

Departamento de Procesos y Tecnología (DPT)
División de Ciencias Naturales e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana - Cuajimalpa

Desarrollo de herramientas computacionales basadas en Julia Programming para el análisis exergoeconómico circular de sistemas (bio)energéticos

Responsable del proyecto: Helen Denise Lugo Méndez (UAMC)

Participantes del proyecto

Mauricio Sales Cruz (UAMC)
Eduardo Ladislao Méndez Cruz (UAMC)
Raúl Lugo Leyte (UAMI)
Sergio Castro Hernández (UAMI)
Ma. Fernanda García López (UAMI)
Eduardo González Peto (UAMI)
Luis Pavel Hernández Corona (UAMI)

Línea de investigación: Modelado, Simulación, Optimización, Dinámica y Control de Procesos
Orientación: Investigación básica e investigación aplicada
Fecha de inicio: Marzo 2024
Duración: 2 años

Vo. Bo. Dra. Nohra Elsy Beltrán
Jefe del Departamento de Procesos y Tecnología

Marzo de 2024

A. PROPUESTA DEL PROYECTO

1 RESUMEN

Ante la falta de regulaciones nacionales e internacionales que consideran tanto la gestión de residuos, como el uso eficiente del agua, energía y materiales, todos juntos y no solo de uno de ellos, esta propuesta busca desarrollar herramientas computacionales que faciliten diseñar y evaluar planes de mejora continua en el uso de recursos en sistemas (bio)energético a través del análisis y diagnóstico termoeconómico (exergoeconómico). Las herramientas se fundamentan la Termoeconomía Circular que es la ciencia del ahorro de recursos.

La estrategia para llevar a cabo el proyecto consiste en desarrollar herramientas computacionales en Julia Programming (lenguaje de programación libre y de código abierto) para el análisis termoeconómico circular de sistemas (bio)energéticos, validar las herramientas mediante su aplicación a sistemas de estudio y documentar las herramientas. Además de las funciones de cálculo de costos de producción y diagnóstico, esta propuesta incluye el desarrollo de herramientas para determinar el ahorro de recursos debido a la recuperación de residuos y la integración de procesos.

2 ANTECEDENTES

El modelo de economía lineal adoptado en el mundo ha sido altamente extractivo, desperdiciador de recursos y generador de residuos; ha afectado irreversiblemente el medio ambiente; y ha contribuido a la desigualdad social. El tránsito a la circularidad para ralentizar los efectos negativos al ambiente y el agotamiento de recursos debe impulsar nuevos modelos de negocios basados en el encadenamiento productivo; diseñar un instrumento de evaluación de Circularidad; y contar con un sistema de información de economía circular que facilite encadenamientos entre sectores para maximizar el uso de recursos. Dentro de los principales obstáculos para encaminarse a una economía circular se encuentran: la falta de homologación de indicadores para comparar el uso de recursos energéticos, materiales e hídricos en la generación de productos/servicios dentro y entre sectores, y la inexistencia de un sistema de gestión integral de todos los recursos. El concepto de economía circular es el nuevo mantra ambiental entre industriales, políticos y académicos. Las acciones en el uso eficiente de recursos se han rebautizado como estrategias de circularidad. Ha surgido un nuevo campo académico para investigar formas de cuantificar la circularidad de productos/procesos: hasta ahora, no se ha acordado una métrica estandarizada.

El costo es la cantidad de recursos necesarios para producir un producto o brindar un servicio. Los costos no son una propiedad física medible, no existen medidores de costos y, por lo tanto, deben ser evaluados por medio de herramientas de contabilización de costos. Además, como nada se produce de forma aislada de sus residuos y coproductos y siempre se utiliza una multiplicidad de recursos, la evaluación de costos no es una actividad trivial. Existe un acuerdo internacional que establece a la exergía como la propiedad termodinámica más adecuada para la evaluación de costos en sistemas (bio)energéticos. La contabilización de costos exergéticos busca el origen del proceso de producción de un producto, y cuantifica el consumo de recursos para evaluar los costos de producción y su impacto en el medio ambiente.

La termoeconomía circular (exergoeconomía circular) es la ciencia del ahorro de recursos, está sustentada en la teoría del costo exergético, y conjunta los principios físicos de la economía circular, la simbiosis industrial, la contabilización de costos exergéticos y el diagnóstico de segunda ley de la termodinámica de sistemas (bio)energéticos. Esta teoría permite contabilizar los costos monetarios y exergéticos, tanto de productos funcionales como de los residuos generados en paralelo. Permite identificar qué parte de estos costos se deben a irreversibilidades internas y cuáles a los residuos producidos o irreversibilidades externas, y evalúa sus efectos económicos mediante el diagnóstico

termoeconomico. Las irreversibilidades internas se pueden reducir mejorando la eficiencia de los procesos o cambiando la tecnología, y las externas reciclando residuos. Las irreversibilidades internas también son la causa de los residuos y de sus costos de transferencia y eliminación.

La Teoría del Costo de Exergía (ECT) responde a la pregunta, ¿cómo obtener los costos exergéticos (costos promedio) de todos los flujos que se interrelacionan en esta estructura e integrando la asignación de costos de residuos?. Esta teoría da respuesta al problema de la asignación de costos de exergía utilizando las siguientes reglas:

- Regla de recursos: En ausencia de una evaluación externa, el costo de exergía de los flujos que ingresan a la planta es igual a su exergía.
- Regla de conservación de costos: Todo el costo generado por el proceso de producción debe incluirse en el costo del producto final. En ausencia de una evaluación externa, debemos asignar un valor cero para el costo de las pérdidas de la planta.
- Regla de recurso no gastado: Si un flujo de salida de un proceso es parte del recurso no gastado de ese proceso, el costo de exergía unitario es el mismo que el del flujo de entrada del cual proviene el flujo de salida (también conocida como regla F).
- Regla de coproductos: Si un proceso tiene un producto compuesto por varios flujos, con la misma calidad termodinámica, entonces se les asignará el mismo costo de exergía unitario (también conocida como regla P).
- Regla de residuos: El costo de exergía de un flujo de residuos que abandona los límites del sistema se asigna nulo (internalización del costo de residuos). Su costo de exergía, formado por la suma del combustible requerido para producirlo más el combustible utilizado para transportarlo y eliminarlo, se asigna a los procesos que lo han generado.

Si un residuo sale de una planta, se disipa en el ambiente, pero se deben contabilizar sus costos de formación y eliminación identificando su origen. Algunos residuos podrían reutilizarse en otros procesos o plantas. La termoeconomía circular permite calcular sus costos de formación y proporcionar un costo objetivo para discutir con plantas interesadas en utilizarlos. Además, en esta teoría el análisis de reciclaje abarca el estudio de recuperación de residuos en plantas de recuperación (enfoque común de la economía circular), así como, el estudio de un conjunto de plantas interconectadas en las que se aprovechan los residuos o subproductos de una planta en otras plantas (simbiosis industrial). Esta teoría cubre el estudio general del aprovechamiento de residuos independientemente de la complejidad de los subsistemas e interconexiones de flujo.

Aunque existe software para modelado, integración de procesos, simulación y optimización de sistemas energéticos, como EES, HSC Chemistry o ASPEN PLUS, no incluyen análisis termoeconomico. En este proyecto se establecen las bases para desarrollar software de análisis termoeconomico de sistemas (bio)energéticos. El proyecto contempla desarrollar un conjunto de herramientas de análisis/diagnóstico termoeconómico que permitirá impulsar encadenamientos productivos (simbiosis industrial) entre plantas de procesos para aprovechar al máximo los recursos, facilitando así el tránsito a un modelo de economía circular.

3 OBJETIVO GENERAL Y PARTICULARES

Desarrollar herramientas computacionales en Julia, lenguaje de programación de código abierto, y basadas en la teoría del costo exergético de la termoeconomía circular para realizar análisis y/o diagnósticos termoeconómicos de cualquier sistema (bio)energético a partir de su modelo termodinámico y de la definición de su estructura productiva.

Los objetivos particulares son:

1. Desarrollar las siguientes herramientas computacionales en el lenguaje de programación Julia:

- i. herramientas de importación de datos termoeconómicos de entrada desde archivos externos,
 - ii. herramientas de validación de los archivos externos para verificar si los datos de entrada son correctos y son consistentes para la construcción de la estructura productiva.
 - iii. herramientas de análisis termoeconómico,
 - iv. herramientas de análisis de reciclaje,
 - v. herramientas de diagnóstico termoeconómico, y
 - vi. herramientas de presentación de resultados.
2. Validar las herramientas mediante su aplicación a los siguientes casos de estudio (estudiados en los proyectos de investigación de los alumnos de posgrado): una turbinas de gas con cogeneración, un ciclo combinado y una bioproceso (tratamiento de aguas residuales o producción de biogás).
3. Elaborar la documentación de las herramientas en cuadernos electrónicos de Jupyter como documentos Markdown.

4 DESCRIPCIÓN

4.1 Hipótesis

El desarrollo de herramientas computacionales en un lenguaje de programación libre y de código abierto y basadas en la teoría de exergoeconomía circular puede facilitar a diseñar planes de mejora en el uso eficiente de recursos (energéticos, hídricos y materiales) en en sistemas (bio)energéticos, mediante el aprovechamiento de residuos y la integración de procesos.

4.2 Metodología

4.2.1 Desarrollar herramientas computacionales para el análisis y diagnóstico termoeconómico de sistemas (bio)energéticos en Julia.

El desarrollo de herramientas computacionales para el análisis y diagnóstico termoeconómico de sistemas (bio)energéticos se fundamenta en la aplicación de la teoría de gráficas, modelos lineales productivos y la Teoría del Costo Exergético Generalizado. Estas herramientas serán implementadas en Julia Programming, un lenguaje de programación de código abierto.

- **Herramientas de importación de los datos termoeconómicos de entrada desde archivos externos.**

Entre los datos de entrada se encuentran: 1) el diagrama de flujo de procesos del sistema (bio)energético, 2) los flujos de exergía de las corrientes materiales y energéticas, 3) los productos de los componentes productivos, recursos utilizados y residuos eliminados, 4) los índices de imputación de costos de formación de residuos a los componentes productivos del sistema, y 5) los costos monetarios de los recursos externos, así como los costos de inversión, mantenimiento y operación.

- **Herramientas de validación de los archivos externos para verificar si los datos son correctos.** Estas herramientas tienen por objetivo verificar si 1) toda la información requerida está disponible; 2) las etiquetas de los flujos, procesos y condiciones de operación son coherentes; 3) los valores de la exergía de los flujos, los índices de imputación de residuos, los costos de los recursos externos son positivos; 4) la definición y la imputación de residuos son correctas; 5) los costos de los recursos externos son correctos; y 6) la consistencia dimensional es correcta.

- **Herramientas para verificar si los datos de entrada son correctos para construir la estructura productiva.** Una estructura productiva es un grafo dirigido (digráfica) con tres tipos de nodos y cuatro tipos conexiones. La estructura productiva se construye a partir de la definición de la eficiencia de los procesos (recurso y producto del proceso) y conectando los flujos con sus procesos a través de las corrientes. De esta manera, estas herramientas tienen por objetivo 1) verificar la correcta conectividad de la estructura productiva: conexiones flujo/corriente y

proceso/corriente; 2) comprobar si los valores de exergía de los flujos y corrientes (recursos y productos) son coherentes con la estructura productiva para una condición de operación dada; y 3) verificar si los balances de exergía son correctos para las aristas de la estructura productiva correspondientes a las corrientes y procesos para una condición de operación dada.

- **Herramientas de análisis termoeconómico** para 1) construir la estructura productiva del sistema, utilizando la estructura el modelo físico como referencia, para determinar la distribución de recursos y productos internos a través del sistema; 2) realizar los balances exergéticos ; 3) construir las tablas recurso-producto-residuo (FPR) y producto-recurso-residuo (PFR); y 4) realizar los balances de contabilización de costos exergéticos y exergoeconómicos para estimar el costo de los productos y residuos.
- **Herramientas de cálculo de índices de imputación** de la formación de los costos de los residuos a los componentes productivo. A pesar de que no existe un criterio general para imputar el costo de los residuos del sistema, cualquier método de asignación de costos de residuos debe imputar los costos de formación de los residuos a los componentes productivos que los hayan generado. Dentro de los métodos se encuentran: Distribución de exergía, Distribución del costo de exergía, Irreversibilidad-distribución de costos, Irreversibilidad-distribución de costos, etc.
- **Herramientas de diagnóstico termoeconómico** para comparar dos estados de la planta mediante el análisis de malfunciones y disfunciones, sus costos y el impacto en el uso de recursos. Un diagnóstico termoeconómico se basa en la comparación de las condiciones actuales y de referencia de un sistema. La condición de referencia suele ser el diseño, mantenimiento mayor, prueba de desempeño, o cambios ambientales, en la calidad del recurso, carga parcial o control. El objetivo es identificar y cuantificar el consumo adicional de recursos causado por el aumento de irreversibilidades en los procesos, ajustando la exergía interna, externa y la producción total útil del sistema.
- **Herramientas de análisis de reciclado** para evaluar el ahorro de costos de la condición de operación de un sistema al reciclar un flujo residual y el costo exergético unitario de los flujos de salida del sistema (productos finales y residuos) en función del índice de reciclaje de un residuo. Los ahorros potenciales del reciclaje de residuos se basan en los costos de producción asociados a las irreversibilidades externas. Estos costos representan la máxima cantidad de recursos que podrían ahorrarse mediante el reciclaje.
- **Herramientas de presentación de resultados** para que los resultados de las herramientas de análisis y diagnóstico termoeconómico sean mostrados en forma de tablas, gráficos, reporte, o almacenados en archivos externos de exportación.

4.2.2 Validar las herramientas computacionales

La validación de las herramientas se llevará a cabo mediante su aplicación a casos de estudio específicos, como turbinas de gas con cogeneración, ciclo combinado y bioprocesos. Para esto, se realizarán los análisis y diagnósticos termoeconómicos de los sistemas de estudio y los resultados se compararán con aquellos arrojados por las herramientas computacionales.

4.2.3 Elaborar la documentación de las herramientas computacionales

La documentación de cada herramienta se llevará a cabo en cuadernos electrónicos de Jupyter como documentos Markdown e incluirán su propósito; los argumentos de entrada, salida (tipos de datos) y opciones; y ejemplos de aplicación.

5 FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

Se espera dirigir proyectos de al menos 1 proyecto terminal y 3 alumnos de posgrado cuyos proyectos de investigación se relacionen con el diseño de las herramientas computacionales y/o su aplicación a

casos de estudio. Los alumnos podrán proceder de la UAM u otras instituciones de educación superior.

6 IMPACTO ESPERADO DEL PROYECTO

Objetivos del Desarrollo Sostenible de la ONU	Metas al 2030 del objetivo en las que el proyecto incide
Agua limpia y saneamiento	<ul style="list-style-type: none"> Mejorar la calidad del agua reduciendo la contaminación, eliminando el vertimiento y minimizando la emisión de productos químicos y materiales peligrosos, reduciendo a la mitad el porcentaje de aguas residuales sin tratar y aumentando considerablemente el reciclado y la reutilización sin riesgos a nivel mundial. Aumentar considerablemente el uso eficiente de los recursos hídricos en todos los sectores y asegurar la sostenibilidad de la extracción y el abastecimiento de agua dulce para hacer frente a la escasez de agua y reducir considerablemente el número de personas que sufren falta de agua.
Energía asequible y no contaminante	Duplicar la tasa mundial de mejora de la eficiencia energética.
Industria, innovación e infraestructura	Modernizar la infraestructura y reconvertir las industrias para que sean sostenibles, utilizando los recursos con mayor eficacia y promoviendo la adopción de tecnologías y procesos industriales limpios y ambientalmente racionales, y logrando que todos los países tomen medidas de acuerdo con sus capacidades respectivas.
Producción y consumo responsables	<ul style="list-style-type: none"> Lograr la gestión ecológicamente racional de los productos químicos y de todos los desechos a lo largo de su ciclo de vida, de conformidad con los marcos internacionales convenidos, y reducir significativamente su liberación a la atmósfera, el agua y el suelo a fin de minimizar sus efectos adversos en la salud humana y el medio ambiente. Reducir considerablemente la generación de desechos mediante actividades de prevención, reducción, reciclado y reutilización. Alentar a las empresas, en especial las grandes empresas y las empresas transnacionales, a que adopten prácticas sostenibles e incorporen información sobre la sostenibilidad en su ciclo de presentación de informes.
Acción por el clima	Mejorar la educación, la sensibilización y la capacidad humana e institucional respecto de la mitigación del cambio climático, la adaptación a él, la reducción de sus efectos y la alerta temprana.

B. RECURSOS NECESARIOS PARA EL PROYECTO

7 FINANCIAMIENTO E INFRAESTRUCTURA FÍSICA Y HUMANA ACTUAL

Financiamiento

Se disponen del recurso otorgado por la Rectoría General de la UAM a través de la convocatoria para postulación de proyectos de investigación por personal académico de ingreso reciente. El monto total solicitado para el primer año es por \$150,000.00.

Infraestructura física actual

Equipo de cómputo: computadoras personales de los profesores y servidor virtual UAM-C

Infraestructura humana actual

Adicionalmente a los profesores participantes, se cuenta con 2 alumnos de doctorado y 3 alumnos de maestría desarrollando actividades afines a este proyecto.

8 PRESUPUESTO CALENDARIZADO

El monto total otorgado para el primer año es por \$150,000.00, correspondiente a los siguientes rubros:

Presupuesto	24I	24P	24O	25I	25P	25O
-------------	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Publicación de artículo en revista indexada y adquisición de documentos y servicios de información (Artículos, materiales y útiles diversos y consumibles):	\$25,000.00	
Adquisición de computadora portátil MacBook Pro (Artículos, materiales y útiles diversos y consumibles)	\$55,000.00	
Pago de cuota para asistencia a un congreso internacional	\$10,000.00	
Pasaje Internacional para transportación al extranjero para asistir a un congreso internacional	\$30,000.00	
Viáticos para hospedaje y alimentación para asistir a un congreso internacional	\$20,000.00	
Pago de cuota para asistencia a un congreso nacional		\$2,000.00
Pasaje Internacional para transportación nacional para asistir a un congreso internacional		\$3,000.00
Viáticos para hospedaje y alimentación para asistir a un congreso internacional		\$5,000.00

C. CALENDARIO DE ACTIVIDADES EN PERIODOS TRIMESTRALES

9 Cronograma de actividades

Descripción de la actividad	24I	24P	24O	25I	25P	25O
Desarrollar herramientas de importación de datos termoeconómicos de entrada desde archivos externos	x					
Desarrollar herramientas de validación de los archivos externos para verificar si los datos de entrada son correctos	x	x	x			
Desarrollar herramientas para verificar si los datos de entrada son correctos para construir la estructura productiva	x	x	x			
Desarrollar herramientas de análisis termoeconómico			x	x		
Desarrollar herramientas de cálculo de índices de imputación de la formación de los costos de los residuos a los componentes productivo			x	x		
Desarrollar herramientas de análisis de reciclaje				x	x	
Desarrollar herramientas de diagnóstico termoeconómico				x	x	
Desarrollar herramientas de presentación de resultados				x	x	x
Validar las herramientas mediante su aplicación a casos de estudio					x	x
Elaborar la documentación de las herramientas	x	x	x	x	x	x

D. INFORMACIÓN PARA EL SEGUIMIENTO DEL PROYECTO

10 Calendarización de productos esperados a lo largo del proyecto

Producto	2024	2025
Publicación de artículos en revistas indizadas internacionales	1	1
Presentación de publicaciones en congresos nacionales	1	1
Presentación de publicaciones en congresos internacionales		1
Dirección de tesis o proyectos terminales de licenciatura		1
Dirección de tesis de maestría	1	1
Dirección de tesis de doctorado		1

11 Resultados esperados

Metas científicas (entregables)

- Publicación artículos en revistas internacionales indexadas.

- Presentación de resultados en congresos nacionales e internacionales.

Metas académicas

- Consolidación de un cuerpo académico “Ingeniería de Sistemas de Bioprocesos: Modelado y Simulación”, del Departamento de Procesos y Tecnología (DPT).
- Fortalecimiento de la docencia a nivel licenciatura y posgrado mediante el desarrollo de prácticas virtuales.
- Formación de alumnos de licenciatura y posgrado en el área de Ingeniería de Sistemas de Procesos.