



## **INNOVACIÓN EN LA OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS A GRAN ESCALA: APLICACIÓN DE LOS INDICADORES 4E DE GREENSCOPE EN LA PRODUCCIÓN DE ACETONA-BUTANO-ETANOL Y ÁCIDO SUCCÍNICO**

Giusseppe Mamani-Paco <sup>a</sup>, Oscar A. Prado-Rubio <sup>b</sup>, Dr. Víctor Hugo Grisales-Díaz <sup>c</sup>, Divanery Rodriguez-Gomez <sup>d</sup>, Ricardo Morales-Rodriguez <sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Noria Alta S/N Col. Noria Alta, México 36050. ricardo.morales@ugto.mx.

<sup>b</sup> Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia, Manizales, Colombia 170003.

<sup>c</sup> Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia 111321.

<sup>d</sup> Coordinación de Ingeniería Bioquímica, Instituto Tecnológico Superior de Irapuato, Carretera Irapuato-Silao Km 12.5, Irapuato, México 36821.

### **Resumen**

Este trabajo implementa una estrategia sistemática para el diseño óptimo de procesos a gran escala en términos económicos, ecológico, energético, eficiencia (4E), utilizando biomasa lignocelulósica para producir ácido succínico, acetona, n-butanol y etanol. Este estudio se logró mediante los programas Fortran Intel Compiler, Aspen Plus V12 y Matlab. Además, se empleó redes neuronales en la evaluación económica, la identificación de variables de alto impacto (VAI) y la optimización multiobjetivo con algoritmos genéticos (OMAG) utilizando las funciones 4E: indicador de intensidad energética específica, productividad másica, valor presente neto y potencial de calentamiento global (GWP). Se estudiaron los casos A, B y C, con correlaciones de VAI de más del 20%, 10% y 5%, respectivamente. Los mejores resultados se lograron en el caso B con rendimientos sobresalientes en las funciones 4E. El caso A mostró limitaciones, mientras que el caso C necesita más casos de estudio. Estos hallazgos destacan la importancia de seleccionar y manejar adecuadamente las VAI para equilibrar rendimiento y eficiencia en la optimización. En conclusión, este trabajo presenta una estrategia innovadora y eficiente para la optimización de procesos, destacando la importancia de una evaluación exhaustiva y precisa de las VAI en el diseño de procesos sostenibles.



*Palabras clave:* Optimización metaheurística; Optimización multiobjetivo; GREENSCOPE; Biomasa lignocelulósica; Redes neuronales.

## **INNOVATION IN LARGE-SCALE PROCESS OPTIMIZATION: APPLICATION OF GREENSCOPE 4E INDICATORS IN THE PRODUCTION OF ACETONE-BUTANOL-ETHANOL AND SUCCINIC ACID**

### **Abstract**

This study presents a systematic approach for the optimal design of large-scale processes, emphasizing economic, ecological, energy, and efficiency (4E) indicators, using lignocellulosic biomass to produce succinic acid, acetone, n-butanol, and ethanol. The methodology integrates the use of Fortran Intel Compiler, Aspen Plus V12, and Matlab. Neural networks were employed for economic assessment, identification of high-impact variables (HIVs), and multi-objective optimization using genetic algorithms (MOGA) based on 4E indicators: specific energy intensity, mass productivity, net present value, and global warming potential. Three case studies (A, B, and C) were evaluated, featuring HIV correlations exceeding 20%, 10%, and 5%, respectively, with the 4E functions. Case B yielded the best performance across the indicators, while Case A exhibited certain limitations, and Case C warrants further investigation. These findings underscore the significance of selecting and managing HIVs to balance performance and efficiency in process optimization. In conclusion, this work introduces an innovative and efficient strategy for optimizing chemical processes, highlighting the pivotal role of thorough HIV evaluation in sustainable process design.

*Keywords:* Metaheuristic optimization; Multi-objective optimization; GREENSCOPE; Lignocellulosic biomass; Neural networks.



## 1. Introducción

En el contexto global actual, marcado por la creciente preocupación por la sostenibilidad y la urgente necesidad de reducir la dependencia de recursos no renovables, el desarrollo de tecnologías limpias y eficientes ha adquirido una relevancia central en la ingeniería de procesos. La biomasa lignocelulósica (BL), derivada de fuentes vegetales como residuos agrícolas y madera, se ha consolidado como una materia prima estratégica debido a su abundancia, rápida regeneración y potencial para reducir el impacto ambiental. Este tipo de biomasa ofrece una alternativa viable a los combustibles fósiles, siendo clave para la producción de biocombustibles y productos químicos de alto valor agregado, lo que contribuye a la mitigación de los efectos negativos de la explotación de recursos fósiles (Morales-Rodríguez y col., 2021).

Entre los biocombustibles derivados de la BL, el n-butanol se destaca por su alto contenido energético y baja presión de vapor en comparación con el etanol, lo que facilita su integración en las infraestructuras de distribución de combustibles ya existentes. Asimismo, la producción de ácido succínico

(AS) ha ganado relevancia como una alternativa sostenible en la industria química, dada la creciente demanda de sustitutos para su producción petroquímica. En este sentido, la utilización de BL para la obtención de n-butanol y ácido succínico no solo reduce la dependencia de recursos no renovables, sino que también contribuye al desarrollo de procesos más sostenibles y competitivos (Liu y col., 2022)..

La optimización de procesos industriales juega un papel crucial en el diseño y operación de sistemas eficientes. Sin embargo, los enfoques determinísticos tradicionales pueden resultar ineficientes en términos de tiempo computacional al enfrentarse a problemas complejos y de gran escala, como los relacionados con la eficiencia energética, los costos y el impacto ambiental (Shelokar y col., 2014). Para superar estas limitaciones, los métodos metaheurísticos han emergido como herramientas poderosas para la optimización de múltiples funciones objetivo, permitiendo una mayor flexibilidad y eficiencia computacional al resolver problemas complejos en menor tiempo.



Este trabajo propone un enfoque innovador para el diseño riguroso de procesos industriales a gran escala, mediante la aplicación de técnicas de optimización metaheurística. Utilizando como caso de estudio la producción combinada de acetona, n-butanol y etanol (ABE) junto con ácido succínico, se busca desarrollar una metodología sistemática que garantice un equilibrio óptimo entre rentabilidad, sostenibilidad y eficiencia. El análisis 4E de GREENSCOPE es una herramienta clave en este enfoque, proporcionando una evaluación integral de los aspectos energéticos, económicos, ambientales y de eficiencia del proceso.

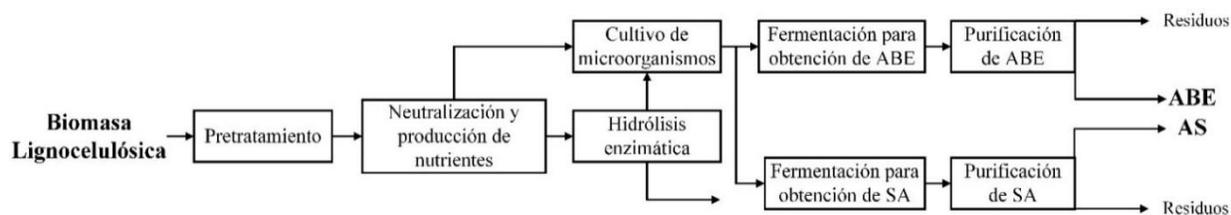
## 2. Metodología

El esquema de trabajo propuesto para alcanzar los objetivos contempló el diseño del proceso combinado a partir de los flujos de

entrada. De forma paralela, se realizó una validación rigurosa de la termodinámica con NRTL-HOC y cinética de la ruta metabólica. Posteriormente, se evaluó las variables de proceso y diseño involucradas. Finalmente, se aplicó la optimización metaheurística multiobjetivo del análisis 4E para seleccionar la configuración óptima del proceso.

### 2.1. Esquema de la biorrefinería.

El esquema de la biorrefinería se presenta en la Figura 1. La primera etapa del proceso implica el pretratamiento con ácido sulfúrico diluido que se mezcla con BL para formar azúcares con baja conversión, seguido por la neutralización que contribuye en la formación de sulfato de amonio como fuente de nitrógeno para el crecimiento de microorganismos (Morales-Rodríguez y col., 2021). En la hidrólisis enzimática, se completa la conversión BL a azúcares.



**Figura 1.** Diagrama de bloques del proceso combinado de obtención de ABE y AS.

### 2.2. Vinculación de programas.

Se emplearon los programas Intel Fortran Compiler (IFC), Aspen Plus® v12.1 y Matlab



R2024a. IFC y Aspen Plus® v12.1 se integraron para modelar el modelo cinético de la producción de ácido succínico (Song y col., 2008) desde una subrutina. Por otro lado, Matlab R2024a se vinculó con Aspen Plus® v12.1 para simular la producción de ABE (Shinto y col., 2007). Esto permitió modelar los reactores en Aspen Plus® v12.1, considerando el cálculo riguroso de las propiedades físicas y químicas de los compuestos y su variación temporal. La optimización metaheurística multiobjetivo se realizó en Matlab R2024a, utilizando el objeto gamultiobj (The MathWorks, 2023) a través de su conexión con Aspen Plus® v12.1.

### 2.3. Identificación de variables de alto impacto (VAI).

Para la identificación de las VAI, se aplicó la metodología reportada por Villareal de Aquino y col. (2023), la cual consiste en la identificación y selección de variables, generación de matriz de incertidumbre con 1000 casos, simulación de los eventos aislados y, finalmente, clasificación y obtención de VAI. Se realizaron dos modificaciones: (1) los objetivos específicos emplearán los indicadores de sostenibilidad de la metodología GREENSCOPE y (2) la

selección de variables se clasificará en función de su importancia, considerando umbrales del 5 %, 10 % y 20 % respecto a los objetivos anteriores.

### 2.4. Metodología GREENSCOPE.

GREENSCOPE se utiliza para apoyar decisiones de diseño y desarrollo sostenible, garantizando tanto la viabilidad económica como el beneficio social normalizando los indicadores de sostenibilidad utilizando una escala del 0 % al 100 %, calculada a partir de los valores mejor y peor escenario de cada indicador (Ruiz-Mercado y col., 2012, 2014).

Además, GREENSCOPE incluye 140 indicadores distribuidos en cuatro métricas: económico, ecológico, energía y eficiencia másica. La selección de los indicadores adecuados debe basarse en investigaciones previas y el nivel de desarrollo tecnológico de los procesos, considerando factores clave relevantes para equilibrar la eficiencia, la viabilidad económica y los impactos ecológicos negativos.

Se usaron 4 indicadores de la metodología GREENSCOPE (ver Tabla 1) para evaluar la selección de VAI y las funciones objetivo para la optimización metaheurística.



1

**Tabla 1.** Indicadores clave para la metodología 4E de GREENSCOPE.

Métrica	Indicador	Abrev.	Ecuación	Unidad
Eficiencia	Productividad másica	MP	$\frac{\sum \text{Flujo másico}_{\text{productos}}}{\sum \text{Flujo másico}_{\text{materia prima}}}$	kg/kg
Ecológico	Potencial de calentamiento global	GWP	$\frac{\sum \text{Flujo másico}_{\text{CO}_2, \text{eq}}}{\sum \text{Flujo másico}_{\text{productos}}}$	kg/kg
Energético	Intensidad energética específica	R <sub>SEI</sub>	$\frac{\sum \text{Energía neta}_{\text{utilizada}}}{\sum \text{Flujo másico}_{\text{productos}}}$	MMcal/kg
Económico	Valor presente neto	NPV		\$

2

### 2.5. Optimización metaheurística.

Se aplicó el objeto gamultiobj, un algoritmo genético multiobjetivo con una variante de NSGA-II de Matlab R2024a. Se empleó los siguientes parámetros: 50 generaciones, 40, 70 y 100 individuos para este problema mixto-entero puesto que tiene variables como número de etapas, etapa de alimentación, fracción de glucosa, temperatura y otras variables; una fracción de cruce de 0.8, una función de mutación adaptativa factible y simulación en paralelo de 7 núcleos.

Para abordar problemas con múltiples funciones objetivo, se identificaron varias soluciones óptimas en el frente de Pareto

(Deb, 2012). En este trabajo, se determinaron los puntos óptimos con las distancias euclidianas.

### 2.6. Construcción de red neuronal.

Se construyeron redes neuronales para cada equipo utilizando diferentes escenarios de flujo, presión, temperatura y configuración del proceso. Los datos se obtuvieron a partir de Aspen Plus® v12.1 y Aspen Economic v12.1, y se procesaron en Python con las librerías numpy, pandas, tensorflow y sklearn. Tras un análisis estadístico y normalización de los datos, se ajustaron las variables de entrada para mejorar el rendimiento. La red neuronal se configuró



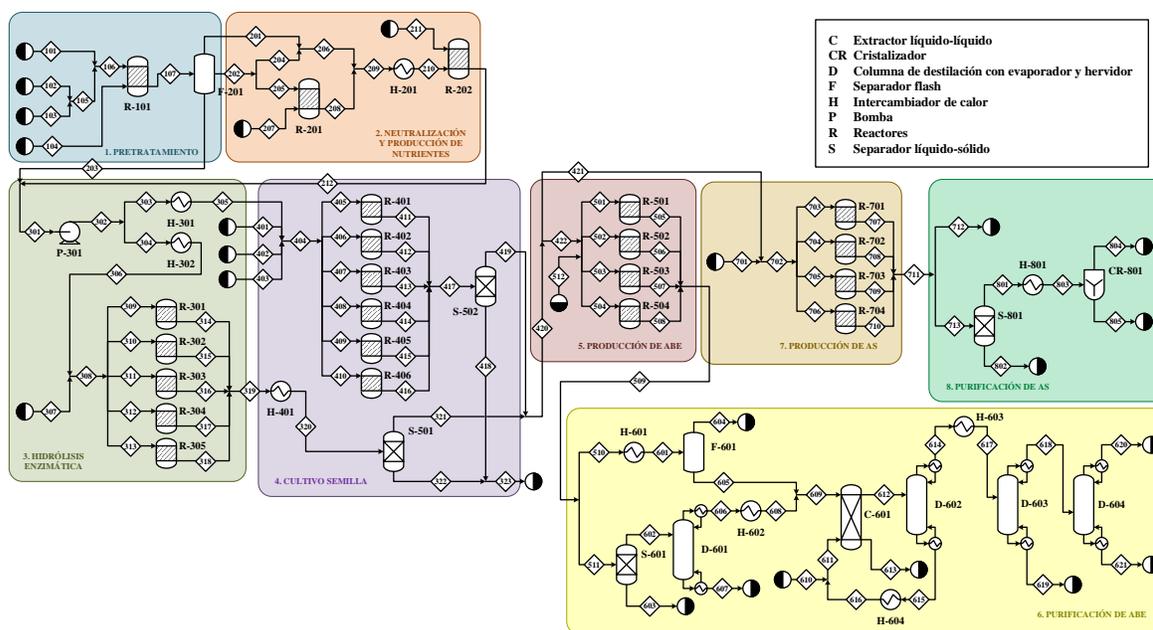
optimizando nodos, capas, validación y tasa de aprendizaje. Si el error en los datos de prueba era inferior al 10 %, la red se almacenaba en archivos (.keras) y la normalización en (.pkl).

### 3. Resultados

#### 3.1. Simulación del proceso.

La Figura 2 muestra la simulación del proceso propuesto para la producción de ABE y AS

dentro de una plataforma de biorrefinería. El diagrama de flujo incluye 8 secciones: 1) pretratamiento, 2) neutralización y producción de nutrientes, 3) hidrólisis enzimática, 4) cultivo de microorganismos, 5) producción de ABE, 6) purificación de ABE, 7) producción de AS y 8) purificación de AS. La capacidad de producción de ABE y AS de 80.56 y 76.61 toneladas métricas por día (TMPD) para el caso base al 50% de glucosa para la producción de ABE.



**Figura 2.** Diagrama de flujo de proceso de una plataforma para el procesamiento de biomasa lignocelulósica para la producción de ABE y SA.

#### 3.2. Identificación y Selección de VAI.

Se realizó el análisis de la correlación entre las variables de entrada y los 4 indicadores

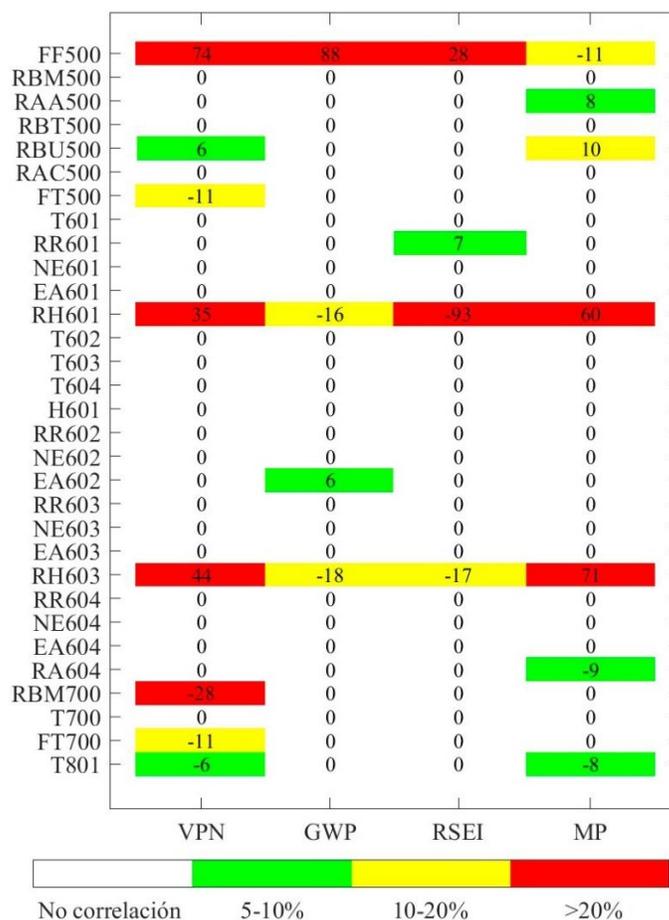
GREENSCOPE en los 1,000 casos de la matriz de datos, representados en la Figura 3. Los resultados indicaron que 4 variables mostraron una correlación entre el 5 % y el 10



% (color verde), 3 variables presentaron correlaciones entre el 10 % y el 20 % (color amarillo), y 4 variables superaron el 20 % de correlación (color rojo).

Las variables que presentaron una correlación entre el 5 % y el 10 % son RAA500 (Relación de ácido acético presente en (512)/glucosa presente en (422) previo al reactor ABE), RR601 (Relación de reflujo en el domo de la columna D-601), EA602 (Etapa de alimentación en la columna D-602), RA604 (Recuperación de acetona en la columna D-604) y T801 (Temperatura en el intercambiador de calor H-801). Las variables con una correlación entre el 10 % y

el 20 % incluyen RBU500 (Ratio de butanol en el reactor ABE R-500), FT500 y FT700 (Fracción de tiempo de carga y descarga  $1/n$  en el reactor ABE y AS respectivamente). Por último, las variables que presentaron una correlación superior al 20 % son FF500 (Fracción de flujo al proceso ABE, corriente (420)-(422)), RH601 (Recuperación de H<sub>2</sub>O en la columna D-601), RH603 (Recuperación de butanol en la columna D-603) y RBM700 (Relación de biomasa presente en (701)/glucosa presente en (421) previo al reactor AS). Por tanto, se determinó que el 39 % de las variables son significativas para la optimización multiobjetivo.



**Figura 3.** Matriz de correlación aplicando el método de hipercubo latino de las VAI con 1,000 casos.

### 3.3. Resultados de la optimización multiobjetivo.

Los tres casos establecidos fueron: caso A VAI con una correlación > 20 %, caso B con VAI con una correlación > 10 % y caso C con VAI con una > 5 %. Asimismo, se analizaron frentes de Pareto bidimensionales y tridimensionales. El primero compara el VPN con los demás indicadores (GWP, R<sub>SEI</sub> y MP). Mientras que las soluciones tridimensionales comparan los siguientes escenarios: VPN-

GWP-MP, VPN-R<sub>SEI</sub>-MP, VPN-GWP-R<sub>SEI</sub> y MP-R<sub>SEI</sub>-GWP.

En la Figura 4, se observan tres tendencias claras en relación con los indicadores de optimización. La primera se centra en los indicadores económicos y de eficiencia con VPN y MP respectivamente, siendo el Caso A<sub>2D(3)</sub> el que obtiene los mejores resultados en esta área. La segunda tendencia aborda los indicadores ecológicos y energéticos, como GWP y R<sub>SEI</sub>, con el caso A<sub>3D(3-4)</sub> reflejando un

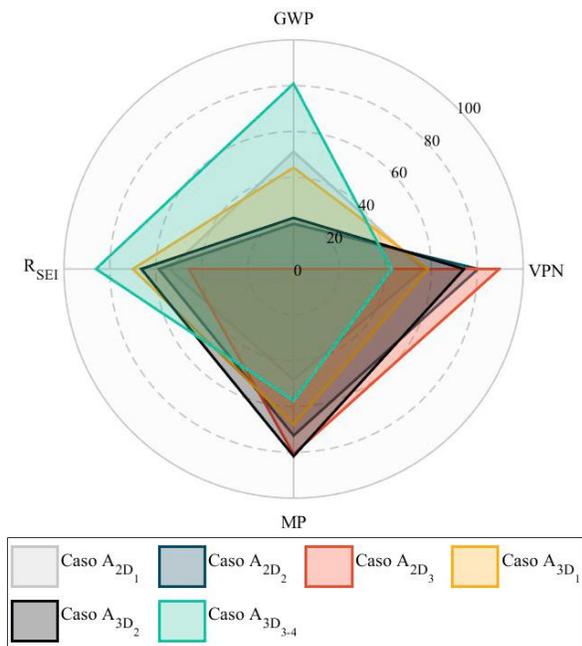


enfoque en sostenibilidad y eficiencia energética. La tercera tendencia busca un balance entre todas las variables analizadas, sin favorecer ninguna en particular, siendo el caso A<sub>3D(1)</sub> con equilibrio moderado en VPN, MP, GWP, y R<sub>SEI</sub>, con una solución balanceada que considera los aspectos económicos, ecológicos, energéticos y de eficiencia.

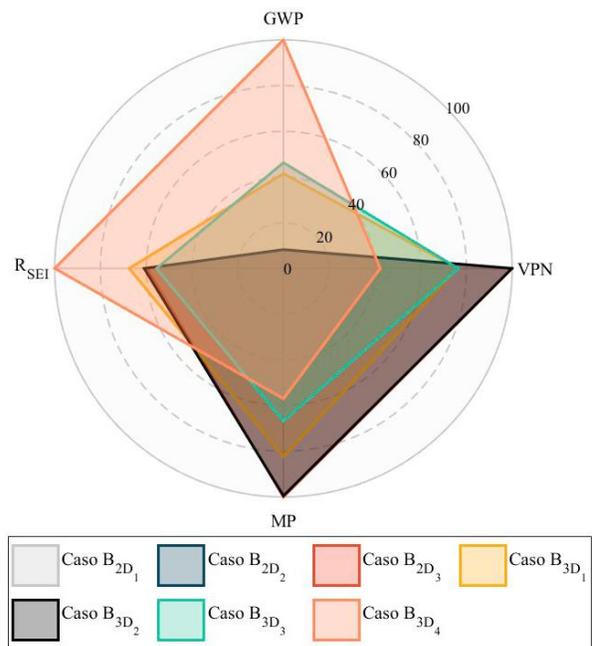
En la Figura 5, se identifican tres tendencias similares en relación con los indicadores de optimización. La primera tendencia se enfoca

en los indicadores económicos y de eficiencia, destacándose los Casos B<sub>2D(2)</sub> y B<sub>3D(2)</sub>, mostrando un enfoque que maximiza principalmente el rendimiento económico y la eficiencia del proceso. La segunda tendencia se concentra en los indicadores ecológicos y energéticos, siendo el Caso B<sub>3D(4)</sub>, priorizando la minimización de impactos ambientales y la eficiencia energética. Finalmente, la tercera tendencia exhibe un equilibrio general entre todas las variables, como se observa en el Caso B<sub>3D(1)</sub>.

1



**Figura 4.** Diagrama de las funciones objetivos normalizadas del caso A.



**Figura 5.** Diagrama de las funciones objetivos normalizadas del caso B.

2



Estos resultados revelaron que las mejores soluciones se alcanzaron en el caso B, lo que indica que la optimización de las variables de alto impacto (VAI) con una correlación superior al 10% (Caso A) favoreció rendimientos sobresalientes. En cambio, las VAI con una correlación mayor al 20% (Caso B) presentaron limitaciones en los indicadores. Por otro lado, las VAI con correlaciones superiores al 5% obtuvieron resultados bajos y requiere de un mayor número de generaciones e individuos en el proceso de optimización para conseguir soluciones efectivas. Esto sugiere que la gestión de variables con bajas correlaciones puede requerir un aumento significativo en los recursos computacionales para lograr resultados óptimos.

#### 4. Conclusiones

Este estudio llevó a cabo una estrategia integral fundamentada en la optimización 4E de GREENSCOPE para el diseño riguroso de un proceso de producción de ABE y AS a partir de biomasa lignocelulósica. Se construyeron redes neuronales para evaluar la viabilidad económica, lo que permitió reducir el tiempo de cálculo y mejorar la precisión en el análisis del VPN. La integración de modelos cinéticos junto con diversos

programas como Fortran, MATLAB y Aspen Plus facilitó un modelado más detallado y riguroso, implementándose con programación en paralelo para optimizar 4 funciones objetivo (VPN, GWP, R<sub>SEI</sub> y MP). La selección de las variables de alto impacto (VAI) mediante el método de hipercubo latino mejoró la identificación de factores clave. Los resultados de la optimización multiobjetivo metaheurística señalaron el caso B como la mejor solución obtenida. Estos hallazgos resaltan la relevancia de incorporar herramientas avanzadas en la optimización multiobjetivo de procesos a gran escala.

#### Referencias bibliográficas

- Liu, Y., Yuan, Y., Ramya, G., Mohan Singh, S., Thuy Lan Chi, N., Pugazhendhi, A., Xia, C., y Mathimani, T. (2022). A review on the promising fuel of the future – Biobutanol; the hindrances and future perspectives. *Fuel*, 327, 125166. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125166>
- Morales-Rodriguez, R., Ponce-Rocha, J. D., Gómez-Castro, F. I., Sánchez-Ramírez, E., Segovia-Hernández, J. G., Sánchez, A., y Rodríguez-Gomez, D. (2021). Acetone,



Butanol, Ethanol and, Xylitol Production Through a Biorefinery Platform: An Experimental & Simulation Approach. *Waste and Biomass Valorization*, 12(9), 4915–4930.

Ruiz-Mercado, G. J., Gonzalez, M. A., y Smith, R. L. (2014). Expanding GREENSCOPE beyond the gate: a green chemistry and life cycle perspective. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 16(4), 703–717.

Ruiz-Mercado, G. J., Smith, R. L., y Gonzalez, M. A. (2012). Sustainability Indicators for Chemical Processes: I. Taxonomy. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(5), 2309–2328.

Shelokar, P., Kulkarni, A., Jayaraman, V. K., y Siarry, P. (2014). Metaheuristics in Process Engineering: A Historical Perspective. En J. Valady y P. Siarry (Eds.). *Applications of Metaheuristics in Process Engineering* (pp. 1–38). De Springer International Publishing.

Shinto, H., Tashiro, Y., Yamashita, M., Kobayashi, G., Sekiguchi, T., Hanai, T.,

Kuriya, Y., Okamoto, M., y Sonomoto, K. (2007). Kinetic modeling and sensitivity analysis of acetone–butanol–ethanol production. *Journal of Biotechnology*, 131(1), 45–56.

Song, H., Jang, S. H., Park, J. M., y Lee, S. Y. (2008). Modeling of batch fermentation kinetics for succinic acid production by *Mannheimia succiniciproducens*. *Biochemical Engineering Journal*, 40(1), 107–115.

The MathWorks, Inc. (2023). Matlab (Programa computacional). <https://la.mathworks.com/>

Villareal de Aquino, M. de los A., Morales-Rodríguez, R., & Pérez-Cisneros, E. (2023). *Metodología Sistemática para la Optimización de Procesos empleando Análisis de Sensibilidad para la Identificación de Variables críticas* [Tesis de maestría, Universidad de Guanajuato].