



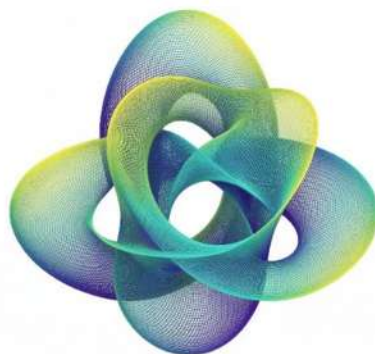
**UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



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

TESIS

**“OPTIMIZACIÓN HÍBRIDA EN INGENIERÍA DE PROCESOS:
ENFOQUES Y APLICACIONES”**



A LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE
INGENIERÍA QUÍMICA PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

M.C. ROGELIO OCHOA BARRAGÁN

ASESOR

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

COASESOR

DR. MAURO ANTONIO DA SILVA SÁ RAVAGNANI

MORELIA, MICHOACÁN.

JUNIO 2026



Resumen

OPTIMIZACIÓN HÍBRIDA EN INGENIERÍA DE PROCESOS: ENFOQUES Y APLICACIONES

POR

M.C. ROGELIO OCHOA BARRAGÁN

DIRIGIDO POR

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

CODIRIGIDO POR

DR. MAURO ANTONIO DA SILVA SÁ RAVAGNANI

JUNIO 2026

Las estrategias de optimización híbrida combinan distintos algoritmos para abordar de manera más eficiente problemas complejos de toma de decisiones. En este proyecto se propone el uso de técnicas de optimización determinista junto con algoritmos de aprendizaje automático y metaheurísticos para resolver desafíos en procesos de gestión e ingeniería. Además, se introduce una nueva estrategia híbrida basada en un Regresor de Base Optimizado (OBR), que permite integrar modelos subrogados generados a partir de grandes volúmenes de datos directamente en modelos de optimización. Esta metodología mejora significativamente la eficiencia en la toma de decisiones, al combinar modelos avanzados de procesos con representaciones de sistemas complejos, como los de producción y cadena de suministro.

Palabras clave: Optimización híbrida, máquinas de aprendizaje, planificación estratégica, Cadena de suministro, Optimización multiobjetivo.



Abstract

HYBRID OPTIMIZATION IN PROCESS ENGINEERING: APPROACHES AND APPLICATIONS

BY

M.C. ROGELIO OCHOA BARRAGÁN

DIRECTED BY

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

CO-DIRECTED BY

DR. MAURO ANTONIO DA SILVA SÁ RAVAGNANI

JUNIO 2026

Hybrid optimization strategies combine different algorithms to more efficiently address complex decision-making problems. This project proposes the use of deterministic optimization techniques together with machine learning and metaheuristic algorithms to solve challenges in management and engineering processes. In addition, a new hybrid strategy based on an Optimized Baseline Regressor (OBR) is introduced, enabling the direct integration of surrogate models generated from large volumes of data into optimization models. This methodology significantly improves decision-making efficiency by combining advanced process models with representations of complex systems, such as production and supply chains.

Keywords: Hybrid optimization, machine learning, strategic planning, supply chain, multi-objective optimization.



Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a todas las personas que, de una u otra manera, formaron parte de este proceso y contribuyeron al desarrollo de este trabajo.

Al Dr. José María Ponce Ortega, por tantos años de formación, por su guía constante y por las enseñanzas que han marcado mi camino académico. A Aurora, por la confianza brindada y por los conocimientos compartidos durante mi estancia en el Posgrado. A César, por su apoyo y por las colaboraciones a lo largo del doctorado, que fueron muy importantes en el desarrollo de este trabajo. A Javier Tovar, por su disposición a colaborar y por compartir generosamente sus conocimientos. Al Dr. Agustín, por sus enseñanzas tanto dentro como fuera del entorno académico.

Agradezco también al Dr. Mauro y a la Dra. Caliane por su amabilidad y apoyo durante mi estancia en Brasil, así como al Dr. Mariano por su acompañamiento durante mi estancia en España. De igual forma, al Dr. Fabricio y al Dr. Luis Fernando, por su asesoría, observaciones y seguimiento a lo largo de estos años.

A mis padres, por su apoyo incondicional. En especial a mi madre, por todo su esfuerzo, dedicación y amor, que han sido fundamentales para llegar hasta aquí.

A mi familia y amigos, por su compañía, comprensión y apoyo a lo largo de este camino.

A Jovanna, por su apoyo, confianza y compañía durante este proceso.

Finalmente, agradezco a la SECIHTI y a la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo por los años de formación y por el financiamiento que hizo posible la realización de este trabajo.



Contenido

Resumen.....	i
Abstract.....	ii
Agradecimientos	iii
Nomenclatura	ix
Capítulo 1. Introducción.....	1
1.1 Generalidades.....	2
1.2 Justificación	3
1.3 Hipótesis	4
1.4 Objetivos	4
1.4.1 Objetivo general	4
1.4.2 Objetivos particulares	4
Capítulo 2. Marco teórico.....	5
2.1 Modelos Matemáticos Deterministas.....	6
2.2 Modelos Sustitutos.....	7
2.3 Revisión de literatura	8
Capítulo 3. Metodología.....	11
3.1 Estrategia matemática del enfoque de optimización.....	13
3.2 Formulación del modelo de optimización híbrido	13
3.3 Generación de los OBR	15
3.3.1 Muestreo de variables.....	15
3.3.2 Implementación de algoritmos ML.....	15
3.4 Modelado Matemático	22
3.4.1 Modelado matemático caña de azúcar.....	22
3.4.2 Modelo matemático de diésel verde	25
Capítulo 4. Resultados	38
4.1 Producción de etanol a partir de la caña de azúcar	39
4.1.1 Resultados generales	44
4.1.2 Solución con AG	45

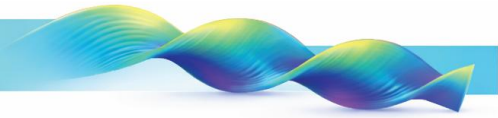


4.1.3 Solución determinista	47
4.2 Producción de diésel verde bajo el paradigma del nexo agua-energía-alimentos.....	51
4.2.1 Simulación de procesos y generación de datos.....	51
4.2.2 Entrenamiento de los OBR.....	53
4.2.3 Aplicación de la estrategia.....	55
4.2.4 Resultados y discusión	57
Capítulo 5. Conclusiones.....	68
Referencias.....	70
Apéndice 1. Contribución a la investigación.....	80



Índice de Figuras

Figura 1. Representación esquemática de una superestructura.	6
Figura 2. Enfoque propuesto para generar modelos híbridos.	12
Figura 3. Superestructura de la cadena de suministro de caña de azúcar.	14
Figura 4. Implementación de OBR no explícitos a través de AG.	17
Figura 5. Estrategia para la selección del regresor.	18
Figura 6. Estrategia metodológica para la producción de diésel verde utilizando OBRs y optimización híbrida basada en PSO.	19
Figura 7. Perspectiva conceptual de la metodología propuesta.	21
Figura 8. Superestructura para la producción de diésel verde en el contexto del nexo agua-energía-alimentos.	27
Figura 9. Diagramas de paridad para a) OBRheating, b) OBRelectricity, c) OBRcooling usando un algoritmo de regresión lineal.	40
Figura 10. Diagramas de paridad para OBRcooling, OBRheating, OBRelectricity usando un algoritmo de regresión con red neuronal.	42
Figura 11. Superestructura representada en el caso de estudio.	43
Figura 12. Curva de convergencia multiobjetivo usando AG.	46
Figura 13. Curva de Pareto y comparación de resultados de OBR lineales vs. resultados de OBR no lineales.	49
Figura 14. Comparación geográfica de soluciones entre soluciones A y B.	50
Figura 15. Comparación de soluciones A y B obtenidas de la biorrefinería instalada en Taretan.	50
Figura 16. Diagrama esquemático del proceso de producción de diésel verde.	52
Figura 17. Gráficos a) y b) de Paridad y c) y d) de residuales para los regresores principales del modelo.	54
Figura 18. Red logística de la región estudiada considerando los nodos representativos a) y la integración propuesta de biorrefinerías b).	56
Figura 19. Curva de Pareto bidimensional para distintos incrementos (Δ) de consumo mínimo de agua.	59
Figura 20. Frontera de Pareto tridimensional que ilustra el equilibrio entre emisiones de	



GHG, costo anual total y consumo de agua dulce en las soluciones factibles.	60
Figura 21. Configuración de la SC óptima para los intercambios de soya.....	61
Figura 22. Análisis de las biorrefinerías con OBRs para a) Energia, H ₂ , Ligeros, agua, GHG; b) Aceite de Soja, Diésel, Calefacción, Refrigeración.	65
Figura 23. Análisis espacial de puntos críticos del consumo total anual de agua.	66



Índice de Tablas

Tabla 1. Hiperparámetros de la red neuronal desarrollada.	41
Tabla 2. Sitios de cultivo de caña de azúcar en Michoacán.	44
Tabla 3. Tiempo global de entrenamiento y solución del modelo (Wall-time).	45
Tabla 4. Hiperparámetros del AG.	46
Tabla 5. Comparación de variables independientes estimadas en cada solución para la biorrefinería de Taretan.	51
Tabla 6. Métricas de validación estadística de los modelos sustitutos OBR bajo validación cruzada de 5 pliegues.	55
Tabla 7. Comparación de soluciones de compromiso óptimas a partir de la optimización multiobjetivo con restricción épsilon.	59
Tabla 8. Intercambios de materia prima de soya entre municipios y biorrefinerías.	62
Tabla 9. Tasa anual de flujo de soya exportada entre nodos.	62

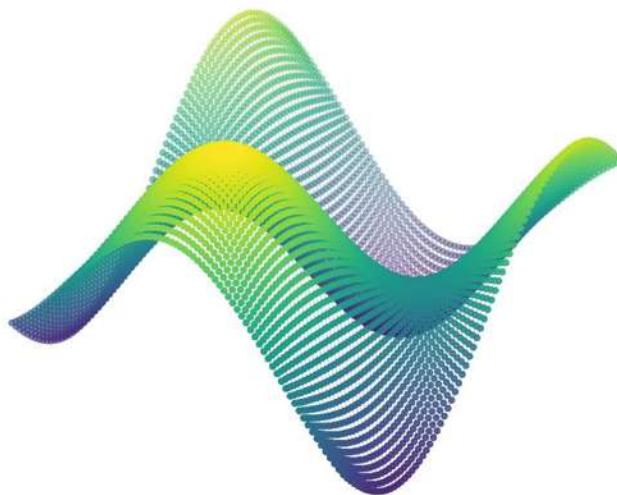


Nomenclatura

AG	Algoritmo Genético
PSO	Particle Swarm Optimization
NSGA-II	Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II
MINLP	Mixed-Integer Nonlinear Programming
MILP	Mixed-Integer Linear Programming
ML	Machine Learning
OBR	Optimized Baseline Regressor
RF	Random Forest
ANN	Artificial Neural Network
MSE	Mean Squared Error
R²	Coefficiente de determinación
SC	Supply Chain (Cadena de suministro)
GHG	Greenhouse Gas (Gases de efecto invernadero)
TAC	Total Annual Cost
GLPK	GNU Linear Programming Kit
Pyomo	Python Optimization Modeling Objects
BioSTEAM	Biorefinery Simulation and Techno-Economic Analysis Modules
TensorFlow	Biblioteca de aprendizaje profundo
Scikit-learn	Biblioteca de aprendizaje automático en Python
PyGAD	Librería de algoritmos genéticos en Python
Pyswarms	Librería para implementación de PSO
OMLT	Optimization and Machine Learning Toolkit
JANOS	Joint Optimization and Learning System
ReLU	Rectified Linear Unit
Adam	Adaptive Moment Estimation



Capítulo 1. Introducción





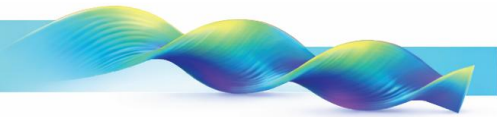
Los modelos matemáticos suelen ser representaciones simplificadas de procesos reales que nos permiten resolver problemas y comprender sistemas complejos. La optimización, por otro lado, es una herramienta matemática enfocada a encontrar la mejor solución entre un conjunto de posibles soluciones para un problema determinado (Ponce-Ortega et al., 2024). El enfoque de modelado basado en la superestructura tiene el potencial de ser muy efectivo, ya que considera muchas opciones de proceso diferentes y optimiza tanto la estructura como las circunstancias operativas del proceso al mismo tiempo (Madenoor Ramapriya et al., 2018; Murat Sen et al., 2015).

En esta sección se abordan las generalidades conceptuales del tema, la importancia de los problemas propuestos, la hipótesis y los objetivos del trabajo en desarrollo.

1.1 Generalidades

En la literatura, al abordar problemas como asignación de recursos, programación de la producción y problemas de transporte, es común el uso de modelos de optimización lineal, debido a su eficiencia y simplicidad computacional (Cansino-Loeza & Ponce-Ortega, 2024). Al disponer tanto de la función objetivo como de las restricciones en forma lineal, estos modelos son convexos, lo que garantiza la obtención de una solución óptima global. Sin embargo, muchos problemas reales presentan comportamientos no lineales y la optimización lineal no logra capturar la complejidad en la interacción de las variables en esos casos (Abotaleb, 2024; Ponce-Ortega & Santibañez-Aguilar, 2019).

El uso de modelos de optimización no lineales permite entonces la representación de sistemas más complejos; sin embargo, la complejidad matemática del modelo de optimización resultante, que es típicamente un problema mixto entero no lineal no convexo a gran escala (MINLP) es el precio a pagar por estos modelos, que también presenta desventajas, como tiempos de resolución más largos y el riesgo de quedarse estancado en mínimos locales (Ponce-Ortega & Hernández-Pérez, 2019). Los modelos que se integran cuando las operaciones unitarias son realistas (es decir, los modelos que se encuentran en simuladores de procesos comerciales que consideran cálculos de termodinámica, cinética y propiedades de transporte no ideales) normalmente no se pueden resolver (Kelly & Zyngier, 2017) por métodos convencionales. La incorporación de la descomposición jerárquica y los marcos MINLP, así como las técnicas de modelado/descomposición, son algunos de los



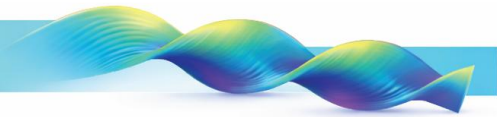
enfoques más populares para simplificar los modelos de optimización de superestructuras (Mencarelli et al., 2020).

En este contexto, los modelos de Machine Learning (ML) ofrecen una alternativa, ya que pueden simplificar sistemas complejos a partir de grandes volúmenes de datos. Estos modelos pueden evitar simulaciones detalladas y computacionalmente costosas en problemas que requieren soluciones rápidas y precisas. Sin embargo, su efectividad depende de la disponibilidad de datos de alta calidad en grandes cantidades, lo que limita su aplicación en algunos casos (Prina et al., 2024).

1.2 Justificación

El desarrollo de modelos matemáticos en ingeniería de procesos requiere herramientas avanzadas que permitan su análisis y solución efectiva. A lo largo de las últimas décadas, la literatura ha presentado una amplia variedad de modelos de optimización, tanto lineales como no lineales, utilizando estrategias deterministas y metaheurísticas. Sin embargo, muchos de estos modelos incluyen simplificaciones que limitan su capacidad para capturar la complejidad inherente a los sistemas reales. El avance tecnológico y la creciente disponibilidad de datos asociados a diversos procesos han generado nuevas posibilidades y estrategias para superar estas limitaciones. Desde este punto de vista, los modelos de ML se presentan como una alternativa atractiva que permite simplificar sistemas complejos mediante el análisis de grandes volúmenes de datos. Su capacidad para generalizar y predecir comportamientos en diferentes escenarios los convierte en herramientas ideales para abordar problemas en los que los métodos tradicionales de optimización resultan ineficientes.

Por lo anterior, este trabajo busca desarrollar metodologías innovadoras que integren la potencia de los modelos de optimización no lineales con las ventajas del ML. Este enfoque híbrido no solo permitirá superar las limitaciones actuales, sino también promover el desarrollo de herramientas más eficientes y accesibles para la toma de decisiones en procesos industriales.



1.3 Hipótesis

La integración de estrategias de optimización híbrida que combinan técnicas deterministas, metaheurísticas y modelos de aprendizaje automático mejora significativamente el desempeño en términos de eficiencia computacional y calidad de las soluciones obtenidas al resolver problemas complejos de ingeniería de sistemas de procesos, en comparación con el uso individual de cada enfoque por separado.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo general

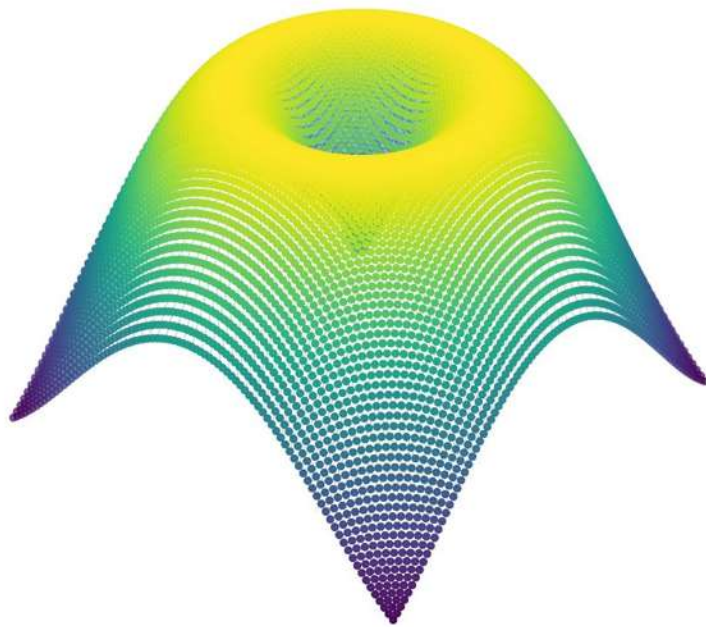
Desarrollar modelos híbridos de programación matemática que integren métodos de optimización matemática con algoritmos de aprendizaje automático, con el fin de generar conjuntos de soluciones eficaces para la planificación de diferentes sistemas de proceso, considerando aspectos económicos, ambientales y sociales.

1.4.2 Objetivos particulares

- Desarrollar una nueva metodología de optimización híbrida que combine enfoques deterministas, metaheurísticos y técnicas de aprendizaje automático, orientada a mejorar la toma de decisiones en sistemas complejos de ingeniería de procesos.
- Implementar casos de estudio basados en sistemas y cadenas de suministro reportados en la literatura o existentes en la práctica industrial, con el fin de validar la aplicabilidad y robustez de la metodología propuesta, evaluando su desempeño frente a métodos tradicionales de optimización.
- Diseñar e incorporar modelos subrogados en la estrategia híbrida de optimización, permitiendo su integración fluida con algoritmos deterministas y metaheurísticos para reducir el costo computacional sin comprometer la precisión de los resultados en diferentes contextos industriales.



Capítulo 2. Marco teórico





2.1 Modelos Matemáticos Deterministas

Los modelos matemáticos constituyen representaciones simplificadas de procesos reales que permiten analizar, comprender y resolver problemas asociados con sistemas complejos. A través de estas representaciones es posible describir relaciones entre variables, establecer restricciones operativas y evaluar diferentes configuraciones de un sistema bajo criterios específicos de desempeño. En este sentido, la optimización matemática es utilizada como una herramienta que permite identificar la mejor solución posible dentro de un conjunto de alternativas factibles para un problema determinado (Ponce-Ortega et al., 2024).

Uno de los enfoques ampliamente utilizados en la síntesis y diseño de sistemas complejos es el enfoque basado en superestructuras. Este enfoque considera simultáneamente múltiples alternativas tecnológicas y configuraciones de proceso dentro de una estructura general que contiene todas las opciones posibles (Ryu et al., 2020). A partir de esta superestructura, el modelo de optimización determina la configuración más adecuada del sistema, así como las condiciones óptimas de operación (Gopinath & Adjiman, 2025). Este tipo de formulación resulta especialmente útil en problemas donde existen diversas rutas tecnológicas o configuraciones posibles (ver **Figura 1**).

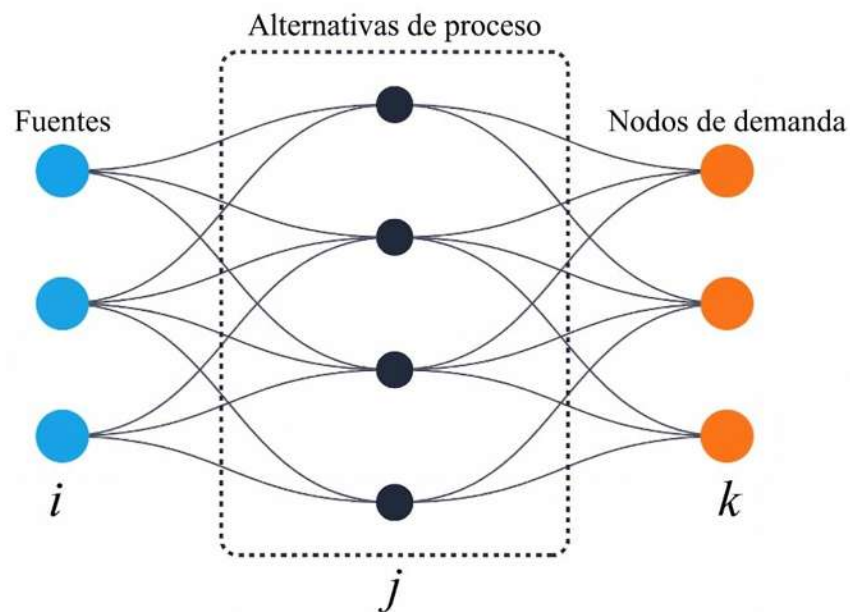
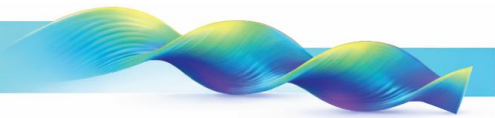


Figura 1. Representación esquemática de una superestructura.



En la literatura es común el uso de modelos de optimización lineal para abordar problemas como asignación de recursos, planeación de la producción y problemas de transporte (Mencarelli et al., 2020). Estos modelos presentan ventajas importantes desde el punto de vista computacional debido a su estructura matemática, ya que tanto la función objetivo como las restricciones se expresan en forma lineal. Como consecuencia, el problema resultante es convexo, lo que garantiza la obtención de soluciones óptimas globales con algoritmos eficientes (Cansino-Loeza & Ponce-Ortega, 2024). Sin embargo, muchos sistemas reales presentan comportamientos altamente no lineales asociados con interacciones complejas entre variables, lo cual limita la capacidad de los modelos lineales para representar adecuadamente estos fenómenos (Abotaleb, 2024).

Con el objetivo de representar de manera más realista estos sistemas, se han desarrollado modelos de optimización no lineales. Estos modelos permiten capturar relaciones más complejas entre variables y representar fenómenos físicos, químicos o económicos con mayor nivel de detalle. No obstante, el incremento en el nivel de detalle conlleva también un aumento significativo en la complejidad matemática del problema. En muchos casos, los modelos resultantes corresponden a problemas de programación no lineal entera mixta no convexa (MINLP) (Grossmann, 2002), los cuales pueden presentar tiempos de solución elevados y dificultades asociadas con la convergencia hacia soluciones óptimas globales (D'Ambrosio & Lodi, 2013). Adicionalmente, cuando se incorporan modelos rigurosos de operaciones unitarias que consideran aspectos termodinámicos, cinéticos o de transporte, la resolución simultánea de todos los modelos dentro de un esquema de optimización puede volverse computacionalmente imposible de resolver (Bruno et al., 1998).

2.2 Modelos Sustitutos

Para reducir la complejidad de los modelos de optimización no lineales, se han propuesto diversas estrategias basadas en técnicas de descomposición y formulaciones jerárquicas (Daichendt & Grossmann, 1998) que permiten simplificar la resolución de modelos de optimización basados en superestructuras (Pistikopoulos et al., 2021). Sin embargo, en los últimos años ha surgido un interés creciente en el desarrollo de metodologías que permitan generar aproximaciones computacionalmente eficientes de sistemas complejos.



Aprendizaje automático

El ML es una rama de la inteligencia artificial enfocada en el desarrollo de modelos capaces de identificar patrones y relaciones a partir de datos. A diferencia de los modelos mecánicos tradicionales, en los cuales las relaciones entre variables se describen mediante ecuaciones basadas en principios físicos o químicos, los modelos de aprendizaje automático construyen aproximaciones funcionales a partir de información observada, lo que permite capturar comportamientos no lineales y relaciones complejas entre variables (Daoutidis et al., 2024). A fines prácticos, estas técnicas permiten que un sistema mejore su desempeño en una tarea específica mediante el análisis de datos. Entre los enfoques más utilizados se encuentra el aprendizaje supervisado, en el cual el modelo se entrena utilizando datos que contienen tanto variables de entrada como salidas conocidas, permitiendo construir funciones predictivas. Métodos como árboles de decisión, modelos de ensamble y redes neuronales artificiales son algunos de los algoritmos más utilizados (Mora-Mariano & Flores-Tlacuahuac, 2022). Por otro lado, el aprendizaje no supervisado se emplea cuando no existe una variable objetivo definida, y su objetivo principal consiste en identificar estructuras o patrones dentro de los datos (Fuentes-Cortés et al., 2022).

En ingeniería de procesos y sistemas energéticos, los modelos de aprendizaje automático se utilizan principalmente para construir modelos sustitutos que aproximan el comportamiento de simulaciones complejas. Estos modelos permiten reducir el costo computacional asociado con evaluaciones repetidas dentro de problemas de optimización o simulación (Neufang et al., 2024). Sin embargo, su desempeño depende en gran medida de la disponibilidad y calidad de los datos utilizados para su entrenamiento. A pesar de estas limitaciones, el aprendizaje automático se ha consolidado como una herramienta complementaria a los enfoques tradicionales de modelado y optimización para el análisis de sistemas complejos (Zhou & Ren, 2025).

2.3 Revisión de literatura

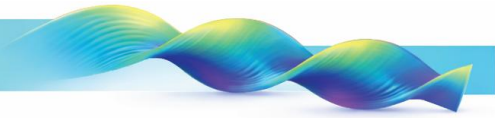
Los modelos sustitutos han sido ampliamente utilizados para aproximar el comportamiento de sistemas complejos mediante representaciones matemáticas más simples. Estos modelos se construyen generalmente a partir de datos generados por simulaciones o por observaciones experimentales, y permiten capturar las relaciones entre variables clave del sistema sin necesidad



de resolver modelos rigurosos en cada iteración del proceso de optimización. Por ejemplo, Fu et al. (2009) emplearon modelos sustitutos para representar redes de alcantarillado dentro de un modelo integrado de aguas residuales urbanas, mostrando mejoras significativas en la eficiencia computacional de problemas de control en tiempo real. De manera similar, Ramírez-Márquez et al. (2020) desarrollaron modelos sustitutos para representar las principales unidades de un proceso de producción de silicio policristalino, permitiendo una representación más eficiente del sistema.

Otros enfoques han incorporado técnicas estadísticas avanzadas para construir modelos sustitutos más robustos. Gonzales y Zavala (2023) propusieron una estrategia basada en optimización bayesiana que permite explorar el espacio de diseño mediante la partición jerárquica de dicho espacio, utilizando modelos sustitutos para identificar regiones relevantes. Asimismo, Long et al. (2025) reportaron el uso de modelos sustitutos contruidos mediante herramientas estadísticas para resolver problemas híbridos con restricciones en el contexto de la gestión de contaminantes, demostrando el potencial de integrar modelos estadísticos con herramientas de optimización en problemas ambientales de alta complejidad.

Por otro lado, la integración de modelos de optimización y aprendizaje automático ha sido explorada en la literatura desde diferentes perspectivas. Una de ellas consiste en utilizar modelos de aprendizaje automático para estimar parámetros o variables del sistema que posteriormente se incorporan en modelos de optimización. Por ejemplo, Thomassey (2010) desarrolló modelos predictivos para estimar la demanda bajo condiciones de alta volatilidad y estacionalidad, mientras que Raya-Tapia et al. (2023) emplearon modelos de aprendizaje profundo para predecir la demanda de recursos como agua, energía y alimentos con el fin de promover la toma de decisiones hacia un consumo sostenible. Otra línea de investigación se enfoca en la incorporación directa de modelos de aprendizaje automático dentro de modelos de optimización mediante técnicas de reformulación matemática. Estas técnicas permiten que los modelos predictivos actúen como restricciones dentro del problema de optimización, integrando así capacidades de predicción y optimización en una misma formulación. Wan et al. (2005) desarrollaron modelos sustitutos a partir de resultados de simulación para representar relaciones causales en cadenas de suministro. Más recientemente, Bertsimas y Margaritis (2025) propusieron una técnica basada en árboles de decisión que permite reformular restricciones no lineales mediante hiperplanos, mejorando significativamente los tiempos de solución y la calidad de las soluciones obtenidas. Asimismo,



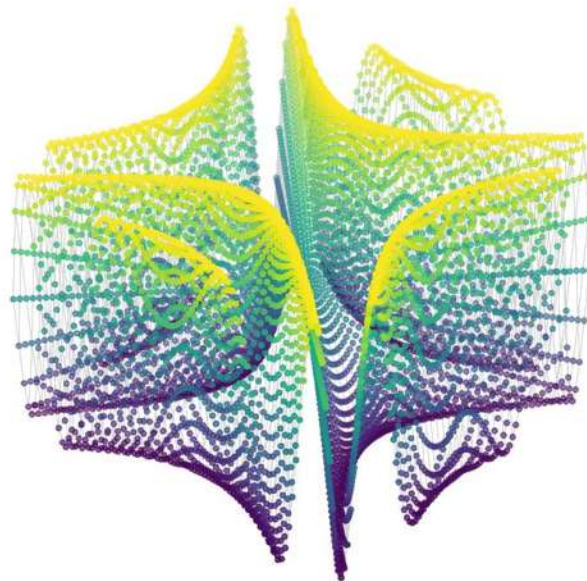
López-Flores et al. (2023) presentaron una formulación MINLP que integra modelos de aprendizaje automático para identificar mejores prácticas en la gestión de agua y producción de gas en campos de shale.

Finalmente, se han desarrollado diversas herramientas computacionales que facilitan la integración de modelos de aprendizaje automático dentro de marcos de optimización. Entre ellas destaca JANOS (Bergman et al., 2022), que permite incorporar modelos predictivos en problemas de optimización discreta mediante transformaciones lineales. De igual manera, la herramienta OMLT (Ceccon et al., 2022) permite integrar redes neuronales y modelos de árboles de decisión dentro de modelos de optimización formulados en Pyomo. Otras plataformas como AutoMLPipeline (Palmes, 2023) facilitan la construcción de modelos sustitutos a partir de estructuras tipo pipeline, mientras que en diversos trabajos de investigación han propuesto el uso de redes neuronales para aproximar restricciones no lineales dentro de modelos de optimización, reduciendo significativamente la complejidad computacional de estos problemas (Henao & Maravelias, 2011; Schweidtmann et al., 2022).

La principal contribución de este trabajo con respecto al estado del arte consiste en proponer una estrategia directa para la integración de modelos de aprendizaje automático en problemas de optimización, sin requerir la reformulación de regresores complejos, lo que simplifica significativamente su implementación. Además, la metodología se aplica a dos casos de estudio poco abordados en este contexto y permite evaluar simultáneamente criterios económicos y ambientales dentro del proceso de toma de decisiones.



Capítulo 3. Metodología



Con base en los conceptos teóricos y herramientas abordados en la sección anterior se establece en la **Figura 2** la estrategia a seguir para generar modelos de optimización híbridos. La metodología integra modelos predictivos basados en aprendizaje automático con formulaciones matemáticas deterministas, permitiendo incorporar parámetros inciertos dentro del proceso de optimización.

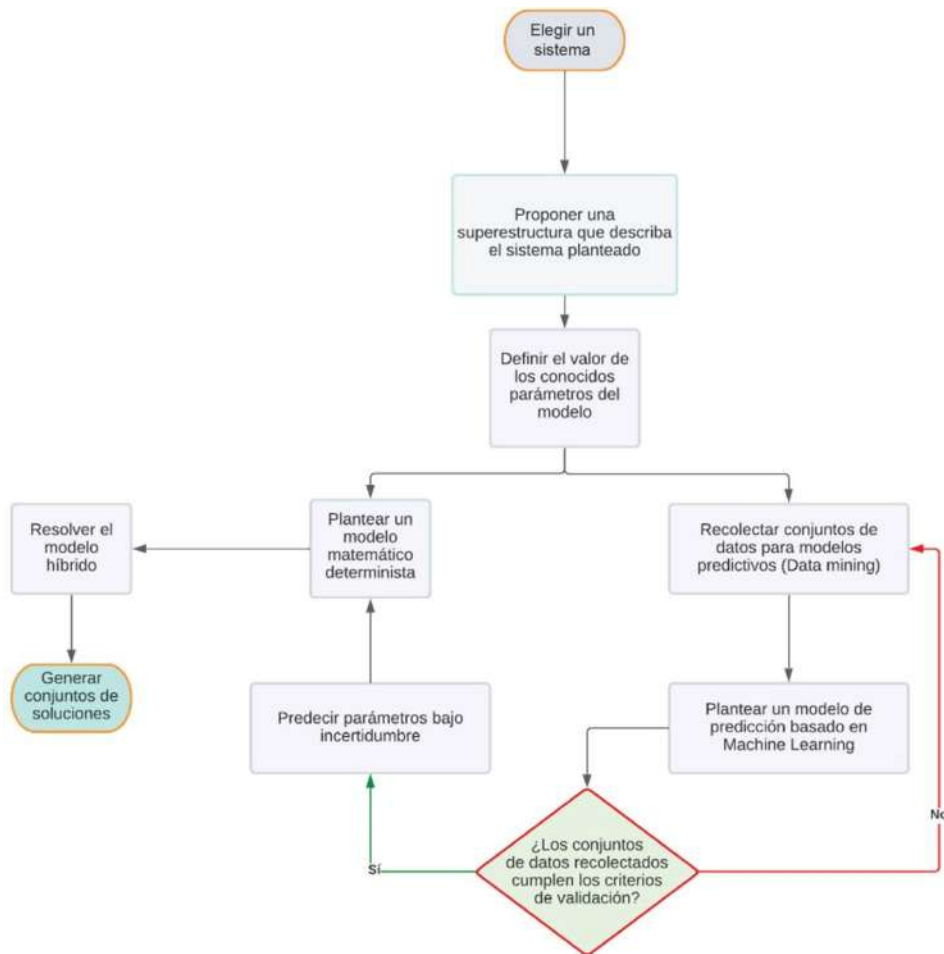


Figura 2. Enfoque propuesto para generar modelos híbridos.



3.1 Estrategia matemática del enfoque de optimización

Para desarrollar la metodología de este trabajo se propone un modelo del siguiente tipo:

$$\min P(x) = f(x) + g(x) \quad (1)$$

Sujeto a:

$$Ax = b \quad (2)$$

$$Cx \leq d \quad (3)$$

$$x_{LB} \leq x \leq x_{UB} \quad (4)$$

Donde, $f(x)$ modela la parte lineal, mientras $g(x)$ representa un modelo no lineal complejo (sustituido posteriormente por OBRs), como una columna de destilación, un reactor, etc. El vector x representa las variables, A y C son matrices constantes correspondientes a las restricciones de igualdad y desigualdad, respectivamente. Los vectores b y d representan los términos constantes asociados a las restricciones de igualdad y desigualdad. Por último, x_{LB} y x_{UB} representan los límites inferior y superior del vector de variables.

3.2 Formulación del modelo de optimización híbrido

Para entender el proceso de desarrollo de estos modelos, se explora su aplicación en la SC de la caña de azúcar. Más adelante se explora el uso de esta metodología en casos de estudio diferentes.

El modelo matemático desarrollado se basa en la superestructura que se muestra en la **Figura 3**, que ilustra la SC abordada para un caso de estudio enfocado en la caña de azúcar considerando dos rutas de proceso distintas. En la primera ruta, la caña de azúcar se destina a la producción de azúcar, mientras que, en la segunda ruta, se destina a la producción de bioetanol. Aquí es donde se incorpora el uso de los OBR, ya que tienen la tarea de capturar con precisión el comportamiento de las biorrefinerías. Los OBR se definen en función de variables asociadas con la cadena de suministro (por ejemplo, flujos) y variables intrínsecas relacionadas con las condiciones de operación de la unidad de proceso en cuestión (por ejemplo, una biorrefinería).

Aunque numerosos estudios han explorado los desafíos relacionados con las biorrefinerías de etanol, este caso de estudio fue seleccionado específicamente por la disponibilidad de datos, lo que permite la evaluación de la estrategia propuesta utilizando modelos que están bien establecidos en trabajos de investigación anteriores.

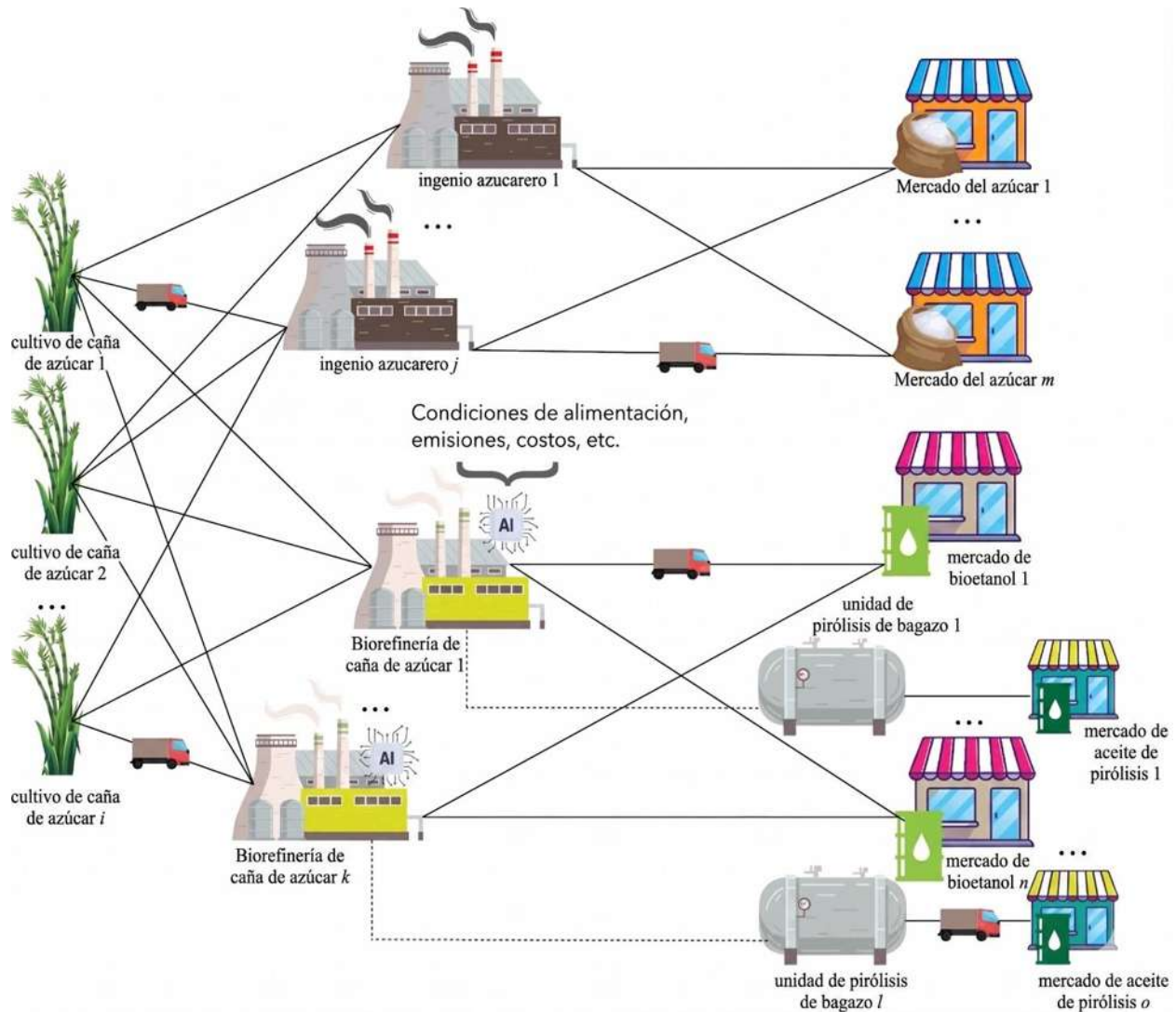


Figura 3. Superestructura de la cadena de suministro de caña de azúcar.



3.3 Generación de los OBR

En esta sección se presentan diversos aspectos relacionados con la generación de OBR, incluyendo el muestreo de variables independientes y dependientes, la generación del conjunto de datos de entrenamiento y prueba, y los parámetros de validación para cada OBR. La codificación de los componentes anteriores se llevó a cabo utilizando la biblioteca BioSTEAM de Python, una plataforma de código abierto para el diseño y simulación de biorrefinerías (Cortes-Peña et al., 2020).

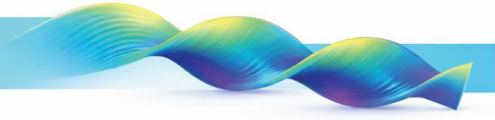
3.3.1 Muestreo de variables

La generación de OBRs consiste en desarrollar modelos subrogados útiles que capturen las variables principales del modelo original (en este caso, el modelo de una biorrefinería), siempre que se respeten las restricciones originales. En este trabajo, se propone considerar como variables independientes las diferentes entradas al modelo de simulación de la biorrefinería, junto con las especificaciones de diseño asociadas a la columna de destilación. Para seleccionar los datos de entrada relevantes, se utiliza un enfoque de muestreo sistemático (Cochran, 1977), que asegura una representación uniforme de los datos en el espacio de diseño del modelo. Es importante destacar que los OBRs generados están limitados por la región de aplicabilidad generada al momento de generar los datos de simulación; un total de 1000 simulaciones se utilizan para este ejemplo.

3.3.2 Implementación de algoritmos ML

3.3.2.1 Criterios de validación

Dado que los algoritmos de aprendizaje automático a veces pueden producir modelos sobre ajustados que funcionan bien en el conjunto de entrenamiento, pero no se generalizan de manera efectiva a nuevos datos, se siguió una práctica estándar. Los conjuntos de datos se dividen en conjuntos de entrenamiento y prueba con una proporción de 80:20, de acuerdo con la recomendación de Azadi y Karimi-Jashni (2016). Para identificar las variables clave del modelo, se prueban diferentes configuraciones de modelado. La validación utiliza el coeficiente de determinación ajustado (R^2), calculado con base en la metodología presentada por Hastie et al. (2009). Estos criterios de validación proporcionan métricas confiables para evaluar la relevancia del modelo y su capacidad de generalizar más allá de los datos de entrenamiento (Ecuación (5)).



$$R^2 = \frac{\sum_{n=1}^N (\hat{Y}_n - \bar{Y})^2}{\sum_{n=1}^N (Y_n - \bar{Y})^2} \quad (5)$$

Donde $\hat{Y}_n$ indica la estimación de las variables dependientes generada con el modelo de regresión, $\bar{Y}$ representa el valor promedio calculado, Y_n es el valor registrado de la variable en el conjunto de datos para el caso n del conjunto de casos N .

3.3.2.2 Implementación directa de las OBR

Se proponen dos enfoques para integrar los OBR en el modelo matemático descrito anteriormente. La primera forma es generar un modelo a través de un algoritmo que permite obtener un regresor explícito según la forma:

$$OBR^{explicit} = \beta_0 + \beta_1 x_1^{\alpha_1} + \beta_2 x_2^{\alpha_2} + \dots + \beta_n x_n^{\alpha_n} \quad (6)$$

La obtención de este tipo de regresores se puede realizar mediante algoritmos como la regresión lineal y polinómica, implementados en Python a través de librerías como Scikit-learn (LinearRegression y PolynomialFeatures) para tareas de aprendizaje automático (Pedregosa et al., 2011). La implementación de regresores explícitos permite integrar directamente un modelo sustituto en el modelo global. Sin embargo, la disponibilidad de algoritmos de regresión capaces de generar estos regresores de forma explícita sigue siendo limitada, lo que puede restringir su aplicabilidad en determinados escenarios. La principal ventaja asociada a la implementación directa de los OBRs radica en la simplificación del proceso de solución, lo que se traduce en una mayor facilidad y rapidez en la obtención de resultados. Esto se debe a que, al integrar los OBRs directamente en el modelo global, el problema se transforma en uno de naturaleza lineal (según sea el caso), eliminando la necesidad de resolver formulaciones más complejas o no lineales que suelen ser computacionalmente exigentes.

3.3.2.3 Implementación de OBR no explícitos con Algoritmos Genéticos

Existen diversos algoritmos de regresión que han mostrado ser altamente efectivos pero no generan un modelo explícito que permita interpretar directamente las relaciones entre las variables independientes, por ejemplo, el uso de máquinas de soporte vectorial (Cristianini & Shawe-Taylor, 2000), por otro lado, existen técnicas basadas en Aprendizaje Profundo como las redes neuronales profundas las cuales son capaces de capturar patrones complejos pero no es posible representar explícitamente la relación entre entradas y salidas (Goodfellow et al., 2016), estos modelos han

sido clasificados en la literatura como técnicas no paramétricas ya que no proveen ecuaciones simples que muestren o describan el comportamiento del modelo (Bishop, 2006).

La implementación de los OBRs, cuya forma explícita se desconoce, se realiza a través de algoritmos genéticos (AG) siguiendo la estrategia presentada en la **Figura 4**.

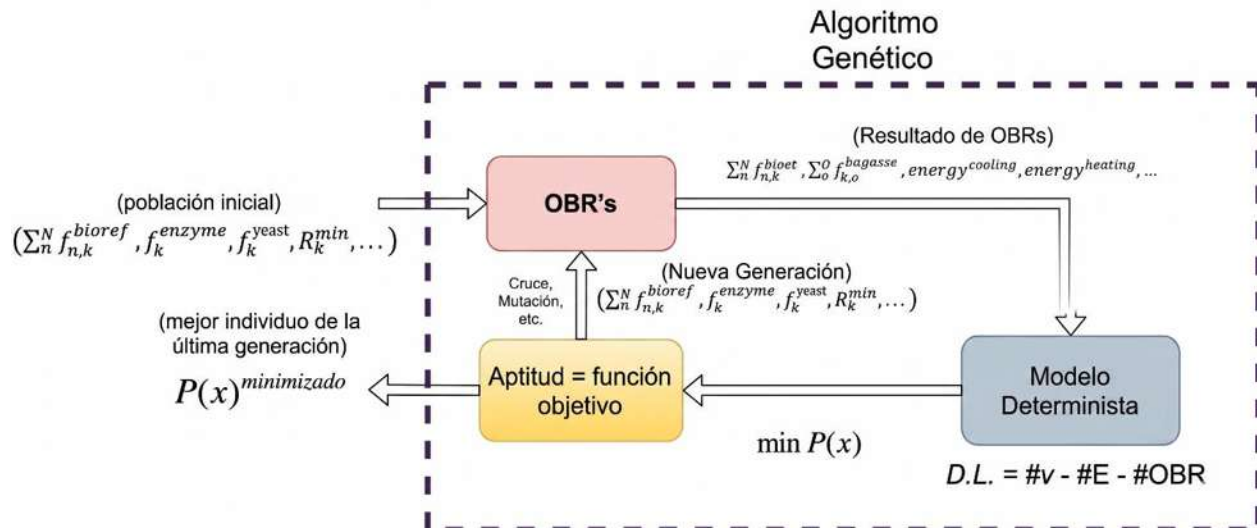


Figura 4. Implementación de OBR no explícitos a través de AG.

La estrategia consiste en definir un conjunto de biorrefinerías (individuos) cuyas condiciones de operación (genes) deben ser diferentes para cada individuo de la población; esto permite generar valores diferentes para cada regresor OBR, lo que implica que los grados de libertad (*G.L.*) definidos para el problema global estarán dados por la Ecuación (7):

$$G.L. = \#v - \#E - \#OBR \quad (7)$$

Donde $\#v$ representa el número de variables, $\#E$ representa el número de ecuaciones y $\#OBR$ representa el número de OBR calculados. La especificación del valor de los OBR permite resolver el modelo global exclusivamente por las variables relacionadas con el modelo lineal (ver Ecuación (1)). Para asegurar que la “evolución de las biorrefinerías” se centre en la minimización de la función objetivo global, la función de fitness del AG se basa en los resultados del modelo matemático determinista que optimiza dicha función. Esto permite al algoritmo, mediante iteraciones generacionales, proponer configuraciones de biorrefinerías cada vez más eficientes,

contribuyendo directamente a la optimización de los objetivos globales. Además, esta estrategia facilita una implementación sencilla, eliminando la necesidad de reformular cada regresor, lo que constituye una ventaja significativa en términos de simplicidad y eficiencia computacional.

La selección del tipo de OBR a implementar en función de la estrategia presentada en este trabajo se resume en la **Figura 5**. Dependiendo de la naturaleza del modelo obtenido, los OBRs pueden incorporarse directamente en formulaciones deterministas cuando presentan expresiones explícitas, o bien resolverse mediante técnicas metaheurísticas cuando corresponden a relaciones no explícitas o altamente complejas. Este enfoque permite aprovechar la capacidad predictiva de los modelos sustitutos sin comprometer la resolución del problema de optimización.

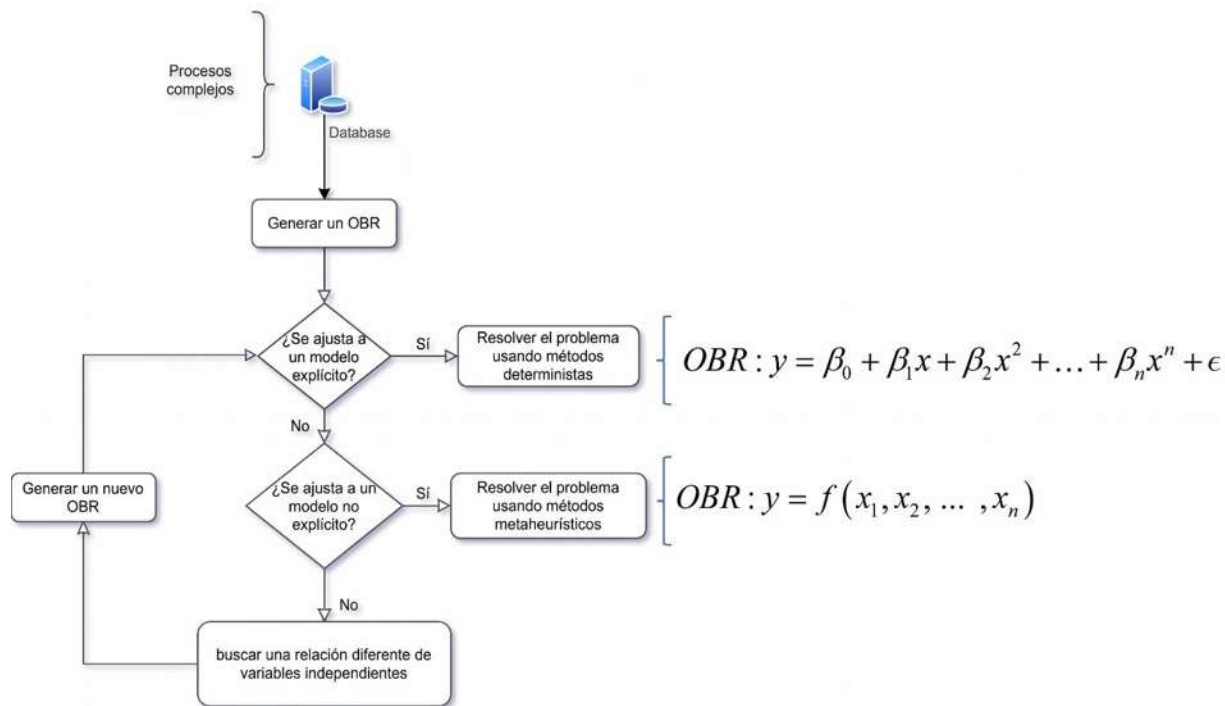


Figura 5. Estrategia para la selección del regresor.

3.3.2.4 Implementación de OBR no explícitos con Particle Swarm Optimization

Cuando los OBR no cuentan con una forma explícita, se puede recurrir a diferentes algoritmos metaheurísticos como puede ser Particle Swarm Optimization (PSO) usado como una estrategia para explorar el espacio de soluciones e incorporar de manera indirecta el comportamiento de los modelos sustitutos dentro del problema global, que, al compararlo con AG resulta ser computacionalmente más ligero. En la **Figura 6** se muestra la estrategia planteada para

la integración de PSO en la producción de Diesel Verde desde una perspectiva de SC empleando Random Forest (RF) como modelo de regresión. La metodología combina simulación de procesos, modelos sustitutos y optimización híbrida para evaluar simultáneamente indicadores económicos y ambientales asociados al diseño de la cadena de suministro.

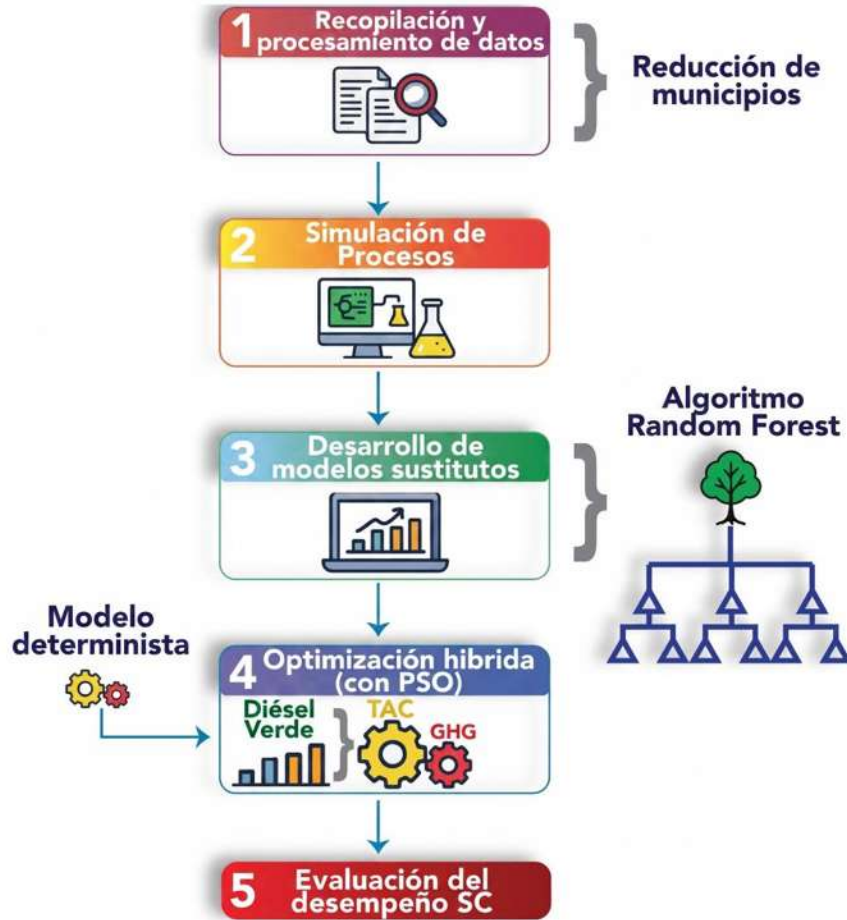


Figura 6. Estrategia metodológica para la producción de diésel verde utilizando OBRs y optimización híbrida basada en PSO.

Los OBRs se integran en un modelo de optimización híbrida, compuesto por un componente determinista y otro predictivo, para identificar las condiciones óptimas de operación de la SC. En este método, tanto la posición como la velocidad de cada partícula, que determinan la dirección del movimiento, se actualizan utilizando las siguientes ecuaciones:

$$V_i^{k+1} = wV_i^k + c_1r_1(p_i^k - x_i^k) + c_2r_2(p_{global}^k - x_i^k) \quad (8)$$

$$x_i^{k+1} = x_i^k + V_i^{k+1} \quad (9)$$



Aquí, x_i^{k+1} y V_i^{k+1} son vectores que representan la posición y la velocidad de la partícula i en la iteración $k+1$, respectivamente. El término w denota el peso de inercia, mientras que c_1 y c_2 son los coeficientes de aceleración cognitiva y social, respectivamente. r_1 y r_2 son vectores aleatorios con valores distribuidos uniformemente entre 0 y 1. p_i^k representa la mejor posición conocida de la partícula i , y p_{global}^k corresponde a la mejor posición encontrada por todo el enjambre. El subíndice k indica el número de iteración actual.

Es importante señalar que la nomenclatura empleada en esta subsección se aplica exclusivamente al método PSO y no corresponde a la metodología ni al marco de modelado de este trabajo. Sin embargo, para mantener la coherencia con la bibliografía existente sobre PSO, se ha adoptado la notación aquí presentada.

La elección de PSO en la producción de Diesel verde se basa en la simplicidad de su implementación, ya que, como se observa en las Ecuaciones (8-9), tiene relativamente pocos parámetros que requieren ajuste, y este algoritmo ha demostrado ser eficiente en problemas no lineales con variables de decisión continuas (Schwaab et al., 2008). En comparación con otras alternativas, como NSGA II, que requiere operadores genéticos, PSO alcanza tiempos de convergencia más rápidos en problemas de dimensionalidad moderada (Zhang et al., 2017), como el problema presentado en este caso de estudio. Además, se aplicó el método de restricción épsilon para generar curvas de Pareto. Por otro lado, PSO ofrece un mayor control sobre la distribución de soluciones, lo que resulta en una exploración más uniforme y completa de la curva de Pareto, como se observa en la sección de resultados, mientras que métodos como NSGA-II dependen del ajuste de parámetros, lo que puede concentrar indirectamente las soluciones en ciertas regiones.

Desde una perspectiva conceptual, el algoritmo PSO propone distintas configuraciones de plantas de diésel verde y, para cada una de ellas, se resuelve el modelo de la SC, considerando únicamente aquellas soluciones que cumplen con las restricciones impuestas por las configuraciones sugeridas (ver **Figura 7**). Las soluciones generadas se almacenan y evalúan según su desempeño, y se comparan iterativamente para encontrar las más eficientes. El algoritmo PSO con 100 iteraciones se ejecuta utilizando un coeficiente cognitivo (c_1) de 1.3, un coeficiente social (c_2) de 1.3, un peso de inercia (w) de 0.75 y una población compuesta por 30 partículas. La selección de estos parámetros sigue un proceso de ajuste informado por la literatura previa. En

particular, la configuración inicial se basa en el estudio de Ravagnani (2009), quien aplicó con éxito PSO en problemas de diseño. Posteriormente, se realizó un análisis de sensibilidad específico alrededor de esos valores para refinar los coeficientes c_1 , c_2 , el peso de inercia w y el tamaño de la población N_{pt} . Esta etapa de ajuste permite verificar la estabilidad de la convergencia y la robustez ante la variación de parámetros.

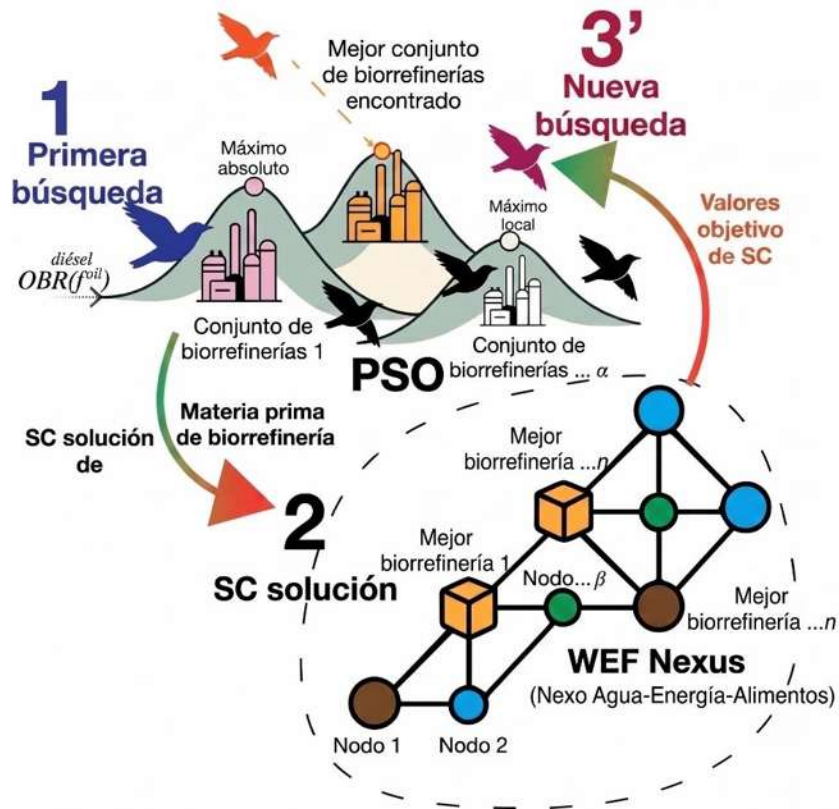
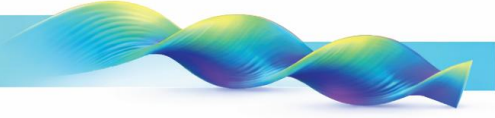


Figura 7. Perspectiva conceptual de la metodología propuesta.

Finalmente, los resultados obtenidos del modelo optimizado se comparan con las simulaciones originales para verificar su precisión y aplicabilidad en escenarios reales. Si se detectan inconsistencias entre los resultados del modelo y los valores generados por el simulador, es necesario revisar cuidadosamente tanto los datos utilizados como el desarrollo de los regresores. Esta revisión permite identificar y corregir posibles fuentes de error y, posteriormente, resolver nuevamente todo el modelo para garantizar su confiabilidad.



3.4 Modelado Matemático

En esta subsección se presentan los modelos desarrollados para las cadenas de suministro de caña de azúcar y de Diesel verde respectivamente.

3.4.1 Modelado matemático caña de azúcar

El modelo matemático de este caso de estudio se basa en la superestructura presentada previamente en la **Figura 3**.

La Ecuación (10) establece que la caña $f_{i,j}^{cane-mill}$ enviada desde los sitios de cultivo (i) a los ingenios azucareros (j) y la caña $f_{i,k}^{cane-bioref}$ enviada desde los sitios de cultivo hacia las biorrefinerías k no debe exceder la caña de azúcar disponible Q_i^{crop} en los sitios de cultivo.

$$\sum_j f_{i,j}^{cane-mill} + \sum_k f_{i,k}^{cane-bioref} \leq Q_i^{crop}, \forall i \in I \quad (10)$$

Para describir la producción de azúcar en los ingenios azucareros $f_{j,m}^{sugar-mill}$, se establece un parámetro de eficiencia $\eta^{sugar-mill}$ como se describe en la Ecuación (11):

$$\sum_m f_{j,m}^{sugar-mill} = \sum_i f_{i,j}^{cane-mill} \cdot \eta^{sugar-mill}, \forall j \in J \quad (11)$$

La azúcar enviada al mercado m ($f_m^{sugar-market}$) recolectada en los ingenios j se describe en la Ecuación (12).

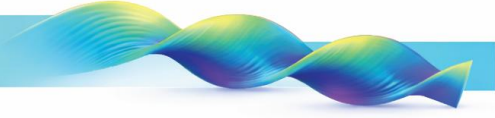
$$f_m^{sugar-market} = \sum_j f_{j,m}^{sugar-mill}, \forall m \in M \quad (12)$$

Para garantizar que la demanda de azúcar D_m^{sugar} continúe satisfaciéndose sin verse afectada por la producción de bioetanol en la región, se establece la Ecuación (13)

$$f_m^{sugar-market} \geq D_m^{sugar}, \forall m \in M \quad (13)$$

La Ecuación (14) establece que la caña de azúcar destinada a producir bioetanol $f_{i,k}^{cane-bioref}$ recolectada de todos los productores i debe ser igual a la caña de azúcar recibida en las biorrefinerías k ($f_{n,k}^{bioref}$) destinada a los mercados n :

$$\sum_i f_{i,k}^{cane-bioref} = \sum_n f_{n,k}^{bioref}, \forall k \in K \quad (14)$$



La biomasa de caña de azúcar se procesa en biorrefinerías para la producción de bioetanol $f_{n,k}^{bioet}$; sin embargo, la modelación asociada con este proceso puede ser amplia y compleja, por lo que aquí es donde se utilizan los OBRs y se representan como una función implícita que se definirá más adelante.

$$\sum_n^N f_{n,k}^{bioet} = OBR_k^{bioet}(\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots), \forall k \in K \quad (15)$$

Al igual que en la producción de azúcar, el bioetanol $f_n^{bioet-market}$ destinado al mercado n es igual al bioetanol producido en todas las biorrefinerías k ($f_{n,k}^{bioet}$):

$$\sum_k^K f_{n,k}^{bioet} = f_n^{bioet-market}, \forall n \in N \quad (16)$$

Con el fin de garantizar la producción de una determinada demanda de bioetanol D_n^{bioet} , se establece la Ecuación (17):

$$f_n^{bioet-market} \geq D_n^{bioet}, \forall n \in N \quad (17)$$

La producción de bagazo $f_{k,o}^{bagasse}$ depende del procesamiento realizado en las biorrefinerías, por lo que se representa como un $OBR_k^{bagasse}$:

$$\sum_o^O f_{k,o}^{bagasse} = OBR_k^{bagasse}(\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots), \forall k \in K \quad (18)$$

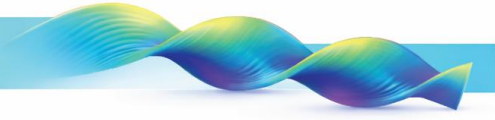
Con el fin de aprovechar la biomasa residual de la biorrefinería, se propone un proceso secundario como se indica en la **Figura 3** para la producción de aceite pirolítico $f_o^{pyro-oil}$, como se muestra en la Ecuación (19):

$$f_o^{pyro-oil} = \sum_k^K f_{k,o}^{bagasse} \cdot \eta^{pyro}, \forall o \in O \quad (19)$$

Para cuantificar los costos, en la Ecuación (20) el modelo toma en cuenta los costos asociados con el transporte $cost^{transport}$, el costo del equipo industrial $cost^{newequipment}$ y los materiales requeridos para la producción de bioetanol $cost^{materials}$, por ejemplo, agua de enfriamiento, levadura, enzimas, etc.

$$cost^{total} = cost^{transport} + cost^{newequipment} + cost^{materials} \quad (20)$$

Como se muestra en la Ecuación (21), los costos de transporte están asociados con el transporte de



la caña de azúcar desde los sitios de cultivo hasta los sitios de procesamiento, además del transporte de los productos a sus respectivos mercados:

$$cost^{transport} = C^{transport} \left[\sum_i^I \sum_j^J (f_{i,j}^{cane-mill} \cdot D_{i,j}^{cane-mill}) + \sum_j^J \sum_m^M (f_{j,m}^{sugar-mill} \cdot D_{j,m}^{mill-smarket}) + \sum_i^I \sum_k^K (f_{i,k}^{cane-bioref} \cdot D_{i,k}^{cane-bioref}) + \sum_n^N \sum_k^K (f_{n,k}^{bioet} \cdot D_{n,k}^{bioref-bmarket}) \right] \quad (21)$$

Donde $C^{transport}$ representa el costo de transporte terrestre por tonelada, $D_{i,j}^{cane-mill}$ las distancias entre los sitios de cultivo y los ingenios azucareros, $D_{i,k}^{cane-bioref}$ las distancias entre los sitios de cultivo y las biorrefinerías, $D_{n,k}^{bioref-bmarket}$ y $D_{j,m}^{mill-smarket}$ representa las distancias desde los sitios de procesamiento hasta sus respectivos mercados.

Para estimar el costo variable asociado con los materiales requeridos en las biorrefinerías $cost^{materials}$ y el costo del equipo industrial requerido para el proceso $cost^{newequipment}$, $OBR_k^{materials}$ y $OBR_k^{newequipment}$ se establecen como se muestra en las Ecuaciones (22-23):

$$cost^{materials} = \sum_k^K OBR_k^{materials} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots) + \sum_j^J \sum_m^M f_{j,m}^{sugar-mill} \cdot C^{sugar-cane} \quad (22)$$

$$cost^{newequipment} = \sum_k^K OBR_k^{newequipment} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}), \forall k \in K \quad (23)$$

El modelo cuantifica la energía requerida en las utilidades asociadas con enfriamiento $energy^{cooling}$, calentamiento $energy^{heating}$ y electricidad $energy^{electricity}$ de las biorrefinerías, como se muestra en las Ecuaciones (24-27), destacando que, como parte del proceso de bioetanol, estas se representan mediante OBRs:

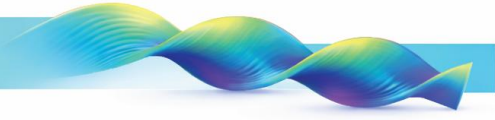
$$energy^{total} = energy^{cooling} + energy^{heating} + energy^{electricity} \quad (24)$$

$$energy^{cooling} = \sum_k^K OBR_k^{cooling} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots) \quad (25)$$

$$energy^{heating} = \sum_k^K OBR_k^{heating} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots) \quad (26)$$

$$energy^{electricity} = \sum_k^K OBR_k^{electricity} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots) \quad (27)$$

La ganancia del modelo (*profit*) se calcula mediante la Ecuación (28), considerando las ventas de azúcar, bioetanol y aceite pirolítico menos los costos totales previamente estimados:



$$profit = \sum_m^M f_m^{sugar-market} \cdot SP^{sugar} + \sum_n^N f_n^{bioet-market} \cdot SP^{bioet} + \sum_o^O f_o^{pyro-oil} \cdot SP^{pyro-oil} - cost^{total} \quad (28)$$

Donde SP^{sugar} , SP^{bioet} , $SP^{pyro-oil}$ representan los precios de venta del azúcar, bioetanol y aceite pirolítico, respectivamente.

Finalmente, se consideran las emisiones del sistema ghg^{total} asociadas con el transporte $ghg^{transport}$, los ingenios azucareros $ghg^{sugar-mill}$ y las emisiones generadas por la biorrefinería ghg^{bioref} (donde se implementa). Las Ecuaciones (29-32) describen cómo se calculan las emisiones:

$$ghg^{total} = ghg^{transport} + ghg^{sugar-mill} + ghg^{bioref} \quad (29)$$

$$ghg^{transport} = EF^{transport} \left[\sum_i^I \sum_j^J (f_{i,j}^{cane-mill} \cdot D_{i,j}^{cane-mill}) + \sum_j^J \sum_m^M (f_{j,m}^{sugar-mill} \cdot D_{j,m}^{mill-smarket}) + \sum_i^I \sum_k^K (f_{i,k}^{cane-bioref} \cdot D_{i,k}^{cane-bioref}) + \sum_n^N \sum_k^K (f_{n,k}^{bioet} \cdot D_{n,k}^{bioet-bmarket}) \right] \quad (30)$$

$$ghg^{sugar-mill} = \sum_j^J \sum_m^M f_{j,m}^{sugar-mill} \cdot EF^{sugar-mill} \quad (31)$$

$$ghg^{bioref} = \sum_k^K OBR_k^{ghg} (\sum_n^N f_{n,k}^{bioref}, f_k^{enzyme}, f_k^{yeast}, R_k^{min}, \dots), \forall k \in K \quad (32)$$

Donde $F^{transport}$, y $EF^{sugar-mill}$ representan el factor de emisión asociado con el transporte y los ingenios azucareros. $D_{i,j}^{cane-mill}$, $D_{i,k}^{cane-bioref}$, $D_{j,m}^{mill-smarket}$, $D_{n,k}^{bioet-bmarket}$ representan las distancias entre los sitios de cultivo y los ingenios, sitios de cultivo y biorrefinerías, ingenios azucareros y mercado de azúcar, y biorrefinerías y mercado de bioetanol, respectivamente.

3.4.2 Modelo matemático de diésel verde

Esta sección describe el modelo matemático desarrollado para la producción de diésel verde en el contexto del nexo agua-energía-alimentos. La superestructura mostrada en la **Figura 8** ilustra las diversas fuentes de energía disponibles para satisfacer las demandas vinculadas al cultivo de soya, la industria ganadera y las demandas municipales. También representa las diferentes fuentes de agua y el potencial de generación de biogás a partir del estiércol bovino. En el centro, la figura resalta cómo interactúan estos elementos con el sistema de producción de diésel verde. La formulación del modelo incorpora restricciones relacionadas con el nexo agua-energía-alimentos que vinculan simultáneamente estos recursos. Esto permite alcanzar la máxima



producción factible de diésel verde sin comprometer la seguridad hídrica, energética ni alimentaria. Sin estas restricciones, el modelo podría incrementar artificialmente la producción de diésel a expensas de recursos críticos del nexo, lo que resalta el papel esencial del enfoque de nexo para preservar el equilibrio del sistema.

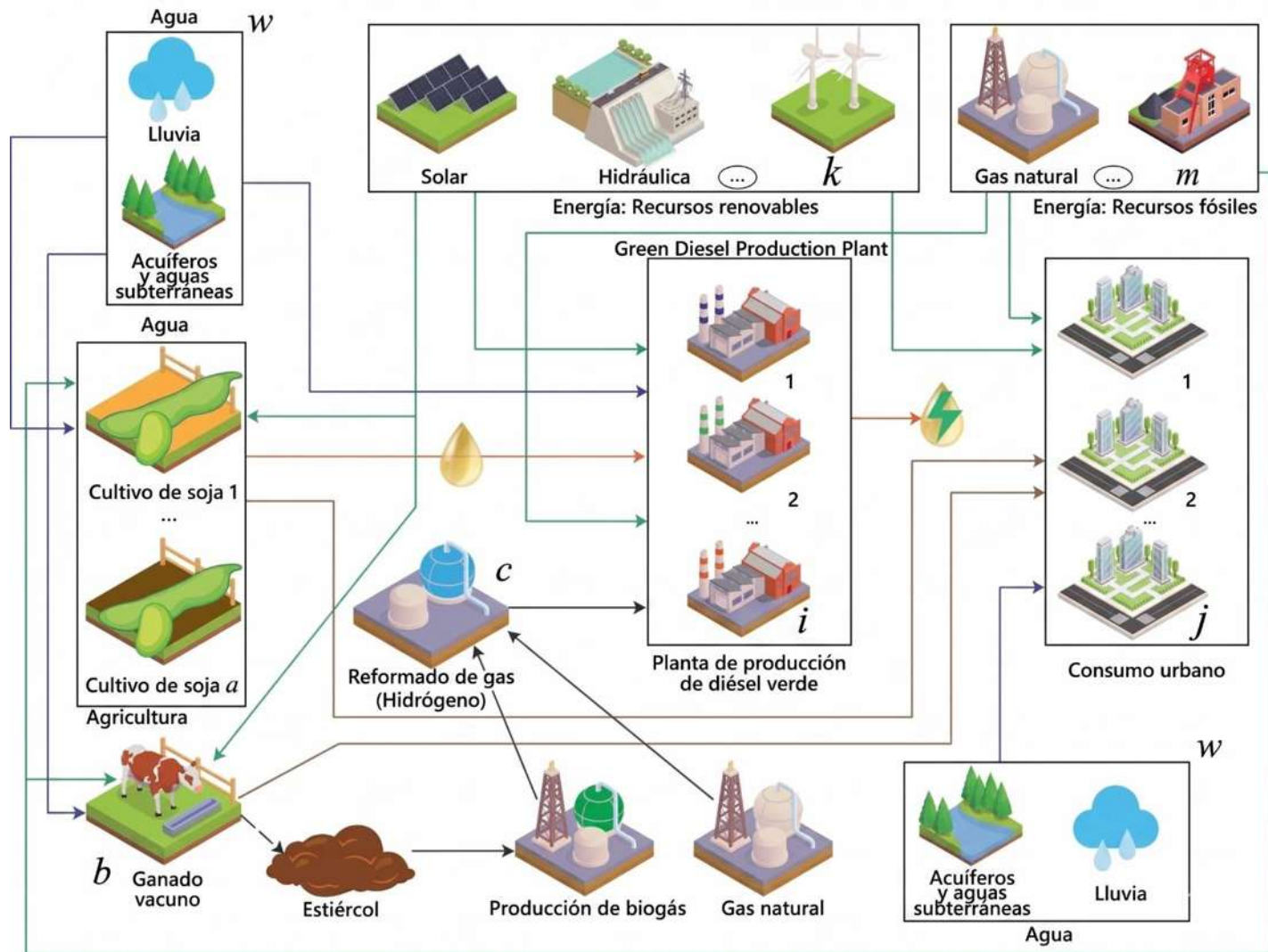
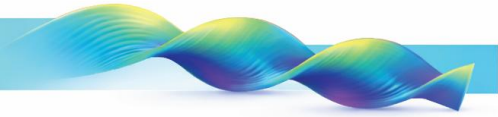


Figura 8. Superestructura para la producción de diésel verde en el contexto del nexo agua-energía-alimentos.



3.4.2.1 Energía

Esta subsección describe la demanda y oferta de energía consideradas en el modelo de la cadena de suministro.

Balance de energía en la planta de diésel verde

La energía requerida por cada planta i se calcula usando un OBR (derivado de los modelos RF previamente entrenados), y esta energía debe ser igual a la energía $p_{k,i}^{r-diesel}$ obtenida de fuentes renovables k y la energía $p_{m,i}^{f-diesel}$ obtenida de recursos fósiles m , como se indica en la Ecuación (33). En otras palabras, esta ecuación asegura que la demanda total de energía de cada planta de diésel verde se satisfaga mediante una combinación de insumos renovables y fósiles.

$$\sum_k^K p_{k,i}^{r-diesel} + \sum_m^M p_{m,i}^{f-diesel} = OBR_i^{diesel-energy-demand}(f_i^{oil-diesel}), \forall i \in I \quad (33)$$

Balance de energía en los nodos de demanda doméstica

Para satisfacer las demandas domésticas de los nodos j ($D_j^{energy-domestic}$), se utiliza la energía producida por recursos renovables $p_{k,j}^{r-domestic}$ y recursos fósiles $p_{m,j}^{f-domestic}$, como se muestra en la Ecuación (34). Esto significa que la demanda total de energía en cada nodo se satisface con la suma de los aportes renovables y fósiles.

$$\sum_k^K p_{k,j}^{r-domestic} + \sum_m^M p_{m,j}^{f-domestic} = D_j^{energy-domestic}, \forall j \in J \quad (34)$$

De manera similar, las Ecuaciones (35) y (36) describen los balances de energía en los sitios de cultivo a y en las granjas ganaderas b , donde $p_{k,a}^{r-Agriculture}$ y $p_{m,a}^{f-Agriculture}$ representan la energía obtenida de recursos renovables destinada al consumo agrícola y ganadero, respectivamente, mientras que $p_{m,a}^{f-Agriculture}$ y $p_{m,b}^{f-Cattle}$ representan de forma análoga la energía obtenida de recursos fósiles. $D_a^{energy-Agriculture}$ y $D_b^{energy-Cattle}$ representan las demandas requeridas en los sitios de cultivo y en las granjas ganaderas, respectivamente. Estos balances garantizan que las operaciones agrícolas y ganaderas reciban la energía requerida a partir de las fuentes renovables y fósiles disponibles.



Balance de energía en los sitios de cultivo

$$\sum_k^K p_{k,a}^{r-Agriculture} + \sum_m^M p_{m,a}^{f-Agriculture} = D_a^{energy-Agriculture}, \forall a \in A \quad (35)$$

Balance de energía en las granjas ganaderas

$$\sum_k^K p_{k,b}^{r-Cattle} + \sum_m^M p_{m,b}^{f-Cattle} = D_b^{energy-Cattle}, \forall b \in B \quad (36)$$

Generación de energía

La generación de energía a partir de recursos renovables p_k^{r-gen} es entonces la suma de todas las energías renovables descritas en las ecuaciones anteriores, como se muestra en la Ecuación (37).

$$p_k^{r-gen} = \sum_i^I p_{k,i}^{r-diesel} + \sum_j^J p_{k,j}^{r-domestic} + \sum_a^A p_{k,a}^{r-Agriculture} + \sum_b^B p_{k,b}^{r-Cattle}, \forall k \in K \quad (37)$$

Esta ecuación garantiza que la generación de energía renovable coincida con la distribución del consumo de energía renovable en todo el sistema.

Dado que la infraestructura para generar energía eléctrica a partir de recursos renovables es limitada, p_k^{r-gen} debe restringirse a la capacidad instalada CAP_k^{r-gen} de cada tecnología k , como se muestra en la Ecuación (38).

$$p_k^{r-gen} \leq CAP_k^{r-gen}, \forall k \in K \quad (38)$$

Esta restricción garantiza que la producción de energía renovable permanezca dentro de los límites técnicos de las plantas instaladas.

De manera similar, estas restricciones se aplican a la energía eléctrica generada mediante recursos fósiles (p_m^{f-gen}), la cual debe limitarse por la capacidad instalada CAP_m^{f-gen} de las tecnologías m (véanse las Ecuaciones (39-40)). Estas ecuaciones garantizan que la generación de energía fósil se contabilice de manera consistente y no exceda la capacidad de la infraestructura.

$$p_m^{f-gen} = \sum_i^I p_{m,i}^{f-diesel} + \sum_j^J p_{m,j}^{f-domestic} + \sum_a^A p_{m,a}^{f-Agriculture} + \sum_b^B p_{m,b}^{f-Cattle}, \forall m \in M \quad (39)$$

$$p_m^{f-gen} \leq CAP_m^{f-gen}, \forall m \in M \quad (40)$$



3.4.2.2 Agua

Esta subsección describe la demanda y disponibilidad de agua dulce consideradas en el modelo de la cadena de suministro.

Balances de agua

Para estimar los requerimientos de agua de las distintas plantas de producción de diésel verde, el parámetro WA^{diesel} que representa el agua necesaria para producir diésel verde se multiplica por la cantidad de diésel producido. Cada planta puede utilizar los recursos hídricos disponibles w , donde $wa_{w,i}^{diesel}$ representa el agua destinada a la producción de diésel en la planta i . Por otro lado, para satisfacer las demandas domésticas, agrícolas y ganaderas, se establecen las demandas $D_j^{water-domestic}$, $D_a^{water-agriculture}$ y $D_b^{water-cattle}$ y sus respectivos flujos de agua $wa_{w,j}^{domestic}$, $wa_{w,a}^{agriculture}$ y $wa_{w,b}^{cattle}$:

$$\sum_w wa_{w,i}^{diesel} = f_i^{diesel} WA^{diesel}, \forall i \in I \quad (41)$$

$$\sum_w wa_{w,j}^{domestic} = D_j^{water-domestic}, \forall j \in J \quad (42)$$

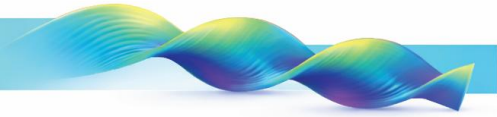
$$\sum_w wa_{w,a}^{agriculture} = D_a^{water-agriculture}, \forall a \in A \quad (43)$$

$$\sum_w wa_{w,b}^{cattle} = D_b^{water-cattle}, \forall b \in B \quad (44)$$

La Ecuación (45) representa la cantidad de agua requerida para la producción de biogás, asumiendo una relación 1:5 de estiércol a agua, como se reporta en el trabajo presentado por Barrena et al. (2019).

$$wa^{biogas} = \sum_b^B \sum_c^C (f_{b,c}^{manure}) \cdot 5 \quad (45)$$

Es importante destacar que el modelo considera la recolección de agua wa^{fresh} para consumo en sitio, por lo que es necesario diferenciar entre el uso de agua dulce y el uso de agua recolectada de la lluvia. Para este propósito se establece la Ecuación (46), mientras que la Ecuación (47) establece una restricción que limita la cantidad de agua dulce wa^{fresh} que puede extraerse con base en los recursos hídricos disponibles AW .



$$wa^{fresh} = \sum_w^W \left(\frac{\sum_i^I wa_{w,i}^{diesel} + \sum_j^J wa_{w,j}^{domestic} + \sum_a^A wa_{w,a}^{agriculture} + \sum_b^B wa_{w,b}^{cattle} + wa^{biogas}}{\sum_a^A wa_{w,a}^{agriculture} + \sum_b^B wa_{w,b}^{cattle} + wa^{biogas}} \right) \quad (46)$$

$$AW \geq wa^{fresh} \quad (47)$$

Sistemas de captación de agua

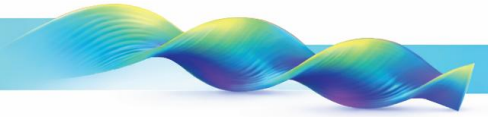
Para describir la captación de agua de lluvia $wa_{w=rain,i}^{diesel}$ es necesario establecer una capacidad máxima para cada colector $CAP^{water-collector-MAX}$, lo que limita la cantidad de agua de lluvia que puede almacenarse, además de introducir el uso de la variable binaria $z_i^{water-collector}$, empleada para representar la decisión de instalar o no colectores de agua en cada sector (1 cuando se decide instalar el colector y 0 cuando se descarta). Las Ecuaciones (48-49) representan la captación de agua para cada biorrefinería, donde la capacidad máxima se fija en función del área de captación del colector y de la precipitación anual registrada en la ubicación. En las Ecuaciones (50-53), se establecen las variables y restricciones asociadas con la captación de agua en los sitios de cultivo y en las granjas lecheras y, a diferencia del agua destinada a la producción de diésel, estas ecuaciones establecen capacidades de captación asociadas con el área y la precipitación anual registrada para cada nodo, además de sus respectivas variables binarias. En estas ecuaciones, $wa_{w=rain,a}^{agriculture}$ y $wa_{w=rain,a}^{cattle}$ representan el agua de lluvia captada para fines agrícolas y ganaderos, respectivamente; $ar_a^{agriculture}$ y ar_b^{cattle} representan el área de captación para fines agrícolas y ganaderos, respectivamente; $z_a^{agriculture-water}$ y $z_b^{cattle-water}$ representan las variables binarias de decisión para la instalación de colectores de agua para fines agrícolas y ganaderos, respectivamente; y $PCP_a^{water-agriculture}$ y $PCP_b^{water-cattle}$ representan la precipitación anual de agua en los sitios de cultivo y en las granjas lecheras, respectivamente.

$$wa_{w=rain,i}^{diesel} \leq cap^{water-collector}, \forall i \in I \quad (48)$$

$$cap^{water-collector} \leq CAP^{water-collector-MAX} \cdot z_i^{water-collector}, \forall i \in I \quad (49)$$

$$wa_{w=rain,a}^{agriculture} \leq ar_a^{agriculture} \cdot PCP_a^{water-agriculture}, \forall a \in A \quad (50)$$

$$ar_a^{agriculture} \leq AR_a^{agriculture-MAX} \cdot z_a^{agriculture-water}, \forall a \in A \quad (51)$$



$$w a_{w=rain,a}^{cattle} \leq a r_b^{cattle} \cdot P C P_b^{water-cattle}, \forall b \in B \quad (52)$$

$$a r_b^{cattle} \leq A R_b^{cattle-MAX} \cdot z_b^{cattle-water}, \forall b \in B \quad (53)$$

3.4.2.3 Alimentos y diésel

Esta subsección describe la producción de soya y la demanda de diésel consideradas en el modelo de la cadena de suministro.

Balances en los sitios de cultivo

Los alimentos $f_{j,a}^{ag-domestic}$ y materias primas $f_{i,a}^{ag-diesel}$ producidos en los distintos sitios de cultivo a deben ser menores o iguales a la capacidad de producción AG_a^{gen} de cada sitio de cultivo a , como se describe en la Ecuación (54). Por otro lado, en la Ecuación (55) se establece una restricción para asegurar que el alimento destinado a cada nodo de demanda j no sea excedido (D_j^{ag}). La Ecuación (56) permite estimar, mediante un factor de rendimiento η^{oil} , la cantidad de aceites vegetales que pueden utilizarse para la producción de diésel $f_i^{oil-diesel}$.

$$\sum_j f_{j,a}^{ag-domestic} + \sum_i f_{i,a}^{ag-diesel} \leq AG_a^{gen}, \forall a \in A \quad (54)$$

$$\sum_a f_{j,a}^{ag-domestic} = D_j^{ag}, \forall j \in J \quad (55)$$

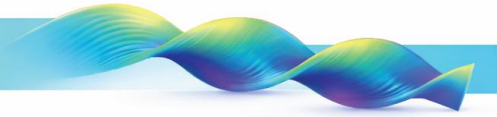
$$f_i^{oil-diesel} = \sum_a f_{i,a}^{ag-diesel} \cdot \eta^{oil}, \forall i \in I \quad (56)$$

Producción de diésel

Para calcular la cantidad de diésel producida por cada planta i , se establece un regresor OBR ($OBR_i^{diesel}(f_i^{oil-diesel})$). Esta producción debe ser menor o igual a la demanda de diésel establecida (D^{diesel}) como se muestra en las Ecuaciones (57-58)

$$f_i^{diesel} = OBR_i^{diesel}(f_i^{oil-diesel}), \forall i \in I \quad (57)$$

$$\sum_i f_i^{diesel} \leq D^{diesel} \quad (58)$$



Producción de hidrógeno

La producción de hidrógeno $f_i^{hydrogen}$ se propone mediante reformado de gas, considerando dos materias primas: biogás producido a partir del estiércol del ganado $f_{c,i}^{biogas}$ y gas natural $f_i^{nat-gas}$. Las Ecuaciones (59-64) describen este proceso, donde AU_b representa las unidades animales disponibles en cada granja b , η^{manure} representa un factor de conversión de la cantidad de estiércol generada por cada unidad animal, z_i^{Biogas} representa una variable binaria para la existencia o no de plantas de biogás, CA^{Biogas} representa la capacidad propuesta para la planta de biogás, η^{biogas} es un factor de eficiencia de la cantidad de biogás que puede obtenerse por cada tonelada de estiércol considerando un proceso de digestión anaerobia, $\eta^{biogasreforming}$ y $\eta^{gasreforming}$ representan un factor de eficiencia para la producción de hidrógeno a partir de biogás y gas natural, respectivamente, $CAP^{nat-gas}$ representa la disponibilidad de gas natural en la región y $OBR_i^{hydrogen}(f_i^{oil-diesel})$ representa un regresor utilizado para calcular la cantidad de hidrógeno necesaria para producir diésel verde en cada planta i .

$$\sum_c^C f_{b,c}^{manure} \leq AU_b \cdot \eta^{manure}, \forall b \in B \quad (59)$$

$$\sum_c^C f_{c,i}^{biogas} \leq z_i^{Biogas} \cdot CA^{Biogas}, \forall i \in I \quad (60)$$

$$\sum_i^I f_{c,i}^{biogas} = \sum_b^B f_{b,c}^{manure} \cdot \eta^{biogas}, \forall c \in C \quad (61)$$

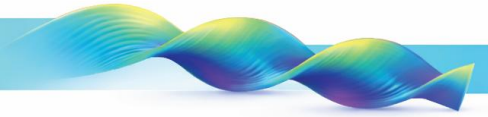
$$f_i^{hydrogen} = \sum_c^C f_{c,i}^{biogas} \cdot \eta^{biogasreforming} + f_i^{nat-gas} \cdot \eta^{gasreforming}, \forall i \in I \quad (62)$$

$$\sum_i^I f_i^{nat-gas} \leq CAP^{nat-gas} \quad (63)$$

$$f_i^{hydrogen} = OBR_i^{hydrogen}(f_i^{oil-diesel}), \forall i \in I \quad (64)$$

3.4.2.4 Costos

El costo anual total (tac) se estima a partir de varios costos asociados con el almacenamiento de agua $cost^{water-storage}$, el bombeo de agua $cost^{water-pump}$, la distribución de gas $cost^{gas-dist}$, los costos de producción de diésel $cost^{diesel}$, biogás $cost^{biogas}$ y electricidad $cost^{energy}$, y finalmente los costos de transporte $cost^{transport}$ asociados con las distintas materias primas involucradas en el modelo matemático. La Ecuación (65) establece cómo



calcular este costo.

$$tac = \left(cost^{water-storage} + cost^{water-pump} + cost^{gas-dist} + \right. \\ \left. cost^{diesel} + cost^{biogas} + cost^{energy} + cost^{transport} \right) \quad (65)$$

Costo del agua

El costo asociado con los recursos hídricos se presenta en las Ecuaciones (66-67), donde se describen los costos asociados con el almacenamiento de agua ($w = rain$) y el bombeo ($\forall w \neq rain$), $A^{water-storage}$ y $B^{water-storage}$ son los costos fijos y variables asociados con los sistemas de almacenamiento, mientras que los parámetros DIS representan las distancias de bombeo de agua para cada nodo que forma parte del nexo, y $C^{water-pump}$ representa el costo del bombeo de agua.

$$cost^{water-storage} = \\ \left(A^{water-storage} \cdot \left[\sum_i^I z_i^{water-collector} + \sum_a^A z_a^{agriculture-water} + \sum_b^B z_b^{cattle-water} \right] + \right. \\ \left. B^{water-storage} \cdot \left[\sum_i^I wa_{w,i}^{diesel} + \sum_j^J wa_{w,j}^{domestic} + \sum_a^A wa_{w,a}^{agriculture} + \sum_b^B wa_{w,b}^{cattle} \right]_{[w=rain]} \right) \quad (66)$$

$$cost^{water-pump} = C^{water-pump} \cdot \sum_{\forall w \neq rain}^W \left(\sum_i^I wa_{w,i}^{diesel} \cdot DIS_{w,i}^{wat-diesel} + \sum_j^J wa_{w,j}^{domestic} \cdot DIS_{w,j}^{wat-dome} + \right. \\ \left. \sum_a^A wa_{w,a}^{agriculture} \cdot DIS_{w,a}^{wat-agri} + \sum_b^B wa_{w,b}^{cattle} \cdot DIS_{w,b}^{wat-cattle} \right) \quad (67)$$

Distribución de gas

Los costos de distribución de gas están asociados con los costos de distribución de biogás $C^{biogas-dist}$ y gas natural $C^{gas-dist}$, como se muestra en la Ecuación (68).

$$cost^{gas-dist} = \sum_i^I (C^{biogas-dist} \cdot \sum_c^C (f_{c,i}^{biogas} \cdot DIS_{c,i}^{biogas}) + C^{gas-dist} \cdot f_i^{nat-gas} \cdot DIS_i^{nat-gas}) \quad (68)$$

Producción de diésel verde

Los costos de producción de diésel verde se estiman considerando un parámetro C^{diesel} que representa el costo variable de producir diésel verde de la siguiente manera:

$$cost^{diesel} = \sum_i^I f_i^{diesel} C^{diesel} \quad (69)$$

Producción de hidrógeno y biogás

Para estimar los costos del hidrógeno, en la Ecuación (70) se considera el costo por tonelada



$C^{hydrogen-prod}$. Para el costo del biogás se consideran el costo fijo A^{Biogas} y el costo variable B^{Biogas} , como se muestra en la Ecuación (71).

$$cost^{hydrogen} = C^{hydrogen-prod} \cdot \sum_i^I f_i^{hydrogen} \quad (70)$$

$$cost^{biogas} = A^{Biogas} z_i^{Biogas} + \sum_i^I \sum_c^C f_{c,i}^{biogas} \cdot B^{Biogas} \quad (71)$$

Producción de energía

Los costos asociados con la producción de energía eléctrica se basan en los costos de producción usando recursos renovables k (C_k^{r-prod}) y los costos de producción usando recursos fósiles m (C_m^{f-prod}):

$$cost^{energy} = \sum_k^K p_k^{r-gen} \cdot C_k^{r-prod} + \sum_m^M p_m^{f-gen} \cdot C_m^{f-prod} \quad (72)$$

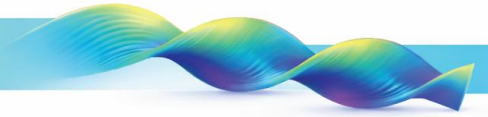
Transporte

Finalmente, los costos de transporte están asociados con un costo de transporte terrestre ($C^{transport}$), que considera el costo por tonelada y por kilómetro recorrido, como se establece en la Ecuación (73).

$$cost^{transport} = C^{transport} \left(\frac{\sum_j^J \sum_a^A f_{j,a}^{ag-domestic} \cdot DIS_{j,a}^{ag-domestic}}{\sum_b^B \sum_c^C f_{b,c}^{manure} \cdot DIS_{b,c}^{manure}} + \sum_i^I \sum_a^A f_{i,a}^{ag-diesel} \cdot DIS_{i,a}^{ag-diesel} \right) \quad (73)$$

3.4.2.5 Emisiones

Las emisiones se estiman de manera similar a los costos, considerando los parámetros EF como factores de emisión de las diferentes etapas del proceso descrito en la superestructura presentada en la **Figura 8**. Estas emisiones se describen en las Ecuaciones (74-80). La Ecuación (81) estima las emisiones totales generadas. En esta ecuación, el término ghg^{tot} representa las emisiones anuales totales del sistema. $ghg^{water-pump}$, $ghg^{gas-dist}$, ghg^{diesel} , $ghg^{hydrogen}$, ghg^{biogas} , ghg^{energy} , $ghg^{transport}$ representan las emisiones asociadas con el bombeo de agua, la distribución de gas, la producción de diésel (usando el regresor $OBR_i^{diesel-ghg}(f_i^{diesel})$), la producción de hidrógeno, la producción de biogás, la producción de energía y las emisiones generadas por el transporte de materias primas y productos.



También es importante señalar que en el modelo se consideran las emisiones de la fase agrícola. Sin embargo, no se incluyen las emisiones por cambio de uso de suelo, ya que se asume la producción actual de soja. No obstante, si escenarios futuros consideran el establecimiento de nuevas áreas de cultivo, las emisiones por cambio de uso de suelo deben incorporarse al análisis, ya que pueden representar una porción significativa de las emisiones totales de GHG. En el caso de la soja, cuando la tierra se convierte para su cultivo con fines de producción de biocombustibles, el cambio de uso de suelo asociado genera emisiones de GHG comparables a las de los combustibles fósiles, sin ofrecer prácticamente ningún beneficio ambiental (Capaz et al., 2021).

$$ghg^{water-pump} = EF^{water-pump} .$$

$$\sum_w^W \left(\sum_i^I wa_{w,i}^{diesel} \cdot DIS_{w,i}^{wat-diesel} + \sum_j^J wa_{w,j}^{domestic} \cdot DIS_{w,i}^{wat-dome} + \sum_a^A wa_{w,a}^{agriculture} \cdot DIS_{w,i}^{wat-agri} + \sum_b^B wa_{w,b}^{cattle} \cdot DIS_{w,i}^{wat-cattle} \right) \quad (74)$$

$$ghg^{gas-dist} =$$

$$\sum_i^I (EF^{biogas-dist} \cdot \sum_c^C (f_{c,i}^{biogas} \cdot DIS_{c,i}^{biogas}) + EF^{gas-dist} \cdot f_i^{nat-gas} \cdot DIS_i^{nat-gas}) \quad (75)$$

$$ghg^{diesel} = \sum_i^I OBR_i^{diesel-ghg} (f_i^{diesel}) \quad (76)$$

$$ghg^{hydrogen} = EF^{hydrogen-prod} \cdot \sum_i^I f_i^{hydrogen} \quad (77)$$

$$ghg^{gas} = EF^{biogas-prod} \cdot \sum_i^I \sum_c^C f_{c,i}^{biogas} \quad (78)$$

$$ghg^{energy} = \sum_k^K p_k^{r-gen} \cdot EF_k^{r-prod} + \sum_m^M p_m^{f-gen} \cdot EF_m^{f-prod} \quad (79)$$

$$ghg^{transport} = EF^{transport} \left(\sum_j^J \sum_a^A f_{j,a}^{ag-domestic} \cdot DIS_{j,a}^{ag-domestic} + \sum_i^I \sum_a^A f_{i,a}^{ag-diesel} \cdot DIS_{i,a}^{ag-diesel} + \sum_b^B \sum_c^C f_{b,c}^{manure} \cdot DIS_{b,c}^{manure} \right) \quad (80)$$

$$ghg^{tot} = \left(ghg^{water-pump} + ghg^{gas-dist} + ghg^{diesel} + ghg^{biogas} + ghg^{energy} + ghg^{transport} \right) \quad (81)$$

3.4.2.6 Función objetivo

En el contexto del nexo agua-energía-alimentos, es esencial considerar múltiples perspectivas al diseñar una SC sostenible. Por ello, se propone un enfoque de optimización multiobjetivo



que considera simultáneamente tres funciones objetivo: (i) minimizar el costo anual totalizado ($\min tac$), (ii) reducir las emisiones totales de gases de efecto invernadero ($\min ghg^{tot}$) y (iii) minimizar el consumo de agua dulce ($\min wa^{fresh}$) a lo largo de toda la cadena. Este enfoque permite capturar de forma integral las interacciones entre distintos recursos, facilitando decisiones más equilibradas que consideran los compromisos entre aspectos económicos, ambientales y de gestión del recurso hídrico

$$\min tac \quad (82)$$

$$\min ghg^{tot} \quad (83)$$

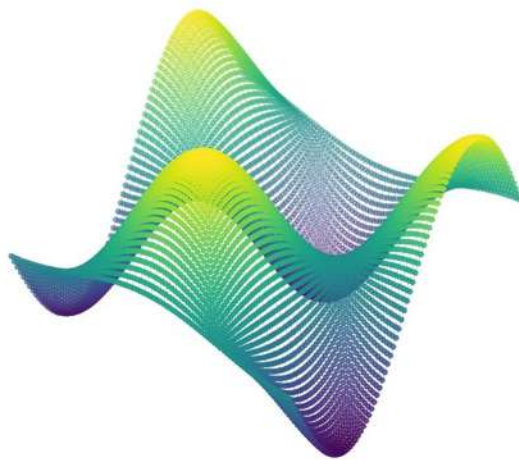
$$\min wa^{fresh} \quad (84)$$

Nótese que, para encontrar la solución que favorece una mayor producción total, es necesario priorizar inicialmente el incremento de la producción de diésel verde mientras se optimiza la SC, considerando simultáneamente los aspectos económicos y ambientales asociados al nexo agua-energía-alimentos, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\max \frac{\sum_i^I f_i^{diesel}}{D^{diesel}} \quad (85)$$



Capítulo 4. Resultados





En este capítulo se abordan los resultados de los diferentes casos de estudio planteados.

4.1 Producción de etanol a partir de la caña de azúcar

La producción de bioetanol a partir de la caña de azúcar representa una alternativa atractiva para la transición hacia combustibles sostenibles. Sin embargo, el diseño estratégico de su cadena de suministro exige equilibrar la rentabilidad económica con la reducción del impacto ambiental. En esta sección se analiza un caso de estudio enfocado en la integración de nuevas biorrefinerías dentro de la infraestructura agrícola del estado de Michoacán. Para superar la complejidad matemática que implica simular estas unidades de procesamiento, se implementa la metodología basada OBRs, lo que permite evaluar eficientemente las rutas de producción y su viabilidad a gran escala. A continuación, se detallan los modelos desarrollados para este propósito.

Para este caso de estudio se propone el desarrollo de regresores lineales de tipo explícito. La **Figura 9** muestra gráficos de paridad para los regresores que modelan la carga térmica de calentamiento, el consumo de electricidad y la carga térmica de enfriamiento, como se observa los tres regresores presentan una alta concordancia entre los valores simulados y predichos, con coeficientes de determinación ajustados superiores a 0.96. Estos resultados indican que los modelos desarrollados son capaces de representar adecuadamente el comportamiento de las variables de proceso consideradas. La principal ventaja asociada con la implementación directa de los OBRs radica en la simplificación del proceso de solución, lo que se traduce en una mayor facilidad y rapidez para obtener resultados.

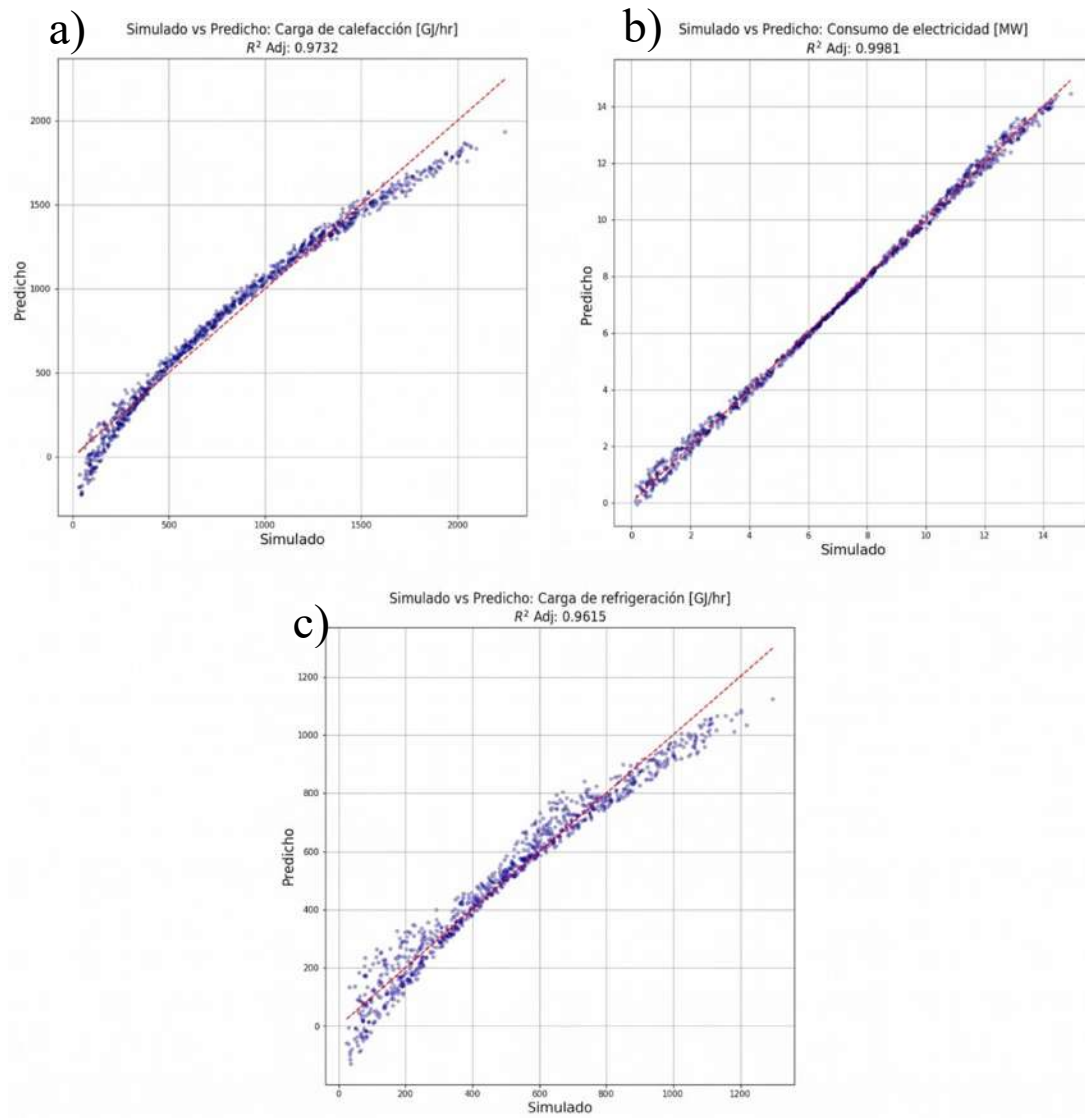
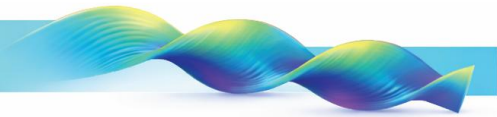


Figura 9. Diagramas de paridad para a) $OBR^{heating}$, b) $OBR^{electricity}$, c) $OBR^{cooling}$ usando un algoritmo de regresión lineal



En la **Figura 10** se muestra el ajuste de los *a) $OBR^{electricity}$, b) $OBR^{heating}$, c) $OBR^{cooling}$* , utilizando un algoritmo de red neuronal codificado con la biblioteca TensorFlow (Abadi et al., 2016) en Python. Se observa que el ajuste de estos regresores entrega mejores valores de R^2 , lo que sugiere que este regresor muestra una mejor generalización del modelo. Los hiperparámetros seleccionados siguiendo una metodología iterativa se muestran en la **Tabla 1**.

Tabla 1. Hiperparámetros de la red neuronal desarrollada.

Hiperparámetro	Valor
Escalador	StandardScaler
Neuronas de la capa de entrada	X_train.shape
Capas ocultas	2
Neuronas por capa oculta	64
Neuronas de la capa de salida	1 (per OBR)
Función de activación	ReLU
Optimizador	Adam
Función de pérdida	Mean Squared Error (MSE)
Épocas	100
Tamaño de lote	32
Proporción de validación	0.2

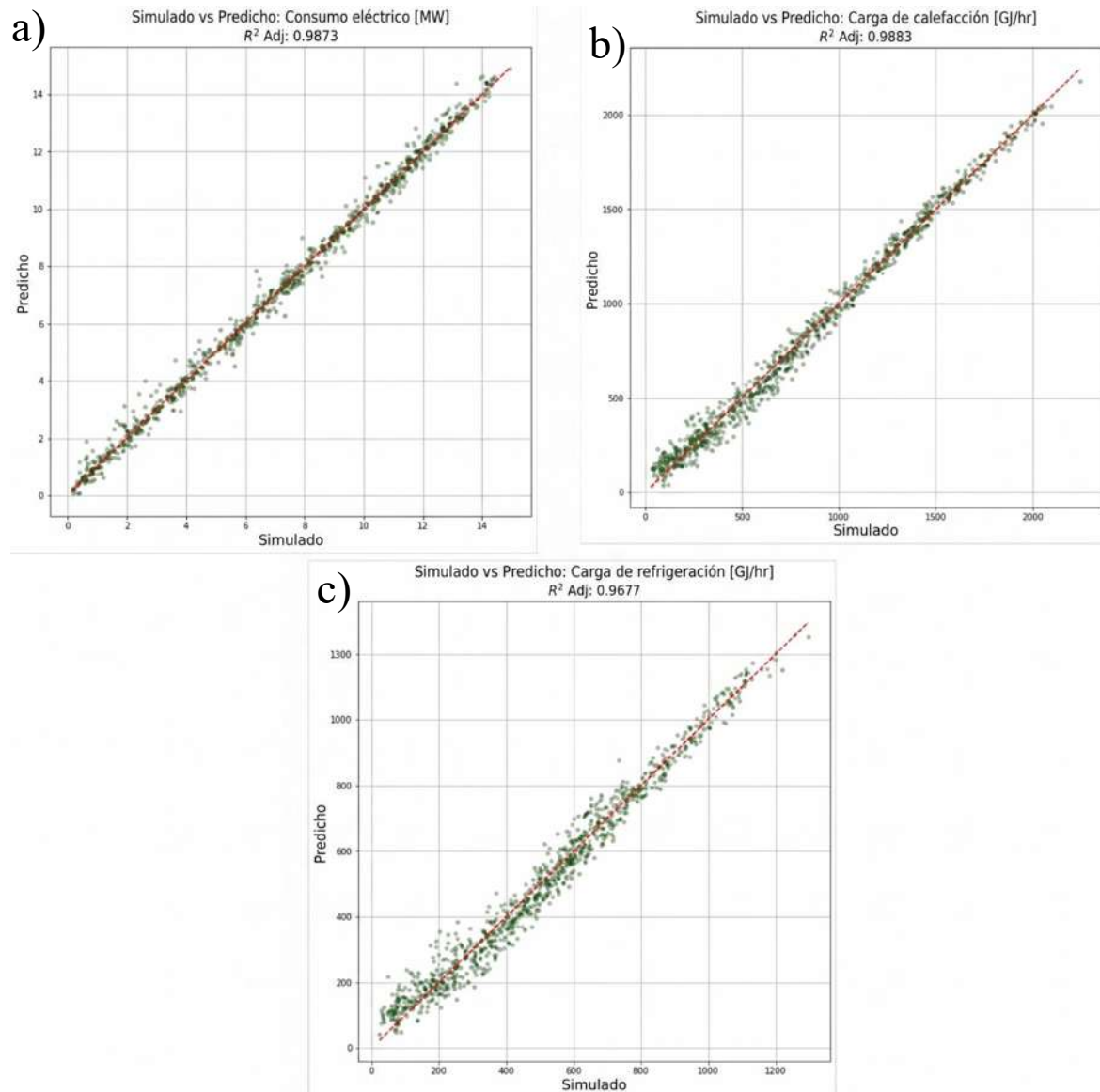


Figura 10. Diagramas de paridad para **a) $OBR^{electricity}$** , **b) $OBR^{heating}$** , **c) $OBR^{cooling}$** usando un algoritmo de regresión con red neuronal.

El caso de estudio seleccionado para evaluar la estrategia propuesta en este trabajo es la región de Michoacán, México, conocida por su destacada producción agrícola. Entre los principales cultivos del estado se encuentran el aguacate, la fresa, la zarzamora, la lenteja, el durazno, la ciruela y la caña de azúcar (GOB, 2018). En el ámbito de la producción de azúcar, Michoacán cuenta con aproximadamente 15,154 hectáreas de cultivo de caña de azúcar, lo que genera una producción anual de 160,000 toneladas de azúcar de diversas calidades (UNC, 2017).

Para este trabajo, se propone la instalación de tres biorrefinerías en el estado, ubicándolas estratégicamente en los mismos municipios donde actualmente operan los ingenios azucareros: Santa Clara, Taretan y Pedernales. El diseño de estas biorrefinerías sigue el esquema presentado por Huang et al. (2016), el cual integra la producción de etanol y biodiésel desde caña lipídica bajo supuestos específicos de conversión, recuperación de coproductos y evaluación económica.

La **Figura 11** presenta la superestructura aplicada al caso de estudio, ilustrando la ubicación de los sitios de cultivo, las biorrefinerías/ingenios y los mercados propuestos. Se consideran dos mercados principales: la ciudad de Morelia, para los productos destinados al consumo local, y el puerto de Lázaro Cárdenas, para los productos destinados a exportación. La **Tabla 2** detalla los sitios de cultivo seleccionados junto con su respectiva producción de caña de azúcar.

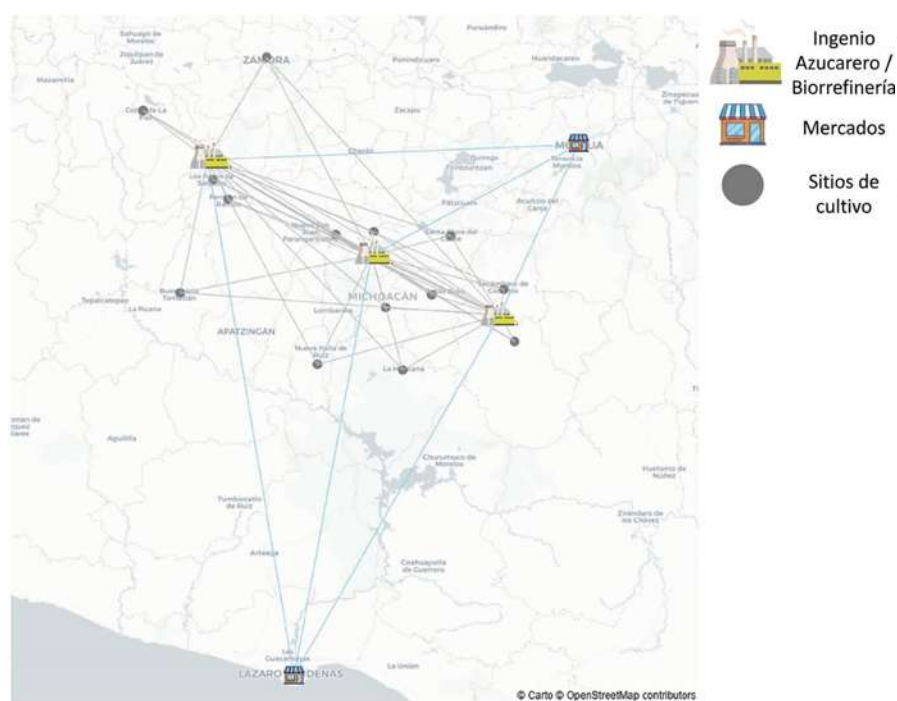


Figura 11. Superestructura representada en el caso de estudio.

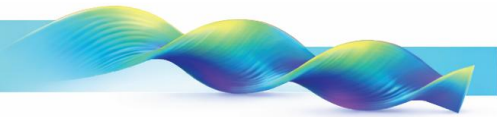


Tabla 2. Sitios de cultivo de caña de azúcar en Michoacán (CONADESUCA, 2022; SAGARPA, 2016).

Municipio	ha	Toneladas por año
Ario	82.03	9,433.45
Buenavista	174.15	20,027.25
Cotija	2289.37	263,277.55
Gabriel Zamora	361.29	41,548.35
La Huacana	62.68	7208.2
Los Reyes	1186.08	136,399.2
Múgica	11.12	1278.8
Nuevo Urecho	1193.01	137,196.15
Peribán	731.79	84,155.85
Salvador Escalante	17.19	1976.85
Tacámbaro	2802.43	322,279.45
Taretan	2332.65	268,254.75
Tocumbo	1415.43	162,774.45
Turicato	2728.7	313,800.5
Uruapan	279.79	32,175.85
Ziracuaretiro	101.99	11,728.85

4.1.1 Resultados generales

El modelo desarrollado es general y se codificó en Python utilizando Pyomo para codificar el modelo matemático determinista, que se resolvió con el solucionador glpk, mientras que los OBR lineales se codificaron en Scikit-learn y los OBR no explícitos en TensorFlow. La minimización simultánea de los objetivos económicos $cost^{total}$ y de los objetivos ambientales ghg^{total} se consideró mediante la metodología de restricción epsilon (Parvizi et al., 2015) para el modelo con OBR de tipo 1 (Solución B) y utilizando el algoritmo NSGA-II (Deb et al., 2002) para la optimización multiobjetivo del AG (Solución



A). Los tiempos de entrenamiento y solución de cada modelo se muestran en la **Tabla 3**.

Tabla 3. Tiempo global de entrenamiento y solución del modelo (Wall-time).

Modelo	Datos	Entrenamiento [s]	Solución [s]
OBR lineal	1000	1.46	0.0665
OBR de red neuronal	1000	47.92	14,260

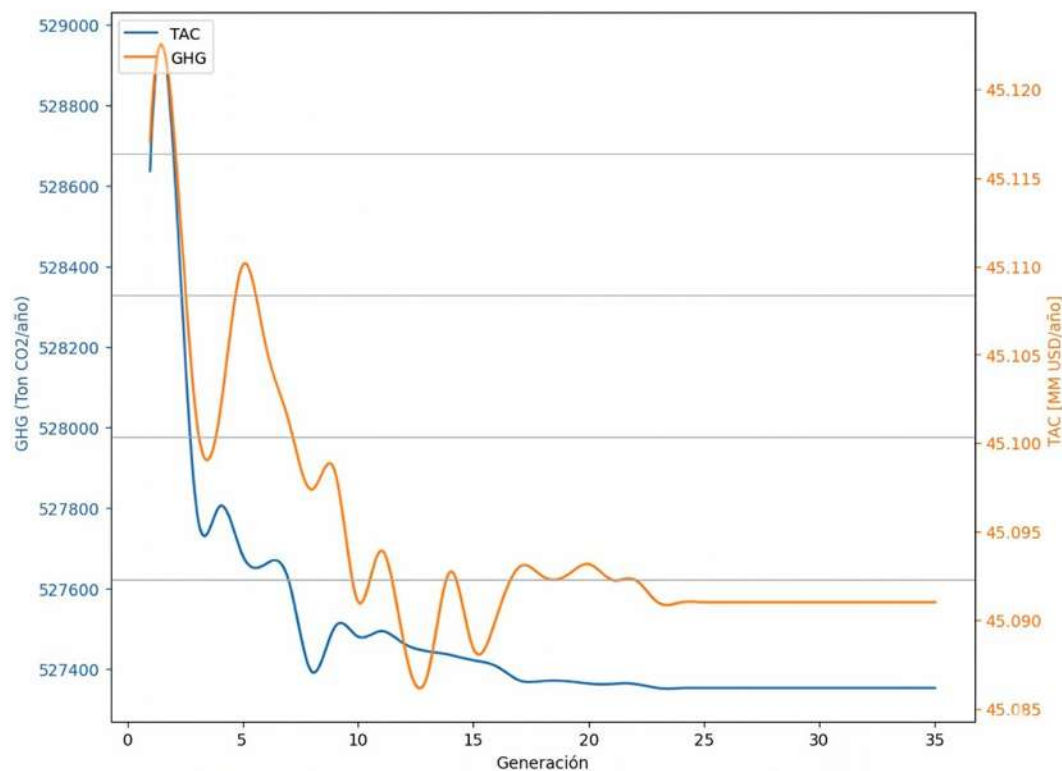
Es evidente que los tiempos de procesamiento son significativamente menores cuando se utilizan OBR de tipo 1 (lineales), en comparación con los que implementan OBR de tipo 2 (redes neuronales). Sin embargo, es importante señalar que los regresores de tipo 1 están restringidos al uso de algoritmos de regresión básicos, lo que puede limitar su capacidad para capturar relaciones complejas entre variables.

4.1.2 Solución con AG

Para la solución A, utilizando un algoritmo genético (AG), se llevó a cabo un proceso iterativo de ajuste que permitió determinar los parámetros presentados en la **Tabla 4**. El algoritmo se implementó con la biblioteca PyGAD, estableciendo como criterio de parada la condición de que el valor de aptitud de ambos objetivos (ambiental y económico) permaneciera constante durante diez generaciones consecutivas. La **Figura 12** muestra las curvas de convergencia del AG, ilustrando la evolución de la aptitud para los objetivos ambientales y económicos a lo largo de las generaciones mostrando como los valores de ambas funciones objetivo se estabilizan después de la generación 25.

**Tabla 4.** Hiperparámetros del AG.

Hiperparámetros del AG	
Tamaño de la población	100
Número de generaciones	35
Tipo de cruzamiento	Uniform
Probabilidad de mutación	Adaptative (10,20)
Tipo de selección de padres	NSGA-II
Tamaño del elitismo:	1
Número de padres seleccionados para cruzarse	50

**Figura 12.** Curva de convergencia multiobjetivo usando AG.



4.1.3 Solución determinista

La solución determinista del modelo se basa exclusivamente en la resolución del modelo MILP, considerando los OBR como restricciones de igualdad lineal. La principal ventaja de este enfoque es la capacidad de generar curvas de Pareto, lo que facilita un análisis más intuitivo de las soluciones y permite definir con precisión la región factible del modelo.

La **Figura 13** muestra la curva de Pareto generada por el modelo lineal determinista, donde se muestra la relación entre los objetivos ambiental (GHG) y económico (TAC). Se observa una tendencia marcada: menores emisiones de GHG se asocian con mayores costos, y viceversa. Además, se analiza con mayor detalle la región donde converge la solución obtenida por el AG (Solución A). Considerando el punto utópico, se selecciona la Solución B para realizar la comparación entre modelos.

Es importante destacar que las soluciones generadas por el AG no se ubican por debajo de la curva de Pareto, ya que la naturaleza del modelo no lineal genera una región factible diferente, cuya delimitación no puede trazarse debido a las características del AG. En la última generación del AG, los puntos azules representan las soluciones exploradas, pero no seleccionadas como óptimas. Ambas soluciones (A y B) difieren en menos de 1% y muestran una ganancia similar de aproximadamente 2.55 MM USD/año. La **Figura 14** ilustra las rutas de procesamiento de caña de azúcar en cada municipio, mostrando algunas diferencias clave entre las soluciones A y B:

- Producción de azúcar refinada: La Solución B (determinista) asigna caña solo de los municipios de Tacámbaro (322,279 Ton/año) y Taretan (un municipio con su propio ingenio azucarero). La Solución A (AG) utiliza caña de los tres municipios con mayor producción (Tacámbaro, Taretan y Turicato, con 313,800 Ton/año).
- Distribución de caña de azúcar: Aunque la mayoría de los sitios de cultivo envían caña al ingenio azucarero más cercano, existen diferencias en los municipios centrales del estado. La asignación de caña entre los nodos de procesamiento Pedernales y Taretan varía según el modelo.



- Mercados: La biorrefinería de Pedernales en la Solución A envía su producción al mercado de Morelia, mientras que en la Solución B se destina al puerto de Lázaro Cárdenas.

A pesar de estas diferencias, ambas estrategias convergen en resultados similares, lo que muestra la efectividad de ambos enfoques.

Finalmente, la **Figura 15** presenta una comparación entre las dos biorrefinerías propuestas, mostrando diferencias significativas en su diseño y operación. Aunque los costos de materiales son similares, con una variación de apenas 2%, las biorrefinerías difieren en tamaño y en el diseño y las especificaciones derivadas de cada modelo. En la Solución B, se asigna una menor proporción de caña de azúcar a la producción de bioetanol en comparación con la Solución A. Por otra parte, la Solución A asigna aproximadamente 3.4 veces más caña de azúcar a la producción de bioetanol en el mismo municipio (véase la **Tabla 5**).

La novedad de este trabajo radica no solo en la integración de OBRs, sino también en el propio caso de estudio dentro de la estrategia optimización establecida. Con base en los resultados obtenidos, el caso de estudio de la biorrefinería en Michoacán ofrece la oportunidad de explorar las complejidades de la producción de bioetanol en una de las principales regiones productoras de caña de azúcar de México, adoptando consideraciones económicas y ambientales en la cadena de suministro. Además, el uso de OBRs permite optimizar procesos químicos complejos dentro de la cadena de suministro. De acuerdo con los resultados, dependiendo del tipo de OBR elegido, particularmente los OBR no explícitos, el modelo de optimización puede adaptarse mejor a la complejidad del proceso químico, permitiendo generalizar a una mayor variedad de procesos. Esta adaptabilidad ofrece ventajas significativas, no solo en el modelado de la producción de bioetanol, sino también en el abordaje de diversos procesos químicos y condiciones de operación variables. Aunque ninguno de los modelos permite un análisis detallado del proceso de producción de bioetanol, la implementación directa de OBRs ha demostrado ser una herramienta valiosa para abordar problemas de toma de decisiones en cadenas de suministro de gran escala, especialmente en escenarios complejos como este.

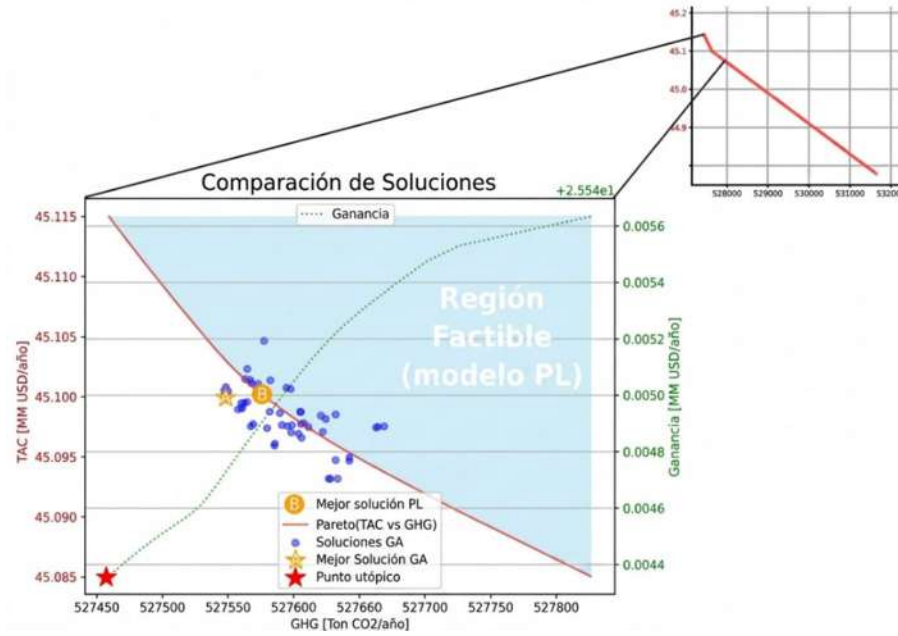


Figura 13. Curva de Pareto y comparación de resultados de OBR lineales vs. resultados de OBR no lineales.

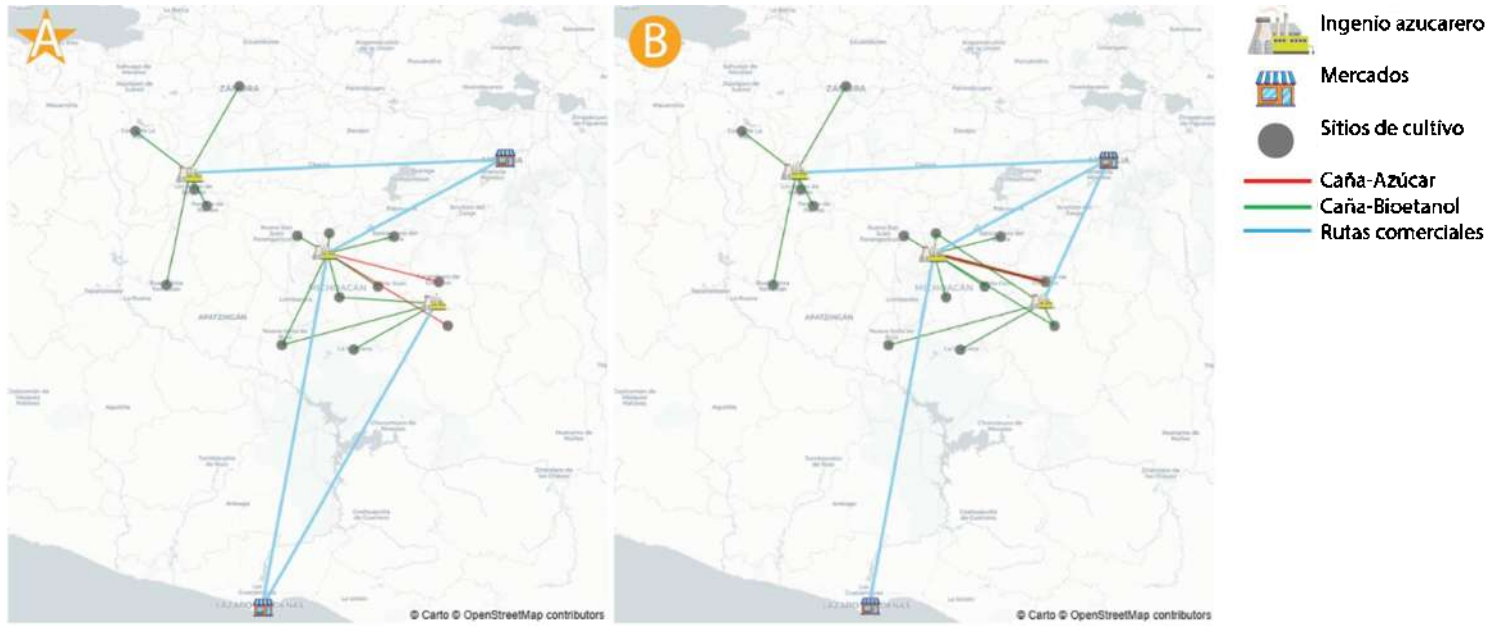


Figura 14. Comparación geográfica de soluciones entre soluciones A y B.

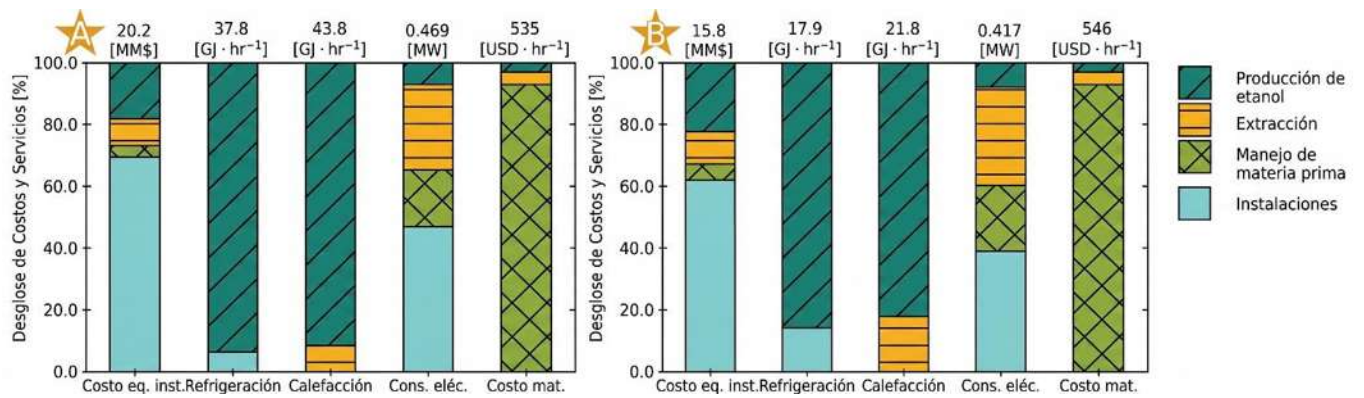


Figura 15. Comparación de soluciones A y B obtenidas de la biorrefinería instalada en Taretan.



Tabla 5. Comparación de variables independientes estimadas en cada solución para la biorrefinería de Taretan.

Variable	Valor de la solución A	Valor de la solución B	Unidades
$\sum_n^N f_{n,1}^{bioref}$	44,572	14,339	[kg/h]
f_1^{enzyme}	769	63	[kg/h]
f_1^{l-w}	32,841	20,000	[kg/h]
f_1^{H3PO4}	183	10	[kg/h]
f_1^{CaO}	1,747	2,000	[kg/h]
f_1^{Flocc}	9	1	[kg/h]
f_1^{Wash}	3,826	1000	[kg/h]
f_1^{Fresh}	2,209	1000	[kg/h]
f_1^{Octane}	416	500	[kg/h]
f_1^{yeast}	2,475	1,000	[kg/h]
R_1^{min}	0.14	1.5	N/A

4.2 Producción de diésel verde bajo el paradigma del nexo agua-energía-alimentos

La producción de biocombustibles avanzados, como el diésel verde, es fundamental para la transición energética; sin embargo, su desarrollo a gran escala puede ejercer una fuerte presión sobre recursos vitales. Para abordar este desafío, esta sección analiza el diseño de una cadena de suministro bajo el paradigma del nexo agua-energía-alimentos, un enfoque que garantiza que la maximización en la producción del biocombustible no comprometa la seguridad hídrica, energética ni alimentaria de la región. Tomando como caso de estudio el estado de Paraná, Brasil, se desarrolla una estrategia de optimización multiobjetivo. Mediante la integración de simulaciones de procesos, OBR y el algoritmo metaheurístico PSO, se evalúan las configuraciones óptimas para equilibrar el costo económico, las emisiones de gases de efecto invernadero y el consumo de agua dulce.

4.2.1 Simulación de procesos y generación de datos

El proceso completo de producción de diésel verde fue diseñado y simulado en Aspen Plus V14, considerando aspectos clave como el suministro de energía, la generación

de emisiones y las principales reacciones del proceso, entre otros. La simulación se basa en el trabajo presentado por Cavalcanti et al. (2022).

Se analizaron diferentes configuraciones de operación para mejorar la eficiencia energética y minimizar las pérdidas del proceso. Para establecer una región de aplicabilidad definida para los modelos OBR desarrollados, se generó una base de datos integral de 500 simulaciones del proceso de producción de diésel verde utilizando una técnica de muestreo espaciado. Las simulaciones cubrieron flujos de alimentación que variaron entre 500 y 57,000 kg/h, asegurando que los modelos sustitutos capturaran con precisión el comportamiento del sistema en un dominio operativo amplio y representativo. La **Figura 16** presenta un diagrama esquemático del proceso considerado, ilustrando la producción de diésel verde a partir de aceites o grasas e hidrógeno. En este proceso, la materia prima reaccionó con hidrógeno en un reactor, formando hidrocarburos y agua. La mezcla resultante se separó posteriormente en diferentes fases: aguas residuales, gases no condensables, fracciones ligeras y el producto final de diésel verde. Adicionalmente, se incluyeron etapas de purga de gases y recuperación de hidrógeno para mejorar la eficiencia del proceso.

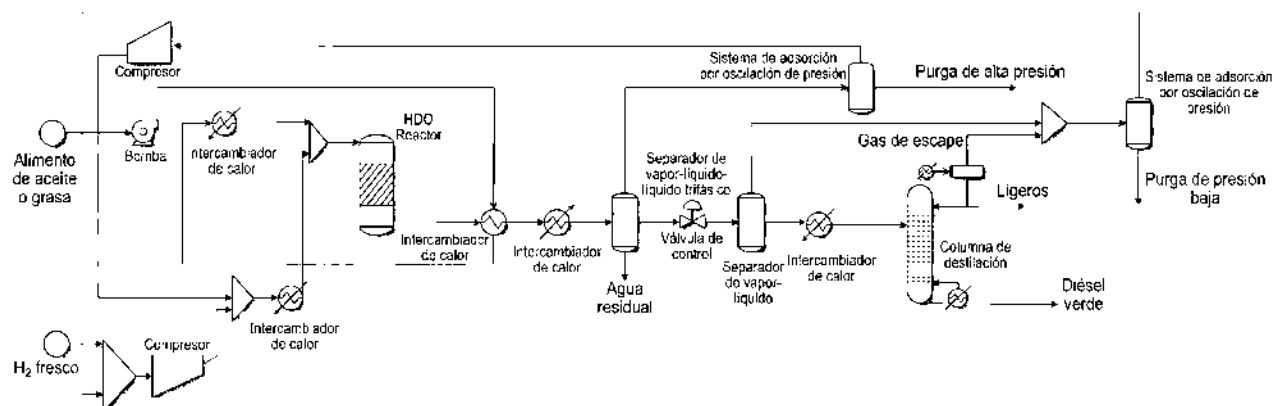


Figura 16. Diagrama esquemático del proceso de producción de diésel verde.

En esta simulación, se asumió un enfoque de fracción másica normalizada para los ácidos grasos dominantes presentes en cada materia prima. Cada ácido graso se asoció con su triglicérido correspondiente, preservando la misma distribución másica en la composición. Todas las materias primas se consideraron refinadas y, por lo tanto, no se modeló explícitamente una etapa de pretratamiento en Aspen Plus. Esta simplificación evitó



añadir incertidumbre a la etapa de simulación.

4.2.2 Entrenamiento de los OBR

Los datos se preprocesaron inicialmente y se dividieron en subconjuntos de entrenamiento y prueba. Posteriormente, se desarrolló un modelo de regresión OBR utilizando el algoritmo RF para cada variable asociada a las biorrefinerías en el marco presentado en este estudio. La selección del modelo se basó en el conjunto de hiperparámetros que proporcionó el mejor ajuste. Actualmente no existían conjuntos de datos públicos a escala industrial para comparar intensidades energéticas o de emisiones en la producción de diésel verde. Por esta razón, la validación en este estudio se realizó mediante criterios estadísticos aplicados a los modelos sustitutos. La validación del modelo se llevó a cabo utilizando métricas como R^2 , R^2 ajustado, RMSE y MAE. Además, se aplicó validación cruzada k-fold para evaluar la capacidad de generalización del modelo y detectar sobreajuste. La **Figura 17** presenta los gráficos de paridad y residuos para los principales regresores, confirmando la consistencia entre valores predichos y simulados. Los elevados valores de R^2 ajustado en los gráficos a) y b) y la distribución aleatoria de los residuos alrededor de cero en los gráficos c) y d) indican que los modelos desarrollados reproducen adecuadamente el comportamiento de las variables analizadas, sin evidenciar sesgos sistemáticos significativos. La **Tabla 6** muestra métricas de desempeño donde los errores permanecieron bajos y los valores de R^2 ajustado superaron 0.99, indicando alta precisión y estabilidad del modelo.

Se destaca que los OBR se entrenaron exclusivamente con variables relacionadas con el flujo de alimentación, considerando un rango de 500 a 57,000 kg/h de aceite de soya. Esta decisión permitió construir un conjunto de datos consistente y regresiones estables. Sin embargo, se excluyeron variables críticas como temperatura y presión, lo cual limitó la generalización del modelo.

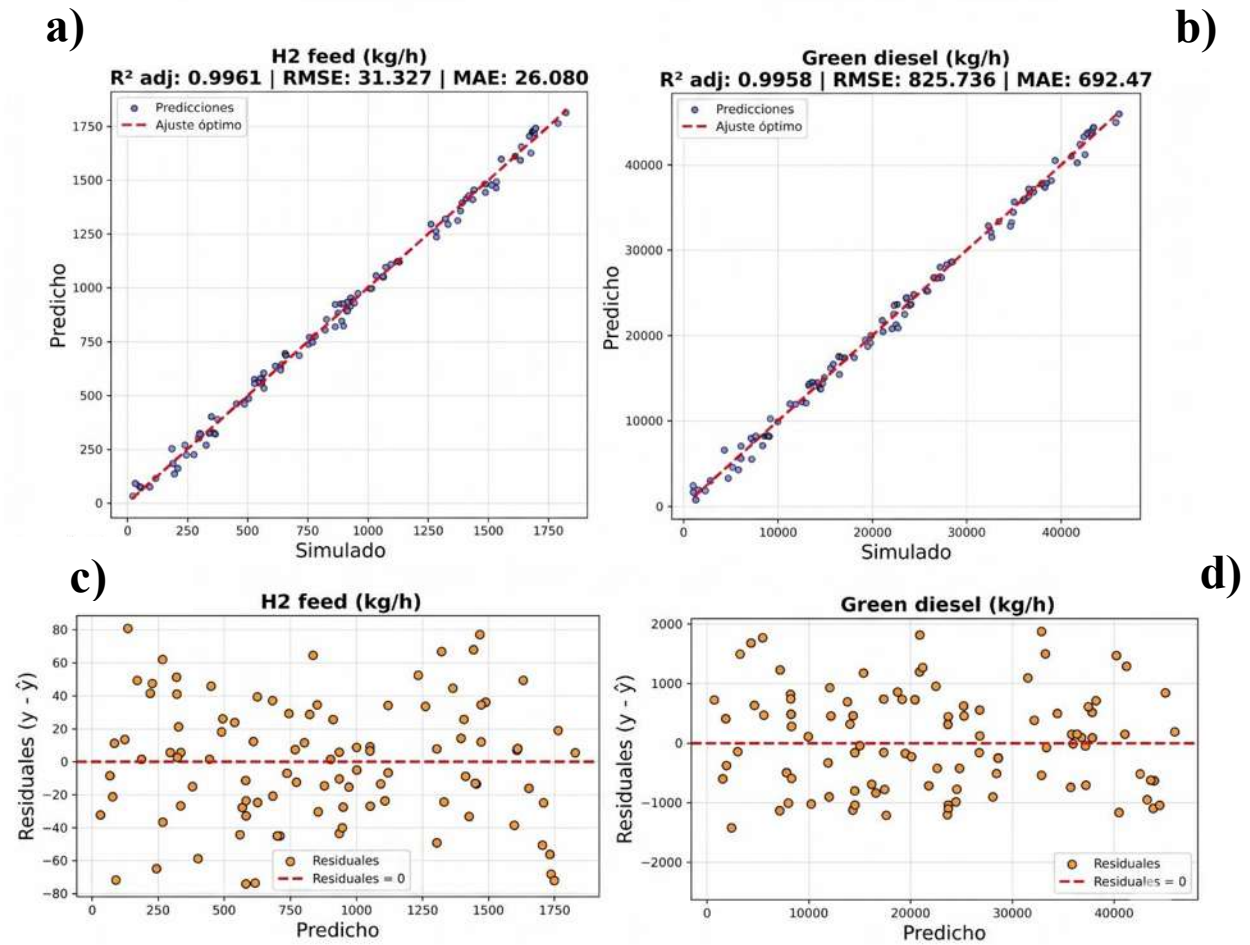


Figura 17. Gráficos a) y b) de Paridad y c) y d) de residuales para los regresores principales del modelo.



Tabla 6. Métricas de validación estadística de los modelos sustitutos OBR bajo validación cruzada de 5 pliegues.

Variable	RMSE	MAE	R ² ajustado	CV5 RMSE (media ± desviación estándar)*	CV5 MAE (media ± desviación estándar)*	CV5 R ² (media ± desviación estándar)*
Alimentación de H ₂ (kg/h)	31.33	26.08	0.9961	31.58 ± 1.00	25.92 ± 1.03	0.9962 ± 0.0007
Diésel verde (kg/h)	825.74	692.48	0.9958	818.28 ± 29.61	662.81 ± 29.98	0.9961 ± 0.0007
Fracciones ligeras (kg/h)	23.99	19.18	0.9925	25.71 ± 1.44	20.32 ± 1.37	0.9919 ± 0.0014
Gases residuales (kg/h)	121.28	99.81	0.9959	127.86 ± 4.39	101.61 ± 5.03	0.9957 ± 0.0008
Agua residual (kg/h)	107.74	87.60	0.9923	108.22 ± 8.22	85.64 ± 7.06	0.9926 ± 0.0016
Electricidad (kW)	108.13	90.08	0.9937	109.68 ± 6.45	89.55 ± 4.77	0.9938 ± 0.0013
Carga térmica total (MW)	0.33	0.28	0.9955	0.34 ± 0.02	0.28 ± 0.01	0.9954 ± 0.0011
Carga de enfriamiento total (MW)	0.69	0.55	0.9943	0.64 ± 0.05	0.51 ± 0.05	0.9953 ± 0.0012
CO ₂ eq total de utilidades (kg/h)	119.51	94.85	0.9935	117.22 ± 6.34	93.68 ± 6.43	0.9940 ± 0.0014

* CV5: validación cruzada de 5 particiones

4.2.3 Aplicación de la estrategia

El estado de Paraná se seleccionó como caso de estudio. Esta región se caracteriza por una alta producción de soya, posicionándose como uno de los principales productores de este cultivo en Brasil (Reuters, 2025). Además, dentro de su territorio operan actualmente cinco plantas de producción de biodiésel, por lo que estas ubicaciones se consideraron como referencia para el diseño de nuevas plantas de producción de diésel verde, buscando no afectar la logística existente (Biodieselbr, 2025). Paraná también destaca por albergar una de las plantas hidroeléctricas más grandes del mundo y por ser el cuarto estado brasileño con mayor capacidad de generación propia de energía, alcanzando aproximadamente 2 GW, solo por detrás de São Paulo, Minas Gerais y Rio Grande do Sul. Entre sus ciudades, Foz do Iguaçu cuenta con el mayor volumen de capacidad instalada (100.4 MW), seguida de Maringá (93.9 MW) y Londrina (74.3 MW) (ABDG, 2023; Itaipu, 2025). En cuanto a los recursos hídricos, el suministro de agua de la región es responsabilidad principalmente de Sanepar (Compañía de Saneamiento de Paraná), que opera en todo el estado de Paraná y parte de Santa Catarina. Sanepar atiende a 344 municipios en Paraná y uno en Santa Catarina, proporcionando al 100 % de la población acceso a una red de abastecimiento de agua. La empresa opera 227 puntos de captación de agua superficial, que representan

aproximadamente el 78.31 % del agua total captada, y 1,217 pozos tubulares profundos, que aportan el 21.69 % restante (SANEPAR, 2020). Debe señalarse que, dada la fuerte interrelación entre los sectores agrícola, energético y de recursos hídricos en la región, el análisis desarrollado considera el enfoque del nexo agua-energía-alimentos, que permite identificar y gestionar sinergias y compromisos entre estos tres sistemas tan relevantes. La **Figura 18** ilustra la SC asociada al problema propuesto, considerando primero a) todas las interacciones posibles entre los nodos existentes (24 municipios) dentro del estado y, posteriormente, b) incluyendo las interacciones entre estos nodos y las biorrefinerías propuestas.

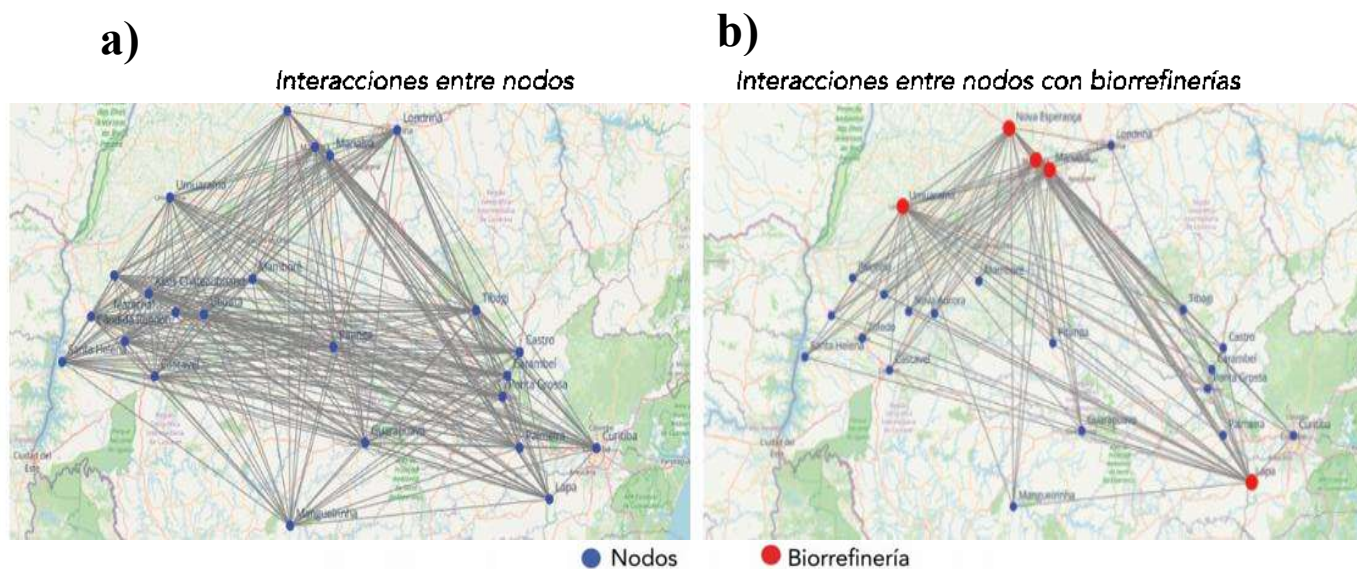


Figura 18. Red logística de la región estudiada considerando los nodos representativos a) y la integración propuesta de biorrefinerías b).



4.2.4 Resultados y discusión

El modelo matemático desarrollado se codificó usando Python y la librería de optimización Pyomo, mientras que los modelos de regresión para los OBRs se entrenaron con las herramientas de ML disponibles en Scikit-Learn. La optimización simultánea de las funciones objetivo propuestas se implementó mediante el enfoque de restricción épsilon, siguiendo la metodología descrita por Parvizi et al. (2015), en la que se selecciona un objetivo para minimización directa (tac) mientras se relajan progresivamente los otros dos. Primero se obtuvieron valores mínimos para el uso de agua dulce y las emisiones mediante optimizaciones de un solo objetivo, y estos sirvieron como puntos de referencia para generar un conjunto de niveles de restricción relajados. WA^{fresh} se relajó en cinco pasos incrementales, y ghg^{tot} en veinte pasos, con valores incrementales distribuidos uniformemente entre el valor mínimo factible y aproximadamente el doble de ese valor. Al combinar estos incrementos se obtuvieron 100 soluciones, de las cuales se extrajeron las soluciones no dominadas para construir el frente de Pareto tridimensional final.

Además, se utilizó la biblioteca Pyswarms para implementar el algoritmo metaheurístico PSO. El tiempo total de solución (wall time) reportado para la solución del modelo fue de 14 minutos y 30 segundos, ejecutándose en un sistema con un procesador Intel Core i5 de 11.^a generación y 16 GB de RAM DDR4. Los resultados muestran que la integración de PSO dentro de la metodología propuesta permitió una exploración eficiente del espacio de decisión, posibilitando la identificación rápida de soluciones de alta calidad para el modelo híbrido completo, reduciendo significativamente el tiempo computacional al manejar su complejidad inherente, en comparación con el caso de estudio previamente abordado, que reporta tiempos de solución de casi cuatro horas al implementar el algoritmo genético NSGA-II para la optimización híbrida.

La **Tabla 7** presenta una comparación de los resultados obtenidos bajo distintos criterios orientados a lograr la máxima producción posible de diésel verde (179.34 m³/h) sin comprometer el nexo agua-energía-alimentos. Por ejemplo, minimizar las emisiones de CO₂ las reduce a 145.9 Mt-CO₂/año, pero requiere de la instalación adicional de cinco plantas de biogás, mientras que minimizar los costos reduce el TAC a 36.2 MMUSD/año a expensas de mayores emisiones (291.5 Mt-CO₂/año) y de un mayor uso de agua (90.5 hm³/año). Los



valores reportados en la **Tabla 7** corresponden al desempeño de todo el sistema del nexo agua-energía-alimentos, ya que las funciones objetivo integran todos los nodos y biorrefinerías interconectados. Por lo tanto, los resultados muestran el comportamiento a nivel de sistema.

El nivel de producción alcanzado representa el 49.9 % de la demanda anual de diésel en la región. Para llegar a este nivel de producción, se analizan a continuación varias alternativas, cada una priorizando un objetivo distinto: minimizar costos, emisiones de GHG o consumo de agua dulce. Estas soluciones ilustran los compromisos inherentes al modelo. La solución que minimiza el consumo de agua dulce instala el máximo número factible de sistemas de captación de lluvia, pero no incluye ninguna planta de producción de biogás debido a los requerimientos de agua dulce asociados. Esta decisión conduce a un aumento de las emisiones de GHG debido a una mayor dependencia del gas natural en el proceso de reformado, lo que a su vez también incrementa el costo total.

En contraste, la solución que minimiza las emisiones de GHG resulta en un mayor costo total y un mayor consumo de agua dulce. Esta configuración representa la opción más costosa, ya que implica la instalación del número máximo de plantas de biogás (cinco unidades). Al minimizar el costo, el modelo evita instalar tanto sistemas de captación de lluvia como plantas de biogás. En consecuencia, esta solución presenta el mayor impacto ambiental y el mayor consumo de agua dulce entre todas las alternativas.

Finalmente, se evalúa una solución cercana al punto utópico (véanse las **Figuras 20 y 21**). Esta configuración representa un compromiso equilibrado entre los tres objetivos. Incluye la instalación de 51 sistemas de captación de lluvia, lo que permite un consumo relativamente bajo de agua dulce. Además, solo se instala una planta de biogás, ubicada en el municipio con el mayor potencial estimado de producción de biogás (Marialva), como se muestra en la **Figura 22**. Esta elección logra una reducción parcial de emisiones al tiempo que limita el aumento en el uso de agua dulce asociado con la producción de biogás. La superficie mostrada en la **Figura 20** es el conjunto de soluciones eficientes obtenido para diferentes valores de Δ . En este contexto, Δ representa el incremento permitido, en múltiplos, respecto al consumo mínimo de agua alcanzable ($65.3 \text{ hm}^3/\text{año}$). El punto utópico (estrella roja) indica la combinación ideal, pero infactible de valores mínimos para cada

objetivo, mientras que la solución óptima (círculo naranja) corresponde a la configuración equilibrada seleccionada.

Tabla 7. Comparación de soluciones de compromiso óptimas a partir de la optimización multiobjetivo con restricción épsilon.

Capacidad de diésel [m^3/h]		179.34			
Solución	ghg^{tot} [Millones t- $CO_2/año$]	tac [MMUSD/año]	WA^{fresh} [$hm^3/año$]	# de colectores de agua	# de plantas de biogás
$\min WA^{fresh}$	254	42.4	65.3	53	0
$\min ghg^{tot}$	145.9	47.2	65.4	53	5
$\min tac$	291.5	36.2	90.5	0	0
Óptima	178.5	41.5	79.8	51	1

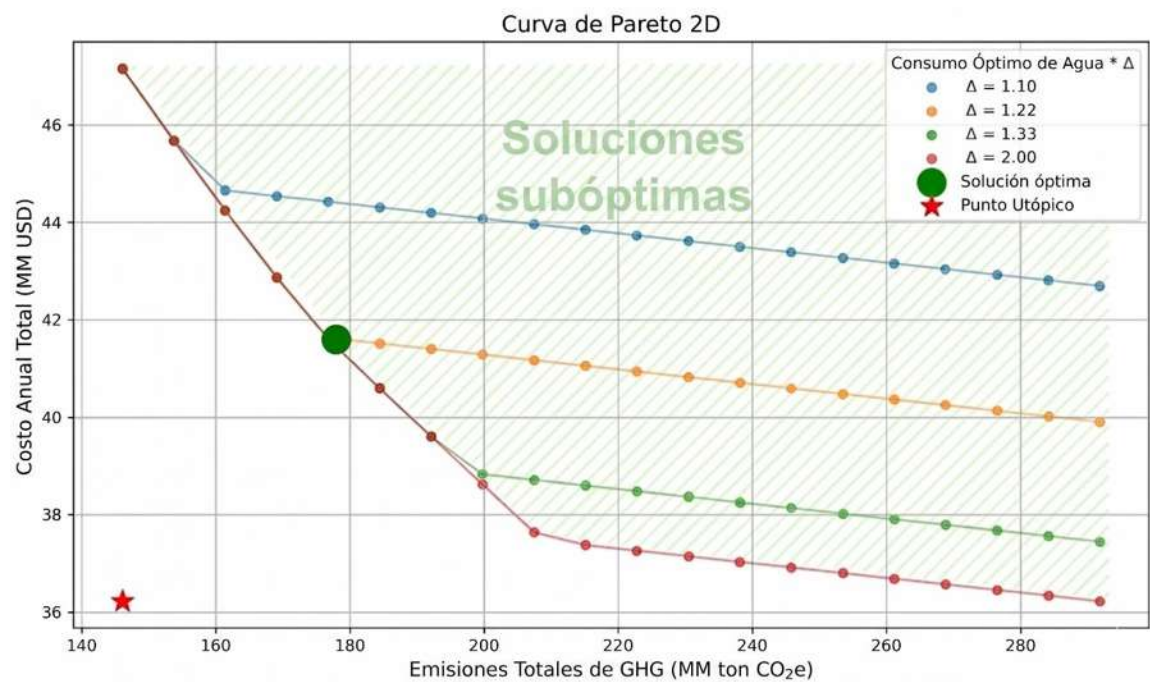


Figura 19. Curva de Pareto bidimensional para distintos incrementos (Δ) de consumo mínimo de agua.

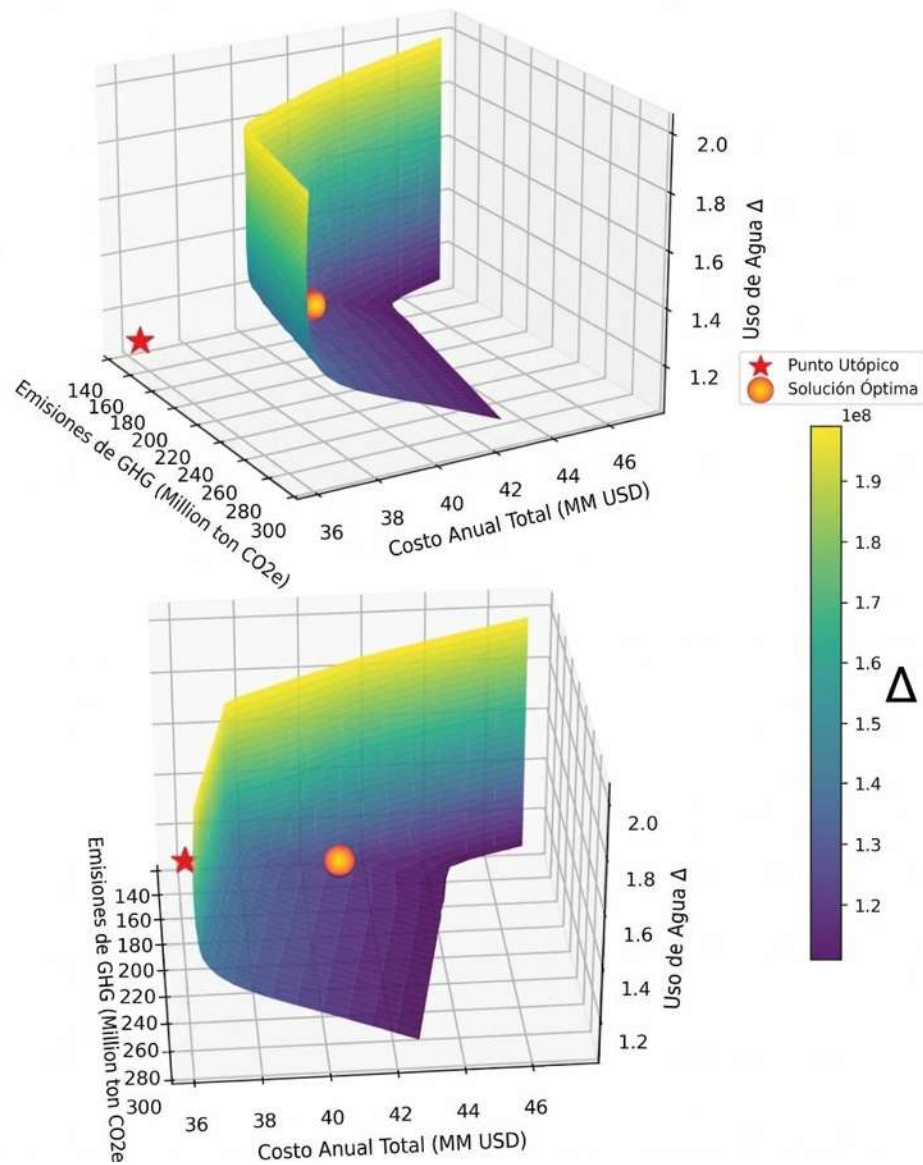


Figura 20. Frontera de Pareto tridimensional que ilustra el equilibrio entre emisiones de GHG, costo anual total y consumo de agua dulce en las soluciones factibles.

La **Figura 21** muestra la configuración resultante de la SC, donde se visualizan las interacciones entre los 24 nodos representativos del estado y las plantas de biocombustible propuestas. Se observa una clara tendencia a priorizar el intercambio de soja entre nodos geográficamente cercanos, así como entre nodos cercanos a las biorrefinerías. Sin embargo, estas interacciones no siempre corresponden a las rutas de menor distancia, principalmente debido a diferencias en la capacidad de producción de soja y en las demandas específicas de cada nodo.

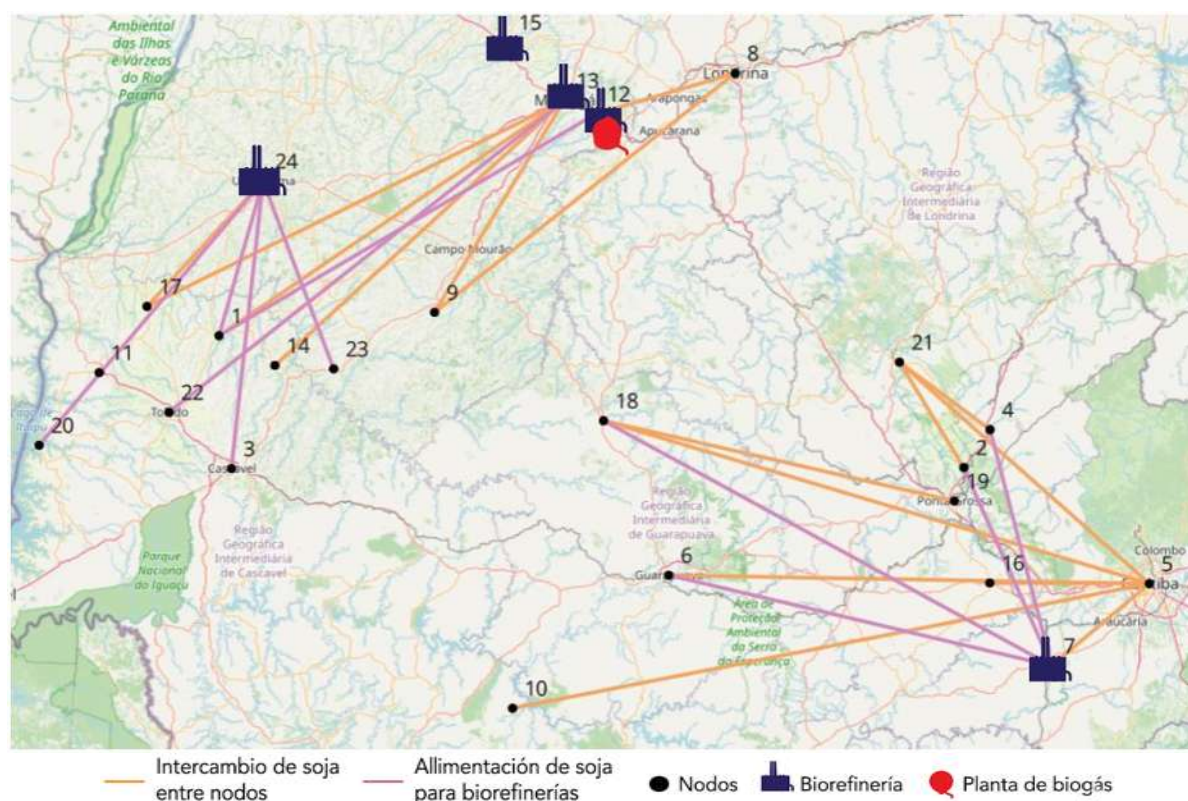


Figura 21. Configuración de la SC óptima para los intercambios de soja.

Además, la **Tabla 8** detalla los intercambios de materia prima de soja entre los municipios y las biorrefinerías. Nótese que el municipio 15 (Nova Esperança) es el único municipio que no envía ni recibe recursos en esta solución. Esto indica que su producción de soja es significativamente mayor que la requerida en el municipio, lo que permite producir diésel verde con recursos locales. En contraste, la **Tabla 9** resume los flujos anuales inter-nodo de soja, mostrando el intercambio de material entre los diferentes municipios del estado.

**Tabla 8.** Intercambios de materia prima de soya entre municipios y biorrefinerías.

Nodos	$f_{i,a}^{ag-diesel} [t/año]$
(12, 1)	101,848.8
(7, 2)	92,780
(13, 22)	98,468.16
(24, 1)	67,471.29
(24, 3)	18,570.45
(7, 6)	48,476.39
(24, 20)	47,168.95
(7, 18)	110,476.9
(7, 4)	171,650.5
(24, 23)	168,723.7

Tabla 9. Tasa anual de flujo de soya exportada entre nodos.

Nodos	$f_{j,a}^{ag-domestic} [t/año]$
(2, 21)	18,293.19
(4, 21)	1,860.87
(5, 6)	175,612.8
(5, 7)	187,394.1
(5, 10)	193,166.3
(5, 16)	215,044.9
(5, 18)	197,687.8
(5, 21)	113,679.9
(8, 9)	110,586.2
(8, 12)	70,558.99
(13, 1)	51,376.77
(13, 9)	123,553.1
(13, 14)	13,368.53
(13, 17)	29,967.87
(19, 18)	6,503.94
(24, 17)	84,101.2



En cuanto a la producción de diésel verde, la **Figura 22** proporciona un análisis detallado de las variables clave por planta. Es notable que los municipios de Marialva y Umuarama son los principales productores, contribuyendo con 25.3 % y 22 %, respectivamente, del total de diésel verde generado. En la región sureste del estado, la planta ubicada en Lapa ocupa el tercer lugar, con 20.6 % de la producción total. Estos resultados indican que la producción de diésel verde se concentra principalmente en la región noroeste de Paraná, lo que tiene importantes implicaciones para la toma de decisiones en términos de infraestructura logística, suministro de materia prima y políticas de desarrollo regional. Estas ubicaciones coinciden con las plantas de biodiésel existentes que ya operan en Paraná, la mayoría de las cuales usan aceite de soja como materia prima, lo que brinda una validación práctica adicional de los hallazgos del modelo. Además, se presenta un análisis del consumo clave de recursos por planta, incluyendo energía, hidrógeno, agua y emisiones de GHG. Esta información es esencial para evaluar el desempeño ambiental de cada instalación, al tiempo que se considera el contexto del nexo agua-energía-alimentos que rige las interacciones sistémicas dentro del estado.

Desde la perspectiva del nexo agua-energía-alimentos, el patrón geográfico mostrado en la **Figura 21** provee información útil. Por un lado, una mayor concentración de la producción en ciertas áreas incrementa la presión sobre los recursos hídricos locales, especialmente en zonas donde el suministro depende principalmente de acuíferos subterráneos, como ocurre en gran parte del estado. La **Figura 22** también demuestra los altos requerimientos de agua y energía por planta, lo que obliga a considerar la capacidad de los sistemas locales de suministro y distribución antes de tomar decisiones de implementación. Es importante señalar que las emisiones reportadas en la **Tabla 8** corresponden a las emisiones anuales agregadas de todo el sistema del nexo agua-energía-alimentos. En contraste, las emisiones a nivel de proceso de la producción de diésel verde se muestran en la **Figura 22**, con valores alrededor de 16,038 kg-CO₂eq/h ($\approx 140,493$ t-CO₂eq/año).

Además, el hecho de que la producción no siempre siga las rutas más cortas muestra que el modelo de optimización priorizó satisfacer la demanda del nexo agua-energía-alimentos más que incrementar la producción de diésel verde. Por lo tanto, los resultados



indican que la toma de decisiones para la transición hacia el diésel verde en el estado no puede basarse únicamente en criterios de eficiencia económica o logística. En consecuencia, es necesario incorporar criterios de sostenibilidad, considerando restricciones ambientales, disponibilidad de agua, emisiones de GHG y la capacidad del sistema eléctrico regional para soportar el aumento en el consumo de energía asociado con la producción de diésel verde. La evaluación detallada de la capacidad del sistema eléctrico regional será abordada en trabajos futuros.

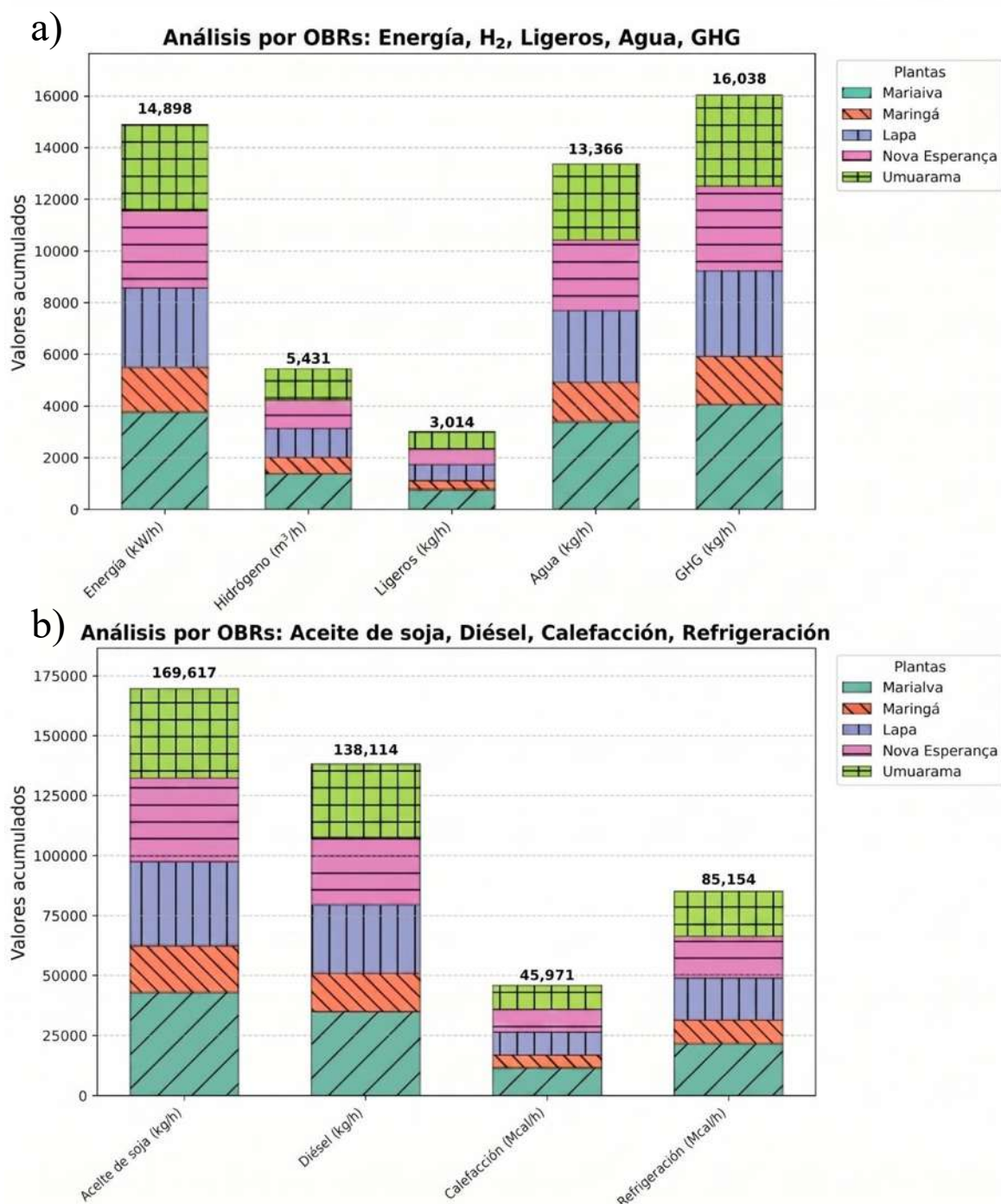


Figura 22. Análisis de las biorrefinerías con OBRs para a) Energía, H₂, Ligeros, agua, GHG; b) Aceite de Soja, Diésel, Calefacción, Refrigeración.

La **Figura 23** presenta un análisis de puntos críticos del consumo de agua, considerando el conjunto completo de municipios junto con la demanda adicional generada por las plantas de diésel verde. Esta perspectiva más amplia hace que la distribución espacial del uso de recursos sea más representativa y permite identificar posibles conflictos del nexo,

con la resolución de la cuadrícula definida para evitar una fragmentación excesiva y, al mismo tiempo, destacar las regiones más afectadas. Los resultados muestran que la mayor concentración de consumo de agua se localiza en la parte norte del área de estudio, superponiéndose con municipios clave seleccionados para la producción de diésel verde, como Marialva, Maringá, Nova Esperança y Umuarama.

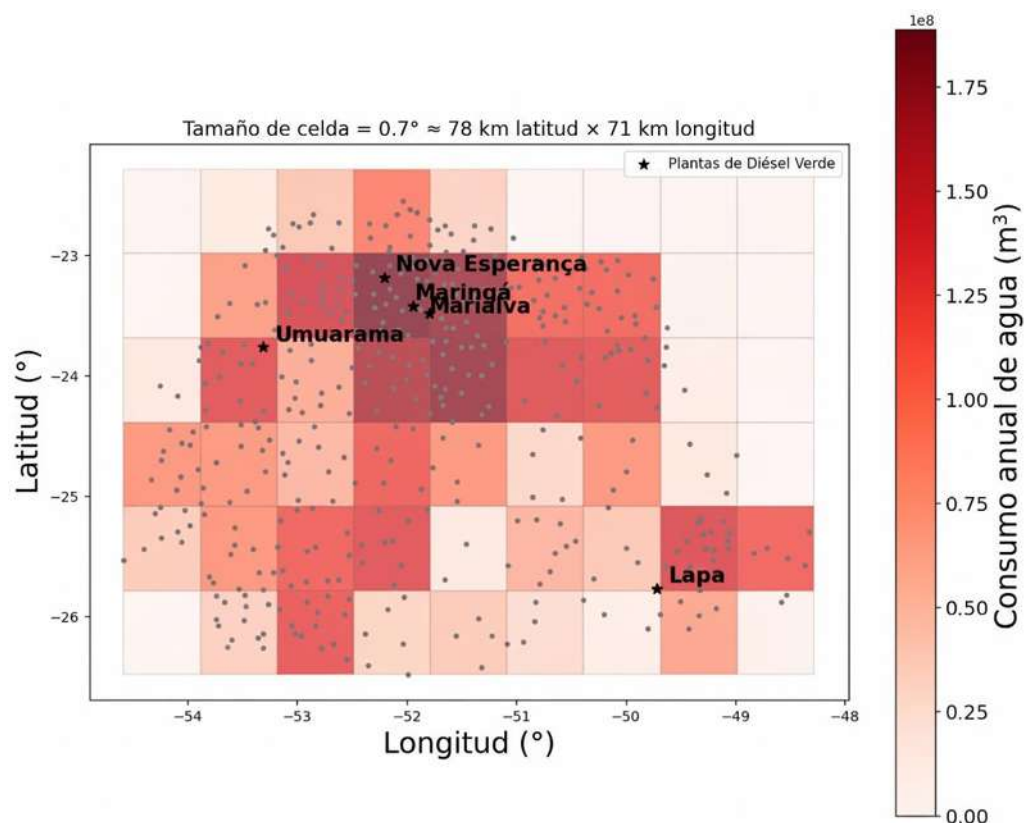
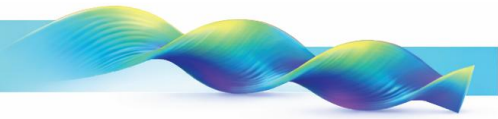


Figura 23. Análisis espacial de puntos críticos del consumo total anual de agua.

Estos resultados proporcionan una base para la toma de decisiones estratégicas en la implementación de nueva infraestructura de producción de diésel verde dentro del estado de Paraná. La concentración de la producción en el noroeste del estado, principalmente en Umuarama y Marialva, sugiere que cualquier futura expansión o inversión debería priorizar las zonas con alta disponibilidad de soja para maximizar la eficiencia operativa y minimizar los costos de transporte.

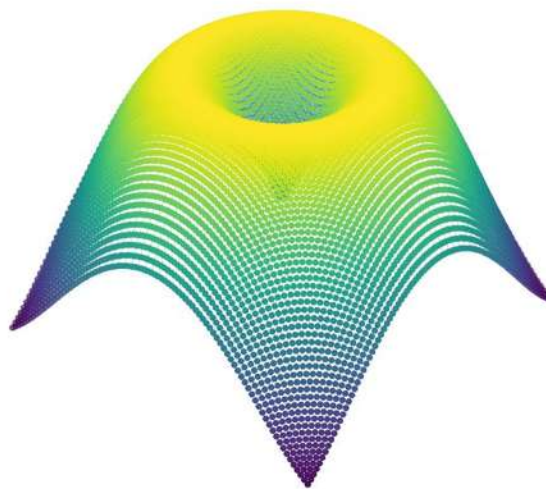
Más allá de su aplicación específica en la producción de biocombustibles, el marco híbrido PSO-OBR propuesto muestra un gran potencial para un uso más amplio en ingeniería de sistemas de procesos y en la optimización de cadenas de suministro. Su



integración de modelos sustitutos derivados de simulaciones rigurosas de procesos con un algoritmo metaheurístico de optimización permite gestionar de manera eficiente problemas de gran escala, no lineales y multiobjetivo, comunes en el diseño de procesos industriales y en redes de asignación de recursos. Este enfoque ofrece una forma práctica de reducir la demanda computacional al tiempo que preserva la fidelidad del modelo, lo que lo hace adecuado para aplicaciones como la intensificación de procesos químicos, la integración energética y la optimización logística en cadenas de suministro complejas.



Capítulo 5. Conclusiones





En este trabajo se desarrolló un marco de optimización híbrida que integra de manera directa modelos sustitutos basados en aprendizaje automático dentro de formulaciones matemáticas, evitando su reformulación y permitiendo su incorporación eficiente en modelos lineales. La estrategia propuesta combina regresores explícitos, como modelos lineales y polinómicos, con enfoques más complejos como redes neuronales implementadas mediante algoritmos genéticos, lo que amplía la capacidad de representación sin incrementar significativamente la complejidad del modelo global. Su aplicación en el caso de estudio de Michoacán demostró la viabilidad económica de las configuraciones obtenidas, alcanzando ganancias del orden de 2.55 MM USD anuales, y evidenció que, aunque distintos tipos de regresores pueden conducir a valores similares de la función objetivo, generan configuraciones de proceso diferentes. Asimismo, la extensión del enfoque al diseño de la cadena de suministro de diésel verde bajo el nexo agua-energía-alimentos, mediante la integración de OBRs con PSO, permitió obtener soluciones técnicamente factibles y ambientalmente aceptables, alcanzando hasta un 50 % de sustitución de diésel convencional sin comprometer recursos críticos, e identificando regiones clave como Marialva con alto potencial productivo. En conjunto, los resultados validan que la integración de modelos sustitutos en esquemas híbridos constituye una herramienta efectiva para la toma de decisiones en sistemas complejos, al reducir la carga computacional sin perder capacidad de análisis. No obstante, se reconoce que estos modelos no sustituyen el nivel de detalle de los simuladores rigurosos, por lo que futuras investigaciones deberán enfocarse en incorporar mayor número de variables operativas, validar el enfoque con datos industriales y considerar escenarios de incertidumbre, particularmente en la disponibilidad de recursos como el agua, así como la inclusión de nuevas fuentes de biomasa, con el fin de fortalecer la robustez y aplicabilidad del marco propuesto.



Referencias

- Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., Brevdo, E., Chen, Z., Citro, C., Corrado, G. S., Davis, A., Dean, J., Devin, M., Ghemawat, S., Goodfellow, I., Harp, A., Irving, G., Isard, M., Jia, Y., Jozefowicz, R., Kaiser, L., Kudlur, M., ... Zheng, X. (2016). *TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems* (arXiv:1603.04467). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1603.04467>
- ABDG. (2023, June 7). Estado do Paraná alcança 2 GW de potência instalada em geração própria de energia. *ABGD*. <https://www.abgd.com.br/porta1/estado-do-parana-alcanca-2-gw-de-potencia-instalada-em-geracao-propria-de-energia/>
- Abotaleb, M. (2024). SOLVING THE OPTIMIZING PARAMETERS PROBLEM FOR NON-LINEAR DATASETS USING THE HIGH-ORDER GENERAL LEAST DEVIATIONS METHOD GLDM) ALGORITHM. *Computational Methods for Differential Equations*, (Online First). <https://doi.org/10.22034/cmde.2024.62441.2751>
- Azadi, S., & Karimi-Jashni, A. (2016). Verifying the performance of artificial neural network and multiple linear regression in predicting the mean seasonal municipal solid waste generation rate: A case study of Fars province, Iran. *Waste Management*, 48, 14–23. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.09.034>
- Barrena Gurbillón, M. A., Cubas Alarcón, F., Gosgot Angeles, W., Ordinola Ramírez, C. M., Rascón Barrios, J., & Huanes Mariños, M. (2019). Sistema de producción de biogás y bioabonos a partir del estiércol de bovino, Molinopampa, Chachapoyas, Amazonas, Perú. *Arnaldoa*, 26(2), 725–734. <https://doi.org/10.22497/arnaldoa.262.26214>



- Bergman, D., Huang, T., Brooks, P., Lodi, A., & Raghunathan, A. U. (2022). JANOS: An Integrated Predictive and Prescriptive Modeling Framework. *INFORMS Journal on Computing*, 34(2), 807–816. <https://doi.org/10.1287/ijoc.2020.1023>
- Bertsimas, D., & Margaritis, G. (2025). Global optimization: A machine learning approach. *Journal of Global Optimization*, 91(1), 1–37. <https://doi.org/10.1007/s10898-024-01434-9>
- Biodieselbr. (2025). *Veja as usinas de Biodiesel no estado: Paraná | BiodieselBR.com*. https://www.biodieselbr.com/usinas_brasil/estados/parana
- Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer New York, NY. <https://link.springer.com/book/9780387310732>
- Bruno, J. C., Fernandez, F., Castells, F., & Grossmann, I. E. (1998). A Rigorous MINLP Model for the Optimal Synthesis and Operation of Utility Plants. *Chemical Engineering Research and Design, Techno-Economic Analysis*, 76(3), 246–258. <https://doi.org/10.1205/026387698524901>
- Cansino-Loeza, B., & Ponce-Ortega, J. M. (2024). The water–energy–food nexus. In *Developments in Environmental Modelling* (Vol. 32, pp. 1–19). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-443-13571-2.00001-1>
- Capaz, R. S., Posada, J. A., Osseweijer, P., & Seabra, J. E. A. (2021). The carbon footprint of alternative jet fuels produced in Brazil: Exploring different approaches. *Resources, Conservation and Recycling*, 166, 105260. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2020.105260>
- Cavalcanti, C. J. S., Ravagnani, M. A. S. S., Stragevitch, L., Carvalho, F. R., & Pimentel, M. F. (2022). Simulation of the soybean oil hydrotreating process for green diesel



- production. *Cleaner Chemical Engineering*, 1, 100004. <https://doi.org/10.1016/j.clce.2022.100004>
- Ceccon, F., Jalving, J., Haddad, J., & Thebelt, A. (2022). Presentation abstract: Optimization formulations for machine learning surrogates. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 49, pp. 57–58). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-85159-6.50008-7>
- Cochran, W. G. (1977). *Sampling Techniques*.
- CONADESUCA. (2022). *Listados de municipios asociados a la producción de caña de azúcar en México*. Gob.Mx. https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/758448/Listado_de_municipios_c_a_eros_Conadesuca.pdf
- Cortes-Peña, Y., Kumar, D., Singh, V., & Guest, J. S. (2020). BioSTEAM: A Fast and Flexible Platform for the Design, Simulation, and Techno-Economic Analysis of Biorefineries under Uncertainty. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 8(8), 3302–3310. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b07040>
- Cristianini, N., & Shawe-Taylor, J. (2000). *An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods* (1st ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511801389>
- Daichendt, M. M., & Grossmann, I. E. (1998). Integration of hierarchical decomposition and mathematical programming for the synthesis of process flowsheets. *Computers & Chemical Engineering*, 22(1), 147–175. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(97\)88451-7](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(97)88451-7)
- D'Ambrosio, C., & Lodi, A. (2013). Mixed integer nonlinear programming tools: An updated



- practical overview. *Annals of Operations Research*, 204(1), 301–320.
<https://doi.org/10.1007/s10479-012-1272-5>
- 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., 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>
- Fu, G., Khu, S.-T., & Butler, D. (2009). Use of surrogate modelling for multiobjective optimisation of urban wastewater systems. *Water Science and Technology*, 60(6), 1641–1647. <https://doi.org/10.2166/wst.2009.508>
- Fuentes-Cortés, L. F., Flores-Tlacuahuac, A., & Nigam, K. D. P. (2022). Machine Learning Algorithms Used in PSE Environments: A Didactic Approach and Critical Perspective. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 61(25), 8932–8962. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c00335>
- GOB, R. A. (2018). *Agricultura Principal Actividad del Sector en el Estado: Sagarpa Michoacán*. <http://www.gob.mx/agricultura|michoacan/articulos/agricultura-principal-actividad-del-sector-en-el-estado-sagarpa-michoacan?idiom=es>
- González, L. D., & Zavala, V. M. (2023). New paradigms for exploiting parallel experiments in Bayesian optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 170, 108110.



<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.108110>

Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press.

Gopinath, S., & Adjiman, C. S. (2025). Superstructure optimization with rigorous models via an exact reformulation. *Computers & Chemical Engineering*, 194, 108972. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2024.108972>

Grossmann, I. E. (2002). Review of Nonlinear Mixed-Integer and Disjunctive Programming Techniques. *Optimization and Engineering*, 3(3), 227–252. <https://doi.org/10.1023/A:1021039126272>

Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>

Henao, C. A., & Maravelias, C. T. (2011). Surrogate-based superstructure optimization framework. *AIChE Journal*, 57(5), 1216–1232. <https://doi.org/10.1002/aic.12341>

Huang, H., Long, S., & Singh, V. (2016). Techno-economic analysis of biodiesel and ethanol co-production from lipid-producing sugarcane. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 10(3), 299–315. <https://doi.org/10.1002/bbb.1640>

Itaipu. (2025). Usina de Itaipu: Conheça tudo sobre a hidrelétrica de Foz do Iguaçu! *Turismo Itaipu*. <https://turismoitaipu.com.br/a-usina-itaipu/>

Kelly, J. D., & Zyngier, D. (2017). Unit-operation nonlinear modeling for planning and scheduling applications. *Optimization and Engineering*, 18(1), 133–154. <https://doi.org/10.1007/s11081-016-9312-7>

Long, A., Sun, R., Mao, X., Duan, Q., & Wu, M. (2025). Surrogate modelling-based multi-objective optimization for best management practices of nonpoint source pollution. *Water Research*, 269, 122788. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.122788>



- López-Flores, F. J., Lira-Barragán, L. F., Rubio-Castro, E., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2023). Hybrid Machine Learning-Mathematical Programming Approach for Optimizing Gas Production and Water Management in Shale Gas Fields. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 11(15), 6043–6056. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.3c00569>
- Madenoor Ramapriya, G., Won, W., & Maravelias, C. T. (2018). A superstructure optimization approach for process synthesis under complex reaction networks. *Chemical Engineering Research and Design*, 137, 589–608. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.07.015>
- Mencarelli, L., Chen, Q., Pagot, A., & Grossmann, I. E. (2020). A review on superstructure optimization approaches in process system engineering. *Computers & Chemical Engineering*, 136, 106808. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106808>
- Mora-Mariano, D., & Flores-Tlacuahuac, A. (2022). A machine learning approach for the surrogate modeling of uncertain distributed process engineering models. *Chemical Engineering Research and Design*, 186, 433–450. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.07.050>
- Murat Sen, S., Dumesic, J. A., & Maravelias, C. T. (2015). A Superstructure-Based Framework for Simultaneous Process Synthesis, Heat Integration, and Utility Plant Design. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 37, pp. 1391–1396). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63577-8.50077-2>
- Neufang, M., Pajak, E., Berg, D. van de, Lee, Y. S., & Chanona, E. A. del R. (2024). *Surrogate-Based Optimization Techniques for Process Systems Engineering* (arXiv:2412.13948). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2412.13948>



- Ochoa-Barragán, R., Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. M. (2025). Superstructure hybrid optimization framework: An innovative approach for multi-objective supply chain optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 200, 109175. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2025.109175>
- Palmes. (2023). Designing Machine Learning Pipeline Toolkit for AutoML Surrogate Modeling Optimization. *JuliaCon Proceedings*, 1(1), 129. <https://doi.org/10.21105/jcon.00129>
- Parvizi, M., Shadkam, E., & Jahani, N. (2015). A Hybrid COA/ ϵ -Constraint Method for Solving Multi-Objective Problems. *International Journal in Foundations of Computer Science & Technology*, 5(5), 27–40. <https://doi.org/10.5121/ijfcst.2015.5503>
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., Vanderplas, J., Passos, A., Cournapeau, D., Brucher, M., Perrot, M., & Duchesnay, É. (2011). Scikit-learn: Machine Learning in Python. *J. Mach. Learn. Res.*, 12(null), 2825–2830.
- Pistikopoulos, E. N., Barbosa-Povoa, A., Lee, J. H., Misener, R., Mitsos, A., Reklaitis, G. V., Venkatasubramanian, V., You, F., & Gani, R. (2021). Process systems engineering – *The generation next?* *Computers & Chemical Engineering*, 147, 107252. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107252>
- Ponce-Ortega, J. M., & Hernández-Pérez, L. G. (2019). *Optimization of Process Flowsheets through Metaheuristic Techniques*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-91722-1>
- Ponce-Ortega, J. M., Ochoa-Barragán, R., & Ramírez-Márquez, C. (2024). *Optimization of*



Chemical Processes: A Sustainable Perspective. Springer Nature Switzerland.

<https://doi.org/10.1007/978-3-031-57270-8>

Ponce-Ortega, J. M., & Santibañez-Aguilar, J. E. (2019). *Strategic planning for the sustainable production of biofuels*. Elsevier.

Prina, M. G., Dallapiccola, M., Moser, D., & Sparber, W. (2024). Machine learning as a surrogate model for EnergyPLAN: Speeding up energy system optimization at the country level. *Energy*, 307, 132735. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.132735>

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>

Ravagnani, M. A. S. S., Silva, A. P., Biscaia, E. C., & Caballero, J. A. (2009). Optimal Design of Shell-and-Tube Heat Exchangers Using Particle Swarm Optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48(6), 2927–2935. <https://doi.org/10.1021/ie800728n>

Raya-Tapia, A. Y., López-Flores, F. J., & Ponce-Ortega, J. M. (2023). Incorporating deep learning predictions to assess the water-energy-food nexus security. *Environmental Science & Policy*, 144, 99–109. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2023.03.010>

Reuters. (2025, February 4). *Colheita de Soja do Paraná Atinge 23% da Área, e Plantio de Milho Vai a 28%*. Forbes Brasil. <https://forbes.com.br/forbesagro/2025/02/colheita-de-soja-do-parana-atinge-23-da-area-e-plantio-de-milho-vai-a-28/>

Ryu, J., Kong, L., Pastore de Lima, A. E., & Maravelias, C. T. (2020). A generalized superstructure-based framework for process synthesis. *Computers & Chemical*



- Engineering*, 133, 106653. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.106653>
- SAGARPA. (2016). *Variedades con mejores rendimientos de las zonas cañeras en México*.
Nota informativa. Gob.Mx.
https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/114367/Nota_Informativa_Febrero_2016_Variedades_con_Mejores_Rendimientos_de_las_Zonas_Ca_eras_en_M_xico.pdf
- SANEPAR. (2020). *ÁGUA | Sanepar*. <https://site.sanepar.com.br/a-sanepar/servicos/agua>
- Schwaab, M., Bisciaia, Jr., E. C., Monteiro, J. L., & Pinto, J. C. (2008). Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization. *Chemical Engineering Science*, 63(6), 1542–1552. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.11.024>
- Schweidtmann, A. M., Bongartz, D., & Mitsos, A. (2022). *Optimization with Trained Machine Learning Models Embedded* (arXiv:2207.12722). arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2207.12722>
- Thomassey, S. (2010). Sales forecasts in clothing industry: The key success factor of the supply chain management. *International Journal of Production Economics*, 128(2), 470–483. <https://doi.org/10.1016/j.ijpe.2010.07.018>
- UNC. (2017, April 21). *Produce Michoacán 400 mil toneladas de caña – Union Nacional de Caneros A.C.* <https://caneros.org.mx/produce-michoacan-400-mil-toneladas-de-cana/>
- Wan, X., Pekny, J. F., & Reklaitis, G. V. (2005). Simulation-based optimization with surrogate models—Application to supply chain management. *Computers & Chemical Engineering*, 29(6), 1317–1328. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2005.02.018>



- Zhang, Y., Gong, D., Sun, X., & Guo, Y. (2017). A PSO-based multi-objective multi-label feature selection method in classification. *Scientific Reports*, 7(1), 376. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-00416-0>
- Zhou, J., & Ren, J. (2025). Surrogate Modeling for Accelerating Optimization of Complex Systems in Chemical Engineering. In C. He & J. Ren (Eds.), *Applied AI Techniques in the Process Industry* (1st ed., pp. 287–311). Wiley. <https://doi.org/10.1002/9783527845491.ch10>



Apéndice 1. Contribución a la investigación

La contribución a la investigación durante mi estancia en el Doctorado se puede resumir en las siguientes publicaciones:

Artículos:

2026

1. Cerda-Flores, S. C., **Ochoa-Barragán**, R., Ponce-Ortega, J. M., Nápoles-Rivera, F., & Azzaro-Pantel, C. (2026). Sustainable Design of Biomethane and Biohydrogen Supply Chains by Implementing A Hybrid AI-GA-based Framework. *Applied Soft Computing*, 115587. <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2026.115587>
2. **Ochoa-Barragán**, R.; Saavedra-Sánchez, L.D.; Nápoles-Rivera, F.; Ramírez-Márquez, C.; Lira-Barragán, L.F.; Ponce Ortega, J.M. Artificial Intelligence Enabling Intelligent Solar Energy Systems: Integration and Emerging Directions. *Processes* 2026, 14, 1167. <https://doi.org/10.3390/pr14071167>
3. **Ochoa-Barragán**, R., Raya-Tapia, A. Y., López-Flores, F. J., Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. M. (2026). Artificial intelligence at seventy: From symbolic aspirations to emergent realities. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c04476>

2025

4. Vega-Muratalla, V. O., Serrano-Arévalo, T. I., **Ochoa-Barragán**, R., Lira-Barragán, L. F., Ramírez-Márquez, C., El-Halwagi, M. M., & Ponce-Ortega, J. M. (2025). Recent advances and engineering challenges of lithium batteries for grid-level energy storage: A review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Article ASAP. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.5c03594> (**Trabajo seleccionado como portada**)
5. Ramírez-Márquez, C., **Ochoa-Barragán**, R., & Vega-Muratalla, V. O. (2025). Synaptic eco-intelligent cities: A neuro-inspired framework for regenerative urban systems. *Naturaleza y Tecnología*, 12(1), 624. <http://naturalezaytecnologia.ugto.mx/index.php/nyt/article/view/624>



6. **Ochoa-Barragán, R.**, Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. M. (2025). Superstructure hybrid optimization framework: An innovative approach for multi-objective supply chain optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 200, 109175. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2025.109175>
7. Serrano-Arévalo, T. I., **Ochoa-Barragán, R.**, Ramírez-Márquez, C., El-Halwagi, M., Abdel Jabbar, N., & Ponce-Ortega, J. M. (2025). Energy storage: From fundamental principles to industrial applications. *Processes*, 13(6), 1853. <https://doi.org/10.3390/pr13061853>
8. Carranza-Maldonado, J., **Ochoa-Barragán, R.**, Guerrero-García-Rojas, H., Ramírez-Márquez, C., & Ponce-Ortega, J. M. (2025). Analyzing the feasibility of lithium extraction in Mexico: Supply chain modeling with economic and environmental considerations. *Processes*, 13(4), 1116. <https://doi.org/10.3390/pr13041116>
9. **Ochoa-Barragán, R.**, Martín-Hernández, E., Omelon, S., Ponce-Ortega, J. M., & Ramírez-Márquez, C. (2025). Strategies for phosphorus recovery in livestock operations: Assessing decentralized and distributed recovery systems. *Waste Management*, 202, 114837. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2025.114837>

2024

10. **Ochoa-Barragán, R.**, Serrano-Arévalo, T., Pulido-Ocegueda, J. C., Cerda-Flores, S. C., Ramírez-Márquez, C., Nápoles-Rivera, F., & Ponce-Ortega, J. M. (2024). Sustainable lime production: An optimal and equitable approach with machine learning. *Journal of Cleaner Production*. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141017>

2023

11. **Ochoa-Barragán, R.**, Ponce-Ortega, J. M., & Tovar-Facio, J. (2023). Long-term energy transition planning: Integrating battery system degradation and replacement for sustainable power systems. *Sustainable Production and Consumption*, 42, 335–350. <https://doi.org/10.1016/j.spc.2023.09.017>
12. **Ochoa-Barragán, R.**, Munguía-López, A. D. C., & Ponce-Ortega, J. M. (2023). A hybrid machine learning–mathematical programming optimization approach for municipal solid



waste management during the pandemic. *Environment, Development and Sustainability*, 1–20. <https://doi.org/10.1007/s10668-023-03354-2>

13. **Ochoa-Barragán, R.**, Munguía-López, A. C., & Ponce-Ortega, J. M. (2023). Strategic planning for the optimal distribution of COVID-19 vaccines. *Socio-Economic Planning Sciences*. <https://doi.org/10.1016/j.seps.2023.101559>

2022

14. Munguía-López, A. C., **Ochoa-Barragán, R.**, & Ponce-Ortega, J. M. (2022). Optimal waste management during the COVID-19 pandemic. *Chemical Engineering and Processing – Process Intensification*, 176, 108942. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2022.108942> (**Trabajo seleccionado como portada**) 
15. **Ochoa-Barragán, R.**, Munguía-López, A. C., & Ponce-Ortega, J. M. (2022). Estrategias de optimización para hacer frente a la pandemia COVID-19. *CIENCIA ergo-sum*, 24(4). <https://doi.org/10.30878/ces.v29n4a4>



Libros:

1. Francisco Javier López-Flores, **Rogelio Ochoa-Barragán**, Alma Yunuen Raya-Tapia, César Ramírez-Márquez and José María Ponce-Ortega. (2024). Machine Learning Tools for Chemical Engineering: Methodologies and Applications. *ELSEVIER*. ISBN: 9780443290596

Este libro aborda el uso de herramientas de Machine Learning en la ingeniería química, proporcionando metodologías y aplicaciones prácticas para optimizar procesos y mejorar la toma de decisiones.

2. José María Ponce-Ortega, **Rogelio Ochoa-Barragán**, and César Ramírez-Márquez. (2024). Optimization of Chemical Processes - A Sustainable Perspective. *Springer*. ISBN 3031572696, 9783031572692

En este libro se explora el uso de estrategias de optimización de procesos químicos con un enfoque en sostenibilidad, integrando conceptos ambientales, económicos y tecnológicos orientados al diseño de diferentes procesos químicos.

3. José María Ponce-Ortega, **Rogelio Ochoa-Barragán**, César Ramírez-Márquez, José Ezequiel Santibañez-Aguilar, Aurora del Carmen Munguía-López. Solid Waste Management: Navigation from Fundamentals to Innovation. *Taylor and Francis*. ISBN: 9781032850610

En este libro se analiza la gestión de residuos sólidos desde sus fundamentos hasta innovaciones recientes, presentando tecnologías y estrategias de optimización aplicables a diferentes contextos y escalas.

Portadas de artículos publicados



CIENCIA *ergo-sum*
Universidad Autónoma del Estado de México
ciencia.ergosum@yahoo.com.mx
E-ISSN: 2395-8782

Estrategias de optimización para hacer frente a la pandemia COVID-19

Ochoa-Barragán, Rogelio; Munguía-López, Aurora del Carmen; Ponce-Ortega, José María
Nanomateriales a la vanguardia para combatir el virus SARS-CoV-2

CIENCIA *ergo-sum*, vol. 29, núm. 4. Número especial "SARS-CoV-2", 2022 | e181

Espacio del Divulgador

Universidad Autónoma del Estado de México, México

Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivar 4.0 Internacional.



Ochoa-Barragán, R., Munguía-López, A. del C. y Ponce-Ortega, J. M. (2022). Estrategias de optimización para hacer frente a la pandemia COVID-19. CIENCIA *ergo-sum*, 29(4). Número especial "SARS-CoV-2". <https://doi.org/10.30878/ces.v29n4a4>



Chemical Engineering and Processing - Process Intensification

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cep



Optimal waste management during the COVID-19 pandemic

Aurora del Carmen Munguía-López^{*}, Rogelio Ochoa-Barragán, José María Ponce-Ortega

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

ARTICLE INFO

Keywords:
Municipal solid waste management
Optimization
Process intensification
Taxation
COVID-19

ABSTRACT

There have been many problems generated by the COVID-19 pandemic. One of them is the worrying increase in the generation of medical waste due to the great risk they represent for health. Therefore, this work proposes a mathematical model for optimal solid waste management, proposing a circular value chain where all types of waste are treated in an intensified industrial park. The model selects the processing technologies and their production capacity. The problem was formulated as a mixed-integer linear programming problem to maximize profits and the waste processed, minimizing environmental impact. The proposed strategy is applied to the case study of the city of New York, where the increase in the generation of medical waste has been very significant. To promote recycling, different tax rates are proposed, depending on the amount of waste sent to the landfill. The results are presented on a Pareto curve showing the trade-off between profits and processed waste. We observed that the taxes promote recycling, even of those wastes that are not very convenient to recycle (from an economic point of view), favoring profits, reducing the environmental impact, and the risk to health inherent to the medical waste.

1. Introduction

One of the main problems as a result of the pandemic is the increase in the generation of some types of waste, mainly medical waste. This type of waste represents a potential risk to health for garbage collectors, health workers, patients, and the general public [1]. Solid waste management was already a problem even before the pandemic, especially in developing countries, due to the lack of infrastructure for waste processing. The existing risk from poor waste management is so high that it is estimated that around 9.2 million people annually die [2].

There are many alternatives and strategies for the management of municipal solid waste (MSW), one of the main trends currently is the conversion of waste-to-energy (WTE) [3,4], using technologies such as gasification, pyrolysis, incineration, among others. However, not all types of waste are convenient to be converted into energy. Metallic waste, for example, has great economic potential, due to the high price at which its derivatives can be sold [5]. In addition, new technologies for waste treatment have been developed in particular for the treatment of waste from COVID-19, such as the processing system for waste from respirators proposed by Zhao and You [6]. Despite the different technologies currently available to MSW, the recycling percentages remain low [7,8]. Different strategies have recently been developed for waste

management seeking to increase the amount of waste that is processed, considering different objectives, whether social, environmental, or economic.

In this paper, a multi-objective optimization strategy for MSW treatment is presented. Our approach involves the evaluation of the construction of an industrial park that promotes the intensification of recycling processes, reduces transport costs, and considers different alternatives for MSW, such as recycling, WTE, and landfill disposal. The mathematical model results in a mixed-integer linear problem (MILP) that includes a variable tax rate to increase recycling rates, especially for those wastes with low economic potential, such as the treatment of medical waste, which has increased significantly because of the pandemic.

The work is structured as follows. In Section 2, the related literature is discussed. Section 3 presents the problem statement. In Section 4 the proposed model is presented. In Section 5, the New York case study is shown to represent the applicability of the proposed model. Section 6 shows the discussion of the obtained results. Finally, the conclusion and recommendations are presented in Section 7.

^{*} Correspondence author.
E-mail address: 1723704c@umich.mx (A.C. Munguía-López).

<https://doi.org/10.1016/j.cep.2022.108942>

Received 5 December 2021; Received in revised form 13 March 2022; Accepted 18 April 2022

Available online 21 April 2022

0255-2701/© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.



Contents lists available at ScienceDirect

Socio-Economic Planning Sciences

journal homepage: www.elsevier.com/locate/seps

Strategic planning for the optimal distribution of COVID-19 vaccines

Rogelio Ochoa-Barragán, Aurora del Carmen Munguía-López^{*}, José María Ponce-Ortega

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

ARTICLE INFO

Keywords:
Vaccines
Optimal distribution
Fair allocation
COVID-19

ABSTRACT

This work presents a multi-objective optimization strategy for fair vaccine allocation through different fairness schemes. The proposed approach considers a diverse series of parameters related to different public health data and social behaviors that influence the correct distribution of vaccines, such as corruption and crime. Simultaneously, the formulation includes prioritizing those groups with the highest risk based on the epidemiological traffic light. Furthermore, the presented strategy involves different budget constraints that allow identifying trade-off solutions through Pareto fronts. Therefore, vaccine allocations are obtained by combining fairness concepts with multi-objective optimization. The applicability of the model is illustrated using the case study of Mexico. The solution to the proposed scenarios was carried out using different justice schemes and an economic objective function. The results show the compromises between a satisfaction index and costs, which are shown through Pareto optimal solutions that allow selecting the solutions that balance the objectives. The solutions provided by the social welfare scheme suggest a greater allocation of vaccines to those states with higher epidemiological risk, which may be helpful in the first stage of vaccination. On the other hand, the Rawlsian scheme provides more balanced solutions that can be useful in situations with lower rates of infection. Finally, the Nash scheme is the one that provides the most balanced solutions, favoring to a lesser extent the areas with the highest epidemiological risk, which may be useful in the later stages of vaccination.

1. Introduction

The global pandemic caused by COVID-19 has caused various problems as well as certain benefits. For example, novel models to accelerate the development of next-generation vaccines have been guided by the scale of the humanitarian and economic impact of the pandemic [1]. On the other hand, vaccines used to require many years of development as it is a slow, complex, and expensive process. Furthermore, many candidate vaccines may be discarded during this process to produce a certified vaccine [2]. Previously, the manufacturing process was done step by step due to cost and high failure rates, requiring multiple breaks for data analysis, which is why it is such a time-consuming process. The COVID-19 pandemic has caused a significant demand for vaccines around the world, leading to major changes in vaccine development. Regarding the distribution of vaccines, in order to establish a fair vaccine allocation system worldwide, it was necessary to carry out clinical and serological studies to confirm which populations remained at greater risk and prioritize their inoculation [3].

For instance, various studies determined that people with obesity suffer worse reactions, and a significant proportion of them may require

intensive care [4]. Furthermore, diabetes, cardiovascular, cerebrovascular, and pulmonary diseases, as well as age and male gender, are multiple risk factors associated with mortality in patients with COVID-19 [5]. Unfortunately, older patients are more likely to progress to severe disease. In addition, these patients are at increased risk of death because they are more prone to multisystem organ dysfunction or failure [6].

Various issues have arisen in the allocation of medical resources globally due to the COVID-19 pandemic. The allocation of medical resources has already been profoundly affected by factors unrelated to COVID-19, including waste and inefficiency on the part of health workers, clumsy and costly bureaucratic systems, and excessive consumption [7]. Therefore, the difficulties generated by COVID-19 increased the importance of the improved distribution of available resources. During the worst part of the pandemic, in some regions, an intense debate about the right of all people to access health care has arisen since professionals considered prioritizing patients with the best chance of surviving over those with little chance. They argued that treating people as equals may no longer be accepted due to the sheer number of people who suffer and are directly affected by the

^{*} Corresponding author. Department of Chemical Engineering, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán, 58060, México.
E-mail address: 1723704c@umich.mx (A.C. Munguía-López).

<https://doi.org/10.1016/j.seps.2023.101559>

Received 6 August 2021; Received in revised form 13 February 2023; Accepted 1 March 2023

Available online 14 March 2023

0038-0121/© 2023 Elsevier Ltd. All rights reserved.



A hybrid machine learning-mathematical programming optimization approach for municipal solid waste management during the pandemic

Rogelio Ochoa-Barragán¹ · Aurora del Carmen Munguía-López¹ · José María Ponce-Ortega¹

Received: 21 November 2022 / Accepted: 4 May 2023
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Nature B.V. 2023

Abstract

This paper provides a mathematical optimization strategy for optimal municipal solid waste management in the context of the COVID-19 epidemic. This strategy integrates two approaches: optimization and machine learning models. First, the optimization model determines the optimal supply chain for the municipal waste management system. Then, machine learning prediction models estimate the required parameters over time, which helps generate future projections for the proposed strategy. The optimization model was coded in the General Algebraic Modeling System, while the prediction model was coded in the Python programming environment. A case study of New York City was addressed to evaluate the proposed strategy, which includes extensive socioeconomic data sets to train the machine learning model. We found the predicted waste collection over time based on the socioeconomic data. The results show trade-offs between the economic (profit) and environmental (waste sent to landfill) objectives for future scenarios, which can be helpful for possible pandemic scenarios in the following years.

Keywords Optimization · Machine learning · Taxation · COVID-19 · Municipal solid waste management

1 Introduction

The COVID-19 pandemic has generated problems in most activities where human being develops. The introduction of various social distancing initiatives, the overproduction of different hygiene products, the reorganization of health systems, and even how consumers plan their food purchases and the waste that this implies, have generated direct and indirect impacts on the environment (Vittuari et al., 2021; Zanetti et al., 2022). The apparent positive effects were observable from cleaner lakes, rivers, and beaches, to improvements in air quality, this offers an opportunity to formulate ecological policies that

✉ Aurora del Carmen Munguía-López
1723704c@umich.mx

¹ Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, 58060 Morelia, Michoacán, México



Contents lists available at ScienceDirect

Sustainable Production and Consumption

journal homepage: www.elsevier.com/locate/spc

Long-term energy transition planning: Integrating battery system degradation and replacement for sustainable power systems

Rogelio Ochoa-Barragán^a, José María Ponce-Ortega^a, Javier Tovar-Facio^{b,*}^a Department of Chemical Engineering, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia, Mich., 58060, Mexico^b Faculty of Chemical Sciences, Universidad Autónoma de Chihuahua, Circuito Universitario S/N, Campus Universitario II, Chihuahua, Chih. 31125, Mexico

ARTICLE INFO

Editor: Dr. Gonzalo Guillen Gosalbez

Keywords:

Energy systems planning
Sustainability
Battery storage systems degradation
Deep discharge

ABSTRACT

The transition towards sustainable energy systems has gained significant importance globally due to high levels of environmental pollution caused by the use of fossil fuels. This study addresses a critical aspect of the global transition towards sustainable energy systems. We emphasize the impact of considering energy storage system degradation and replacement in long-term energy transition planning. The importance of this lies in mitigating the challenges posed by the intermittency and variability of renewable energy sources, such as wind and solar, without failing to consider the negative effect that excessive use of batteries as a storage energy system would have. We propose an optimization model that integrates power systems generation and transmission infrastructure with strategic energy storage system implementation to optimize their size, operation, and location for maximum efficiency and benefits. This paper offers a comprehensive approach to take into account the environmental effect of the depth of the discharge and replacement of battery systems over a long-term planning horizon considering hourly operation of representative time periods. The electricity system of Baja California, Mexico, a region heavily reliant on fossil fuels, is presented as a case study to show the applicability of the model. Results demonstrate that continuous replacement of dispatchable generators (natural gas power plants) for non-dispatchable generators (variable renewable power plants) may cause an unexpected increase of indirect greenhouse gas emissions from the continuous replacement of batteries when degradation is not considered. The results of the case study show an average emissions factor of 0.325 Ton CO₂e/MWh, approximately 24 % lower than government expectations, using the proposed MILP model.

1. Introduction

The incorporation of renewable energies into current energy supply systems has witnessed remarkable growth in recent years. However, this transition is not without challenges, primarily due to the inherent uncertainties associated with these energy sources (Hannan et al., 2021). For instance, solar energy availability is contingent upon variables such as the time of day and specific weather conditions, which can significantly impact its generation potential. Similarly, wind energy, known as one of the largest contributors to global electricity generation among renewable sources, is subject to fluctuations influenced by various factors (Salah et al., 2021). As a result, these intermittent and variable characteristics of renewable energy sources pose significant challenges for energy planners and grid operators, necessitating careful consideration and integration of energy storage systems and efficient network

planning strategies. Based on the aforementioned challenges, energy storage emerges as a potential solution to overcome the instability in renewable energy production (Abualigah et al., 2022).

Making informed decisions regarding the transition of current energy systems is vital to ensure efficient and reliable energy systems (Ahmad et al., 2022). In this regard, planning models allow for the evaluation of various hypothetical scenarios that strengthen the decision-making process and technology selection in electricity networks. These models enable the assessment of different impacts that new technologies, economic trends, or optimization strategies may have in meeting future demands (Alizadeh et al., 2020).

In past decades, electricity generation relied primarily on dispatchable fossil fuel resources (Elavarasan, 2019). Planning models during that time were not subject to constraints such as the temporal availability of resources or unpredictable variability in energy production efficiencies. However, the current challenge lies in finding efficient

* Corresponding author.

E-mail address: jtovarf@uach.mx (J. Tovar-Facio).<https://doi.org/10.1016/j.spc.2023.09.017>

Received 19 July 2023; Received in revised form 20 September 2023; Accepted 26 September 2023

Available online 10 October 2023

2352-5509/© 2023 Institution of Chemical Engineers. Published by Elsevier Ltd. All rights reserved.



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Cleaner Production

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jclepro

Sustainable lime production in Michoacan Mexico: An optimal and equitable approach with machine learning

Rogelio Ochoa-Barragán, Tania Itzel Serrano-Arévalo, Juan Carlos Pulido-Ocegueda, Sandra Cecilia Cerda-Flores, César Ramírez-Márquez*, Fabricio Nápoles-Rivera, José María Ponce-Ortega

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

ARTICLE INFO

Handling Editor: Zhifu Mi

Keywords:

Supply chain planning
Mathematical optimization
Sustainable development
Machine-learning
Social welfare

ABSTRACT

This paper presents a novel approach to the strategic planning of the supply chain for lime cultivation. The uncertainty associated with lime production due to factors such as transportation, crime, and water availability, among others, represents different challenges. To address these challenges, the authors propose the use of machine learning tools coupled with deterministic optimization to obtain optimal solutions for the supply chain for future years. This paper highlights the use of justice schemes to ensure an equitable distribution of lime production between farmers and learning machines to quantify the insecurity impact on lime production in Michoacan. The problem can be solved using a Mixed-Integer Linear Programming (MILP) model that focuses on maximizing economic benefits, minimizing the use of irrigation water in crops, and minimizing Carbon Dioxide Equivalent (CO_{2eq}) emissions within the supply chain. The results demonstrate that the proposed approach can effectively address the challenges facing the lime production supply chain, resulting in an optimized and equitable lime production and distribution between farmers using the Social Welfare Justice scheme. Scenario A presents a utopian viewpoint with maximum benefits and minimum CO_{2eq} generated emissions, corresponding to \$ 4.08×10^9 and 1.94×10^6 tons of CO_{2eq}, respectively. This paper contributes to the growing body of literature on the use of Artificial Intelligence (AI) in supply chain management, specifically in the optimization of supply chain processes.

1. Introduction

India, Mexico, and China currently top the world ranking as the biggest lime producers. Roughly 3 million tons are harvested every year in India, 2.4 million tons in Mexico, and 2.3 million tons are harvested in China (FEDERCITRUS, 2021). According to data from the Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO, 2020), world lime production increased by 6.2 % compared to previous years, and harvested areas increased by 2.9 %, with an average yield of 16 tons per hectare. Mexico presents a yield of 14.5 tons per hectare (AtlasBig, 2021), which represents a high production volume due to its large harvest regions. This is an area of opportunity for Mexico, as it is possible to optimize the yield per hectare which will allow for greater harvest volumes.

Approximately 30 % of the lime produced in Mexico is exported to

Europe, Asia, South America, and other parts of North America (Nicolás and Favila, 2019). The volume of lime exported in 2018 was 733,897 tons, which translated to 569 million dollars. The quantity of exported lime produced in Mexico has been steadily increasing year after year, reaching 28 nations. Some of the countries where lime is exported are the Netherlands, the United Kingdom, France, Spain, Belgium, Germany, Italy, Japan, South Korea, Russia, and the United States, which stood out with 669,168 tons imported in 2018 (InfoAgro, 2022).

Mexico produces a wide variety of fruit crops, with lime occupying a prominent place at a national level due to its harvest volume and the economic goods it generates. According to the Agricultural and Rural Development Office (SADER, 2022), lime crops represent 11 % of the total national fruit production. It is important to mention that the harvest volume is not uniform throughout the year, but the favorable climatic conditions in the country allow the production of the fruit yearlong (SADER, 2022).

* Corresponding author.

E-mail address: cesar.ramirez@umich.mx (C. Ramírez-Márquez).

<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141017>

Received 22 September 2023; Received in revised form 17 January 2024; Accepted 28 January 2024

Available online 2 February 2024

0959-6526/© 2024 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Contents lists available at ScienceDirect

Waste Management

journal homepage: www.elsevier.com/locate/wasman

Research Paper

Strategies for phosphorus recovery in livestock operations: Assessing decentralized and distributed recovery systems

Rogelio Ochoa-Barragán^a, Edgar Martín-Hernández^b, Sidney Omelon^b,
José María Ponce-Ortega^a, César Ramírez-Márquez^{a,*}

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

^b Department of Mining and Materials Engineering, McGill University, Montreal, QC H3A 0C5, Canada

ARTICLE INFO

Keywords:

Multi-objective optimization
Phosphorus recovery
Nutrient pollution
Livestock waste
Circular economy

ABSTRACT

Phosphorus recovery and recycling are crucial to ensure the sustainable supply of this resource while preserving soils and water bodies. Livestock operations are a major source of phosphorus releases through manure generation. Manure storage and over-application may result in the transportation of phosphorus to water bodies by runoff, leading to nutrient pollution. However, their lack of economies of scale and spatial scattering hinders phosphorus recovery at livestock operations. To address these issues, this work explores the implementation of decentralized and distributed strategies for phosphorus recovery at livestock operations through manure processing centers and mobile processing units, respectively. A multi-objective optimization model is developed to design optimal networks for each strategy studied considering environmental and economic aspects. The optimal location of processing centers is determined according to the processing capacity of each phosphorus recovery technology, the location of the livestock operations, and the manure generated by each operation. The decentralized and distributed strategies for phosphorus recovery are assessed using the State of Minnesota in the USA as a case study. Phosphorus recovery can be performed using a decentralized recovery system with minimum greenhouse gas emissions, resulting in an investment cost of 45 million USD. Nevertheless, integrating a distributed phosphorus recovery approach based on mobile units in the decentralized system results in a more cost-effective recovery strategy. This strategy is also estimated to reduce the cost of phosphorus recovery at livestock operations to 23 million USD.

1. Introduction

Phosphorus (P) is a necessary nutrient for all forms of life, for which there is no known substitute, and its global reserves are limited (Reijnders, 2016). However, P is a non-volatile element that reaches waterbodies by runoff and leaching processes. P is transported to lentic waters where it accumulates over time and leads to the eutrophication of aquatic ecosystems. Anthropogenic activities associated with agricultural practices are a main source of P releases to water bodies and contribute to build P legacy across the landscape, which directly turns out to be one of the main causes of eutrophication in coastal and inland aquatic bodies (Ashley et al., 2011).

Among the agricultural practices, an important source of P releases is the generation of large amounts of manure in livestock operations. Since about 70 % of the phosphorus (P) ingested by livestock is excreted through manure (Menzi et al., 2010), the recovery of P from the manure

produced by livestock operations has been proposed as an alternative to reduce the nutrient pollution of agricultural systems (Bloem et al., 2017). Additionally, livestock operations collect the manure produced in confined areas, which makes the acquisition of previously collected manure relatively simple, resulting in a point source P flow that eases the implementation of recovery systems (U.S. Department of Agriculture, 2009; Ribaudo et al., 2003).

In addition to mitigating nutrient pollution from livestock operations, the recovery of P in forms suitable for use as fertilizer reduces the need for importing agricultural P products. As a result, the impact that disruption of the global P supply chains would have on the local agricultural systems is reduced, resulting in more resilient food production systems (Cordell and White, 2015).

Different processes for P recovery from manure have been proposed, highlighting the recovery of P through struvite precipitation which currently turns out to be one of the most popular alternatives within the fertilizer industry, since it can be obtained from a wide variety of

* Corresponding author.

E-mail address: cesar.ramirez@umich.mx (C. Ramírez-Márquez).

<https://doi.org/10.1016/j.wasman.2025.114837>

Received 7 November 2024; Received in revised form 31 March 2025; Accepted 23 April 2025

0956-053X/© 2025 Elsevier Ltd. All rights are reserved, including those for text and data mining, AI training, and similar technologies.

Article

Analyzing the Feasibility of Lithium Extraction in Mexico: Supply Chain Modeling with Economic and Environmental Considerations

Jovanna Carranza-Maldonado ¹, Rogelio Ochoa-Barragán ², Hilda Guerrero-García-Rojas ^{1,*}, César Ramírez-Márquez ² and José María Ponce-Ortega ^{2,*}

¹ Economics Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia 58060, Michoacán, Mexico; 1208420x@umich.mx

² Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia 58060, Michoacán, Mexico; 1207293g@umich.mx (R.O.-B.); cesar.ramirez@umich.mx (C.R.-M.)

* Correspondence: hilda.guerrero@umich.mx (H.G.-G.-R.); jose.ponce@umich.mx (J.M.P.-O.); Tel.: +52-443-3223500 (ext. 3088) (H.G.-G.-R.); Tel.: +52-443-3223500 (ext. 1277) (J.M.P.-O.); Fax: +52-443-3273584 (J.M.P.-O.)



Academic Editor: Marco Vaccari

Received: 8 March 2025

Revised: 3 April 2025

Accepted: 5 April 2025

Published: 8 April 2025

Citation: Carranza-Maldonado, J.; Ochoa-Barragán, R.; Guerrero-García-Rojas, H.; Ramírez-Márquez, C.; Ponce-Ortega, J.M. Analyzing the Feasibility of Lithium Extraction in Mexico: Supply Chain Modeling with Economic and Environmental Considerations. *Processes* **2025**, *13*, 1116. <https://doi.org/10.3390/pr13041116>

Copyright: © 2025 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract: Lithium is a strategic resource due to its use in rechargeable batteries for electric vehicles and electronic devices, driving high demand for extraction. This study analyzes the lithium supply chain in Mexico, focusing on both the extraction of lithium carbonate for export and the potential for producing lithium-ion batteries and lithium grease, considering their environmental impact. The proposed mixed integer linear programming (MILP) model, solved using the GAMS modeling environment, suggests that lithium extraction in Mexico is viable, with Sonora having the greatest extraction capacity. Three solutions were evaluated: Solution A maximizes profits (USD 317.19 M) but has high greenhouse gas (GHG) emissions (1,119,904 tons), Solution B balances profits (USD 186.98 M) with lower emissions (559,904 tons), and Solution C prioritizes emission reduction (44,792 tons) at the cost of lower profits (USD 48.20 M). Solution C implies a scenario with severe environmental restrictions, which indirectly leads to lower investment costs by avoiding the production of lithium grease and batteries. This study highlights the potential impact of tariffs on U.S. lithium exports, with a 25% tariff making exports economically unviable. This underscores the need for Mexico to diversify its export markets. Decision-makers can use this model to explore alternative strategies, reduce dependence on a single market, and optimize the economic and environmental sustainability of the lithium sector.

Keywords: lithium extraction; supply chain modeling; mathematical optimization; decision making; economic feasibility

1. Introduction

Lithium has become one of the most crucial elements in the global energy transition due to its fundamental role in energy storage solutions, particularly lithium-ion batteries [1,2]. These batteries power electric vehicles (EVs), renewable energy storage systems, and a vast range of consumer electronics, making lithium an essential component in global decarbonization efforts [3]. The rising demand for lithium has led to intensified global competition for resources focusing on South America's "Lithium Triangle" (Argentina, Bolivia, Chile), home to over 50% of the world's lithium reserves [4]. However, Mexico

Review

Energy Storage: From Fundamental Principles to Industrial Applications

Tania Itzel Serrano-Arévalo ¹, Rogelio Ochoa-Barragán ¹, César Ramírez-Márquez ^{1,*}, Mahmoud El-Halwagi ², Nabil Abdel Jabbar ³ and José María Ponce-Ortega ^{1,*}

¹ Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Avenida Francisco J. Múgica, SN, Building V1, Ciudad Universitaria, Morelia 58060, Michoacan, Mexico; 1129300h@umich.mx (T.I.S.-A.); 1207293g@umich.mx (R.O.-B.)

² Chemical Engineering Department, Texas A & M University, College Station, TX 77843-3122, USA; el-halwagi@tamu.edu

³ Chemical Engineering Department, American University of Sharjah, Sharjah 26666, United Arab Emirates; nabdeljabbar@aus.edu

* Correspondence: cesar.ramirez@umich.mx (C.R.-M.); jose.ponce@umich.mx (J.M.P.-O.); Tel.: +52-443-3223500 (ext. 1277) (C.R.-M. & J.M.P.-O.)

Abstract: The increasing global energy demand and the transition toward sustainable energy systems have highlighted the importance of energy storage technologies by ensuring efficiency, reliability, and decarbonization. This study reviews chemical and thermal energy storage technologies, focusing on how they integrate with renewable energy sources, industrial applications, and emerging challenges. Chemical Energy Storage systems, including hydrogen storage and power-to-fuel strategies, enable long-term energy retention and efficient use, while thermal energy storage technologies facilitate waste heat recovery and grid stability. Key contributions to this work are the exploration of emerging technologies, challenges in large-scale implementation, and the role of artificial intelligence in optimizing Energy Storage Systems through predictive analytics, real-time monitoring, and advanced control strategies. This study also addresses regulatory and economic barriers that hinder widespread adoption, emphasizing the need for policy incentives and interdisciplinary collaboration. The findings suggest that energy storage will be a fundamental pillar of the sustainable energy transition. Future research should focus on improving material stability, enhancing operational efficiency, and integrating intelligent management systems to maximize the benefits of these technologies for a resilient and low-carbon energy infrastructure.

Keywords: energy storage systems; chemical energy storage; thermal energy storage; artificial intelligence; renewable energy integration



Academic Editor: Evangelos Tsotsas

Received: 15 May 2025

Revised: 7 June 2025

Accepted: 10 June 2025

Published: 12 June 2025

Citation: Serrano-Arévalo, T.I.; Ochoa-Barragán, R.; Ramírez-Márquez, C.; El-Halwagi, M.; Abdel Jabbar, N.; Ponce-Ortega, J.M. Energy Storage: From Fundamental Principles to Industrial Applications. *Processes* **2025**, *13*, 1853. <https://doi.org/10.3390/pr13061853>

Copyright: © 2025 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Energy consumption has had a growth of about 2.6% annually over the past decade within developing economies and in emerging markets. These economies and markets account for approximately 85% of the global population. This growth is being driven by key factors such as a population increase of over 720 million people, a 40% rise in industrial activity, and a 50% economic expansion [1]. The resulting surge in energy demand has intensified global warming, prompting cities and governments to collaborate in achieving the Paris Agreement objectives of limiting the rise of global temperatures below 2 °C, with an aspirational goal of 1.5 °C [2]. In order to meet these targets without hindering economic growth, energy efficiency has become a cornerstone of global sustainability policies [3]. Decarbonizing the energy sector is essential, with the Energy Storage Systems (ESS) being



Contents lists available at ScienceDirect

Computers and Chemical Engineering

journal homepage: www.elsevier.com/locate/compchemeng

Superstructure hybrid optimization framework: An innovative approach for multi-objective supply chain optimization

Rogelio Ochoa-Barragán , César Ramírez-Márquez, José María Ponce-Ortega

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

ARTICLE INFO

Keywords:

Hybrid models
Machine learning
Mathematical optimization
Biorefineries
Supply chain

ABSTRACT

Modeling process systems is highly complex and requires advanced tools to generate optimal solutions effectively. While no perfect mathematical model exists, integrating artificial intelligence with mathematical optimization helps overcome the limitations of traditional models. This paper presents a novel approach to supply chain optimization by incorporating machine learning models directly into optimization frameworks. Unlike traditional methods that require complex reformulations for integrating advanced machine learning algorithms, our strategy allows seamless incorporation into both deterministic and metaheuristic techniques, simplifying hybrid model implementation. To evaluate the proposed strategy, we analyze the installation of bioethanol biorefineries in the Michoacán region, Mexico, a major sugarcane producer. This case study leverages well-established processes to generate high-quality data for training machine learning models that enhance predictive accuracy. Additionally, it enables a comprehensive economic and environmental assessment of bioethanol production, highlighting its role in energy security, greenhouse gas reduction, and rural economic development. Results show that using a linear regression model and a neural network model yields an annual profit of 2.55 MM USD while minimizing costs and environmental impact. Although predictive models do not fully replace process simulators, our approach demonstrates that decision-making can significantly benefit from hybrid models, reducing computational complexity while maintaining accuracy.

1. Introduction

Mathematical models are usually simplified representations of real processes that allow us to solve problems and understand complex systems. Optimization, on the other hand, is a mathematical tool focused on finding the best solution among a set of possible solutions for a given problem (Ponce-Ortega et al., 2024). The superstructure-based synthesis approach has the potential to be highly effective in theory since it considers a lot of different process options and optimizes both the structure and the process's operating circumstances at the same time (Murat Sen et al., 2015; Madenoor-Ramapriya et al., 2018). In the literature, when addressing problems such as resource allocation, production scheduling, and transportation problems, the use of linear optimization models is common, due to their computational efficiency and simplicity (Cansino-Loeza and Ponce-Ortega, 2023). By having both the objective function and the constraints in a linear form, these models are convex, which guarantees obtaining a global optimal solution. However, many real problems present nonlinear behaviors, and linear optimization fails to capture the complexity of the interaction of

variables in those cases (Abotaleb, 2024; Ponce-Ortega and Santibañez-Aguilar, 2019).

The use of non-linear optimization models allows for the representation of more complex systems, however, the mathematical complexity of the resulting optimization model, which is typically a large-scale nonconvex mixed-integer nonlinear program (MINLP), is the price paid for this power, which also presents disadvantages such as long resolution times and the risk of getting stuck in local minima (Ponce-Ortega and Hernández-Pérez, 2018). Models that are integrated when unit operations are realistic (i.e., models found in commercial process simulators that consider calculations of thermodynamics, kinetics, and nonideal transport properties) typically cannot be solved (Kelly and Zyngier, 2016). The incorporation of hierarchical decomposition and MINLP frameworks, as well as modeling/decomposition techniques, are some approaches to simplify superstructure optimization models (Mencarelli et al., 2020).

On the other hand, different methodologies have been presented that allow the generation of computationally efficient approximations of complex systems. In this context, Fu et al. (2009) presented surrogate

* Corresponding author.

E-mail address: jose.ponce@umich.mx (J.M. Ponce-Ortega).<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2025.109175>

Received 11 December 2024; Received in revised form 21 February 2025; Accepted 4 May 2025

Available online 6 May 2025

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



**SYNAPTIC ECO-INTELLIGENT CITIES: A NEURO-INSPIRED
FRAMEWORK FOR REGENERATIVE URBAN SYSTEMS IN THE
SOCIETY 5.0 ERA**

César Ramírez-Márquez ^a, Rogelio Ochoa-Barragán ^a, 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, México, 58060. jose.ponce@umich.mx

Abstract

This article introduces the concept of Synaptic Eco-Intelligent Cities as a novel research framework that integrates ecological infrastructure, digital intelligence, and civic participation to support regenerative and inclusive urban transformation. Drawing from biological principles, the city is modeled as a distributed system in which these elements interact through feedback mechanisms analogous to synaptic connections in neural networks. The methodology is structured into three functional layers: environmental sensing embedded in ecological systems, decentralized computation through artificial intelligence and edge technologies, and participatory governance incorporating real-time citizen input. To operationalize the concept, a set of process-based indicators is proposed to assess urban system performance in terms of connectivity, responsiveness, ecological regeneration, civic engagement, and learning capacity. This approach shifts the focus from static sustainability metrics toward dynamic and context-sensitive measures of urban intelligence. The proposed framework is articulated through conceptual reasoning and system logic to clarify an emerging viewpoint in urban landscape design and planning aligned with the principles of Society 5.0.

Keywords: Synaptic urbanism; Eco-intelligent systems; Adaptive infrastructure; Urban regeneration; Society 5.0.

Recent Advances and Engineering Challenges of Lithium Batteries for Grid-Level Energy Storage: A Review

Published as part of *Industrial & Engineering Chemistry Research* special issue "Energy Storage across Scales".

Victor Osvaldo Vega-Muratalla, Tania Itzel Serrano-Arévalo, Rogelio Ochoa-Barragán, Luis Fernando Lira-Barragán, César Ramírez-Márquez, Mahmoud M. El-Halwagi, and José María Ponce-Ortega*

 Cite This: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2026, 65, 1424–1447

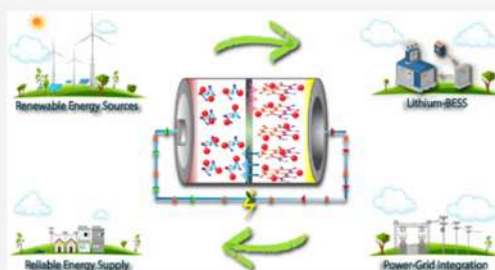
 Read Online

ACCESS |

 Metrics & More

 Article Recommendations

ABSTRACT: The global shift toward decarbonization demands reliable and scalable energy storage solutions for the sustainable integration of renewable energy sources into power grids. Lithium-based batteries (LIBs) have emerged as potential candidates for energy storage due to their high energy density, rapid response, and potential for continuous cost reduction. This review covers recent material advances, engineering challenges, and system-level innovations related to the deployment of LIBs at grid scale. Real-world applications, techno-economic indicators, sustainability concerns, recycling, as well as second-life of LIBs are also examined. Beyond the current widespread adoption of LIBs, emerging chemistries such as Li–Air batteries, hybrid energy storage systems, and regulatory frameworks are discussed. The analysis highlights that lithium-based battery energy storage systems (lithium-BESS) will play a pivotal role in large-scale applications in the following years. Nevertheless, their long-term adoption will depend not only on technological progress and cost reduction but also on sustainability, safety, and particularly the establishment of robust policy support.



1. INTRODUCTION

In the context of addressing global warming and the possible depletion of fossil fuels, the role of renewable energy sources (RES) is key in the energy transition toward a near-utopian scenario of net-zero emissions. However, during the last years, one of the main challenges has not been how to convert them into electrical energy, but how to manage them. Therefore, to address the problems associated with the intermittency of the main RES (such as solar and wind energy), storage systems have been implemented, which are essential to guaranteeing a stable and secure electricity supply.¹ Among the wide variety of storage technologies available, Battery energy storage systems (BESS) stand out as one of the most efficient solutions for short and medium-term electricity storage, particularly in distributed applications. In other words, they allow for small to medium-scale energy management systems (EMS) in specific locations, reducing the need for long-distance energy transport and decreasing transmission losses.^{2,3} Within this field, much of the current technological race is focused on producing increasingly efficient and cost-effective batteries, with lithium-based batteries (LIBs) leading the way.⁴ Although there are promising alternatives, such as redox flow batteries (RFBs), which store

energy in liquids in external tanks and can offer high scalability, long life, and efficient charging cycles (suitable for large-scale storage), their energy density is considerably lower.⁵ Sodium-ion batteries (SIBs) are cheaper and safer but also have low energy density.⁶ All solid-state batteries (ASSBs), still under development, offer greater energy density, although their high production costs make large-scale manufacturing difficult.^{7,8}

In this context, Figure 1 presents a comparison of various commercial battery technologies, based on data reported by the European Energy Commission,⁹ large-scale LIBs reach about 1000 MWh of capacity, followed by VRFB (~800 MWh) and NaS (~300 MWh), whereas other chemistries such as Zn–Br, IRFB (iron redox flow battery), and LIB-High Power remain below 150 MWh, and traditional systems like Ni–Cd, NaNiCl₂ (ZEBRA), lead–acid, and Ni–MH are limited to less than 50

Received: August 28, 2025

Revised: December 2, 2025

Accepted: December 3, 2025

Published: December 10, 2025



Review

Artificial Intelligence Enabling Intelligent Solar Energy Systems: Integration and Emerging Directions

Rogelio Ochoa-Barragán, Luis David Saavedra-Sánchez, Fabricio Nápoles-Rivera *, César Ramírez-Márquez , Luis Fernando Lira-Barragán *  and José María Ponce-Ortega 

Department of Chemical Engineering, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Francisco J. Mujica S/N, Ciudad Universitaria, Morelia 58060, Michoacán, Mexico; 1207293g@umich.mx (R.O.-B.); 1339424j@umich.mx (L.D.S.-S.); cesar.ramirez@umich.mx (C.R.-M.); jose.ponce@umich.mx (J.M.P.-O.)

* Correspondence: fabricio.napoles@umich.mx (F.N.-R.); luis.lira@umich.mx (L.F.L.-B.)

Abstract

The integration of artificial intelligence (AI) into solar energy systems has emerged as a transformative pathway to enhance efficiency, reliability, and sustainability in renewable energy. This review examines recent advances in AI-driven optimization and integration strategies across photovoltaic and solar thermal technologies with elements of bibliometric analysis to identify trends, methodologies, and research directions. A particular emphasis is placed on machine learning and deep learning techniques applied to solar irradiance forecasting, maximum power point tracking, fault detection, energy management, and predictive maintenance. Unlike earlier reviews that focused on isolated applications, this work highlights the systemic role of AI in enabling smart grids, hybrid systems, and large-scale energy storage integration. The novelty of this contribution lies in mapping the evolution from traditional control methods to intelligent, self-adaptive frameworks that couple physical modeling with data-driven approaches, offering a structured roadmap for future developments. Furthermore, the review identifies challenges such as data scarcity, computational demand, and interpretability of AI models, while outlining opportunities for process intensification, resilience, and techno-economic optimization. By bridging technical progress with implementation prospects, this article provides an updated reference for researchers, policymakers, and industry stakeholders seeking to accelerate the deployment of AI-enhanced solar energy solutions.

Keywords: artificial intelligence; machine learning; deep learning; photovoltaic systems; optimization; forecasting; fault detection; smart grids; integration; renewable energy



Academic Editors: Dimitris Ipsakis and Andreas Yiotis

Received: 11 March 2026

Revised: 2 April 2026

Accepted: 2 April 2026

Published: 4 April 2026

Copyright: © 2026 by the authors.

Licensee MDPI, Basel, Switzerland.

This article is an open access article

distributed under the terms and

conditions of the [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Attribution (CC BY) license.

1. Introduction

Global commitments to climate stabilization have accelerated the expansion of renewable energy systems, placing solar power at the center of current efforts to shift toward low-carbon development [1,2]. The Paris Agreement, adopted by 196 countries in 2015, places explicit pressure on national energy strategies to reduce greenhouse gas emissions [3], while COP26 reinforced this agenda by calling for a progressive phase-down of coal and a rapid expansion of clean, health-oriented energy systems [4]. These international mandates coincide with structural dynamics already reshaping global energy markets. Between 2010 and 2020, installed photovoltaic capacity increased from 40,334 to 709,674 MW, marking one of the fastest technological expansions in contemporary energy history [5,6]. Concentrated



Contents lists available at ScienceDirect

Applied Soft Computing Journal

journal homepage: www.elsevier.com

Sustainable design of biomethane and biohydrogen supply chains by implementing a hybrid AI-GA-based framework

Sandra Cecilia Cerda-Flores^{a, b}, Rogelio Ochoa-Barragán^a, José María Ponce-Ortega^a,
Fabricio Nápoles-Rivera^a, Catherine Azzaro-Pantel^{b, *}

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

^b Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, Toulouse, France

ARTICLE INFO

Keywords:
Waste-to-Energy
Biohydrogen
Supply Chain
Hybrid Models
Machine Learning

ABSTRACT

Net-zero is one of the most ambitious pathways to limit anthropogenic emissions and keep global warming levels under 2°C. Biomethane and biohydrogen are two energy vectors considered key for the decarbonization of hard-to-abate sectors. This study evaluates the techno-economic performance of waste-to-energy, producing biomethane and processing a portion of it into biohydrogen. Surrogate models trained on ASPEN simulations of the steam-methane reforming (SMR) process are incorporated into the deterministic mathematical model, creating a hybrid model that implements genetic algorithms to optimise the supply chain design, with profit maximisation and water minimisation for the SMR process as the objective functions. The methodology was applied to the occidental region of Mexico as a case study, characterized by high biomass availability and industrial activity. A price-sensitivity analysis identifies the price points at which the supply chain becomes economically viable, showing that the supply chain becomes profitable with a biomethane and biohydrogen selling price of 2.5 €/m³ and 5 €/kg, respectively. An optimal scenario that balances profits and end-user affordability at a biomethane selling price of 3 €/m³ and 6 €/kg for hydrogen, obtaining 57.1 M€/year in profits while minimising water consumption in the SMR process at 53582 m³/month, achieved through the GA optimisation. A key finding of this analysis is the higher cost structure and lower hydrogen yield obtained through the surrogate models, which can capture inefficiencies that otherwise may be overlooked.

1. Introduction

One of the key pathways to remain under the 2°C benchmark from the Paris Agreements is the net-zero emissions target [1]. The main objective of this framework is to reach carbon neutrality by the year 2050, which the International Panel on Climate Change (IPCC) defined as a state in which anthropogenic emissions are balanced globally by the emissions removed over a determined period [2]. Governments and some private sectors have welcomed this target as a direct measure useful for policy implementation [3]. However, energy consumption worldwide remains heavily dependent on fossil fuels, so this has become one of the focal points for pressure in divesting from conventional energy sources and adopting decarbonization pathways aligned with net-zero goals [4].

Biomethane and biohydrogen are key energy carriers that have been extensively studied to encourage decarbonization. Biomethane is obtained from the upgrading of biogas, and its physicochemical properties place it as a natural substitute for natural gas. Additionally, when obtained from organic waste, its use encourages a circular economy while repurposing the methane that would otherwise be emitted to the atmosphere. Hydrogen, in turn, stands out as a powerful energy carrier for the decarbonization of hard-to-abate industries, which include cement, ammonia, and steel production [5]. When produced from clean energy sources, wind or solar through electrolysis, hydrogen is classified as "green hydrogen", but according to the research carried out in [6], hydrogen obtained from electrolysis is a competitive option when the power system is fuelled 100% by renewables. Currently, about 47% of hydrogen is produced via steam-methane reforming (SMR), contribut-

Abbreviations: AI, Artificial Intelligence; ATR, Autothermal Reforming; GA, Genetic Algorithm; GDP, Gross Domestic Product; HPWS, High Pressure Water Scrubbing; LCOH, Levelised Cost of Hydrogen; LCBG, Levelised Cost of Biomethane; ML, Machine Learning; MILP, Mixed-Integer Linear Program; OBRs, Optimised Baseline Regressors; POX, Partial Oxidations; PSA, Pressure Swing Adsorption; SMR, Steam Methane Reforming; WGS, Water-gas Shift

* Corresponding author.

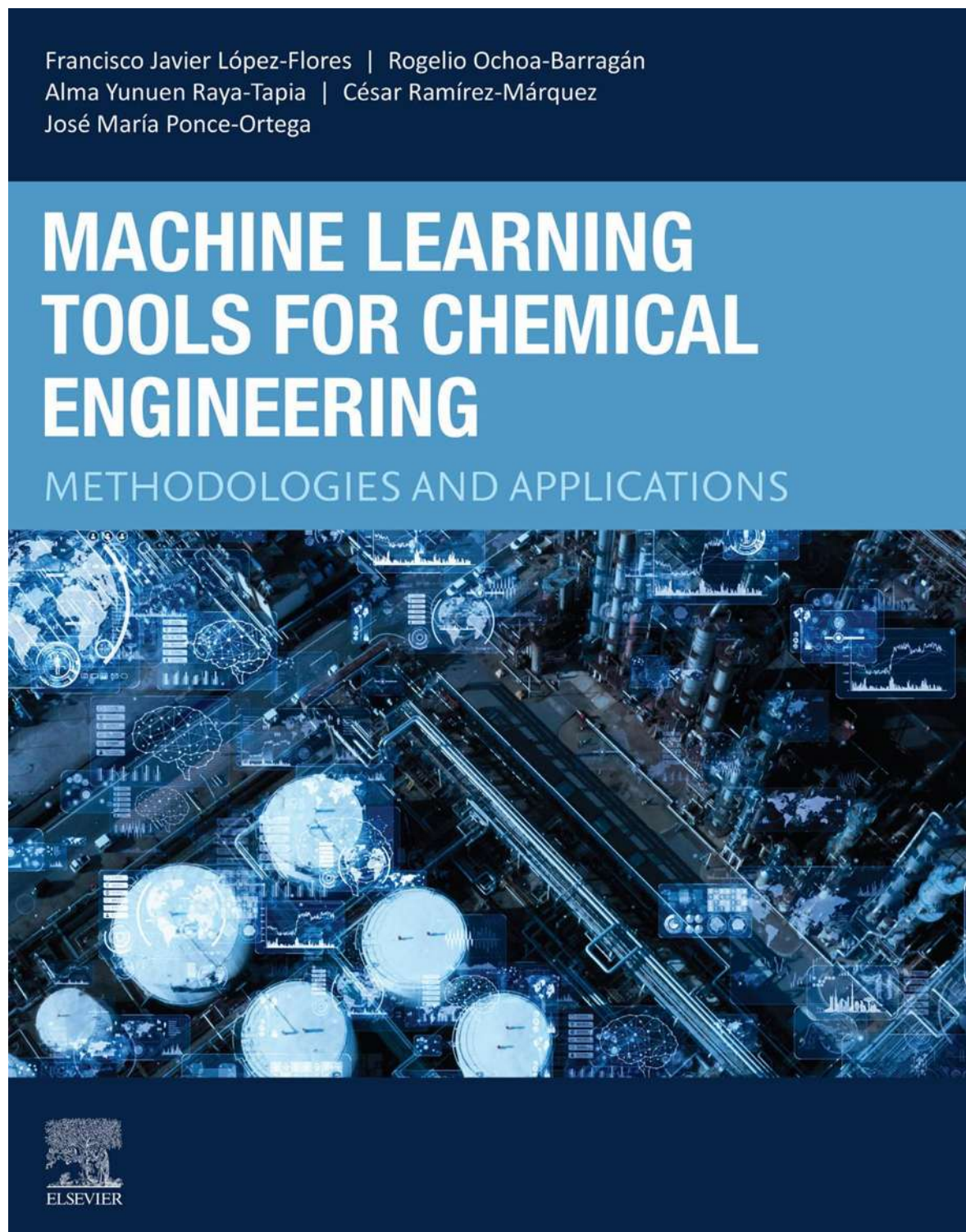
E-mail address: catherine.azzaropantel@toulouse-inp.fr (C. Azzaro-Pantel).

<https://doi.org/10.1016/j.asoc.2026.115587>

Received 6 September 2025; Received in revised form 27 February 2026; Accepted 16 May 2026
1568-4946/© 20XX



Portadas de Libros Publicados







José María Ponce-Ortega
Rogelio Ochoa-Barragán
César Ramírez-Márquez

Optimization of Chemical Processes

A Sustainable Perspective

 Springer

Solid Waste Management

Navigation from Fundamentals to Innovation



José María Ponce-Ortega, Rogelio Ochoa-Barragán,
César Ramírez-Márquez, José Ezequiel Santibañez-Aguilar, and
Aurora del Carmen Munguía-López



CRC Press
Taylor & Francis Group

A SCIENCE PUBLISHERS BOOK



Rogelio Ochoa Barragán

OPTIMIZACIÓN HÍBRIDA EN INGENIERÍA DE PROCESOS ENFOQUES Y APLICACIONES.pdf

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid::3117:597343557

Fecha de entrega

4 jun 2026, 7:55 a.m. GMT-6

Fecha de descarga

4 jun 2026, 8:01 a.m. GMT-6

Nombre del archivo

OPTIMIZACIÓN HÍBRIDA EN INGENIERÍA DE PROCESOS ENFOQUES Y APLICACIONES.pdf

Tamaño del archivo

10.7 MB

106 páginas

16.036 palabras

96.303 caracteres

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

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



A quien corresponda,

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

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

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	OPTIMIZACIÓN HÍBRIDA EN INGENIERÍA DE PROCESOS: ENFOQUES Y APLICACIONES	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	M.C. ROGELIO OCHOA BARRAGÁN	1207293g@umich.mx
Director	DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA	jose.ponce@umich.mx
Codirector	DR. MAURO ANTONIO DA SILVA SÁ RAVAGNANI	massravagnani@uem.br
Coordinador del programa	DR. JAVIER LARA ROMERO	doc.cs.ingenieria.quimica@umich.mx ó lararom@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	NO	No fue utilizada

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

Datos del solicitante	
Nombre y firma	M.C. ROGELIO OCHOA BARRAGÁN
Lugar y fecha	Morelia, Michoacán a 02 de junio del 2026