conserva parte de la dirección previa para suavizar la

trayectoria y escapar de mínimos locales. Por su parte, RMSProp (Root Mean Square) ajusta de forma adaptativa la tasa de aprendizaje normalizando cada actualización con la media móvil de los gradientes al cuadrado, equilibrando pasos grandes y pequeños.

De esta evolución surge Adam (Adaptive Moment Estimation), hoy el optimizador más usado y generalmente el más eficaz (Kingma y Ba, 2014). Adam combina lo mejor de sus predecesores: incorpora la inercia del momento (media móvil de los gradientes) y la adaptación de RMSProp (media móvil de los gradientes al cuadrado), asignando así tasas de aprendizaje específicas por parámetro.

$$w_{k+1} = w_k - \alpha \frac{v_k}{\sqrt{s_k + \epsilon}} \nabla f(w_k) \quad (2.19)$$

$$v_k = (\beta_1) v_{k-1} + (1 - \beta_1) \nabla f(w_k) \quad (2.20)$$

$$s_k = (\beta_2) s_{k-1} + (1 - \beta_2) \nabla^2 f(w_k) \quad (2.21)$$

donde α es el tamaño del paso (también llamado “tasa de aprendizaje”) y $\nabla f(w_k)$ es el gradiente de la función de pérdida para la iteración k-ésima. Donde β es la constante de impulso ($0 < \beta < 1$), v_k es el término de dirección del paso que incorpora el impulso, y s_k es la media móvil de los gradientes al cuadrado.

Adam corrige sesgos iniciales y requiere pocos ajustes manuales de hiperparámetros, por lo cual converge rápido, además, es robusto a gradientes ruidosos o dispersos y se adapta bien tanto a problemas densos como a datos escasos. En la práctica, suele bastar con los valores por defecto ($\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$, $\epsilon \approx 10^{-8}$), lo que simplifica la configuración y explica su adopción casi universal en RNA.

2.2.6. Optimización de hiperparámetros

Los hiperparámetros son variables de configuración externas que deben fijarse antes de entrenar un modelo y que gobiernan tanto su arquitectura como la forma en que aprende (Yang et al., 2020). A diferencia de los parámetros internos, que el algoritmo ajusta automáticamente a partir de los datos, como los pesos (w) de una RNA), los hiperparámetros se determinan manualmente o mediante estrategias de optimización.

Desde el punto de vista funcional pueden agruparse en dos categorías:

- Hiperparámetros de estructura: definen la topología del modelo. Por ejemplo, para RNA, incluyen el número de capas y de neuronas ocultas.
- Hiperparámetros del proceso de entrenamiento: regulan cómo se actualizan los parámetros internos. Entre los más influyentes en las RNA, se encuentran la tasa de aprendizaje, el tamaño de lote (*batch size*) y el número de épocas.

La **Tabla 2.1** resume los hiperparámetros más relevantes para RF y RNA, evidenciando la dualidad “estructura-entrenamiento” y su impacto en el rendimiento del modelo.

Tabla 2.1. Algunos hiperparámetros asociados a RF y ANN.

Algoritmo	Hiperparámetros
RF	Número de árboles
	Profundidad del árbol
	Número de características
	Criterio
RNA	Número de capas ocultas
	Número de unidades/neuronas
	Función de activación
	Tasa de aprendizaje
	Tamaño de lote
	Número de épocas
	Tamaño de lote

La optimización de hiperparámetros puede realizarse de forma manual o automática. Tradicionalmente, la optimización se realiza manualmente basándose en la intuición y la experiencia o en el llamado método de ensayo y error. Sin embargo, el método de ensayo y error es lento, tedioso y, en algunos problemas, puede resultar ineficaz. Por otro lado, existen algoritmos para automatizar la optimización de hiperparámetros que son populares, eficientes y hay una gran variedad de ellos.

La optimización de hiperparámetros mediante los métodos manual y automático se basa en los siguientes pasos,

1. Selección de los hiperparámetros a evaluar (véase la **Tabla 2.1**).
2. Elección de un conjunto de valores de los hiperparámetros seleccionados.
3. Ejecutar un experimento de aprendizaje automático para el conjunto seleccionado de hiperparámetros y sus valores, y evaluar y guardar sus métricas de rendimiento (error cuadrático medio, error absoluto medio, etc).
4. Repita los pasos 2 y 3 para el número especificado de ejecuciones de prueba o hasta que esté satisfecho con el rendimiento del modelo.

Tras el proceso de optimización, se obtiene la lista de experimentos ejecutados, los valores de los hiperparámetros en cada experimento y las métricas de rendimiento.

La optimización de hiperparámetros puede abordarse con distintos algoritmos que equilibran exhaustividad, eficiencia computacional y capacidad de escapar de configuraciones subóptimas. Entre los más empleados destacan la búsqueda en cuadrícula (grid search), la búsqueda aleatoria y la optimización bayesiana (Liashchynskyi y Liashchynskyi, 2019; Alibrahim y Ludwig, 2021).

2.3. Optimización

La optimización de modelos de aprendizaje automático entrenados se puede abordar mediante enfoques metaheurísticos y determinista.

Es importante señalar que la optimización basada en técnicas deterministas es una tarea complicada o imposible de realizar directamente. Esto se debe a que los entornos de programación deterministas son incompatibles con el lenguaje de programación interno con el que se desarrollan los modelos de aprendizaje automático. Además, la extracción de modelos de aprendizaje automático puede ser una tarea muy exigente debido al tamaño y la no linealidad de los modelos asociados al elevado número de parámetros y funciones de activación (ver **sección 2.2**). Por otro lado, las técnicas metaheurísticas son totalmente compatibles con los modelos de aprendizaje automático entrenados, lo que facilita el proceso de implementación.

2.3.1. Optimización metaheurística

Las técnicas metaheurísticas son procedimientos de alto nivel cuyo objetivo es encontrar una solución suficientemente buena, explotando algunas características del espacio de búsqueda mediante distintos métodos. Las técnicas metaheurísticas se componen de diferentes heurísticas de bajo nivel e integran otros factores como la estocasticidad. Según un paradigma global, se inspiran en la naturaleza o en procesos biológicos, físicos y sociales. Un aspecto importante es que las técnicas metaheurísticas aplican un equilibrio dinámico entre las fases de diversificación e intensificación de la búsqueda. En concreto, el término diversificación se refiere a la exploración del espacio de soluciones, promoviendo en el proceso de búsqueda la evaluación de regiones no visitadas para generar soluciones que difieran significativamente de las actuales. Por el contrario, la intensificación está vinculada al uso de la experiencia acumulada en la búsqueda, concentrándose en explorar la vecindad de las soluciones óptimas encontradas previamente.

Los algoritmos metaheurísticos incluyen tres mecanismos fundamentales: generación de soluciones iniciales, operadores de variación que producen nuevas soluciones y operadores de selección que guían la búsqueda en una u otra dirección, eventualmente en función de la calidad de las soluciones y de la trayectoria de exploración previa. Los procedimientos heurísticos inherentes a la metaheurística facilitan la obtención de soluciones de alta calidad, aunque sin garantía de encontrar el óptimo global. Además, guían el procedimiento de búsqueda basado en el aprendizaje para evitar que el método quede atrapado en un óptimo local, lo que permite realizar búsquedas en problemas altamente no convexos que presentan un gran número de soluciones locales.

En el campo de la metaheurística basada en la naturaleza, existen dos grupos de algoritmos: los algoritmos evolutivos (EA) y la inteligencia de enjambre.

Los EA imitan la selección natural: parten de una población inicial de soluciones, generan descendencia mediante cruce y mutación, evalúan cada individuo con una función de aptitud y conservan a los más aptos, repitiendo el ciclo hasta cumplir un criterio de parada (Bartz-Bejelstein et al., 2014; Eiben et al., 2015). Su eficacia depende de cómo se representen las soluciones y de parámetros como el tamaño poblacional o las tasas de cruce y mutación.

Dentro de los EA, los algoritmos genéticos (GA) son muy populares para problemas tanto mono- como multiobjetivo (Genetic Algorithm, 2019). El NSGA-II es el estándar de facto para trazar la frontera de Pareto entre dos objetivos (Deb et al., 2002), mientras que NSGA-III extiende esta capacidad a tres o más dimensiones con mayor eficiencia (Deb y Jain, 2014). En general, un GA sigue cuatro etapas: (1) inicialización aleatoria de la población, (2) evaluación con la función de aptitud, (3) evolución mediante selección proporcional a la aptitud y aplicación de operadores genéticos para generar nuevos individuos, y (4) terminación cuando se alcanza el número de generaciones o la convergencia deseada.

2.3.2. Optimización determinista

La optimización determinista, o programación matemática, es la rama clásica de los algoritmos de optimización en matemáticas. Estos algoritmos derivan del álgebra lineal, ya que se basan en el cálculo del gradiente y, en algunos casos, del hessiano de la variable objetivo (Ji et al., 2007; Cavazzuti, 2013). Una de las ventajas más destacables de la optimización determinista es que la convergencia de una solución es muy rápida en comparación con los algoritmos de optimización metaheurísticos (Kvasov y Mukhametzhanov et al., 2013).

Esto implica que se necesitan menos evaluaciones de funciones para llegar a una solución. Esta formulación matemática rigurosa no implica elementos estocásticos (aleatorios), por lo que los resultados obtenidos a partir de un algoritmo de optimización determinista son inequívocos y totalmente reproducibles. Por otro lado, los algoritmos de optimización determinista buscan puntos estacionarios en la variable objetivo, por lo que la solución óptima encontrada podría ser un óptimo local y no el óptimo global. Un aspecto importante dentro de los algoritmos deterministas y estocásticos es la necesidad de establecer algunos elementos o atributos para el proceso de optimización. Por ejemplo, inicializar seleccionando una muestra factible o un grupo de muestras factibles, y definir un criterio de parada o terminación. Se denomina muestra factible a la asignación de valores a cada variable de diseño tal que se satisfagan todas las restricciones del problema. Es importante mencionar que los algoritmos deterministas pueden enfrentarse a problemas cuando tratan con funciones de optimización extremadamente volátiles o problemas complejos, especialmente debido a los grandes espacios de búsqueda y a la presencia de intrincadas estructuras del problema.

Los principales modelos de optimización determinista se diferencian principalmente por el tipo de variables y ecuaciones utilizadas en cada uno de ellos. Por ejemplo: la programación lineal (LP) es el modelo matemático de optimización más simple, en el que la función objetivo y las restricciones se modelan como relaciones lineales y las variables asumen valores reales y continuos. La programación no lineal (NLP) se refiere a problemas de optimización con función objetivo y/o restricciones no lineales. La programación entera (IP) es aquella en la que todas las variables de decisión son números enteros. La programación lineal entera mixta (MIP) contiene una mezcla de variables enteras y continuas. La programación no lineal entera mixta (MINLP) puede contener variables enteras, binarias y continuas, y la función objetivo y/o las restricciones pueden ser no lineales.

Tradicionalmente, los modelos deterministas suelen resolverse en plataformas computacionales como AMPL, MPL, AIMMS, Xpress-MP, GAMS, PYOMO (Python) y JUMP (Julia). Sin embargo, los entornos de programación deterministas son incompatibles con el lenguaje de programación interno con el que se desarrollan los modelos de aprendizaje automático. Por lo tanto, es necesario reformular los modelos de aprendizaje automático entrenados para ser optimizados en plataformas deterministas. Actualmente, las únicas formulaciones utilizadas para reformular modelos de aprendizaje automático entrenados son la MIP y NLP. En general, la MIP se formulan del siguiente modo:

$$\text{Min } a^T x + b^T y \quad (2.22)$$

$$\text{s.t. } Dx + Ey \leq c \quad (2.23)$$

$$x \in \mathbb{R}^n \quad (2.24)$$

$$y \in \{0,1\} \quad (2.25)$$

donde x es el vector de variables continuas, y es el vector de variables binarias (0 y 1), a y b son vectores de coeficientes, D y E son matrices de coeficientes y c es un vector de términos independientes.

La NLP se refiere a problemas de optimización con función objetivo y/o restricciones no lineales y las variables asumen valores continuos.

$$\text{Min } f(x) \quad (2.26)$$

$$\text{s.t. } g_i(x) \leq 0, \forall i \in I \quad (2.27)$$

$$h_j(x) = 0, \forall j \in J \quad (2.28)$$

$$x \in \mathbb{R}^n \quad (2.29)$$

donde $f(x)$ es la función objetivo que hay que minimizar (o maximizar), $g_i(x)$ son las restricciones de desigualdad y $h_j(x)$ son las restricciones de igualdad.

Capítulo 3. PLANTEAMIENTO 1

Implementación del Aprendizaje Automático en el Modelado de Motores Térmicos para Optimizar la Recuperación de Calor Residual

3.1. Generalidades

Actualmente, la recuperación del calor residual (WHR) es una de las formas más importantes de conservar la energía, mejorar los beneficios económicos y reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (Su et al., 2021); el calor residual es el potencial energético de los procesos tecnológicos, residuos, subproductos y productos intermedios que se producen durante los procesos y no se utilizan en el propio proceso (Jouhara et al., 2018).

Desde la aparición del análisis Pinch de Linnhoff y Hindmarsh (1983) como marco para maximizar la recuperación de calor, las investigaciones se han concentrado en dos líneas principales. Primero, la optimización de redes de intercambiadores de calor (HEN) para reducir el consumo de servicios y los costos asociados (Kang y Liu, 2018; Wang et al., 2020a). Segundo, la WHR mediante ciclos termodinámicos adaptados a fuentes de baja temperatura. Dentro de esta última, se han propuesto configuraciones integradas que combinan generación eléctrica, enfriamiento y calentamiento (Lira-Barragán et al., 2014) o que optimizan parámetros de calderas en ciclos Kalina de presión múltiple (Hua et al., 2015). También destacan redes híbridas de enfriamiento que acoplan absorción y compresión de vapor (Chan et al., 2017) y ciclos Brayton con CO₂ supercrítico para aplicaciones marítimas (Sharma et al., 2017; Pan et al., 2020). Otros estudios evalúan cascadas LiBr/H₂O-CO₂ (Yang et al., 2019b, 2021), motores Stirling para gases de escape (Güeven et al., 2019), o ciclos Kalina y ORC en configuraciones duales (Wu et al., 2021). Finalmente, análisis paramétricos y optimizaciones multiobjetivo han comparado fluidos de trabajo y arquitecturas ORC (Özahi y Tozlu, 2019; Liu et al., 2020; Özcan y Ekici, 2021; Nondy y Gogoi, 2021), equilibrando desempeño energético, económico y ambiental.

Los métodos tradicionales, experimentos específicos y correlaciones termodinámicas, ofrecen alta precisión, pero sufren graves problemas de convergencia que dificultan el tratamiento de sistemas de gran escala o de múltiples motores térmicos. Para abordar estas limitaciones, algunos investigadores introducen supuestos simplificados sobre eficiencias, temperaturas y presiones (Topolski et al., 2019; Sun et al., 2020), lo que sacrifica realismo. El rápido avance de la IA abre la puerta a modelar y optimizar motores térmicos de gran escala para la WHR, aunque la literatura aún es escasa y suele centrarse en un solo ciclo. Ejemplos notables incluyen la predicción del desempeño de ORC con Máquina de Vectores de Apoyo (SVM) y RNA (Dong et al., 2018); el modelado dinámico de ORC mediante

diferentes tipos de RNA (Palagi et al., 2019); RNA para estimar la presión óptima y la eficiencia de ORC transcíticos (Zhi et al., 2019); y la optimización de la potencia de un ORC acoplado a un motor diésel con RNA (Yang et al., 2019a). Otros estudios aplican RNA multietapa al ciclo Kalina (Acar, 2020); combinan aprendizaje automático con algoritmos metaheurísticos para predecir la eficiencia isentrópica en ORC (Ping et al., 2020); o emplean RNA y SVM para comparar cuatro configuraciones de ORC (Wang et al., 2020b). Las técnicas profundas también ganan terreno: LSTM para sistemas Kalina (Dehghani, 2021), CNN para ciclos Brayton con CO₂ supercrítico (Diao et al., 2021) y modelos basados en REFPROP para 106 fluidos de trabajo en ORC regenerativos (Peng et al., 2021). No obstante, la investigación actual sigue siendo fragmentaria: las aplicaciones de aprendizaje automático en WHR rara vez abarcan la integración simultánea de varios motores térmicos o redes de gran escala.

Cabe señalar que ninguno de los enfoques anteriores ha considerado el modelado mediante aprendizaje automático de múltiples motores térmicos para la WHR con el fin de satisfacer todas las necesidades energéticas de las plantas industriales (enfriamiento, calentamiento, refrigeración y electricidad); las principales investigaciones se han centrado en el modelado ORC. Además, no se han optimizado e integrado diferentes modelos conectados entre sí por restricciones energéticas para maximizar la eficiencia energética, ni se han evaluado los aspectos medioambientales y sociales. Por lo tanto, se presenta una metodología novedosa que implica el modelado de tres motores térmicos (SRC, ORC y ciclo AR) mediante aprendizaje automático para la WHR y su integración en una planta industrial que requiere servicios auxiliares de calentamiento y enfriamiento, así como refrigeración y electricidad. Todo el sistema integrado se representa mediante un modelo global que tiene en cuenta todos los requisitos energéticos, las restricciones y los modelos de motores térmicos. Además, la optimización se realiza mediante el algoritmo NSGA-III, teniendo en cuenta los beneficios económicos, medioambientales y sociales. Por último, las condiciones óptimas de funcionamiento obtenidas se comparan con simulaciones en Aspen Plus® para evaluar la precisión de los modelos de aprendizaje automático construidos.

3.2. Planteamiento del Problema

Considerando una planta industrial que permite la instalación de motores térmicos para satisfacer sus necesidades de servicios auxiliares. El problema se define formalmente como sigue.

Se dan:

- Un conjunto de corrientes calientes y un conjunto de corrientes frías, incluyendo sus caudales de capacidad calorífica, temperaturas de entrada y temperaturas de salida.
- Un conjunto de motores térmicos que pueden interconectarse entre sí y las utilidades mínimas de calefacción y refrigeración para minimizar el calor residual. Los motores térmicos considerados son SRC, ORC y ciclo AR.
- Un conjunto de biocombustibles b disponibles para suministrar energía al SRC, incluidos sus costos unitarios, los GEI unitarios y el número de puestos de trabajo que pueden generarse por kJ producido para cada biocombustible.
- Un conjunto de combustibles fósiles f disponibles para suministrar energía al SRC. También se conocen los costos unitarios, el GEI específico global y el número de puestos de trabajo que pueden generarse por kJ producido.
- Se dispone de un conjunto de fluidos de trabajo para hacer funcionar el ORC.
- El agua de refrigeración utilizada como fluido refrigerante se da con temperaturas y costo unitario conocidos.

También se dan las variables de cálculo, los intervalos de funcionamiento y las condiciones fijas de los motores térmicos para la construcción de los modelos de aprendizaje automático.

La **Figura 3.1** presenta la superestructura propuesta en este capítulo para llevar a cabo la integración energética. En primer lugar, se desarrolla la gran curva compuesta (GCC) utilizando el análisis Pinch para obtener la utilidad mínima de calentamiento y la utilidad mínima de enfriamiento. La utilidad de enfriamiento se recupera mediante el ORC, el agua de enfriamiento y el ciclo AR. El SRC puede funcionar con diferentes fuentes de energía (combustibles fósiles y biocombustibles) para producir energía en la turbina y calor residual en el condensador. Una parte del calor residual se emplea para satisfacer la utilidad de calentamiento del proceso. Otra parte del calor residual se utiliza para impulsar el ciclo AR

que proporciona la demanda de refrigeración al proceso. El calor residual restante se envía al ORC para generar más energía. Hay que tener en cuenta que las condiciones de funcionamiento de los motores térmicos son variables de decisión para la integración energética, así como durante la optimización del sistema.

Por lo tanto, las cantidades de fuentes de energía utilizadas, las condiciones óptimas de funcionamiento de los motores térmicos que satisfacen la integración energética y la potencia producida deben determinarse teniendo en cuenta los objetivos económicos, medioambientales y sociales.

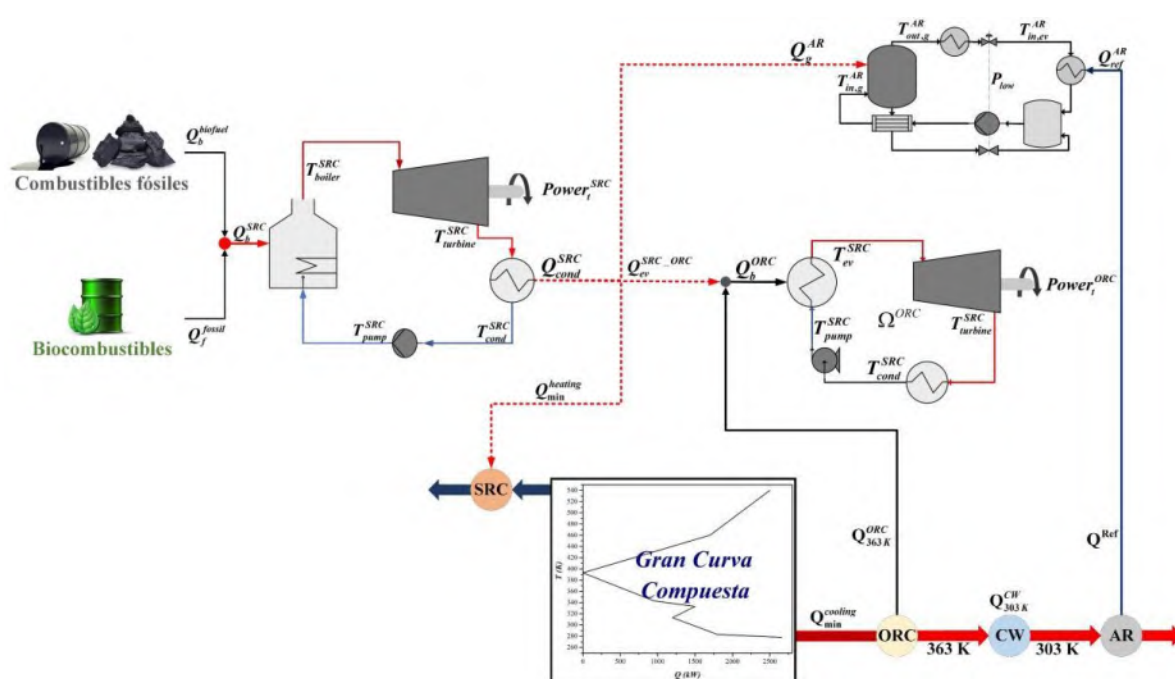


Figura 3.1. Superestructura propuesta para el sistema energético integrado.

3.3. Metodología

La metodología propuesta combina el análisis Pinch, ecuaciones matemáticas y RNA. La metodología propuesta se ilustra en la **Figura 3.2**. El modelo global se desarrolla utilizando modelos de RNA y ecuaciones matemáticas. En este trabajo, la RNA implementada es la MLP, donde para cada motor térmico se construye un modelo MLP. Los conjuntos de datos necesarios para la creación de los modelos MLP se obtienen mediante simulaciones de los motores térmicos en el simulador de procesos Aspen Plus®. Las ecuaciones matemáticas implementadas son los diferentes balances energéticos, restricciones, ecuaciones de costos y ganancias, así como las funciones objetivo. El análisis Pinch se utiliza para desarrollar la

GCC con el que se obtienen las utilidades mínimas de calentamiento, enfriamiento y refrigeración. Por último, el modelo global se optimiza con un algoritmo genético multiobjetivo para satisfacer las distintas funciones objetivo.

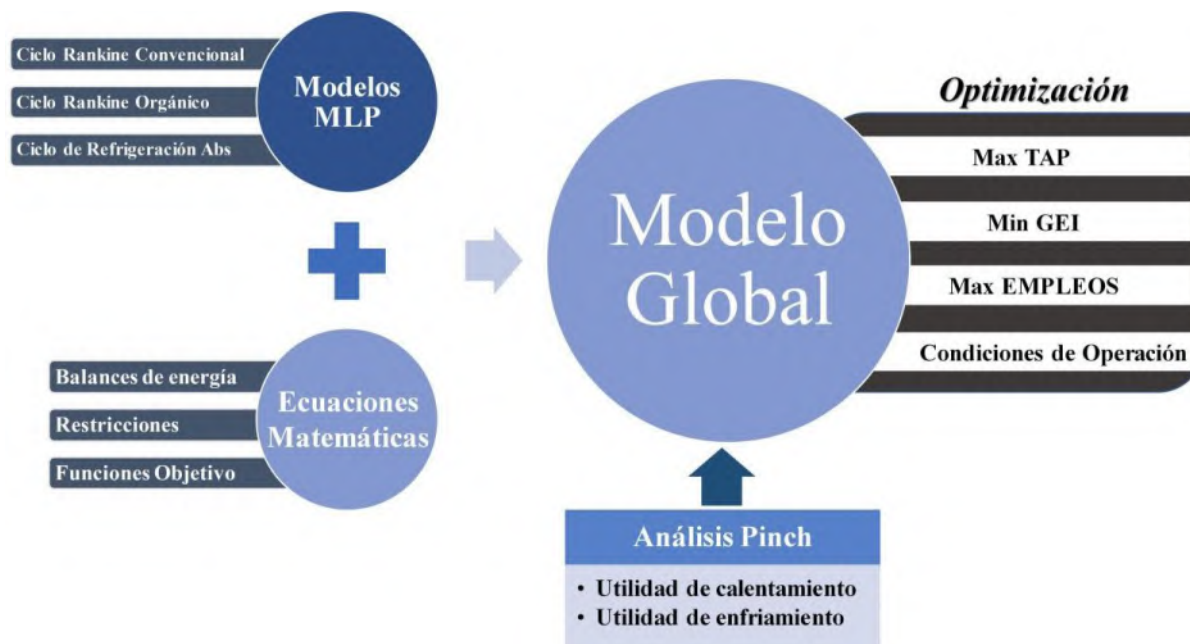


Figura 3.2. Representación esquemática de la metodología propuesta.

3.3.1. Simulaciones de motores térmicos

Los motores térmicos se simulan en Aspen Plus® para obtener los conjuntos de datos con los que se construyen los modelos MLP. Las condiciones en las que se simulan estos motores térmicos se presentan en la **Tabla 3.1**. Las variables de cálculo del SRC son las temperaturas de los distintos bloques (condensador, bomba, caldera y turbina) y el calor suministrado a la caldera. Para el ORC, las variables de cálculo son las temperaturas de cada bloque (condensador, bomba, evaporador y turbina), el calor suministrado al evaporador y el fluido de trabajo. Mientras que para el ciclo AR, las variables son las temperaturas de entrada y salida del generador, la temperatura de entrada del evaporador (temperatura de refrigeración), el aporte de calor al ciclo y la baja presión de operación de este ciclo; se selecciona esta variable (presión) porque el ciclo AR consta de varios bloques y el uso de esta presión elimina posibles errores de cálculo. La **Tabla 3.1** también muestra las condiciones de cálculo que se fijan al simular los motores térmicos. Además, las variables de cálculo en las simulaciones son las mismas que las entradas para la construcción de los modelos MLP; de este modo, hay cinco variables de entrada para el SRC, seis variables de

entrada para el ORC y cinco variables de entrada para el ciclo AR. También se definen dos salidas para cada motor térmico, la potencia producida y el costo total para el SRC, la potencia producida y el costo total para el ORC, y el calor de refrigeración y el costo total del ciclo AR. Para las simulaciones, se selecciona el modelo termodinámico tablas de vapor NBS (STEAMNBS) para el SRC (AspenTech, 2013), el método de propiedades de la ecuación de estado Peng-Robinson para el ORC (AspenTech, 2013), y el método de propiedades PR-BM para el ciclo AR (ecuación de estado Peng-Robinson modificada por Boston-Mathia) (Mansouri y col., 2015). Cabe señalar que los costos totales se determinan en cada simulación mediante Aspen Process Economic Analyzer (AspenTech, 2012), que se basa en la tecnología Aspen Icarus y está diseñado para producir estimaciones conceptuales y detalladas.

Tabla 3.1. Condiciones de cálculo de los motores térmicos.

Parámetros	Símbolo	Valores
Temperatura del condensador (K)	$T_{cond}^{SRC}, T_{cond}^{ORC}$	544-578, 279-315
Temperatura de la bomba (K)	$T_{pump}^{SRC}, T_{pump}^{ORC}$	559-602, 380-316
Temperatura de la caldera (K)	$T_{boiler}^{SRC}, T_{ev}^{ORC}$	818-1609
Temperatura del evaporador (K)	$T_{turbine}^{SRC}, T_{turbine}^{ORC}$	372-947
Temperatura de la turbina (K)	Q_b^{SRC}, Q_b^{ORC}	544-1218, 310-859
Calor suministrado al boiler (kW)	$\dot{m}^{SRC}$	5000-10000
Calor suministrado al evaporador (kW)	Ω^{ORC}	500-1600
Flujo másico, SRC (kg/s)	$\dot{m}^{ORC}$	2.77
Fluido de trabajo, ORC	$T_{in,g}^{AR}$	R236ea, R245fa y R123
Flujo másico, ORC (kg/s)	$T_{out,g}^{AR}$	2.15, 1.86 y 2.14
Temperatura de entrada del generador (K)	$T_{in,ev}^{AR}$	317-329
Temperatura de salida del generador (K)	P_{low}	344-373
Temperatura de entrada del evaporador (K)	Q_g^{AR}	236-251
Baja presión, ciclo AR (atm)	$\dot{m}^{AR}$	0.80-1.60
Calor de entrada al ciclo AR (kW)	-	1500-4000
Flujo másico, ciclo AR (kg/s)	η_p	6.94

NH ₃ , AR cycle (%)	η_t	60.0
Eficiencia de la bomba	$T_{cond}^{SRC}, T_{cond}^{ORC}$	0.80
Eficiencia de la turbina	$T_{pump}^{SRC}, T_{pump}^{ORC}$	0.90

3.3.2. Modelo global

De forma ilustrativa, los modelos MLP de cada motor térmico se representan matemáticamente mostrando las entradas y salidas, que se consideran como variables independientes y dependientes. Además, el modelo global describe matemáticamente la **Figura 3.1**, donde se presenta esquemáticamente el problema abordado.

Mediante el modelo del SRC se obtiene la potencia producida en la turbina ($Power_t^{SRC}$) y el costo total anual ($Cost^{SRC}$), este modelo se representa de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} Power_t^{SRC} \\ Cost^{SRC} \end{bmatrix} = Model_{MLP}^{SRC} \left(Q_b^{SRC}, T_{cond}^{SRC}, T_{pump}^{SRC}, T_{boiler}^{SRC}, T_{turbine}^{SRC} \right) \quad (3.1)$$

donde Q_b^{SRC} es el calor suministrado a la caldera, T_{cond}^{SRC} es la temperatura del condensador, T_{pump}^{SRC} es la temperatura de la bomba, T_{boiler}^{SRC} es la temperatura de la caldera y $T_{turbine}^{SRC}$ es la temperatura en la turbina.

El calor suministrado a la caldera (Q_b^{SRC}) es igual a la suma del calor suministrado por los combustibles fósiles (Q_f^{fossil}) más la suma del calor suministrado por los biocombustibles ($Q_b^{biofuel}$).

$$Q_b^{SRC} = \sum_{f \in F} Q_f^{fossil} + \sum_{b \in B} Q_b^{biofuel} \quad (3.2)$$

Asimismo, Q_b^{SRC} es igual a la potencia producida en la turbina ($Power_t^{SRC}$) más el calor residual en el condensador (Q_{cond}^{SRC}).

$$Q_b^{SRC} = Power_t^{SRC} + Q_{cond}^{SRC} \quad (3.3)$$

El modelo para el ORC calcula la potencia producida en la turbina ($Power_t^{ORC}$) y el costo total anual del ORC ($Cost^{ORC}$), este modelo se representa a continuación:

$$\begin{bmatrix} \text{Power}_t^{ORC} \\ \text{Cost}^{ORC} \end{bmatrix} = \text{Model}_{MLP}^{ORC} \left(\Omega^{ORC}, Q_{ev}^{ORC}, T_{cond}^{ORC}, T_{pump}^{ORC}, T_{ev}^{ORC}, T_{turbine}^{ORC} \right) \quad (3.4)$$

donde Ω^{ORC} es el fluido de trabajo, Q_{ev}^{ORC} es el calor suministrado al evaporador, T_{cond}^{ORC} es la temperatura del condensador, T_{pump}^{ORC} es la temperatura de la bomba, T_{ev}^{ORC} es la temperatura del evaporador y $T_{turbine}^{ORC}$ es la temperatura en la turbina.

El calor suministrado al evaporador (Q_{ev}^{ORC}) es igual al calor suministrado por el SRC ($Q_b^{SRC-ORC}$), más el calor procedente del análisis Pinch con una temperatura superior a 363 K ($Q_{363\text{ K}}^{ORC}$).

$$Q_{ev}^{ORC} = Q_{ev}^{SRC-ORC} + Q_{363\text{ K}}^{ORC} \quad (3.5)$$

El modelo para el ciclo AR calcula el calor de refrigeración (Q_{ref}^{AR}) y el costo total anual para el AR (Cost^{AR}), esto se matemáticamente se modela como:

$$\begin{bmatrix} Q_{ref}^{AR} \\ \text{Cost}^{AR} \end{bmatrix} = \text{Model}_{MLP}^{AR} \left(Q_g^{AR}, T_{in,g}^{AR}, T_{out,g}^{AR}, T_{in,ev}^{AR}, P_{low} \right) \quad (3.6)$$

donde Q_g^{AR} es la entrada de calor al ciclo AR, $T_{in,g}^{AR}$ es la temperatura de entrada del generador, es la temperatura de salida del generador, $T_{in,ev}^{AR}$ es la temperatura de entrada del evaporador y P_{low} es la presión de operación baja en el ciclo.

Para satisfacer los requisitos energéticos, se consideran las siguientes relaciones:

$$Q_{cond}^{SRC} = Q_b^{SRC-ORC} + Q_g^{AR} + Q_{min}^{heating} \quad (3.7)$$

donde el calor residual del condensador (Q_{cond}^{SRC}) es igual a la suma del calor suministrado al ORC ($Q_{ev}^{SRC-ORC}$), el calor suministrado al generador del ciclo AR (Q_g^{AR}) y la utilidad mínima de calentamiento ($Q_{min}^{heating}$).

Mientras que la refrigeración (Q_{ref}^{AR}) producido en el ciclo AR tiene que ser igual al calor mínimo de refrigeración (Q^{Ref}) definido por el análisis Pinch.

$$Q_{ref}^{AR} = Q^{Ref} \quad (3.8)$$

La utilidad mínima de enfriamiento ($Q_{min}^{cooling}$) es igual a la suma del calor recuperado por el ORC ($Q_{363\text{ K}}^{ORC}$), el calor recuperado por el agua de enfriamiento ($Q_{303\text{ K}}^{CW}$) y el calor de refrigeración (Q^{Ref}).

$$Q_{min}^{cooling} = Q_{363\text{ K}}^{ORC} + Q_{303\text{ K}}^{CW} + Q^{Ref} \quad (3.9)$$

Adicionalmente, para llevar a cabo la integración energética entre los motores térmicos y la CCG, es necesario satisfacer la diferencia mínima de temperatura; esto sólo se requiere cuando el SCR está involucrado.

$$\Delta T_{min} \leq T_{turbine}^{SRC} - T_{pump}^{ORC} \quad (3.10)$$

$$\Delta T_{min} \leq T_{turbine}^{SRC} - T_{in,g}^{AR} \quad (3.11)$$

$$\Delta T_{min} \leq T_{turbine}^{SRC} - T_{min}^{heating} \quad (3.12)$$

Los ingresos por la venta de energía ($Revenue_{elec}$) se determinan de la siguiente manera:

$$Revenue_{elec} = t_{op} a_c (Power_t^{SRC} + Power_t^{ORC}) \quad (3.13)$$

donde a_c es el precio de la electricidad y t_{op} es el tiempo de operación anual.

El costo del combustible ($Cost_{fuel}$) depende del tipo y la cantidad de combustible seleccionado en el proceso de optimización y se modela como sigue:

$$Cost_{fuel} = t_{op} D_s \left[\sum_{f \in F} (C_f^{fossil} Q_f^{fossil}) + \sum_{b \in B} (C_b^{biofuel} Q_b^{biofuel}) \right] \quad (3.14)$$

donde C_f^{fossil} y $C_b^{biofuel}$ son los costos unitarios de los combustibles fósiles f y de los biocombustibles b , D_s es un factor de conversión de tiempo.

El costo del agua de enfriamiento viene dado por:

$$Cost_{cw} = C_{cw} \times D_s \times Q_{303\text{ K}}^{CW} \quad (3.15)$$

donde C_{cw} es el costo unitario del agua de enfriamiento.

La función objetivo (OF) consiste en maximizar la ganancia total anual (TAP), minimizar las emisiones de gases de efecto invernadero ($GHGE$) y maximizar los puestos de empleos creados en este proyecto, que se define como sigue:

$$OF = \{\max TAP, \min GHGE, \max JOBS\} \quad (3.16)$$

La función objetivo económica pretende maximizar el TAP , que incluye los ingresos generados por la venta de energía ($Revenue_{elec}$), menos el costo del combustible ($Cost_{fuel}$), el costo del agua de enfriamiento ($Cost_{cw}$), el costo total anual del SRC ($Cost^{SRC}$), el costo total anual del ORC ($Cost^{ORC}$) y el costo total anual del ciclo AR ($Cost^{AR}$).

$$TAP = Revenue_{elec} - Cost_{fuel} - Cost_{cw} - Cost^{RC} - Cost^{ORC} - Cost^{AR} \quad (3.17)$$

La función objetivo ambiental viene determinada por el GEI global vertido al medio ambiente, donde $ghge_f^{fossil}$ y $ghge_b^{biofuel}$ son los GEI individuales para los combustibles fósiles f y los biocombustibles b .

$$GHGE^{Overall} = t_{op} D_s \left[\sum_{f \in F} (ghge_f^{fossil} Q_f^{fossil}) + \sum_{b \in B} (ghge_b^{biofuel} Q_b^{biofuel}) \right] \quad (3.18)$$

La función objetivo social es maximizar el número de puestos de trabajo creados en el proyecto, donde $jobs_f^{fossil}$ y $jobs_b^{biofuel}$ son los puestos de empleos individuales generados por los combustibles fósiles f y los biocombustibles b .

$$JOBS = t_{op} \left[\sum_{f \in F} (jobs_f^{fossil} Q_f^{fossil}) + \sum_{b \in B} (jobs_b^{biofuel} Q_b^{biofuel}) \right] \quad (3.19)$$

3.4. Resultados

3.4.1. Caso práctico

El caso práctico descrito por Tora y El-Halwagi (2010) se utiliza para ilustrar la aplicabilidad de la metodología propuesta. El caso es una planta farmacéutica, como se muestra en la **Figura 3.3**. La mezcla de alimentación ($C1$) primero se calienta a 513 K y

luego se introduce en un reactor adiabático donde tiene lugar una reacción endotérmica. Los gases que salen del reactor ($H1$) a 398 K se enfrían a 338 K antes de ser enviados a la unidad de recuperación. La mezcla que sale del fondo del reactor se separa en una corriente de vapor y otra de lodo. La corriente de vapor ($H2$) sale de la unidad de separación a 358 K y debe ser enfriada a 298 K antes de su almacenamiento. La corriente de lodo se lava con un líquido inmiscible caliente a 328 K. El líquido de lavado se purifica y se recicla a la unidad de lavado. Durante la purificación, la temperatura baja a 308 K. Por lo tanto, el líquido reciclado ($C2$) se calienta a 328 K. La corriente superior de la unidad de purificación ($H3$) se enfría de 318 a 283 K para condensar un disolvente que se recicla de nuevo al sistema de separación. Los datos de las corrientes de proceso en caliente y en frío se muestran en la **Tabla 3.2**. La diferencia mínima de temperatura ($\Delta T_{\min}$) es igual a 10 K, el tiempo de operación anual (t_{op}) es de 8640 h/año y el precio de la electricidad (a_c) es igual a 0.14 \$/kW-hr. Asimismo, los datos de los combustibles disponibles se muestran en la **Tabla 3.3**, donde se reportan los costos, las emisiones de *GEI* y los empleos generados por cada combustible. También se seleccionan diferentes valores del límite superior del *GEI* global para obtener una curva de Pareto y analizar el comportamiento de las soluciones.

Además, la optimización se realiza mediante el NSGA-III, que es implementado para resolver problemas de optimización con más de dos objetivos; en el modelo global se consideran tres objetivos simultáneamente (Max TAP , Min $GHGE^{Overall}$, y Max $JOBS$). Los parámetros asociados para la implementación del NSGA-III son los siguientes: tamaño de la población (PS): 200 individuos, número máximo de generaciones (MNG): 100, fracción de cruce (CF): 0.9, y fracción de mutación (MF): 0.1, que son los valores típicos utilizados para este fin. Para resolver este problema se utilizó una computadora con AMD Ryzen 7 a 2.3 GHz, 16 GB de RAM y el tiempo promedio de cómputo para la solución de cada punto de la curva de Pareto fue de 73 minutos. Cabe destacar que se utilizó el lenguaje de programación Python para la creación de los modelos MLP, así como implementación, codificación y optimización del modelo global.

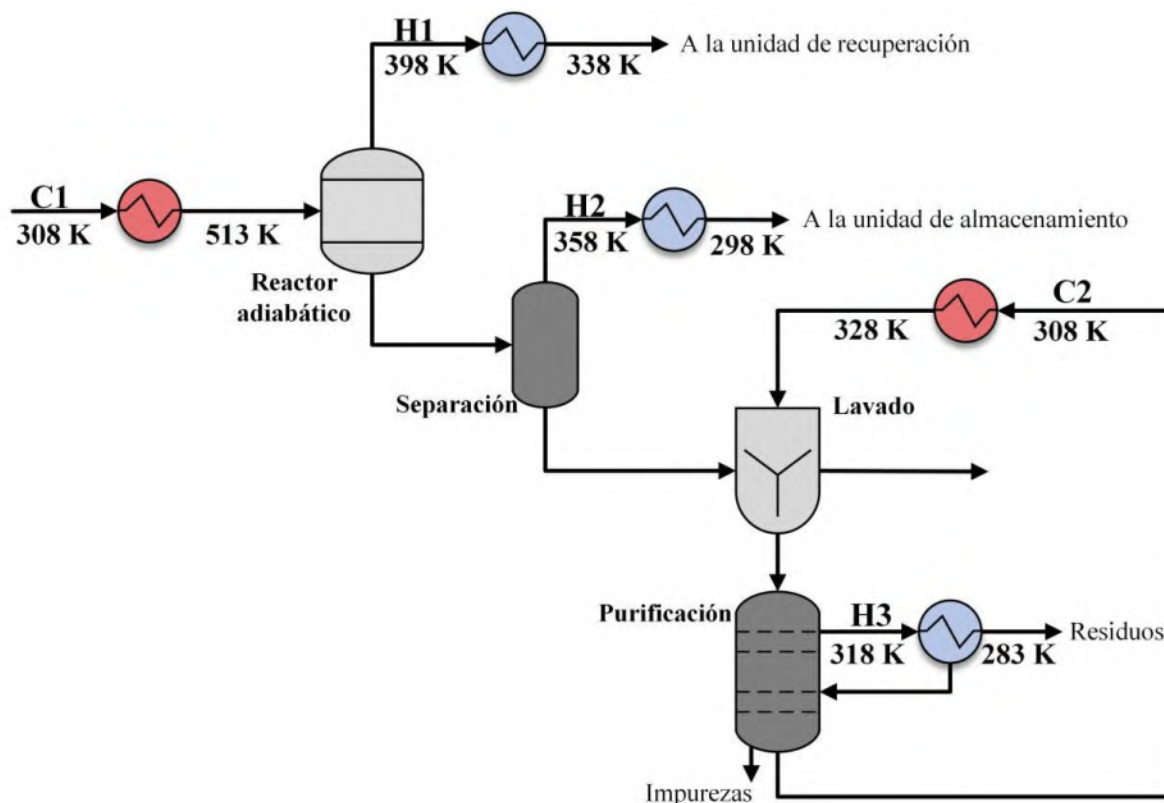


Figura 3.3. Diagrama de flujo de la planta farmacéutica.

Tabla 3.2. Datos de las corrientes del caso práctico.

Corriente	Temperatura de entrada (K)	Temperatura de salida (K)	Q (kW)
H1	398	338	-2,325
H2	358	298	-1,125
H3	318	283	-1531
C1	308	513	4,100
C2	308	328	725

Tabla 3.3. Datos unitarios de los combustibles para el caso práctico.

Combustibles	GEI generales (ton CO _{2eq} /kJ)	Costos (\$/mm kJ)	Generación de empleos (empleos/kJ)
<i>Fósiles</i>			
1. Carbón	2.21357×10^{-7}	1.5559	1.06281×10^{-11}
2. Petróleo	8.05408×10^{-8}	18.2447	1.81677×10^{-11}
3. Gas natural	7.90892×10^{-8}	5.8349	5.25431×10^{-11}
<i>Biocombustibles</i>			
1. Biomasa	2.44307×10^{-8}	2.0303	6.6964×10^{-8}
2. Biogás	2.68216×10^{-8}	8.5388	5.25431×10^{-7}
3. Madera blanda	3.3482×10^{-8}	2.5332	1.46691×10^{-8}
4. Madera dura	3.3482×10^{-8}	2.8975	5.43641×10^{-8}

3.4.2. Análisis Pinch

La **Figura 3.4** muestra la GCC para este caso práctico que se desarrolló a través del análisis Pinch para identificar los objetivos de servicios mínimos. Los servicios mínimos de calentamiento y enfriamiento son $Q_{\min}^{\text{heating}} = 2500 \text{ kW}$ y $Q_{\min}^{\text{cooling}} = 2656 \text{ kW}$, respectivamente. El servicio de calentamiento se satisface utilizando una parte del calor residual generado en el condensador del SRC y el servicio de enfriamiento se satisface con el ORC, el agua de enfriamiento y el ciclo AR. De acuerdo con la CCG (**Figura 3.4**), el exceso de calor por encima de 363 K ($Q_{363 \text{ K}}^{\text{ORC}} = 560 \text{ kW}$) es recuperado por el ORC para la producción de energía eléctrica, el calor entre 363 K y 303 K ($Q^{\text{CW}} = 750 \text{ kW}$) es eliminado por el agua de enfriamiento y el exceso de calor de las corrientes de proceso que necesitan bajar su temperatura por debajo de 303 K ($Q^{\text{ref}} = 1346 \text{ kW}$) es satisfecho por el ciclo AR.

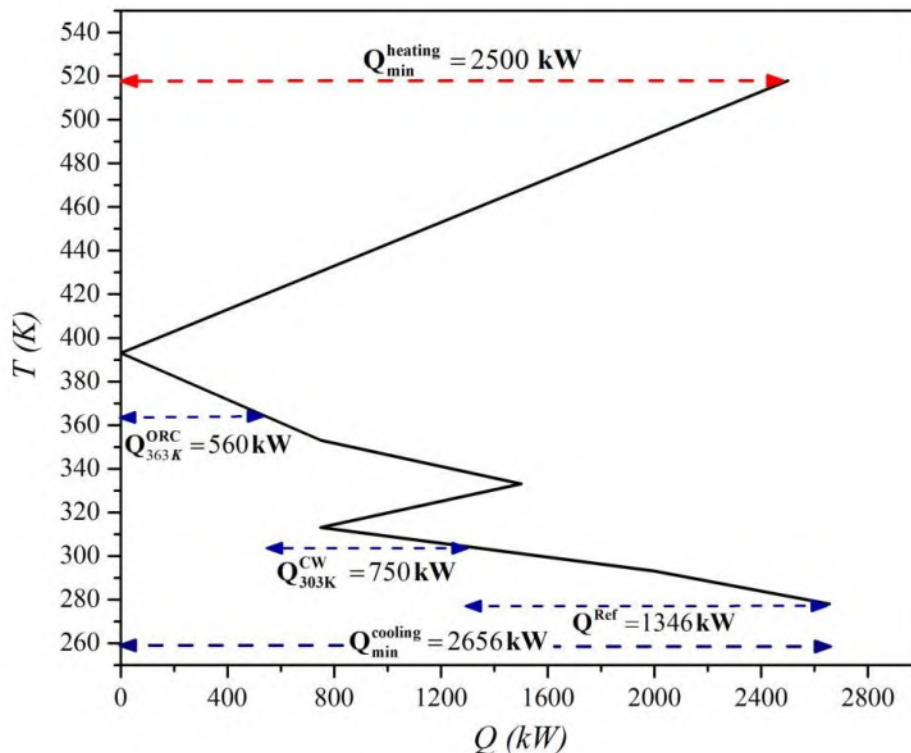


Figura 3.4. GCC para el caso de estudio.

3.4.3. Resultados de los modelos MLP

En este estudio, se obtuvieron 294 conjuntos de datos para el SRC, 480 conjuntos de datos para el ORC y 240 conjuntos de datos para el ciclo AR. Además, los conjuntos de datos de cada motor térmico se dividieron en dos categorías: entrenamiento y validación (véase la **Tabla 3.4**). En concreto, el 80% de los conjuntos de datos de cada motor térmico se utilizó para el entrenamiento y el 20% restante para la validación. Una vez realizado el entrenamiento de cada modelo MLP, se evaluó el rendimiento (error) de los modelos mediante la predicción de los conjuntos de datos de validación. Los tres MLP desarrollados se entrenaron utilizando la función de activación ReLU (Eckle y Schmidt-Hieber, 2019) y el optimizador Adam. Cabe señalar que la arquitectura óptima de MLP se determina por ensayo y error de los parámetros estructurales, también, es posible utilizar algoritmos de optimización (Babanouri y col., 2013); sin embargo, el algoritmo de entrenamiento, la función de activación, y otras decisiones se llevan a cabo a través del proceso de ensayo y error. Por lo tanto, no hay una fórmula exacta disponible para decidir qué arquitectura MLP resolverá un problema determinado (Messikh y col., 2017). Tras unos cuantos ensayos, la tasa de aprendizaje y las épocas se fijaron en 0.001 y 200, respectivamente. Mientras que la cantidad de capas ocultas y neuronas se obtuvieron realizando el proceso de prueba y error, así como un análisis de sensibilidad. Finalmente, las arquitecturas óptimas de los tres MLP construidos con los errores más bajos se presentan a continuación:

- ✓ Se han determinado cinco entradas, dos salidas y dos capas ocultas para el SRC. El número de neuronas en la primera y segunda capa oculta es de 100 y 100, respectivamente.
- ✓ Se establecieron seis entradas, dos salidas y dos capas ocultas para el ORC. El número de neuronas en la primera y segunda capa oculta es de 100 y 200, respectivamente.
- ✓ Se definieron cinco entradas, dos salidas y tres capas ocultas para el ciclo AR. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capa oculta es de 100, 400 y 200, respectivamente.

Tabla 3.4. Especificación de los conjuntos de datos.

Motor térmico	Conjunto de entrenamiento	Conjunto de validación	Número de entradas	Número de salidas
SRC	235	59	5	2

ORC	384	96	6	2
AR cycle	192	48	5	2

La **Figura 3.5** muestra los resultados de predicción de cada modelo MLP en función de los parámetros y las arquitecturas óptimas. En el caso del SRC (a), la potencia real producida y el costo total real se han comparado con la potencia predicha y el costo total predicho. El ORC (b) se ha representado de la misma manera que el SRC, mientras que para el ciclo AR (c) el calor de refrigeración real y el costo total real se han comparado con el calor de refrigeración predicho y el costo total predicho. La **Tabla 3.5** presenta los valores de los índices de evaluación de las salidas. Se puede observar que los resultados estimados por los modelos MLP son relativamente precisos porque el MRE se mantiene entre el 0.7% y el 1.2%, y el R^2 se mantiene entre el 0.988 y el 0.999. En conclusión, los modelos MLP desarrollados pueden predecir correctamente los resultados deseados para los motores térmicos.

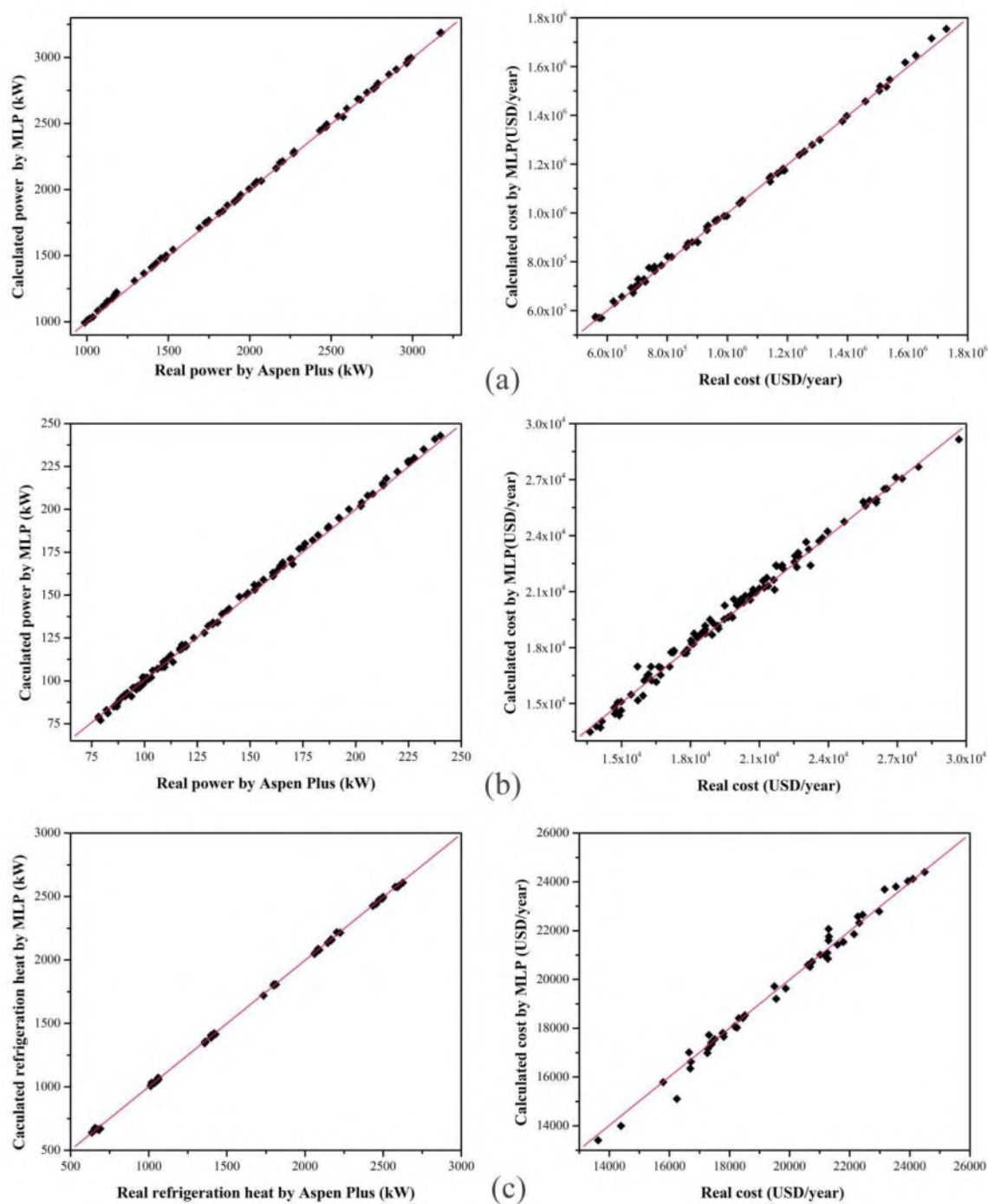


Figura 3.5. Resultados de predicción en la etapa de validación de los modelos MLP para las salidas deseadas de SRC (a), ORC (b) y ciclo AR (c).

Tabla 3.5. Errores de predicción del conjunto de validación.

Índice /Salida	SRC		ORC		AR cycle	
	$Power_t^{SRC}$	$Cost^{SRC}$	$Power_t^{ORC}$	$Cost^{ORC}$	Q_{ref}^{AR}	$Cost^{AR}$
MRE (%)	0.746	1.037	1.248	1.502	0.682	1.118
R ²	0.999	0.998	0.998	0.990	0.999	0.988

3.4.4. Resultados de la optimización

El conjunto de soluciones de Pareto para maximizar la *TAP*, minimizar los *GEI* asociados y maximizar el número de empleos generados se presenta en la **Figura 3.6**. Es importante mencionar que el NSGA-III trata de satisfacer los tres objetivos simultáneamente, por lo que no se obtuvieron soluciones extremas; por ejemplo, una solución en la que todo el calor suministrado al SRC proceda del carbón, lo que maximizaría el *TAP*, así como las emisiones de *GEI*.

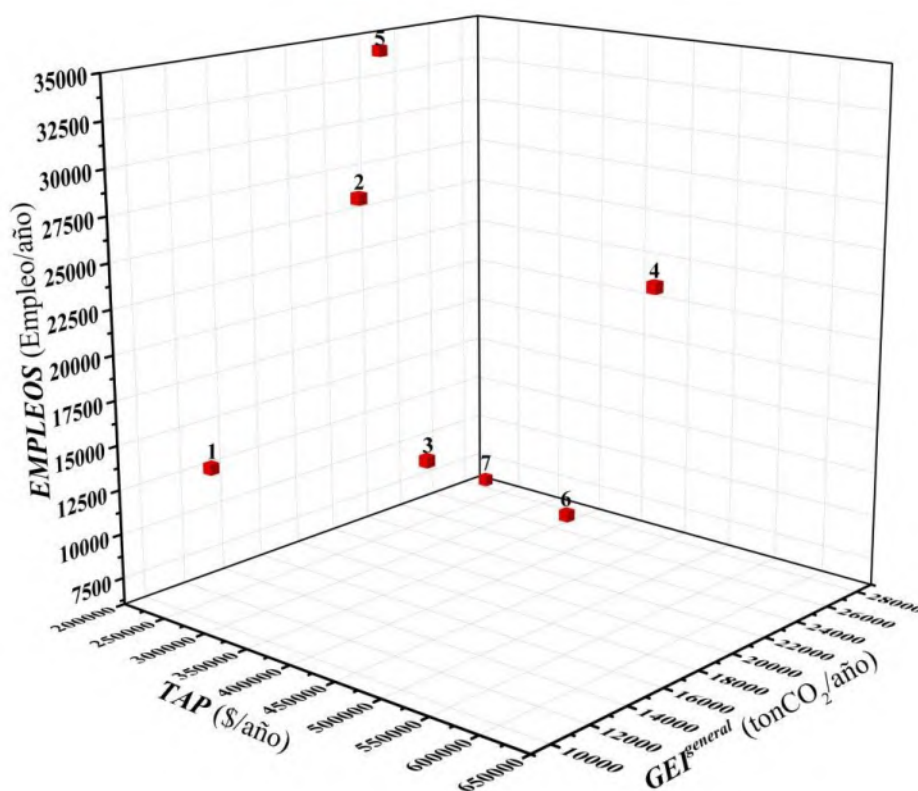


Figura 3.6. Curva de Pareto para *TAP*, *GEI* y Empleos.

La **Figura 3.6** muestra que la solución más amigable con el medio ambiente es el punto 1, donde se obtiene la menor cantidad de emisiones de *GEI* (10,911 tonCO₂/año), con un *TAP* igual a 266,704 \$/año, mientras que la cantidad de empleos generados es igual a 13,996 empleos/año. El punto 7 es la peor solución desde el punto de vista económico, medioambiental y social, ya que esta solución es la que genera el menor *TAP* (246,638 \$/año), el menor número de empleos (7,136 puestos de trabajo/año) y las mayores emisiones de *GEI* (27,045 tonCO₂/año), lo que supone un incremento del 148% respecto al punto 1 (solución con menor *GEI*). Por otro lado, el punto 5 es la mejor solución social ya que el número de empleos generados es igual a 34,819 puestos de trabajo/año, lo que supone un incremento del 388% respecto al punto 7, mientras que el *TAP* es igual a 270,547 \$/año y la cantidad de emisiones de *GEI* corresponde a 19,919 tonCO₂/año. El punto 4 representa la solución que tiene la mejor *TAP*, que es igual a 604,946 \$/año que corresponde a un aumento del 145% en comparación con el punto 7; también se producen 17,791 tonCO₂/año de emisiones de *GEI*, así como los puestos de trabajo generados, son iguales a 25,559 empleos/año. Obsérvese que, aunque esta solución es la mejor en términos de *TAP*, también genera un 63% más de emisiones de *GEI* que el punto 1, que no es tan grande como la cantidad generada en el punto 7; además, sólo disminuye el número de empleos generados en un 26% en comparación con el punto 5 (solución con el mayor número de empleos generados). Por lo tanto, se concluye que el punto 4 es la mejor solución en términos económicos, medioambientales y sociales.

Además, la **Figura 3.7** muestra la distribución de los combustibles utilizados para el funcionamiento del SRC. La cantidad total de calor suministrado oscila entre 6,348 kW y 7,064 kW. A la vez, se observa una tendencia en la disminución del calor suministrado por los biocombustibles y un aumento en los combustibles fósiles. En la solución 1, los biocombustibles proporcionan el 65% del calor total, produciendo así menos emisiones de *GEI*, mientras que en la solución 7 esto disminuye a sólo el 30% del calor total, por lo que es la peor solución medioambiental, ya que la principal fuente de calor es el carbón y es la solución en la que se suministra la menor cantidad de calor al SRC (6,348 kW). En la solución 4, los biocombustibles proporcionan el 70% del calor total y es la mejor solución en términos económicos, medioambientales y sociales porque la asignación de las fuentes de calor se distribuye principalmente en madera dura, biomasa, biogás y carbón.

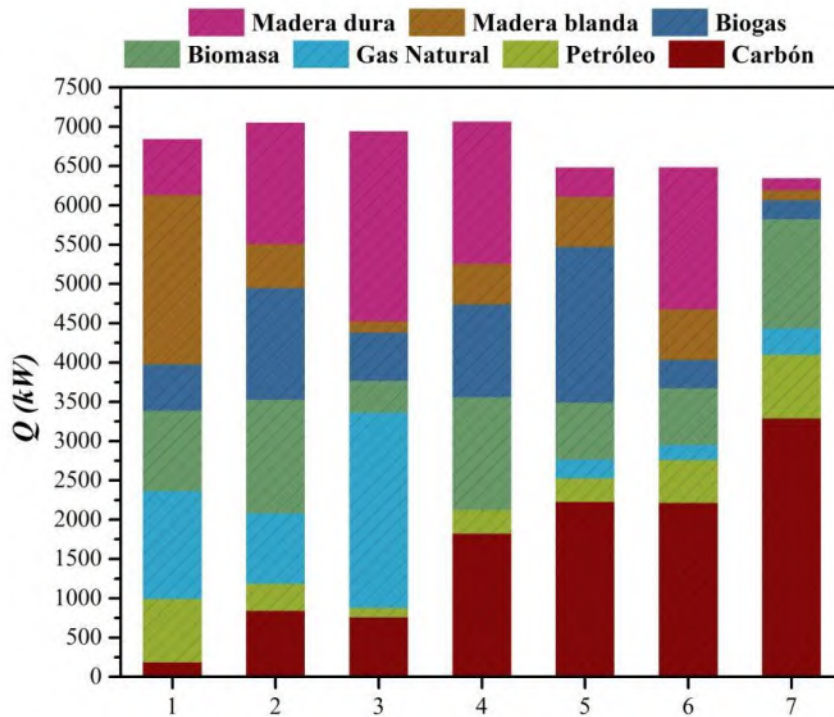


Figura 3.7. Combustibles utilizados por las diferentes soluciones.

Las condiciones de operación, así como las eficiencias obtenidas de los motores térmicos, son diferentes en cada solución. La eficiencia térmica del SRC se sitúa entre 0.227 (solución 7) y 0.286 (solución 4). La eficiencia del ORC se sitúa entre 0.117-0.153, siendo la solución 3 la de menor valor y la solución 4 la de mayor eficiencia. Obsérvese que la solución 4 también fue la solución con mayor eficiencia térmica en estos ciclos. Sin embargo, el *COP* del ciclo AR se mantuvo entre 0.54 (solución 4) y 0.60 (solución 1).

Las **Tablas 3.6, 3.7 y 3.8** presentan los resultados óptimos obtenidos para los motores térmicos en la solución 4. A partir de las condiciones de operación, las eficiencias (μ^{SRC} y μ^{ORC}) y el coeficiente de rendimiento (*COP*) obtenidos en la optimización, se realizaron simulaciones en Aspen Plus® para evaluar la precisión de los modelos MLP, comparar resultados y obtener presiones de operación. El SRC produce una potencia de 2,025 kW, por lo que funciona con un rendimiento equivalente a 0.286 tanto en el modelo MLP como en Aspen Plus®, mientras que la principal diferencia está en la temperatura de operación de la caldera, donde el error es igual al 5.8%, sin embargo, las demás condiciones son muy similares; el error es igual al MRE determinado entre los modelos MLP y la simulación en Aspen Plus®. El ORC tiene un rendimiento equivalente a 0.153 tanto en el modelo MLP

como en Aspen Plus®, donde el error de las temperaturas de operación para la caldera y la turbina es igual al 6.6% y al 7.7%, respectivamente, mientras que para las demás temperaturas el error es igual al 0%. Para el ciclo AR se obtuvo un *COP* igual a 0.54, cabe destacar que el mayor error se encuentra en la baja presión (7.4%) y un porcentaje negativo ya que en la simulación (Aspen Plus®) se obtuvo 1 K más que en el modelo MLP. En general, los resultados obtenidos para los motores térmicos son muy similares, lo que demuestra y reafirma que se obtuvieron modelos MLP precisos y eficientes.

La **Figura 3.8** muestra el diagrama esquemático del problema resuelto con los valores óptimos obtenidos. Cabe destacar que se suministran 2,120 kW de combustibles fósiles y 4,944 kW de biocombustibles, mientras que el calor residual generado en el condensador del SRC (5,039 kW) se distribuye entre las necesidades de calentamiento (2,500 kW), el ORC (42 kW) y el ciclo AR (2,497 kW), y el fluido de trabajo seleccionado para el ORC fue el R123. Los costos totales anuales del SRC, el ORC y el ciclo AR fueron iguales a 1,043,302 \$/año, 12,285 \$/año y 20,276 \$/año, respectivamente.

Además, este caso práctico fue utilizado por Gutiérrez-Arriaga y col. (2014) donde sólo satisfacían las utilidades de enfriamiento utilizando el ORC, el agua de enfriamiento y un refrigerante, considerando como función objetivo la maximización del beneficio bruto anual generado por la venta de la electricidad producida en el ORC; las utilidades calientes no fueron satisfechas ni consideradas en los costos. Entonces, sólo se modeló el ORC mediante correlaciones termodinámicas y se optimizó mediante un algoritmo genético. Los resultados presentados para el ORC con el R123 como fluido de trabajo son: eficiencia térmica igual a 0.0957 y costo total anual igual a 18.372 \$/año. Esto representa un 36% menos en eficiencia térmica y un 49% más en costo total que los obtenidos en este trabajo. También, los costos de refrigeración obtenidos fueron de 4,416,000 \$/año, muy elevados en comparación con los obtenidos en este trabajo (20,276 \$/año).

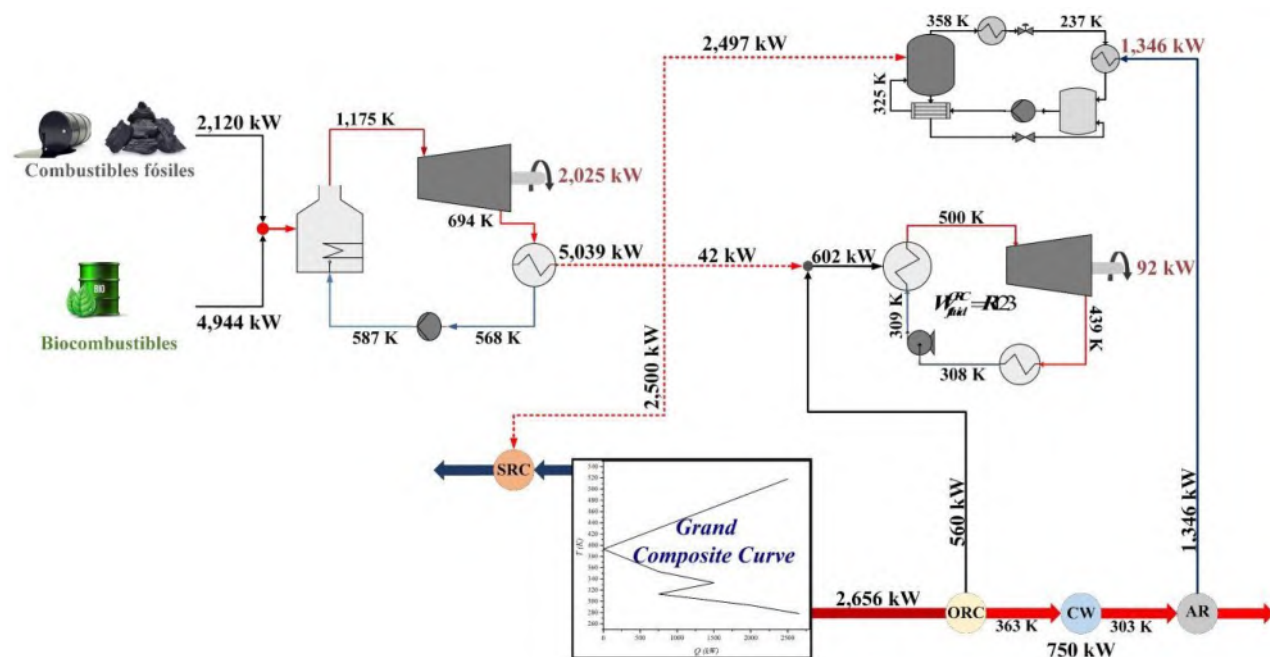


Figura 3.8. Solución óptima para la energía de integración.

Tabla 3.6. Resultados detallados de la evaluación del SRC y de la precisión.

Concepto	Resultados de la optimización / modelo MLP	Resultados en Aspen Plus ®	Error (%)
T_{cond}^{SRC} (K)	568.0	561.4	1.1
T_{pump}^{SRC} (K)	587.0	587.0	0.0
T_{boiler}^{SRC} (K)	1,175.0	1107.0	5.8
$T_{turbine}^{SRC}$ (K)	694.0	692.0	0.3
P_{high} (atm)	-	700.0	-
P_{low} (atm)	-	71.5	-
Q_b^{SRC} (kW)	7,064.0	7,064.0	0.0
Power	2,025.0	2,025.0	0.0

Tabla 3.7. Resultados detallados de la evaluación del ORC y de la precisión.

Concepto	Resultados de la optimización / modelo MLP	Resultados en Aspen Plus®	Error (%)
T_{cond}^{ORC} (K)	308.0	308.0	0.0
T_{pump}^{ORC} (K)	309.0	309.0	0.0

T_{boiler}^{ORC} (K)	500.0	467.0	6.6
$T_{turbine}^{ORC}$ (K)	439.0	405.0	7.7
P_{high} (atm)	-	92.0	-
P_{low} (atm)	-	1.28	-
Q_b^{ORC} (kW)	602.0	602.0	0.0
Power	92.0	92.0	0.0

Tabla 3.8. Resultados detallados de la evaluación del ciclo AR y de la precisión.

Concepto	Resultados de la optimización / modelo MLP	Resultados en Aspen Plus®	Error (%)
$T_{in,g}^{AR}$ (K)	325.0	325.0	0.0
$T_{out,g}^{AR}$ (K)	358.0	358.0	0.0
$T_{in,ev}^{AR}$ (K)	237.0	238.0	-0.4
$T_{out,ev}^{AR}$ (K)	-	242.0	-
P_{high} (atm)	-	18.5	-
P_{low} (atm)	0.94	0.87	7.4
Q_g^{AR} (Kw)	2,497.0	2,497.0	0.0
Q_{ref}^{AR}	1,346.0	1,346.0	0.0

Capítulo 4. PLANTEAMIENTO 2

Desarrollo y Evaluación de Modelos para predecir la Producción de Gas y el Agua de Retorno en Yacimientos de Gas Shale

4.1. Generalidades

La creciente demanda energética y el agotamiento de los recursos convencionales han impulsado la búsqueda de fuentes alternativas, entre las que destaca el gas de lutitas (shale gas) por su abundancia mundial (Han et al., 2021b) y su carácter no convencional, gas adsorbido o libre atrapado en formaciones de baja porosidad y alto contenido orgánico (Speight et al., 2016). Su explotación se ha potenciado con la fracturación hidráulica y la perforación horizontal, que elevan la producción (Xu et al., 2012), pero también conllevan elevados consumos de agua dulce y la generación de grandes volúmenes de agua de retorno con compuestos peligrosos (Onishi et al., 2019), cuya gestión resulta compleja.

En respuesta, numerosos estudios han abordado la planificación óptima de la cadena del gas shale, transporte, gasoductos, unidades de procesamiento y venta (Arredondo-Ramírez et al., 2016; Hong et al., 2020; Ahn et al., 2020) y la gestión económica-ambiental del flujo de retorno (reúso, almacenamiento, tratamiento y disposición) (Bartholomew y Mauter, 2016; Guerra et al., 2016; Hernández-Pérez et al., 2020; Serrano-Areválo et al., 2022). La predicción de la producción a nivel de pozo es especialmente difícil con métodos convencionales (Knudsen y Foss, 2015); por ello se han propuesto marcos probabilísticos, modelos grises, enfoques empíricos y técnicas de superficie de respuesta, entre otros (Zou et al., 2016; Chen et al., 2020; Nguyen-Le et al., 2021).

El auge del aprendizaje automático ha permitido desarrollar modelos basados en SVM, ANN, RF, LSTM y CNN para estimar producción, recuperación final estimada (EUR) y flujos de retorno. En este contexto, Li y Han (2017) aplicaron la tecnología de RNA para predecir la tasa de producción de pozos de gas de esquisto en función de la información sobre fracturación hidráulica y las propiedades del yacimiento. Shahkarami et al. (2018) aplicaron varias técnicas de aprendizaje automático (regresión lineal, SVM, RNA y GP) utilizando como datos información histórica de terminación, perforación y producción de pozos de gas shale situados en el suroeste de Pensilvania. Han et al. (2020) utilizaron modelos de aprendizaje automático RF, gradient boosting machine (GBM) y SVM para evaluar la productividad del gas shale utilizando parámetros de fracturación hidráulica y terminación de pozos. Han y Kwon (2021) aplicaron una red neuronal profunda basada en un MLP para predecir la producción acumulada de gas utilizando como variables independientes la información del pozo, la terminación, la fracturación hidráulica y los datos de producción en

la formación Montney de Canadá. Yang et al. (2022) desarrollaron un modelo de memoria a corto plazo basado en aprendizaje profundo para predecir la producción de gas shale y lo compararon con métodos analíticos convencionales. Además, se han utilizado diferentes técnicas de aprendizaje automático para predecir la EUR del gas shale (Liu et al., 2021; Niu et al., 2022). Mientras que, para la tasa de agua de retorno, se ha presentado un trabajo que implementa el aprendizaje profundo basado en MLP para pronosticar el reflujo de pozos de gas de esquisto utilizando factores de reflujo característicos y datos de 286 pozos de gas de esquisto en el yacimiento de Weiyuan, China (Yuyang et al., 2021). Aunque la mayoría se circunscribe a objetivos individuales y bases de datos específicas.

México posee el segundo lugar de mayor potencial de shale gas de Latinoamérica y el sexto del mundo, con 545 Tcf técnicamente recuperables (EIA, 2013). El campo mejor documentado es Eagle Ford, cuya extensión mexicana en la Cuenca de Burgos alcanza un potencial de 343 Tcf (EIA, 2015; Cuevas et al., 2004). No obstante, su desarrollo se ve frenado por limitaciones de inversión, capacidad de servicios y disponibilidad de agua.

Ante este panorama, el presente trabajo propone modelos de RNA para predecir (i) el gas acumulado en los primeros 12 meses y (ii) el flujo de retorno acumulado en los primeros 90 días, usando seis variables clave y una base de datos de pozos del Eagle Ford (Texas). Se desarrollan dos modelos de salida única y uno multi-salida, optimizados mediante análisis de sensibilidad de hiperparámetros. Finalmente, se evalúa un área en la Cuenca de Burgos (Coahuila) como caso pionero en México, optimizando las variables de pozo con un algoritmo genético multiobjetivo que maximiza la producción de gas y minimiza el consumo de agua dulce.

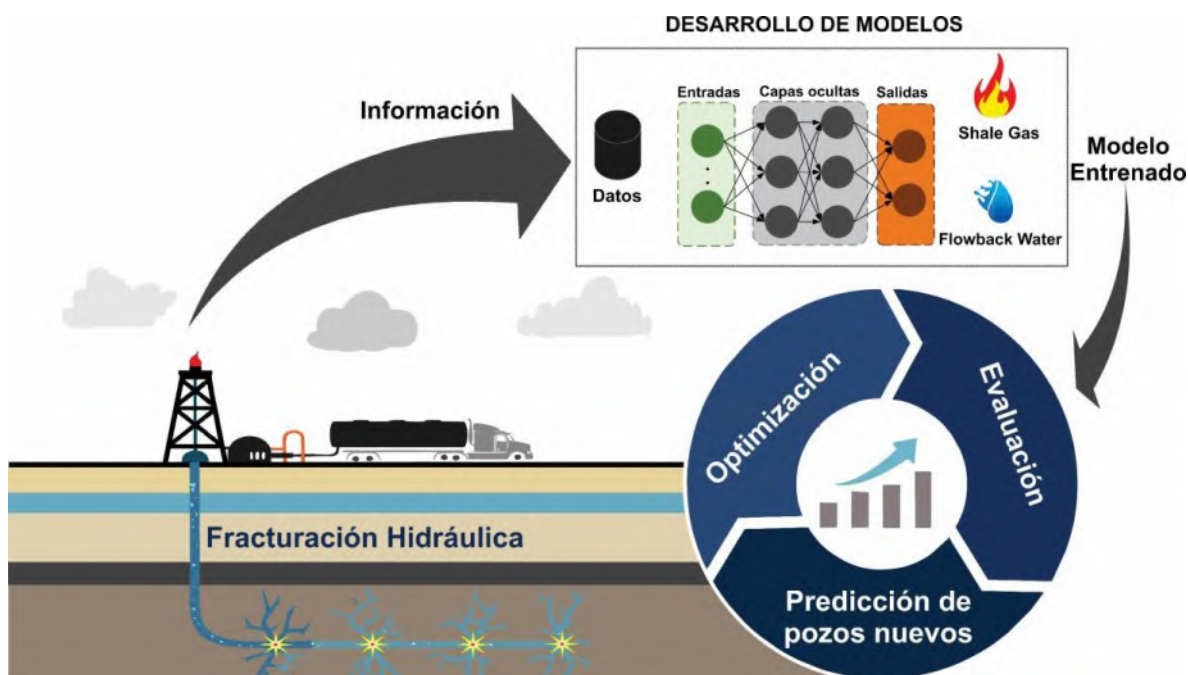


Figura 4.1. Representación esquemática de la estrategia implementada para el desarrollo de este estudio.

4.2. Metodología

La **Figura 4.2** presenta de forma esquemática la metodología utilizada para desarrollar los modelos de RNA y la optimización de las variables de entrada para la perforación de pozos de gas de esquisto en una zona de estudio dentro de México. Inicialmente, la recolección de datos se lleva a cabo utilizando una base de datos de Texas; posteriormente, se realiza el preprocesamiento y análisis de datos para eliminar anomalías y analizar las correlaciones entre los parámetros del conjunto de datos, mientras que la etapa de normalización de datos elimina los errores causados por los diferentes órdenes de magnitud de los parámetros. Después, el conjunto de datos se divide en un conjunto de entrenamiento y un conjunto de validación que se utilizan para entrenar los modelos de RNA, realizar previsiones y comprobar la validez de los modelos entrenados. La selección del modelo a entrenar depende de las salidas deseadas, ya que se propone desarrollar tres modelos de RNA, dos con una sola salida y uno con múltiples salidas. Dependiendo del modelo seleccionado, se define la combinación inicial de hiperparámetros para entrenar el modelo, validar el modelo y almacenar los resultados obtenidos, así como el modelo entrenado. Si no es el último experimento del análisis de sensibilidad para el modelo

seleccionado, se define una nueva combinación de hiperparámetros; esto se repite hasta completar todos los experimentos del análisis de sensibilidad. Tras obtener los resultados de cada modelo, se seleccionan los mejores modelos RNA con las métricas de error más bajas. Estos modelos RNA se utilizan para evaluar la posibilidad de perforar pozos de gas de esquisto en una zona de estudio en México. En base a la función objetivo y al número de pozos a perforar, se elige el algoritmo de optimización y los parámetros asociados (tamaño de la población, número máximo de generaciones, etc.). Finalmente, se realiza la optimización de las variables de entrada de los modelos RNA en función de la función objetivo y el análisis de los resultados.

4.2.1. Preparación de los datos

Los datos utilizados en este trabajo se tomaron de la formación Eagle Ford en Texas. La formación Eagle Ford ha sido una de las fuentes más notables de combustible fósil no convencional en Estados Unidos (Hou y col., 2021). La formación se extiende por la plataforma Comanche desde la cuenca Maverick en el suroeste de Texas a lo largo de la frontera internacional con México, a través del arco de San Marcos y hasta la cuenca del este de Texas, cubriendo un área de 640 km de largo y 60 km de ancho. En el sur de Texas, la Eagle Ford es más gruesa dentro de la Cuenca Maverick y se adelgaza hacia el Arco de San Marcos, con un rango de aproximadamente 15 a 90 millas (Hentz y col., 2010; Zhao y col., 2020).

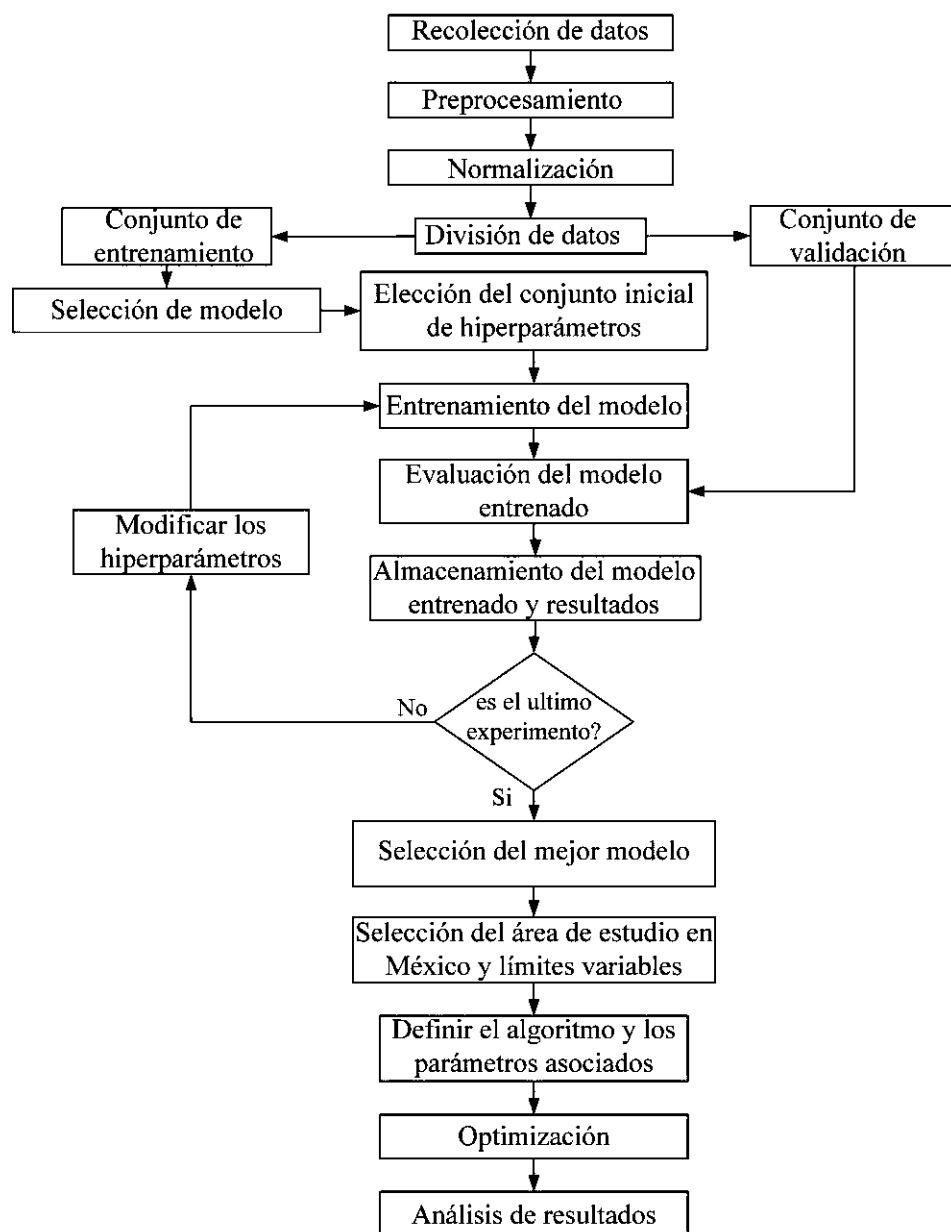


Figura 4.2. La metodología general utilizada para el desarrollo de este proyecto.

En este trabajo, se seleccionó un área de estudio (véase la **Figura 4.3**) dentro de la formación Eagle Ford, en la frontera con México, donde se recogieron un total de 508 datos de pozos horizontales de la base de datos de pozos de Texas (Well Finder, 2022). Se consideraron un total de 8 parámetros (ver **Tabla 4.1**), donde las variables dependientes a pronosticar son la producción acumulada de gas a 12 meses (12CGA) y el flujo de retorno a 90 días (90FB), mientras que las variables independientes son la latitud (LAD), la longitud (LOD), la profundidad vertical real (TVD), la longitud lateral (LLE), el total de apuntalante

(TPP) y el total de agua de fractura (TFW). Es importante mencionar que después de la etapa de preprocesamiento de los datos, el conjunto de datos se redujo a 298, debido a la alta variabilidad obtenida en el 90FB de cada pozo, donde se decidió mantener sólo aquellos datos donde el 90FB era mayor al 5% respecto al TFW suministrado en cada pozo. Además, la **Tabla 4.1** presenta los rangos, la media y la desviación estándar de cada parámetro recogido.

Mediante gráficos de dispersión y el coeficiente de correlación de Pearson (véase la **Figura 4.4**), se analizaron las relaciones por pares de los parámetros considerados para encontrar cuáles de las variables independientes tienen efectos significativos sobre las variables de respuesta; además, se muestra un histograma de todos los parámetros a lo largo de la diagonal. El coeficiente de correlación de Pearson es un índice que mide la dependencia lineal entre dos variables continuas, este coeficiente va de -1 a +1. Empleando el coeficiente de correlación de Pearson en la **Figura 4.4**, se confirma la inexistencia de correlaciones para 90FB con LAD (-0.069), LOD (-0.043) y TVD (0.019), correlaciones positivas moderadas con LLE (0,43) y correlaciones positivas fuertes con TPP (0.62) y TWF (0.75). Para el 12CGA, se confirma una fuerte correlación negativa con LAD (-0.51), correlaciones positivas débiles con LOD (0.092) y LLE (0.13) correlaciones positivas moderadas con TVD (0.43), TPP (0.3) y correlación positiva fuerte con TWF (0.51). Es importante mencionar que no se descarta la posibilidad de que existan relaciones no lineales entre los pares de variables en los que se encontraron relaciones inexistentes según el coeficiente de Pearson.

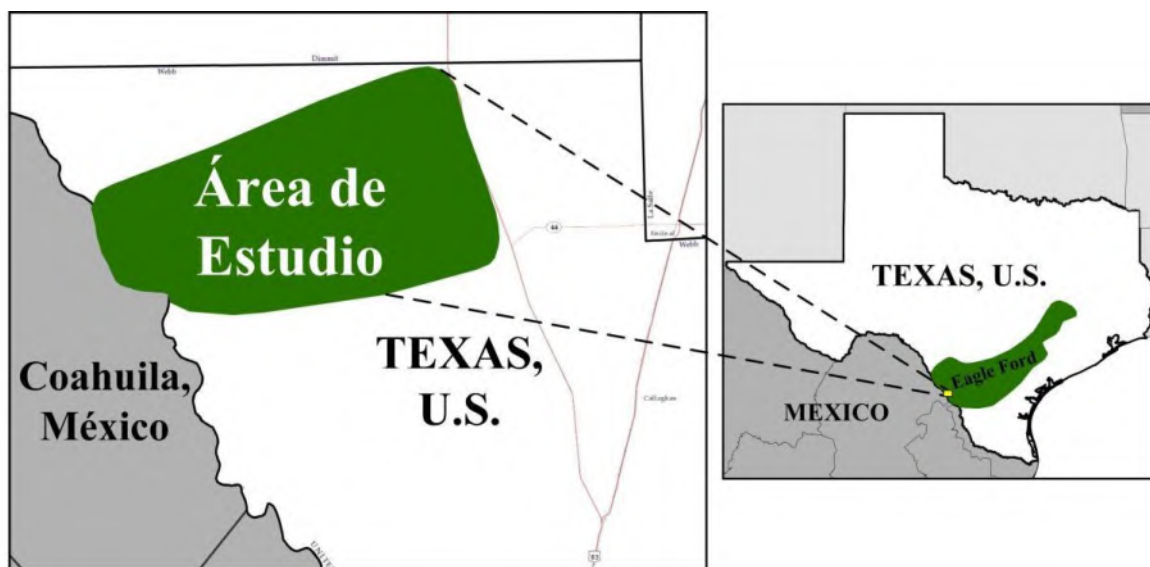


Figure 4.3. Ubicación de la zona de estudio donde se recopilieron los datos de los pozos de gas shale.

Table 4.1. Lista de las características de los parámetros del conjunto de datos.

Parámetros	Unidades	Rangos	Media	Tipo de datos
LAD	[°]	27.980 ~ 28.287	28.1	<i>Variables de entrada</i>
LOD	[°]	-99.999 ~ -99.592	-99.8	
TVD	[m]	2076 ~ 2898	2529.4	
LLE	[m]	996 ~ 4024	2248.5	
TPP	[10 ⁶ kg]	0.1 ~ 16.5	4.6	
TFW	[10 ³ m ³]	7.1 ~ 154.5	32.2	<i>Variables de Salida</i>
90FB	[10 ³ m ³]	0.43 ~ 48.89	5.3	
12CGA	[10 ³ m ³]	4.17 ~ 144.53	31.5	

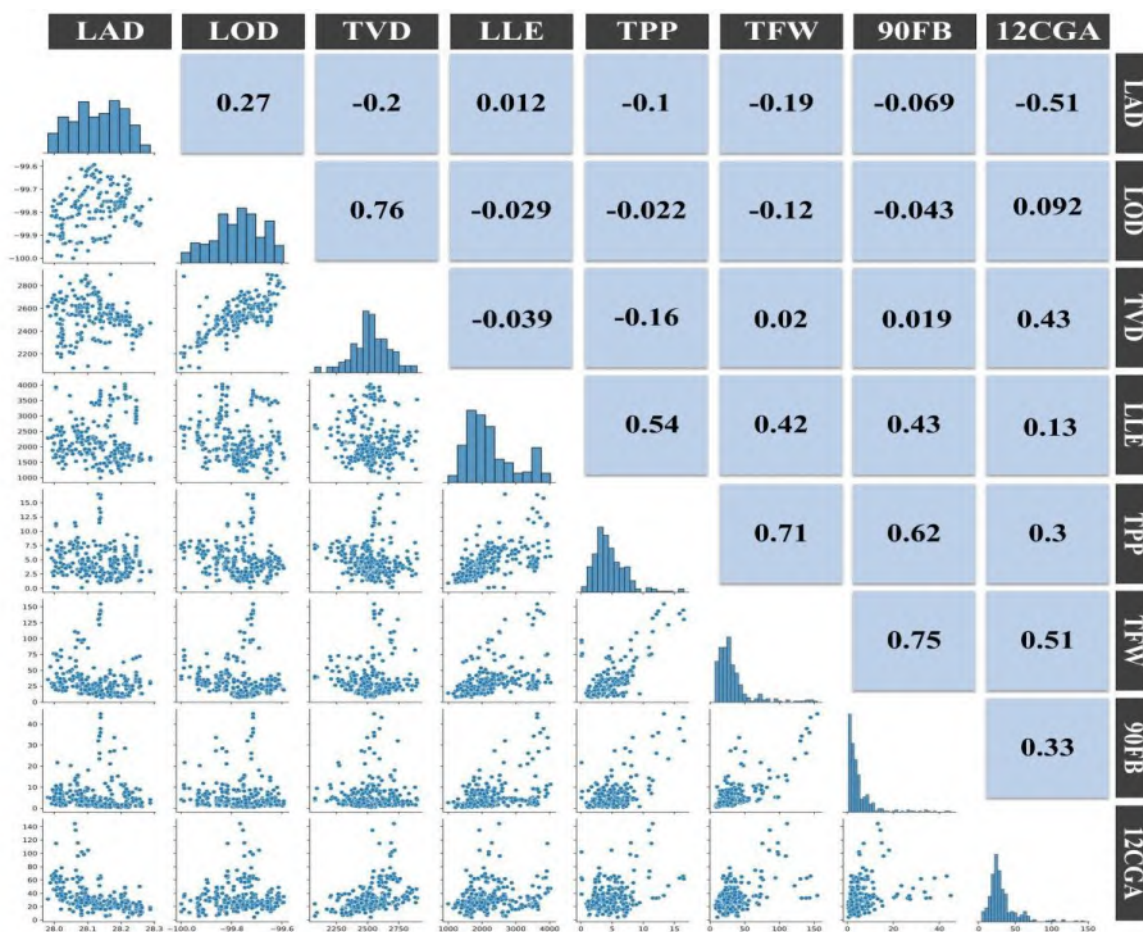


Figura 4.4. Gráficos de dispersión y matriz del coeficiente de correlación de Pearson que muestran las correlaciones por pares de los parámetros y los histogramas de cada parámetro.

4.2.2. Análisis de sensibilidad de los hiperparámetros

Se llevó a cabo un análisis de sensibilidad de los hiperparámetros para optimizar mejor los modelos RNA. Para definir los hiperparámetros y los rangos en el análisis de sensibilidad, se realizaron entrenamientos previos de los modelos. Los hiperparámetros y rangos para el análisis de sensibilidad se presentan en la **Tabla 4.2**. Cabe destacar que se ha considerado la construcción de tres modelos RNA. El primer modelo tiene sólo la 90FB como variable de salida (modelo de salida única), el segundo modelo sólo la 12CGA (modelo de salida única) y el tercer modelo es un modelo de salida múltiple que considera la 90FB y la 12CGA como variables de salida.

Table 4.2. Hiperparámetros y rangos utilizados en el análisis de sensibilidad.

Hiperparámetro	Modelo para 90FB	Modelo para 12CGA	Modelo Multi-Salida
Nº de neuronas	50,100,150,250,500	100,150,200,250,300	50,100,150,200,250,300,
	0		500
Nº de capas ocultas	2,4,6	4,6,8	4,6,8,10
Velocidad de aprendizaje	0.001,0.0001	0.001,0.0001	0.001,0.0001
Tamaño de lota	1,2,4	1,2,4	1,2

4.2.3. Optimización de las variables

A través del análisis de la **Figura 4.4**, se verificó la influencia de las variables de entrada en el 90FB obtenido y el 12CGA producido en los pozos de gas shale. Por lo tanto, los modelos RNA pueden ser utilizados para predecir el 90FB obtenido y el 12CGA producido en nuevos pozos que fueron perforados en un área cercana al área de estudio donde se recolectaron los datos. Asimismo, en el caso de zonas cercanas sin pozos de gas shale, estos modelos pueden utilizarse para predecir los 90FB esperados y los 12CGA producidos suponiendo cuáles serían las variables de entrada. En este caso, dado el número de pozos de gas shale que se van a perforar, es posible optimizar la combinación de variables de entrada para cada pozo con el fin de minimizar el consumo total de agua dulce de todos los pozos ($TFW^{allwells}$) y maximizar la producción de gas acumulada en 12 meses de todos los pozos ($F^{gas_allwells}$). Para ello, es necesario realizar una optimización multiobjetivo, considerando el siguiente conjunto de ecuaciones como función objetivo,

$$O.F.=\{\min TFW^{allwells}, \max F^{gas_allwells}\} \quad (4.1)$$

$$TFW^{allwells} = \sum_{i=1}^n TFW_i \quad (4.2)$$

$$F^{gas_allwells} = \sum_{i=1}^n F_n^{12_month_gas} \quad (4.3)$$

donde n es igual a el número total de pozos que serán perforados. Los variables de decisión son iguales a las variables de entrada presentadas en la **Tabla 4.1**.

4.3. Resultados

4.3.1. Resultados de los modelos MLP

El conjunto de datos recopilados se dividió aleatoriamente en un 85% para el conjunto de entrenamiento y un 15% para el conjunto de validación. Los modelos RNA fueron entrenados utilizando la función de activación ReLU y Adam. Después de desarrollar todos los experimentos del modelo RNA para el análisis de sensibilidad, se seleccionaron los mejores modelos RNA. La **Tabla 4.3** muestra los valores de los hiperparámetros con los que se obtuvieron los mejores modelos. Nótese que, en los tres casos, los mejores modelos no fueron los mayores de todos los experimentos realizados en el análisis de sensibilidad. Además, como era de esperar, el modelo MLP con la mayor estructura fue el modelo multi-salida.

Tabla 4.3. Valores de los hiperparámetros de los mejores modelos obtenidos mediante el análisis de sensibilidad.

Hiperparámetro	Modelo 90FB	Modelo 12CGAS	Modelo multi-salida
Numero de neuronas	150	100	250
Numero de capas ocultas	4	8	8
Velocidad de aprendizaje	0.0001	0.0001	0.0001
Tamaño de lote	1	1	1

La **Tabla 4.4** muestra los valores obtenidos para los índices de error de los mejores modelos obtenidos, tanto para el conjunto de entrenamiento como para el conjunto de validación. Se puede observar que los resultados de los modelos RNA para ambos conjuntos son relativamente precisos ya que los errores son bajos (MSE, MAE y MRE) para el conjunto de entrenamiento y al predecir con el conjunto de validación, estos errores no aumentan drásticamente. Además, se han reportado diferentes estudios en distintos países que sólo consideran una única variable de salida. Específicamente, para el 12CGA, los valores obtenidos en este trabajo están dentro de los rangos reportados (Shahkarami y col., 2018; Wang y col., 2019; Han y col., 2020; Hui y col., 2021) y para el 90FB los errores obtenidos fueron cercanos a los reportados por el único trabajo que ha realizado este tipo de modelo en

China (Yuyang y col., 2021). Lo mismo ocurre con el R^2 que pasa de 0.98 (conjunto de entrenamiento) a 0.947 (conjunto de validación) en el modelo de salida única (90FB), mientras que el R^2 para el modelo de salida única variable (12CGA) pasa de 0.99 a 0.931. Para el modelo multi-salida, el R^2 del 30FB se mantiene entre 0.976 y 0.951, y para el 12CGA pasa de 0.993 a 0.854. En base a estos resultados, se puede determinar que, para el 90FB, el modelo de salida única comparado con el modelo multi-salida es muy similares en términos de precisión, ya que los índices tienen valores muy cercanos, mientras que para el 12CGA el modelo de salida única es mejor que el modelo multi-salida ya que el modelo de salida única presenta mejores valores de los índices. Además, la **Figura 4.5** muestra gráficamente los resultados obtenidos del pronóstico realizado por los modelos frente a los valores reales para el conjunto de entrenamiento y validación de los modelos de salida única.

Tabla 4.4. Errores obtenidos para los modelos mejor entrenados.

Métricas/Conjunto	Modelos Única-Salida				Modelo Multi-Salida			
	90FB		12CGA		90FB		12CGA	
	Entren.	Valid.	Entren.	Valid.	Entren.	Valid.	Entren.	Valid.
MSE	0.814	3.699	3.892	23.83	0.993	2.966	2.362	86.773
MAE	0.452	1.194	0.968	2.975	0.364	1.107	1.007	5.0913
MRE [%]	8.988	19.268	3.031	9.668	6.837	17.652	3.098	15.104
R^2	0.980	0.947	0.990	0.931	0.976	0.951	0.993	0.8546

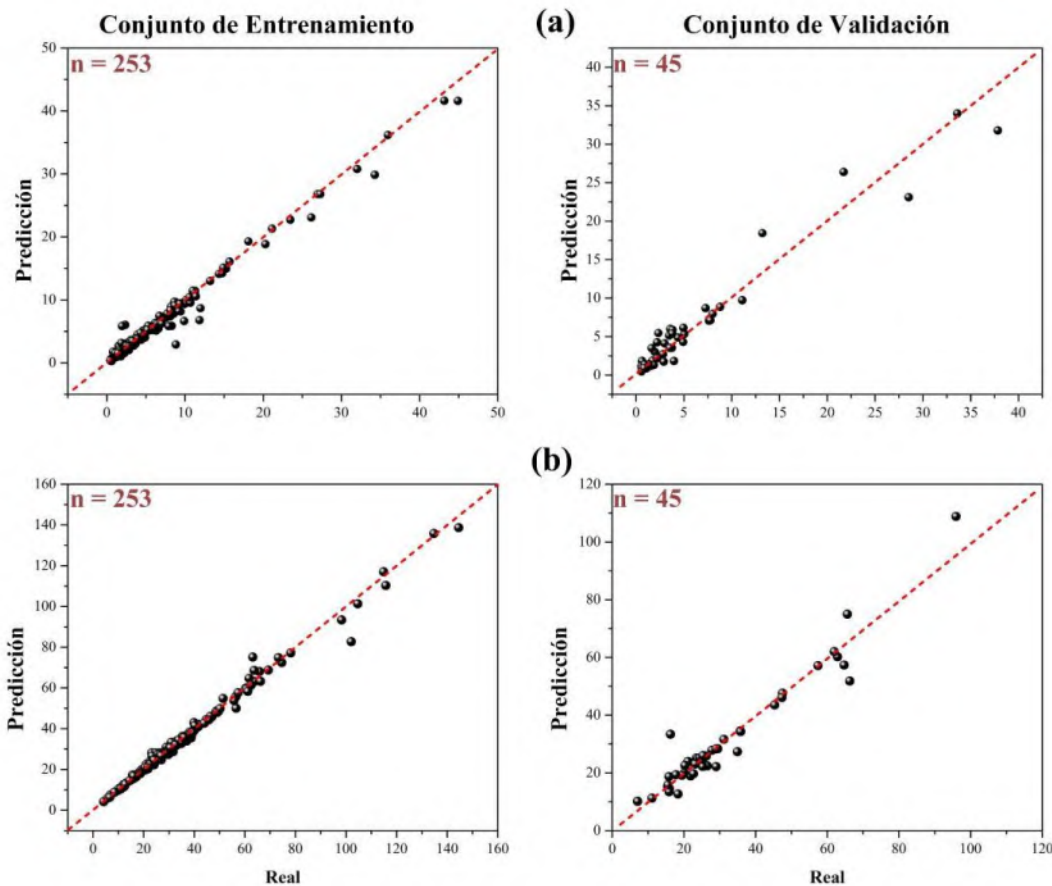


Figura 4.5. Comparación de los valores reales frente a los calculados por los modelos para el conjunto de entrenamiento y el conjunto de validación; modelo de flujo de retorno a 90 días (a) modelo de gas acumulado a 12 meses (b).

4.3.2. Evaluación de un área de estudio y optimización multiobjetivo

Los modelos RNA se utilizaron para evaluar la posible perforación de pozos de gas shale en México y para analizar los beneficios y las necesidades requeridas para satisfacer los requisitos de perforación. Para ello, se seleccionó un área de estudio en la cuenca de Burgos, en el noreste del estado de Coahuila de Zaragoza, México, en la frontera con Estados Unidos, cercana a la zona geográfica donde se tomaron los conjuntos de datos para la construcción de los modelos RNA. Se ha propuesto la optimización multiobjetivo de los modelos RNA para dos escenarios, donde el escenario (a) evalúa la perforación de 20 pozos y el escenario (b) 40 pozos. Para esta evaluación, se utilizaron modelos de salida única para predecir los 90FB y 12CGA producidos en cada pozo considerado en los escenarios.

Los límites inferior y superior de los parámetros asociados a cada pozo se representan en las siguientes ecuaciones,

$$27.9954 \leq LTD_n \leq 28.1440 \quad (4.12)$$

$$-100.1965 \leq LND_n \leq -100.0916 \quad (4.13)$$

$$2080 \leq TVD_n \leq 2850 \quad (4.14)$$

$$1200 \leq LLN_n \leq 4000 \quad (4.15)$$

$$0.1 \leq TPP_n \leq 7.0 \quad (4.16)$$

$$12 \leq TFW_n \leq 65 \quad (4.17)$$

Cabe señalar que los límites inferior y superior de latitud y longitud se establecen para abarcar la zona de estudio propuesta en Coahuila de Zaragoza, México.

La optimización multiobjetivo se lleva a cabo mediante el conocido algoritmo NSGA-II. Los valores de los hiperparámetros asociados a la optimización multiobjetivo (NSGA-II) son los siguientes Tamaño de la población (PS): 100 individuos, Número máximo de generaciones (MNG): 100, Fracción de cruce (CF): 0,9, y Fracción de Mutación (MF): 0,5, que son valores adecuados para problemas tan complejos como el abordado. Hay que tener en cuenta que el NSGA-II con los 100 individuos y 100 generaciones seleccionados realiza un total de 10,000 evaluaciones durante el proceso de optimización. Mientras que para la resolución de este problema se utilizó un ordenador con un procesador AMD Ryzen 7 a 2,3 GHz con 16 GB de RAM y el tiempo de cálculo para obtener la curva de Pareto fue de 7.30 y 12.21 horas para los escenarios (1) y (2), respectivamente.

La **Figura 4.6** muestra las curvas de Pareto obtenidas tras la optimización multiobjetivo de ambos escenarios. En las curvas de Pareto de cada escenario se han identificado el punto de utopía (UP) y el punto nadir (NP). La solución del punto de utopía se obtiene a través de la “mejor solución” para cada objetivo, por ejemplo, con el valor máximo de gas acumulado a 12 meses y el valor mínimo de agua total de fractura utilizada. El punto de utopía no es factible, ya que los objetivos son conflictivos, pero se utiliza como referencia ideal. La solución nadir se obtiene con los peores valores de los objetivos.

En el escenario 1, se obtuvieron un total de 12 soluciones después del MNG y se observa que, a medida que aumenta el gas acumulado total, también aumenta el agua total consumida para la fracturación hidráulica. Sin embargo, hay un aumento exponencial y en las soluciones donde se consume la mayor cantidad de agua, se predice casi la misma cantidad de gas acumulado total. El punto (a) es la solución en la que se predice la mayor cantidad de gas acumulado en los primeros 12 meses con un valor igual a $701,900 \text{ m}^3$, pero al mismo tiempo es la solución con el mayor consumo total de agua de $715,150 \text{ m}^3$. Por su parte, el punto (b) es la solución con la menor cantidad de gas acumulado pronosticado, igual a $673,750 \text{ m}^3$, y la menor cantidad de agua total consumida, igual a $702,330 \text{ m}^3$, lo que representa una disminución del 4% y del 1.8%, respectivamente, con respecto al punto (a). En el punto (c), se ha pronosticado una cantidad de gas acumulado igual a $686,420 \text{ m}^3$ y la cantidad total de agua consumida es igual a $704,730 \text{ m}^3$, lo que representa una disminución del 2.2% y del 1.45%, respectivamente, con respecto al punto (a). Obsérvese que el gas acumulado pronosticado disminuye aproximadamente a la mitad en comparación con el punto (b), mientras que la diferencia en el consumo total de agua es de sólo $2,400 \text{ m}^3$. Además, el punto c es la solución más cercana a la UP.

En el escenario 2, se han obtenido un total de 11 soluciones después del MNG; aunque la tendencia no es tan marcada como en el escenario 1, el aumento de la cantidad de gas acumulado produce un incremento del consumo de agua. En este escenario, el punto (a) representa la solución en la que se prevé la mayor cantidad de gas acumulado a 12 meses con un valor de $1,255,320 \text{ m}^3$ y el total de agua consumida es igual a $1,432,210 \text{ m}^3$, lo que equivale a un aumento del 78.8% y del 100%, respectivamente, en comparación con el escenario 1. Mientras que el punto (b) es la solución con el menor consumo total de agua de fractura con un valor de $1,421,140 \text{ m}^3$ y la cantidad de gas acumulada en 12 meses es igual a $1,228,190 \text{ m}^3$, lo que representa un aumento del 102% y del 83.3%, respecto al punto (b) del escenario 1. El punto (c) representa un punto intermedio entre (a) y (b), donde la cantidad de gas acumulado a 12 meses prevista es igual a $1,243,690 \text{ m}^3$ y el total de agua de fractura consumida tiene un valor de $1,422,300 \text{ m}^3$, lo que representa un aumento del 101.8% y del 81.2%, respecto al punto (c) del escenario 1. Además, el punto c de este escenario es el más cercano a la UP. Obsérvese que, aunque este escenario considera el doble de pozos (40) en comparación con el escenario 1, ninguna solución ha logrado acercarse al doble del

pronóstico de gas acumulado a 12 meses, mientras que el agua de fractura total en casi todas las soluciones se ha duplicado. Hasta cierto punto, esto tiene sentido porque los MLP son modelos no lineales, y un aumento significativo de la perforación de pozos no garantiza un aumento significativo de la cantidad de gas producido. Se seleccionaron los puntos (c) de ambos escenarios para analizar el resto de los resultados.

Cabe destacar que existe la posibilidad de que, si se manipularan los parámetros asociados al algoritmo (PS, MNG, CF y MF), se podrían encontrar mejores soluciones, ya que la optimización del escenario 2 representa un problema más complejo de resolver en comparación con el escenario 1; esto se refleja en los tiempos de convergencia.

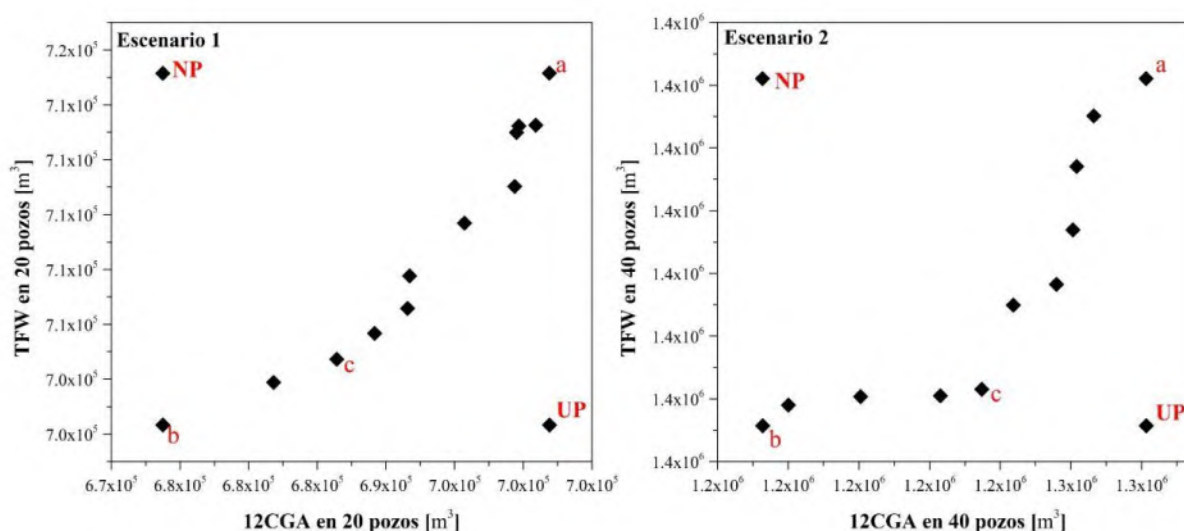


Figura 4.6. Curvas de Pareto para el total de gas acumulado en 12 meses y el total de agua de fractura para los escenarios 1 y 2.

La **Figura 4.7** muestra el mapa de ubicación de la zona de estudio propuesta en la frontera entre Coahuila de Zaragoza y Texas; además, se presentan las ubicaciones de cada uno de los pozos considerados en ambos escenarios. A través de la longitud y latitud optimizada por el NSGA-II para cada pozo, se ha encontrado la ubicación correcta de cada uno de los pozos a perforar. Cabe destacar que las ubicaciones de los pozos están dispersas en la zona de estudio propuesta. Así, es posible aumentar el número de pozos totales considerados para la fracturación hidráulica en la zona de estudio. Sin embargo, en ambos

escenarios, no se obtuvieron pozos potenciales para perforar en la parte suroeste de la zona de estudio.

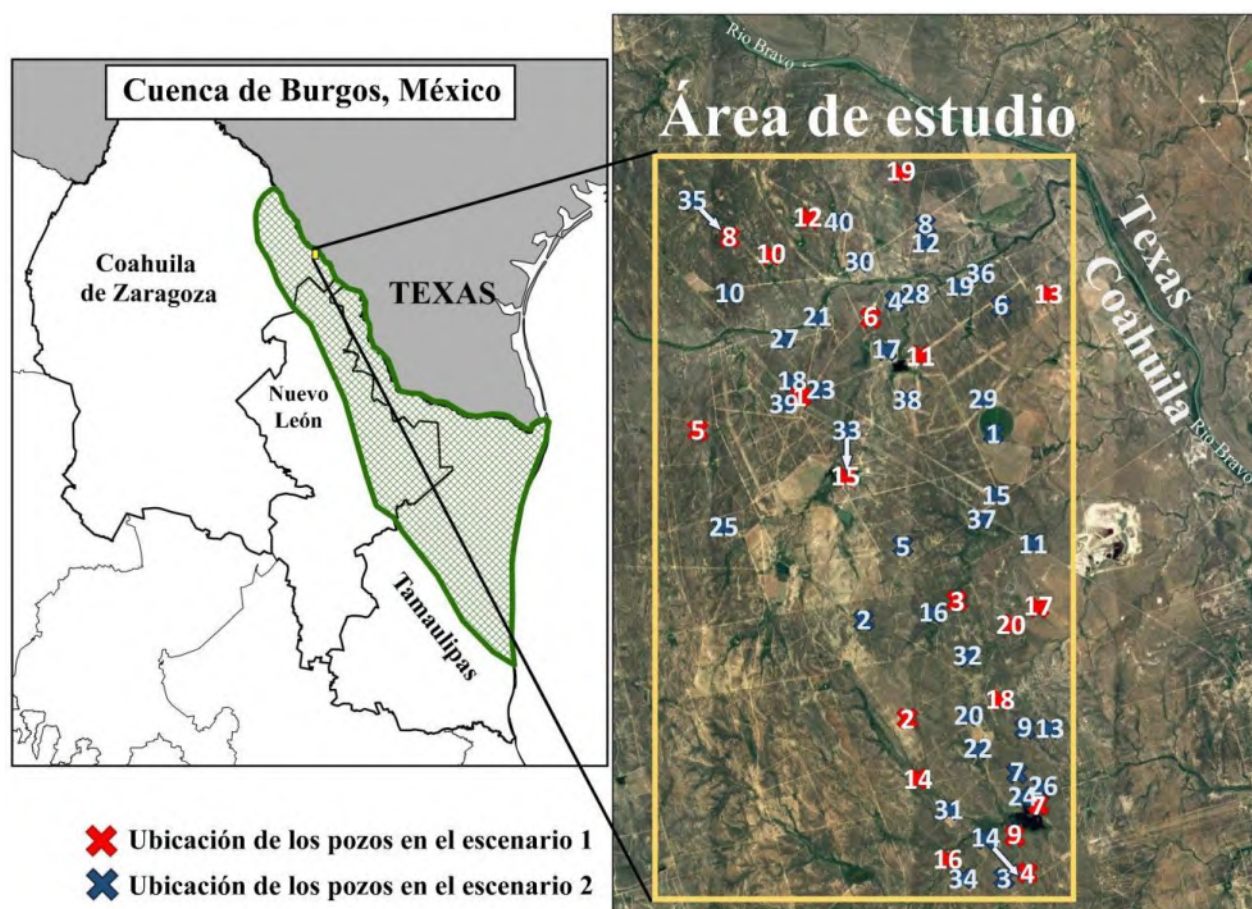


Figura 4.7. Ubicación de cada pozo dentro del área de estudio propuesta en la cuenca de Burgos.

En la **Figura 4.8**, se muestra el TFW a utilizar y el pronóstico del 12CGA en cada pozo para los escenarios 1 y 2. Se puede observar que, en general, el agua de fractura total de los pozos varía para cada uno de ellos, mientras que el pronóstico de 12CGA se separa en dos grupos; esto es así en ambos escenarios. En el escenario 1, la mayoría de los pozos están entre los $26,587 \text{ m}^3$ (pozo 2) y los $45,758 \text{ m}^3$ (pozo 10) de TFW utilizada, donde el pozo con mayor TFW es el pozo 17 con $53,410 \text{ m}^3$. Por lo demás, los pozos 4, 14 y 20 requieren menos TFW, que se mantienen por debajo de los $17,276 \text{ m}^3$ (pozo 14). Mientras que en la mayoría de los pozos el pronóstico de 12CGA para cada pozo está entre $14,293 \text{ m}^3$ (pozo 18) y $20,564 \text{ m}^3$ (pozo 10) un total de 13 pozos están entre estas cantidades. En el otro extremo, los pozos

2,7,9,14 y 16 son los que pronostican la mayor cantidad de 12CGA, que se sitúan entre 67,255 m³ y 78,622 m³; hay que tener en cuenta que estos pozos no consumen grandes cantidades de agua.

En el escenario 2, el TFW utilizado en cada pozo está completamente disperso entre 59,456 m³ (pozo 2) y 14,810 m³ (pozo 7). Mientras que, en la mayoría de los pozos, el pronóstico de 12CGA está entre 67,000 m³ (pozo 22) y 13,529 m³ (pozo 31), y las mayores cantidades de 12CGA pronosticadas están entre 60,836 m³ (pozo 7) y 78,598 m³ (pozo 34); todos estos pozos (3, 7, 9, 14, 16, 20, 22, 24, 32 y 34) están requiriendo bajos niveles de agua, como en el escenario 1.

Es importante destacar que en los pozos donde se prevé la mayor cantidad de 12CGA en ambos escenarios, algunas variables tienen valores en común. En concreto, todos estos pozos están situados en el lado sureste del área de estudio propuesta (véase la **Figura 4.7**); tienen una profundidad vertical verdadera (TVD) superior a 2,400 metros y una longitud lateral (LLN) superior a 3,070 metros, lo que significa que estos pozos son más grandes en comparación con el resto de los pozos, por lo que tendría sentido la mayor cantidad en el pronóstico de 12CGA.

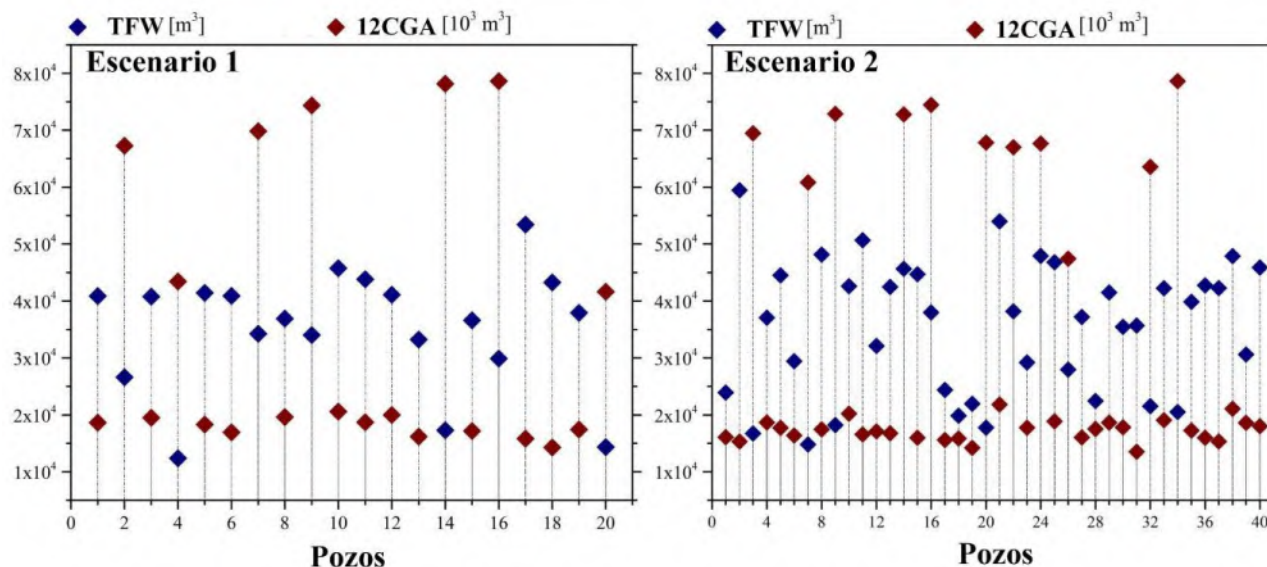


Figura 4.8. TFW consumido para completar cada pozo y pronóstico de 12CGA para cada pozo en ambos escenarios; TFW se representa con puntos azules y 12CGA con puntos rojos.

La **Figura 4.9** muestra el pronóstico de 90FB para cada pozo en los escenarios. Cabe destacar la dispersión encontrada en los valores obtenidos. En el escenario 1, el pozo con la mayor predicción de 90FB fue el pozo 16 con un valor igual a $8,366 \text{ m}^3$, este pozo también predice la mayor cantidad de 12CGA (ver **Figura 4.9**) y en términos de porcentaje de flujo de retorno respecto al TFW utilizado fue del 28%. En el pozo 19 se pronosticó la menor cantidad de 90FB con un valor de $3,388 \text{ m}^3$, y también se obtuvo el menor porcentaje de flujo de retorno igual al 9%. El pozo en el que se encontró el mayor porcentaje de flujo de retorno es el pozo 14 con un valor igual al 45%. En el escenario 2, el pozo 16 también prevé la mayor cantidad de 90FB con un porcentaje de flujo de retorno igual al 24%, además, es uno de los pozos donde se prevé más 12CGA (ver **Figura 4.9**). En el pozo 4 se prevé la menor cantidad de 90FB con un valor de $2,807 \text{ m}^3$, siendo también el que tiene el menor porcentaje de flujo de retorno (7.5%) y en el pozo 7 se obtuvo el mayor porcentaje de flujo de retorno, que es igual al 44%.

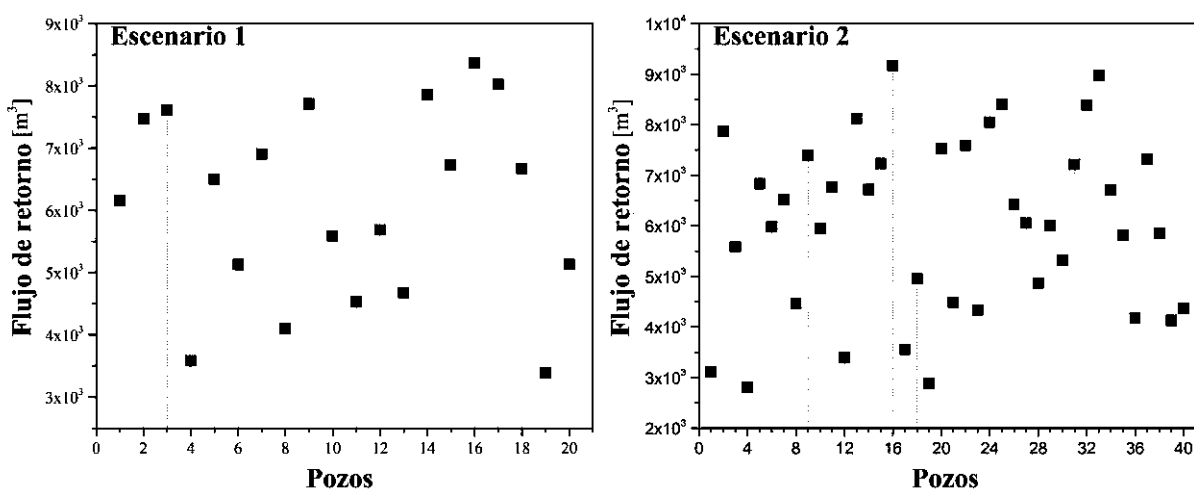


Figura 4.9. Pronóstico de flujo de retorno a 90 días para cada pozo en ambos escenarios

Capítulo 5. PLANTEAMIENTO 3

Implementación Simultánea del Aprendizaje Automático y la Optimización Determinista en la Gestión del Agua en Yacimientos de Gas Shale

5.1. Generalidades

Este capítulo introduce, por primera vez, la integración de modelos de aprendizaje automático con un esquema de optimización matemática determinista para la explotación de yacimientos de gas shale. El método combina, en un único problema MINLP, RNA de predicción para el flujo de retorno y el gas acumulado con una superestructura que abarca todas las decisiones de fracturación y de gestión hídrica. Maximizar la ganancia total anual (*TAP*) y minimizar el consumo total de agua fresca son los objetivos económicos y medioambientales establecidos en este proyecto. Por último, se presenta un caso práctico situado en México para mostrar la aplicabilidad del enfoque propuesto.

A continuación, se presentan las principales contribuciones de este capítulo:

- Integración pionera aprendizaje automático y MINLP: incorporación simultánea de modelos de aprendizaje automático dentro de un problema MINLP determinista para optimizar producción de gas y gestión del agua en yacimientos de shale.
- Modelos predictivos robustos: desarrollo de modelos de aprendizaje automático para predecir el flujo de retorno y el gas producido en pozos de gas shale; los hiperparámetros asociados se optimizan con el algoritmo adaptativo Hyperband basado en una búsqueda aleatoria.
- Superestructura hídrica completa: formulación de un modelo que contempla todas las rutas posibles (reúso, almacenamiento, tratamiento y disposición) para minimizar el uso de agua fresca y maximizar la rentabilidad, incorporando todos los costos asociados.

Este trabajo sienta las bases para un diseño integral y cuantitativamente riguroso, donde la IA y la optimización basada en programación matemática conviven de forma sinérgica. En consecuencia, la metodología propuesta, ilustrada en la **Figura 1.1**, puede reestructurarse como se muestra en la **Figura 5.1**. Antes de integrar los modelos RNA entrenados en el modelo global, es imprescindible reformular cada RNA como un problema de optimización, ya sea de MIP o de NLP, según se detalla en la **Sección 2.3.2**.

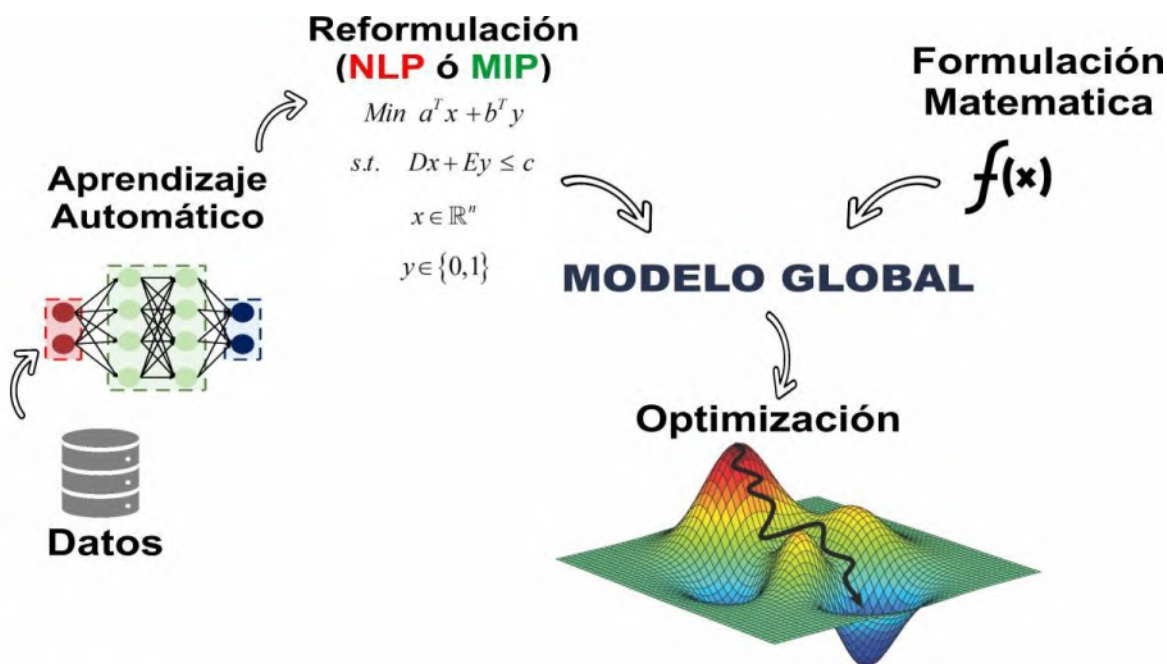


Figura 5.1. Estrategia de solución propuesta para modelos de aprendizaje automático y optimización determinista.

5.2. Metodología

La metodología aplicada se divide en distintas etapas (véase la **Figura 5.2**). Se desarrolla una RNA para predecir el flujo de retorno y el gas producido. En primer lugar, para la construcción del modelo RNA, se lleva a cabo la recolección del conjunto de datos y su preprocesamiento. A continuación, se normaliza el conjunto de datos y se divide en un conjunto de entrenamiento y un conjunto de validación, que se utilizan para entrenar y evaluar/validar el modelo RNA. Además, se lleva a cabo la optimización de los hiperparámetros asociados al modelo RNA para obtener un modelo competitivo. Tras obtener el mejor modelo RNA con los hiperparámetros optimizados, se genera un modelo subrogado en un lenguaje de modelado algebraico (ver **sección 2.3.2**), que se incorpora al modelo matemático propuesto. El modelo matemático incluye el modelo subrogado del modelo RNA, balances de materiales, generación temporal de flujo de retorno, opciones de tratamiento, almacenamiento, reutilización y eliminación, así como la producción de gas de esquisto. Asimismo, se considera una calendarización de un año para la explotación de los

pozos. Además, se utiliza el método ϵ -constraint para encontrar soluciones compromiso mediante las funciones objetivo propuestas.

Los datos usados para el desarrollo de este modelo son los presentados en la **sección 4.1.1.** y las métricas de error usadas para la evaluación del modelo RNA son el MSE, el MAE, el MAPE y R^2 .

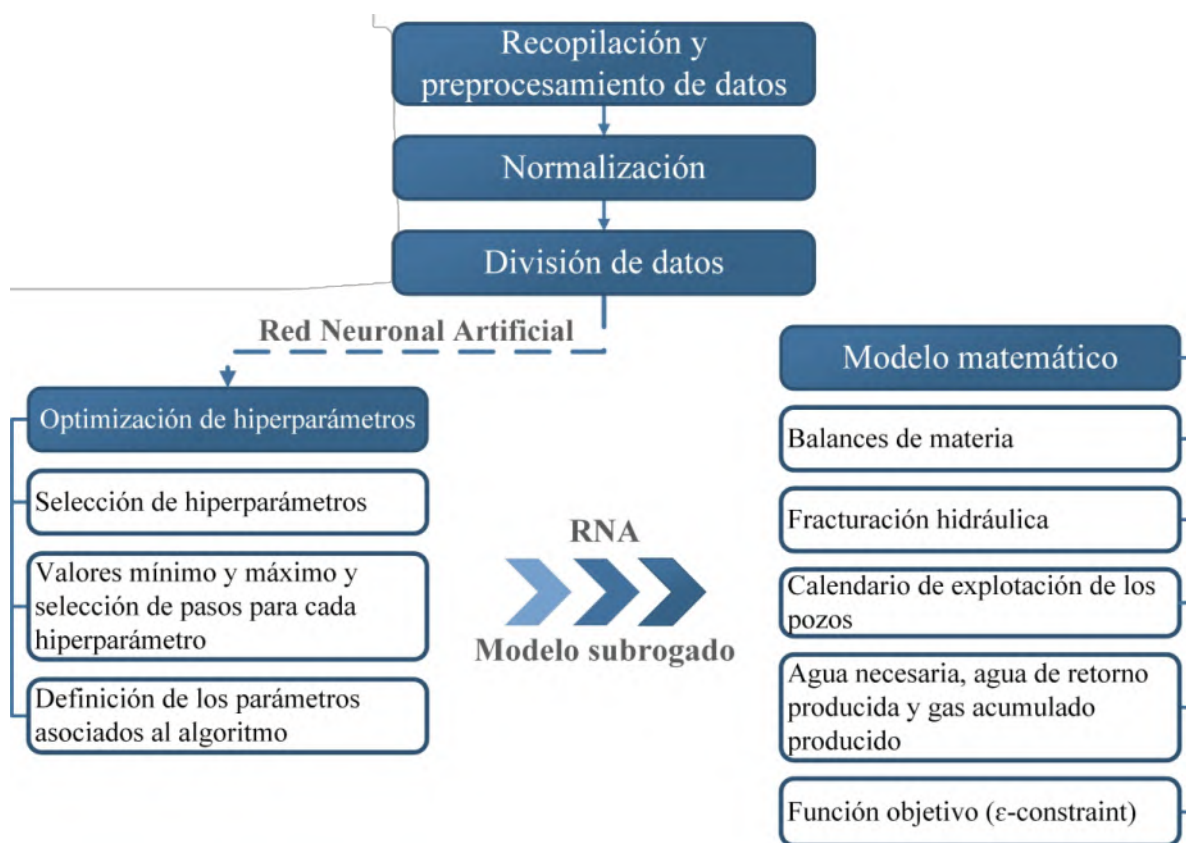


Figura 5.2. Descripción general de la metodología propuesta.

5.2.1. Optimización de Hiperparámetros

Se ha utilizado el algoritmo novedoso Hyperband (Li et al., 2018) para la optimización de hiperparámetros. Este algoritmo es adaptativo en el cálculo asignando más recursos a configuraciones de hiperparámetros prometedoras y eliminando rápidamente las malas. Al asignar recursos de forma adaptativa, este algoritmo examina más órdenes de magnitud de configuraciones de hiperparámetros que los enfoques que entrenan uniformemente todas las configuraciones hasta el final (como los métodos de optimización

bayesianos), identificando así rápidamente los buenos hiperparámetros. En concreto, Hyperband es un enfoque novedoso para la evaluación de configuraciones al formular la optimización de hiperparámetros como un problema de asignación de recursos adaptativo de escaneo puro que aborda cómo asignar recursos entre configuraciones de hiperparámetros muestreadas aleatoriamente. Además, Hyperband es de 5 a 30 veces más rápido que los algoritmos populares de optimización bayesiana en una variedad de problemas de aprendizaje profundo (Li et al., 2018).

5.2.2. Modelo global

Al definir un número concreto de pozos a perforar y fijar un calendario para su terminación, es posible anticipar con precisión los momentos en los que cada pozo demandará agua para la fractura hidráulica. Así, dentro de un horizonte de planificación determinado, puede programarse la fase de fracturación de cada pozo y, con ello, su correspondiente necesidad hídrica.

A diferencia de estudios anteriores, donde el volumen de agua requerido y el flujo de retorno se consideraban parámetros fijos, este trabajo trata ambos aspectos como variables integradas en la formulación matemática del modelo de RNA desarrollado. El agua utilizada proviene mayoritariamente de fuentes frescas y de corrientes reutilizadas extraídas de los pozos. Todo el flujo de retorno recolectado se somete a tratamiento en la red interconectada para evitar la contaminación de los acuíferos. Una vez tratado, el fluido puede almacenarse para su posterior reutilización o eliminarse, habiendo sido depurado, en cualquier caso. Por ello, la formulación propuesta incorpora las ecuaciones que representan cada interacción mostrada en la superestructura (**Figura 5.3**) y contempla tanto las limitaciones de disponibilidad de agua dulce como los costos asociados a la gestión hídrica dentro de la industria del gas shale.

Para entender el modelo, primero se definen los conjuntos utilizados en la formulación matemática. Los conjuntos que representan el número de pozos, las tecnologías de tratamiento, las unidades de almacenamiento, el número de vertidos de residuos y los periodos totales son N , I , S , D y T , respectivamente. Mientras que el índice n se utiliza para N ; el índice i para I ; el índice s para S ; el índice t para T . Las siguientes ecuaciones describen la representación matemática de la **Figura 5.3**, que se subdivide en los siguientes apartados:

ilustración matemática del modelo RNA para cada pozo, balances de materiales, restricciones de capacidad y diseño, necesidades totales de agua fresca, costos de capital y explotación, ingresos por venta de gas y, por último, la función objetivo.

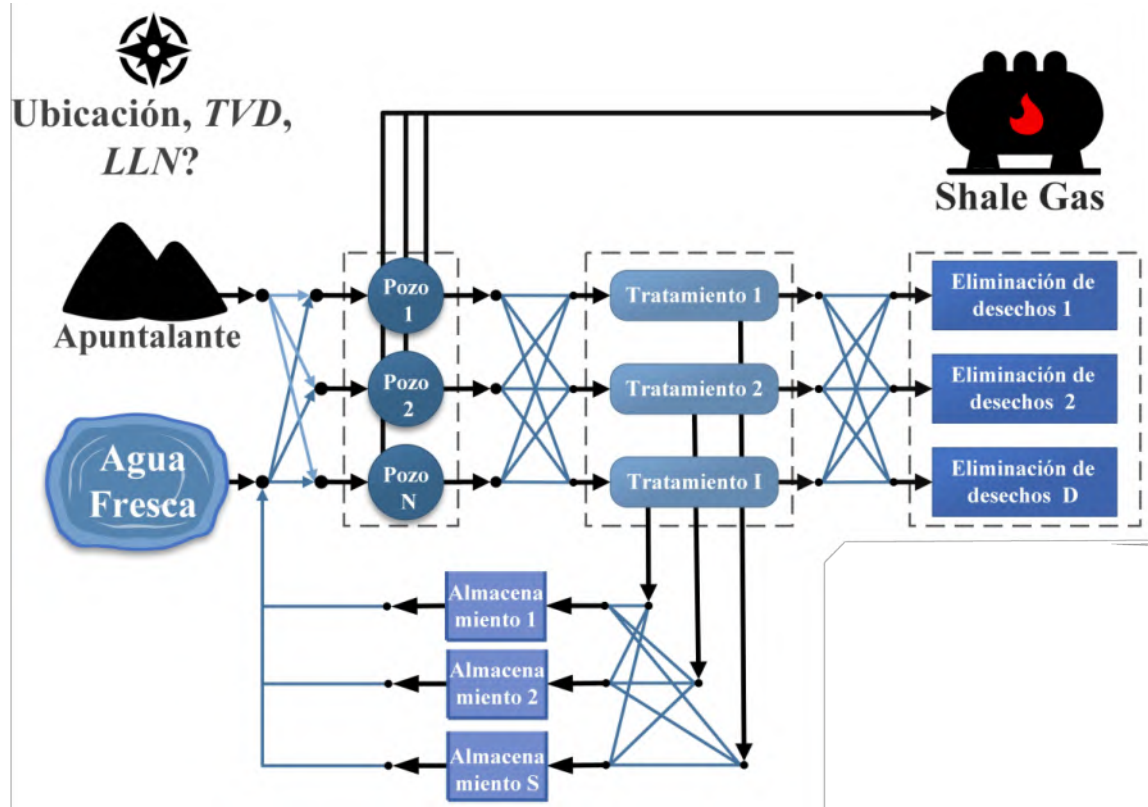


Figura 5.3. Superestructura propuesta para optimizar el proceso de fracturación hidráulica.

5.2.2.1. Ilustración matemática del modelo RNA

Con fines ilustrativos, la ecuación 1 representa matemáticamente el modelo RNA; donde, a través de las diferentes variables de entrada con las que se entrenó el modelo RNA, es posible predecir el flujo de retorno (FBK_n) y el gas total acumulado (CGA_n) en cada pozo.

$$\begin{bmatrix} FBK_n \\ CGA_n \end{bmatrix} = RNA^{MLP} [LAD_n, LND_n, TVD_n, LLE_n, TPP_n, TFW_n] \quad (5.1)$$

donde LAD_n es la latitud del pozo n , LND_n es la longitud del pozo n , TVD_n es la profundidad vertical verdadera del pozo n , LLE_n es la longitud lateral del pozo n , TPP_n es el total de apuntalante suministrado al pozo n , y TFW_n es el total de agua de fractura para el pozo n .

Además, deben definirse las siguientes ecuaciones para el agua alimentada al pozo n y el flujo de retorno obtenida de cada pozo n .

$$TFW_n = \sum_t F_{n,t}^{well_in}, \quad \forall n \quad (5.2)$$

$$FBK_n = \sum_t F_{n,t}^{well_out}, \quad \forall n \quad (5.3)$$

5.2.2.2. Balances de masa

El agua fresca se segrega y se envía a cada pozo n durante el proceso de terminación:

$$F_t^{fresh} = \sum_n ff_{n,t}^{fresh}, \quad \forall t \quad (5.4)$$

Las necesidades de agua durante la fase de fracturación hidráulica en cada pozo n ($F_{n,t}^{well_in}$) proceden de las fuentes de agua fresca ($ff_{n,t}^{fresh}$) más el agua procedente del sistema de almacenamiento ($ff_{s,n,t}^{storage}$):

$$F_{n,t}^{well_in} = ff_{n,t}^{fresh} + \sum_s ff_{s,n,t}^{storage}, \quad \forall n, \forall t \quad (5.5)$$

Una vez finalizada la fase de terminación, se produce agua de retorno en cada pozo ($F_{n,t}^{well_out}$), que se segrega y se envía a un conjunto de unidades de tratamiento ($ff_{n,i,t}^{well}$):

$$F_{n,t}^{well_out} = \sum_i ff_{n,i,t}^{well}, \quad \forall n, \forall t \quad (5.6)$$

El mayor obstáculo para la industria del gas shale es garantizar el caudal de agua indispensable para culminar la terminación de cada pozo, en especial en regiones que sufren una acusada escasez hídrica. Por ello, resulta fundamental estimar con precisión el volumen de agua disponible, que en muchos casos debe contar con aprobación y regulación gubernamental, destinado a la fase de fracturación hidráulica de cada pozo; esta contabilización representa una contribución clave:

$$F_t^{fresh} \leq \left(\frac{Avail V_t^{fresh_max}}{H^{time}} \right), \quad \forall t \quad (5.7)$$

donde F_t^{fresh} representa el consumo de agua fresca durante el periodo t (m^3/d), $AvailV_t^{fresh_max}$ es la disponibilidad de agua durante el periodo t ($m^3/semana$) y H^{time} es un factor de conversión temporal ($d/semana$).

Cabe señalar que todo el flujo de retorno se trata, evitando el almacenamiento o el vertido de flujo de retorno sin tratar.

El modelo contempla una red interconectada integrada por varias unidades de tratamiento, comúnmente usadas para depurar el fluido de fractura hidráulica. El modelo selecciona las tecnologías idóneas, determina cuántas unidades de cada tipo son necesarias y establece la capacidad óptima para cada una.

Entonces, una vez segregado el flujo de retorno, el balance para el mezclador a la entrada de cada unidad de tratamiento establece que el caudal de entrada para la unidad i durante el periodo t ($F_{i,t}^{treat_in}$) viene dado por la suma del flujo de retorno separada a la salida de los pozos al mismo tiempo y enviada a la unidad ($ff_{n,i,t}^{well}$):

$$F_{i,t}^{treat_in} = \sum_n ff_{n,i,t}^{well}, \quad \forall i, \forall t \quad (5.8)$$

Se cuenta con tecnologías previamente validadas que pueden cubrir estos requerimientos; en otras palabras, el flujo de retorno puede procesarse por completo hasta alcanzar una calidad adecuada que permita su reutilización o su disposición final sin contratiempos.

Además, según la superestructura, a la salida de cada unidad de tratamiento hay un separador, donde la corriente de salida ($F_{i,t}^{treat_out}$) puede enviarse a las unidades de almacenamiento ($ff_{i,s,t}^{treat_sto}$) o a la eliminación final ($ff_{i,d,t}^{treat_dis}$):

$$F_{i,t}^{treat_out} = \sum_s ff_{i,s,t}^{treat_sto} + \sum_d ff_{i,d,t}^{treat_dis}, \quad \forall i, \forall t \quad (5.9)$$

Los flujos de aguas residuales generados por el proyecto ($F_{d,t}^{waste}$) proceden de la red interconectada, donde la calidad del agua cumple la normativa medioambiental en materia de contaminantes:

$$F_{d,t}^{waste} = \sum_i ff_{i,d,t}^{treat-dis}, \quad \forall d, \forall t \quad (5.10)$$

Del mismo modo, el sistema de almacenamiento ($F_{s,t}^{storage-in}$) se alimenta de los flujos de residuos tratados en la red de interconectada que cumplen los requisitos de calidad para su reutilización:

$$F_{s,t}^{storage-in} = \sum_i ff_{i,s,t}^{treat-sto}, \quad \forall s, \forall t \quad (5.11)$$

Una vez que el agua tratada se almacena en embalses o depósitos, el caudal que sale de la unidad de almacenamiento s se reutiliza en el pozo n durante el periodo t ($ff_{s,n,t}^{storage}$):

$$F_{s,t}^{storage-out} = \sum_n ff_{s,n,t}^{storage}, \quad \forall s, \forall t \quad (5.12)$$

La mayoría de las unidades de tratamiento implican pérdidas de agua durante su funcionamiento; este aspecto se modela del siguiente modo:

$$F_{i,t}^{treat-out} = \alpha_i^{treat} F_{i,t}^{treat-in}, \quad \forall i, \forall t \quad (5.13)$$

donde α_i^{treat} representa el factor de eficiencia en términos de caudal volumétrico para la unidad i .

En una plataforma de pozos, la etapa de terminación incorpora la fractura hidráulica, proceso que exige bombear grandes volúmenes de agua, empleada como fluido de fractura, durante un lapso aproximado de 1 a 3 meses. Tras esta operación, un porcentaje considerable del agua inyectada retorna a la superficie como flujo de retorno. Dicho caudal, previa depuración y almacenamiento, puede reutilizarse para disminuir la necesidad de agua dulce en fracturas posteriores. Al coordinar el calendario de terminación de múltiples pozos, cada uno atendido por diferentes cuadrillas, el almacenamiento cobra relevancia; ya que garantiza la disponibilidad de agua tratada en los periodos activos de fracturación y actúa como reserva estratégica cuando escasea el recurso hídrico.

En este contexto, el balance de acumulación de los pozos de almacenamiento establece que el volumen del depósito s en el periodo t ($V_{s,t}^{storage}$) es igual al del final del

periodo anterior ($V_{s,t-1}^{storage}$), más la diferencia de los caudales de entrada y salida multiplicada por el factor de conversión temporal:

$$V_{s,t}^{storage} = V_s^{storage_initial} + H^{time} (F_{s,t}^{storage_in} - F_{s,t}^{storage_out}), \quad \forall s, \forall t = 1 \quad (5.14)$$

$$V_{s,t}^{storage} = V_{s,t-1}^{storage} + H^{time} (F_{s,t}^{storage_in} - F_{s,t}^{storage_out}), \quad \forall s, \forall t > 1 \quad (5.15)$$

Debe tenerse en cuenta que para el primer periodo se considera un volumen inicial de foso conocido ($V_s^{storage_initial}$). Adicionalmente, se requiere garantizar la continuidad de los ciclos, por esta razón, el volumen inicial es igual al último volumen en el depósito s:

$$V_s^{storage_initial} = V_{s,t}^{storage}, \quad \forall t = t^{final} \quad (5.16)$$

5.2.2.3. Capacidad y limitaciones de diseño

Algunos de los objetivos clave que persigue el modelo de optimización son determinar el número de unidades de tratamiento, las tecnologías de tratamiento y los vertederos finales necesarios en la solución óptima, así como el tamaño de cada uno de ellos. En primer lugar, para las unidades de tratamiento, el siguiente par de relaciones selecciona si la unidad i es necesaria o no (la existencia de las unidades de tratamiento se modela mediante la variable binaria y_i^{treat}); además, la capacidad operativa de cada tratamiento ($F_i^{treat_cap}$) se representa mediante:

$$F_i^{treat_cap} \geq F_{i,t}^{treat_in}, \quad \forall i, \forall t \quad (5.17)$$

$$F_i^{treat_cap} \leq F_i^{treat_max} y_i^{treat}, \quad \forall i \quad (5.18)$$

donde $F_i^{treat_max}$ representa un límite superior para la capacidad operativa asociada a la unidad i (esta información puede ser facilitada por los vendedores de tecnologías de tratamiento). Debe tenerse en cuenta que la capacidad óptima ($F_i^{treat_cap}$) debe utilizarse en la función de costos relacionada con los costos de tratamiento.

Del mismo modo, para las unidades de almacenamiento U deposito, se necesitan las siguientes relaciones:

$$V_s^{storage_cap} \geq V_{s,t}^{storage}, \quad \forall s, \forall t \quad (5.19)$$

$$V_s^{storage_cap} \leq V_s^{storage_max} y_s^{storage}, \quad \forall s \quad (5.20)$$

donde $V_s^{storage_cap}$ denota la capacidad óptima de la unidad de almacenamiento; mientras que $V_s^{storage_max}$ representa la capacidad máxima del depósito s y $y_s^{storage}$ es una variable binaria utilizada para modelar la existencia de las unidades de almacenamiento/depósito.

Por último, los vertederos finales acumulan todo el caudal vertido en ellos durante el horizonte temporal dado. De esta forma, la capacidad operativa para el vertido d ($V_d^{waste_cap}$) se determina de la siguiente forma:

$$V_d^{waste_cap} = H^{time} \sum_t F_{d,t}^{waste}, \quad \forall d \quad (5.21)$$

$$V_d^{waste_cap} \leq V_d^{waste_max} y_d^{waste}, \quad \forall d \quad (5.22)$$

donde $V_d^{waste_max}$ es la capacidad máxima de cada vertedero y la existencia de cada vertedero se modela mediante la variable binaria (y_d^{waste}). De este modo, se puede determinar el número de tecnologías de tratamiento, almacenamientos/ depósitos y vertederos en la solución óptima, así como sus capacidades.

5.2.2.4. Agua fresca total utilizada

Aunque las limitaciones de agua pueden superarse, es importante cuantificar el agua total necesaria para completar todos los pozos propuestos. Por lo tanto, la siguiente relación determina las necesidades totales de agua fresca (TWR):

$$TWR = H^{time} \sum_t F_t^{fresh} \quad (5.23)$$

5.2.2.5. Costos de operación

Los costos de operación considerados corresponden al costo del agua fresca, los costos de operación de las unidades de tratamiento y los costos de transporte (incluidas todas las trayectorias), que se describen detalladamente a continuación.

El costo del agua fresca ($Cost^{fresh}$) se obtiene multiplicando la suma del agua necesaria durante todos los periodos por el costo unitario del agua fresca (UC^{fresh}) y el factor de conversión temporal:

$$Cost^{fresh} = H^{time} UC^{fresh} \sum_t F_t^{fresh} \quad (5.24)$$

Los costos de operación para el tratamiento y la eliminación ($Cost^{op_tratamiento-dis}$) se determinan del siguiente modo:

$$Cost^{op_treat-dis} = H^{time} \left[\sum_i \sum_t UOC_i^{treat} F_{i,t}^{treat_in} + \sum_d \sum_t UOC_d^{dis} F_{d,t}^{waste} + \right] \quad (5.25)$$

donde UOC_i^{treat} es el costo de operación unitario para la unidad de tratamiento i y UOC_d^{dis} representa el costo de operación unitario para la eliminación d .

El costo de transporte de agua fresca ($Cost^{trans_fresh}$) puede calcularse multiplicando el caudal de agua fresca enviado al pozo n en el periodo t por el costo unitario de transporte (UTC_n^{fresh}):

$$Cost^{trans_fresh} = H^{time} \sum_n \sum_t UTC_n^{fresh} ff_{n,t}^{fresh} \quad (5.26)$$

Hay que tener en cuenta que los costos unitarios son diferentes para cada pozo para considerar la distancia geográfica entre la fuente de agua fresca y cada pozo. Es importante mencionar que para algunos yacimientos de esquisto existentes el recurso de agua fresca está disponible a distancias significativas de los pozos; por lo tanto, en casos como la región de esquisto Marcellus, el transporte de agua fresca es varias veces superior al costo del agua fresca (Yang et al., 2014).

El flujo de retorno producida en los pozos se transporta a la red interconectada y el costo asociado a esta operación se considera a través de la siguiente relación:

$$Cost^{trans_fb} = H^{time} \sum_n \sum_i \sum_t UTC_{n,i}^{used} ff_{n,i,t}^{well} \quad (5.27)$$

donde $UTC_{n,i}^{used}$ es el costo unitario de transporte para el flujo de retorno en la trayectoria generada por el pozo n y el tratamiento i . Aquí, también el costo unitario puede cambiar para cada trayectoria.

El caudal que sale del tratamiento puede enviarse a los vertederos y los costos de transporte generados son los siguientes:

$$Cost^{trans_treat_dis} = H^{time} \sum_i \sum_d \sum_t UTC_{i,d}^{treat_dis} ff_{i,d,t}^{treat_dis} \quad (5.28)$$

donde $UTC_{i,d}^{treat_dis}$ es el costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento i hasta el vertedero d .

Además, el agua tratada puede enviarse al sistema de almacenamiento con los siguientes costos:

$$Cost^{trans_treat_sto} = H^{time} \sum_i \sum_s \sum_t UTC_{i,s}^{treat_sto} ff_{i,s,t}^{treat_sto} \quad (5.29)$$

donde $UTC_{i,s}^{treat_sto}$ representa el costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento i hasta el almacenamiento s .

El agua almacenada en depósitos se transporta a los pozos para su reutilización y el costo asociado se contabiliza en la siguiente relación:

$$Cost^{trans_sto_well} = H^{time} \sum_s \sum_n \sum_t UTC_{s,n}^{sto_well} ff_{s,n,t}^{storage} \quad (5.30)$$

donde $UTC_{s,n}^{sto_well}$ es el costo unitario de transporte del agua reutilizada desde el depósito s hasta el pozo n .

Por último, la suma de todos los costos de operación descritos anteriormente da como resultado el costo total de operación (TOC) del proyecto:

$$TOC = Cost^{fresh} + Cost^{op_treat} + Cost^{trans_fresh} + Cost^{trans_fb} + Cost^{trans_treat_dis} + Cost^{trans_treat_sto} + Cost^{trans_sto_well} \quad (5.31)$$

5.2.2.6. Costos de capital

La adquisición de las unidades de tratamiento, las unidades de almacenamiento, así como la creación de vertederos finales genera costos de capital, que se incluyen en la función objetivo económica.

El costo de capital de las unidades de tratamiento consta de dos partes, una que es fija (FC^{treat}) y depende únicamente de la existencia de la unidad (se multiplica por la variable binaria y_i^{treat}), y otra que depende de la capacidad de la unidad que se determina

multiplicando el costo unitario (VC^{treat}) por la capacidad de la unidad ($F_i^{treat-cap}$) elevada al exponente que da cuenta de las economías de escala (β^{treat}) de la siguiente manera:

$$CapCost^{treatment} = k_F \sum_i \left[FC^{treat} y_i^{treat} + VC^{treat} (F_i^{treat-cap})^{\beta^{treat}} \right] \quad (5.32)$$

donde k_F es un factor utilizado para anualizar la inversión. Cabe señalar que, en la relación anterior, FC^{treat} , VC^{treat} y β^{treat} son parámetros determinados antes del proceso de optimización.

Lo mismo ocurre con las unidades de almacenamiento y los vertederos:

$$CapCost^{storage} = k_F \sum_s \left[FC^{storage} y_s^{storage} + VC^{storage} (V_s^{cap})^{\beta^{storage}} \right] \quad (5.33)$$

$$CapCost^{waste} = k_F \sum_d \left[FC^{waste} y_d^{waste} + VC^{waste} (V_d^{waste-cap})^{\beta^{waste}} \right] \quad (5.34)$$

Cabe destacar que, en las relaciones anteriores, k_F , FC , VC y β son parámetros dados para el proceso de optimización y las variables incluidas son las siguientes: la variable binaria para modelar la existencia de la unidad (y) y la capacidad total para la unidad (F^{cap} ó V^{cap}). Asimismo, β representa el único término no lineal incluido en todo el modelo matemático propuesto. Cabe señalar que estas funciones de costos de capital, que incluyen los costos fijos y variables y tienen en cuenta las economías de escala, se utilizan habitualmente en los procesos industriales. Para determinar los coeficientes de las funciones de costos de capital, se correlacionan los costos declarados con las relaciones anteriores. Los costos de capital se anualizan, de este modo, las unidades necesarias pueden utilizarse en los próximos años para explotar más pozos de gas shale.

Además, el costo total de capital (TCC) se compone de los costos de capital de las unidades de tratamiento, las unidades de almacenamiento y los vertidos finales:

$$TCC = CapCost^{treat} + CapCost^{waste} + CapCost^{storage} \quad (5.35)$$

Cabe mencionar que el costo fijo incluido en la función de costo de capital está relacionado con los costos generados que no dependen del caudal, como la preparación del emplazamiento para instalar el tratamiento, almacenamiento, eliminación, etc.

5.2.2.7. Costo de perforación y terminación

Los costos de perforación y terminación de cada pozo se determinan del siguiente modo:

$$DCC = k_F \left[\sum_n \left(UCos_{n}^{drilling} TVD_n + UCos_{n}^{comp} LLN_n \right) \right] \quad (5.36)$$

donde $UCos_{n}^{drilling}$ es el costo de perforación por profundidad total del pozo n , mientras que $UCos_{n}^{comp}$ es el costo de terminación por longitud lateral del pozo n .

5.2.2.8. Restricciones de ubicación

Para garantizar que la ubicación de cada pozo no sea la misma, se proponen las siguientes restricciones de ubicación:

$$\left(LAD_n - LAD_m \right)^2 \geq \Omega^{LAN} \quad (5.37)$$

$$\left(LOD_n - LOD_m \right)^2 \geq \Omega^{LON} \quad (5.38)$$

donde m es igual al número de pozos, sin embargo, no se considera la combinación cuando m y n son iguales. Ω^{LAN} y Ω^{LON} son factores de localización con valores muy pequeños. Cabe señalar que al menos una de estas restricciones debe estar activada.

5.2.2.9. Función objetivo

La función objetivo consiste en maximizar la ganancia total anual (TAP) y minimizar TWR , que se define del siguiente modo:

$$OF = \{ \max TAP, \min TWR \}$$

Las TAP es igual a los ingresos generados por la venta del gas (*Revenue*) menos DCC , TOC y TCC :

$$TAP = Revenue - DCC - TOC - TCC \quad (5.39)$$

Los ingresos por venta de gas son los siguientes:

$$Revenue = \sum_n Ng^{price} CGA_n \quad (5.40)$$

donde Ng^{price} es igual al precio unitario actual del gas natural.

Este modelo propuesto es un problema de MINLP. Además, dado que los objetivos propuestos pueden tener comportamientos inversos, se aplica el método ε -constraint para encontrar soluciones compromiso entre los objetivos (*TAP* y *TWR*) propuestos.

5.3. Resultados y Discusión

La realización de este proyecto se llevó a cabo bajo el lenguaje de programación Python. Mientras que, el modelo MINLP propuesto se codificó implementando la librería Pyomo (Hart et al., 2011), utilizando un ordenador con un AMD Ryzen 7 a 2.3 GHz con 16 GB de RAM.

5.3.1. Modelo RNA

El conjunto de datos se dividió aleatoriamente en un 85 % para el conjunto de entrenamiento y un 15 % para el conjunto de validación. El modelo RNA se entrenó utilizando la función de activación ReLU. Adam y la métrica MSE como función de pérdida. La **Tabla 5.1** muestra los hiperparámetros optimizados, los valores mínimo y máximo, y el conjunto de pasos para cada hiperparámetro; esto se definió utilizando el método de prueba y error. Nótese que la tasa de aprendizaje no implica un paso porque no sigue ningún criterio, sino que simplemente genera valores aleatorios entre los valores mínimo y máximo en escalas logarítmicas. El número de veces a iterar sobre el algoritmo Hyperband y el número máximo de épocas para realizar el entrenamiento de un modelo se han fijado en 75 y 100, respectivamente. Además, se seleccionó la función de pérdida de validación (MSE) como objetivo a minimizar para reducir los problemas asociados al sobreajuste del modelo. Por último, durante el proceso de optimización de los hiperparámetros se realizaron un total de 19,049 experimentos en un tiempo de computación de 16.4 horas.

Tabla 5.1. Espacio de búsqueda de hiperparámetros para el algoritmo de Hyperband.

Hiperparámetros	Escala	Min	Max	Pasos
Capas ocultas	Entero	1	6	1
Neuronas por capa	Entero	10	200	10
Velocidad de aprendizaje	Log	1e-4	1e-2	-

A continuación, se presenta la arquitectura del mejor modelo obtenido con la optimización de hiperparámetros:

- Seis entradas, dos salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 30, 100 y 50, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0.0073.

Cabe señalar que el mejor modelo encontrado es un modelo pequeño con pocos parámetros asociados a la RNA. Por lo tanto, la incorporación de este modelo RNA al modelo matemático mejorará el tiempo de cálculo durante la optimización del proceso.

En la **Tabla 5.2** se presentan los valores obtenidos para las distintas métricas de error utilizadas en la evaluación del modelo RNA; éstos se presentan para el conjunto de entrenamiento y validación de ambas variables de salida. En general, se obtienen resultados más precisos para el flujo de retorno, ya que se obtienen valores más bajos para el MSE y el MSA, y valores más altos para el R^2 . Sin embargo, un aspecto importante a descartar es que los valores de las métricas son muy similares tanto para el conjunto de entrenamiento como para el conjunto de validación, esto indica que el modelo ha sido desarrollado correctamente ya que ha aprendido el comportamiento de los datos que al ser evaluados con los datos de validación se obtuvieron valores similares en las métricas. Por lo tanto, se ha evitado el sobreajuste del modelo. La **Figura 5.4** muestra gráficamente los resultados obtenidos de la predicción del modelo RNA frente a los valores reales para el conjunto de entrenamiento y validación. Obsérvese que cuanto más cerca están los puntos de la pendiente de 45° , más preciso es el modelo RNA. Además, pocas predicciones se desvían de la pendiente para ambas variables de salida, lo que confirma la precisión del modelo RNA desarrollado.

Tabla 5.2. Errores obtenidos para los datos de entrenamiento y validación.

Métrica/Conjunto	Flujo de retorno		Gas total acumulado	
	Entrenamiento	Validación	Entrenamiento	Validación
MSE	0.04524	0.05463	0.06654	0.06444
MAE	0.13764	0.16458	0.14856	0.15447
MAPE	31.4381	34.0849	9.68911	9.14203
R^2	0.95455	0.94548	0.93455	0.92664

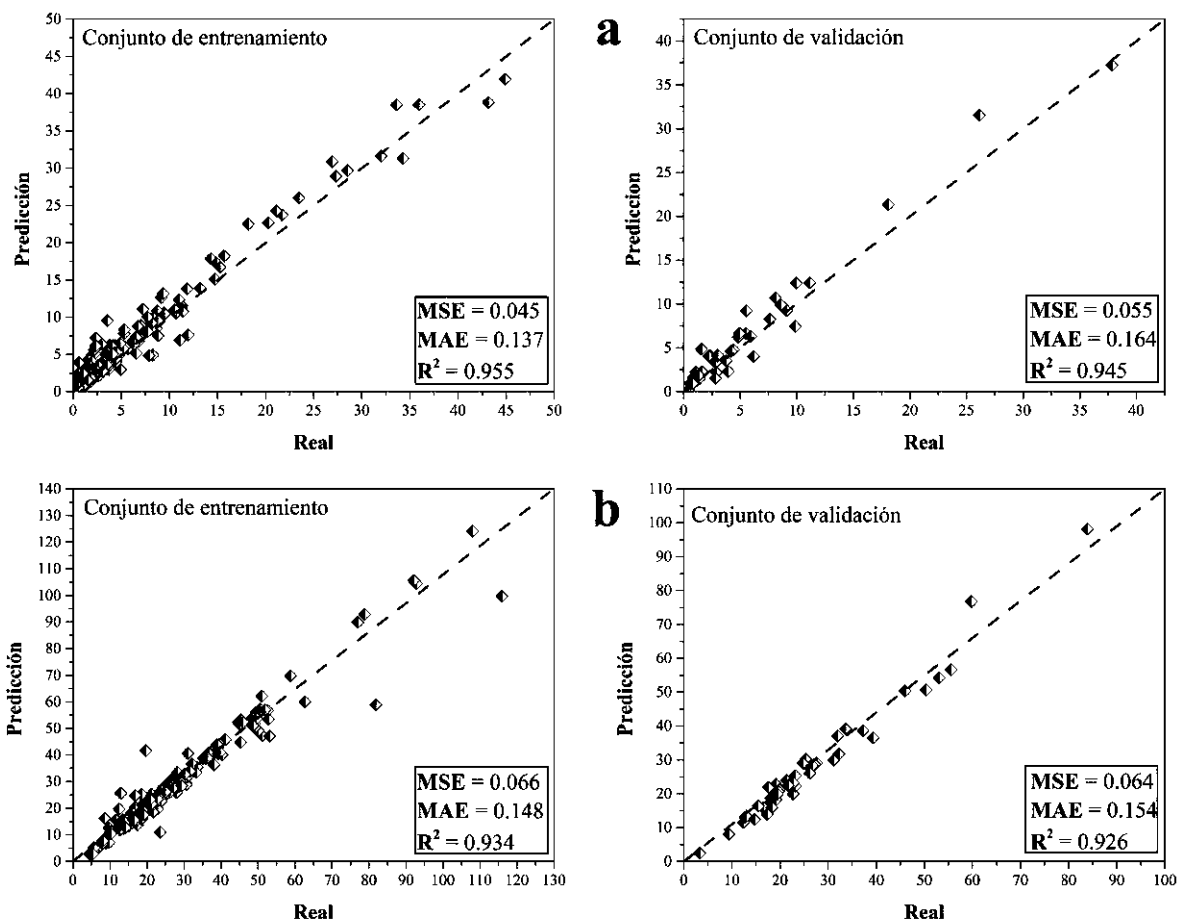


Figura 5.4. Comparación de los valores reales frente a los valores pronosticados por el modelo; flujo de retorno (a) y el gas acumulado total producido (b).

5.3.2. Caso práctico

Para evaluar y analizar los beneficios del modelo matemático propuesto que incorpora el modelo RNA, se seleccionó un área de estudio en la cuenca de Burgos, en la parte noroeste del estado de Coahuila en México; esta área de estudio se encuentra en la frontera con Estados Unidos, junto a la zona geográfica donde se recopilaron los datos para el desarrollo del modelo RNA.

Es importante señalar que los límites inferior y superior de latitud y longitud se establecen para abarcar la zona de estudio propuesta. La gestión del agua se optimiza en periodos de una semana a lo largo de un horizonte temporal de 52 semanas (un año), y cada

pozo tarda 5 semanas en completarse. Esto significa que el agua suministrada durante las 5 semanas para la terminación de cada pozo es igual al TFW_n . Además, se supone que el flujo de retorno se obtiene durante las tres primeras semanas a razón del 60%, 25% y 15% para la primera, segunda y tercera semanas, respectivamente. La suma del flujo de retorno obtenida durante las tres semanas es igual a FBK_n .

Se han contemplado tres equipos de fracturación hidráulica para completar un total de 20 pozos basándose en la programación mostrada en la **Figura 5.5**. Se han considerado tres equipos de fracturación hidráulica para completar un total de 20 pozos. La brigada de fracturación hidráulica 1 completa los pozos 1 - 8, la brigada de fracturación hidráulica 2 trabaja los pozos 9 - 15, y finalmente, la brigada 3 opera los pozos 16 - 20. Además, al principio trabajan dos cuadrillas de fracturación hidráulica; al cabo de unas semanas, pueden operar tres cuadrillas. Sin embargo, aproximadamente a mediados de año no se permite operar a ninguna cuadrilla debido a la escasez de agua, y gradualmente, cuando la disponibilidad de agua permite a las cuadrillas de fracturación hidráulica reiniciar las operaciones. Es importante señalar que el rendimiento de la programación depende en gran medida de las limitaciones históricas del agua fresca disponible. También hay que tener en cuenta que el tiempo de transición necesario para trasladar la cuadrilla de fracturación hidráulica de un pozo al siguiente es de una semana.

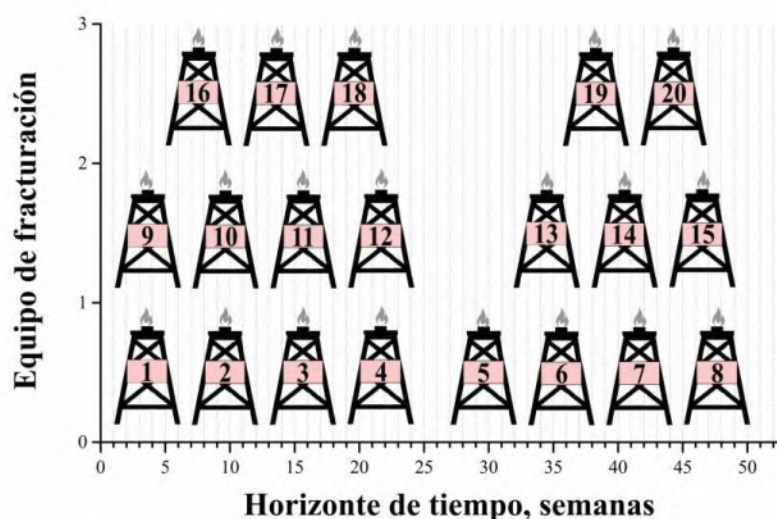


Figura 5.5. Programación de la fase de terminación de los pozos.

Por otro lado, el factor de conversión temporal (H^{time}) es 7 días/semana, $k_f=0,1$, el factor de eficiencia volumétrica (α_i^{treat}) para las unidades de tratamiento es 0.9, y no hay volumen inicial en las unidades de almacenamiento ($V_s^{storage_inicial}$). Es importante mencionar que las unidades de tratamiento, las unidades de almacenamiento y los vertederos finales considerados se utilizan normalmente en los yacimientos de shale gas existentes. Además, el costo de perforación por profundidad total del pozo n ($UCost_n^{drilling}$) y el costo de terminación por longitud lateral del pozo n ($UCost_n^{comp}$) son iguales a 410 \$/m y 1969 \$/m (EIA, 2016). El precio unitario actual del gas natural (Ng^{price}) es igual a 0.3089 \$/m³ (EIA, 2022) y un valor igual a 2 \$/m³ para el costo unitario del agua fresca.

5.3.3. Resultados de la optimización

El modelo subrogado generado del modelo RNA entrenado se reformula como un problema NLP con 570 variables y 744 restricciones, este modelo subrogado es equivalente a la ilustración matemática de la RNA mostrada en la sección 5.2.2.1. En total, el modelo global MINLP propuesto consta de 23,941 variables continuas, 10 variables binarias y 21,998 restricciones. Para resolver este problema se implementó el solucionador DICOPT junto con los solucionadores CONOPT y CPLEX. El tiempo medio para la solución de cada punto de la curva de Pareto fue de 660 s.

El comportamiento entre los objetivos de este proyecto se muestra en la curva de Pareto (**Figura 5.6**). En general, se puede observar que a medida que aumenta el TWR aumenta el TAP , sin embargo, a medida que aumenta el TWR , el aumento del TAP es muy pequeño por lo que en las últimas soluciones se obtienen valores similares en términos de TAP . Además, las soluciones importantes se identifican con los puntos A, B y C. Dada la actual preocupación por el agua fresca, el punto A representa la mejor solución medioambiental ya que desde este aspecto la minimización de TWR es más relevante que el beneficio económico; esta solución proporciona valores de 100,502 m³ y 194,770,250 \$/año de TWR y TAP , respectivamente. Mientras que la solución con mayor beneficio económico es el punto B con un TAP igual a 328,575,018 \$/año y una TWR igual a 588,725 m³, lo que equivale a un incremento del 68.70% y 485.78% para el TAP y TWR con respecto al punto A; nótese que el incremento en el consumo de TWR es muy significativo mientras que en

términos de *TAP* no hay mucho cambio con respecto a la solución A, esto debido a que la producción de gas se ve afectada por otras variables y llega un punto en el que lo utilizado de agua deja de afectar la producción de gas. Por otra parte, se identificaron el punto utópico (UP) y el punto nadir (NP) en la curva de Pareto. La solución del punto utópico se obtiene a través de la mejor solución para los objetivos, por ejemplo, con el valor máximo de la *TAP* y el valor mínimo de la *TWR*. Sin embargo, el punto utópico no es factible, ya que los objetivos son conflictivos, pero se utiliza como referencia ideal. La solución nadir se obtiene con los peores valores de los objetivos. El punto C representa la solución más cercana al UP, por lo que es la solución más equilibrada en términos medioambientales y económicos. El *TWR* en la solución C es igual a $263,243 \text{ m}^3$, lo que equivale a un aumento del 161.93% con respecto a la solución A y a una disminución del 55.30% con respecto a la solución B, mientras que el *TAP* obtenido es igual a $295,147,421 \text{ \$/año}$, lo que equivale a un aumento del 51.53% con respecto a la solución A y a una disminución de sólo el 10.17% con respecto a la solución B. Sobre la base de lo anterior, se puede concluir que la mejor solución es el punto C.

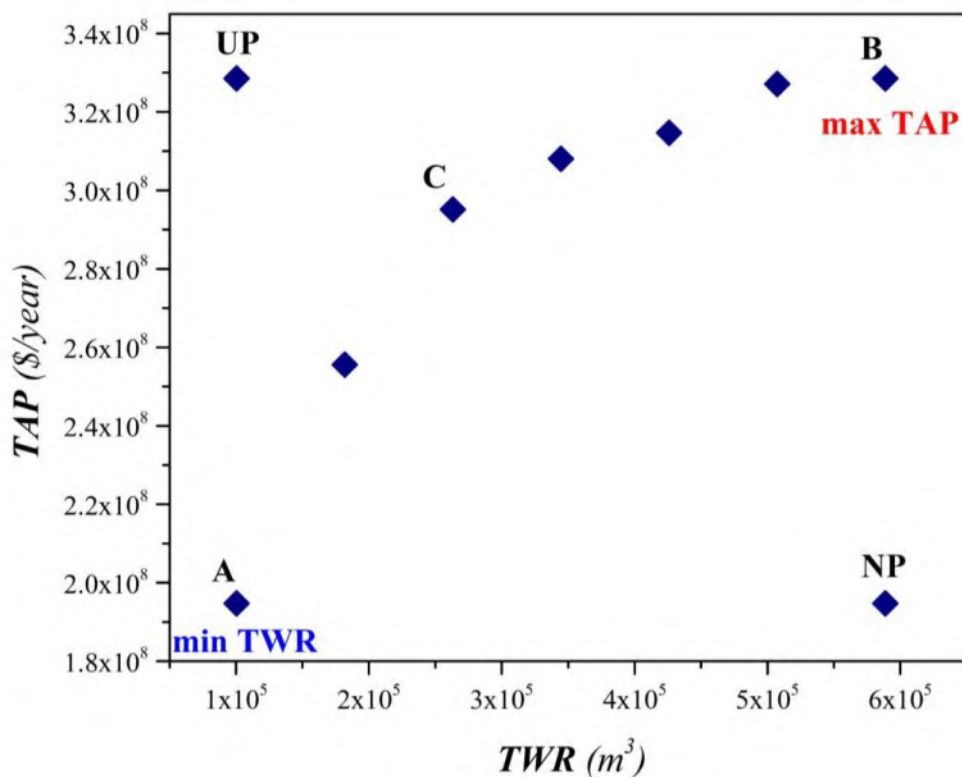


Figura 5.6. Curva Pareto para *TAP* y *TWR*.

En la **Tabla 5.3** se presentan resultados importantes para las soluciones A, B y C. Se puede observar que en cada solución la cantidad de agua total reutilizada es diferente, siendo la solución B donde se obtiene la mayor cantidad de agua total reutilizada con un valor de 128,845 m³, sin embargo, en términos porcentuales esa cantidad sólo corresponde al 18% de la utilizada, por lo que esta solución es la peor. Mientras que en la solución C el total de agua reutilizada corresponde al 27% y en la solución A al 29%, siendo esta la solución en la que se reutiliza el mayor porcentaje de agua. Adicionalmente, en la literatura se han reportado diferentes trabajos donde se considera el mismo caso práctico fijando la cantidad de agua total de fractura y han alcanzado porcentajes de agua total reutilizada de entre 20-22% (Lira-Barragán et al., 2016b; Hernández-Pérez et al., 2020). Además, para las tres soluciones se ha obtenido un costo medio de perforación y terminación por pozo de 7,917,047 \$/pozo, 8,700,973 \$/pozo y 8.630.239 \$/pozo para las soluciones A, B y C respectivamente; estos costos por pozo se encuentran entre los costos reportados en la Formación Eagle Ford (EIA, 2016).

Tabla 5.3. Resultados detallados del caso de estudio.

Concepto/solución	a	b	c
Número de unidades de tratamiento requeridas	1	3	3
Número de unidades de almacenamiento requeridas	1	2	2
Número de vertidos necesarios	1	1	1
Costo del agua fresca, \$/año	201,004	1,177,451	526,486
Costo de operación de las unidades de tratamiento, \$/año	617,115	1,943,358	1,402,909
Costos de transporte pozos fuente frescos, \$/año	554,413	3,212,184	1,589,321
Costo transporte pozos-tratamientos, \$/año	31718	99,421	75,862
Costo de transporte tratamientos-eliminación \$/año	24356	91,937	61,241
Costo transporte tratamientos-almacenamientos \$/año	58511	181,672	132,019
Costo de transporte pozos de almacenamiento, \$/año	64165	201,208	149,359
Costo total de operación (TOC), \$/año	1,551,286	6,907,232	3,937,198
Costo de capital de las unidades de tratamiento, \$/año	9522	28,570	28,570
Costo de capital de los vertidos, \$/año	6982	11,092	9,288
Costo de capital para almacenamiento/pozos, \$/año	1275	2,895	3,084
Costo total de capital (TCC), \$/año	17,781	42,558	40,941
Costo de perforación y acabado (DCC), \$/año	15,834,094	17,401,947	17,260,479

Ingresos por venta de gas, \$/año	212,173,413	352,926,755	316,386,041
Ganancia total anual (TAP), \$/año	194,770,250	328,575,018	295,147,421
Requerimiento total de agua fresca (TWR), m ³	100,502	588,725	263,243
Agua total reutilizada, m ³	41,498	128,845	93,631

La **Figura 5.7** muestra la cantidad de TWR y de agua reutilizada suministrada a cada pozo en la solución C. El pozo 4 es el que requiere la mayor cantidad de agua y toda el agua suministrada corresponde a agua fresca. Por otro lado, el pozo que menos agua consume es el pozo 8, donde el 20% del es agua reutilizada. Además, el de los pozos 19 y 20 se abastece completamente de agua reutilizada. También se puede concluir que el flujo de retorno obtenida en las primeras 25 semanas del programa de fracturación hidráulica (**Figura 5.5**) se reutilizó en los pozos 12, 16, 17 y 18. Mientras tanto, el flujo de retorno obtenida durante el resto de la semana se reutiliza en los pozos 8, 13, 15, 19 y 20.

En la **Figura 5.8** se presenta el total acumulado de gas producido y flujo de retorno por pozo. La producción de gas de casi todos los pozos se sitúa entre 45×10^6 m³ (pozo 14) y 68×10^6 m³ (pozo 16). Los pozos que producen menos gas son el pozo 4, con un valor igual a 15.72×10^6 m³, y el pozo 10, con 4.47×10^6 m³. Sin embargo, en el pozo 4 se obtiene una mayor cantidad de flujo de retorno, igual a 12.63×10^6 m³ que representa el 33% de la para este pozo (véase la **Figura 5.7**). Mientras que el pozo 8 es el pozo en el que se adquiere la menor cantidad de flujo de retorno con una cantidad igual a 1.08×10^3 m³ que corresponde al 15% del total de agua de fractura.

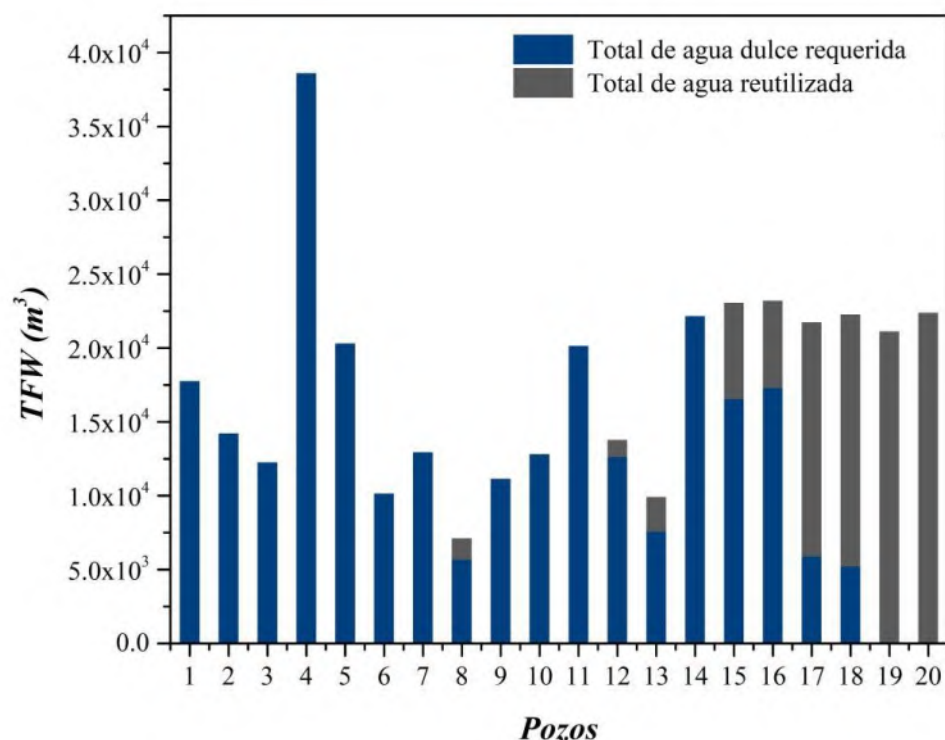


Figura 5.7. Agua fresca total requerida y agua reutilizada para cada pozo en la solución C.

Finalmente, la **Figura 5.9** muestra las ubicaciones óptimas para cada uno de los pozos dentro del área de estudio propuesta en la parte noroeste del estado de Coahuila, México. Se puede observar como todos los pozos están bien distribuidos en el área de estudio. Por lo tanto, se podría aumentar el número de pozos a perforar y considerar parámetros Ω menores para aumentar la producción de gas.

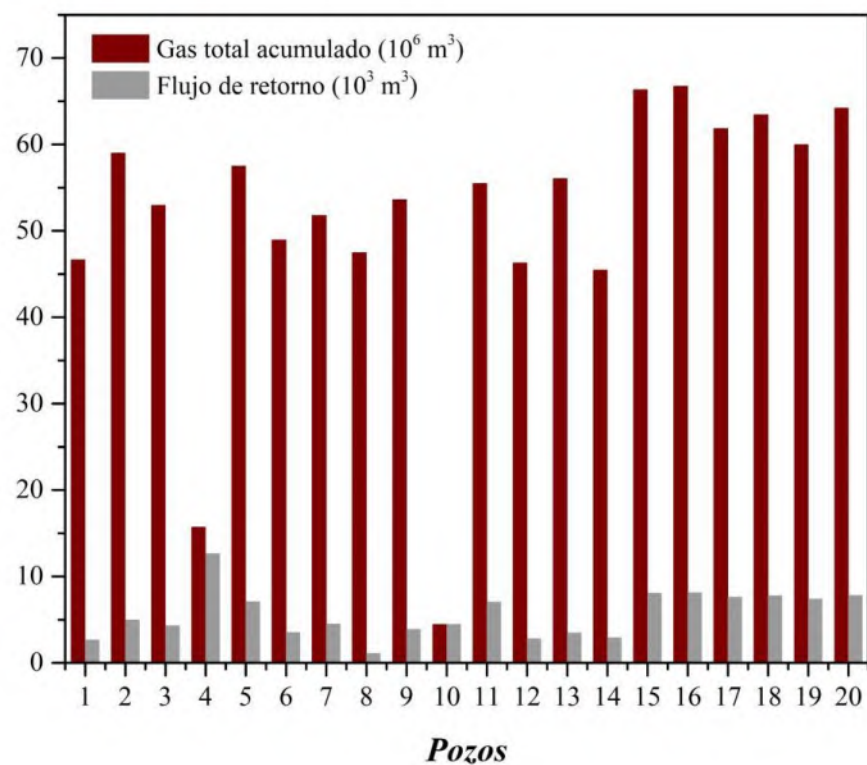


Figura 5.8. Producción acumulada de gas y flujo de retorno en cada pozo de la solución C.

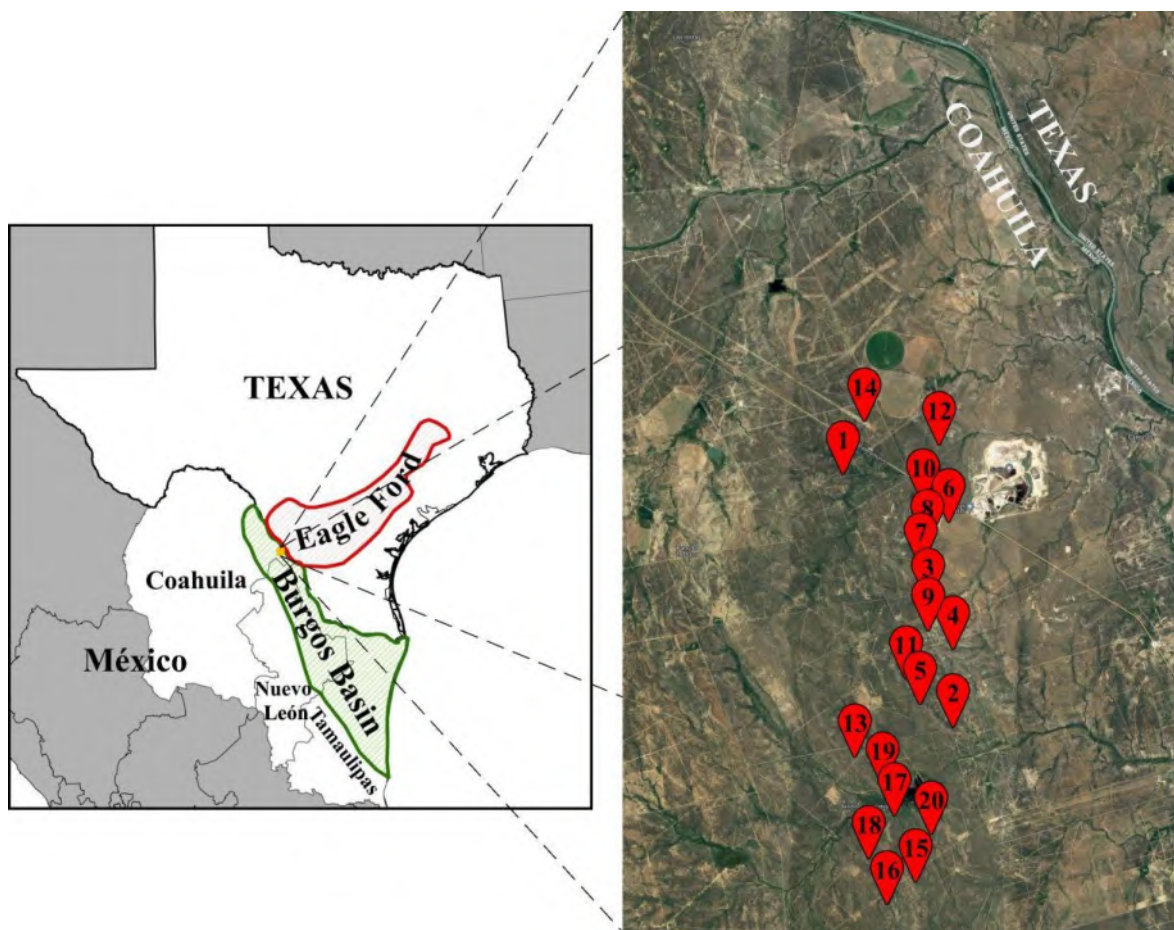


Figura 5.9. Ubicación óptima de cada pozo en el área de estudio.

Capítulo 6. PLANTEAMIENTO 4

Optimización de la Producción de Paneles Solares Fotovoltaicos en México

6.1. Generalidades

La urgencia climática y la creciente demanda energética han colocado a las fuentes renovables en el centro del desarrollo sostenible. Entre ellas, la energía solar fotovoltaica (FV) destaca por su disponibilidad mundial y por las bajas emisiones asociadas a los paneles de silicio (98.3–149.3 g CO₂ eq/kWh) frente a la generación fósil (400–1,000 g CO₂ eq/kWh) (Rahman et al., 2022a; Shin et al., 2017; Mehedi et al., 2022). Durante la última década, la capacidad instalada de FV creció de forma acelerada, superando incluso la nueva potencia proveniente de fuentes nucleares y fósiles: en 2022 se estimaron 627 GW de potencia fotovoltaica acumulada (Banik et al., 2021; Rahman et al., 2022b).

Dos factores explican esta expansión: i) la rápida caída de los costos de producción, impulsada por la industria china (Hopkins y Li, 2016; Imam et al., 2022; Muneer et al., 2022), que ha permitido precios récord como los 0.025 USD/kWh ofertados en Arabia Saudí; y ii) la consolidación de un mercado global, aunque con ritmos desiguales, Europa avanzó apenas un 25 % en la última década (Crijns-Graus et al., 2022) y América Latina, con México a la cabeza, empieza a despegar gracias a su elevada irradiación, el crecimiento de la demanda eléctrica y regulaciones favorables (Zhang et al., 2021; Ferreira et al., 2018). Pese a ese potencial, México adolece de una cadena de suministro local incipiente: sus diez fabricantes apenas suman 1.5 GW de capacidad anual (European Commission, 2019). A ello se suma el desafío ambiental del fin de vida útil de los paneles, cuya gestión y reciclaje reciben aún poca atención (Sica et al., 2018).

La literatura muestra escasos trabajos que integren RNA o aprendizaje automático con modelos de optimización para sistemas renovables: las revisiones recientes sobre predicción energética (Rahman et al., 2021) y mejora térmica mediante nanofluidos (Sharma et al., 2022) apuntan a este déficit y a la necesidad de IA ética y transparente.

Para cerrar esa brecha, se desarrolla una metodología que:

1. Entrena modelos RNA capaces de estimar consumos de materias primas, agua, energía y producción de silicio policristalino para plantas FV, optimizando capas ocultas, neuronas y tasa de aprendizaje.

2. Incorpora las RNA como modelos subrogados en un marco de NLP multiobjetivo implementado en Pyomo, acoplando los modelos RNA dentro del problema de optimización. Se sigue la misma metodología presentada en la **Figura 5.1**.
3. Optimiza todo el esquema productivo (silicio, obleas, celdas y módulos) minimizando costos, agua y energía, y maximizando la rentabilidad.
4. Cuantifica el potencial mexicano para insertarse en el mercado mundial de paneles y proyecta los volúmenes de residuo FV que generarán las instalaciones actuales.

Con ello se presenta el primer trabajo que combina aprendizaje automático y programación matemática determinista para diseñar, de forma integral y sostenible, la industria fotovoltaica mexicana.

6.2. Metodología

La **Figura 6.1** presenta la metodología utilizada para desarrollar los modelos de aprendizaje automático y la optimización multiobjetivo del modelo matemático propuesto para la producción de paneles solares fotovoltaicos; se divide en múltiples etapas. Se propone la creación de una RNA para predecir la producción de silicio policristalino, el consumo de energía y agua, y los costos asociados. En primer lugar, se recopila el conjunto de datos de una planta de producción de silicio policristalino. A continuación, se realiza un preprocesamiento de los datos para eliminar anomalías y se aplica una normalización de los datos para establecer los mismos órdenes de magnitud de los parámetros. A continuación, el conjunto de datos se divide en un conjunto de entrenamiento y un conjunto de validación que se utilizan para entrenar y verificar la precisión del modelo de RNA. Además, se lleva a cabo la optimización de los hiperparámetros asociados al modelo de RNA para obtener un modelo eficiente y competitivo. Tras obtener el mejor modelo de RNA con los hiperparámetros optimizados, se genera un modelo subrogado, que puede subrogados a los modelos de RNA en problemas matemáticos de optimización de mayor envergadura e integrarse perfectamente con el lenguaje de modelado algebraico Pyomo. Posteriormente, el modelo subrogado se incorpora al modelo matemático conectando todas las variables del modelo que interactúan con el modelo RNA. El modelo matemático contempla la producción de silicio policristalino (modelos RNA), obleas, celdas y módulos considerando como función objetivo la maximización del beneficio total y la minimización de las emisiones generadas y del

consumo de agua. Para la optimización multiobjetivo se utiliza el método de ϵ -constraint para encontrar soluciones de compromiso entre los objetivos propuestos.

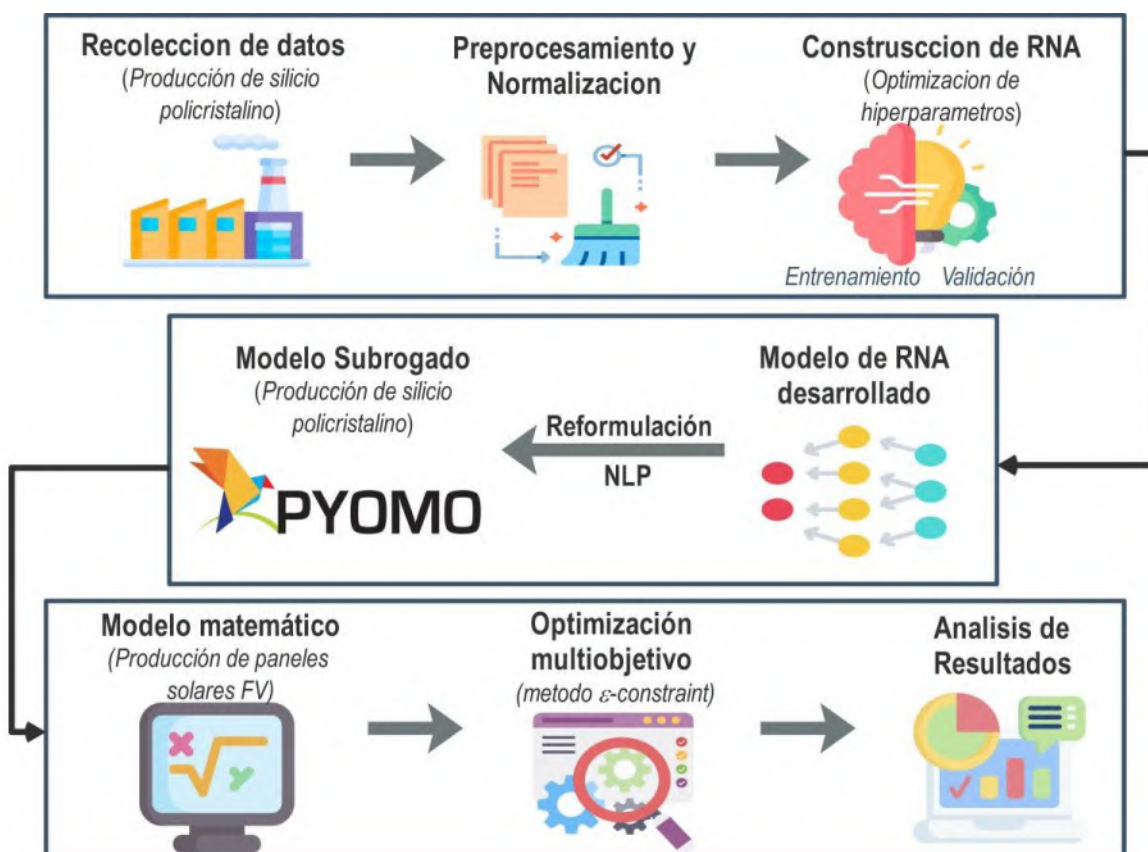


Figura 6.1. Representación esquemática de la metodología propuesta.

6.2.1. Conjunto de datos

Para recopilar el conjunto de datos se ha utilizado un modelo riguroso de una planta de producción de silicio policristalino que adopta una ruta híbrida que combina etapas de Siemens y Union Carbide (Ramírez Márquez et al., 2020). Esta planta se divide en cuatro secciones principales. La primera sección consiste en la carborreducción de dióxido de silicio (SiO_2) por carbón (C) para obtener silicio metalúrgico. La segunda sección describe la producción de clorosilanos mediante el sistema de reacción formado por la hidrogenación del tetracloruro de silicio (SiCl_4) y la hidroclicación del silicio metalúrgico con ácido clorhídrico (HCl). La tercera sección consiste en la purificación de los clorosilanos obtenidos en el reactor anterior mediante columnas de destilación. Por último, la cuarta sección es la conversión del triclorosilano en polisilicio en un reactor de deposición Siemens. La secuencia

del proceso de la planta de producción de silicio policristalino incluye tres reactores, dos columnas de destilación, compresores, intercambiadores de calor, mezcladores y divisores.

Se han recopilado 380 conjuntos de datos mediante una serie de simulaciones del modelo riguroso de la planta de producción de silicio policristalino. Las variables de entrada seleccionadas son las materias primas (SiO_2 , Carbón, H_2 y SiCl_4) necesarias para la producción de silicio y las condiciones de operación de la planta (TCarb_1, TCarb_2, Presión, H_2/SiCl_4 , FR columna 1, RR columna 1, FR columna 2 y TSiemens); mientras que las variables de salida son la producción de silicio policristalino (Si^{GS}), la venta de subproducto (SSP), el consumo de energía (PTC), el consumo de agua (WTC) y el costo de refrigeración (REC). La **Tabla 6.1** muestra todos los parámetros mencionados y sus unidades, así como los límites máximo y mínimo, la media y la desviación estándar que se determinaron a partir de la base de datos recopilada.

Tabla 6.1. Lista de parámetros de la base de datos.

Parámetros	Unidades	Limites	Media	Desviación estándar
SiO_2	[10^5 Kmol]	1.2 ~ 14	7.14	3.78
Coal	[10^5 Kmol]	2.5 ~ 28	14.3	7.56
H_2	[10^5 Kmol]	1.7 ~ 5.9	3.94	1.5
SiCl_4	[10^5 Kmol]	3.6 ~ 5.4	1.99	1.25
TCarb_1	[K]	2,754 ~ 3,001	2,845	25.1
TCarb_2	[K]	373 ~ 873	611	195.3
Pressure	[Kpa]	1,442 ~ 2,027	2008	91.4
H_2/SiCl_4	-	1.0 ~ 5.0	2.56	1.3
FR column 1	-	2.0 ~ 2.2	2.1	0.05
RR column 1	-	13.3 ~ 15.0	14.6	0.53
FR column 2	-	5.1 ~ 7.6	6.6	0.84
TSiemens	[K]	1,481 ~ 1,500	1492	2.0
Silicon production (Si^{GS})	[10^6 kg]	1.4 ~ 21.3	10.5	5.67
Sale sub-product (SSP)	[10^7 \$]	1.6 ~ 15.8	7.5	3.67
Power consumption (PTC)	[10^7 kW]	5.0 ~ 54.5	26.0	13.40
Water consumption (WTC)	[10^7 L]	5.0 ~ 15.5	8.1	2.40
Refrigeration cost (REC)	[10^5 \$]	5.7 ~ 68.5	36.3	15.80

6.2.2. Modelo Global

El modelo matemático propuesto considera el esquema completo del proceso de producción de paneles solares fotovoltaicos (véase la **Figura 6.2**) a partir de materias primas de silicio y se presenta en un horizonte temporal pensado en anticipar el consumo de energía y agua, y satisfacer la demanda futura de paneles solares fotovoltaicos en una región específica. Además, se considera la posibilidad de importar y exportar. El consumo de energía puede abastecerse mediante diferentes tecnologías convencionales disponibles en la región. También se incluyen diferentes combustibles fósiles disponibles. Los módulos fotovoltaicos producidos pueden utilizarse dentro de la región o exportarse.

Es importante señalar que mediante la integración de los modelos RNA de las plantas de producción de silicio policristalino se podrán obtener las condiciones óptimas de operación de estas. Por lo tanto, a través de esta metodología, las plantas están siendo rigurosamente modeladas y optimizadas.

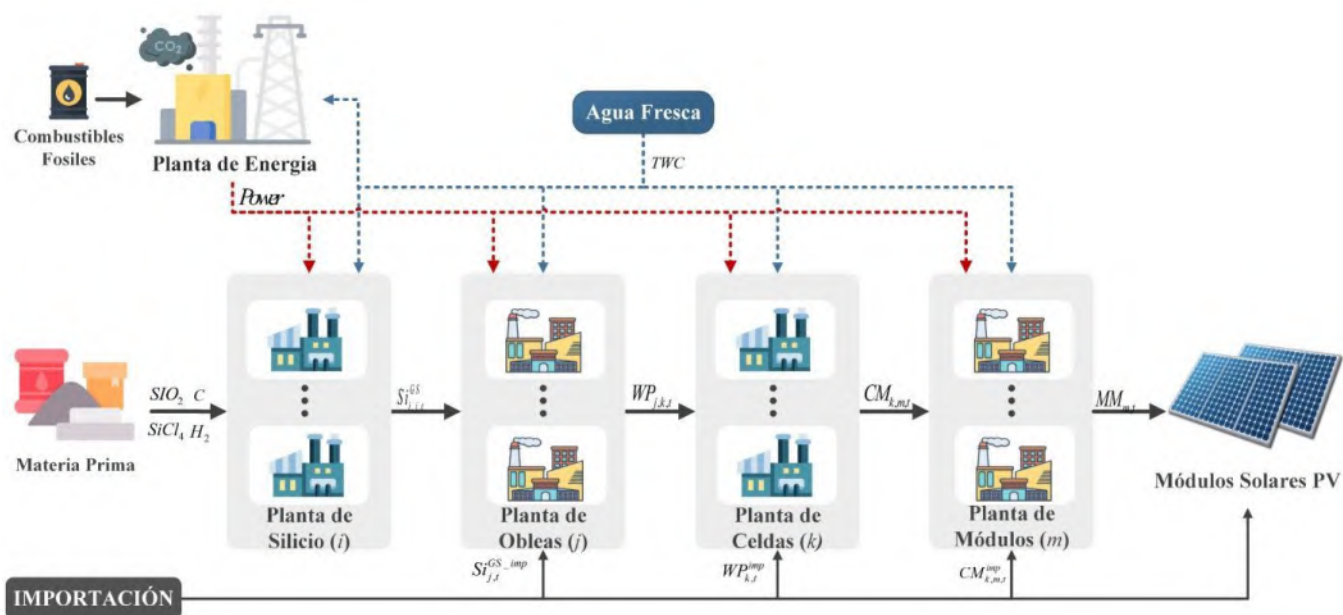


Figura 6.2. Superestructura propuesta para la producción de paneles solares fotovoltaicos

Lo primero que hay que hacer para entender el modelo es definir los conjuntos utilizados en la formulación matemática. Los conjuntos I , J , K y M se utilizan para las plantas de producción de silicio policristalino, las obleas, las celdas y los módulos; los índices i , j , k

y m están asociados a los conjuntos I , J , K y M , respectivamente. Los conjuntos empleados para la producción de energía, los combustibles fósiles y el período de tiempo (años) son C , F y T ; el índice c se establece para C , el índice f denota F y el índice t indica T . El modelo matemático describe la superestructura propuesta (**Figura 6.2**) y se subdivide en las siguientes secciones: ilustración matemática del modelo RNA, producción de obleas, producción de celdas, producción de módulos, capacidad de energía fotovoltaica necesaria en la región, consumo de energía, producción de energía, emisiones generadas, consumo total de agua, beneficio individual, costos de operación, beneficio total y función objetivo.

En la ecuación **6.1** se presenta una ilustración matemática del modelo RNA. Este modelo RNA puede incorporarse al modelo de programación matemática. Además, esta representación (ecuación **6.1**) es sólo ilustrativa debido a la complejidad del modelo RNA. El modelo RNA puede utilizarse para predecir variables como la producción de silicio policristalino ($Si_{i,t}^{GS}$), el subproducto de venta ($SSP_{i,t}$), el consumo de energía ($PTC_{i,t}$), el consumo de agua ($WTC_{i,t}$) y el costo de refrigeración ($REC_{i,t}$) en cada planta de producción de silicio policristalino a través de diferentes variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} Si_{i,t}^{GS} \\ SSP_{i,t} \\ PTC_{i,t} \\ WTC_{i,t} \\ REC_{i,t} \end{bmatrix} = f^{MLP} \left[\begin{array}{l} SIO2_{i,t}, C, H2_{i,t}, SiCl4_{i,t}, T1_{i,t}, T2_{i,t}, P_{i,t}, \\ H2/SiCl4_{i,t}, Rac1_{i,t}, RR1_{i,t}, Rac2_{i,t}, RR2_{i,t}, Ts_{i,t} \end{array} \right], \forall i \in I, t \in T \quad (6.1)$$

donde $SIO2_{i,t}$, C , $H2_{i,t}$ y $SiCl4_{i,t}$ son las materias primas con las que se alimenta cada planta para la producción de silicio. Mientras que $T1_{i,t}$, $T2_{i,t}$, $P_{i,t}$, $H2/SiCl4_{i,t}$, $Rac1_{i,t}$, $RR1_{i,t}$, $Rac2_{i,t}$, $RR2_{i,t}$ y $Ts_{i,t}$ son las condiciones de funcionamiento de las plantas de producción de silicio policristalino; estas variables son las mismas que las presentadas en la **Tabla S1**.

Además, el silicio policristalino producido en cada planta está limitado por la capacidad máxima que puede instalarse, esto se representa del siguiente modo:

$$Si_{i,t}^{GS} \leq caps_{i,t}, \forall i \in I, t \in T \quad (6.2)$$

$$caps_{i,t} \leq Maxcaps_{i,t}, \quad \forall i \in I, t \in T \quad (6.3)$$

La producción de obleas considera el $Si_{i,t}^{GS}$ producido en las plantas instaladas y el silicio que se puede comprar o importar ($Si_{j,t}^{GS-imp}$).

$$WP_{j,t} = \beta_j^{silicon} \left[\sum_i Si_{i,j,t}^{GS} + Si_{j,t}^{GS-imp} \right], \quad \forall j \in J, t \in T \quad (6.4)$$

$$WP_{j,t} \leq capw_{j,t}, \quad \forall j \in J, t \in T \quad (6.5)$$

$$capw_{j,t} \leq Maxcapw_{j,t}, \quad \forall j \in J, t \in T \quad (6.6)$$

donde $WP_{j,t}$ es la producción de obleas y $\beta_j^{silicon}$ es el factor de conversión de silicio en obleas. $Si_{i,j,t}^{GS}$ representa el silicio suministrado a la planta j por la planta de producción de silicio i . Mientras que $capw_{j,t}$ y $Maxcapw_{j,t}$ representan la capacidad instalada de las plantas de producción de obleas y la capacidad máxima que puede instalarse en cada planta.

La producción de celdas solares considera las obleas ($WP_{wpp,t}$) producidas en plantas instaladas y las obleas que pueden comprarse o importarse ($WP_{cmp,t}^{imp}$).

$$CM_{k,t} = \beta_k^{wafer} \left[\sum_j WP_{j,k,t} + WP_{k,t}^{imp} \right], \quad \forall k \in K, t \in T \quad (6.7)$$

$$CM_{k,t} \leq capc_{k,t}, \quad \forall k \in K, t \in T \quad (6.8)$$

$$capc_{k,t} \leq Maxcapc_{k,t}, \quad \forall k \in K, t \in T \quad (6.9)$$

donde $CM_{k,t}$ es la producción de celdas y β_k^{wafer} es el factor de conversión de oblea a celda.

La producción de módulos solares tiene en cuenta las células solares ($CM_{k,t}$) producidas en las plantas instaladas y las células importadas ($CM_{m,t}^{imp}$).

$$MM_{m,t} = \beta_m^{cell} \left[\sum_k CM_{k,m,t} + CM_{m,t}^{imp} \right], \quad \forall m \in M, t \in T \quad (6.10)$$

$$MM_{m,t} \leq capm_{m,t}, \quad \forall m \in M, t \in T \quad (6.11)$$

$$capm_{m,t} \leq Maxcapm_{m,t}, \quad \forall m \in M, t \in T \quad (6.12)$$

donde $MM_{m,t}$ es la producción total de módulos y β_m^{cell} es un factor de conversión de celda a módulo. Es importante destacar que la producción total de módulos ($MM_{m,t}$) se utiliza para ser instalada en la región de estudio ($MM_{m,t}^{install}$), abasteciendo las necesidades de energía solar fotovoltaica, y otra parte se exporta ($MM_{m,t}^{export}$). Esto se representa de la siguiente manera:

$$MM_{m,t} = MM_{m,t}^{install} + MM_{m,t}^{export}, \forall m \in M, t \in T \quad (6.13)$$

La capacidad de energía fotovoltaica (PEC_t) necesaria en la región se suministra a través de los módulos instalados producidos ($MM_{m,t}^{install}$) y los módulos importados (MM_t^{imp}).

$$PEC_t = \varepsilon \left[\sum_m MM_{m,t}^{install} + MM_t^{imp} \right], \forall t \in T \quad (6.14)$$

donde ε es un factor de conversión del módulo en capacidad de PE disponible. Hay que señalar que lo único que se puede exportar son los módulos producidos; mientras que el silicio, las obleas, las celdas y los módulos se pueden importar. Los módulos importados (MM_t^{imp}) sólo se utilizan para abastecer las necesidades de la región.

La energía consumida en todo el proceso de producción de módulos solares es igual a la suma del consumo de energía en la producción de silicio policristalino ($PTC_{i,t}$), la producción de obleas ($ECW_{j,t}$), la producción de celdas ($ECC_{k,t}$) y la producción de módulos ($ECM_{m,t}$):

$$ETC_t = \sum_i PTC_{i,t} + \sum_j ECW_{j,t} + \sum_k ECC_{k,t} + \sum_m ECM_{m,t}, \forall t \in T \quad (6.15)$$

La energía consumida en el proceso de producción de obleas se determina a partir de la siguiente ecuación:

$$ECW_{j,t} = \phi_j WP_{j,t}, \forall j \in J, t \in T \quad (6.16)$$

donde ϕ_j es un factor unitario que representa la cantidad de energía consumida por oblea producida.

Se supone que las celdas se producen de acuerdo con un flujo de proceso estándar en el que hay un consumo de diferentes servicios, como electricidad y agua, en diferentes etapas.

En primer lugar, las obleas se tratan para eliminar los daños causados por la sierra de corte y se texturizan (texturizado o limpieza), antes de la difusión del emisor en un horno. Tras la difusión, se realiza un tratamiento químico húmedo para aislar los bordes y eliminar el fosfosilicato de vidrio (PSG). El nitrato de silicio (SiNx) se deposita con PECVD. La metalización se estampa por serigrafía (Al con almohadillas de soldadura de Ag en la parte trasera, rejilla de Ag en la parte delantera) y se calienta en un horno de cocción a alta temperatura. Por lo tanto, el consumo de energía de la producción de celdas se determina de la siguiente manera:

$$ECC_{k,t} = UTC_k CM_{k,t} + UED_k CM_{k,t} + UDP_k CM_{k,t} + UMT_k CM_{k,t}, \quad \forall k \in K, t \in T \quad (6.17)$$

donde UTC_k , UED_k , UDP_k y UMT_k representan los factores unitarios de consumo de energía por celda producida en las etapas de texturizado o limpieza, difusión del emisor, depósito con PECVD y metalizado, respectivamente.

En la producción de módulos, sólo se realiza el montaje, que también consume energía, por tanto:

$$ECM_{m,t} = UMA_m MM_{m,t}, \quad \forall m \in M, t \in T \quad (6.18)$$

donde UMA_{mmp} es el factor unitario de consumo de energía para cada conjunto de módulos.

La energía necesaria se produce mediante tecnologías convencionales que funcionan con fuentes de combustible fósil.

$$ETC_t = \sum_c Power_{c,t}, \quad \forall t \in T \quad (6.19)$$

donde $Power_{c,t}$ es la energía producida por la tecnología convencional c en el periodo t . La potencia producida se determina del siguiente modo:

$$Power_{c,t} = \sum_f Q_{c,f,t} \mu_{c,f,t}, \quad \forall c \in C, t \in T \quad (6.20)$$

donde $\mu_{c,t}$ es la eficiencia térmica de la tecnología convencional c y $Q_{c,f,t}$ es el calor suministrado a la tecnología convencional c por el combustible fósil f .

Las emisiones de CO_{2eq} se cuantifican a través de las emisiones producidas por los combustibles fósiles en cada tecnología convencional.

$$emissions^{CO2eq} = \sum_c \sum_f \sum_t \omega_{c,f,t}^{emissions} Q_{c,f,t} \quad (6.21)$$

donde $\omega_{c,f,t}^{emissions}$ es la emisión unitaria de CO_{2eq} para el combustible f .

En la producción de silicio, obleas y células solares, se necesita agua para su funcionamiento. Además, la producción de energía a partir de tecnologías convencionales requiere grandes cantidades de agua. Por lo tanto, el consumo total de agua (TWC) se determina de la siguiente manera:

$$TWC = \left[\sum_i \sum_t WTC_{i,t} + \sum_j \sum_t UWC_{j,t}^{wafer} WP_{j,t} + \sum_k \sum_t UWC_{k,t}^{PECVD} CM_{k,t} + \sum_c \sum_t UWC_{c,t}^{conv_tech} Power_{c,t} \right] \quad (6.22)$$

Es importante mencionar que no se requiere agua en la producción de módulos, ya que en esta fase sólo se realiza el montaje. Sin embargo, existe un consumo indirecto de agua debido al consumo de energía.

La ganancia total de las plantas de producción de silicio policristalino ($Profit^{siliconplants}$) considera la ganancia generada por la venta del silicio policristalino producido ($Si_{i,t}^{GS}$) más la ganancia por la venta de subproductos ($SSP_{i,t}$) menos el costo de instalación de las plantas de silicio ($Cost_{ins}^{Si}$), los costos de materia prima ($RMC_{i,t}$), y los costos de refrigeración ($REC_{i,t}$).

$$Profit^{siliconplants} = \left[\sum_i \sum_t USC_{i,t}^{si} Si_{i,t}^{GS} + \sum_i \sum_t SSP_{i,t} - Cost_{ins}^{Si} - \sum_i \sum_t RMC_{i,t} - \sum_i \sum_t REC_{i,t} \right] \quad (6.23)$$

donde $USC_{i,t}^{si}$ es igual al costo unitario del silicio policristalino.

El costo de instalación de las plantas de silicio ($Cost_{ins}^{Si}$) viene determinado por la capacidad máxima a instalar multiplicada por el costo unitario variable (ς_i^{Si}) más un costo fijo de instalación (ψ_i^{Si}):

$$Cost_{ins}^{Si} = \sum_i \left[\varsigma_i^{Si} + \psi_i^{Si} (cap_i^{Si}) \right] \quad (6.24)$$

Los costos de las materias primas ($RMC_{i,t}$) consideran los costos asociados a la cantidad de dióxido de silicio ($SiO2_{i,t}$), carbón ($C_{i,t}$), hidrógeno ($H2_{i,t}$) y tetracloruro de silicio ($SiCl4_{i,t}$) necesarios:

$$RMC_{i,t} = URC_{rm}^{SiO_2} SiO2_{i,t} + URC_{rm}^C C_{i,t} + URC_{rm}^{H_2} H2_{i,t} + URC_{rm}^{SiCl_4} SiCl4_{i,t} \quad (6.25)$$

donde $URC_{rm}^{SiO_2}$, URC_{rm}^C , $URC_{rm}^{H_2}$ y $URC_{rm}^{SiCl_4}$ representan los costos unitarios de las materias primas.

La ganancia total de la producción de obleas ($Profit^{waferplants}$) considera el beneficio obtenido de la venta de obleas menos el costo de instalación de las plantas de obleas, el costo de producción, los costos del silicio policristalino producido y los costos del silicio importado:

$$Profit^{waferplants} = \left[\sum_j \sum_t UWC_{j,t}^{cost-wafer} WP_{j,t} - Cost_{ins}^{wafer} - \sum_j \sum_t UPC_j^{wafer} WP_{j,t} - \sum_i \sum_t USC_{i,t}^{Si} Si_{i,t}^{GS} - \sum_j \sum_t UTC_{j,t}^{Si-imp} Si_{j,t}^{GS-imp} \right] \quad (6.26)$$

donde $UWC_{j,t}^{cost-wafer}$ y UPC_j^{wafer} denotan el costo unitario de la oblea y el costo unitario de producción de la oblea. $UTC_{j,t}^{Si-imp}$ representa el costo unitario del silicio importado.

El costo de instalación de las fábricas de obleas ($Cost_{ins}^{wafer}$) se calcula utilizando la capacidad máxima instalada (cap_j^{waf}) y los costos variables (ψ_j^{waf}) y fijos (ς_j^{waf}) unitarios de instalación.

$$Cost_{ins}^{wafer} = \sum_j \left[\varsigma_j^{waf} + \psi_j^{waf} (cap_j^{waf}) \right] \quad (6.27)$$

La ganancia total de la producción de celdas viene determinada por el beneficio de la venta de las celdas menos el costo de instalación de la planta, el costo de producción, el costo de las obleas producidas y el costo de las obleas importadas:

$$Profit^{cellplants} = \left[\sum_k \sum_t UCC^{cell} CM_{k,t} - Cost_{ins}^{cell} - \sum_k \sum_t UPC_k^{cell} CM_{k,t} - \sum_j \sum_t UWC_j^{wafer} WP_{j,t} - \sum_k \sum_t UTC_{k,t}^{wafer_imp} WP_{k,t}^{imp} \right] \quad (6.28)$$

donde UCC^{cell} y UPC_k^{cell} son el costo unitario de la celda y el costo unitario de producción, respectivamente. $UTC_{k,t}^{wafer_imp}$ representa el costo unitario de importación de las obleas.

El costo de instalación de las plantas de celdas ($Cost_{ins}^{cell}$) se calcula utilizando la capacidad máxima instalada (cap_j^{waf}) y los costos variables (ψ_k^{cell}) y fijos (ς_k^{cell}) unitarios de instalación:

$$Cost_{ins}^{cell} = \sum_k \left[\varsigma_k^{cell} + \psi_k^{cell} (cap_k^{cell}) \right] \quad (6.29)$$

La ganancia total de la producción de módulos ($Profit^{modplants}$) viene determinado por la ganancia de la venta de los módulos menos el costo de instalación de la planta de módulos, el costo de producción, el costo de las celdas producidas y el costo de las celdas importadas:

$$Profit^{modplants} = \left[\sum_m \sum_t UMC_{m,t}^{module} MM_{m,t} - Cost_{ins}^{module} - \sum_m \sum_t UPC_m^{module} MM_{m,t} - \sum_k \sum_t UCC^{cell} CM_{k,t} - \sum_m \sum_t UTC_{m,t}^{cell_imp} CM_{m,t}^{imp} \right] \quad (6.30)$$

donde $UMC_{m,t}^{module}$ y UPC_m^{module} denotan el costo unitario del módulo y el costo unitario de producción, respectivamente. $UTC_{m,t}^{cell_imp}$ es el costo unitario de importación de las celdas.

Es importante mencionar que el beneficio de la venta de los módulos incluye los módulos instalados en la región y los módulos exportados. De la siguiente manera es posible determinar sólo la ganancia de los módulos exportados:

$$Profit^{module_export} = \sum_m \sum_t UMC_{m,t}^{module} MM_{m,t}^{export} \quad (6.31)$$

El costo de instalación de las centrales de módulos ($Cost_{ins}^{module}$) considera la capacidad máxima instalada (cap_j^{waf}) y los costos variables (ψ_m^{mod}) y fijos (ς_m^{mod}) unitarios:

$$Cost_{ins}^{module} = \sum_m \left[\varsigma_m^{mod} + \psi_m^{mod} (cap_m^{mod}) \right] \quad (6.32)$$

Los costos de operación incluyen los costos generados por los módulos importados ($Cost^{module_import}$), el costo del agua consumida ($Cost^{water}$), el costo de operación y mantenimiento de las tecnologías convencionales ($cost^{opm}$) y los costos de los combustibles fósiles ($cost^{fuels}$):

$$Cost^{module_import} = \sum_m \sum_t UTC_{m,t}^{mod_imp} MM_{m,t}^{imp} \quad (6.33)$$

$$Cost^{water} = UCW^{water} TWC \quad (6.34)$$

$$cost^{opm} = \sum_c \sum_t UPC_{c,t}^{con_tec} Power_{c,t} \quad (6.35)$$

$$cost^{fuels} = \sum_f \sum_t \left(\Omega_{f,t}^{fossil} \sum_c Q_{c,f,t} \right) \quad (6.36)$$

donde $UTC_{m,t}^{mod_imp}$, UCW^{water} y $UPC_{c,t}^{con_tec}$ son los costos unitarios de los módulos importados, el agua consumida y el funcionamiento y mantenimiento. $\Omega_{f,t}^{fossil}$ representa el costo unitario de la fuente de energía utilizada.

La ganancia total viene determinada por la suma de la ganancia de producción de silicio policristalino, la ganancia de producción de obleas, de celdas y de módulos, menos los costos de operación:

$$TOP = \left[Profit^{siliconplants} + Profit^{waferplants} + Profit^{cellplants} + Profit^{modplants} - Cost^{module_import} - Cost^{transp} - Cost^{water} - Cost^{opm} - Cost^{fuels} \right] \quad (6.37)$$

La función objetivo considera aspectos económicos y medioambientales maximizando el beneficio total (TOP) y minimizando el consumo total de agua (TWC) y las emisiones generadas, que se define como sigue:

$$OF = \{\max TOP, \min TWC, \min emissions\} \quad (6.38)$$

6.3. Caso Practico

Se ha elegido México para mostrar la aplicabilidad de la metodología propuesta e ilustrar los resultados. México tiene una superficie de 1,964,375 km² y una población de 126,014,024 habitantes. La ubicación geográfica (frontera con Estados Unidos, Guatemala y Belice), la gran relación con los países de América, las inversiones extranjeras (SEECO, 2023) y el ser un país en vías de desarrollo hacen de México un país ideal para la instalación a gran escala de industrias de producción de paneles solares fotovoltaicos. México también cuenta con fuentes de las principales materias primas requeridas (carbón, dióxido de silicio, hidrógeno, cloruro de silicio y ácido clorhídrico). Además, América representa la región con menor participación en el mercado global de producción de silicio, obleas, celdas y módulos; esta participación global equivale a 4%, 0.3%, 0% y 8.85%, respectivamente (Frischknecht et al., 2015). Por lo tanto, aumentar la producción de paneles solares fotovoltaicos en América (México) podría traer beneficios económicos, sociales y ambientales.

Por otro lado, se propone satisfacer la necesidad de paneles solares fotovoltaicos en México en los años 2040-2047. La **Figura 6.3** muestra la evolución de la capacidad agregada y la capacidad instalada de la tecnología solar fotovoltaica. Sabiendo que los paneles solares fotovoltaicos tienen una vida útil promedio de 25 años, se propone sustituir y optimizar la producción de paneles solares fotovoltaicos entre los años 2040-2047, cuando los paneles solares fotovoltaicos actualmente instalados en México serán desechados y deberán ser sustituidos por nuevos paneles solares fotovoltaicos. Esto permitirá abastecer la demanda nacional, exportar los paneles y cuantificar la cantidad de residuos generados por los paneles solares fotovoltaicos actualmente instalados (2015-2022). Además, la sustitución de paneles solares fotovoltaicos después de 2040 también considera un incremento medio anual de 150 MW de capacidad instalada. Es importante tener en cuenta que la producción de paneles solares fotovoltaicos siempre será superior a la requerida a nivel nacional (la mayor parte se exportará), y si se requiere una mayor capacidad en México hay suficiente producción de paneles solares fotovoltaicos disponible.

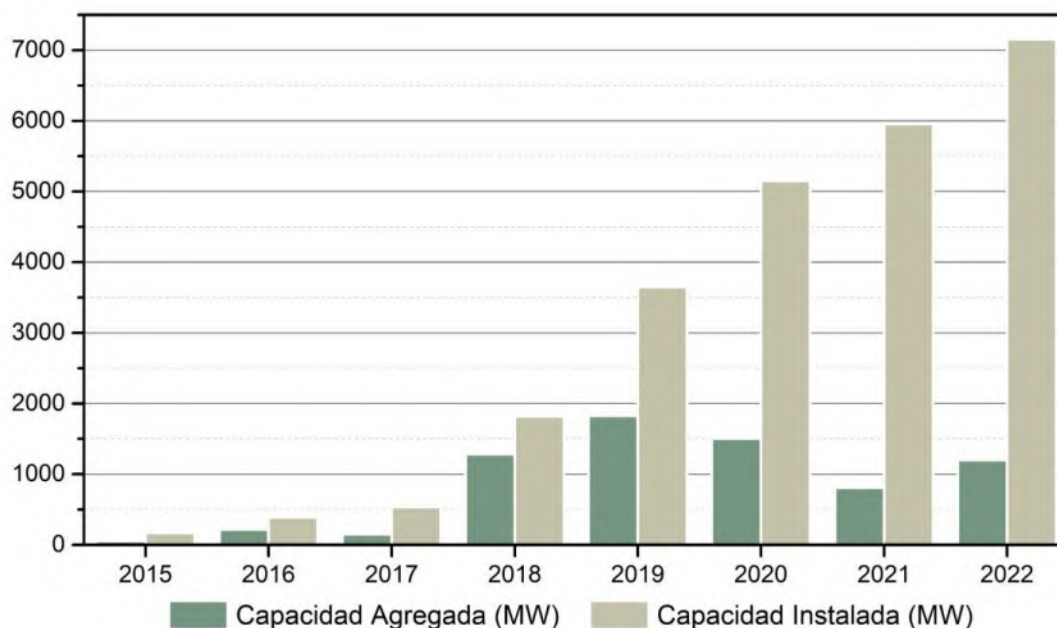


Figura 6.3. Evolución de la capacidad agregada y capacidad instalada de tecnología solar fotovoltaica en México 2015-2022 [con base en datos de México (PRODESEN, 2023)].

6.4. Resultados y Discusión

6.4.1. Modelo RNA

El conjunto de datos recopilados se dividió aleatoriamente en un 80% para el conjunto de entrenamiento y un 20% para el conjunto de validación. El modelo de RNA se entrenó utilizando la función de activación ReLU, Adam y la métrica MSE como función de pérdida. Para la optimización de los hiperparámetros (capas ocultas, neurona por capa oculta, tasa de aprendizaje), se han seleccionado los límites mínimo y máximo, y el conjunto de pasos para cada hiperparámetro mediante algunos experimentos de prueba y error. El número de veces para iterar sobre el algoritmo Hyperband completo y el número máximo de épocas para realizar el entrenamiento de un modelo se han fijado en 75 y 100, respectivamente. Además, se seleccionó la función de pérdida de validación (MSE) como objetivo a minimizar, con el fin de reducir los problemas asociados al sobreajuste del modelo. Por último, durante el proceso de optimización de los hiperparámetros mediante Hyperband (ver **sección 5.2.1**), se llevaron a cabo un total de 6,159 experimentos en un tiempo de cálculo de 7.6 horas.

A continuación, se presenta la arquitectura del mejor modelo obtenido con la optimización de hiperparámetros:

- Doce entradas, cinco salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 20, 20 y 10, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,0005.

El mejor modelo encontrado es un modelo pequeño con pocos parámetros asociados a la RNA. Esto se traduce en un mejor tiempo de cálculo (optimización multiobjetivo) cuando este modelo se incorpora al modelo matemático.

La **Tabla 6.2** muestra los valores obtenidos para las distintas métricas utilizadas en la evaluación del modelo RNA; se presentan para el conjunto de validación de las cinco variables de salida. En general, se ha obtenido un modelo sobresaliente que ha aprendido el comportamiento de la base de datos con muy buenos errores. Todos los errores para todas las variables de salida se han mantenido similares, lo que indica una buena precisión y estabilidad del modelo RNA en la predicción de todas las variables. El consumo de agua es el que presenta los valores más bajos de las métricas de error; sin embargo, la disminución relativa al resto de las variables es insignificante. El MSE y el MAE se mantuvieron por debajo de 0.0087 y 0.0557, mientras que el R^2 se mantuvo por encima de 0.99.

Tabla 6.2. Errores obtenidos para los datos de validación errores obtenidos para los datos de validación.

	Producción de silicio	Venta de subproductos	Consumo de energía	Consumo de energía	Costo de refrigeración
MSE	0.0041	0.0011	0.0056	0.0087	0.0070
MAE	0.0259	0.0209	0.0357	0.0557	0.0441
R^2	0.9958	0.9987	0.9945	0.9903	0.9940

6.4.2. Optimización Multiobjetivo

El modelo subrogado (reformulación) para el modelo RNA es un problema NLP con 207 variables y 245 restricciones; esto es para cada planta de producción de silicio policristalino. Si se instalan 4 plantas, debe incorporarse un modelo subrogado para cada

planta, para lo cual el número de variables y restricciones se multiplica por 4. Asimismo, debe tenerse en cuenta que se incluyen los años de producción, por lo que debe considerarse un modelo subrogado para cada planta y año de producción. En total, el modelo matemático global es un problema NLP que representa la superestructura propuesta (véase la **Figura 6.2**) consta de 7,746 variables continuas y 8,812 restricciones. Para resolver este problema se ha utilizado el solucionador CONOPT. El tiempo medio para la solución de cada punto de la curva de Pareto fue de 780 s.

Dado que los objetivos económicos y medioambientales tienen un comportamiento inverso, se ha aplicado un enfoque de optimización multiobjetivo basado en el método de ϵ -constraint para analizar el compromiso entre los aspectos económicos y medioambientales (*TOP*, emisiones y *TWC*). La **Figura 6.4** ilustra la curva de Pareto en la que se puede observar el comportamiento entre *TOP*, emisiones y agua consumida. Además, en la curva de Pareto se han identificado el punto de utopía (UP) y el punto nadir (NP). El punto de utopía se determina a través de las mejores soluciones para cada objetivo, por ejemplo, con el valor máximo de *TOP* y los valores mínimos de emisiones y agua consumida. El punto utopía no es factible y sólo se utiliza como referencia ideal. La solución nadir se obtiene con los peores valores de los objetivos.

En términos generales, se observa (**Figura 6.4**) que las emisiones y el consumo de agua aumentan cuando también lo hace el *TOP*. Además, las emisiones y el consumo de agua son proporcionales; cuanto menores son las emisiones, menor es el consumo de agua. Sin embargo, se han detectado dos soluciones interesantes (A y B) en la curva de Pareto.

La mejor solución económica, con un beneficio igual a 3.44×10^{10} USD, se consiguió maximizando el *TOP*. Sin embargo, esta solución también representa la peor solución en términos medioambientales, ya que presenta un *TWC* de 3.758×10^9 m³ y unas emisiones iguales a 6.19×10^7 TonCO₂. La solución con la menor generación de emisiones (8.05×10^5 TonCO₂) también tiene el *TOP* más bajo de 2.39×10^9 USD con un *TWC* igual a 2.499×10^8 ; las emisiones, el *TOP* y el *TWC* se reducen en un 98.7%, 93.0% y 93.3% con respecto a la mejor solución económica. Mientras que en la solución con menor consumo de agua (2.495×10^8 m³), hay 3.13×10^6 TonCO₂ de emisiones y un *TOP* igual a 3.59×10^9 USD.

Obsérvese que el *TWC* es similar al de la solución con menores emisiones, pero con un aumento del 288.8% de las emisiones generadas y sólo un 50% más de beneficio económico.

Los puntos A y B son soluciones interesantes de analizar, ya que son los más cercanos al punto de utopía (véase la **Figura 6.4**). Entre los dos, el punto A representa la solución con mayor *TOP* (3.37×10^{10} USD) pero con mayor *TWC* (3.757×10^9 m³) y unas emisiones generadas de 2.12×10^7 TonCO₂. Esta solución es muy similar a la mejor solución económica, pero con una disminución del 65.8% de las emisiones generadas; lo que hace que la solución A sea muy atractiva. Por otro lado, el punto B ofrece un *TOP* inferior (2.10×10^{10} USD), unas emisiones inferiores (1.10×10^7 TonCO₂) y un *TWC* inferior (2.11×10^9 m³) en comparación con el punto A. Sin embargo, la disminución del beneficio es sólo del 38.9% en comparación con la mejor solución económica, mientras que las emisiones y el *TWC* disminuyeron un 82.2% y un 43.9%, respectivamente. Esta solución en términos medioambientales es más atractiva que la solución A, pero al mismo tiempo la reducción económica no es tan significativa. En conclusión, el punto B ha sido declarado solución de compromiso debido a las compensaciones medioambientales y económicas encontradas, así como por ser la solución más cercana al punto de utopía.

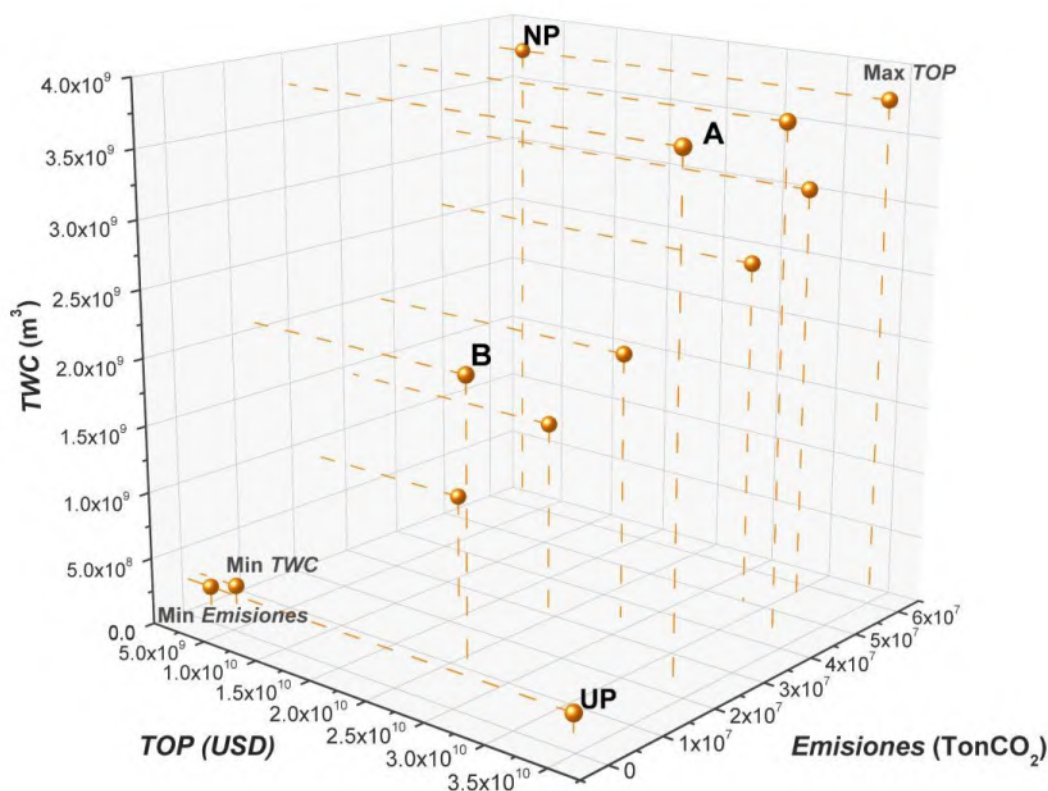


Figura 6.4. Curva de Pareto para *TOP*, emisiones generadas y *TWC*.

En la **Tabla 6.2** se presentan las emisiones producidas por potencia instalada y potencia generada, y el agua consumida por potencia instalada y potencia generada para las soluciones A y B. Es importante mencionar que la potencia instalada se determina por el número de módulos totales producidos en cada solución, mientras que la potencia generada se determina para la vida útil de los paneles solares fotovoltaicos (25 años) por la potencia instalada, las horas anuales de funcionamiento de los paneles solares y el factor de capacidad medio, que en EE.UU. se sitúa entre el 16% y el 29% (EIA, 2023). México tiene valores similares, por lo que se ha utilizado un factor de capacidad medio del 21%.

La producción de paneles solares fotovoltaicos genera emisiones, por lo que se han hallado las emisiones producidas por cada kW de paneles solares fotovoltaicos instalados. Por otro lado, es bien sabido que la producción de energía mediante paneles solares FV no produce emisiones. Sin embargo, se han determinado las emisiones generadas por kWh de energía solar fotovoltaica producida utilizando las emisiones generadas durante la producción de paneles solares fotovoltaicos y suponiendo que no se generan emisiones

durante la vida útil media. Los valores hallados son considerablemente inferiores a las emisiones generadas por los combustibles fósiles.

Mediante la producción de paneles solares fotovoltaicos se determina el consumo de agua por potencia instalada, mientras que la generación de energía solar fotovoltaica consume una cantidad mínima de agua, principalmente para las operaciones de limpieza. Por lo tanto, el consumo total de agua por potencia generada se ha calculado mediante el consumo de agua durante la producción de paneles solares fotovoltaicos y el consumo de agua durante la vida útil de los paneles solares fotovoltaicos (véase la **Tabla 6.3**). Aunque estos valores pueden considerarse elevados y alarmantes, son sobresalientes en comparación con el consumo de agua de las centrales hidroeléctricas de embalse ($1.8 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{kWh}$), las centrales de hulla ($1.9 \times 10^{-2} \text{ m}^3/\text{kWh}$) y las centrales nucleares ($3.4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{kWh}$). Por otro lado, la solución B presenta una mayor eficiencia en la generación de emisiones y en el uso del agua en comparación con la solución A. Esto reafirma la solución B como la solución de compromiso.

Tabla 6.3. Producción de emisiones y consumo de agua por capacidad instalada y potencia generada.

	Producción de emisiones		Consumo total de agua (TWC)	
	Capacidad instalada (TonCO ₂ /kW)	Energía generada (TonCO ₂ /kWh)	Capacidad instalada (m ³ /kW)	Energía generada (m ³ /kWh)
Solución A	9.44×10^{-2}	2.05×10^{-6}	16.74	4.64×10^{-4}
Solución B	5.18×10^{-2}	1.12×10^{-6}	9.92	3.16×10^{-4}

La **Figura 6.5** muestra la distribución porcentual de los beneficios, el consumo de energía y el consumo de agua de las plantas de producción de silicio policristalino, las plantas de producción de obleas, las plantas de producción de células y las plantas de producción de módulos. Se observa que, en términos económicos, existe una tendencia creciente hacia el producto final, con los mayores beneficios (35.7%) en las plantas de producción de módulos; las plantas de producción de silicio policristalino tienen los menores beneficios (13.0%) con respecto a los beneficios totales. El mayor consumo energético corresponde a las plantas de producción de células (39.7%) debido al proceso de producción estándar que tiene diferentes

etapas de consumo energético, mientras que las plantas de producción de módulos son las que menos energía consumen (15.5%), ya que en estas plantas sólo se realiza el ensamblaje (se necesitan 72 celdas para ensamblar un módulo). Además, las plantas de producción de obleas consumen el 89.2% del total de agua utilizada, una situación inesperada es que el mayor consumo de agua se centra en estas plantas. Sin embargo, se ha comprobado que la industria de fabricación de obleas y semiconductores tiene un elevado consumo de agua, incluso cuando se aplican estrategias de reciclaje (Wang et al., 2023). En la producción de obleas, se realiza una limpieza en húmedo en la que se aplican pasos de lavado secuenciales para eliminar materia orgánica, metales y partículas. El consumo de agua de las plantas de producción de silicio y de módulos es del 0.25% y del 0.10%, relativamente pequeño en comparación con el de las plantas de producción de obleas.

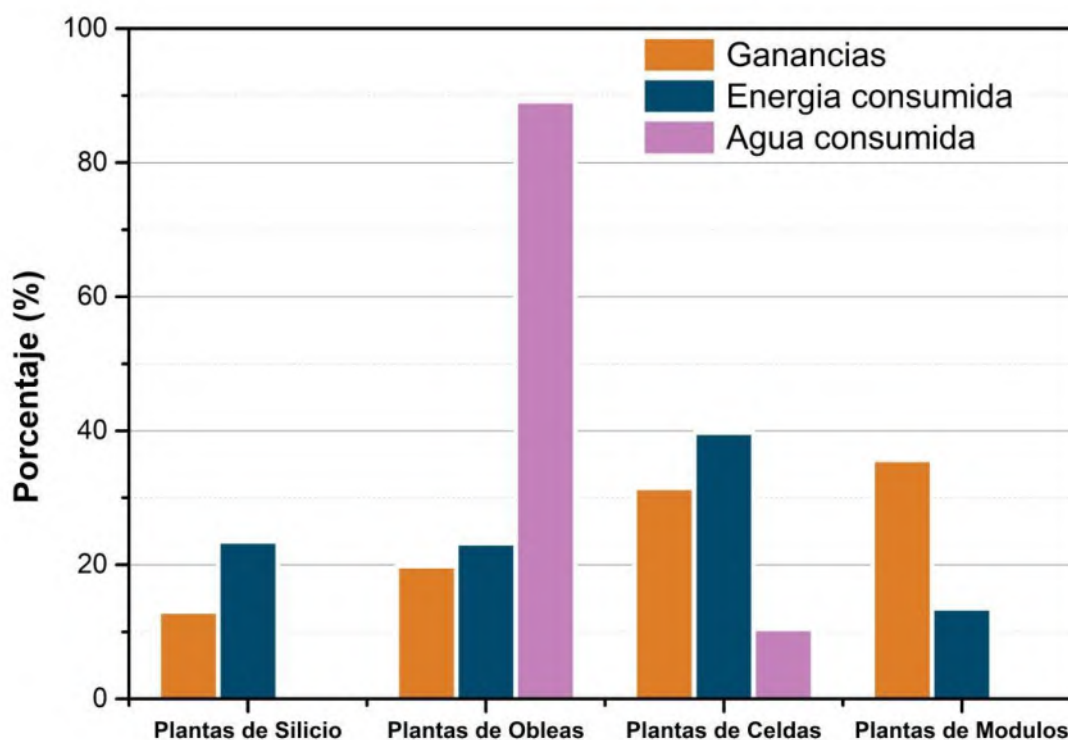


Figura 6.5. Distribución del beneficio, el consumo de energía y el consumo de agua para las distintas plantas de producción en la solución de compromiso.

En todos los años se han producido aproximadamente 9.8261×10^7 módulos (ver **Figura 6.6**), donde la mayor parte de ellos deben ser exportados y el resto son requeridos

para satisfacer los requerimientos energéticos de la energía solar fotovoltaica en México. La **Tabla 6.4** presenta los resultados detallados obtenidos en la solución de compromiso; estos resultados se determinan para todas las plantas y todos los años considerados. Por último, la **Tabla 6.5** enumera las condiciones óptimas de funcionamiento obtenidas para cada planta de producción de silicio policristalino; éstas se determinan durante la optimización. Cabe destacar que todas las plantas operan en condiciones diferentes, siendo la Planta 1 la de mayor capacidad instalada (9.472×10^6 kg) y la Planta 2 la de menor capacidad (3.887×10^6 kg).

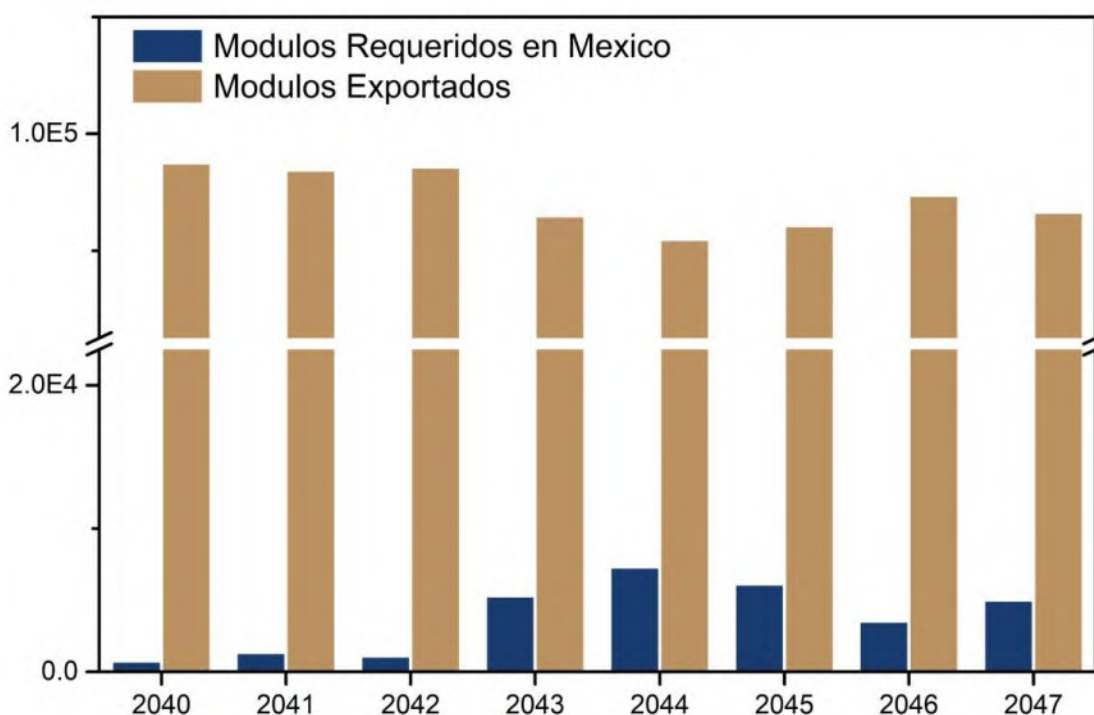


Figure 6.6. Módulos producidos cada año en la solución de compromiso.

Tabla 6.4. Resultados detallados de la solución compromiso.

Concepto	Solución B
Silicio importado, 10^8 kg	1.360
Oblea importada, 10^{10}	1.197
Celda importada, 10^{10}	1.197
Módulo importado	0
Costo de la materia prima, 10^8 USD	8.958
Costo del consumo de agua, 10^8 USD	5.055

Costo de operación y mantenimiento, 10^4 USD	3.760
Costo de los combustibles fósiles, 10^8 USD	7.304
Costo de capital de las plantas de silicio, 10^8 USD	1.467
Costo de capital de las plantas de obleas, 10^9 USD	1.148
Costo de capital de las plantas de células, 10^8 USD	4.156
Costo de capital de las plantas de módulos, 10^9 USD	1.841
Ganancia total (<i>TOP</i>), 10^{10} USD	2.100
Emisiones generadas, 10^7 TonCO ₂	1.100
Consumo total de agua (<i>TWC</i>), 10^9 m ³	2.110

Tabla 6.5. Condiciones óptimas de operación de las plantas de producción de silicio policristalino.

Variable	Planta 1	Planta 2	Planta 3	Planta 4
T _{Carb_1} , K	3001.0	2792.0	3001.0	2899.0
T _{Carb_2} , K	499.0	665	513.0	597.0
P, Kpa	14420	1974	1442.0	1721.0
H ₂ /SiCl ₄	1.0	1.0	1.0	1.0
FR column 1	2.2	2.2	2.2	2.2
RR column 1	13.7	15.0	13.6	15.0
FR column 2	7.6	7.6	7.6	7.6
RR column 2	59.9	59.9	59.9	59.9
T _{Siemens} , K	1498.0	1500.0	1498.0	1496.0

6.4.3. Residuos de Paneles Solares Fotovoltaicos en México

El desarrollo de la energía solar fotovoltaica está ligado a la generación de residuos fotovoltaicos una vez que estos sistemas llegan al final de su vida útil. A medida que aumenten las instalaciones fotovoltaicas, también lo harán los residuos fotovoltaicos. La recuperación y reutilización de materiales secundarios se ha convertido en una cuestión importante porque los módulos solares utilizan metales valiosos (por ejemplo, oro, plata, telurio, etc.) y otros materiales (por ejemplo, vidrio) que pueden recuperarse, reciclarse y reutilizarse (Stolz et al., 2018; Wang et al., 2023). Por lo tanto, disponer de una cuantificación anual de la cantidad de residuos que se generarán cuando los sistemas fotovoltaicos lleguen al final de su vida útil puede ayudar a los responsables a planificar la gestión óptima de los residuos (sistemas de recuperación y reciclaje) para reducir el agotamiento de los recursos,

reducir el impacto ambiental relacionado con la extracción y el procesamiento de recursos naturales valiosos y limitados, y ahorrar energía.

A través de la evolución de la capacidad instalada en México (ver **Figura 6.3**), se ha estimado el número total de módulos solares instalados. Mientras que para estimar la cantidad de residuos que pueden ser reciclados a partir del número de módulos instalados, se ha tomado como referencia un estudio que realizó una amplia investigación sobre la cantidad de metales, rendimientos reales y futuros de reciclaje de cada metal identificado en el inventario (Domínguez y Geyer, 2017). Por lo tanto, se ha determinado la cantidad de residuos generados por veintiún metales utilizados en los sistemas fotovoltaicos.

La **Tabla 6.6** presenta los residuos totales y por metales en toneladas que se generarán. Se prevé un total de 812,219.8 toneladas de residuos fotovoltaicos entre 2040 y 2047. El aluminio, el hierro y el silicio son los principales metales que componen los paneles solares fotovoltaicos, por lo que serán los que se desecharán en mayor cantidad. Además, la mayor cantidad de residuos se espera para 2044. Sin embargo, la cantidad de residuos a partir de 2040 seguirá aumentando significativamente debido al gran potencial solar de México. La energía fotovoltaica podría aportar potencialmente unos 30 GW de capacidad instalada para 2030 (IRENA, 2015). Actualmente, algunos países en el mundo han establecido procesos y estrategias para la recuperación, reciclaje y reutilización de estos residuos, obteniendo buenos rendimientos para la mayoría de los metales. De esta manera, establecer en México una industria de producción de paneles solares fotovoltaicos y plantas de reciclaje de residuos al mismo tiempo es una propuesta atractiva que generará empleos y contribuirá a un futuro sustentable basado en energías renovables.

Tabla 6.6. Cantidad de residuos que generarán en México las instalaciones solares actuales.

Metal/año	2040	2041	2042	2043	2044	2045	2046	2047
Ag	1.8	7.6	5.2	44.5	63.4	52.2	28.0	41.7
Al	1,572.0	6,571.0	4,525.9	38,589.8	54,907.8	45,229.2	24,254.6	36,111.1
Au	0.2	0.8	0.5	4.5	6.3	5.2	2.8	4.2
Cd	0.6	2.5	1.7	14.8	21.1	17.4	9.3	13.9
Cr	0.1	0.3	0.2	1.5	2.1	1.7	0.9	1.4
Cu	302.3	1,263.7	870.4	7,421.1	10,559.2	8,697.9	4,664.4	6,944.4
Fe	2,539.4	10,614.7	7,311.1	62,337.4	88,697.3	73,062.5	39,180.6	58,333.3
Ga	0.1	0.5	0.3	3.0	4.2	3.5	1.9	2.8

In	0.1	0.3	0.2	1.5	2.1	1.7	0.9	1.4
Mg	24.2	101.1	69.6	593.7	844.7	695.8	373.1	555.6
Mn	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Mo	0.1	0.5	0.3	3.0	4.2	3.5	1.9	2.8
Ni	0.0	0.2	0.1	1.2	1.7	1.4	0.7	1.1
Pb	0.4	1.5	1.0	8.9	12.7	10.4	5.6	8.3
Se	0.1	0.5	0.3	3.0	4.2	3.5	1.9	2.8
Si	1,572.0	6,571.0	4,525.9	38,589.8	54,907.8	45,229.2	24,254.6	36,111.1
Sn	0.1	0.5	0.3	3.0	4.2	3.5	1.9	2.8
Ta	0.0	0.0	0.0	0.1	0.1	0.1	0.0	0.1
Te	0.6	2.5	1.7	14.8	21.1	17.4	9.3	13.9
Ti	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Zn	60.5	252.7	174.1	1484.2	2111.8	1739.6	932.9	1388.9
Total (Ton)	6,074.7	25,391.9	17,489.2	149,119.8	212,176.3	174,775.7	93,725.4	139,541.5

Capítulo 7. CONCLUSIONES

El objetivo principal de esta tesis fue desarrollar y validar un enfoque híbrido que integre modelos de aprendizaje automático con técnicas de optimización, a fin de mejorar la precisión predictiva y la eficiencia de la toma de decisiones en sistemas de energía sostenible. Para demostrar su viabilidad y alcance, el enfoque se aplicó a cuatro planteamientos que abarcan la recuperación de calor residual, la producción y gestión hídrica en yacimientos de gas shale, la planificación integrada de fracturación y reúso de agua mediante un modelo MINLP, y la optimización de la cadena completa de manufactura de paneles fotovoltaicos. A partir de los resultados obtenidos, se pueden extraer las siguientes conclusiones globales:

La integración explícita de RNA en formulaciones de optimización, ya sea resueltas con algoritmos genéticos multiobjetivo (Planteamientos 1 y 2) o con métodos deterministas MINLP o NLP (Planteamientos 3 y 4), permitió capturar con elevada fidelidad la conducta de procesos complejos y entregar soluciones factibles que superan a los diseños convencionales en indicadores económicos y ambientales. Este hallazgo confirma la hipótesis de que la sinergia aprendizaje automático y optimización constituye una herramienta poderosa para afrontar la complejidad y la multi variabilidad de los sistemas energéticos modernos.

En los cuatro casos se alcanzaron coeficientes de determinación $R^2 \geq 0.92$ y errores medios relativos menores al 2 %. Esta precisión permitió reemplazar simulaciones detalladas por modelos subrogados ligeros sin sacrificar fiabilidad, lo cual fue clave para reducir los tiempos de cómputo y posibilitar exploraciones exhaustivas de frentes de Pareto o resoluciones deterministas de gran escala.

Los algoritmos genéticos (NSGA-III y NSGA-II) demostraron capacidad para trazar frentes de Pareto coherentes en problemas con objetivos contrapuestos, por ejemplo, maximizar ganancia económica y minimizar emisiones o consumo de agua, mientras que los métodos deterministas garantizaron convergencia en problemas de gran dimensionalidad, validando la versatilidad del marco propuesto frente a distintas clases de formulación.

El Planteamiento 1 evidenció que la integración de ciclos térmicos modelados con RNA puede simultáneamente elevar la WHR y reducir las emisiones de GEI sin comprometer

la rentabilidad ni la generación de empleo. El Planteamiento 2 mostró que el incremento indiscriminado de pozos no conlleva beneficios proporcionales en producción de gas y sí un consumo de agua dulce significativamente mayor, subrayando la necesidad de decisiones basadas en óptimos multiobjetivo. El Planteamiento 3 probó que es posible reutilizar hasta un 29 % del agua de fractura con ganancias anuales competitivas, mientras que el Planteamiento 4 confirmó ventajas ambientales frente a tecnologías convencionales y anticipó la magnitud de residuos FV, habilitando estrategias de gestión circular.

Aun cuando cada planteamiento presentó características operativas y conjuntos de restricciones distintos, el procedimiento de (i) entrenamiento y validación de modelos aprendizaje automático, (ii) reformulación en lenguaje de optimización y (iii) resolución multiobjetivo se mantuvo inalterado. Ello demuestra que el marco es escalable a sistemas de mayor tamaño (por ejemplo, redes energéticas regionales o parques eco-industriales) y transferible a otros dominios donde intervengan procesos con comportamientos no lineales, datos heterogéneos y múltiples métricas de desempeño.

7.1. Trabajos futuros

Recuperación de calor residual: El Planteamiento 1 demostró la viabilidad de integrar ciclos SRC/ORC/AR mediante modelos RNA; sin embargo, la eficiencia global puede incrementarse si se optimiza simultáneamente la HEN. Futuras investigaciones deberían: (i) formular un modelo integrado que incluya la superestructura HEN y los motores térmicos, y (ii) emplear optimizadores deterministas híbridos que garanticen la selección conjunta de topología, áreas y condiciones operativas de los intercambiadores de calor.

Producción de paneles fotovoltaicos: Los resultados del Planteamiento 4 evidencian ventajas económicas y ambientales de la manufactura nacional, pero también la generación futura de 812 kt de residuos. Futuras investigaciones deberían: (i) extender el modelo para incluir recirculación interna de desperdicios (silicio, obleas, vidrio) y rutas de reciclaje externas, (ii) incorporar variables discretas que representen tecnologías de reciclaje emergentes, y (iii) analizar esquemas de economía circular aplicando indicadores de ciclo de vida (LCA) y métricas de recuperación de valor.

Fin de vida y LCA: Una extensión natural es integrar módulos LCA dinámicos en los cuatro planteamientos, evaluando impactos desde la extracción de materias primas hasta la disposición final. Esto permitirá optimizar decisiones considerando no sólo costos y emisiones operativas, sino también huellas de carbono y agua a lo largo de todo el ciclo de vida.

Gemelos digitales y control en línea: El enfoque desarrollado puede acoplarse a plataformas de gemelo digital para monitorear procesos en tiempo real, actualizar modelos RNA con datos operativos y ejecutar optimización recursiva (*closed-loop*). Sin embargo, se requerirá estrategias de *transfer learning* y gestión de datos industriales de alta frecuencia.

Redes neuronales gráficas (GNN): Muchos sistemas energéticos (redes de calor, parques eco-industriales, cadenas de suministro) presentan topologías naturales en grafo. Sustituir MLP por GNN puede capturar de forma más eficiente dependencias espaciales y de flujo, mejorando la generalización y reduciendo el tamaño de los modelos.

Optimización cuántica: La creciente disponibilidad de *quantum annealers* y algoritmos híbridos cuántico-clásicos abre la posibilidad de resolver MINLP de gran tamaño,

particularmente aquellos con variables binarias provenientes de reformulaciones de RNA. Explorar optimización cuántica para subproblemas discretos (p.ej., selección de intercambiadores, ubicación de pozos) podría reducir tiempos de cómputo y ampliar la escala abordable.

Estas líneas ofrecen un camino prometedor para profundizar en la convergencia entre inteligencia artificial, optimización avanzada y sostenibilidad, consolidando el papel del enfoque híbrido en el diseño de futuros sistemas energéticos circulares, inteligentes y de gran escala.

CONTRIBUCIONES

ARTÍCULOS PUBLICADOS

López-Flores Francisco Javier, Alejandra Pérez-Nava, J Betzabe González-Campos y José M. Ponce-Ortega (2025). Analysis of an electrically responsive drug delivery system for ibuprofen on-demand release using a machine learning approach. *Computers in Biology and Medicine*. **Factor de Impacto: 7.0**

Bannih Teresita Zamora-Aguirre, **López-Flores Francisco Javier**, César Ramírez-Márquez, Fabricio Napoles Rivera y José M. Ponce-Ortega (2025). Modeling and optimization of an integrated system for the green dimethyl ether production: process simulation, modeling with artificial intelligence, and optimization methods. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*. **Factor de Impacto: 3.9**

Carlos Antonio Padilla-Esquivel, **Francisco Javier López-Flores**, Luis Germán Hernández-Perez, Eusiel Rubio-Castro, José M. Ponce-Ortega (2025). Optimizing green urea production: integration of process simulation, artificial intelligence, and sustainable technologies. *Journal of Cleaner Production*. **Factor de Impacto: 10.0**

Morales Mora M. A, Soriano Ramírez V.A, López Rivera P., **López-Flores Francisco Javier**, Nolasco Hipólito C., Gonzalo Angeles Ordóñez, y Martínez Delgadillo S.A. (2024). Narrative policy framework to evaluate clean energy certificates in shaping decarbonization strategies: evidence from Mexico's electricity sector. *Climatic Change*. **Factor de Impacto: 4.9**

Francisco Javier López-Flores, Alma Yunuen Raya-Tapia, César Ramírez-Márquez, José M. Ponce-Ortega (2025). Exploring clustering tools in process systems engineering: innovations, applications, and future directions. *Chemical Engineering Research and Design*. **Factor de Impacto: 3.9**

Yazmin Trejo-Jerónimo, **Francisco Javier López-Flores**, César Ramírez-Márquez, Luis Fernando Lira-Barragán, José M. Ponce-Ortega (2025). Greenhouse gas emissions clustering: advancing net zero goals through data-driven analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **Factor de Impacto: 3.9**

López-Flores Francisco Javier, César Ramírez-Márquez, J. Betzabe González-Campos y José M. Ponce-Ortega (2025). Machine learning for predicting and optimizing physicochemical properties of deep eutectic solvents: review and perspectives.

Industrial & Engineering Chemistry Research. Seleccionado como portada de revista*. **Factor de Impacto: 3.9**

Francisco Javier López-Flores, Maritza E Cervantes-Gaxiola, Oscar M Hernández-Calderón, José M. Ponce-Ortega, Jesús Raúl Ortiz-del-Castillo, Eusiel Rubio-Castro (2025). Comprehensive Crop Allocation Model: Balancing Profitability, Environmental Impact, and Occupational Health. *Computers & Chemical Engineering*. **Factor de Impacto: 3.9**

Alma Yunuen Raya-Tapia, **Francisco Javier López-Flores**, Javier Tovar-Facio y José M. Ponce-Ortega (2025). Comparative framework of representative weeks selection methods for the optimization of power systems. *Computers & Chemical Engineering*. **Factor de Impacto: 3.9**

López-Flores Francisco Javier, César Ramírez-Márquez, y Ponce-Ortega José M. (2024). Process Systems Engineering Tools for Optimization of Trained Machine Learning Models: Comparative and Perspective. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. Seleccionado como portada de revista*. **Factor de Impacto: 3.9**

López-Flores Francisco Javier, César Ramírez-Márquez, Eusiel Rubio-Castro y José M. Ponce-Ortega (2024). Solar photovoltaic panel production in Mexico: A novel machine learning approach. *Environmental Research*. **Factor de Impacto: 7.7**

López-Flores Francisco Javier, Jorge Andrés Ornelas-Guillén, Alejandra Pérez-Nava, J Betzabe González-Campos y José M. Ponce-Ortega (2024). Data-driven machine learning approach for modeling the production and predicting the characteristics of aligned electrospun nanofibers. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. Seleccionado como portada de revista*. **Factor de Impacto: 3.9**

López-Flores Francisco Javier, Xate Geraldine Sánchez-Zarco, Eusiel Rubio-Castro y José M. Ponce-Ortega (2023). A machine learning approach for optimizing the water-energy-food-ecosystem nexus: a resilience perspective for sustainability. *Environment, Development and Sustainability*. **Factor de Impacto: 4.9**

López-Flores Francisco Javier, Luis F. Lira-Barragán, Eusiel Rubio-Castro, Mahmoud M. El-Halwagi y José M. Ponce-Ortega (2023). Hybrid machine learning-mathematical programming optimization approach for gas production and optimal water

management in shale gas fields. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. **Factor de Impacto: 7.3**

Serrano-Areválo Tania Itzel, **López-Flores Francisco Javier**, Alma Yunuen Raya-Tapia, César Ramírez-Márquez y José M. Ponce-Ortega (2023). Optimal expansion for a clean power sector transition in Mexico based on predicted electricity demand using deep learning scheme. *Applied Energy*. **Factor de Impacto: 11.0** (autor de correspondencia)

López-Flores Francisco Javier, Luis F. Lira-Barragán, Eusiel Rubio-Castro, y José M. Ponce-Ortega. (2023). Development and evaluation of deep learning models for forecasting gas production and flowback water in shale gas reservoirs. *Industrial Chemistry and Engineering Research*. **Factor de Impacto: 3.8** (Portada de Revista)

Raya-Tapia Alma Yunuen, **López-Flores Francisco Javier** y Ponce-Ortega José M. (2023) Incorporating deep learning predictions to assess the water-energy-food nexus security. *Environmental Science and Policy*. **Factor de Impacto: 5.2**

López-Flores Francisco Javier, Hernández-Pérez Luis Germán, Lira-Barragán Luis F., Rubio-Castro Eusiel, y Ponce-Ortega José María. (2022). Optimal profit distribution in interplant waste heat integration through a hybrid approach. *Energy*. **Factor de Impacto: 9.0**

López-Flores Francisco Javier, Rubio-Castro Eusiel, y Ponce-Ortega José María. (2022) Incorporating machine learning for thermal engines modeling in industrial waste heat recovery. *Chemical Engineering Research and Design*. **Factor de Impacto: 3.9**

Solis-Jacome Alejandro, **López-Flores Francisco Javier** y Ponce-Ortega José María. (2022) Reusing Industrial Gaseous Emissions for Syngas Production. *Process Integration and Optimization for Sustainability*. **Factor de Impacto: 2.5**

López-Flores Francisco Javier, Hernández-Pérez Luis Germán, Luis F. Lira-Barragán, Rubio-Castro Eusiel, y Ponce-Ortega José M. (2021). A Hybrid Metaheuristic-Deterministic Optimization Strategy for Waste Heat. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. **Factor de Impacto: 3.9**

ARTÍCULOS BAJO REVISIÓN

- Alma Yunuen Raya-Tapia, **Francisco Javier López-Flores**, Antonio Sánchez, Mariano Martín, César Ramírez-Márquez, José M. Ponce-Ortega (2025). Power-to-X and the green chemical revolution: a review on sustainable energy carriers and synthetic fuels. Enviado a *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **Factor de Impacto: 3.9**
- Hugo Eduardo Medrano-Minet, **Francisco Javier López-Flores**, Fabricio Nápoles-Rivera, Eusiel Rubio-Castro, José M. Ponce-Ortega (2025). Sustainable optimization of chosyn networks in eco-industrial systems via a hybrid machine learning and mathematical programming approach. Enviado a *Computers and Chemical Engineering*. **Factor de Impacto: 3.9**
- López-Flores Francisco Javier**, Raya-Tapia Alma Yunuen, Nagib Alexey Zetina-Alonso, y José M. Ponce-Ortega (2024). Machine-learning–based cancer patient segmentation and hospital resource optimization. Enviado a *Data & Knowledge Engineering*. **Factor de Impacto: 2.7**
- Thelma Posadas Paredes, **Francisco Javier López-Flores**, César Ramírez-Márquez, José M. Ponce-Ortega (2025). Clustering-based classification of global natural resource utilization patterns for sustainable development. Enviado a *Chemical Engineering Research and Design*. **Factor de Impacto: 3.9**
- Morales-Mora M.A., Caballero-Castrillo M.A., Pérez-Ramírez Y.I., González-Díaz A. y **López-Flores Francisco Javier** (2025). A multi-scale assessment of Mexico's energy metabolism and sustainability (2005–2023) based on dynamic energy budget theory. Enviado a *Energy for Sustainable Development*. **Factor de Impacto: 4.9**

LIBROS PUBLICADOS

Francisco Javier López-Flores, Rogelio Ochoa-Barragán, Alma Yunuen Raya-Tapia, César Ramírez-Márquez, and José María Ponce-Ortega. **Machine Learning Tools for Chemical Engineering: Methodologies and Applications**. 17 Capítulos, Editorial Elsevier (ISBN: 9780443290589). Publicado. <https://shop.elsevier.com/books/machine-learning-tools-for-chemical-engineering/lopez-flores/978-0-443-29058-9>

Alma Yunuen Raya-Tapia, **Francisco Javier López-Flores**, César Ramírez-Márquez, and José María Ponce-Ortega. **Machine Learning and Clustering for a Sustainable Future: Applications in Engineering and Environmental Science**. 10 Capítulos, Editorial Springer. Será publicado en septiembre del 2025. <https://link.springer.com/book/9783032038753>

Tania Itzel Serrano-Arévalo, Xate Geraldine Sánchez-Zarco, **Francisco Javier López-Flores**, César Ramírez-Márquez, and José María Ponce-Ortega. **Strategies for an Energy Transition: Planning for a Sustainable Future**. Editorial Elsevier. (ISBN: 9780443341113). Será publicado en octubre del 2025. <https://shop.elsevier.com/books/strategies-for-an-energy-transition/serrano-arevalo/978-0-443-34111-3>

Apéndice I. Portadas de las Publicaciones



Analysis of an electrically responsive drug delivery system for ibuprofen on-demand release using a machine learning approach

Francisco Javier López-Flores ^{a, *}, Alejandra Pérez-Nava ^{c, *},
Diana Katherine Córdor-Arboleda ^{d, *}, Bernardo A. Frontana-Uribe ^c,
J. Betzabe González-Campos ^b, José María Ponce-Ortega ^{a, *}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Múgica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio V1, Morelia, Mich, 58060, Mexico

^b Biological and Chemical Research Institute, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Múgica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio V1, Morelia, Mich, 58060, Mexico

^c Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, 04510, CDMX, Mexico

^d Escuela de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Yachay Tech, Hda. San José S/N y Proyecto Yachay, Urcuquí, 100119, Ecuador

ARTICLE INFO

Keywords:

Drug delivery systems
Ibuprofen
Machine learning
PEDOT
Data-driven analysis

ABSTRACT

This study aims to optimize ibuprofen-based Drug Delivery Systems (DDSs) to address their short half-life and enhance controlled release. Advanced machine learning techniques, including Artificial Neural Networks, Random Forest, and CatBoost, were employed to model and predict the behavior of DDSs under various experimental conditions. Ibuprofen was loaded into a conducting polymer matrix based on PEDOT, and drug release was achieved through programmable electrical stimuli. Data preprocessing included the normalization of numerical variables and One-Hot Encoding for categorical variables. The predictive models, optimized via Optuna for hyperparameter tuning, demonstrated robust performance, achieving high R^2 values for the released concentration and kinetic parameters of release. SHAP (SHapley Additive exPlanations) analysis provided insights into the influence of key variables, such as diffusion time, stimulus type, and electrode type, that significantly impacted drug release behavior. The results demonstrated the potential of machine learning to optimize DDSs, improving predictive accuracy and enabling personalized and efficient approaches. This study contributes to the design of more advanced and sophisticated pharmaceutical formulations aligned with the principles of personalized medicine and on-demand delivery.

1. Introduction

Since ancient times, humans have consumed drugs for a variety of purposes. Consequently, the need for controlled drug administration became evident over the years. Before the advent of controlled drug delivery, there was no capacity to manage drug kinetics, which is of paramount importance today for the delivery of chemotherapeutics, anti-inflammatory drugs, psychotropic agents, and hormonal therapies [1].

Many health conditions require personalized treatment because, even when different individuals may be suffering from the same disease, every individual is unique. Differences in living environments, consumption habits, and stages of an illness often require tailored treatments [2]. This is why the need for personalized medicine has recently

emerged, aiming to address these factors and customize treatment for each individual.

Controlled Drug Delivery Systems (DDSs) have emerged as one of the most promising applications for human health, and this area of research is constantly evolving. A DDS is a technological formulation designed to precisely control a drug's disposition in the body, aiming to achieve the best possible therapeutic results by transporting bioactive compounds to a host system. Significant efforts have been made to develop new DDSs to improve the performance of therapeutic agents while reducing toxicity and side effects. To provide a more regulated and targeted distribution, advanced DDSs have recently been developed using cutting-edge technology. The release mechanism and rate of each DDS are determined by their unique physical, chemical, and morphological characteristics, which, in turn, affect their affinities for various drug

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.combiomed.2025.110642>

Received 8 November 2024; Received in revised form 7 April 2025; Accepted 17 June 2025

0010-4825/© 2025 Elsevier Ltd. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.



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

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

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

ARTICLE INFO

Keywords:

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

ABSTRACT

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

1. Introduction

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

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

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

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

* Corresponding author.

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

<https://doi.org/10.1016/j.cep.2025.110363>

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

Available online 29 May 2025

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

Optimizing green urea production: Integration of process simulation, artificial intelligence, and sustainable technologies

Carlos Antonio Padilla-Esquivel ^{a,*,}, Francisco Javier López-Flores ^{a,*,},
Luis Germán Hernández-Pérez ^{b,*,}, Eusiel Rubio-Castro ^{c,*,}, José María Ponce-Ortega ^{a,*,}

^a Department of Chemical Engineering, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia, Mich, 58060, Mexico

^b Aspen Technology, Inc., Corporate Research Group, Av. Paseo de la Reforma 412 Suite 10, Cuauhtémoc, CDMX, 06600, Mexico

^c Chemical and Biological Sciences Department, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sinaloa, 80000, Mexico

ARTICLE INFO

Handling Editor: Kathleen Aviso

Keywords:

Green fertilizers
Process simulation
Artificial neural networks
Carbon capture
Sustainability

ABSTRACT

The production of fertilizers, such as urea, faces significant environmental challenges due to greenhouse gas emissions associated with conventional processes. This study addresses these problems by integrating innovative technologies such as electrolysis to generate green hydrogen, carbon capture, green ammonia and the use of renewable energies. In addition, an approach combining artificial neural networks (ANN) and multi-objective optimization techniques is proposed to design efficient and sustainable green urea production processes. Using simulations in Aspen Plus and sensitivity analysis, databases were generated to train ANN models with optimized hyperparameters, achieving accurate representations of the systems. These models were used in optimized schemes using deterministic, metaheuristic and Bayesian methods. The results highlight the ability of ANN to predict with high accuracy variables such as production, costs and energy consumption, with coefficients of determination above 0.99. The optimal solutions balanced sustainability and costs, showing that deterministic methods are more robust and faster, while metaheuristic and Bayesian techniques achieved higher yields, albeit with higher costs. This approach not only demonstrates the technical and economic feasibility of green urea, but also establishes an innovative framework for sustainability in chemical processes using artificial intelligence and advanced optimization.

1. Introduction

Soil quality is a topic belonging to study areas of the United Nations Environmental Systems and Societies (Oke et al., 2024), it is an essential aspect for a region or even a country, and even more so for its inhabitants, as it significantly impacts daily life (Devkota et al., 2024). Fertilizers are essential in modern agriculture (Huang et al., 2024), as they are used to increase food production (Özkan et al., 2024) in response to population growth. Among nutrients, macronutrients play a crucial role in crop development and productivity. In particular, nitrogen (N) and phosphorus (P) are the main elements that promote plant growth and improve crop yields (Wen et al., 2024). To cope with the increasing food demand, farmers have started to use large amounts of fertilizers, such as urea and diammonium phosphate (Divyangkumar and Panwar, 2024). From synthetic fertilizers to organic options such as compost and manure, each type offers specific benefits depending on the

needs of plants and the preferences of farmers and gardeners (Reuland et al., 2024). Indeed, the extensive production, access, and effective use of fertilizers in recent decades have enabled a significant increase in global food production (Milani et al., 2022). However, the fertilizer manufacturing process currently relies on fossil fuels such as natural gas and coal as the main feedstock (Zhang et al., 2021), generating large amounts of greenhouse gases.

Urea, one of the most widely used fertilizers worldwide (Yeasmin et al., 2024), stands out as a chemical compound of great value due to its ease of granulation and transportation, both in bulk and in bags, without risk of explosion. Highly soluble in water and leaving no saleable residue when dissolved, which is particularly suited for agricultural applications. With one of the highest levels of nitrogen content among solid fertilizers, urea is a highly effective option in agriculture, recognized for its efficiency and relatively low environmental impact compared to other alternatives (Vafakish et al., 2024).

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2025.145371>

Received 4 January 2025; Received in revised form 19 February 2025; Accepted 23 March 2025

Available online 24 March 2025

0959-6526/© 2025 Elsevier Ltd. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.



Narrative policy framework to evaluate clean energy certificates in shaping decarbonization strategies: evidence from Mexico's electricity sector

Miguel A. Morales Mora^{1,5} · Vicente A. Soriano Ramírez¹ · Patricia López Rivera¹ · Francisco Javier López-Flores² · Cirilo Nolasco Hipólito³ · Gonzalo Angeles Ordóñez¹ · Sergio A. Martínez Delgadillo⁴

Received: 31 July 2024 / Accepted: 19 April 2025
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature B.V. 2025

Abstract

This article introduces a unique approach to analyzing the performance of tradable green certificates in Mexico using the Narrative Policy Framework (NPF) and Capacity Factor (CF). The Clean Energy Certificates (CEC) aim to reduce CO_{2e} emissions within the National Electricity System (NES). The research evaluates the operating conditions of the photovoltaic and wind subsectors from 2019 to 2023 by examining the relationship between the CF, the backup of conventional plants to manage intermittency, and their impact on the CEC. The NPF uses multiple dimensions and levels to assess the policy consistency and decarbonization goals of the NES. Additionally, it compares official CO₂ emissions reduction projections with the indirect emissions from backup plants, based on real electricity generation data from both subsectors. The findings reveal the need for fossil fuel-based backup power plants to compensate for the shortfall in CF, which generates indirect emissions. Therefore, the reliance on fossil-based backup plants underscores the necessity for a new and more sustainable method of CEC allocation. This method would be crucial in influencing decarbonization targets, particularly as intermittent generation in the energy matrix continues to rise. In summary, the expected delivery of 198,041 GWh between 2019 and 2023 by the PV and wind subsectors fell short of expectations, with only 159,188 GWh generated and delivered. Furthermore, the metabolic rate for both subsectors stood at 0.8 to 201.3 kgCO₂/MWh for PV and 83.7 to 129 kgCO₂/MWh for wind, respectively, surpassing the threshold for clean energy between three and four years out of five analyzed.

Keywords Capacity factor · Clean energy certificates · Tradable green certificates · National electricity system · Narrative policy framework · Renewable energy

Extended author information available on the last page of the article

Published online: 25 April 2025

Springer



Exploring clustering tools in process systems engineering: Innovations, applications, and future directions

Francisco Javier López-Flores , Alma Yunuen Raya-Tapia , César Ramírez-Márquez, José María Ponce-Ortega

Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Mich. 58060, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Clustering
Process Systems Engineering
Optimization
Data analysis
Anomaly detection

ABSTRACT

Clustering techniques play a transformative role in optimizing complex systems across various domains, including Process Systems Engineering (PSE), healthcare, and network analysis. In PSE, these methods enhance fault detection, renewable energy systems, supply chain management, and chemical process optimization by simplifying large datasets, improving decision-making, and enabling sustainable solutions. Beyond industrial applications, clustering supports medical diagnostics and epidemiological studies, as well as social and technological network optimization, enabling better information flow and resource allocation. Researchers have expanded clustering applications by integrating them with other advanced machine learning techniques and real-time data analytics, fostering resilience and adaptability in dynamic environments. Despite these advancements, challenges persist, particularly in managing computational demands and developing adaptive, real-time clustering frameworks that address evolving landscapes. This review critically examines state-of-the-art clustering methodologies across these fields, comparing their contributions, limitations, and future potential. The discussion highlights interdisciplinary approaches and ethical considerations, emphasizing clustering's role in tackling global challenges such as sustainability and energy transitions. Finally, the paper outlines emerging trends that will shape clustering applications in next-generation systems, digitalization, and artificial intelligence-driven optimization strategies.

1. Introduction

Chemical engineering focuses on the production of products essential to everyday life. These processes depend on design and operational models for decision-making with economic, environmental, and safety implications. Mathematical modeling plays a crucial role in designing and understanding chemical processes. Thus, process systems engineering (PSE) emerged within chemical engineering, where its traditional focus was on the economic viability of chemical process systems, encompassing energy efficiency and productivity (Reis and Saraiva, 2021). Beginning at the scale of individual equipment, it has expanded to encompass plant and supply chain scales in recent decades (Vassiliadis et al., 2024). However, PSE has also contributed to small scales (i.e., at the level of atoms, molecules, and particles), which has resulted in molecular design methods (Bakshi, 2019).

PSE has become a recognized, autonomous, and well-established scientific discipline. PSE includes mathematical modeling and

simulation, process synthesis and design, new product design or product improvement, operations scheduling and planning, monitoring, diagnostics, prediction, process control, and optimization, among other system analysis activities (Reis and Saraiva, 2021). As a multidisciplinary field, PSE integrates applied mathematics, computer science (algorithms), and engineering to address complex problems at different scales and assist in decision-making (Biegler and Grossmann, 2004). This has positioned PSE as a field of great interest in academia and an effective tool in industry.

Over the years, new environmental, economic, social, safety, and sustainability objectives have shaped the chemical industry (Ortiz-Espinoza et al., 2019; Teh et al., 2019). For example, industries have focused on decreasing environmental impact by improving the management and operation of chemical process plants (Khan et al., 2023; Pan et al., 2016; Vooradi et al., 2018). Thus, PSE provides a scientific basis and computational tools to address these current and future challenges (Grossmann and Harjunkoski, 2019). Researchers and

Greenhouse Gas Emission Clustering: Advancing Net Zero Goals through Data-Driven Analysis

Published as part of *Industrial & Engineering Chemistry Research* special issue "Net Zero Technologies".

Yazmin Trejo-Jerónimo, Francisco Javier López-Flores, César Ramírez-Márquez, Luis Fernando Lira-Barragán, and José María Ponce-Ortega*

 Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c04884>

 Read Online

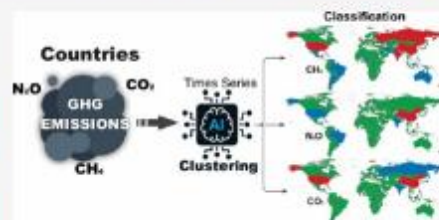
ACCESS |

 Metrics & More

 Article Recommendations

 Supporting Information

ABSTRACT: This study analyzes greenhouse gas (GHG) emissions (carbon dioxide (CO₂), methane (CH₄), and nitrous oxide (N₂O)) from 108 countries (1990–2020) using k-means clustering with a Dynamic Time Warping (DTW) metric, identifying high, medium, and low emission clusters based on total and per capita emissions. CO₂, driven by fossil fuel use in energy, industry, and transportation, dominates emissions, with China and the U.S. accounting for 44% globally. Methane from agriculture and fossil fuel extraction disproportionately affects India, Brazil, and Turkmenistan, while N₂O, linked to nitrogen-based fertilizers, shows high per capita contributions from Australia, New Zealand, and parts of Africa. Tailored mitigation strategies addressing regional and sector-specific drivers are critical, emphasizing energy transitions, sustainable agriculture, and land-use management. Clustering provides policymakers with a framework for targeted climate action, aligning emission profiles with solutions. Future research should focus on sectoral emissions, real-time monitoring, and mitigation impacts to advance global net-zero goals.



1. INTRODUCTION

The current climate crisis is one of the greatest challenges facing humanity.¹ Governments and international organizations have implemented measures and policies aimed at transitioning to a low-carbon economy, primarily to mitigate greenhouse gas (GHG) emissions from the energy sector. In 2023, global carbon dioxide (CO₂) emissions reached a record 36.8 gigatons, representing a 0.9% increase from the previous year, with the energy sector responsible for 75% of these emissions.²

The Paris Agreement, signed during COP21 in 2015, set the goal of limiting global temperature increases to below 2 °C compared to preindustrial levels, with an aspiration to limit warming to 1.5 °C.^{3,4} However, without concrete and urgent measures to achieve this target, the Earth faces catastrophic and irreversible consequences. These include the depletion of natural resources, loss of biodiversity, and threats to human existence and global health.⁵ The World Health Organization has identified climate change as the greatest threat to global public health, as its effects exacerbate existing vulnerabilities and create new health risks.⁶

A major driver of global warming is the continued reliance on fossil fuels, including coal, oil, and natural gas, which account for over 75% of global GHG emissions and nearly 90% of all CO₂ emissions.^{7–9} Despite significant growth in renewable energy adoption, fossil fuels still supply over 80% of the world's energy, underscoring the urgent need for a transition toward cleaner and more sustainable energy systems.¹⁰

This energy transition involves profound changes in the production and consumption of energy to reduce dependence on fossil fuels.¹¹ It emphasizes adopting renewable energy sources, improving energy efficiency, and electrifying key sectors such as transportation and industry.¹² Achieving "Net Zero" emissions, balancing GHG emissions produced with those removed from the atmosphere, has become a critical objective for global sustainability efforts. Addressing this challenge will require transformative action on an unprecedented scale. Recent studies indicate that achieving international climate targets will necessitate tripling installed renewable energy capacity and doubling energy efficiency by 2030.^{13,14} These measures are critical not only to mitigate GHG emissions but also to ensure sustainable and secure energy supplies for future generations.

Among the GHGs contributing to climate change, carbon dioxide (CO₂), methane (CH₄), and nitrous oxide (N₂O) are the most significant.^{15,16} The Global Warming Potential (GWP) metric measures the heat-trapping capability of these gases relative to CO₂, which has a GWP of 1.¹⁷ CH₄ is approximately 25 times more effective at trapping heat over 100 years, while

Received: December 22, 2024

Revised: February 25, 2025

Accepted: March 20, 2025

Machine Learning for Predicting and Optimizing Physicochemical Properties of Deep Eutectic Solvents: Review and Perspectives

Francisco Javier López-Flores, César Ramírez-Márquez, J. Betzabe González-Campos, and José María Ponce-Ortega*

Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c03610>

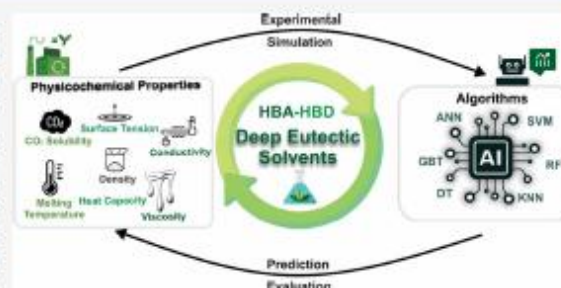
Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

ABSTRACT: This review explores the application of machine learning in predicting and optimizing the key physicochemical properties of deep eutectic solvents, including CO₂ solubility, density, electrical conductivity, heat capacity, melting temperature, surface tension, and viscosity. By leveraging machine learning, researchers aim to enhance the understanding and customization of deep eutectic solvents, a critical step in expanding their use across various industrial and research domains. The integration of machine learning represents a significant advancement in tailoring deep eutectic solvents for specific applications, marking progress toward the development of greener and more efficient processes. As machine learning continues to unlock the full potential of deep eutectic solvents, it is expected to play an increasingly pivotal role in revolutionizing sustainable chemistry and driving innovations in environmental technology.



1. INTRODUCTION

The 12 Principles of Green Chemistry, established by Anastas and Warner in 1998, guide the development of safer chemical processes.¹ The eighth principle stresses reducing harmful substances. Organic solvents, used in industries such as pharmaceuticals and paints, often evaporate, leading to air pollution and the formation of ground-level ozone, which is hazardous to life.² Many of these solvents are also toxic and carcinogenic.³

Deep Eutectic Solvents (DES), introduced by Abbot et al.⁴ are gaining recognition as sustainable and environmentally friendly alternatives to hazardous organic solvents. They are characterized by their low toxicity, biocompatibility, ease of preparation, and cost-effectiveness. DES align with green chemistry principles, as they are nonflammable, nonvolatile, thermally stable, and overall safer to use compared to conventional solvents. DES have found applications in a wide range of fields (Figure 1). They are employed in chemical synthesis,⁵ catalysis,⁶ CO₂ capture,⁷ natural compound extraction,⁸ biotechnology,⁹ electrochemistry,¹⁰ pharmaceutical processing,^{11,12} nanotechnology,¹³ and process separation.¹⁴ These versatile applications underscore the broad utility of DES, especially in developing sustainable and eco-friendly processes due to their green character. This is of special interest because they can contribute to taking action to achieve some of the 17 Sustainable Development Goals (SDGs) established by the United Nations (UN) in the 2030 Agenda for Sustainable



Figure 1. DES applications.

Received: September 23, 2024

Revised: November 20, 2024

Accepted: December 13, 2024

Comprehensive crop allocation model: Balancing profitability, environmental impact, and occupational health

Francisco Javier López-Flores^{b,*}, Maritza E. Cervantes-Gaxiola^a,
Oscar M. Hernández-Calderón^a, José M. Ponce-Ortega^b, Jesús Raúl Ortiz-del-Castillo^a,
Eusiel Rubio-Castro^{a,*}

^a Chemical and Biological Sciences Department, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sinaloa 80000, Mexico

^b Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58060, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Agriculture
Crop allocation
Sustainability
Water integration
Environmental impact
Occupational health

ABSTRACT

This paper presents an innovative mathematical optimization model, formulated as a Mixed-Integer Nonlinear Programming problem, for sustainable crop allocation across a set of available parcels. The model not only maximizes the economic benefits derived from crop sales but also optimizes the use of water and fertilizers, minimizes environmental impact, and assesses health and safety risks to workers using the Process Route Health Index, adapted from the chemical industry. The adaptation methodology is designed and presented step-by-step to highlight its applicability and relevance in the agricultural context. The integration of mass networks for the use, reuse, and regeneration of water and fertilizers allows for significant optimization of resources, reducing both operating costs and environmental waste. A case study involving the allocation of four crops across 12 parcels over three sowing cycles demonstrates the model's applicability under different scenarios, evaluating profits, Eco-indicator 95, water footprint, and occupational health. The results obtained demonstrate the model's ability to balance economic benefits with environmental sustainability and labor safety.

1. Introduction

Agriculture, one of the oldest and most essential economic activities worldwide, is crucial for income and employment in many regions. However, its intensive exploitation, excessive use of agrochemicals, and high water demand make it a high-risk activity for both human health and the environment (Kharel et al., 2022; Chataut et al., 2023). Developing methodologies and technologies that evaluate agriculture from a comprehensive perspective is imperative, taking into account not only economic benefits but also risks to human health and environmental impact to promote sustainability.

Water is essential for agriculture, supporting crop growth and yield (Djaman et al., 2022; Qiu et al., 2023), especially when used with fertilizers. Flood irrigation remains the most common method due to its simplicity, low cost, and high productivity, particularly in hot and windy climates where drip and sprinkler systems incur higher losses and energy costs (Kenny et al., 2009; Sketch et al., 2020). In the face of water scarcity, alternatives such as sustainable agriculture have been explored to conserve resources, maintain a healthy environment, and ensure

economic viability (Velten et al., 2015). Strategies have been developed to enhance irrigation systems, aiming to reduce water consumption in agriculture (Biazin et al., 2012; Moges et al., 2011; Rubio-Castro et al., 2016; Hipólito-Valencia et al., 2021). Additionally, methodologies have been implemented to quantify environmental impact through nitrogen uptake, using only the water necessary to maximize production (Núñez-López, 2018).

Furthermore, farmers annually face the challenge of deciding what to plant in each parcel, considering factors such as crop succession, expected prices, water availability, resources, labor, production costs, and climatic conditions (Moglew, 1962; Randall et al., 2024). In this context, annual crop planning has gained prominence in the literature (Adewumi and Chetty, 2017). Current methodologies focus on identifying the optimal combination of parcels and crops, thereby maximizing the use of available resources (Bachinger and Zander, 2007; López-Mata et al., 2016; Mellaku et al., 2018). Besides, some works have been addressed the multi-objective optimization method for crop planning (Adekanmbi and Olugbara, 2015), the consideration of economies of scale and supply-demand relationships for crop allocation (Adewumi et al., 2017), the maximization of the net agricultural benefit taking into

* Corresponding author.

E-mail address: erc@uas.edu.mx (E. Rubio-Castro).

<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108996>

Received 24 September 2024; Received in revised form 1 December 2024; Accepted 30 December 2024

Available online 31 December 2024

0098-1354/© 2025 Elsevier Ltd. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.



Comparative framework of representative weeks selection methods for the optimization of power systems

Alma Yunuen Raya-Tapia^a, Francisco Javier López-Flores^{a,*}, Javier Tovar-Facio^b,
José María Ponce-Ortega^{a,*}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, 58060, Mexico

^b Faculty of Chemical Sciences, Universidad Autónoma de Chihuahua, Circuito Universitario S/N, Campus UACH II, Chihuahua, Chih. 31125, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:
Clustering
Time
Periods
Power system
K-means
Regions

ABSTRACT

Considering the reliability and flexibility to supply future energy demand, power grid planning models are composed of mathematical formulations that represent investments in the installation and operation of generation and storage systems to reduce costs and environmental impacts. However, these can be computationally intractable to solve for many periods. Hence, in this paper, three methods are compared to obtain representative weeks in terms of their accuracy in representing the net load duration curve (NLDC) of the 5 regions that compose the Mexican peninsular electric system and in the objective function domain of a proposed model. The selection methods used for representative weeks were k-means with Euclidean metric, k-means with dynamic time warping (DTW) metric and a combinatorial method. It was observed that the combinatorial method obtained a root mean square error (RMSE) in the representation of 2.80, followed by k-means with DTW metric with 3.21 and finally k-means with Euclidean metric with 5.49. K-means with DTW metric requires about 17 and 70 times more computational time than the combinatorial method and k-means with Euclidean metric, because it had no restrictions on the amount of deformation allowed. In terms of the objective function, the combinatorial method had higher total system costs with $\$ 4.4274 \times 10^{10}$, while they were 0.1 % and 0.2 % lower in k-means with DTW and k-means with Euclidean metric, respectively. These lower costs are due to underestimation of the system cost, as the methods do not adequately reflect operational situations and generate less expensive scenarios than are actually the case.

1. Introduction

Due to efforts to decarbonize energy systems, policies have been established with the objective of increasing renewable energy generation in the coming decades. However, a disadvantage of renewable energies is their intermittency influenced by weather conditions, which leads to mismatches with load demands, challenging the security of the power system by negatively affecting the reliability and economic efficiency of operations (Li et al., 2024). Energy storage can be a key component in the decarbonization of electricity systems by supporting the integration of renewable energy generation technologies because it smoothes the variability of wind and solar generation, avoiding shortages and taking advantage of surplus electricity events to be used at times of lower cost or critical need (de la Cruz and Castellanos, 2024).

Among the various models used for power system planning, unit

commitment (UC) models are short-term models with high temporal resolution (hourly or sub-hourly) that determine the best dispatch schedule taking into account a number of technological and system-wide constraints (Heuberger et al., 2017). Generation expansion planning (GEP) models are long-term investment models that ignore small changes in the time scale to perform calculations over a reasonable period (Tejada-Arango et al., 2018).

Historically, dispatchable thermal technologies dominated power systems, which allowed planning models to have longer time periods and ignore short-term operational constraints with minimal impact on the quality of results (Lara et al., 2018). However, today with the increasing proportion of wind and solar generation in the power system, it is vitally important to consider hourly operational decisions to assess the flexibility of the system (Albadi and El-Saadany, 2010; Islam and Roy, 2023). In this way, it is possible to evaluate the balance systematically and rigorously between long-term investment decisions and

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108985>

Received 30 September 2024; Received in revised form 16 December 2024; Accepted 16 December 2024

Available online 17 December 2024

0098-1354/© 2024 Elsevier Ltd. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.

Process Systems Engineering Tools for Optimization of Trained Machine Learning Models: Comparative and Perspective

Francisco Javier López-Flores, César Ramírez-Márquez, and José María Ponce-Ortega*



Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00632>



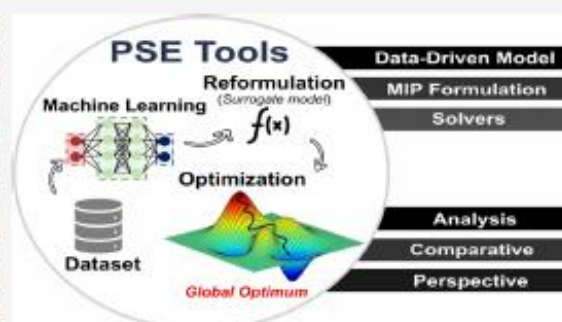
Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

ABSTRACT: This article studies the relevance of innovative Process Systems Engineering (PSE) tools that can reformulate trained machine learning models that are driven by advances in computational technologies, showcasing a pivotal transformation in chemical engineering methodologies. The article also delves into how trained machine learning models are reformulated and optimized to refine engineering decisions as it provides a novel analysis of tools to develop machine learning models by reformulating them, and optimizing them in PSE, thus highlighting their significance and applications. It offers a comprehensive comparison of several cutting-edge tools, including JANOS, MeLOn, ENTMOOT, reluMIP, OptiCL, Gurobi Machine Learning, OMLT, and PySCIPOpt-ML, highlighting their distinct abilities for performance and decision-making. Furthermore, challenges related to the explicit formulation of the main machine learning models are discussed. Guidance is provided to select the appropriate tool according to users' requirements. Additionally, a comparative study of the tools is presented using a case study to analyze and compare the size and type of formulations, the optimal solution, and the computation times.



1. INTRODUCTION

The advancement in Process Systems Engineering (PSE), through the incorporation of computational tools and machine learning, marks a significant breakthrough in chemical engineering beginning with the foundational contributions of Sargent (1972)¹ and expanded by researchers such as Janković et al. (2024).² PSE has broadened its focus from merely optimizing and managing chemical processes to embracing the new possibilities afforded by digital technology. This development includes the adoption of new computational tools such as mathematical optimization methods that are drastically changing the PSE landscape.³ Among these changes, the introduction and application of surrogate models emerge as critical innovations which have significantly improved the decision-making process in engineering.

Machine learning has the potential to replace the complexity of traditional approaches such as thermodynamic,^{4–6} phenomenological,^{7,8} and thermohydraulic^{9,10} models, as well as the ability to build data-driven models that cannot be described or modeled by traditional approaches.^{11–13} In PSE, machine learning has been applied to different areas^{14–16} such as flowsheet analysis, planning, scheduling, supply chain, control, and optimization process.

Although surrogate models have been engineered to be efficient and computationally lightweight approximations of more complex physical systems,¹⁷ models trained by machine

learning have also been called data-driven surrogate models.¹⁸ Their ability to mimic the behavior of more complex systems is transforming how engineers approach process design, analysis, and optimization. The advancement and implementation of data-driven surrogate models in PSE have been thoroughly recognized.^{19–21} Moreover, data-driven surrogate models represent a significant improvement in accuracy and performance in the modeling of complex processes, including those that were not previously able to be addressed. The abilities of these surrogate models have led to more precise results, which in turn improves decision-making and benefits sustainability.

Due to multiple problems (such as language incompatibility) associated with the simultaneous implementation of trained machine learning models (data-driven surrogate models) within mathematical optimization frameworks, the number of developments and researches related to this problem have increased. Therefore, several novel open-source tools have recently been created that facilitate the optimization of rigorously trained

Received: February 17, 2024

Revised: July 9, 2024

Accepted: July 10, 2024



Solar photovoltaic panel production in Mexico: A novel machine learning approach

Francisco Javier López-Flores^a, César Ramírez-Márquez^a, Eusiel Rubio-Castro^b, José María Ponce-Ortega^{a,*}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Múgica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio VI, Morelia, Mich., 58060, Mexico

^b Chemical and Biological Sciences Department, Universidad Autónoma de Sinaloa, Av. de las Américas S/N, Culiacán, Sinaloa, 80010, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Solar photovoltaic
Sustainability
Machine learning
Artificial neural network
Multi-objective optimization
Renewable energy

ABSTRACT

This study examines the potential for widespread solar photovoltaic panel production in Mexico and emphasizes the country's unique qualities that position it as a strong manufacturing candidate in this field. An advanced model based on artificial neural networks has been developed to predict solar photovoltaic panel plant metrics. This model integrates a state-of-the-art non-linear programming framework using Pyomo as well as an innovative optimization and machine learning toolkit library. This approach creates surrogate models for individual photovoltaic plants including production timelines. While this research, conducted through extensive simulations and meticulous computations, unveiled that Latin America has been significantly underrepresented in the production of silicon, wafers, cells, and modules within the global market; it also demonstrates the substantial potential of scaling up photovoltaic panel production in Mexico, leading to significant economic, social, and environmental benefits. By hyperparameter optimization, an outstanding and competitive artificial neural network model has been developed with a coefficient of determination values above 0.99 for all output variables. It has been found that water and energy consumption during PV panel production is remarkable. However, water consumption ($33.16 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kWh}$) and the emissions generated ($1.12 \times 10^{-6} \text{ TonCO}_2/\text{kWh}$) during energy production are significantly lower than those of conventional power plants. Notably, the results highlight a positive economic trend, with module production plants generating the highest profits (35.7%) among all production stages, while polycrystalline silicon production plants yield comparatively lower earnings (13.0%). Furthermore, this study underscores a critical factor in the photovoltaic panel production process which is that cell production plants contribute the most to energy consumption (39.7%) due to their intricate multi-stage processes. The blending of Machine Learning and optimization models heralds a new era in resource allocation for a more sustainable renewable energy sector, offering a brighter, greener future.

1. Introduction

The world's ever-growing need for energy, coupled with the alarming effects of climate change, has brought renewable energy sources to the forefront as a critical element in achieving sustainable development. As of today, humanity's objective encompasses not only the generation of energy but also the ability to do it in a manner that exhibits environmental responsibility thus ensuring a sustainable future. Solar energy stands out as a key solution to meet these imperatives (Fuso Nerini et al., 2018). Among the various solar-based technologies for energy production, silicon-based solar cells have firmly established themselves as one

of the most promising and viable options (A. Rahman et al., 2022).

Currently, solar energy technology ranks as the third most widely used renewable energy source at a global scale only behind hydroelectric and wind power. Electricity generated from fossil fuels results in CO₂ emissions that range from 400 g to 1000 g of CO₂ eq/kWh (Shin et al., 2017), whereas the emissions from silicon-based solar panels range from 98.3 to 149.3 g CO₂ eq/kWh, with an average value of 123.8 g CO₂ eq/kWh (Mehedi et al., 2022). Therefore, photovoltaic (PV) technology represents promising opportunities to meet the world's future energy demands in an environmentally friendly manner. Over the last decades, the acceptance of solar PV has grown significantly, establishing a strong

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.118047>

Received 26 September 2023; Received in revised form 29 November 2023; Accepted 24 December 2023

Available online 29 December 2023

0013-9351/© 2023 Elsevier Inc. All rights reserved.

Data-Driven Machine Learning Approach for Modeling the Production and Predicting the Characteristics of Aligned Electrospun Nanofibers

Francisco Javier López-Flores, Jorge Andrés Ornelas-Guillén, Alejandra Pérez-Nava, J. Betzabe González-Campos, and José María Ponce-Ortega*

Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00075>

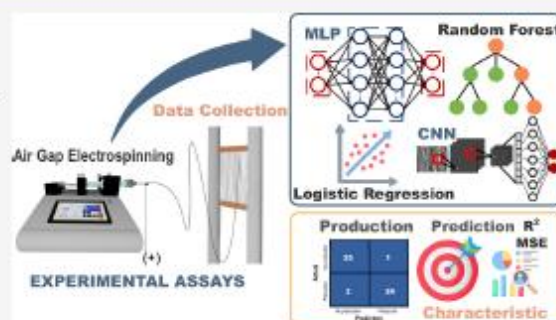
Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

ABSTRACT: The generation of electrospun nanofibrous with controlled size, shape, and spatial orientation is crucial for the development of biomedical and electronic devices. Aligned nanofibers are advantageous over random nanofibers because control of the spatial orientation can improve electrical and optical properties and play an important role in tissue engineering applications, impacting the mechanical and biological properties of the scaffold. Therefore, different machine learning models have been developed to predict the optimal production of electrospun-aligned poly(vinyl alcohol) nanofibers. The database was obtained by multiple assays using the airgap electrospinning setup and varying the voltage, the distance between the tip and collector, and polymer concentration. Binary classification models were developed, which can predict the production or not of aligned nanofibers. In addition, regression models have been developed to predict the orientation, angle, and diameter of the nanofibers when there is a production of nanofibers. A convolutional neural network has also been developed. It was concluded that for the binary classification, the artificial neural network performs better predictions obtaining an accuracy equal to 0.94, and for the validation set, an accuracy equal to 0.90 and an F1-score equal to 0.87 were obtained.



INTRODUCTION

Nanofiber structures have become increasingly attractive and gained much interest due to their unique properties; namely, highly porous interconnected tridimensional microstructure, high surface area to volume ratio, and lightweight, in addition to the physicochemical properties inherent to the nature of the components which integrate the nanofibers as such. These features are ideal for use in applications as varied as tissue engineering, sensor development, filtration, energy storage, and functional materials.¹

Electrospinning is the most commonly used technique for the production of nanofiber mats due to it being a simple, low-cost, and versatile methodology to produce controllable nanofiber structures with tunable functional properties. In particular, the production of poly(vinyl alcohol) (PVA) nanofibers is of great importance, since it is a nontoxic, hydrophilic, and biocompatible polymer widely used in tissue engineering applications and between the many polymer-based scaffolds.² PVA-based scaffolds are known to provide mechanical stability, flexibility, and slow degradation kinetics compared to that made of natural polymers.³ In addition, PVA-aligned electrospun nanofibers have been shown to fit specific

alignments, porosity, and architectures, while maintaining their flexibility and biological features.⁴

Randomly oriented nanofibers are produced using the traditional electrospinning configuration; nonetheless, aligned nanofibers are advantageous over random nanofibers because it has been demonstrated that the control of spatial orientation can improve electrical and optical properties and play an important role in tissue engineering applications, impacting the mechanical and biological properties of the scaffold;⁵ besides, it can enhance drug delivery by altering release performance.⁶ Fiber alignment can be achieved by the airgap electrospinning configuration; nonetheless, the production of aligned nanofiber mats involves the control of several experimental parameters that must be carefully adjusted to achieve a spinnable regime and, at the same time, control size, alignment, quality, and

Received: January 6, 2024

Revised: March 11, 2024

Accepted: March 18, 2024



A machine learning approach for optimizing the water-energy-food-ecosystem nexus: a resilience perspective for sustainability

[Francisco Javier López-Flores](#)¹ · [Xate Geraldine Sánchez-Zarco](#)¹ ·
[Eusiel Rubio-Castro](#)² · [José María Ponce-Ortega](#)¹

Received: 16 August 2023 / Accepted: 20 November 2023
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature B.V. 2023

Abstract

Recently, several optimization strategies and models have been presented to analyze water-energy-food interconnections. In this study, a novel optimization model has been proposed to introduce the term water-energy-food-ecosystem nexus integrated with machine learning tools. This approach incorporates conventional and unconventional technologies for resource generation, use, and distribution, taking into account life cycle analysis, nexus security, and economic benefit as objectives toward sustainability. Additionally, it confirms the possibility of exploiting machine learning technologies to predict with high accuracy the results of complex MINLP models without requiring explicit indications as a support function for informed decision-making. The artificial neural network has been evaluated, optimized, and compared in a case study located in Mexico to show the applicability of the proposed approach. The nexus has been evaluated to determine the resilience of the system in the years 2020, 2022, 2025, 2030, and 2040. The results obtained when investigating the accuracy of the neural network model revealed a high prediction accuracy for the three objective functions, with values above 0.99 for the coefficient of determination and below 0.0007 for the mean square error. The 2020 compromise solution presents better trade-offs among the three objectives than the ones reported in the literature. Finally, by 2040, a significant increase in the environmental impact of 50% over the emissions generated in 2022 is found. While the security index indicates a severe scenario for water scarcity in the future.

Keywords Water-energy-food-ecosystem nexus · Machine learning · Life cycle assessment · Artificial neural network · Sustainability · Resilience

Hybrid Machine Learning-Mathematical Programming Approach for Optimizing Gas Production and Water Management in Shale Gas Fields

Francisco Javier López-Flores, Luis Fernando Lira-Barragán, Eusiel Rubio-Castro, Mahmoud M. El-Halwagi, and José María Ponce-Ortega*



Cite This: <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c00569>



Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

Supporting Information

ABSTRACT: This paper presents a novel mathematical programming approach that simultaneously incorporates a mixed-integer nonlinear programming formulation with machine learning models to determine the operating conditions, gas production, and optimal water management for the completion phase in shale gas fields. The dataset for the development of an artificial neural network model has been collected from the Eagle Ford Texas formation. The total cumulative gas production and flowback water generated in shale gas wells are selected as output variables. The mathematical optimization model considers machine learning models for each well, mass balances, treatment, storage, reuse, and disposal options as well as well location selection and associated costs and revenues from the sale of the shale gas produced. A case study has been used to illustrate the benefits of the proposed approach. The compromise solution offers a water consumption per produced energy of 6.71 L/GJ in addition to the fact that 27% of the total fracture water required can be obtained by reusing the flowback water with attractive economic indicators.

KEYWORDS: machine learning, flowback water, shale gas production, hydraulic fracturing, artificial neural network, mixed-integer nonlinear programming



INTRODUCTION

The use of natural gas is a major option for satisfying the global needs for energy and feedstocks.^{1,2} In addition to its abundant reserves, natural gas releases lower amounts of greenhouse gas emissions in comparison with the rest of the fossil fuels.^{3,4} Shale gas is a type of unconventional natural gas that can be an effective complement for renewable energies toward a sustainable energy transition.^{5,6} Moreover, shale gas is abundant worldwide with a recoverable resource quantity equal to 7257 Tcf as well as relatively low exploitation costs.⁷ The main innovations that have achieved efficient large-scale exploitation of shale gas are horizontal drilling, hydraulic fracturing (fracking), fracture proppant to maintain fluid conductivity in fractures during production and the development of hydraulic fracturing fluids that drive proppant particles into fractures (prevent microbial growth and minimize formation damage).^{8–10} One of the primary disadvantages of hydraulic fracturing is that it requires enormous amounts of freshwater and produces highly polluted flowback water streams, which may lead to the contamination of surface water and groundwater.^{11,12} The substantial use of freshwater and discharge of wastewater in shale gas production necessitate the develop-

ment of effective water management strategies. Several optimization methodologies/strategies have been developed for the efficient use of available water and reuse of flowback water. Specifically, Yang et al.¹³ developed a stochastic mixed-integer linear programming (MILP) model under uncertain water availability to minimize transportation, treatment, storage, and disposal costs. Elsayed et al.¹⁴ developed an optimization approach for using membrane distillation in treating flowback water. Bartolomew and Mauter¹⁵ presented a multiobjective MILP model to assess the trade-offs between financial and environmental costs, and human health for water acquisition, transport, storage, and treatment. Guerra et al.¹⁶ proposed a mathematical formulation that simultaneously considers water management and shale gas supply chain design and planning. Lira-Barragán et al.¹⁷ introduced a mathematical programming formulation that considers the temporal

Received: January 30, 2023

Revised: March 30, 2023



ACS Publications

© XXXX American Chemical Society

A

<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c00569>
ACS Sustainable Chem. Eng. XXXX, XXX, XXX–XXX

Optimal expansion for a clean power sector transition in Mexico based on predicted electricity demand using deep learning scheme

Tania Itzel Serrano-Arévalo, Francisco Javier López-Flores^{*}, Alma Yunuen Raya-Tapia, César Ramírez-Márquez, José María Ponce-Ortega

Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Múgica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio VI, Morelia, Mich 58060, Mexico

HIGHLIGHTS

- Optimal planning for the strategic energy transition.
- Incorporating machine learning in forecasting scenarios.
- Simultaneous economic and environmental assessment.
- Case study for the Mexican energy system.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Keywords:

Power sector transition
Deep learning
Optimal planning
Renewable energy
Emissions reduction

ABSTRACT

This study presents a mathematical programming approach for the strategic planning of electrical energy production. The proposed approach seeks the optimal selection of conventional and clean technologies and their production capacity in a given period. In addition, it aims to assess the amount of emissions generated and water consumption, without neglecting economic aspects. The planning considered in this study extends from 2020 to 2040, where the approach considers the implementation of deep learning models to forecast the future electricity demand of each year through historical data; thus obtaining a more precise energy configuration. Fossil fuels and biofuels are used as primary energy in the operation of different technologies. Therefore, both economic and environmental objectives are considered. The economic objective function determines the minimum total discounted cost, which encompasses energy production, operation, maintenance, primary energy, and investment costs. While the environmental objective focuses on reducing water consumption and emissions. Through Pareto curves, using the ϵ -constraint method, the proposed model determines the trade-offs between the total discounted cost and the CO_2 emissions generated. The Mexican electrical system is presented as a specific case study with real production data and available resources. The results show that it is possible to reduce the total discounted cost by up to 11.02%, while in environmental aspects, up to 28.27% in emissions and up to 20.23% in water consumption, achieving that the power produced by renewable energies increases progressively until reaching 70% of the energy demand in 2040, where the system is committed to implementing clean technologies

^{*} Corresponding author.

E-mail address: francisco.lopez@umich.mx (F.J. López-Flores).

<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2023.121597>

Received 12 September 2022; Received in revised form 10 July 2023; Accepted 13 July 2023

0306-2619/© 2023 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Development and Evaluation of Deep Learning Models for Forecasting Gas Production and Flowback Water in Shale Gas Reservoirs

Francisco Javier López-Flores, Luis Fernando Lira-Barragán, Eusiel Rubio-Castro, Mahmoud M. El-Halwagi, and José María Ponce-Ortega*

Cite This: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2023, 62, 6434–6447

Read Online

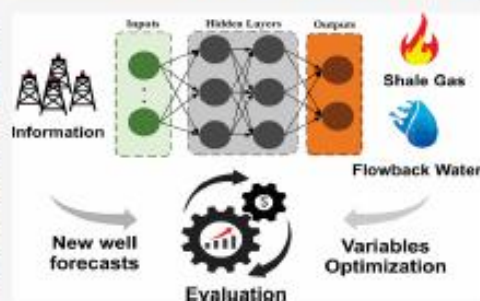
ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

Supporting Information

ABSTRACT: In this paper, deep learning models are developed based on a multilayer perceptron to forecast 12 month cumulative produced shale gas and 90 day produced flowback water using a study area within the Eagle Ford Formation as a database. These models can help decision-makers have important references when drilling new wells. Latitude, longitude, true vertical depth, lateral longitude, total proppant, and total fracture water are used as input variables. The trained models are evaluated in a study area within the Burgos Basin to analyze the energy benefits, freshwater consumption, and flowback water produced through well drilling for the first time in Mexico. A non-dominated sorting genetic algorithm is used for the minimization of total freshwater consumption and maximization of cumulative produced gas. The multilayer perceptron models showed good results. The coefficient of determination and the mean absolute error of the single-output models remained above 0.93 and below 3.00 for the validation set, respectively.



INTRODUCTION

The growing demand for energy consumption and the depletion of conventional resources such as oil, coal, and natural gas have led to a great interest in the search for new alternative energy resources.¹ Nowadays, shale gas has attracted interest as it is proven to be abundant worldwide^{2,3} and it has environmental and economic advantages and disadvantages over conventional resources.⁴ Shale gas is an unconventional natural gas that exists in an adsorbed gas or free gas state within shale formations with low porosity and high organic content.⁵ Future trends indicate a considerable growth in natural gas production due to increased shale gas yields.^{6,7} Efficient exploitation of shale gas has been facilitated by the development of hydraulic fracturing operations and horizontal drilling, which expand hydrocarbon drainage maximizing production.⁸ However, shale gas operations involve at the same time environmental implications because hydraulic fracturing generally requires excessive amounts of freshwater and produces large volumes of water containing hazardous compounds, high-salinity wastewater, and other chemicals.⁹ For this reason, the optimal management of flowback water is a complicated task to carry out due to its variability in both volumes and hazardous substance content.

Due to the importance, potential, and problems of shale gas, several investigations have been carried out for the optimal distribution, planning, and production of shale gas considering transportation, pipelines, processing units, and the sale of shale

gas.^{10–12} Methodologies have also been presented for the optimal management of flowback water^{13–15} considering both environmental and economic aspects of the different uses of flowback water^{16,17} such as reuse, storage, treatment, and disposal.^{18,19} In addition, modeling shale gas wells for production forecast is an extremely complicated task to perform through the methodologies (phenomenological and first principles) of conventional gas resources.²⁰ Hence, to overcome the limitations of traditional methods, researchers have developed alternative models for shale gas production forecasts. For example, Zou et al.²¹ presented an integrated probabilistic framework by combining Monte Carlo Simulation with a gas transport model of a horizontal well with multifracturing stages to assess shale gas resources in China. Wang et al.²² introduced a hybrid model called metabolic nonlinear gray model–autoregressive integrated moving average model (MNGM-ARIMA), which uses a linear model to correct nonlinear predictions considering a monthly gas production database from the US. Wang et al.²³ proposed an

Received: November 24, 2022

Revised: March 17, 2023

Accepted: March 17, 2023

Published: March 29, 2023





Incorporating deep learning predictions to assess the water-energy-food nexus security

Alma Yunuen Raya-Tapia, Francisco Javier López-Flores, José María Ponce-Ortega *

Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán 58060, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Forecasts
Water consumption
Nexus
Energy security
Food production
Sustainability

ABSTRACT

Water, energy and food (WEF) are experiencing significant stress due to an increase in their demand and scarcity, and this situation will worsen in the coming years. For this reason, this paper proposes a WEF nexus index, which consists of 6 indicators of availability and accessibility to measure water, energy and food security. The proposed methodology, based on indicators and a scoring system, allows decision-makers to evaluate the nexus security and implement actions to achieve the sustainability of the three resources by 2050. Models based on deep learning are developed for the projection of the production and consumption of resources for the case study of Mexico. The Long Short-Term Memory and Gated Recurrent Unit networks are considered. Projections for 2050 resulted in water consumption of 121,679 hm³, electricity generation of 772,486 GWh and electricity consumption of 932,764 GWh, while food production will reach 351,802,080 tons. This represents an increase of 51.7% in water consumption, 180.33% in electricity generation, 254.54% in electricity demand and 103.05% in food production, compared to 2010. The WEF nexus index has an upward trend because the accessibility of water and energy will increase by 2050, but their availability will decrease; the opposite is the case in the food sector, where availability will increase and access will decrease.

1. Introduction

Water, energy and food (WEF) are vital resources for human well-being, poverty reduction and sustainable expansion (FAO, 2014a). These resources are intrinsically connected, which means that the WEF Nexus applies to different connections such as water-energy (WE), energy-food (EF), food-water (FW) and water-energy-food (WEF) (Endo et al., 2018; Salam et al., 2017). For example, water is used in irrigation for food production, as well as in power generation (Li and Singh, 2019), while energy is required to produce, transport and distribute food, as well as to extract, pump, lift, collect, transport and treat water (FAO, 2014b). However, the challenge of securing sufficient water, energy and food to meet human needs is increasingly threatened (Li et al., 2020) due to climate change, population growth, urbanization, and economic development (Niva et al., 2020; Wu et al., 2021). As the population grows and urbanization develops, so does the demand for resources (Cui et al., 2022). Therefore, the water-energy-food nexus (WEF) approach was specifically designed to address the resource insecurity of the nexus and improve livelihoods through efficient management of WEF resources (Wolde et al., 2022). Since the 2011 Bonn conference, the

concept of the water-energy-food nexus (WEF Nexus) and its relationship to the Sustainable Development Goals (SDGs), particularly Goals 2, 6 and 7 (Stephan et al., 2018), have gained considerable attention from the public and academia (Van Vuuren et al., 2019). This has led to the growing need for integrative assessments and the development of numerous tools for the WEF Nexus, the water evaluation and planning system WEAP (SEI, 2014), the Long-range Energy Alternatives Planning (LEAP) system (SEI, 2013), Multi-Scale Integrated Analysis of Social and Ecosystem Metabolism MuSIASEM (FAO, 2013), WEF Nexus Tool 2.0 that evaluates scenarios and identifies resource allocation strategies (Mohtar and Daher, 2016), among others (IRENA, 2015). There are inherent limits to single-sector modeling tools; however, they can be linked together offline (Molajou et al., 2021).

There are qualitative methods (Dalla Fontana et al., 2020; Tilt et al., 2022) and quantitative methods to study the nexus, such as physical models, benefit-cost analysis (BCA), integrated indices (Xu and Yao, 2022), and optimization management models (Endo et al., 2015). However, previously developed WEF nexus analytical tools have not been well adopted, as they are generally complex or difficult to replicate, and sector integration to establish the linkages between sectors is unclear or not established at all (Albrecht et al., 2018; McGrane et al.,

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.envsci.2023.03.010>

Received 16 December 2022; Received in revised form 14 February 2023; Accepted 10 March 2023

1462-9011/© 2023 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Optimal Profit Distribution in Interplant Waste Heat Integration through a Hybrid Approach

Francisco Javier López-Flores^a, Luis Germán Hernández-Pérez^a,
Luis Fernando Lira-Barragán^a, Eusiel Rubio-Castro^b, José M. Ponce-Ortega^{a,*}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Edificio VI, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Mich., Mexico

^b Chemical and Biological Sciences Department, Universidad Autónoma de Sinaloa, Av. de las Américas S/N, Culiacán, Sinaloa, 80010, Mexico

ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 May 2021

Received in revised form

4 April 2022

Accepted 10 April 2022

Available online 28 April 2022

Keywords:

Allocation schemes

Interplant heat integration

Metaheuristic optimization

Deterministic optimization

Waste heat

Thermal engines

ABSTRACT

Resource allocation among stakeholders has not been addressed equitably in interplant heat integration that simultaneously considers thermal engines. Therefore, this paper presents an approach to interplant heat integration and thermal engines that considers the equitable allocation of resources among the different industrial plants involved. A hybrid solution procedure based on iteration between metaheuristic optimization and deterministic optimization is used to solve the problem. Thermal engines (steam Rankine, organic Rankine, and absorption refrigeration cycles) are modeled through a process simulator and optimized using a link between MS Excel®-Visual Basic for Applications®-Aspen Plus®. Using the deterministic approach, a mathematical model is proposed to determine the individual revenues of the involved industrial plants. The incorporation of the Social Welfare, Rawlsian Welfare, and Nash schemes is proposed to find the fairest revenue allocation. A case study with four different scenarios is shown to evaluate the proposed approach. The results show different solutions for thermal engines, as well as different revenue distributions under the allocation schemes. Optimal operating conditions are found for thermal engines. Also, it is shown that for this case study the Rawlsian scheme provides a fair allocation of revenue and costs.

© 2022 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Energy integration allows recovering waste/excess heat emitted by industrial plants [1]. Energy integration is especially important for the reduction of wasted energy, where the benefits can be in the economic (reduction of energy costs) and environmental (reduction of associated emissions) points of view. Heat exchanger networks (HENs) help to reduce the utility demands of industrial plants by integrating process streams [2–5]. In addition, a set of techniques have been developed to allow the simultaneous heat integration of HENs and thermal engines [6–9]. For further energy

integration, interplant heat integration [10] has been considered. In this context, Hipolito-Valencia et al. [11] proposed a mathematical formulation that allows intraplant and interplant heat exchange for the process streams, in addition to considering the integration of a steam Rankine cycle (SRC), an organic Rankine cycle (ORC), and an absorption refrigeration cycle (AR). Bade and Bandyopadhyay [12] proposed a linear programming formulation to minimize the thermal oil flow rate considering the minimum total utility requirements for multiple indirectly integrated plants as a constraint. Wang et al. [13] proposed a combined heat integration method, which combines features of the direct method (process flows) and the indirect method (intermediate fluid loops). Song et al. [14] proposed a novel concept called interplant shifted composite curve to determine the maximum heat recovery potential feasible through the indirect integration of interplant heat and the minimum flow rate of an intermediate loop medium used. Chang et al. [15] presented a methodology for simultaneous optimization for heat integration of multiple plants using intermediate fluid circles, finding the best design with the lowest total annual cost (TAC),

Abbreviations: CF, Crossover Fraction; CONOPT, Continuous Nonlinear Optimizer; DICOPT, Discrete and Continuous Optimizer; GAMS, General Algebraic Modelling System; GHGE, Greenhouse gas emissions; I-MODE, Improved Multi-Objective Differential Evolution Algorithm; MF, Mutation Fraction; MNG, Maximum Number of Generations; PS, Population Size; TLS, Taboo List Size; TR, Taboo Radius.

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).

<https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.124001>



Incorporating machine learning for thermal engines modeling in industrial waste heat recovery

Francisco Javier López-Flores^a, Eusiel Rubio-Castro^b,
José María Ponce-Ortega^{a,*}

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Ciudad Universitaria, Francisco J. Mujica S/N, Edificio V1, 58060 Morelia, Michoacán, Mexico

^b Chemical and Biological Sciences Department, Universidad Autónoma de Sinaloa, Av. de las Américas S/N, Culiacán, Sinaloa 80010, Mexico

ARTICLE INFO

Article history:

Received 18 January 2022

Received in revised form 2 March 2022

Accepted 11 March 2022

Available online 17 March 2022

Keywords:

Machine learning

Multilayer perceptron

Waste heat recovery

Pinch analysis

Organic Rankine cycle

Absorption refrigeration cycle

ABSTRACT

This paper proposes a methodology for efficient, accurate, and sustainable waste heat recovery, where the energy needs of an industrial plant allow the installation of thermal engines. In this methodology, pinch analysis, mathematical equations, machine learning models, and an optimization algorithm are combined for the first time. To satisfy the industrial requirements, the selected thermal engines are the steam Rankine cycle, the organic Rankine cycle, and the absorption refrigeration cycle, which are modeled by using multilayer perceptron neural networks. The Non-dominated Sorting Genetic Algorithm-III is used to solve the optimization problem. Moreover, multi-objective trade-offs between economic, environmental, and social aspects are studied. A case study is presented to show the applicability of the proposed methodology. The multilayer perceptron models of the thermal engines were created with high accuracy. Furthermore, the results show that with this methodology it is possible to find the optimal operating conditions of thermal engines and solutions that allow the use of different fuels to fulfill the three objective functions.

© 2022 Institution of Chemical Engineers. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The gradual increase in energy demand attributed to overpopulation, urbanization, and the operation/production of some industrial processes has raised the need for new approaches to aid in the efficient use of energy (Sharma et al., 2020). Currently, waste heat recovery (WHR) is one of the most important ways to conserve energy, improve economic benefits and reduce greenhouse gas emissions (Su et al., 2021); waste heat is the energy potential of technological processes, waste, by-products, and intermediate products

that are produced during the processes and are not used in the process itself (Jouhara et al., 2018).

Since Linnhoff and Hindmarsh (1983) developed the pinch analysis to optimize heat recovery in industrial processes, different methodologies for optimal energy utilization have been proposed. Some works have focused on optimizing the configuration of heat exchanger networks (HEN) to reduce utilities and minimize associated costs (Kang and Liu, 2019; Wang et al., 2020a, 2020b, 2020c). Furthermore, other methodologies have concentrated on the use of thermal engines to recover low-grade waste heat as well as to obtain different benefits (Oluleye and Smith, 2016; Omar et al., 2019; Alkilaibi and Lior, 2021). For example, Lira-Barragán et al. (2014) presented an approach that considered power generation, refrigeration, and heating cycles simultaneously integrated with HEN, considering economic, environmental, and social

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (F. J. López-Flores).
<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.03.022>



Reusing Industrial Gaseous Emissions for Syngas Production

Alejandro Solís-Jacome¹ · Francisco Javier López-Flores¹ · José María Ponce-Ortega¹

Received: 23 March 2022 / Revised: 23 May 2022 / Accepted: 26 May 2022 / Published online: 4 June 2022
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2022

Abstract

This work presents a comprehensive study of industrial plants, focused on the application of optimization methods that allow the coupling of a syngas production process. Different processes have been reported for the production of syngas; however, these methodologies are based on the use of fossil resources such as natural gas. In this work, the use of CO₂ and H₂S waste streams emitted by industrial plants to obtain high value-added products and through the application of optimization methods to reduce the associated costs and significantly improve the performance in the production of syngas is proposed. The study of the syngas production process using residual streams of CO₂ and H₂S as raw material is proposed based on a simulation in the Aspen Plus® software. First, a factorial experimental design and an ANOVA analysis are proposed to determine the decision variables of the process; in addition, the process is energetically improved through energy integration. Then, the proposal contemplates the implementation of a metaheuristic optimization method for the syngas production process, considering a multi-objective approach in such a way that a technical–economic–environmental optimization of the process can be carried out. The results showed that the temperatures of the reactors were the most significant factors in the process; this is thanks to the design of experiments and the ANOVA implemented. Furthermore, through the metaheuristic optimization technique, an energy saving of 21% was achieved and a decrease in the total CO₂ emissions of 8%, which will benefit the implementation of the process.

Keywords Industrial waste streams · Syngas production · Multi-objective optimization · Valorization of gaseous emissions

Introduction

The increase in CO₂ emissions in the environment has contributed to global warming; these emissions are constantly increasing due to the dependence of world economies on fossil fuels as an energy source (Bayer and Aklin 2020). Atmospheric pollution is one of the main focuses of attention in the scientific community, as it is a precursor to global warming and, in turn, to climate change suffered by the planet. In general, the industry has a high energy consumption, which translates into the generation of high amounts of by-products associated with greenhouse gases (Wang and Zhang 2022; Nong et al. 2021). These harmful gases are composed of 80% CO₂. Specifically, in 2019, a 2% growth in CO₂ emissions was reported, reaching a total of 36.8 Gt per

year, being the most representative volume of emissions. Of this amount, the industrial sector is responsible for 60–75% of its production due to activities related mainly to the ignition of organic material and fossil fuels (Tan et al. 2019; Wang et al. 2019).

This situation has motivated the development of different green techniques and methodologies focused on the production of renewable energies such as wind (Peng et al. 2021), hydraulic (Xiao et al. 2022), and solar (Almutairi et al. 2022), among others. However, currently, the largest amount of electrical energy is obtained from fossil fuels and this trend may continue for more than 50 years (Wang et al. 2019). In this sense, the technology for capturing and storing CO₂ to prevent it from reaching the atmosphere is one of the most applicable solutions at an industrial level (Stuardi et al. 2019; Kim et al. 2018). According to the prediction of the Global Institute for Carbon Capture and Storage, 14% of the CO₂ produced worldwide must be captured to reduce the global temperature by 2 °C by 2060 and avoid irreversible damage to the planet; this way, there are necessarily more than 2500 facilities for the capture of CO₂ with capacities

✉ José María Ponce-Ortega
jose.ponce@umich.mx

¹ Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mújica S/N, Ciudad

A Hybrid Metaheuristic–Deterministic Optimization Strategy for Waste Heat Recovery in Industrial Plants

Francisco Javier López-Flores, Luis Germán Hernández-Pérez, Luis F. Lira-Barragán, Eusiel Rubio-Castro, and José M. Ponce-Ortega*



Cite This: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2021, 60, 3711–3722



Read Online

ACCESS |



Metrics & More

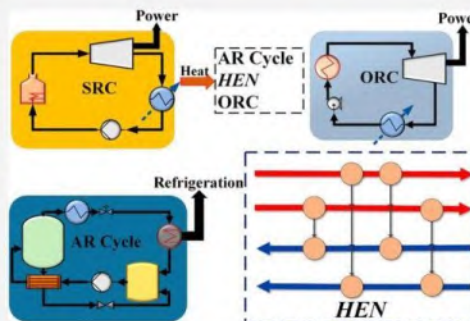


Article Recommendations



Supporting Information

ABSTRACT: This work presents a novel approach to recover industrial waste heat and to integrate it into utilities, refrigeration, and electricity production through the incorporation of heat exchanger networks and thermal engines (steam Rankine cycle, organic Rankine cycle, and absorption refrigeration cycle). The solution approach is based on the iteration between metaheuristic–deterministic optimization strategies. Metaheuristic optimization is established through the MS Excel–VBA–Aspen Plus link to obtain accurate modeling results. Deterministic optimization is implemented in the GAMS platform, where the mathematical formulation is based on a superstructure that considers all of the energy interconnections between the heat exchanger network, utilities, and thermal engines. Furthermore, economic, environmental, and social targets are evaluated. A case study is presented to show the applicability of the proposed methodology. The operating conditions obtained are presented (working fluid flow rate, temperatures, pressures, and efficiencies) for each thermal engine. Furthermore, the results show an increase in the total annual profit by 148%.



INTRODUCTION

Several industrial processes produce great amounts of energy that has no practical use and is discharged into the environment. Wasted energy is an environmental problem, which produces considerable amounts of greenhouse gas emissions, while the reuse of the produced waste heat can increase the thermal efficiency and minimize the consumption of primary energy sources (reducing the environmental impact). Waste heat is classified according to temperature ranges as high temperature (waste heat > 400 °C), medium temperature (100 °C < waste heat < 400 °C), and low temperature (waste heat < 100 °C).¹ It has been reported that, annually in the US, a total of 18.9 exajoules of waste heat is discharged by thermal power plants, where 4% of this energy corresponds to waste heat at temperatures above 90 °C.² In China, it is estimated that around 7.6 exajoules of low-temperature waste heat is lost per year.³ Additionally, the increment in fuel prices, the progressive growth in world energy demand,⁴ and the concern related to global warming establish the efficient use of energy as a very important challenge to solve in the industrial sector, which represents the highest energy consumption with more than 20% of the total.⁵ In this context, there is a set of systems available for waste heat recovery (WHR), with the purpose of reusing the residual energy and, as a consequence, to improve the overall energy efficiency. The organic Rankine cycle (ORC) is a thermodynamic cycle for the generation of electricity, which

uses an organic liquid with a high molecular weight and a low liquid–vapor phase change as a working fluid;⁶ the main application is the WHR.^{7,8} The absorption refrigeration (AR) cycle represents an efficient alternative to satisfy the refrigeration requirements in multiple processes.^{9,10} The AR cycle is driven by a low-temperature heat source.^{11,12} In addition, the desalination plant,¹³ Kalina cycle,^{14,15} and Brayton cycle^{16,17} have been used for recovering wasted heat in different processes. Figure 1 shows the necessary requirements in an industrial plant to meet the demands of heating, cooling, and electricity.

Heat exchanger networks (HENs) deal with the heat recovery between process streams; with this approach, the consumption of utilities (i.e., steam, fuels, cooling water, refrigeration) is reduced, and consequently, economic and environmental benefits are obtained.^{18–20} Since the pinch analysis was developed,^{21,22} several methods and solution approaches have been proposed.^{23–26} In this sense, different optimization techniques have been developed to involve WHR in the process industry. For example, Ponce-Ortega et al.²⁷ reported an

Received: December 24, 2020

Revised: February 18, 2021

Accepted: February 18, 2021

Published: February 28, 2021



Francisco Javier López-Flores | Rogelio Ochoa-Barragán
Alma Yunuen Raya-Tapia | César Ramírez-Márquez
José María Ponce-Ortega

MACHINE LEARNING TOOLS FOR CHEMICAL ENGINEERING

METHODOLOGIES AND APPLICATIONS



Bibliografía

- AspenTech, (2012). Aspen Icarus Reference Guide, V8; Aspen Technology Inc. <https://www.aspentech.com/en/products/pages/aspensprocess-economic-analyzer> (consultado en diciembre 2021).
- AspenTech, (2013). Aspen Physical Property System. <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-properties> (consultado en diciembre 2021)
- Ahn, Y., Kim, J., & Kwon, J. S.-I. (2020). Optimal design of supply chain network with carbon dioxide injection for enhanced shale gas recovery. *Applied Energy*, 274, 115334. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.115334>
- Alibrahim, H., & Ludwig, S. A. (2021). Hyperparameter Optimization: Comparing Genetic Algorithm against Grid Search and Bayesian Optimization. *2021 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, 1551-1559. <https://doi.org/10.1109/cec45853.2021.9504761>
- Aria, M., Cuccurullo, C., & Gnasso, A. (2021). A comparison among interpretative proposals for Random Forests. *Machine Learning with Applications*, 6, 100094. <https://doi.org/10.1016/j.mlwa.2021.100094>
- Arredondo-Ramírez, K., Ponce-Ortega, J. M., & El-Halwagi, M. M. (2016). Optimal planning and infrastructure development for shale gas production. *Energy Conversion and Management*, 119, 91-100. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.04.038>
- Babanouri, N., Karimi Nasab, S., & Sarafrazi, S. (2013). A hybrid particle swarm optimization and multi-layer perceptron algorithm for bivariate fractal analysis of rock fractures roughness. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 60, 66-74. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2012.12.028>
- Banik, A., & Sengupta, A. (2021). Scope, challenges, opportunities and future goal assessment of floating solar park. *2021 Innovations in Energy Management and Renewable Resources (52042)*, 1-5. <https://doi.org/10.1109/iemre52042.2021.9386735>
- Bartholomew, T. V., & Mauter, M. S. (2016). Multiobjective optimization model for minimizing cost and environmental impact in shale gas water and wastewater

- management. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 4(7), 3728-3735.
<https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.6b00372>
- Bartz-Beielstein, T., Branke, J., Mehnen, J., & Mersmann, O. (2014). Evolutionary Algorithms. *WIREs Data Mining and Knowledge Discovery*, 4(3), 178-195.
<https://doi.org/10.1002/widm.1124>
- Blank, J., & Deb, K. (2020). Pymoo: Multi-objective optimization in Python. *IEEE Access*, 8, 89497-89509. <https://doi.org/10.1109/access.2020.2990567>
- Bock, S., & Weis, M. (2019). A proof of local convergence for the Adam optimizer. *2019 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, 1-8.
<https://doi.org/10.1109/ijcnn.2019.8852239>
- Cavazzuti, M. (2013). Deterministic Optimization, in: Cavazzuti, M. (Ed.), *Optimization Methods: From theory to design scientific and technological aspects in mechanics*. Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 77-102. https://doi.org/10.1007/978-3-642-31187-1_4
- Ccopa Rivera, E., Da Costa, A. C., Wolf Maciel, M. R., & Filho, R. M. (2006). Ethyl alcohol production optimization by coupling genetic algorithm and multilayer perceptron neural network. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 132(1-3), 969-984.
<https://doi.org/10.1385/abab:132:1:969>
- Ceccon, F., Jalving, J., Haddad, J., Thebelt, A., Tsay, C., Laird, C. D., & Misener, R. (2022). *OMLT: Optimization & Machine Learning Toolkit* (Versión 2). arXiv.
<https://doi.org/10.48550/ARXIV.2202.02414>
- Chan, W. M., Leong, Y. T., Foo, J. J., & Chew, I. M. L. (2017). Synthesis of energy efficient chilled and cooling water network by integrating waste heat recovery refrigeration system. *Energy*, 141, 1555-1568. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.11.056>
- Chen, Y., Xu, J., & Wang, P. (2020). Shale gas potential in China: A production forecast of the Wufeng-Longmaxi Formation and implications for future development. *Energy Policy*, 147, 111868. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2020.111868>
- Crijns-Graus, W., Wild, P., Amineh, M. P., Hu, J., & Yue, H. (2022). International comparison of research and investments in new renewable electricity technologies: a

- focus on the European Union and China. *Energies*, 15(17), 6383. <https://doi.org/10.3390/en15176383>
- Cuevas Lerees, A., Muñoz-Cisneros, R., Silva-Saldivar, P., De La Rosa-R, V.H., Rivas-R, E.O., González-O, J., & Fernández-Turner, R. (2004). A New Upper Oligocene Oil Play in Southern Burgos Basin, México. <https://www.searchanddiscovery.com/pdfz/documents/2005/cuevas/images/cuevas.pdf.html>
- Daoutidis, P., Lee, J. H., Rangarajan, S., Chiang, L., Gopaluni, B., Schweidtmann, A. M., Harjunkoski, I., Mercangöz, M., Mesbah, A., Boukouvala, F., Lima, F. V., Del Rio Chanona, A., & Georgakis, C. (2024). Machine learning in process systems engineering: Challenges and opportunities. *Computers & Chemical Engineering*, 181, 108523. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108523>
- Deb, K., & Jain, H. (2014). An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, part i: solving problems with box constraints. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 18(4), 577-601. <https://doi.org/10.1109/tevc.2013.2281535>
- Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., & Meyarivan, T. (2002). A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 6(2), 182-197. <https://doi.org/10.1109/4235.996017>
- Decardi-Nelson, B., Alshehri, A. S., Ajagekar, A., & You, F. (2024). Generative AI and process systems engineering: The next frontier. *Computers & Chemical Engineering*, 187, 108723. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108723>
- Diao, C., Liu, T., Yang, Z., & Duan, Y. (2021). Comparison between deep learning and fully connected neural network in performance prediction of power cycles: Taking supercritical CO2 Brayton cycle as an example. *International Journal of Intelligent Systems*, 36(12), 7682-7708. <https://doi.org/10.1002/int.22603>
- Domínguez, A., & Geyer, R. (2017). Photovoltaic waste assessment in Mexico. *Resources, Conservation and Recycling*, 127, 29-41. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2017.08.013>

- Dong, S., Zhang, Y., He, Z., Deng, N., Yu, X., & Yao, S. (2018). Investigation of support vector machine and back propagation artificial neural network for performance prediction of the organic Rankine cycle system. *Energy*, 144, 851-864. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.12.094>
- Eckle, K., & Schmidt-Hieber, J. (2019). A comparison of deep networks with ReLU activation function and linear spline-type methods. *Neural Networks*, 110, 232-242. <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2018.11.005>
- EIA (Energy Information Administration). Trends in U.S. oil and natural gas upstream costs. (2016). <https://www.eia.gov/analysis/studies/drilling/pdf/upstream.pdf>.
- EIA (Energy Information Administration). Frequently asked questions (FAQs). <https://www.eia.gov/tools/faqs/faq.php?id=52&t=8>
- Eiben, A.E., Smith, J.E., (2015). What Is an Evolutionary Algorithm?, in: Eiben, A.E., Smith, J.E. (Eds.), Introduction to Evolutionary Computing, Natural Computing Series. Springer, Berlin, Heidelberg, pp. 25–48. https://doi.org/10.1007/978-3-662-44874-8_3
- European Commission. Joint Research Centre. (2019). *PV status report 2019*. Publications Office. <https://data.europa.eu/doi/10.2760/326629>
- Ferreira, A., Kunh, S. S., Fagnani, K. C., De Souza, T. A., Tonezer, C., Dos Santos, G. R., & Coimbra-Araújo, C. H. (2018). Economic overview of the use and production of photovoltaic solar energy in brazil. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 81, 181-191. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.06.102>
- Frischknecht, R., Itten, R., Sinha, P., De Wild-Scholten, M., Zhang, J., Heath, G., & Olson, C. (2015). *Life Cycle Inventories and Life Cycle Assessments of Photovoltaic Systems*. National Renewable Energy Laboratory (NREL). <https://doi.org/10.2172/1561526>
- Fuso Nerini, F., Tomei, J., To, L. S., Bisaga, I., Parikh, P., Black, M., Borrion, A., Spataru, C., Castán Broto, V., Anandarajah, G., Milligan, B., & Mulugetta, Y. (2017). Mapping synergies and trade-offs between energy and the Sustainable Development Goals. *Nature Energy*, 3(1), 10-15. <https://doi.org/10.1038/s41560-017-0036-5>

- Genetic Algorithm. (2019). En S. Mirjalili, *Studies in Computational Intelligence* (pp. 43-55). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-93025-1_4
- Goldberg, M., Sinclair, K., Milligan, M. (2004). Job and Economic Development Impact (JEDI) Model: A User-Friendly Tool to Calculate Economic Impacts from Wind Projects, NREL/CP-500-35953, National Renewable Energy Laboratory: Golden, CO.
- Guerra, O. J., Calderón, A. J., Papageorgiou, L. G., Sirola, J. J., & Reklaitis, G. V. (2016). An optimization framework for the integration of water management and shale gas supply chain design. *Computers & Chemical Engineering*, 92, 230-255. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2016.03.025>
- Guido, A. M. C. S. (2016). *Introduction to Machine Learning with Python*. O'Reilly Media, Inc. <https://www.oreilly.com/library/view/introduction-to-machine/9781449369880/>
- Gutiérrez-Arriaga, C. G., Abdelhady, F., Bamufleh, H. S., Serna-González, M., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2015). Industrial waste heat recovery and cogeneration involving organic Rankine cycles. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 17(3), 767-779. <https://doi.org/10.1007/s10098-014-0833-5>
- Güven, M., Bedir, H., & Anlaş, G. (2019). Optimization and application of Stirling engine for waste heat recovery from a heavy-duty truck engine. *Energy Conversion and Management*, 180, 411-424. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.10.096>
- Haghighat, F. (2021). Predicting the trend of indicators related to Covid-19 using the combined MLP-MC model. *Chaos, Solitons & Fractals*, 152, 111399. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111399>
- Han, D., Jung, J., & Kwon, S. (2020). Comparative study on supervised learning models for productivity forecasting of shale reservoirs based on a data-driven approach. *Applied Sciences*, 10(4), 1267. <https://doi.org/10.3390/app10041267>
- Han, D., & Kwon, S. (2021). Application of machine learning method of data-driven deep learning model to predict well production rate in the shale gas reservoirs. *Energies*, 14(12), 3629. <https://doi.org/10.3390/en14123629>

- Han, J., Kamber, M., & Pei, J. 1 - Introduction. In *Data Mining (Third Edition)*; Han, J., Kamber, M., Pei, J., Eds.; The Morgan Kaufmann Series in Data Management Systems; Morgan Kaufmann: Boston, (2021a); pp 1–38. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-381479-1.00001-0>
- Han, K., Song, X., & Yang, H. (2021b). The pricing of shale gas: A review. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 89, 103897. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2021.103897>
- Hart, W. E., Watson, J.-P., & Woodruff, D. L. (2011). Pyomo: Modeling and solving mathematical programs in Python. *Mathematical Programming Computation*, 3(3), 219-260. <https://doi.org/10.1007/s12532-011-0026-8>
- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning*. Springer New York. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>
- Hernández-Pérez, L. G., Lira-Barragán, L. F., & Ponce-Ortega, J. M. (2020). Hybrid multiobjective optimization using deterministic and metaheuristic techniques for flowback water reusing in hydraulic fracturing processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(34), 15298-15308. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c02867>
- Hernández-Pérez, L. G., Sánchez-Tuirán, E., Ojeda, K. A., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2019). Optimization of microalgae-to-biodiesel production process using a metaheuristic technique. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 7(9), 8490-8498. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b00274>
- Hentz, T.F., & Ruppel, S.C. (2010). Regional Lithostratigraphy of the Eagle Ford Shale: Maverick Basin to East Texas Basin. *American Association of Petroleum Geologists*. https://www.searchanddiscovery.com/documents/2011/10325hentz/ndx_hentz.pdf
- Hong, B., Li, X., Song, S., Chen, S., Zhao, C., & Gong, J. (2020). Optimal planning and modular infrastructure dynamic allocation for shale gas production. *Applied Energy*, 261, 114439. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.114439>
- Hopkins, M., & Li, Y. (2016). The rise of the Chinese solar photovoltaic industry: Firms, governments, and global competition, in: Y. Zhou, W. Lazonick, Y. Sun (Eds.), China

- Hosmer, D.W., & Lemeshow, S. Introduction to the Logistic Regression Model. In *Applied Logistic Regression*; John Wiley & Sons, Ltd, (2000); pp 1–30.
<https://doi.org/10.1002/0471722146.ch1>
- Hou, L., Yu, Z., Luo, X., Lin, S., Zhao, Z., Yang, Z., Wu, S., Cui, J., & Zhang, L. (2021). Key geological factors controlling the estimated ultimate recovery of shale oil and gas: A case study of the Eagle Ford shale, Gulf Coast Basin, USA. *Petroleum Exploration and Development*, 48(3), 762-774. [https://doi.org/10.1016/s1876-3804\(21\)60062-9](https://doi.org/10.1016/s1876-3804(21)60062-9)
- Hua, J., Li, G., Chen, Y., Zhao, X., & Li, Q. (2015). Optimization of thermal parameters of boiler in triple-pressure Kalina cycle for waste heat recovery. *Applied Thermal Engineering*, 91, 1026-1031. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.09.005>
- Hui, G., Chen, S., He, Y., Wang, H., & Gu, F. (2021). Machine learning-based production forecast for shale gas in unconventional reservoirs via integration of geological and operational factors. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 94, 104045. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2021.104045>
- Imam, A. A., Oladigbolu, J. O., Mustafa M.A., S., & Imam, T. A. (2022). The effect of solar photovoltaic technologies cost drop on the economic viability of residential grid-tied solar pv systems in Saudi Arabia. *2022 International Conference on Electrical, Computer and Energy Technologies (ICECET)*, 1-5. <https://doi.org/10.1109/icecet55527.2022.9872582>
- Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). *AR6 Synthesis Report: Climate Change 2023*. IPCC. Intergovernmental Panel on Climate Change. (2023). <https://www.ipcc.ch/report/sixth-assessment-report-cycle/>
- International Energy Agency (IEA) (2022). Global Energy Crisis. Paris: IEA. Recuperado de <https://www.iea.org/topics/global-energy-crisis> (consultado el 1 de junio de 2023).
- IRENA, Renewable energy prospects: United states of america https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2015/Jan/IRENA_REmap_USA_summar

y_2015.pdf?la=en&hash=EB538B5534AEDE4694E5C4067926AE7FA060E876
(consultado el 25 de mayo del 2023).

- Javad Dehghani, M. (2021). Enhancing energo-exergo-economic performance of Kalina cycle for low- to high-grade waste heat recovery: Design and optimization through deep learning methods. *Applied Thermal Engineering*, 195, 117221. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.117221>
- Ji, Y., Zhang, K.-C., & Qu, S.-J. (2007). A deterministic global optimization algorithm. *Applied Mathematics and Computation*, 185(1), 382-387. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2006.06.101>
- Jouhara, H., Khordehghah, N., Almahmoud, S., Delpech, B., Chauhan, A., & Tassou, S. A. (2018). Waste heat recovery technologies and applications. *Thermal Science and Engineering Progress*, 6, 268-289. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2018.04.017>
- Kang, L., & Liu, Y. (2019). Synthesis of flexible heat exchanger networks: A review. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 27(7), 1485-1497. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.09.015>
- Kim, P. (2017). *MATLAB Deep Learning*. Apress. <https://doi.org/10.1007/978-1-4842-2845-6>
- Kingma, D. P., & Ba, J. (2014). *Adam: A Method for Stochastic Optimization* (Versión 9). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1412.6980>
- Knudsen, B. R., & Foss, B. (2015). Designing shale-well proxy models for field development and production optimization problems. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 27, 504-514. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.08.005>
- Kuhn, M., & Johnson, K. (2013). *Applied Predictive Modeling*. Springer New York. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-6849-3>
- Kvasov, D. E., & Mukhametzhonov, M. S. (2018). Metaheuristic vs. deterministic global optimization algorithms: The univariate case. *Applied Mathematics and Computation*, 318, 245-259. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2017.05.014>

- Li, L., Jamieson, K., DeSalvo, G., Rostamizadeh, A., & Talwalkar, A. (2018). *Hyperband: A Novel Bandit-Based Approach to Hyperparameter Optimization* (No. arXiv:1603.06560). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1603.06560>
- Li, Y., & Han, Y. (2017, noviembre 7). Decline curve analysis for production forecasting based on machine learning. *SPE Symposium: Production Enhancement and Cost Optimisation*. SPE Symposium: Production Enhancement and Cost Optimisation, Kuala Lumpur, Malaysia. <https://doi.org/10.2118/189205-ms>
- Liashchynskyi, P., & Liashchynskyi, P. (2019). *Grid search, random search, genetic algorithm: a big comparison for nas* (Versión 1). arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1912.06059>
- Linnhoff, B., & Hindmarsh, E. (1983). The pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science*, 38(5), 745-763. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(83\)80185-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(83)80185-7)
- Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Guillén-Gosálbez, G., & El-Halwagi, M. M. (2016). Optimal water management under uncertainty for shale gas production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(5), 1322-1335. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5b02748>
- Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., & El-Halwagi, M. M. (2014). Optimal design of process energy systems integrating sustainable considerations. *Energy*, 76, 139-160. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.04.111>
- Liu, H., Ong, Y.-S., Shen, X., & Cai, J. (2020). When gaussian process meets big data: a review of scalable GPs. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 31(11), 4405-4423. <https://doi.org/10.1109/tnnls.2019.2957109>
- Liu, Y.-Y., Ma, X.-H., Zhang, X.-W., Guo, W., Kang, L.-X., Yu, R.-Z., & Sun, Y.-P. (2021). A deep-learning-based prediction method of the estimated ultimate recovery (EUR) of shale gas wells. *Petroleum Science*, 18(5), 1450-1464. <https://doi.org/10.1016/j.petsci.2021.08.007>
- Liu, Z., Xie, N., & Yang, S. (2020). Thermodynamic and parametric analysis of a coupled LiBr/H₂O absorption chiller/Kalina cycle for cascade utilization of low-grade waste

- heat. *Energy Conversion and Management*, 205, 112370. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112370>
- López-Flores, F. J., Hernández-Pérez, L. G., Lira-Barragán, L. F., Rubio-Castro, E., & Ponce-Ortega, J. M. (2021). A hybrid metaheuristic–deterministic optimization strategy for waste heat recovery in industrial plants. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 60(9), 3711–3722. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c06201>
- López-Flores, F. J., Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. M. (2024). Process systems engineering tools for optimization of trained machine learning models: comparative and perspective. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 63(32), 13966–13979. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00632>
- Malekian, A., & Chitsaz, N. (2021). Chapter 4 - Concepts, procedures, and applications of artificial neural network models in streamflow forecasting. In *Advances in Streamflow Forecasting*; Sharma, P.; Machiwal, D., Eds.; Elsevier, pp 115–147. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-820673-7.00003-2>
- Mansouri, R., Boukholda, I., Bourouis, M., & Bellagi, A. (2015). Modelling and testing the performance of a commercial ammonia/water absorption chiller using Aspen-Plus platform. *Energy*, 93, 2374–2383. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.10.081>
- Marsland, S. (2014). *Machine Learning: An Algorithmic Perspective* (2.^a ed.). Chapman and Hall/CRC. <https://doi.org/10.1201/b17476>
- Mehedi, T. H., Gemechu, E., & Kumar, A. (2022). Life cycle greenhouse gas emissions and energy footprints of utility-scale solar energy systems. *Applied Energy*, 314, 118918. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2022.118918>
- Miller, R. E., & Blair, P. D. (2009). *Input-output analysis: foundations and extensions* (2.^a ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/cbo9780511626982>
- Montgomery, D. C., Peck, E. A., & Vining, G. G. (2021). *Introduction to linear regression analysis* (Sixth edition). Wiley.
- Mohri, M., Rostamizadeh, A., & Talwalkar, A. (2018). *Foundations of Machine Learning*. (Second edition). The MIT Press.

- Muneer, T., Jadraque, G.E., & Etxebarria, Berrizbeitia, S. (2022). Solar and wind energy technologies, in: T. Muneer, E. Jadraque Gago, S. Etxebarria Berrizbeitia (Eds.), *Coming Age Sol. Wind Power*, Springer International Publishing, Cham, 2022: pp. 21–103. https://doi.org/10.1007/978-3-030-92010-4_2
- Nguyen-Le, V., Kim, M., Shin, H., & Little, E. (2021). Multivariate approach to the gas production forecast using early production data for Barnett shale reservoir. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 87, 103776. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2020.103776>
- Niu, W., Lu, J., & Sun, Y. (2022). Development of shale gas production prediction models based on machine learning using early data. *Energy Reports*, 8, 1229-1237. <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2021.12.040>
- Nondy, J., & Gogoi, T. K. (2021). Exergoeconomic investigation and multi-objective optimization of different ORC configurations for waste heat recovery: A comparative study. *Energy Conversion and Management*, 245, 114593. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114593>
- Onishi, V.C., Reyes-Labarta, J.A., & Caballero, J.A. (2019). Membrane desalination in shale gas industry. *Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes*, 243-267. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813551-8.00010-3>
- Özahi, E., & Tozlu, A. (2020). Optimization of an adapted Kalina cycle to an actual municipal solid waste power plant by using NSGA-II method. *Renewable Energy*, 149, 1146-1156. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.10.102>
- Özcan, Z., & Ekici, Ö. (2021). A novel working fluid selection and waste heat recovery by an exergoeconomic approach for a geothermally sourced ORC system. *Geothermics*, 95, 102151. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2021.102151>
- Palagi, L., Pesyridis, A., Sciubba, E., & Tocci, L. (2019). Machine Learning for the prediction of the dynamic behavior of a small scale ORC system. *Energy*, 166, 72-82. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.10.059>
- Pan, P., Yuan, C., Sun, Y., Yan, X., Lu, M., & Bucknall, R. (2020). Thermo-economic analysis and multi-objective optimization of S-CO₂ Brayton cycle waste heat

- recovery system for an ocean-going 9000 TEU container ship. *Energy Conversion and Management*, 221, 113077. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113077>
- Park, Y.S., & Lek, S. (2016). Chapter 7 - Artificial neural networks: multilayer perceptron for ecological modeling. In *Developments in Environmental Modelling*; Jorgensen, S. E. Ecological Model Types, Elsevier, Vol. 28, pp 123–140. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63623-2.00007-4>
- Peng, Y., Lin, X., Liu, J., Su, W., & Zhou, N. (2021). Machine learning prediction of ORC performance based on properties of working fluid. *Applied Thermal Engineering*, 195, 117184. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.117184>
- Ping, X., Yang, F., Zhang, H., Zhang, J., Zhang, W., & Song, G. (2021). Introducing machine learning and hybrid algorithm for prediction and optimization of multistage centrifugal pump in an ORC system. *Energy*, 222, 120007. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.120007>
- PRODESEN. <https://www.cenace.gob.mx/Paginas/SIM/Prodesen.aspx> (consultado el 17 de abril del 2023).
- Rahman, A., Farrok, O., & Haque, M. M. (2022a). Environmental impact of renewable energy source based electrical power plants: Solar, wind, hydroelectric, biomass, geothermal, tidal, ocean, and osmotic. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 161, 112279. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112279>
- Rahman, M. M., Khan, I., Field, D. L., Techato, K., & Alameh, K. (2022b). Powering agriculture: Present status, future potential, and challenges of renewable energy applications. *Renewable Energy*, 188, 731-749. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2022.02.065>
- Rahman, M. M., Shakeri, M., Tiong, S. K., Khatun, F., Amin, N., Pasupuleti, J., & Hasan, M. K. (2021). Prospective methodologies in hybrid renewable energy systems for energy prediction using artificial neural networks. *Sustainability*, 13(4), 2393. <https://doi.org/10.3390/su13042393>
- Ramírez-Márquez, C., Martín-Hernández, E., Martín, M., & Segovia-Hernández, J. G. (2020). Surrogate based optimization of a process of polycrystalline silicon

- production. *Computers & Chemical Engineering*, 140, 106870. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106870>
- Rasmussen, C. E., & Williams, C. K. I. (2005). *Gaussian Processes for Machine Learning*. The MIT Press. <https://doi.org/10.7551/mitpress/3206.001.0001>
- Russell, R. (2018). Machine Learning: Step-by-step guide to implement machine learning algorithms with python.
- Senturk Acar, M. (2021). Multi-stage artificial neural network structure-based optimization of geothermal energy powered Kalina cycle. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 145(3), 829-849. <https://doi.org/10.1007/s10973-020-10125-y>
- Serrano-Areválo, T. I., Lira-Barragán, L. F., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2022). Strategic planning for optimal management of different types of shale gas wastewater. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10(4), 1451-1470. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c06610>
- SEECO. Inversión Extranjera Directa Primer trimestre de 2023. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/826709/20230519_Presentaci_n_IED_1T-2023__p_blica__2_.pdf
- Shahkarami, A., Ayers, K., Wang, G., & Ayers, A. (2018, octubre 7). Application of machine learning algorithms for optimizing future production in marcellus shale, case study of southwestern pennsylvania. *SPE/AAPG Eastern Regional Meeting*. SPE/AAPG Eastern Regional Meeting, Pittsburgh, Pennsylvania, USA. <https://doi.org/10.2118/191827-18erm-ms>
- Shalev-Shwartz, S., & Ben-David, S. (2014). Understanding Machine Learning.
- Sharma, O. P., Kaushik, S. C., & Manjunath, K. (2017). Thermodynamic analysis and optimization of a supercritical CO₂ regenerative recompression Brayton cycle coupled with a marine gas turbine for shipboard waste heat recovery. *Thermal Science and Engineering Progress*, 3, 62-74. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2017.06.004>
- Sharma, P., Said, Z., Kumar, A., Nižetić, S., Pandey, A., Hoang, A. T., Huang, Z., Afzal, A., Li, C., Le, A. T., Nguyen, X. P., & Tran, V. D. (2022). Recent advances in machine learning research for nanofluid-based heat transfer in renewable energy system.

- Energy & Fuels*, 36(13), 6626-6658.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.2c01006>
- Shin, J., Park, J., & Park, N. (2017). A method to recycle silicon wafer from end-of-life photovoltaic module and solar panels by using recycled silicon wafers. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 162, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2016.12.038>
- Sica, D., Malandrino, O., Supino, S., Testa, M., & Lucchetti, M. C. (2018). Management of end-of-life photovoltaic panels as a step towards a circular economy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, 2934-2945.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.10.039>
- Speight, J.G. (2016) Deep Shale Oil and Gas. 1st ed. *Gulf Professional Publishing*.
- Stolz, P., Frischknecht, R., Heath, G., Komoto, K., Macknick, J., Sinha, P., & Wade, A. (2017). *Water Footprint of European Rooftop Photovoltaic Electricity based on Regionalised Life Cycle Inventories*. National Renewable Energy Laboratory (NREL). <https://doi.org/10.2172/1561520>
- Su, Z., Zhang, M., Xu, P., Zhao, Z., Wang, Z., Huang, H., & Ouyang, T. (2021). Opportunities and strategies for multigrade waste heat utilization in various industries: A recent review. *Energy Conversion and Management*, 229, 113769.
<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113769>
- Sun, X., Liu, L., Dong, Y., Zhuang, Y., Zhang, L., & Du, J. (2020). Superstructure-based simultaneous optimization of a heat exchanger network and a compression-absorption cascade refrigeration system for heat recovery. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59(36), 16017-16028. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c02776>
- Topolski, K., Lira-Barragán, L. F., Panu, M., Ponce-Ortega, J. M., & El-Halwagi, M. M. (2019). Integrating mass and energy through the anchor-tenant approach for the synthesis of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(36), 16761-16776. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b02622>
- Tora, E. A., & El-Halwagi, M. M. (2010). Integration of solar energy into absorption refrigerators and industrial processes. *Chemical Engineering & Technology*, 33(9), 1495-1505. <https://doi.org/10.1002/ceat.201000048>

- Torres, A. I., Ferreira, J., & Pedemonte, M. (2025). Machine learning and process systems engineering for sustainable chemical processes—A short review. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 51, 100982. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2024.100982>
- U.S. Energy Information Administration (EIA). (2013) Technically recoverable shale gas and shale oil resources: An assessment of 137 shale formations in 41 countries outside the United States.
- U.S. Energy Information Administration (EIA). (2015) Technically Recoverable Shale Oil and Shale Gas Resources: Mexico. 2015. https://www.eia.gov/analysis/studies/worldshalegas/pdf/mexico_2013.pdf
- Wang, B., Klemeš, J. J., Li, N., Zeng, M., Varbanov, P. S., & Liang, Y. (2021). Heat exchanger network retrofit with heat exchanger and material type selection: A review and a novel method. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 138, 110479. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110479>
- Wang, L., Bu, X., & Li, H. (2020a). Multi-objective optimization and off-design evaluation of organic rankine cycle (ORC) for low-grade waste heat recovery. *Energy*, 203, 117809. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117809>
- Wang, Q., Huang, N., Chen, Z., Chen, X., Cai, H., & Wu, Y. (2023). Environmental data and facts in the semiconductor manufacturing industry: An unexpected high water and energy consumption situation. *Water Cycle*, 4, 47-54. <https://doi.org/10.1016/j.watcyc.2023.01.004>
- Wang, S., & Chen, S. (2019). Insights to fracture stimulation design in unconventional reservoirs based on machine learning modeling. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 174, 682-695. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2018.11.076>
- Wang, W., Deng, S., Zhao, D., Zhao, L., Lin, S., & Chen, M. (2020b). Application of machine learning into organic Rankine cycle for prediction and optimization of thermal and exergy efficiency. *Energy Conversion and Management*, 210, 112700. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.112700>

Well Finder | WellDatabase. <https://app.welldatabase.com/browse/Wells#> (consultado el 30 de junio del 2022).

Wu, Z., Chen, L., Feng, H., & Ge, Y. (2021). Constructal thermodynamic optimization for a novel Kalina-organic Rankine combined cycle to utilize waste heat. *Energy Reports*, 7, 6095-6106. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2021.09.025>

Xu, B., Haghighi, M., Cooke, D., & Li, X. (2012, marzo 20). Production data analysis in eagle ford shale gas reservoir. *SPE/EAGE European Unconventional Resources Conference and Exhibition*. SPE/EAGE European Unconventional Resources Conference and Exhibition, Vienna, Austria. <https://doi.org/10.2118/153072-ms>

Yang, F., Cho, H., & Zhang, H. (2019). Performance prediction and optimization of an organic Rankine cycle using back propagation neural network for diesel engine waste heat recovery. *Journal of Energy Resources Technology*, 141(6). <https://doi.org/10.1115/1.4042408>

Yang, L., & Shami, A. (2020). On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice. *Neurocomputing*, 415, 295-316. <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2020.07.061>

Yang, P., Yuan, M., Liu, Z., Xie, N., Liu, Y., & Yang, S. (2021). Multi- objective optimization and life cycle assessment of a cascade system integrating LiBr/H₂O absorption refrigeration with transcritical CO₂ power cycle. *Energy Conversion and Management*, 244, 114453. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114453>

Yang, R., Liu, X., Yu, R., Hu, Z., & Duan, X. (2022). Long short-term memory suggests a model for predicting shale gas production. *Applied Energy*, 322, 119415. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2022.119415>

Yang, S., Deng, C., & Liu, Z. (2019). Optimal design and analysis of a cascade LiBr/H₂O absorption refrigeration/transcritical CO₂ process for low-grade waste heat recovery. *Energy Conversion and Management*, 192, 232-242. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.04.045>

Yuyang, L., Xinhua, M., Xiaowei, Z., Wei, G., Lixia, K., Rongze, Y., & Yuping, S. (2021). Shale gas well flowback rate prediction for Weiyuan field based on a deep learning

- algorithm. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 203, 108637.
<https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.108637>
- Zhang, Y., Jin, W., & Xu, M. (2021). Total factor efficiency and convergence analysis of renewable energy in Latin American countries. *Renewable Energy*, 170, 785-795.
<https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.02.016>
- Zhao, H., Liu, C., Larson, T. E., McGovern, G. P., & Horita, J. (2020). Bulk and position-specific isotope geochemistry of natural gases from the Late Cretaceous Eagle Ford Shale, south Texas. *Marine and Petroleum Geology*, 122, 104659.
<https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104659>
- Zhi, L.-H., Hu, P., Chen, L.-X., & Zhao, G. (2019). Multiple parametric analysis, optimization and efficiency prediction of transcritical organic Rankine cycle using trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)) for low grade waste heat recovery. *Energy Conversion and Management*, 180, 44-59.
<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.10.086>
- Zou, Y., Yang, C., Wu, D., Yan, C., Zeng, M., Lan, Y., & Dai, Z. (2016). Probabilistic assessment of shale gas production and water demand at Xiuwu Basin in China. *Applied Energy*, 180, 185-195. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.07.099>

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

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



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

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	Enfoque Híbrido de Aprendizaje Automático y Técnicas de Optimización Aplicado a Sistemas Energéticos Sostenibles	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Francisco Javier López Flores	francisco.lopez@umich.mx
Director	José María Ponce Ortega	jose.ponce@umich.mx
Codirector	Eusiel Rubio Castro	erc@uas.edu.mx
Coordinador del programa	José Apolinar Cortés	jose.apolinar@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	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	Francisco Javier López Flores
Lugar y fecha	Morelia, Michoacan, a 15 de agosto del 2025

Francisco Javier López Flores

Enfoque Híbrido de Aprendizaje Automático y Técnicas de Optimización Aplicado a Sistemas Energéticos

 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega:

tm:old::3117:483524910

Fecha de entrega:

14 ago 2025, 12:57 p.m. GMT-6

Fecha de descarga:

14 ago 2025, 1:03 p.m. GMT-6

Nombre de archivo:

Enfoque Híbrido de Aprendizaje Automático y Técnicas de Optimización Aplicado a Sistemas Ener....pdf

Tamaño de archivo:

8.3 MB

180 Páginas

41.402 Palabras

225.653 Caracteres

25% Similitud general

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para ca...

Fuentes principales

- 21%  Fuentes de Internet
- 19%  Publicaciones
- 0%  Trabajos entregados (trabajos del estudiante)

Marcas de integridad

N.º de alertas de integridad para revisión

No se han detectado manipulaciones de texto sospechosas.

Los algoritmos de nuestro sistema analizan un documento en profundidad para buscar inconsistencias que permitirían distinguirlo de una entrega normal. Si advertimos algo extraño, lo marcamos como una alerta para que pueda revisarlo.

Una marca de alerta no es necesariamente un indicador de problemas. Sin embargo, recomendamos que preste atención y la revise.