Naturaleza y TECNOLOGÍA
Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

INTENSIFICACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS PARA LA PRODUCCIÓN Y PURIFICACIÓN DE SOLVENTES SUSTENTABLES

Josué Ailton Arguello-Villalon [a], Dayanara García-Conejo [a], Wendy Valeria Lemus-Molina [a], Rogelio Ochoa-Barragán [b], César Ramírez-Márquez [b], José María Ponce-Ortega [b], Heriberto Alcocer-García [a,b*]

[a] Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Ingeniería Química, Noria Alta S/N, 36050, Guanajuato, Guanajuato, México.

[b] Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Departamento de Ingeniería Química, Avenida Francisco J. Múgica, SN, Edificio V1, Ciudad Universitaria, 58060, Morelia, Michoacán, México.

h.alcocer@ugto.mx

Resumen

Este estudio presenta una evaluación de dos metodologías para la intensificación y optimización de las secciones de separación de carbonato de dimetilo (DMC) y lactato de etilo (EL), considerando criterios económicos, ambientales y computacionales. Para el DMC se aplicó un análisis secuencial de las variables de diseño y operación, comparando el esquema convencional con una configuración térmicamente acoplada. Para el EL se realizó una optimización multiobjetivo rigurosa y posteriormente se desarrollaron modelos sustitutos basados en redes neuronales, integrados con NSGA-II. En el proceso de DMC, el acoplamiento térmico permitió reducir la carga térmica en 32.35%, el impacto ambiental en 35.51% y el costo total anual en 24.25%. Para el EL, el diseño convencional presentó un mejor desempeño que la configuración acoplada. Además, los modelos sustitutos reprodujeron la tendencia obtenida mediante la optimización rigurosa y redujeron considerablemente el costo computacional de la búsqueda. Estos resultados muestran que cada metodología presenta ventajas y limitaciones, y que la intensificación debe evaluarse de acuerdo con las características particulares de cada proceso.

Palabras clave: Carbonato de dimetilo, lactato de etilo; intensificación de procesos; optimización multiobjetivo; modelos sustitutos.

Naturaleza y TECNOLOGÍA

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

PROCESS INTENSIFICATION AND OPTIMIZATION FOR THE PRODUCTION AND PURIFICATION OF SUSTAINABLE SOLVENTS

Abstract

This study presents an evaluation of two methodologies for the process intensification and optimization of the separation sections of dimethyl carbonate (DMC) and ethyl lactate (EL), considering economic, environmental, and computational criteria. For DMC, a sequential analysis of design and operating variables was applied to compare the conventional scheme with a thermally coupled configuration. For EL, rigorous multi-objective optimization was performed, followed by the development of surrogate models based on artificial neural networks integrated with NSGA-II. In the DMC process, thermal coupling reduced the total thermal duty by 32.35%, the environmental impact by 35.51%, and the total annual cost by 24.25%. For EL, the conventional design showed better economic, environmental, and energy performance than the thermally coupled configuration. In addition, the surrogate models reproduced the trend obtained through rigorous optimization and considerably reduced the computational cost of the search. These results show that each methodology presents specific advantages and limitations, and that process intensification must be evaluated according to the particular characteristics of each system.

Keywords: Dimethyl carbonate; ethyl lactate; process intensification; multi-objective optimization; surrogate models.

1. Introducción

Los solventes constituyen un componente fundamental en los procesos de la industria química. Debido a su uso extensivo, los solventes representan una fuente importante de consumo energético, emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV) y generación de residuos a lo largo de la cadena de producción (Clarke y col., 2018).

En este contexto, se ha promovido el desarrollo de solventes verdes. Estos compuestos se caracterizan por presentar menor toxicidad, menor volatilidad y, en muchos casos, un origen renovable. Entre estas alternativas destacan el lactato de etilo (EL) y el carbonato de dimetilo (DMC), dos solventes considerados de alto potencial debido a sus propiedades fisicoquímicas.

El lactato de etilo es un éster biodegradable derivado del ácido láctico ampliamente utilizado como alternativa a diversos solventes derivados del petróleo. Por otra parte, el carbonato de dimetilo se considera

un solvente ambientalmente benigno utilizado en procesos de síntesis orgánica, producción de polímeros y como sustituto de reactivos altamente tóxicos como el fosgeno y el sulfato de dimetilo (Tundo y Selva, 2002).

A pesar de las ventajas ambientales que presentan ambos compuestos, su sostenibilidad depende de la eficiencia del proceso mediante el cual son producidos (Clarke y col., 2018). Aunque las rutas de producción del lactato de etilo (EL) y del carbonato de dimetilo (DMC) son distintas, diversos estudios coinciden en que la etapa de purificación representa uno de los principales desafíos para ambos procesos. En el caso del EL, la recuperación y reciclaje del etanol requiere la separación de la mezcla azeotrópica etanol-agua mediante esquemas de destilación extractiva con glicerol. De forma similar, la producción de DMC demanda configuraciones de destilación extractiva con p-xileno para romper el azeótropo formado entre el DMC y el etanol. Estas estrategias de separación incrementan el número de equipos, la demanda energética y los costos asociados a la operación del proceso (Valvassore y Costa 2025; Liu y col., 2019; Zhu y col., 2020).

Debido a ello, en los últimos años la Intensificación de Procesos (IP) ha surgido como una estrategia para desarrollar configuraciones más compactas, energéticamente eficientes y sostenibles mediante una mayor integración de las operaciones de separación (Stankiewicz y Moulijn, 2000; Pistikopoulos y col., 2021). En sistemas de destilación, esta estrategia incluye configuraciones como columnas térmicamente acopladas, columnas de pared divisoria y el movimiento de secciones, que han demostrado reducir hasta un 40% el consumo energético y los costos asociados respecto a los esquemas convencionales (Segovia-Hernández y col., 2021).

En un trabajo previo se desarrollaron y evaluaron configuraciones intensificadas para el proceso de producción de lactato de etilo, demostrando el potencial de la integración térmica y de la reconfiguración estructural de columnas (Alcocer-García y col., 2025). Este estudio se basó en un análisis de sensibilidad para evaluar el efecto de variables como la relación de reflujo sobre el desempeño de las configuraciones, identificando reducciones importantes en la carga térmica. Sin embargo, este enfoque únicamente permite analizar el efecto de una o pocas variables a la vez, sin garantizar la identificación de las condiciones

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

óptimas de diseño. Esta limitación resulta crítica en procesos intensificados, donde la alta interdependencia entre las variables de diseño y la necesidad de conciliar criterios económicos y ambientales exigen un abordaje más integral que el que puede ofrecer un análisis convencional. Para superar esta limitación, la optimización multiobjetivo ha sido ampliamente utilizada para identificar condiciones de operación que permitan obtener los mejores resultados en términos económicos y ambientales en procesos intensificados. Para resolver este tipo de problemas se han propuesto diferentes estrategias de optimización, incluyendo algoritmos metaheurísticos híbridos como Evaluación Diferencial con Lista Tabú (DETL) (Sánchez-Ramírez y col., 2016). No obstante, la evaluación iterativa de un elevado número de soluciones candidatas mediante simulaciones rigurosas del proceso incrementa significativamente el costo computacional.

Con el propósito de superar esta limitación, los modelos sustitutos (surrogate models) se han consolidado como una alternativa eficiente en problemas de optimización de procesos, ya que permiten aproximar el comportamiento de modelos rigurosos mediante representaciones basadas en datos, reduciendo considerablemente el tiempo computacional requerido durante la búsqueda de soluciones óptimas (Padilla-Esquivel y col., 2026).

Entre los diferentes modelos sustitutos, las redes neuronales artificiales han sido ampliamente adoptadas debido a su capacidad para aproximar relaciones altamente no lineales entre las variables de proceso y las funciones objetivo. Esta capacidad las convierte en una alternativa adecuada para sustituir simulaciones rigurosas dentro de esquemas de optimización (Hilera y Martínez, 1995).

La integración de modelos sustitutos con algoritmos evolutivos representa una estrategia eficiente para abordar problemas de optimización multiobjetivo, ya que permite explorar un gran número de soluciones candidatas utilizando las predicciones del modelo sustituto en lugar de ejecutar simulaciones rigurosas en cada iteración (Sánchez y col., 2025).

Ahora bien, el análisis tecnoeconómico y ambiental de procesos intensificados requiere equilibrar la precisión con la que se representa el comportamiento del sistema y el esfuerzo computacional necesario para explorar sus condiciones de diseño y

operación. Aunque los modelos rigurosos permiten evaluar con detalle el desempeño del proceso, su ejecución repetida durante la optimización puede elevar considerablemente el tiempo de cálculo. Por ello, resulta relevante analizar estrategias que conserven una representación adecuada de los compromisos entre el costo total anual y el impacto ambiental, pero que permitan ampliar la búsqueda de soluciones con una demanda computacional razonable. Este equilibrio entre rigurosidad, capacidad de exploración y eficiencia computacional constituye un aspecto fundamental en la evaluación sostenible de procesos químicos complejos (McBride y Sundmacher, 2019; Padilla-Esquivel y col., 2026; Sánchez y col., 2025).

2. Metodología

El presente trabajo comprende dos casos de estudio correspondientes a las secciones de separación en los procesos de producción de DMC y EL. En ambos casos se tomó el diseño base como referencia y se evaluó una configuración intensificada mediante acoplamiento térmico, seleccionada entre las alternativas previamente analizadas por presentar el mejor desempeño energético. Las configuraciones consideradas se muestran en la Figura 1 y se simularon en Aspen Plus V8.8.

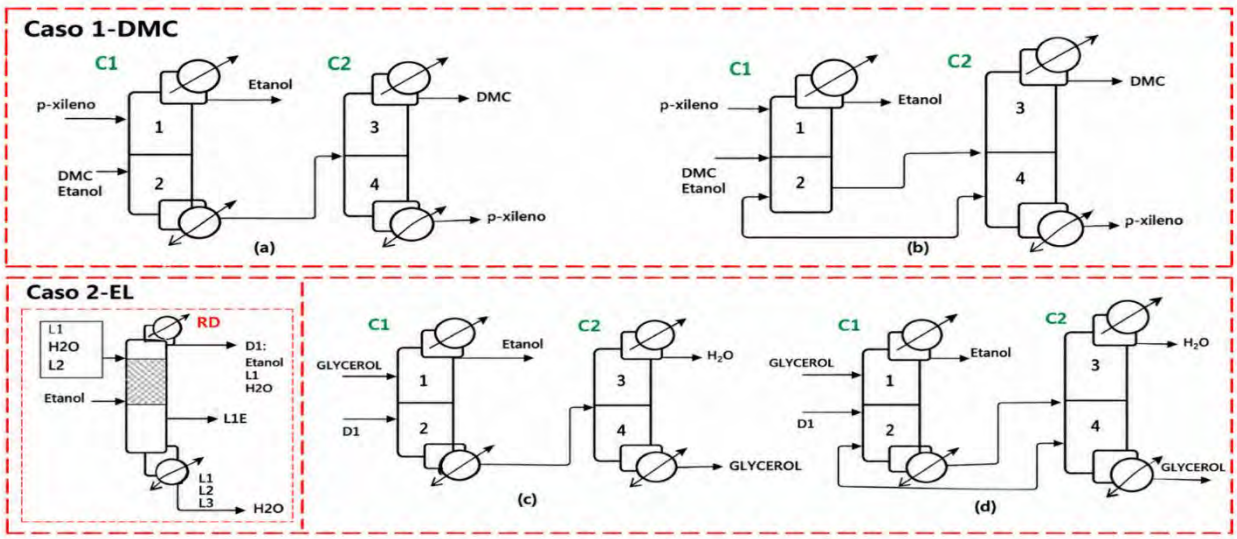


Figura 1. Configuraciones de separación evaluadas: (a) diseño convencional para DMC, (b) configuración térmicamente acoplada para DMC, (c) diseño convencional para EL y (d) configuración térmicamente acoplada para EL.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

2.1. Funciones objetivo

El desempeño de las configuraciones se evaluó mediante la minimización simultánea del costo total anual (TAC) y del eco-indicador 99 (Eco99), utilizados como criterios económicos y ambientales. La integración de criterios económicos y ambientales dentro de una misma estrategia de optimización permite identificar soluciones de compromiso y realizar una evaluación más integral de los procesos químicos (Padilla-Esquivel y col., 2026).

El TAC considera la inversión anualizada de los equipos y los costos de operación asociados principalmente con el consumo de servicios auxiliares. Su cálculo se realizó de acuerdo con Horsch y Skiborowski (2025), mediante la Ec. (1).

$$TAC = \frac{\sum_{i=1}^{n} C_{TM,i}}{n} + \sum_{j=1}^{n} C_{ut,j} \qquad (1)$$

donde TAC es el costo anual total, C_{TM} es el costo de capital de la planta, n es el número total de unidades individuales y C_{ut} es el costo de los servicios.

El impacto ambiental se determinó mediante Eco99, siguiendo la metodología de Goedkoop y Spriensma (2001) el cual se mide por ecopuntos que es equivalente a la contaminación promedio anual de un ciudadano europeo.

$$Eco99 = \sum_b \sum_d \sum_{k \in K} \delta_d \omega_d \beta_b \alpha_{b,k} \qquad (2)$$

donde β_b representa la cantidad de la sustancia b liberada por unidad de referencia, $\alpha_{b,k}$ es el daño causado por dicha sustancia en la categoría de impacto k, mientras que ω_d y δ_d corresponden a los factores de ponderación y normalización de la categoría de daño d.

Para asegurar una comparación bajo condiciones equivalentes, únicamente se consideraron factibles las simulaciones convergentes que cumplieron las especificaciones de pureza establecidas en cada proceso. En el caso del DMC, se exigieron purezas iguales o superiores al 99% para las corrientes de DMC, etanol y p-xileno. Para el EL, se establecieron purezas iguales o superiores al 98% para las corrientes de etanol y agua, y una pureza igual o superior al 99% para la corriente de glicerol.

2.2. Casos de estudio

Aunque ambos casos se evaluaron mediante TAC y Eco99, se utilizaron metodologías diferentes para definir sus condiciones de diseño y operación. En el DMC se aplicó un análisis de sensibilidad secuencial basado en simulaciones individuales, mientras que para

el EL se implementó una optimización rigurosa seguida de una estrategia asistida por modelos sustitutos y un algoritmo genético.

2.2.1. Caso de estudio I: carbonato de dimetilo

El diseño base del proceso de DMC se tomó de Yang y col. (2019), y está constituido por una columna de destilación extractiva (C1), donde se utilizó p-xileno para separar la mezcla DMC-etanol, seguida de una segunda columna (C2), en la que se separó el DMC del p-xileno, como se muestra en la Figura 1a. La no idealidad del sistema ternario se representó mediante el modelo termodinámico NRTL.

Las condiciones de diseño y operación se evaluaron mediante un análisis secuencial, modificando el número de etapas, las etapas de alimentación, la relación de reflujo, el flujo de p-xileno, las cargas térmicas del rehervidor y del condensador. En cada simulación se verificaron la convergencia y las especificaciones de pureza indicadas en la Sección 2.1.

Posteriormente, se implementó el acoplamiento térmico mediante una corriente lateral de vapor proveniente de la columna C2 hacia la columna C1, para suplir la carga térmica del rehervidor, como se muestra en la Figura 1b. Esta configuración se analizó con el mismo procedimiento, considerando adicionalmente el flujo de interconexión. Finalmente, los diseños factibles se compararon mediante la carga térmica total, el TAC, Eco99 y los costos de los principales equipos. La secuencia metodológica se resume en la Figura 2.

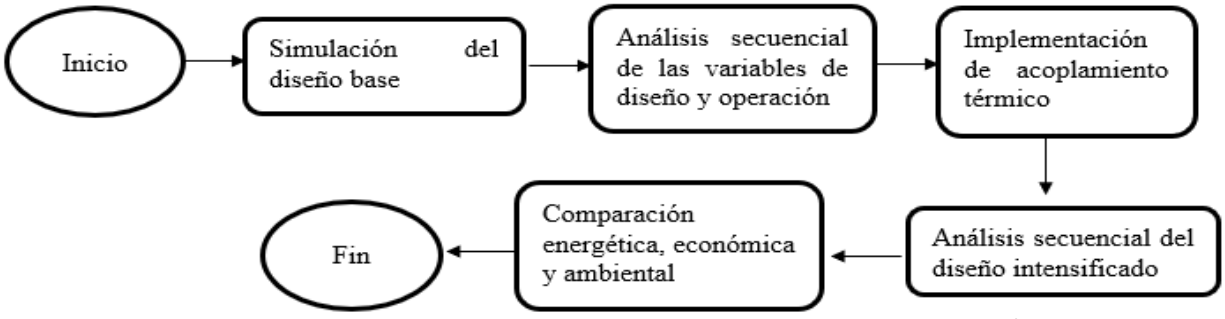


Figura 2. Secuencia metodológica empleada para la evaluación del diseño base y la configuración térmicamente acoplada en la purificación de DMC.

2.2.2. Caso de estudio II: lactato de etilo

El esquema base del proceso de lactato de etilo se tomó de Valvassore y Costa (2025). El análisis se delimitó a las columnas C1 y C2 de la sección de separación, debido a que concentran aproximadamente el 71% de la carga térmica total del proceso. En C1 se emplea glicerol como agente extractivo para recuperar etanol, mientras que en C2 se separan el agua y el glicerol. Se evaluaron el diseño base mostrado en la Figura 1c y la configuración térmicamente acoplada de la Figura 1d. Las variables de diseño y operación evaluadas incluyeron el número de platos, las etapas de alimentación, el diámetro de las columnas, las relaciones de reflujo y los flujos de las columnas; para la configuración acoplada se incluyó el flujo de vapor de interconexión C2-C1. Para representar el comportamiento termodinámico se utilizaron los modelos NRTL para la fase líquida y Hayden-O'Connell para la fase de vapor; los parámetros faltantes se estimaron mediante UNIFAC, siguiendo el procedimiento de Dai y col. (2019).

Ambas configuraciones se analizaron mediante una estrategia constituida por una optimización rigurosa y una optimización asistida por modelos sustitutos. La secuencia completa, desde la simulación del proceso hasta la validación de las soluciones obtenidas, se presenta en la Figura 3.

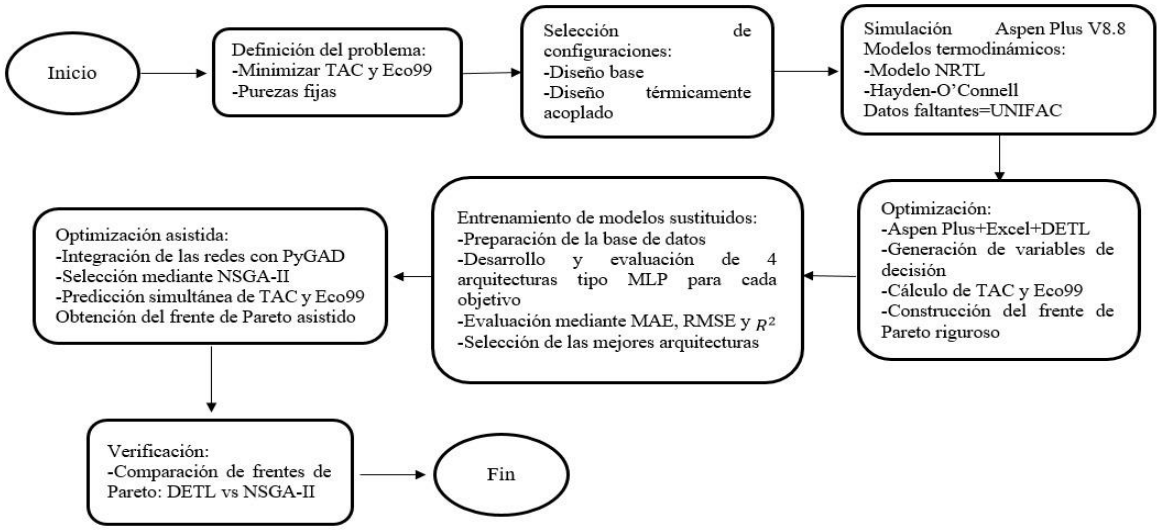


Figura 3. Secuencia metodológica empleada para la evaluación del diseño convencional y la configuración térmicamente acoplada en EL.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

2.2.2.1. Optimización rigurosa y generación de datos

La optimización rigurosa se realizó mediante la integración de Aspen Plus V8.8, Microsoft Excel y el algoritmo Evaluación Diferencial con Lista Tabú (DETL). Para cada variable de decisión, se establecieron sus límites inferiores y superiores. El algoritmo se configuró con una población de 120 individuos y 100 generaciones, lo que dio lugar a 12,000 evaluaciones de soluciones candidatas. Para cada solución candidata, Aspen Plus ejecutó la simulación rigurosa, mientras que Excel recuperó la información necesaria para calcular el TAC, Eco99 y las penalizaciones asociadas con las restricciones de pureza. Este esquema de comunicación entre el algoritmo, Excel y Aspen Plus se basó en la plataforma híbrida presentada por Sánchez-Ramírez y col. (2016).

Las simulaciones convergentes cuya suma de penalizaciones fue igual a cero se consideraron factibles y se almacenaron en una base de datos. Posteriormente, los resultados se utilizaron para desarrollar los modelos sustitutos. De manera independiente, los resultados se representaron en el espacio TAC-Eco99 y se analizaron mediante el criterio de dominancia de Pareto. Las soluciones no dominadas conformaron el frente de Pareto riguroso correspondiente a cada configuración.

2.2.2.2. Desarrollo de los modelos sustitutos

Las soluciones factibles obtenidas mediante optimización rigurosa se utilizaron para desarrollar modelos sustitutos capaces de relacionar variables de diseño y operación con el TAC y Eco99. Para cada configuración del proceso, la base de datos se sometió a una etapa de preparación que incluyó la corrección de encabezados, la eliminación de columnas vacías, la separación de las variables de entrada y de salida, y la eliminación de observaciones atípicas mediante el criterio del rango intercuartílico que pudieran afectar el ajuste de las redes neuronales.

Los datos depurados se estandarizaron y se dividieron aleatoriamente en conjuntos de entrenamiento y prueba, correspondientes al 80% y 20% de las observaciones, respectivamente. Esta distribución permite utilizar la mayor parte de la información disponible para el ajuste del modelo, manteniendo un conjunto independiente para evaluar su capacidad de generalización, y constituye una estrategia ampliamente

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

utilizada para la separación de datos de entrenamiento y prueba (Joseph, 2022; Tahir y col., 2025). Durante el ajuste de las redes neuronales, se reservó el 20 % del conjunto de entrenamiento para validación, por lo que la distribución efectiva de los datos fue de 64 % para entrenamiento, 16 % para validación y 20 % para prueba, distribución que también ha sido empleada en el desarrollo de modelos neuronales a partir de simulaciones rigurosas (Kwon y col., 2021). Se evaluaron cuatro arquitecturas candidatas de redes neuronales tipo perceptrón multicapa, cuyas características se presentan en la Tabla 1. Las capas ocultas emplearon la función de activación ReLU, mientras que la capa de salida utilizó una activación lineal, adecuada para la estimación de variables continuas TAC y Eco99. El entrenamiento se realizó mediante el optimizador Adam y la función de pérdida Huber. Cada arquitectura se entrenó de manera independiente para cada función objetivo, obteniendo un modelo para TAC y otro para Eco99.

Tabla 1. Arquitecturas candidatas y parámetros de entrenamiento evaluados para los modelos sustitutos de TAC y Eco99.

Modelo	Capas ocultas	Dropout	L2	Tasa de aprendizaje	Tamaño de lote (batch)
1	[64,32]	(0.15,0.10)	1e-4	1e-3	32
2	[128,64]	(0.10,0.10)	1e-4	1e-3	32
3	[96,48]	(0.10,0.10)	0	1e-3	32
4	[64,64]	(0.15,0.15)	1e-3	1e-3	32

Las arquitecturas candidatas se evaluaron mediante el error absoluto medio (MAE), la raíz del error cuadrático medio (RMSE) y el coeficiente de determinación (R^2), calculados sobre datos no utilizados durante el entrenamiento. Para cada función objetivo se seleccionó la red neuronal con el mayor valor de R^2, verificando a su vez que presentara valores reducidos de MAE y RMSE. La elección de la arquitectura a partir de su capacidad predictiva es importante porque la precisión del modelo sustituto depende de la calidad de los datos y de la representación

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

adecuada de las relaciones no lineales del proceso (McBride y Sundmacher, 2019).

2.2.2.3. Optimización multiobjetivo mediante NSGA-II

Las redes neuronales seleccionadas para predecir TAC y Eco99 se integraron a un algoritmo genético implementado mediante la biblioteca PyGAD. Cada individuo representó una combinación de las variables de diseño y operación del proceso, mientras que los modelos sustitutos estimaron simultáneamente los valores de ambas funciones objetivo.

La optimización multiobjetivo se realizó mediante NSGA-II en PyGAD. Se empleó una población de 10 individuos durante 10 generaciones, lo que representó 100 evaluaciones mediante los modelos sustitutos. Esta configuración se seleccionó buscando un compromiso entre la capacidad de exploración del espacio de soluciones y la eficiencia computacional del procedimiento de optimización. NSGA-II emplea mecanismos de selección elitista, ordenamiento no dominado y distancia de crowding orientados a mantener tanto la convergencia como la diversidad de las soluciones durante la búsqueda multiobjetivo (Deb y col., 2002). Si bien un incremento en el tamaño de la población o en el número de generaciones puede ampliar la exploración del espacio de búsqueda, también incrementa el número de evaluaciones requeridas, aspecto especialmente relevante en estrategias de optimización asistidas por modelos sustitutos (Chugh y col., 2018). Los modelos sustitutos estimaron el TAC y Eco99 de cada solución. Finalmente, la población obtenida se representó en el espacio TAC–Eco99 para analizar los compromisos entre ambos objetivos.

La región de búsqueda se restringió a los valores mínimos y máximos de las variables presentes en la base de datos. Esta delimitación permitió reducir la generación de soluciones fuera de la región representada por los datos de entrenamiento.

Para cada configuración, la solución compromiso se seleccionó como el punto del frente con menor distancia euclidiana normalizada respecto al punto ideal, definido por los valores mínimos de las funciones objetivo. Posteriormente, las soluciones seleccionadas se evaluaron nuevamente en Aspen Plus para verificar la convergencia y el cumplimiento de las restricciones de pureza.

Los resultados obtenidos mediante la estrategia asistida se compararon con los

correspondientes a la optimización rigurosa, considerando los valores de TAC y Eco99, la distribución de los conjuntos de soluciones obtenidos, las simulaciones de validación y el esfuerzo computacional requerido. Este enfoque, basado en la integración de modelos rigurosos, modelos sustitutos y algoritmos evolutivos, ha sido utilizado para explorar eficientemente condiciones de operación y compromisos multiobjetivo en procesos químicos complejos (Tai y col., 2025).

2.3. Casos de estudio

Finalmente, ambas metodologías se compararon considerando el grado de automatización, la intervención del usuario, la forma de exploración de las variables y el esfuerzo computacional. A partir de estos criterios se discutieron sus principales ventajas y limitaciones.

3. Resultados

Los resultados se presentan de acuerdo con los dos casos de estudio y con la estrategia metodológica empleada en cada uno. Para el DMC se analiza el efecto del acoplamiento térmico mediante la comparación energética, económica y ambiental con el diseño base. Posteriormente, para EL se evalúan los frentes de Pareto obtenidos mediante la optimización rigurosa y la estrategia asistida por modelos sustituidos, así como la precisión y el esfuerzo computacional de ambos enfoques y las ventajas y desventajas que presentan.

3.1. Caso de estudio I: carbonato de dimetilo

Las condiciones seleccionadas para el diseño base y la configuración térmicamente acoplada cumplieron con las especificaciones de pureza establecidas para las corrientes de DMC, etanol y p-xileno. Por tanto, la comparación se realizó bajo condiciones equivalentes de separación, de manera que las diferencias observadas se atribuyeron a las modificaciones de diseño y operación.

Como se muestra en la Figura 4, el diseño base presentó una carga térmica total de 7,098.12 kW, mientras que la configuración térmicamente acoplada requirió 4,801.60 kW, lo que representa una reducción de 32.35%. Esta disminución se debe al aprovechamiento de la corriente de vapor procedente de C2 para suministrar la energía requerida en la sección inferior de C1, reduciendo la demanda externa de servicios auxiliares.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

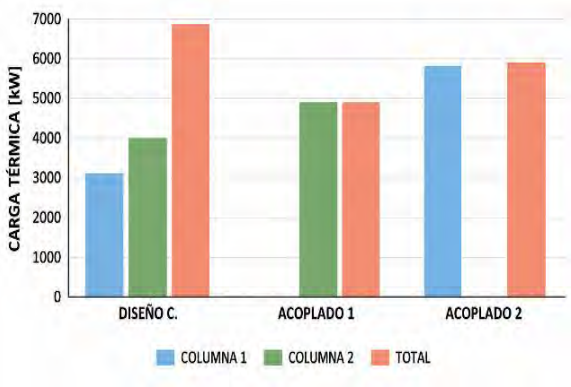


Figura 4. Comparación de la carga térmica de las columnas y la carga total para el diseño convencional y acoplado del proceso DMC.

El resultado confirma que la integración térmica entre columnas puede disminuir el consumo energético sin afectar las especificaciones de separación (Triantafyllou y Smith, 1992; Sun y col., 2020).

La disminución de la demanda energética estuvo acompañada por una reducción del impacto ambiental. El valor de Eco99 disminuyó de 1,542,422.08 ecopuntos/año para el diseño base a 994,723.65 ecopuntos/año para la configuración acoplada, equivalente a una reducción de 35.51 %, como se muestra en la Figura 5. La tendencia similar entre la carga térmica y Eco99 indica que una parte importante del impacto ambiental del proceso está asociada con la generación de los servicios térmicos requeridos por las columnas.

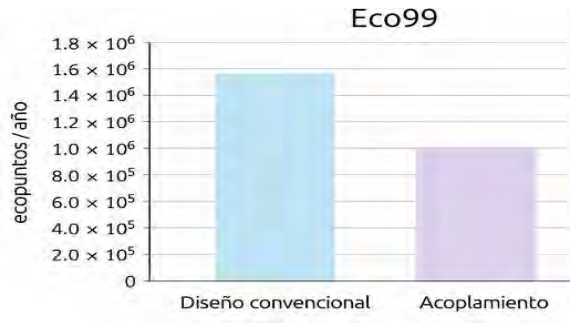


Figura 5. Comparación del impacto ambiental (Eco99), para el diseño convencional y acoplado del proceso DMC.

En términos económicos, el TAC se redujo de 1,169,476.80 a 885,863.78 $/año, correspondiente a un ahorro de 24.25 %. Aunque el número total de etapas aumentó ligeramente de 91 en el diseño base a 94 en la configuración acoplada, la reducción en el consumo de servicios compensó el incremento asociado con el tamaño de los equipos.

La relación entre el TAC y el número total de etapas se muestra en la Figura 6. En ella se observa que la configuración térmicamente acoplada presenta un menor TAC que el diseño convencional, aun cuando requiere un número ligeramente mayor de etapas. Este resultado confirma que el número de etapas no es por sí solo el factor dominante en el comportamiento económico del sistema.

En conjunto, la configuración térmicamente acoplada presentó un mejor desempeño que el diseño base en los tres indicadores evaluados, con reducciones de 32.35 % en la carga térmica, 35.51 % en Eco99 y 24.25 % en TAC.

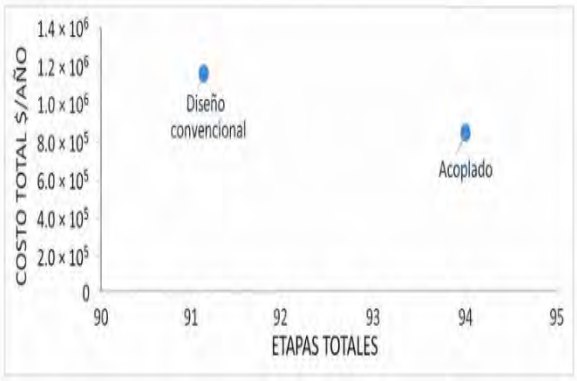


Figura 6. Relación entre el costo total anual y el número total de etapas para las configuraciones evaluadas del proceso.

Estos resultados muestran que el acoplamiento térmico permite mejorar simultáneamente el desempeño energético, ambiental y económico del proceso de separación de DMC, manteniendo las especificaciones de pureza establecidas.

3.2. Caso de estudio II: lactato de etilo

Para el caso del EL, los resultados se presentan siguiendo la secuencia metodológica empleada.

3.2.1. Optimización rigurosa de las configuraciones

La optimización rigurosa permitió obtener soluciones factibles para el diseño convencional y térmicamente acoplado. Las soluciones no dominadas se representaron en el espacio TAC-Eco99, como se muestra en la Figura 7.

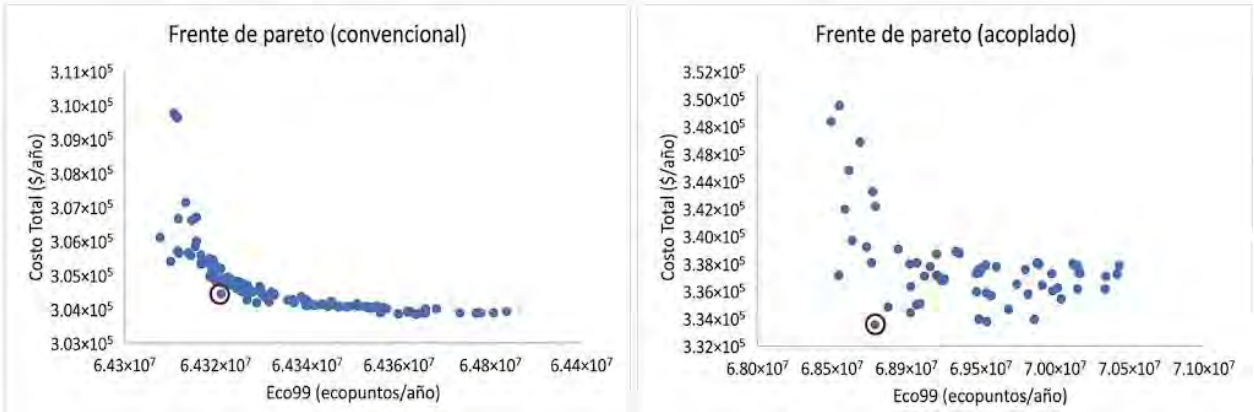


Figura 7. Frentes de Pareto obtenidos mediante optimización rigurosa con DETL para las configuraciones evaluadas del proceso de EL.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

De cada frente se seleccionó una solución compromiso. Para el diseño convencional se obtuvo un TAC de 304,433.11 $/año y un Eco99 de 6.432 x 10^7 ecopuntos/año, con una carga térmica total de 226.31 kW. Por otra parte, la configuración térmicamente acoplada presentó un TAC de 333,369.9 $/año, un Eco99 de 6.879 x 10^7 ecopuntos/año y una carga térmica total de 252.172 kW. Para las soluciones compromiso seleccionadas, el diseño acoplado presentó un 9.5 % más en el valor del TAC, un 7 % más en Eco99 y un 11.4 % más en la carga térmica total respecto al diseño convencional, en la Tabla 2 se muestran las soluciones compromiso de DETL.

Tabla 2. Variables de diseño y desempeño de las soluciones de compromiso obtenidas mediante DETL para el proceso de EL**.**

Variable	Convencional	Térmicamente acoplado
Platos C1	28	31
Alimentación 1 C1	5	15
Alimentación 2 C1	17	22
Reflujo (kg/kg) C1	1.294	-
Flujo de vapor (kg/h) C2-C1	-	306.117
Flujo-D (kmol/h) C1	4.756	4.758
Diámetro (m) C1	0.517	0.638
Platos C2	18	20
Alimentación C2	7	11
Reflujo (kcal/h) C2	0.250	0.258
Flujo-D (kmol/h) C2	6.021	5.940
Diámetro (m) C2	0.374	0.817
TAC ($/año)	3.044×10^5	3.333×10^5
Eco99 (ecopuntos/año)	6.432×10^7	6.879×10^7

3.2.2. Desempeño de los modelos sustitutos

Tras evaluar las cuatro arquitecturas candidatas, se seleccionó el mejor modelo para cada función objetivo y para cada configuración del proceso. La selección se realizó con base en el mayor coeficiente de determinación (R^2), verificando adicionalmente valores reducidos de MAE y RMSE. La Tabla 3 resume las mejores arquitecturas seleccionadas para predecir TAC y Eco99 en la configuración convencional y térmicamente acoplada.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Tabla 3. Desempeño predictivo de los modelos sustitutos seleccionados para TAC y Eco99.

Configuración	Función objetivo	Modelo	Capas ocultas	MAE	RMSE	R^2
Convencional	TAC ($/año)	2	[128,64]	-71.060	112.559	0.999
Convencional	Eco99 (ecopuntos/año)	4	[64,64]	3957.275	9899.32	0.989
Térmicamente acoplado	TAC ($/año)	3	[96,48]	1184.506	2987.443	0.986
Térmicamente acoplado	Eco99 (ecopuntos/año)	2	[128,64]	5927.180	12862.14	0.981

En todos los casos se obtuvieron valores de R^2 superiores a 0.98, lo que indica una adecuada capacidad predictiva dentro de la región representada por los datos de entrenamiento. Los resultados también muestran que la arquitectura de mejor desempeño dependió tanto de la configuración del proceso como de la función objetivo evaluada. Por esta razón, se conservaron modelos independientes para estimar TAC y Eco99 en cada configuración del proceso, considerando las diferencias observadas en su desempeño predictivo.

3.2.3. Desempeño de los modelos sustitutos

Los modelos seleccionados para TAC y Eco99 se integraron con PyGAD y NSGA-II para obtener los frentes de Pareto asistidos de ambas configuraciones. En la Figura 8(a), correspondiente al diseño convencional, la solución de compromiso presentó un TAC calculado de 304,544.4062 $/año y un Eco99 de 64,351,192 ecopuntos/año. Para la configuración térmicamente acoplada, mostrada en la Figura 8(b), se obtuvo un TAC de 344,117.84 $/año y un Eco99 de 68,353,936 ecopuntos/año.

La solución acoplada presentó valores 12.99 % mayores de TAC y 6.22 % mayores de Eco99 respecto a la convencional. Por tanto, el diseño convencional mostró un mejor desempeño conjunto, tendencia consistente con la optimización rigurosa. Los frentes obtenidos representan alternativas no dominadas con diferentes compromisos entre los objetivos, identificadas mediante el ordenamiento por dominancia y los mecanismos de preservación de diversidad de NSGA-II (Deb y col., 2002).

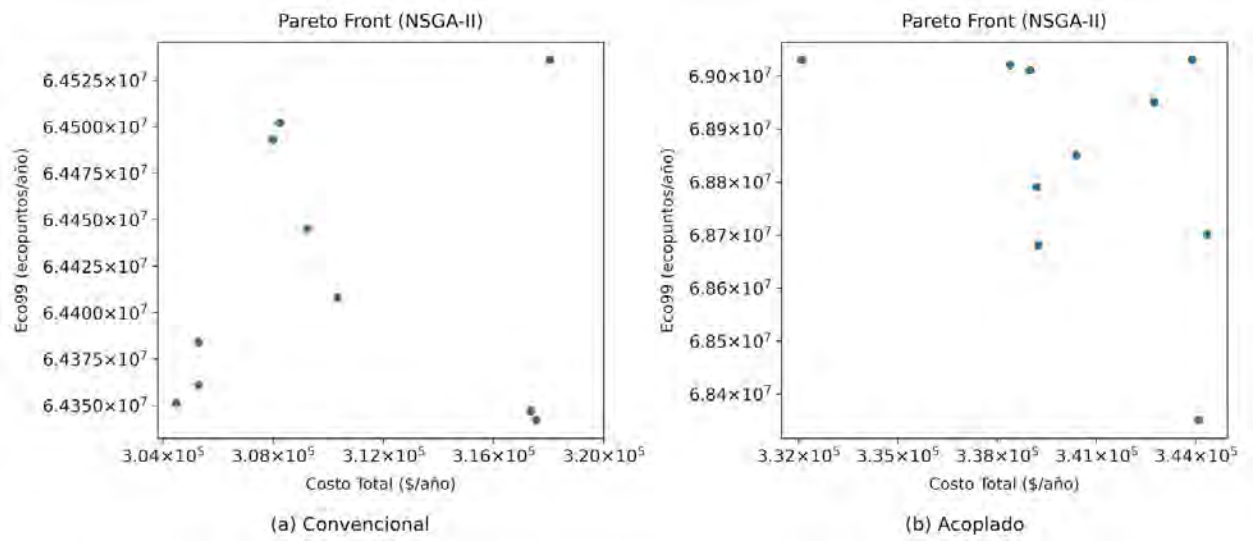


Figura 8. *Conjuntos de soluciones obtenidos mediante la estrategia asistida con modelos sustitutos y NSGA-II para el proceso de EL: (a) diseño convencional y (b) configuración térmicamente acoplada.*

Las variables de diseño y los valores calculados de TAC y Eco99 correspondientes a las soluciones de compromiso se presentan en la Tabla 4. Ambas soluciones se validaron en Aspen Plus, confirmando la convergencia del proceso y el cumplimiento de las especificaciones de pureza. A partir de esta validación se obtuvieron las cargas térmicas de C1 y C2, así como la carga térmica total, las cuales se utilizaron para complementar la comparación energética entre las configuraciones.

Tabla 4. Variables de diseño y desempeño de las soluciones de compromiso obtenidas mediante la estrategia asistida con NSGA-II para el proceso de EL.

Variable	Convencional	Térmicamente acoplado
Platos C1	27	32
Alimentación 1 C1	8	10
Alimentación 2 C1	20	23
Reflujo (kg/kg) C1	1.2945	-
Flujo de vapor (kg/h) C2-C1	-	330.108
Flujo-D (kmol/h) C1	4.752	4.7578
Diámetro (m) C1	0.5574	1.1871
Platos C2	17	24
Alimentación C2	7	16
Reflujo (kcal/h) C2	0.2596	0.2746
Flujo-D (kmol/h) C2	6.02	6.0478

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Diámetro (m) C2	0.3108	1.2949
TAC calculado ($/año)	3.045×10^5	3.441×10^5
Eco99 calculado (ecopuntos/año)	6.435×10^7	6.835×10^7
Carga térmica de C1 (kW)	91.2961	0
Carga térmica de C2 (kW)	135.1850	238.176
Carga térmica total (kW)	226.481	238.176

Los frentes obtenidos mediante DETL y mediante la estrategia asistida por modelos sustitutos presentaron la misma tendencia general.

Para el diseño convencional, la solución asistida presentó un TAC 0.036 % mayor, un Eco99 0.0465 % mayor y una carga térmica total 0.08% mayor que la solución seleccionada mediante DETL. En la configuración térmicamente acoplada, el TAC aumentó 3.22 %, mientras que Eco99 y la carga térmica total disminuyeron 0.64 % y 5.55 %, respectivamente. Estas diferencias indican que los modelos sustitutos reprodujeron de manera adecuada la región de compromiso identificada por el modelo riguroso, aunque las soluciones seleccionadas no coincidieron exactamente. Esta variación es esperable, debido a que NSGA-II realizó la búsqueda sobre aproximaciones de las funciones objetivo y no directamente sobre las simulaciones de Aspen Plus.

La principal diferencia entre las estrategias se encuentra en el esfuerzo computacional requerido. La optimización rigurosa mediante DETL necesitó 12,000 evaluaciones por configuración, en las que cada solución candidata fue simulada directamente en Aspen Plus para calcular TAC, Eco99 y verificar las restricciones de pureza. En contraste, una vez entrenados los modelos sustitutos, NSGA-II realizó la búsqueda utilizando las predicciones de las redes neuronales y reservó las simulaciones rigurosas para la validación final. Por tanto, la estrategia asistida redujo el esfuerzo computacional de la búsqueda posterior, aunque su confiabilidad permaneció condicionada por la calidad de los datos y por la región utilizada durante el entrenamiento. Esta interpretación coincide con McBride y Sundmacher (2019), quienes señalan que la complejidad de los modelos rigurosos puede producir un esfuerzo computacional considerable, y con Sánchez y col. (2025), quienes emplearon modelos sustitutos para

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

realizar una optimización económica y ambiental computacionalmente eficiente.

3.3. Comparación general de las metodologías

El análisis secuencial aplicado al DMC permitió evaluar de forma directa el efecto de las variables de diseño y operación, facilitando la interpretación de los cambios realizados. Sin embargo, al ejecutarse manualmente, requirió una elevada intervención del usuario y un tiempo prolongado, además de limitar la evaluación simultánea de las interacciones entre variables.

Para el EL, la optimización rigurosa mediante DETL automatizó la exploración de las variables, aunque las 12,000 evaluaciones requirieron aproximadamente 10 h. Posteriormente, el uso de los modelos sustitutos con NSGA-II redujo el tiempo de búsqueda a cerca de 5–6 min, equivalente a una disminución aproximada de 100 a 120 veces. No obstante, esta ventaja depende de la información generada previamente mediante las simulaciones rigurosas, por lo que el enfoque asistido complementa, pero no sustituye, la validación en Aspen Plus.

4. Conclusiones

La evaluación de dos metodologías permitió analizar diferentes formas de abordar la intensificación y optimización de procesos de separación, considerando tanto la calidad de las soluciones como el esfuerzo requerido para obtenerlas. El análisis secuencial aplicado al DMC facilitó la interpretación directa del efecto de las variables de diseño y operación; sin embargo, requirió una elevada intervención del usuario y limitó la exploración simultánea de sus interacciones. Por su parte, la estrategia aplicada al EL permitió automatizar la búsqueda multiobjetivo y ampliar la exploración del espacio de diseño. La incorporación de modelos sustitutos redujo considerablemente el costo computacional, aunque su aplicación depende de la información generada previamente mediante simulaciones rigurosas y de la validación final en Aspen Plus.

Para la purificación de DMC, la configuración térmicamente acoplada mostró un mejor desempeño que el diseño convencional, con reducciones de 32.35% en la carga térmica, 35.51% en Eco99 y 24.25% en el costo total anual. Estas mejoras se atribuyen al aprovechamiento interno de la energía entre las columnas, que disminuyó la

demanda de servicios térmicos sin afectar las especificaciones de pureza.

En el caso del EL, tanto la optimización rigurosa como la estrategia asistida identificaron al diseño convencional como la alternativa con mejor desempeño económico, ambiental y energético. Este resultado demuestra que una configuración intensificada no es necesariamente superior y que sus beneficios deben determinarse mediante una evaluación integral de las variables del proceso. En conjunto, el estudio confirma que la selección de la metodología y de la configuración debe realizarse de acuerdo con las características de cada sistema, equilibrando capacidad de exploración, costo computacional y confiabilidad de los resultados.

Referencias bibliográficas

Alcocer-García, H., Arguello-Villalon, J. A., García Conejo, D., y Ponce-Ortega, J. M. (2025). Análisis de esquemas intensificados para la producción y purificación de lactato de etilo. Naturaleza y Tecnología, 12(5), 159-171.

Chugh, T., Jin, Y., Miettinen, K., Hakanen, J., y Sindhya, K. (2018). A surrogate-assisted reference vector guided evolutionary algorithm for computationally expensive many-objective optimization. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 22(1), 129–142. https://doi.org/10.1109/TEVC.2016.2622301

Clarke, C. J., Tu, W.-C., Levers, O., Bröhl, A., y Hallett, J. P. (2018). Green and sustainable solvents in chemical processes. Chemical Reviews, 118(2), 747–800. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b0057

Dai, S.-B., Lee, H.-Y., y Chen, C.-L. (2019). Design and economic evaluation for the production of ethyl lactate via reactive distillation combined with various separation configurations. Industrial & Engineering Chemistry Research, 58(15), 6121–6132. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b03343

Deb, K., Pratap, A., Agarwal, S., y 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

Goedkoop, M., y Spriensma, R. (2001). The eco-indicator 99: A damage-oriented method for life cycle impact assessment: Methodology report and manual for designers. Pre Consultants.

Hilera, J. R., y Martínez, V. J. (1995). Redes neuronales artificiales: Fundamentos, modelos y aplicaciones. RA-MA Editorial.

Horsch, A. S., y Skiborowski, M. (2025). Thermally coupled distillation columns without vapor transfer: Current state and further needs. Separation and Purification Technology, 354, 128762. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.128762

Joseph, V. R. (2022). Optimal ratio for data splitting. Statistical Analysis and Data Mining: The ASA Data Science Journal, 15(4), 531–538. https://doi.org/10.1002/sam.11583

Kwon, S., Park, G., Jang, Y., Cho, J., Chu, M.-G., y Min, B. (2021). Determination of oil well placement using convolutional neural network coupled with robust optimization under geological uncertainty. Journal of Petroleum Science and Engineering, 201, 108118. https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.108118

Liu, K., Wang, Z., Zhang, Y., Xu, D., Gao, J., Ma, Z., y Wang, Y. (2019). Vapour-liquid equilibrium measurements and extractive distillation process design for separation of azeotropic mixture (dimethyl carbonate + ethanol). The Journal of Chemical Thermodynamics, 133, 10–18. https://doi.org/10.1016/j.jct.2019.01.027

McBride, K., y Sundmacher, K. (2019). Overview of surrogate modeling in chemical process engineering. Chemie Ingenieur Technik, 91(3), 228–239. https://doi.org/10.1002/cite.201800091

Padilla-Esquivel, C. A., Báez-Barrón, G., Gil-Cisneros, C. D., Zavala-Vega, D. K., García-García, E., Villazón-León, V., Alcocer-García, H., Nápoles-Rivera, F., Ramírez-Márquez, C., y Ponce-Ortega, J. M. (2026). Optimization in chemical engineering: A systematic review of its evolution, state of the art, and emerging trends. Processes, 14(8), 1247. https://doi.org/10.3390/pr14081247

Pistikopoulos, E. N., Tian, Y., y Bindlish, R. (2021). Operability and control in process intensification and modular design: Challenges and opportunities. AIChE Journal, 67(5). https://doi.org/10.1002/aic.17204

Sánchez, L. F., Vallerio, M., y Manenti, F. (2025). Computationally-efficient environmental and economic multi-objective optimization of a methanol production

process via surrogate modeling. Engineering Reports, 7(11). https://doi.org/10.1002/eng2.70422

Sanchez-Ramírez, E., Quiroz-Ramírez, J. J., Hernandez, S., y Segovia-Hernández, J. G. (2016). Economic, environmental and dynamic optimization applied to hybrid processes for the purification of biobutanol (pp. 367–372). https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63428-3.50066-7

Segovia-Hernández, J. G., Hernández, S., Sánchez-Ramírez, E., y Mendoza-Pedroza, J. (2021). A short review of dividing wall distillation column as an application of process intensification: Geographical development and the pioneering contribution of Prof. Arturo Jimenez in Latin America. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification, 160, 108275. https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108275

Stankiewicz, A. I., y Moulijn, J. A. (2000). Process intensification: Transforming chemical engineering. Chemical Engineering Progress, 96(1), 22–34.

Sun, S., Yang, A., y Shen, W. (2020). Research advances in thermally coupled intensification technology for special distillation. CIESC Journal, 71, 4575–4589.

Tahir, N. M., Zhang, J., y Armstrong, M. (2025). Robust nonlinear soft sensor for online estimation of product compositions in heat-integrated distillation column. ChemEngineering, 9(4), 87. https://doi.org/10.3390/chemengineering9040087

Tai, X. Y., Fisher, O., Xing, L., y Xuan, J. (2025). Integration of sustainability assessment into early-stage carbon capture process design with an explainable AI framework. Digital Chemical Engineering, 17, 100265. https://doi.org/10.1016/j.dche.2025.100265

Triantafyllou, C., y Smith, R. (1992). The design and optimization of fully thermally coupled distillation columns. Transactions of the Institution of Chemical Engineers, 70(Part A), 118–132.

Tundo, P., y Selva, M. (2002). The chemistry of dimethyl carbonate. Accounts of Chemical Research, 35(9), 706–716. https://doi.org/10.1021/ar010076f

Valvassore, M. S., y Costa, C. B. B. (2025). Analysis of novel configurations of an intensified process for ethyl lactate production. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification, 208,

110146. https://doi.org/10.1016/j.cep.2024.110146

Yang, A., Sun, S., Shi, T., Xu, D., Ren, J., y Shen, W. (2019). Energy-efficient extractive pressure-swing distillation for separating binary minimum azeotropic mixture dimethyl carbonate and ethanol. Separation and Purification Technology, 229, 115817. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.115817

Zhu, Z., Yu, X., Ma, Y., Yang, J., Wang, Y., Cui, P., y Li, X. (2020). Efficient extractive distillation design for separating binary azeotrope via thermodynamic and dynamic analyses. Separation and Purification Technology, 238, 116425. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.116425