



**GOBIERNO DE
MÉXICO**

EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOQUÍMICA

B.1.2 ELABORACIÓN DE APUNTES DE ASIGNATURA

Síntesis y Optimización de Procesos

Plan de estudios: 2016
Clave Asignatura: IQF-1024

Dr. Manuel Antonio Borja Salín

No dictamen.
AS-2-043/2023

Revisores

VoBo.
Dra. María del Carmen Carreño de León

VoBo
Dra. Hilda Moreno Saavedra

VoBo
Dr. Vicente Vallejo Puerta

Agosto-2024

Contribución académica:

En una época en que la inteligencia artificial y la nanotecnología marcan la perspectiva de las nuevas tecnologías emergentes, con la manipulación de átomos para conformar moléculas y a su vez nuevos materiales con nuevas propiedades y tecnologías para su producción y comercialización, permite ver en perspectiva el horizonte del Ingeniero Químico.

El Análisis - Síntesis de un nuevo material con nuevas propiedades para cubrir las expectativas de un mercado en constante cambio forman parte del predominio del mercado, esta situación parecen ser los desafíos del Ingeniero Químico en esta generación.

Conocer el presente es el trampolín para avanzar hacia el futuro, por ello es necesario discernir las óptimas rutas de obtención de productos químicos tradicionales y de ahí tener la base para proyectar y tener la visión holista, integral, de un proceso optimizado.

La parte medular y cumbre del desarrollo de un Ingeniero Químico es poder discernir los elementos básicos para conformar un mecanismo de obtención de un nuevo material, la modelación, diseño y optimización de un proceso químico, y más aún si se trata de un inédito proceso con una síntesis resiente, tanto técnica como económicamente factible son las bases del progreso.

La Ciencia genera conocimiento, sin embargo, al desarrollar tecnología se desencadena el bienestar, al disponer de mayores recursos y mejores oportunidades.

México es por naturaleza un país rico en energéticos con una riqueza ancestral en recursos naturales que le permiten estar entre las tres primeras economías de América Latina conocer a profundidad los procesos de refinación y petroquímica permitirá al Ingeniero químico ahondar en los conocimientos de química orgánica y adentrarse en el entendimiento de equipos de proceso a escala industrial de dimensiones, tales como la isomerización de pentanos, desalquilación del benceno, obtención de gas de síntesis, del amoniaco, de la urea entre tantos otros.

México también es el segundo lugar mundial en patentes con registro de plantas medicinales, pero solo menos del cinco por ciento dispone de estudios científicos, lo cual representa un área de oportunidad muy grande para el desarrollo, extracción y purificación del medio activo de plantas en el país.

Lo anteriormente expuesto fortalece la magnífica oportunidad de dar este nuevo enfoque al curso.

Si a estas ideas básicas se agrega que el alumno dispone actualmente de herramientas muy poderosas de software libre, que le permiten acompañarlo en toda su vida profesional para afrontar la inmensa problemática de ser la mejor versión de sí mismo, no solo con el conocimiento adquirido en el Instituto, sino de herramientas que le ayudaran a desempeñar mejor su trabajo profesionalmente hablando.

Caracterización de la asignatura:

“Esta asignatura aporta al perfil del Ingeniero Químico herramientas para diseñar, seleccionar, y optimizar procesos químicos en plantas industriales de acuerdo a tecnologías limpias para el sector industrial con criterios de sustentabilidad.”

Con base a lo anterior se tomarán como ejemplo los siguientes procesos industriales para lograr los objetivos educacionales.

Tema 1: "Síntesis y Análisis de Procesos"

En este tema se abordarán los principales procesos de refinación y petroquímica que se desarrollan en el país y sus productos derivados como por ejemplo la síntesis del amoniaco, gas de síntesis, producción de metanol, a partir del metano, etano a etileno entre otros y su análisis termodinámico y cinético utilizando tanto software libre y propietario como por ejemplo coco y swsim.

Tema 2: "Integración de Energía"

Se utilizará el software propietario libre y gratuito "HINT" entre otros programas para la integración energética de procesos mediante análisis pinch, por medio de un proyecto integrador que se lleva a cabo desde el inicio del curso.

Tema 3: "Evaluación Económica de Procesos"

Una de las herramientas tecnológicas que además de permitir una simulación de procesos químicos permitiendo incorporar su análisis "Tecnico-Economico" es Coco y Swsim entre otros que utilizan software tanto libre como propietario siendo estos de distribución libre y gratuita

Tema 4: "Optimización de Procesos"

Para lograr este objetivo educacional se utiliza la herramienta de Python con el Paquete/Librería "Scipy.Optimize" que permite por medio de un modelo matemático la optimización de un proceso químico de una o diferentes variables y su representación gráfica con la librería "Cvxopt".

Cabe recalcar que es importante impartir el conocimiento necesario para la materia de "Síntesis y Optimización de Procesos" pero también es igual de importante dar las herramientas necesarias para cumplir este cometido y permitir que el alumno disponga de ellas en el momento que en su vida profesional así lo requiera tanto como subordinado o como emprendedor independiente

Se debe mencionar que para el desarrollo de la materia de Síntesis y Optimización de Procesos se utiliza el ambiente de desarrollo del "navegador anaconda" con su editor "Spyder", "Júpiter" y su prompt del "Power Shell" para la incorporación de librería y paquetes.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Asignatura	Síntesis y Optimización de Procesos
Clave oficial de la asignatura	IQF-1024
Programa educativo al que impacta	Ingeniería Química

La asignatura de "Síntesis y optimización de Procesos" contribuye a la formación del Ingeniero Químico al dar los conocimiento y herramientas que le permiten diseñar, seleccionar y optimizar los procesos químicos inmersos en las plantas Industriales con un criterio innovador basado en la sustentabilidad y las tecnologías limpias para preservar el futuro de nuestra sociedad.

La materia de "Síntesis y optimización de Procesos" integra los conocimientos de las operaciones unitarias aunado a las de ingeniería económica con una visión innovadora que permite diseñar desde un inicio la mejor alternativa tanto social como técnicamente aceptable.

Basado en el Método Científico y los principios básicos de Ingeniería y Economía el alumno será capaz de formular y resolver problemas complejos en ingeniería de procesos, de equipos e instalaciones presentando alternativas novedosas para su síntesis de forma diferente a lo establecido optimizando su obtención.

La meta o el camino es que el alumno logre ser la mejor versión de sí mismo, superándose de manera permanentemente, enriqueciéndose técnicamente al colaborar en equipos interdisciplinarios y multiculturales, con un espíritu crítico, mente abierta y disposición al cambio, prevaleciendo siempre la ética profesional como baluarte de equidad.

Competencia(s) a desarrollar

Capacidad para poder discernir los elementos que componen un proceso químico, analizar las propiedades termodinámicas de cada elemento y con una visión holista integrarlo para lograr la optimización de cada equipo de forma independiente y global a toda la planta.

Procesar grandes volúmenes de información técnica y multidisciplinaria de fuentes diversas y discernir lo verdaderamente valioso para la toma de decisiones.

Desarrollar las habilidades pertinentes para lograr la síntesis de un proceso a partir de las materias primas disponibles, si existe reacción química encontrar las rutas de reacción adecuadas, y las baterías de separación necesarias para lograr la calidad requerida utilizando las técnicas de optimización de procesos para obtener las mejoras técnicas y económicamente factibles.

Sintetizar nuevos materiales partir de nuevos y novedosos procesos utilizando nuevas rutas de reacción.

La materia de “Síntesis y Optimización de Procesos” se imparte en el octavo semestre de la carrera de Ingeniería Química, los alumnos disponen del conocimiento fundamentales sobre operaciones unitarias, química analítica, química orgánica , programación, balances de materia y energía, reactores químicos entre otras materias, sin embargo su conocimiento es aislado, solo un reactor, una columna, solo un sistema de separación sin embargo en la realidad cotidiana los procesos químicos son mucho más complejos tanto en equipos como en diversidad de materias primas y productos.

La materia de síntesis y optimización de procesos tiene como finalidad dar una visión más integral de los procesos químicos actuales.

Temario de la materia de Síntesis y Simulación de Procesos

Tema y subtemas	Complementos Educativos	Herramienta tecnológica
Tema 1: Síntesis y análisis de procesos 1.1. Selección de rutas de reacción. 1.2. Desarrollo de diagramas de flujo. 1.3. Selección de procesos de separación	Estudio de casos Aprendizaje basado en problemas Proyecto Integrador	Infografías Secuencias Didácticas Presentaciones Cuestionarios de evaluación

Tema 2: Integración de Energía 2.1. Significado del acercamiento mínimo de energía 2.2. Determinación de redes con el método de diagramas de contenido de calor. 2.3. Determinación de redes con el método del punto de pliegue. 2.4. Predicción de requerimientos de áreas en redes de intercambiadores de calor. 2.5. Revisión de redes de intercambiadores de cal existentes.	Estudios de Casos Aprendizaje basado en problemas Proyecto integrador	Posters Presentaciones Cuestionarios de evaluación
Tema 3: Evaluación económica de procesos 3.1 Selección de materiales. 3.2. Técnicas de análisis económico de procesos. 3.3. Estimación de costos de inversión y operación	Estudio de casos Aprendizaje basado en problemas Proyecto integrador	Infografías Presentaciones Cuestionarios de evaluación
Tema 4 Optimización de Procesos 4.1. Modelación de procesos. 4.2. Optimización de una variable 4.3. Programación dinámica.		

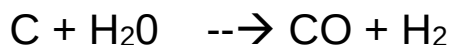
Tema 1: Síntesis y análisis de procesos

Conceptos Básicos

La síntesis de un proceso se podría definir como la obtención de un producto químico mediante alternativas viables de diferentes materias primas es decir utilizando “precursores químicos” más simples o más complejos se obtiene un producto específico.

Por ejemplo, la Síntesis del Amoniaco, proceso Haber-Bosch, que se obtiene a partir de hidrocarburos gaseosos, metano/etano, como fuente de hidrogeno y el aire como precursor del nitrógeno,

El gas de Síntesis, es una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono en diversas proporciones, reacción principal.



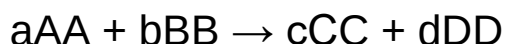
La cual se puede producir a partir de la síntesis de:

- 1.- Gasificación del carbón, de la biomasa, o de algunos tipos de residuos tanto ligeros como pesados
- 2.- Reformado del gas Natural con vapor de agua
- 3.- Reformado de hidrocarburos líquidos
- 4.- Entre otras muchas alternativas

Para llevar a cabo la síntesis de un proceso químico se deben cumplir con ciertos criterios Termodinámicos siendo entre ellos los siguientes:

- 1.- Cada una de las reacciones debe ser termodinámicamente factible
Lo que significa que el cambio en la Energía libre de Gibbs debe ser menor 10 Kcal/gmol, siempre y cuando no se utilice un catalizador
- 2.- La gama de productos intermedios pueden o no ser consumidos en el reactor
- 3.- La estequiometria es complicada cuando se trata de complejos activados
- 4.- Se busca identificar una cinética apropiada que esclarezca las etapas limitantes

En una reacción genérica:



la energía libre de Gibbs sería:

Energía libre de formación de los reactivos: $a \cdot \Delta G_{f(AA)}^0 + b \cdot \Delta G_{f(BB)}^0$

Energía libre de formación de los productos: $c \cdot \Delta G_{f(CC)}^0 + d \cdot \Delta G_{f(DD)}^0$

Donde:

$\Delta G_r^0 =$

Energía libre formación **productos** – Energía libre de formación **reactivos**

$$\Delta G_r^0 = (c \cdot \Delta G_{f(CC)}^0 + d \cdot \Delta G_{f(DD)}^0) - (a \cdot \Delta G_{f(AA)}^0 + b \cdot \Delta G_{f(BB)}^0)$$

En forma genérica:

$$\Delta G_r^0 = \sum n_p \Delta G_{f(p)}^0 - \sum n_R \Delta G_{f(R)}^0$$

Donde:

ΔG_r^0 = Variación de la energía libre de reacción

n_p, n_R = Coeficientes estequiométricos de los productos y reactivos

$\Delta G_{f(p)}^0, \Delta G_{f(R)}^0$ = Energías Libres de Gibbs de productos y reactivos

La energía libre de Gibbs establece las reglas termodinámicas que deben cumplirse para que un proceso químico se lleve a cabo

Diferentes expresiones de la Energía Libre de Gibbs.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$$\Delta G < 0$$

El proceso es espontáneo

$$\Delta G > 0$$

El proceso no es espontáneo

$$\Delta G = 0$$

El proceso se encuentra en equilibrio

EQUILIBRIO QUÍMICO Y CONSTANTE DE EQUILIBRIO

Una reacción química está en equilibrio cuando la energía libre alcanza un mínimo

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln K$$

Tabla 1.1 Valores de la Energía libre de Gibbs.

Variaciones de $\Delta G^0 = -nRT \ln K$ en el equilibrio			
K	Ln K	ΔG^0	Observaciones
>1	Positivo	Negativo	Tienden hacia los productos
=1	Cero	Cero	Tienden a igualarse
<1	Negativo	Positivo	Tienden hacia los reactantes

La energía de cambio total de Gibbs para la reacción



donde la presión y la temperatura son constantes está dada por:

$$\Delta_t G_{p,t} = \Delta_t G_{p,t}^0 + RT \ln(\alpha_{CC}^c \alpha_{DD}^d \alpha_{AA}^a \alpha_{BB}^b)$$

Donde α_i se refiere al coeficiente de actividad de los reactantes y productos, $\Delta_t G_{p,t}$ es el cambio en la energía estándar de Gibbs a presión y temperatura ambiente

En el equilibrio se tiene:

$$\Delta_t G_{p,t}^0 = -RT \ln \frac{(\alpha_{Cequil})^c (\alpha_{Dequil})^d}{(\alpha_{Aequil})^a (\alpha_{Bequil})^b} = RT \ln K_\alpha$$

En la expresión anterior α_{Aequil} se refiere al coeficiente de actividad en el equilibrio y K_α se refiere a la constante de equilibrio expresada en términos de actividad.

$$\Delta_r G_{p,t} = RT \left[\ln (\alpha_{CC}^c \alpha_{DD}^d / \alpha_{AA}^a \alpha_{BB}^b) - \ln K_{\infty} \right]$$

La relación anterior permite calcular la constante de equilibrio, la temperatura T a partir de la energía libre de Gibbs usando:

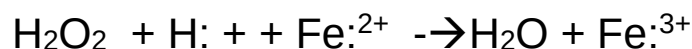
$$-RT \ln [K(T)] = \Delta_r G_{p,t}(T)$$

ChemPy.

“Chempy” es un módulo de Python gratuito, libre y de código abierto para utilizarse en aplicaciones en Ingeniería Química, ciencias de materiales, termodinámica, Química analítica y Química orgánica.

Incluye “clases” que permiten representar sustancias y reacciones químicas, así como soluciones analíticas y numéricas de ecuaciones diferenciales.

Por ejemplo, sea las reacciones de reducción-oxidación de



Representadas por las Ecuaciones de Velocidad en la Tabla 2.

Tabla 1.2 Ecuaciones de Velocidad de la Reducción del Fe^{2+} a Fe^{3+}

Ecuaciones de Velocidad	Constante de Equilibrio
$2\text{Fe}^{+2} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{Fe}^{+3} + 2\text{OH}^-;$	42
$2\text{Fe}^{+3} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{Fe}^{+2} + \text{O}_2 + 2\text{H}^+;$	17
$\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O};$	1e10
$\text{Fe}^{+3} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{FeOOH(s)} + 3\text{H}^+;$	1e-4
$\text{FeOOH(s)} + 3\text{H}^+ \rightarrow \text{Fe}^{+3} + 2\text{H}_2\text{O}$	2.5

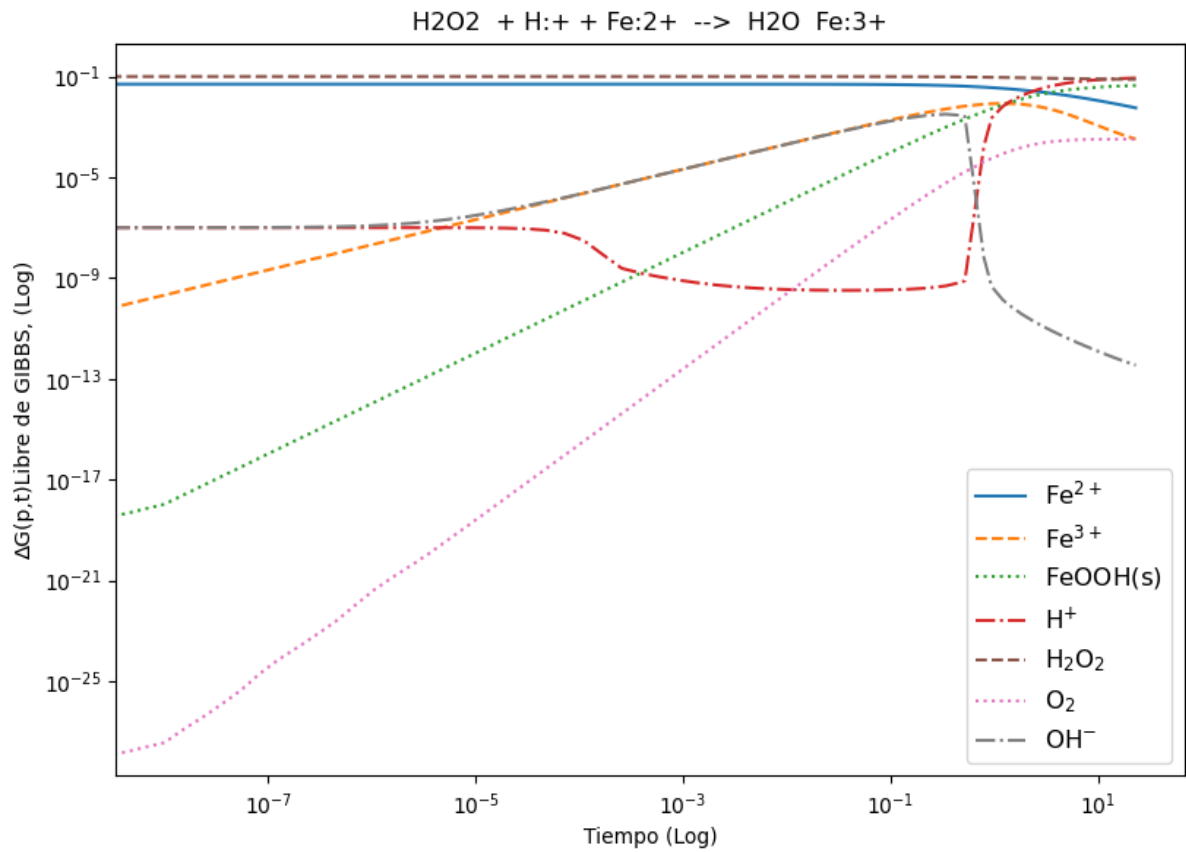
```

3  @author: BORJA Y OTROS|
4  """
5  #SE IMPORTA CHEMPY Y SU MODULO DE REACCIONES QUIMICAS
6  from chempy import ReactionSystem # Las constantes de velocidad son arbitrarias
7  #DEFINICION DE LAS ECUACIONES DE REACCION Y CONSTANTES
8  rsys = ReactionSystem.from_string(
9      """2 Fe+2 + H2O2 -> 2 Fe+3 + 2 OH-; 42
10     2 Fe+3 + H2O2 -> 2 Fe+2 + O2 + 2 H+; 17
11     H+ + OH- -> H2O; 1e10
12     H2O -> H+ + OH-; 1e-4
13     Fe+3 + 2 H2O -> FeOOH(s) + 3 H+; 1
14     FeOOH(s) + 3 H+ -> Fe+3 + 2 H2O; 2.5""") # "[H2O]" = 1.0
15  #DEFINICION DE LAS ECUACIONES DE REACCION-FIN
16  from chempy.kinetics.ode import get_odesys #IMPORTACION DEL MODULO CINETICO
17  odesys, extra = get_odesys(rsys) #MODULO DE ECUACIONES DIFERENCIALES
18  from collections import defaultdict
19  import numpy as np #MODULO NUMPY PARA ARREGLOS ESPACIO DONDE VIVE LA REACCION
20  tout = sorted(np.concatenate((np.linspace(0, 23), np.logspace(-8, 1))))
21  #CONCENTRACIONES INICIALES
22  c0 = defaultdict(float, {'Fe+2': 0.05, 'H2O2': 0.1, 'H2O': 1.0, 'H+': 1e-7, 'OH-': 1e-7})
23  #INTEGRACION DE LAS ECUACIONES Y TOLERANCIA DE CONVERGENCIA
24  result = odesys.integrate(tout, c0, atol=1e-12, rtol=1e-14)
25  #GRAFICACION
26  import matplotlib.pyplot as plt
27  _ = result.plot(names=[k for k in rsys.substances if k != 'H2O'], xscale='log', yscale='log')
28  _ = plt.legend(loc='best', prop={'size': 12});
29  _ = plt.xlabel('Tiempo (Log)'); _ = plt.ylabel('ΔG(p,t) Libre de GIBBS, (Log)')
30  _ = plt.title(" H2O2 + H:+ + Fe:2+ --> H2O Fe:3+ ")
31  _ = plt.tight_layout()
32  plt.show()

```

Fig 1.1 Código Abierto explicado para representar la reacción
Redox $\text{Fe:}^{2+} \rightarrow \text{Fe:}^{3+}$

ION
eac
Fe
e+3
+ O
->
3 +
OH(
ION
mpy
ext
lec
ump
ort
RAC
aul
CIO
od
CIO
atp
lt.
leg
xla



Grafica 1.1 Visualización para representar la reacción Redox
 $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$

Cabe mencionar que los valores de las Constantes son solo representativos para validar el método y la graficación

1.1. Selección de rutas de reacción.

Las reacciones químicas se ven influenciadas por la concentración y temperatura local, las reacciones producen o consumen calor que cambian la composición de la mezcla reaccionante, afectando las propiedades del flujo, derivado de esto se deben tomar en cuenta el acoplamiento de las ecuaciones que describen la transferencia de energía, masa, y momentum

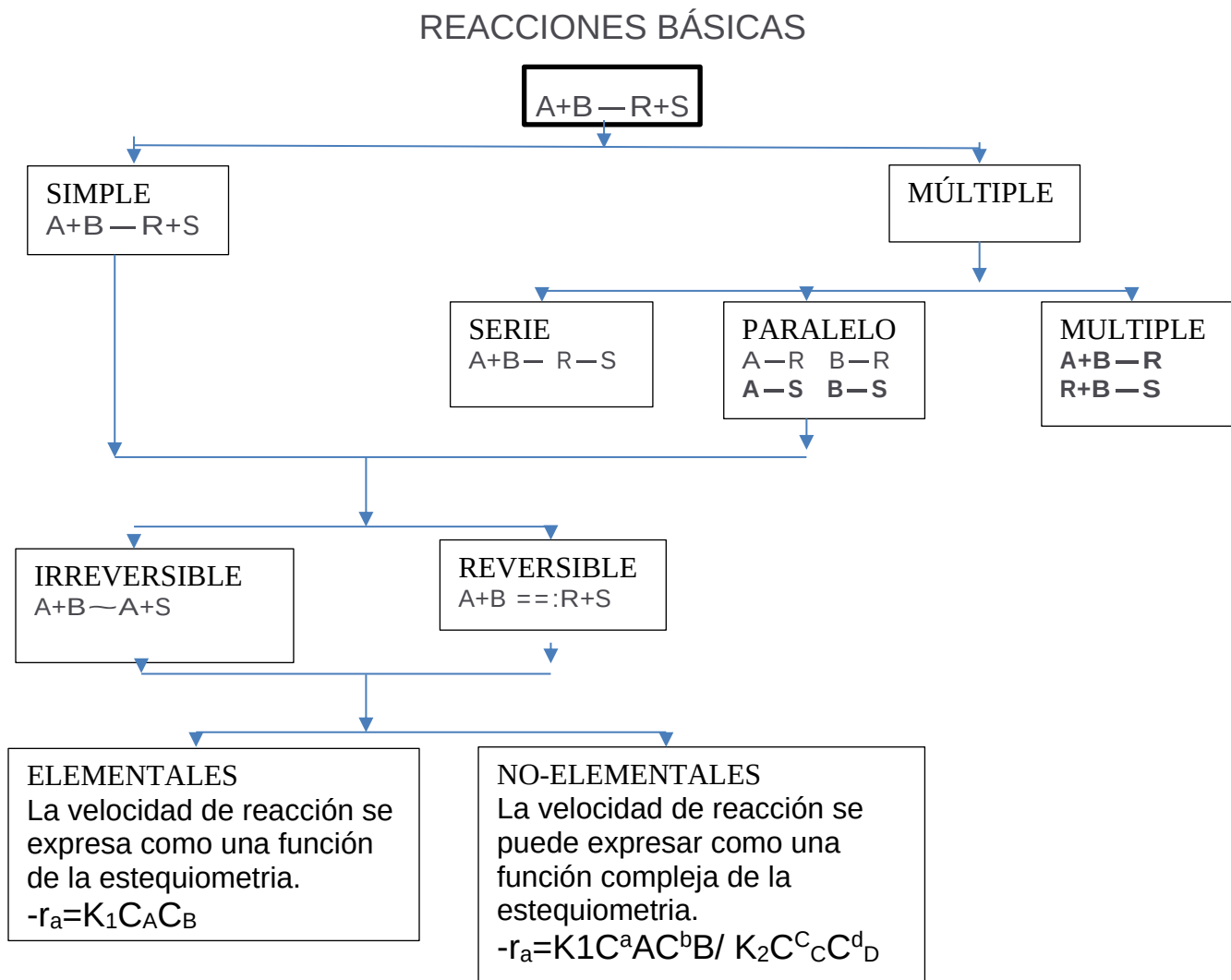


Fig. 1. 2 características que distinguen los diferentes tipos de reacciones químicas

TIPOS DE REACTORES:

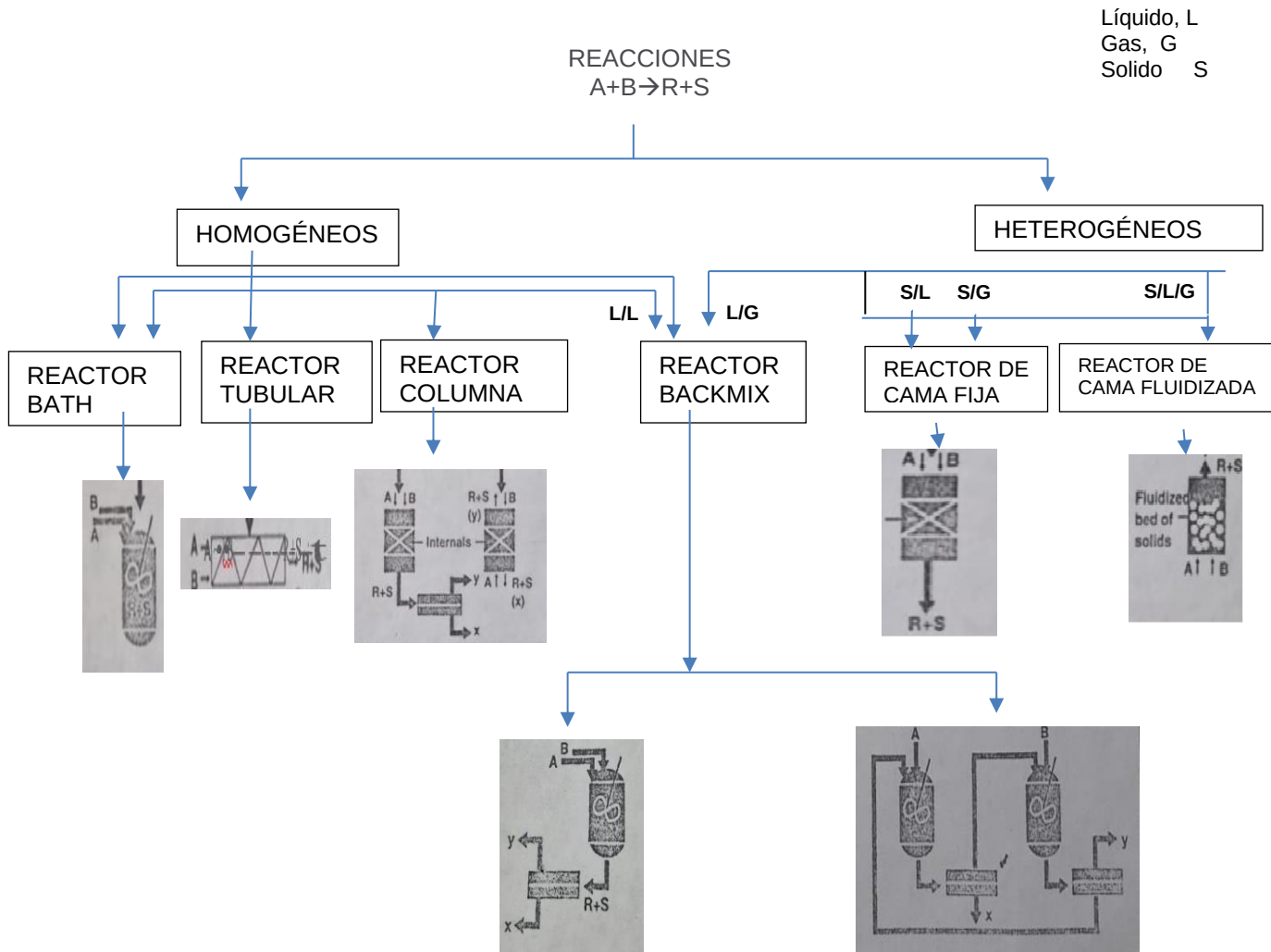


Fig. 1.3 Diferentes tipos de reactores y su configuración

GAS DE SÍNTESIS.

El gas de síntesis, es una mezcla de monóxido de carbono e hidrogeno que varía la composición dependiendo de la fuente de la cual se obtenga, pudiendo tener metano y dióxido de carbono.

Una de sus aplicaciones es la de obtener gasolinas, metanol, vía deshidrogenación oxidativa y amoníaco vía reformado con vapor.

El gas de síntesis se obtiene a partir de una fuente rica en carbono como el coque, nafta, biomasa, gas natural, hidrocarburos, hulla o el propio carbón.

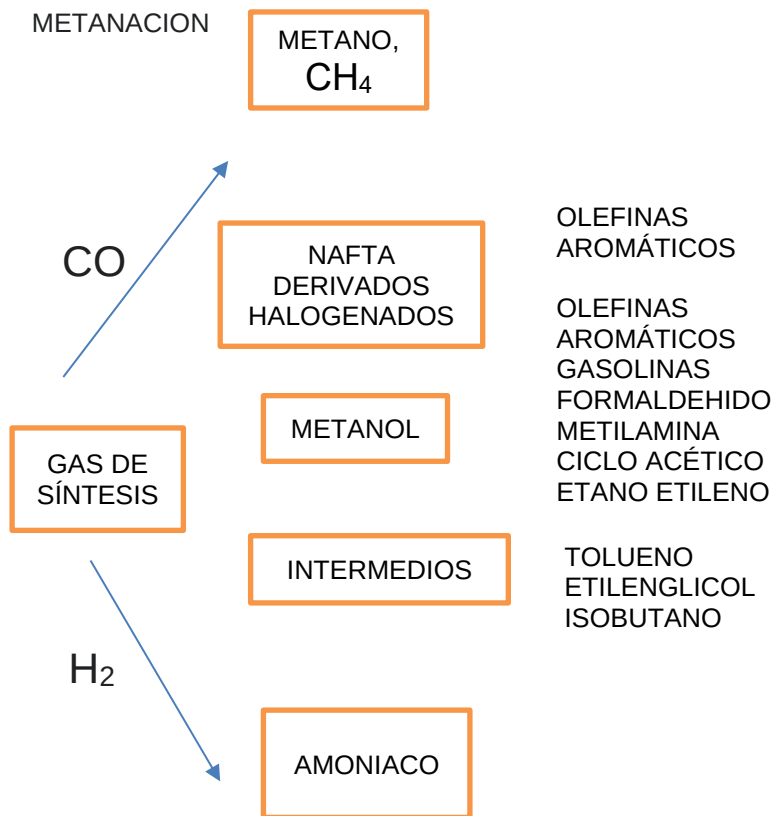


Fig. 1.4 Algunas aplicaciones del gas de síntesis

El proceso consta de una oxidación parcial y sucesiva de la materia prima por medio de oxígeno, aire o vapor de agua a temperaturas próximas a 800 °C

Principales procesos para la obtención del gas de síntesis:

Gasificación del carbón, gasificación de la biomasa, o algún otro residuo orgánico, utilizando oxígeno puro o bien vapor de agua.

Reformado de gas natural con vapor de agua.

Reformado de hidrocarburos líquidos para producir hidrógeno.

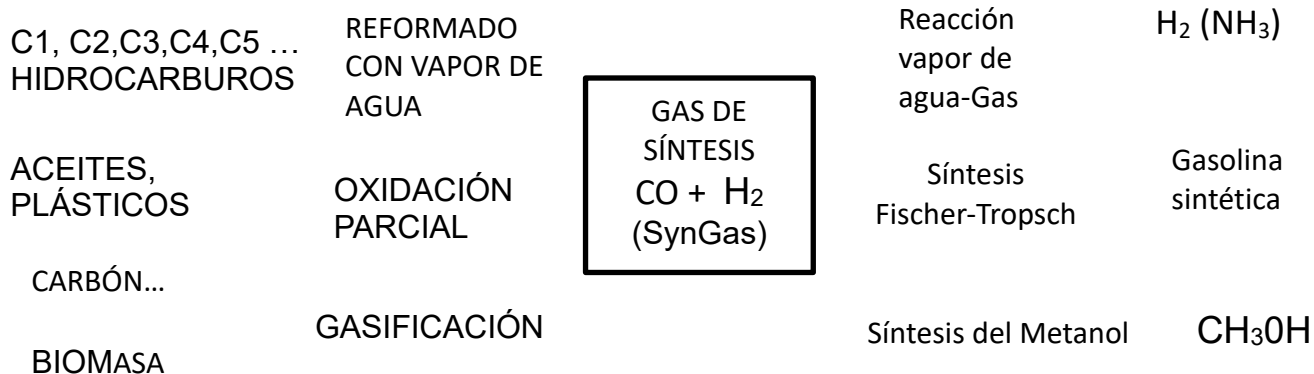


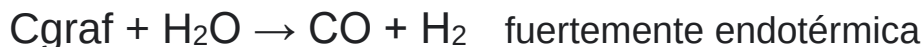
Fig. 1.5 Principales procesos y productos a partir del gas de síntesis

Producción de gas de síntesis a partir de diferentes materias primas

Obtención a partir del **carbón**:

El carbón se procesa con vapor de agua para dar origen al gas de síntesis, el proceso se denomina gasificación.

La reacción principal es:



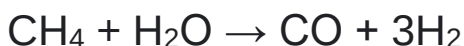
Para lograr la temperatura necesaria se consume aproximadamente 1/3 del carbón en el proceso de la combustión.

A partir del **gas natural**:

A nivel industrial existen principalmente tres procesos para la obtención del gas de síntesis a partir del gas natural:

Reformado con vapor:

La reacción es endotérmica para la producción del gas de síntesis con vapor de agua entre 500°C - 850°C el cual permite llevar a cabo la siguiente reacción.



Para lograr la temperatura requerida se quema una parte del gas natural, este proceso es el más comúnmente empleado.

Obtención del gas de síntesis a partir de la **biomasa**:

La biomasa para la obtención del gas de síntesis es la que contiene en su mayoría celulosa y lignina, fuente rica en carbón

Gasificación de la Biomasa: “Proceso APL” (All Power Labs)

La gasificación de biomasa comprende los siguientes cinco procesos combinados.

- **secado**
- **pirólisis**
- **Combustión**
- **Cracking de alquitrán**
- **Reducción**

Materia prima

Biomasa.

Proceso:

Gasificación.

Observaciones:

Altamente Endotérmica.

Condiciones Operación:

El proceso se lleva a cabo sin oxígeno y se requiere 1/3 de la materia prima para lograr la combustión que se llevar a cabo entre 100-1200 °C

La reacción principal es:



Productos:

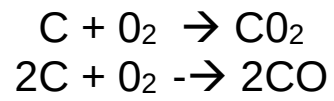
Carbón, Oxígeno proveniente de la biomasa e Hidrógeno

Segunda etapa: Alimentación parcial de oxígeno:

Productos: CO, CO₂, CH₄, C₂H₆, C₂H₄ + Hidrocarburos Líquidos siendo H₂O, Fenoles, Alquitrán, y C_nH_n

Subproducto: bio-carbón o ceniza carbonetizada, se utiliza para mejoramiento de suelos o en procesos industriales por su alto poder calorífico..

Principales Reacciones Exotérmicas:



Reacciones Endotérmicas:

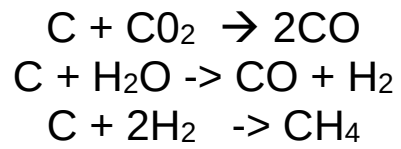


Diagrama de flujo para la obtención de gas de síntesis a partir de biomasa utilizando cinco procesos combinados.

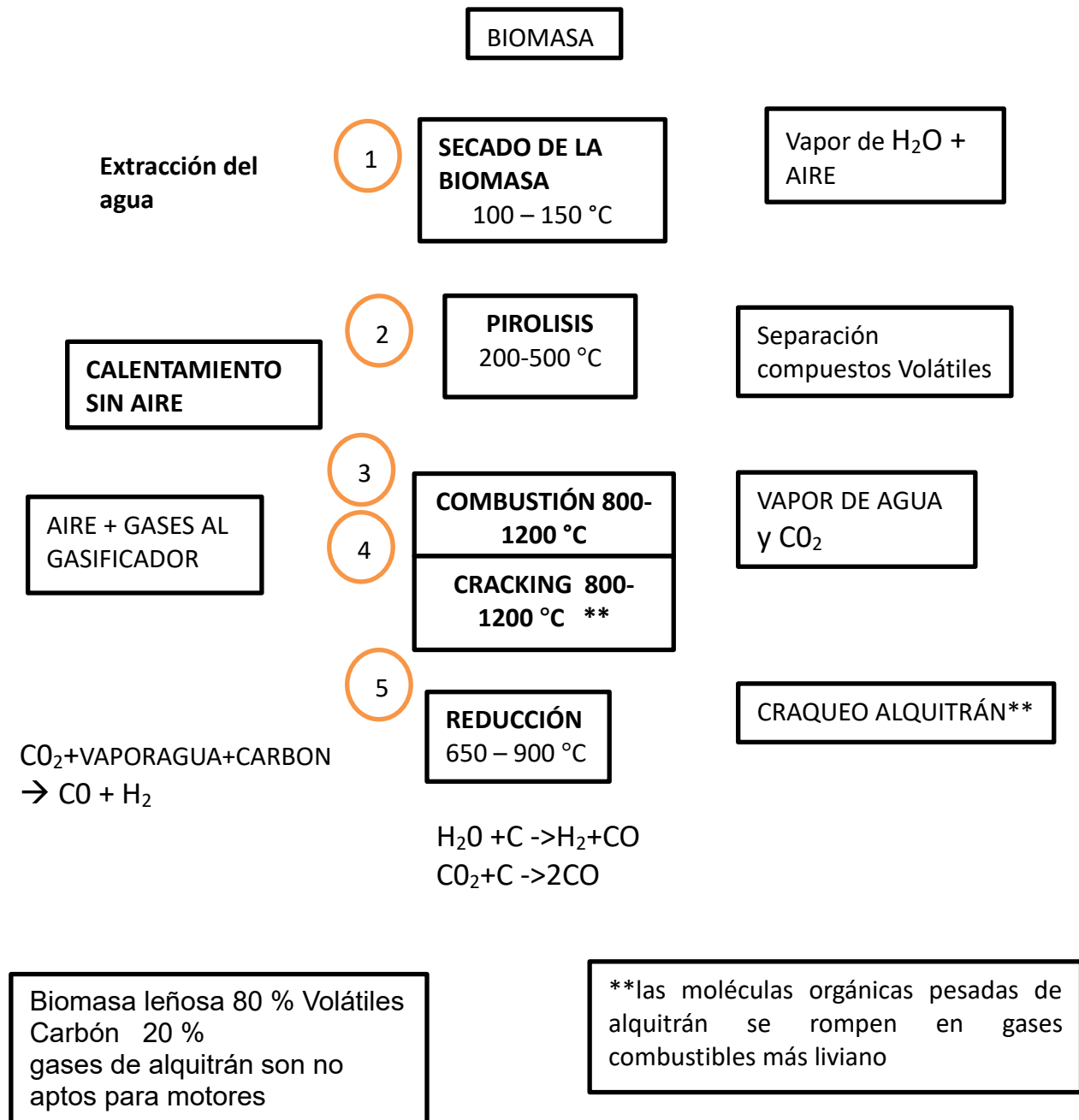


Fig. 1.6 Procesos combinados para la conversión de la Biomasa, Proceso APL (All Power Lab)

Secado.

Este proceso es endotérmico en el rango de temperatura de 100-150°C, los productos resultantes son vapor de agua y biomasa seca.

Pirólisis.

En este proceso endotérmico en el rango de temperatura de 200-500 °C, se refiere al rompimiento del enlace C-H con la separación de los compuestos volátiles del carbón vegetal contenido en la biomasa. No se agrega oxígeno.

Combustión.

Para lograr la temperatura de combustión, mayor a 800 °C, se recircula los vapores productos de la pirolisis y se mezclan con el aire en el gasificador produciendo vapor de agua y dióxido de carbono provocando también el rompimiento del alquitrán

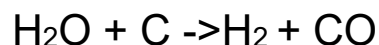
Cracking del Alquitrán

Aproximadamente el 80 % de los compuestos volátiles provienen del alquitrán, el 20 % restante es carbón vegetal

El proceso de crackeo del alquitrán sucede simultáneamente con la combustión, rompiéndose el enlace C - C, convirtiéndolo en compuestos más ligeros.

Reducción.

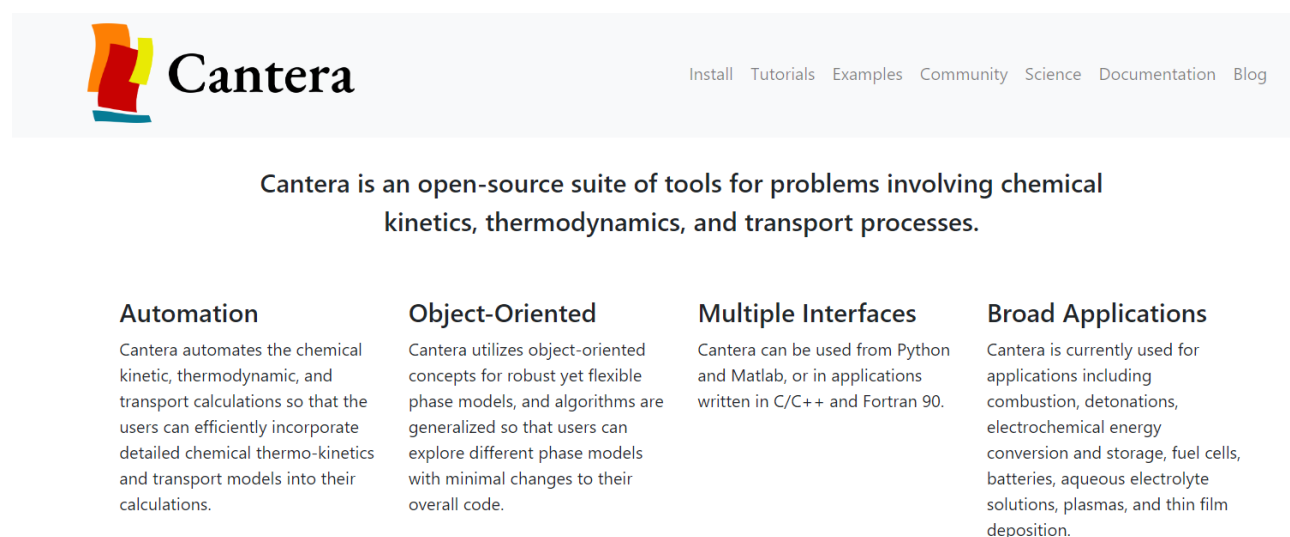
Como producto de la pirolisis térmica los gases volátiles se pueden convertir en gases combustibles por medio de reacciones de reducción, siendo.



Por medio del proceso de reducción se obtiene el 50 % del gas de síntesis.

Para conocer las rutas de reacción es necesario disponer de las propiedades Físico-Químicas de los compuestos involucrados en la reacción, así como apoyarnos de una base de datos con información de propuestas de mecanismos de reacción cinéticos.

Cantera es una suite de software libre de herramientas que proporcionan información de la cinética química, termodinámica y procesos de transporte para reacciones químicas y se encuentra en el url: <https://cantera.org>



The image shows the Cantera website. At the top left is the Cantera logo, which consists of three overlapping squares in red, orange, and yellow, with the word "Cantera" in a bold, black, sans-serif font. To the right of the logo is a navigation menu with links: "Install", "Tutorials", "Examples", "Community", "Science", "Documentation", and "Blog". Below the navigation menu is a central text block that reads: "Cantera is an open-source suite of tools for problems involving chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes." Below this text are four columns, each with a heading and a description:

Automation	Object-Oriented	Multiple Interfaces	Broad Applications
Cantera automates the chemical kinetic, thermodynamic, and transport calculations so that the users can efficiently incorporate detailed chemical thermo-kinetics and transport models into their calculations.	Cantera utilizes object-oriented concepts for robust yet flexible phase models, and algorithms are generalized so that users can explore different phase models with minimal changes to their overall code.	Cantera can be used from Python and Matlab, or in applications written in C/C++ and Fortran 90.	Cantera is currently used for applications including combustion, detonations, electrochemical energy conversion and storage, fuel cells, batteries, aqueous electrolyte solutions, plasmas, and thin film deposition.

Fig. 1.7 Software de código abierto “Cantera”, es una herramienta que proporcionan información de la cinética, termodinámica de una reacción química.

Algunos ejemplos en Python.

```

5 @author: BORJA Y OTROS
6 """
7
8 import cantera as ct
9 import numpy as np
10 #Se define un objeto que representa una mezcla de gases
11 gas1 = ct.Solution('gri30.yaml')
12
13 #Para ver el estado de la mezcla lo llamamos como una funcion
14 gas1()

```

```

wdir='C:/Users/SONY/Desktop/sabatico-2023/SEGUNDO INFORME
SABATICO 2024/SCRIPTS-GASSINTESIS')

gri30:
    temperature 300 K
    pressure 1.0133e+05 Pa
    density 0.081894 kg/m^3
    mean mol. weight 2.016 kg/kmol
    phase of matter gas

    1 kg      1 kmol
    -----
    enthalpy 26469      53361 J
    internal energy -1.2108e+06 -2.441e+06 J
    entropy 64910      1.3086e+05 J/K
    Gibbs function -1.9447e+07 -3.9204e+07 J
    heat capacity c_p 14311      28851 J/K
    heat capacity c_v 10187      20536 J/K

    mass frac. Y      mole frac. X      chem.
    -----
    pot. / RT

```

Fig. 1.8 Despliegue de propiedades de una mezcla con Cantera

El estado del objeto se puede cambiar a diferentes condiciones agregando las condiciones requeridas, por ejemplo

```
gas1.TP=1200,101325
```

Que representa una temperatura de 1200 °C y una presión de 101325 Pa, siempre en unidades SI

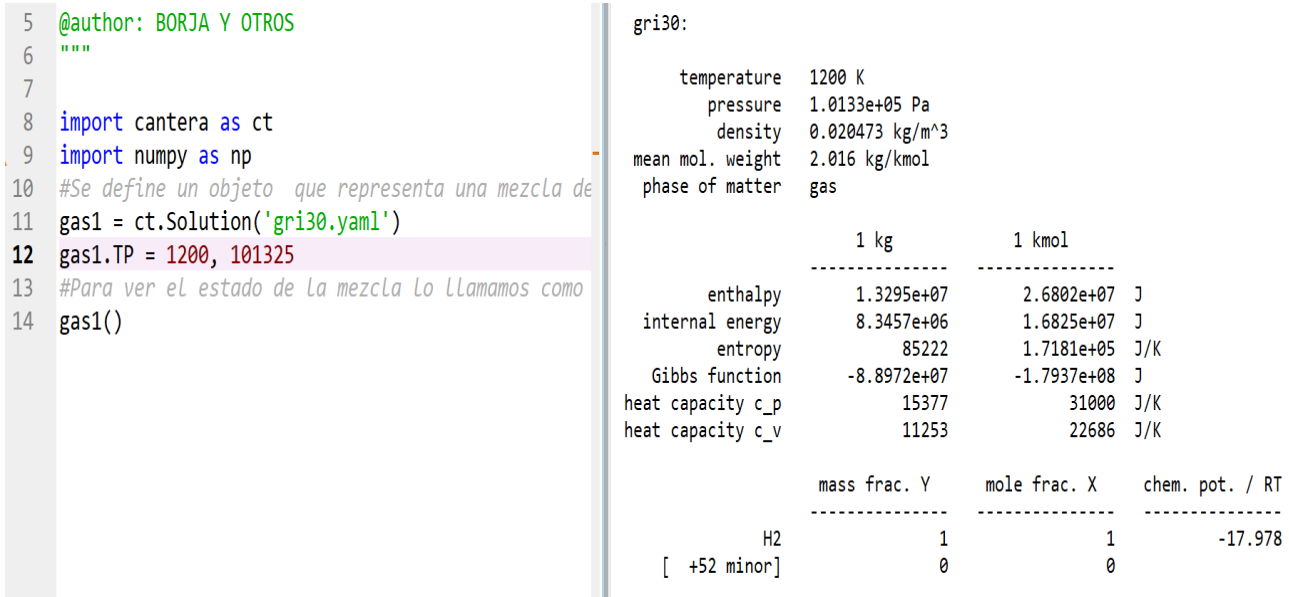


Fig. 1.9. Despliegue de propiedades a diferentes Temperaturas y presiones

Generalmente en termodinámica se requiere conocer dos propiedades además de la composición de una sustancia o de una mezcla.

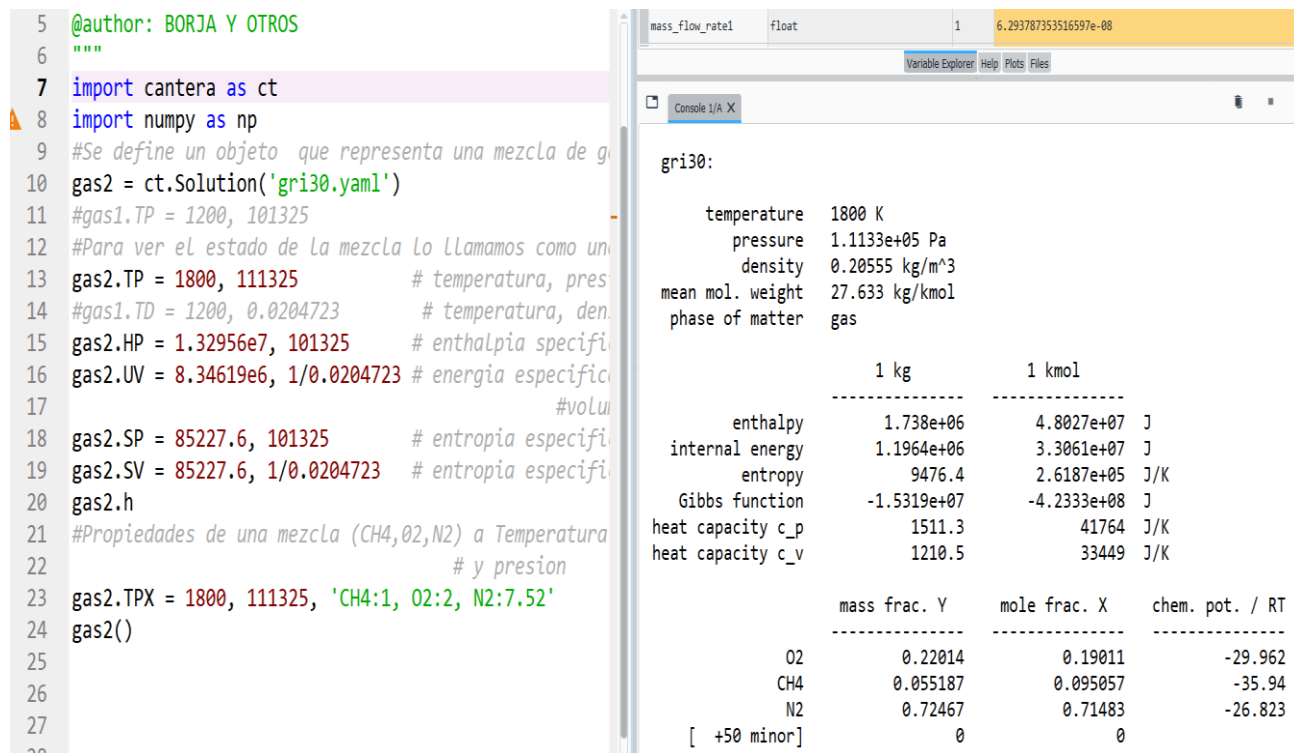


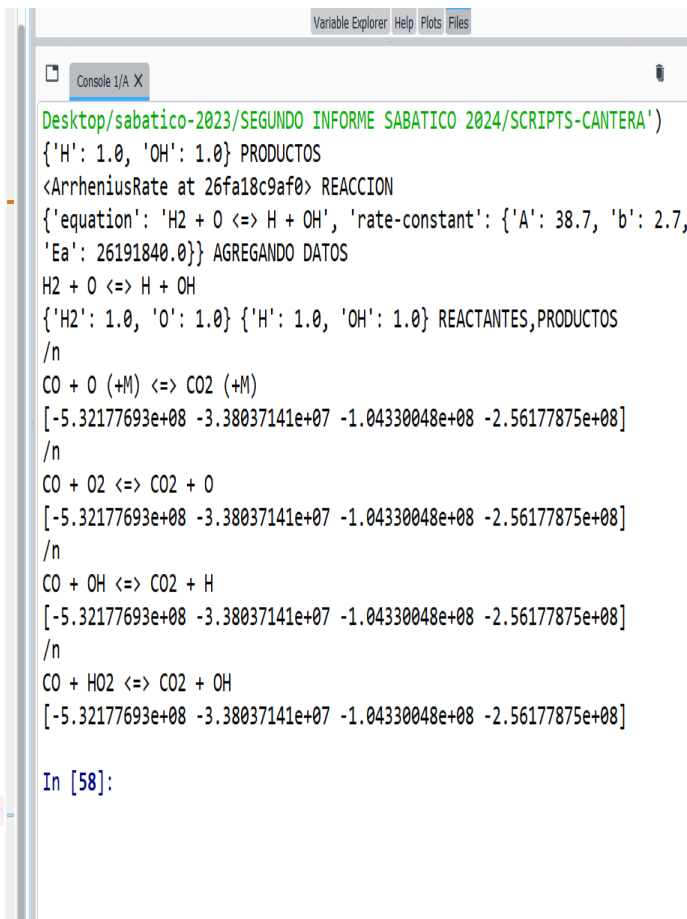
Fig. 1.10 Despliegue de propiedades termodinámicas a P y T así como fracciones molares y composiciones del O₂, CH₄ y N₂

Tratándose de cinética química se pueden emplear los métodos:

“**Solution()**” y “**kinetics()**” que proveen todos los métodos necesarios para calcular las propiedades termodinámicas asociadas con cada reacción, por ejemplo, constantes de velocidad y coeficientes estequiométricos.

Es decir, información adicional que son independientes de la termodinámica como se observa en el siguiente código.

```
5 @author: BORJA Y OTROS
6 """
7 #IMPORTAMOS LIBRERIAS
8 import cantera as ct
9 import numpy as np
10 #REPOSITORIO DE REACCIONES
11 g = ct.Solution('gri30.yaml')
12 r = g.reaction(2) # LA REACCION COMO UN OBJETOT
13
14 r.reactants #DEFINICION DE REACTNTES
15 {'H2': 1.0, 'O': 1.0}
16 r.products #DEFINICION DE PRODUCTOS
17 {'H': 1.0, 'OH': 1.0}
18 r.rate
19 #<ArrheniusRate at 1c0a71f02b0>
20 r.rate.input_data #INCORPORACION DE DATOS
21 {'rate-constant': {'A': 38.7, 'b': 2.7, 'Ea': 26191840.0}}
22
23 #IMPRIMIENDO
24
25 print(r.products, "PRODUCTOS") #PRODUCTOS
26 print(r.rate, "REACCION") #VELOCIDAD DE REACCION
27 print(r.input_data, "AGREGANDO DATOS") #INCORPORANDO DATOS
28 print(r)
29 print(r.reactants, r.products, "REACTANTES, PRODUCTOS") #REACTANTES
30
31 II = [i for i, r in enumerate(g.reactions())
32       if 'CO' in r.reactants and 'CO2' in r.products] #SOLO CO Y CO2
33 for i in II:
34     print(g.reaction(i).equation)
35     print(g.delta_enthalpy[II])
```



```
Variable Explorer Help Plots Files
Console 1/A X
Desktop/sabatico-2023/SEGUNDO INFORME SABATICO 2024/SCRIPTS-CANTERA')
{'H': 1.0, 'OH': 1.0} PRODUCTOS
<ArrheniusRate at 26fa18c9af0> REACCION
{'equation': 'H2 + O <=> H + OH', 'rate-constant': {'A': 38.7, 'b': 2.7,
'Ea': 26191840.0}} AGREGANDO DATOS
H2 + O <=> H + OH
{'H2': 1.0, 'O': 1.0} {'H': 1.0, 'OH': 1.0} REACTANTES, PRODUCTOS
/n
CO + O (+M) <=> CO2 (+M)
[-5.32177693e+08 -3.38037141e+07 -1.04330048e+08 -2.56177875e+08]
/n
CO + O2 <=> CO2 + O
[-5.32177693e+08 -3.38037141e+07 -1.04330048e+08 -2.56177875e+08]
/n
CO + OH <=> CO2 + H
[-5.32177693e+08 -3.38037141e+07 -1.04330048e+08 -2.56177875e+08]
/n
CO + H2O <=> CO2 + OH
[-5.32177693e+08 -3.38037141e+07 -1.04330048e+08 -2.56177875e+08]
In [58]:
```

Fig. 1.11 Obtención del repositorio gri30.yaml propiedades cinéticas y termodinámicas de la reacción.

```

11 @author: BORJA y OTROS
12 """
13 """
14 Ejemplo de un analisis de sensibilidad de una reaccion elemental de oxidacion
15 entre O+H2<=>H+OH
16 El primer gráfico generado muestra cómo cambia la constante de velocidad con
17 respecto a la temperatura.
18 El segundo gráfico muestra el cambio de la energía de activación con respecto
19 a la entalpia de la reacción.
20 los mecanismos de reaccion son diferentes para cada reaccion
21 """
22 import cantera as ct
23 import numpy as np
24 import matplotlib.pyplot as plt
25
26 #Se crea la reaccion O+H2<=>H+OH
27 r1 = ct.Reaction({"O":1, "H2":1}, {"H":1, "OH":1},
28                 ct.ArrheniusRate(3.87e1, 2.7, 6260*1000*4.184))
29 print(r1,"EECUACION DE VELOCIDAD r1")
30 #Create a Blowers-Masel reaction O+H2<=>H+OH
31 r2 = ct.Reaction({"O":1, "H2":1}, {"H":1, "OH":1},
32                 ct.BlowersMaselRate(3.87e1, 2.7, 6260*1000*4.184, 1e9))
33 print(r2,"EECUACION DE VELOCIDAD r2")
34 #Create a Blowers-Masel reaction with same parameters with r2
35 #reaction equation is H+CH4<=>CH3+H2
36 r3 = ct.Reaction({"H":1, "CH4":1}, {"CH3":1, "H2":1},
37                 ct.BlowersMaselRate(3.87e1, 2.7, 6260*1000*4.184, 1e9))
38 print(r3,"EECUACION DE VELOCIDAD r3")
39 gas = ct.Solution(thermo='ideal-gas', kinetics='gas',
40                 species=ct.Solution('gri30.yaml').species(), reactions=[r1, r2, r3])
41
42 gas.TP = 300, ct.one_atm
43 print(gas.TP,"temperatura y presion gas")
44 r1_rc = gas.forward_rate_constants[0]

```

```

48 print(r1_rc,r2_rc,r3_rc, "CONSTANTE DE VELOCIDAD, r1,r2,r3")
49
50 r1_kf = []
51 r2_kf = []
52 T_range = np.arange(300, 3500, 100)
53 for temp in T_range:
54     gas.TP = temp, ct.one_atm
55     r1_kf.append(gas.forward_rate_constants[0])
56     r2_kf.append(gas.forward_rate_constants[1])
57 plt.plot(T_range, r1_kf, label='REACCION # 1 CON K1')
58 plt.plot(T_range, r2_kf, label='REACCION # 2 CON K2')
59 plt.xlabel("Temperatura(K)")
60 plt.ylabel("CAMBIO CONSTANTE DE VELOCIDAD (kmol/(m^3.s)")")
61 plt.title("COMPARACION DE $k_f$ vs. TEMPERATURA DE REACCION PARA k1 y k2",y=1.1)
62 plt.legend()
63
64 # Esta funcion cambia la entalpia de las especies
65 # La entalpia cambia el mecanismos de reaccion
66 def change_species_enthalpy(gas, species_name, dH):
67
68     #Busca las especies por nombre y cambia la entalpia por dH (in J/kmol)
69
70     index = gas.species_index(species_name)
71
72     species = gas.species(index)
73     dx = dH / ct.gas_constant
74     perturbed_coeffs = species.thermo.coeffs.copy()
75     perturbed_coeffs[6] += dx
76     perturbed_coeffs[13] += dx
77
78     species.thermo = ct.NasaPoly2(species.thermo.min_temp, species.thermo.max_temp,
79                                 species.thermo.reference_pressure, perturbed_coeffs)
80

```

E_a vs. ΔH para $O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$

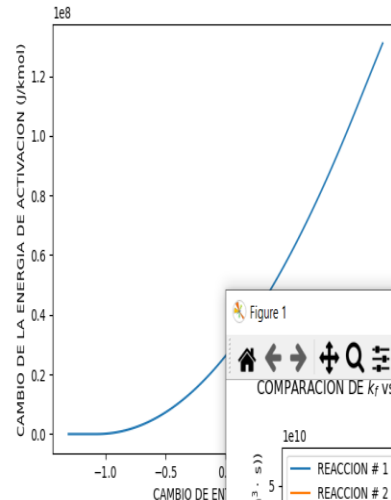
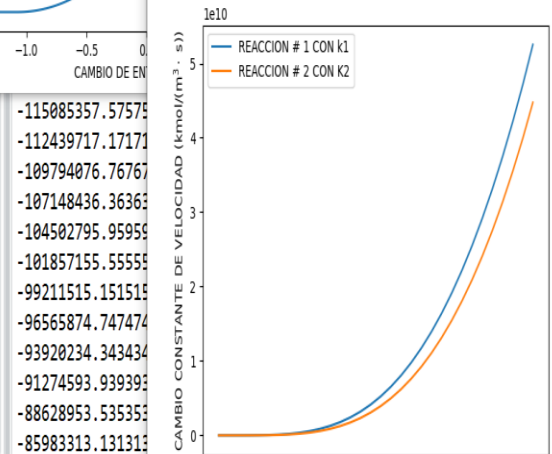


Figure 1
COMPARACION DE k_f vs. TEMPERATURA DE REACCION PARA k1 y k2



-115085357.57575
-112439717.17171
-109794076.76767
-107148436.36363
-104502795.95959
-101857155.55555
-99211515.15151
-96565874.74747
-93920234.34343
-91274593.93939
-88628953.53535
-85983313.13131

09/05/2024 10:04 n.m.
Variable Explorer Help Plots Files

Console 1/A X

```

velocidad.py, wd=C:\Users\SANTI\DESKTOP\SABATICO-2023\SEGUNDO
INFORME SABATICO 2024/SCRIPTS-GASINTEIS')
H2 + O <=> H + OH EECUACION DE VELOCIDAD r1
H2 + O <=> H + OH EECUACION DE VELOCIDAD r2
CH4 + H <=> CH3 + H2 EECUACION DE VELOCIDAD r3
(300.0, 101325.0000000001) temperatura y presion gas
5195.44737317942 946.0507745940241 2533.800177671109 CONSTANTE DE
VELOCIDAD, r1,r2,r3
-130959199.99999988 Entalpia del gas
-128313559.59595948 Entalpia del gas
-125667919.19191903 Entalpia del gas
-123022278.78787869 Entalpia del gas
-120376638.38383824 Entalpia del gas
-117730997.97979799 Entalpia del gas
-115085357.57575744 Entalpia del gas
-112439717.17171699 Entalpia del gas
-109794076.76767665 Entalpia del gas
-107148436.36363631 Entalpia del gas
-104502795.9595958 Entalpia del gas
-101857155.55555546 Entalpia del gas
-99211515.15151507 Entalpia del gas
-96565874.74747461 Entalpia del gas
-93920234.34343427 Entalpia del gas
-91274593.93939382 Entalpia del gas
-88628953.53535348 Entalpia del gas
-85983313.13131303 Entalpia del gas

```

```

81 gas.modify_species(index, species)
82 print(gas.delta_enthalpy[1], "Entalpia del gas ")#Variacion de la entalpia del GAS
83 return gas.delta_enthalpy[1]
84
85 # GRAFICANDO LA ENERGIA DE ACTIVACION DE LA REACCION 2
86 #CON RESPECTO A LA ENERGIA DE CAMBIO
87
88 E0 = gas.reaction(1).rate.activation_energy
89 upper_limit_enthalpy = 5 * E0 #LIMITE SUPERIOR
90 lower_limit_enthalpy = -5 * E0 #LIMITE INFERIOR
91
92 Ea_list = []
93 deltaH_list = np.linspace(lower_limit_enthalpy, upper_limit_enthalpy, 100)
94 for deltaH in deltaH_list:
95     delta_enthalpy = change_species_enthalpy(gas, "H", deltaH - gas.delta_enthalpy[1])
96     gas.reaction(1).rate.delta_enthalpy = delta_enthalpy
97     Ea_list.append(gas.reaction(1).rate.activation_energy)
98 print(Ea_list, "ARREGLO DE ENERGIA DE ACTIVACION")
99 plt.figure()
100 plt.plot(deltaH_list, Ea_list)#GRAFICACION DE ENTALPIA VS ENERGIA DE ACTIVACION
101 plt.xlabel("CAMBIO DE ENTALPIA (J/kmol)")
102 plt.ylabel("CAMBIO DE LA ENERGIA DE ACTIVACION (J/kmol)")
103 plt.title(r"$E_a$ vs. $\Delta H$ para $O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$, $y=1.1$")
104 plt.show()
105
106 """
107 La primera y la segunda reacción tienen la misma ecuación de reacción,
108 pero tienen diferentes mecanismos, por lo que la constante de velocidad directa
109 de la primera reacción es 5195,447 kmol/(m³.s), la constante de velocidad directa de la
110 segunda reacción es 946,051 kmol/(m³.s).
111 Los parámetros de velocidad de la segunda y tercera reacción son los mismos,
112 pero la constante de velocidad directa de la segunda reacción es 946,051 kmol/(m³.s),
113 la constante de velocidad directa de la tercera reacción es 2533,800 kmol/(m³.s)

```

Fig. 1.12 Código abierto explicado para un análisis de sensibilidad paramétrica de una reacción con dos mecanismos de reacción diferentes

1.2. Desarrollo de diagramas de flujo.

La importancia de un diagrama de flujo radica en la simplicidad que significa poder disponer de la visión global de un proceso por complejo que sea en un solo documento.

La visión del manejo de “Diagramas de Flujo” por “Objetos” es una forma sencilla de representación al definir un objeto por sus “Atributos” es decir características esenciales tanto estructurales, físicas, químicas o biológicas y a su vez los métodos que implican su solución numérica.

Todo objeto recibe y da información. Bajo este concepto los principales “Objetos” que pueden ser considerados para la diagramación de un proceso químico

En la figura 13.0 se muestran los equipos-objetos de proceso más comunes para la elaboración de diagramas de flujo, sin embargo, se pueden definir equipos específicos definidos por el usuario con las propiedades que se requieran

podrían ser:

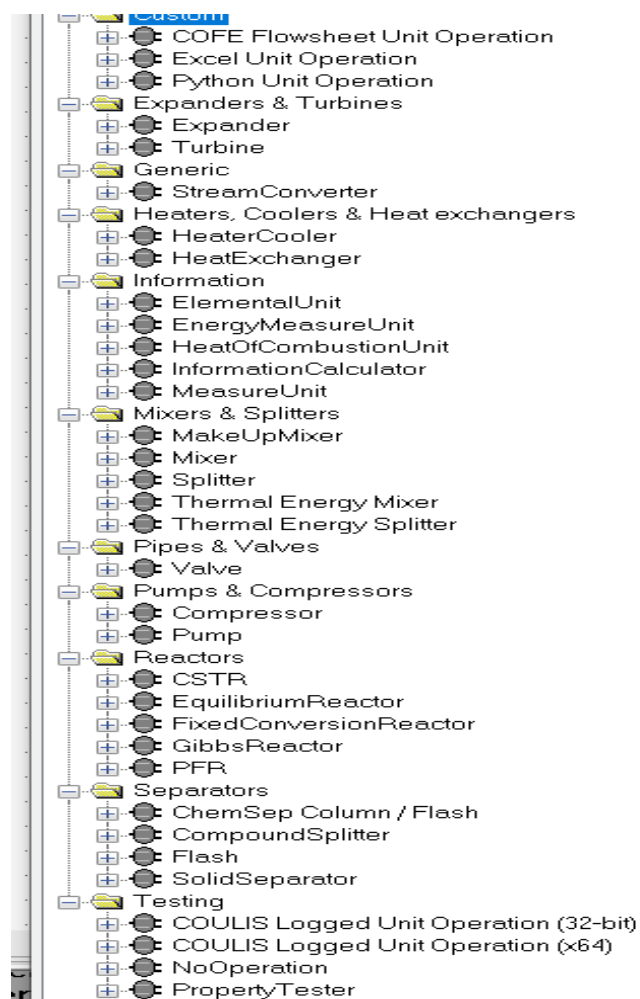


Fig. 1.13 Principales objetos-Equipos que pueden considerarse para la diagramación de un proceso químico

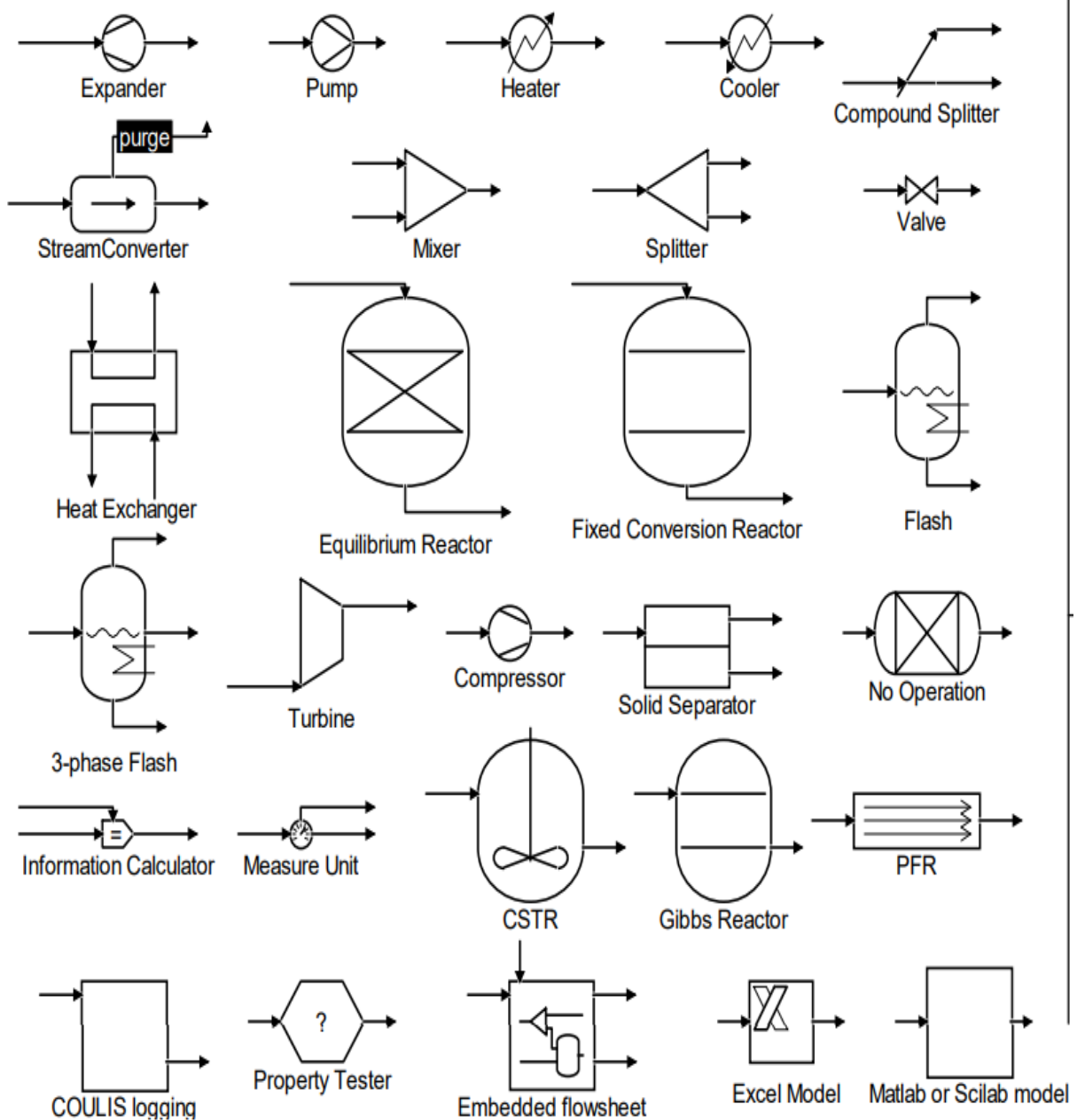


Fig. 1.14 Principales equipos de proceso para generar diagramas de flujo

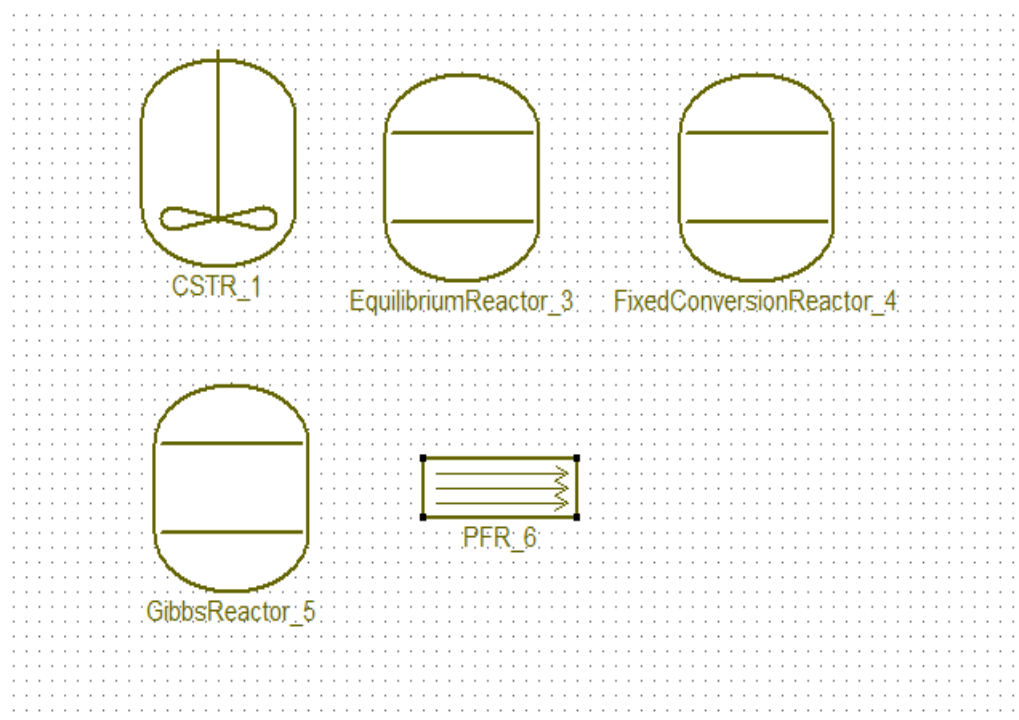


Fig. 1.15 Reactores químicos

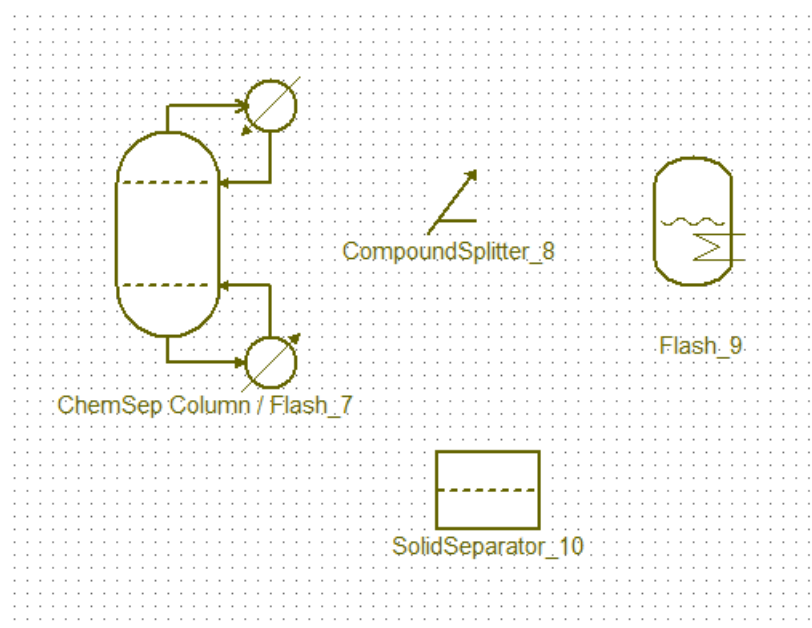


Fig. 1.16 Separadores

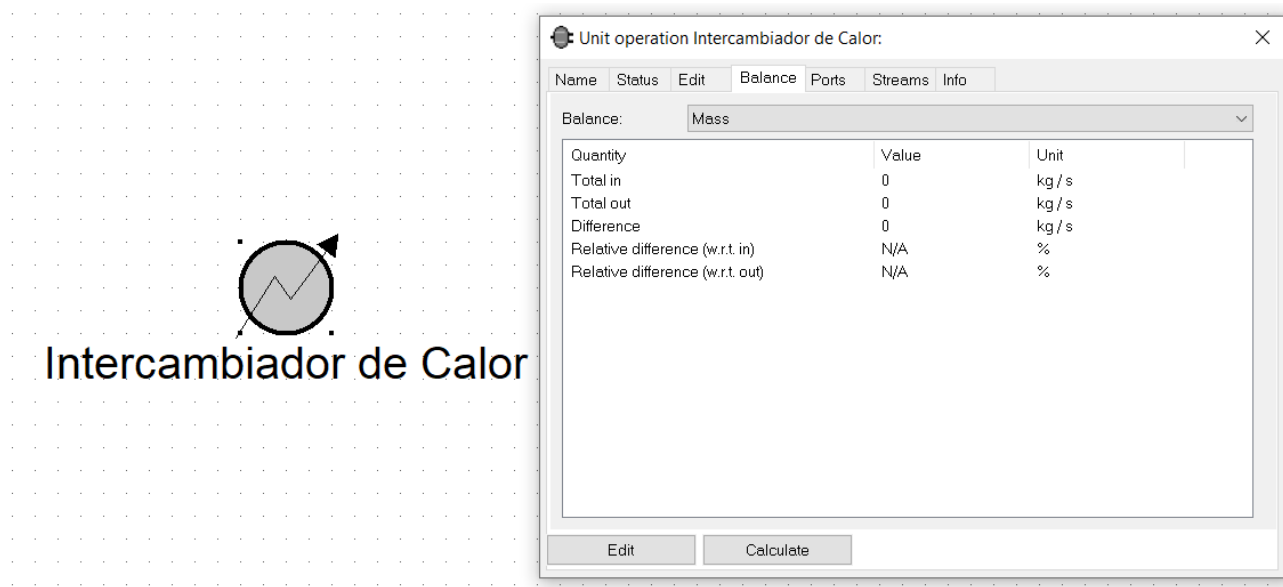


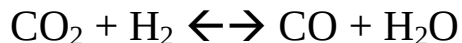
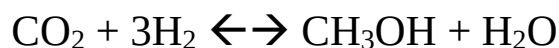
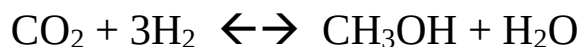
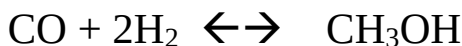
Fig. 1.17 Atributos principales del objeto “Intercambiador de calor”

Ejemplo.

Una de las vías para la obtención del metanol es a partir del gas de síntesis o bien a partir de la deshidrogenación oxidativa del metano. El metanol es una alternativa a los combustibles líquidos siendo factible elaborarse a partir de cualquier fuente de hidrocarburos el cual incluye la biomasa, mediante su oxidación parcial, produciendo gas de síntesis que a su vez se transforma en metanol.

Cinética de Reacción.

La reacción se lleva a cabo entre el monóxido de carbono y dióxido de carbono con hidrogeno, descrita por Vanden Bussche y Fromet.



La reacción es exotérmica y usa un catalizador. y esta descrita por LHHW, (Langmuir-Hinselwood-Hougen-Watson).

LHHW establecen una estructura cinética de la forma:

$$R = (\text{Termino Cinético}) * (\text{Termino momentum}) / (\text{Termino adsorción})$$

La ecuación de velocidad es de primer orden para la producción de metanol a partir del dióxido de carbón de acuerdo a la Ecuación (1)

En la ecuación cinética 2 representa al modelo cinético que produce agua.

$$R_1 = (k_4 p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}) \frac{\left[1 - \frac{1}{K_{E1}} \left(\frac{p_{\text{CH}_3\text{OH}} p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}^3} \right) \right]}{\left[1 + k_3 \left(\frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{H}_2}} \right) + k_1 \sqrt{p_{\text{H}_2}} + k_2 p_{\text{H}_2\text{O}} \right]^3}$$

Ecuación 1

$$R_2 = (k_5 p_{\text{CO}_2}) \frac{\left[1 - \frac{1}{K_{E2}} \left(\frac{p_{\text{CO}} p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{CO}_2} p_{\text{H}_2}} \right) \right]}{\left[1 + k_3 \left(\frac{p_{\text{H}_2\text{O}}}{p_{\text{H}_2}} \right) + k_1 \sqrt{p_{\text{H}_2}} + k_2 p_{\text{H}_2\text{O}} \right]}$$

Ecuación 2

Fig. 1.18 Ecuaciones de Velocidad Cinética y Difusión

Table 1. Kinetic LHHW Parameters

R_1 ($\text{CO}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{H}_2\text{O}$)	
kinetic factor	$k = 1.07 \times 10^{-3}$ $E = 36\,696 \text{ kJ/kmol}$
driving-force expressions	
term 1	
conc. exponents for reactants:	$\text{CO}_2 = 1; \text{H}_2 = 1$
conc. exponents for products:	$\text{CH}_3\text{OH} = 0; \text{H}_2\text{O} = 0$
coefficients:	$A = -23.02581; B = C = D = 0$
term 2	
conc. exponents for reactants:	$\text{CO}_2 = 0; \text{H}_2 = -2$
conc. exponents for products:	$\text{CH}_3\text{OH} = 1; \text{H}_2\text{O} = 1$
coefficients:	$A = 24.388981; B = -7059.7258;$ $C = D = 0$
adsorption expression	
adsorption term exponent:	3
concentration exponents:	
term 1:	$\text{H}_2 = 0; \text{H}_2\text{O} = 0$
term 2:	$\text{H}_2 = -1; \text{H}_2\text{O} = 1$
adsorption constants:	
term 1:	$A = 0, B = 0, C = 0, D = 0$
term 2:	$A = 8.1471087, B = 0, C = 0, D = 0$

Fig. 1.19 Parámetros cinéticos ecuación #1

R_2 ($\text{CO}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$)	
kinetic factor	$k = 1.22 \times 10^9$ $E = 94765 \text{ kJ/kmol}$
driving-force expressions	
term 1	
conc. exponents for reactants:	$\text{CO}_2 = 1; \text{H}_2 = 0$
conc. exponents for products:	$\text{CO} = 0; \text{H}_2\text{O} = 0$
coefficients:	$A = -11.512952; B = C = D = 0$
term 2	
conc. exponents for reactants:	$\text{CO}_2 = 0; \text{H}_2 = -1$
conc. exponents for products:	$\text{CO} = 1; \text{H}_2\text{O} = 1$
coefficients:	$A = -16.184871; B = 4773.2589;$ $C = D = 0$
adsorption expression	
adsorption term exponent:	1
concentration exponents:	
term 1:	$\text{H}_2 = 0; \text{H}_2\text{O} = 0$
term 2:	$\text{H}_2 = -1; \text{H}_2\text{O} = 1$
adsorption constants:	
term 1:	$A = 0, B = 0, C = 0, D = 0$
term 2:	$A = 8.1471087, B = 0, C = 0, D = 0$

Fig. 1.20 Parámetros cinéticos ecuación #2

Tomando en consideración estos parámetros se construye el diagrama de flujo de la Fig. 1.21

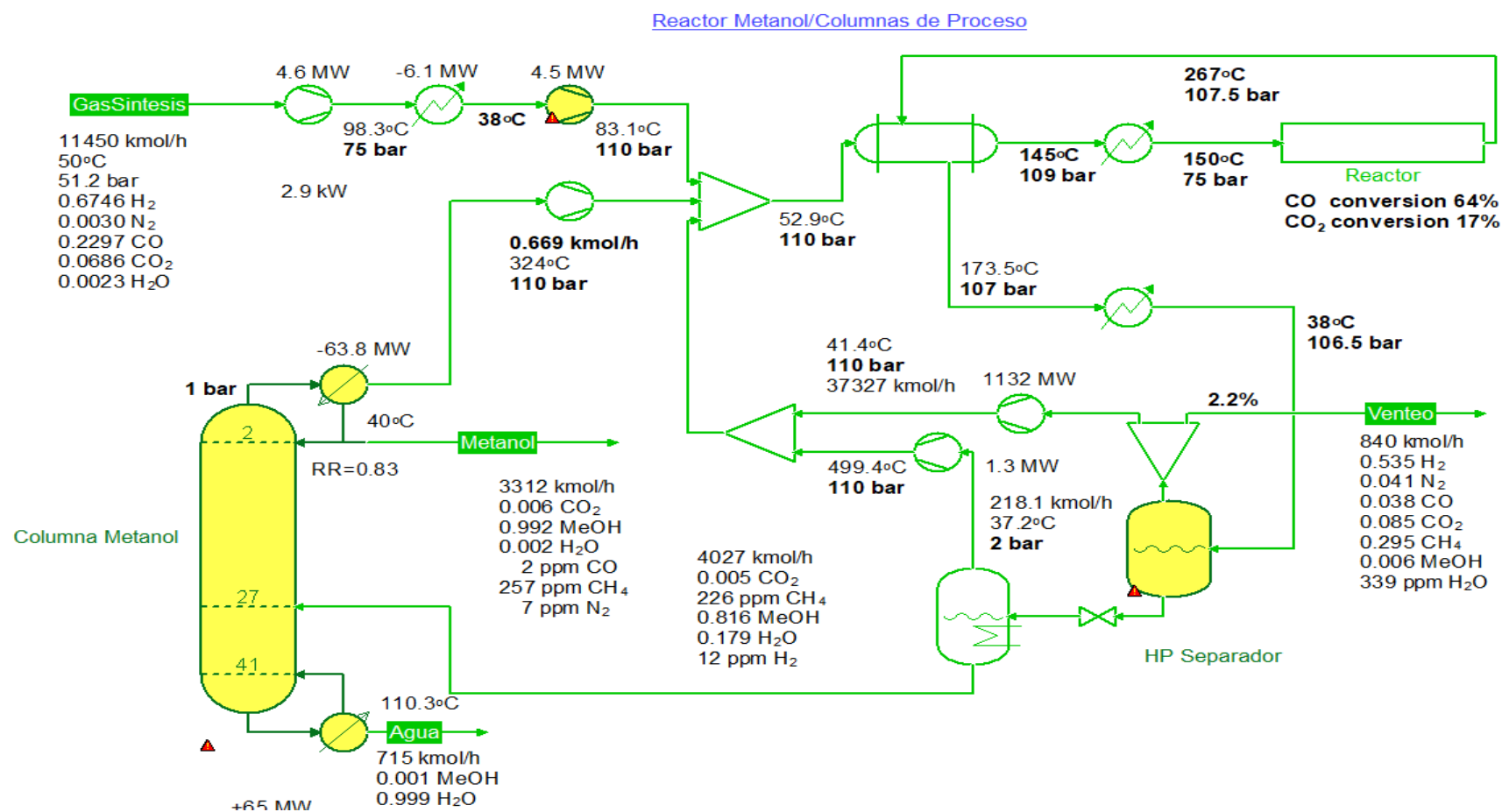


Fig. 1.21 Diagrama de flujo del proceso de obtención de Metanol a partir del gas de Síntesis.

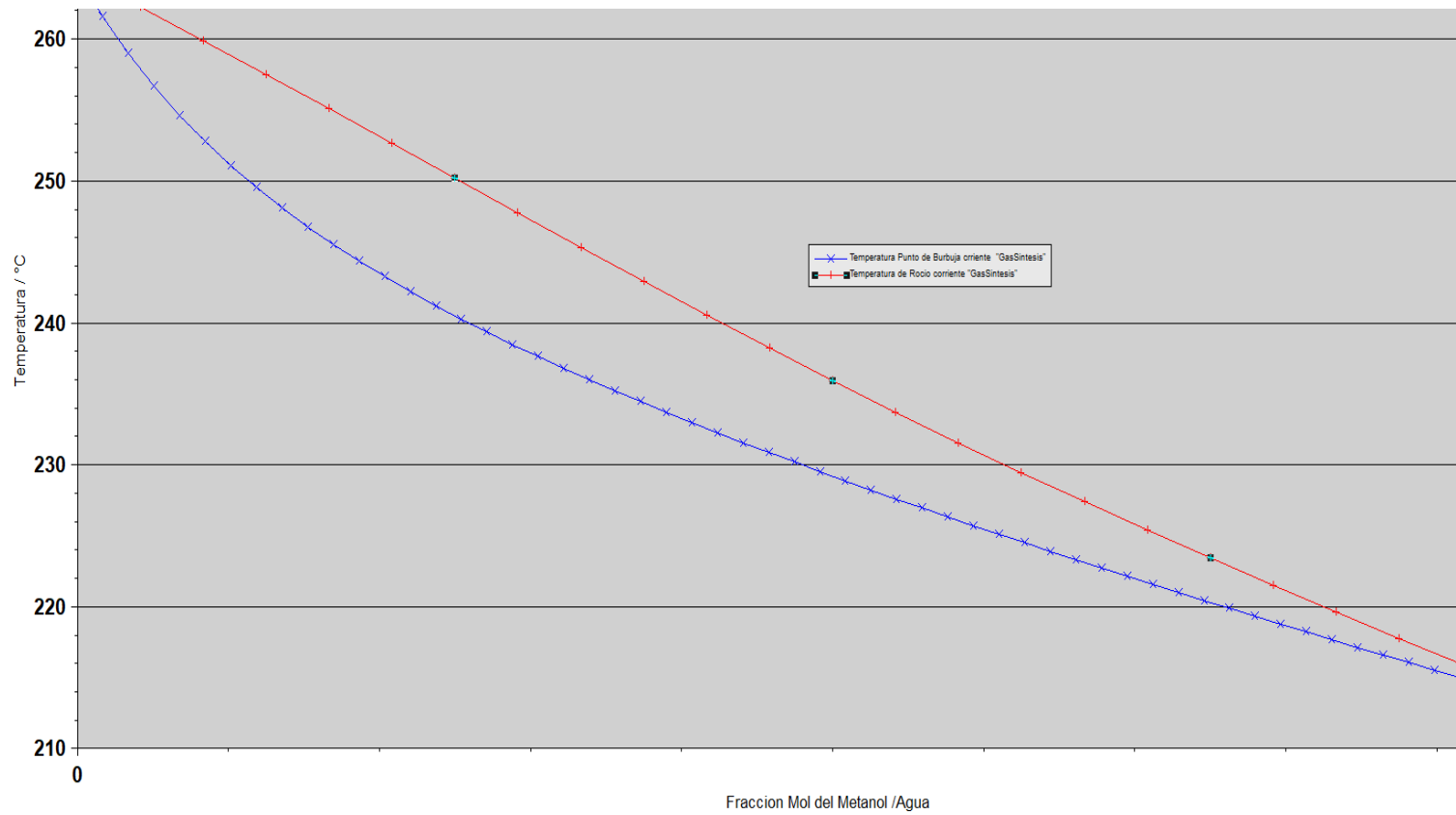


Fig. 1.22 Diagrama de fases Metanol-Agua en condiciones del proceso

Ejemplo:

En los procesos termoquímicos se encuentra la pirolisis lenta y rápida en la que la biomasa se transforma tanto en productos líquidos o sólidos.

La pirolisis rápida se utiliza principalmente para producir principalmente bioaceite líquido, derivado de su poder calorífico alto lo cual lo hace muy atractivo para utilizarse como combustible para el transporte.

En la pirolisis lenta la biomasa favorece el producto sólido es decir la producción del bio-carbón el cual tiene mayor densidad energética, hidrofobicidad, capacidad de molienda, y puede ser utilizado como mejorador de suelos o bien utilizarse como carbón activado o para la elaboración de las baterías tradicionales

La pirólisis rápida convierte la biomasa en líquidos entre el 60% al 70% de la materia prima, el producto es estable, limpio y capaz de usarse como materia prima de alto poder energético.

El proceso consta en un calentamiento muy rápido de biomasa del orden y 2-4 Segundos

Desde el punto de vista de proceso es necesario mantener y controlar la temperatura del reactor de pirolisis alrededor de 500°C

El tiempo de residencia del vapor es del orden de 1-2 Segundos

Se debe enfriar rápidamente los vapores producidos y formar los líquidos de pirolisis

Los subproductos que se obtienen son el Bio-Carbón, utilizado como mejorador de suelos, carbón activado, o bien por su alto poder calorífico como sustituto del coque en la industria metalúrgica, otro sub producto son los no-condensados

Los no-condensados generalmente contienen ácido acético, metanol, aldehídos y cetonas, ciclopentanonas, furanos entre otros

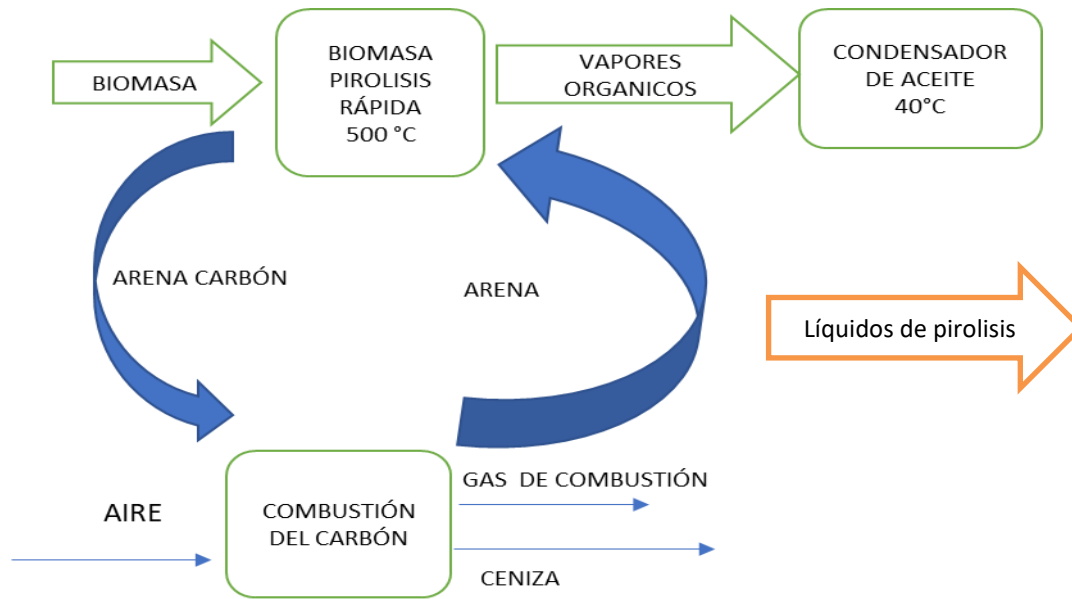
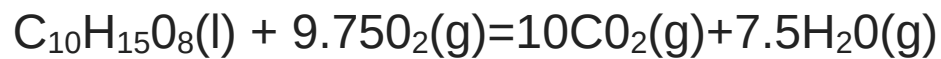


Fig. 1.23 Pirolisis rápida de biomasa

La composición de la biomasa comprende alrededor del 25 % agua, los productos de la combustión se puede escribir como:



Entalpia: 16.5 /Kg en el líquido producto de la pirolisis

TITULO: PIROLISIS RAPIDA DE LA BIOMASA

AUTORES: Sjors de Groot, Tomas Kreuge

A100: PIROLISIS RAPIDA DE BIOMASA

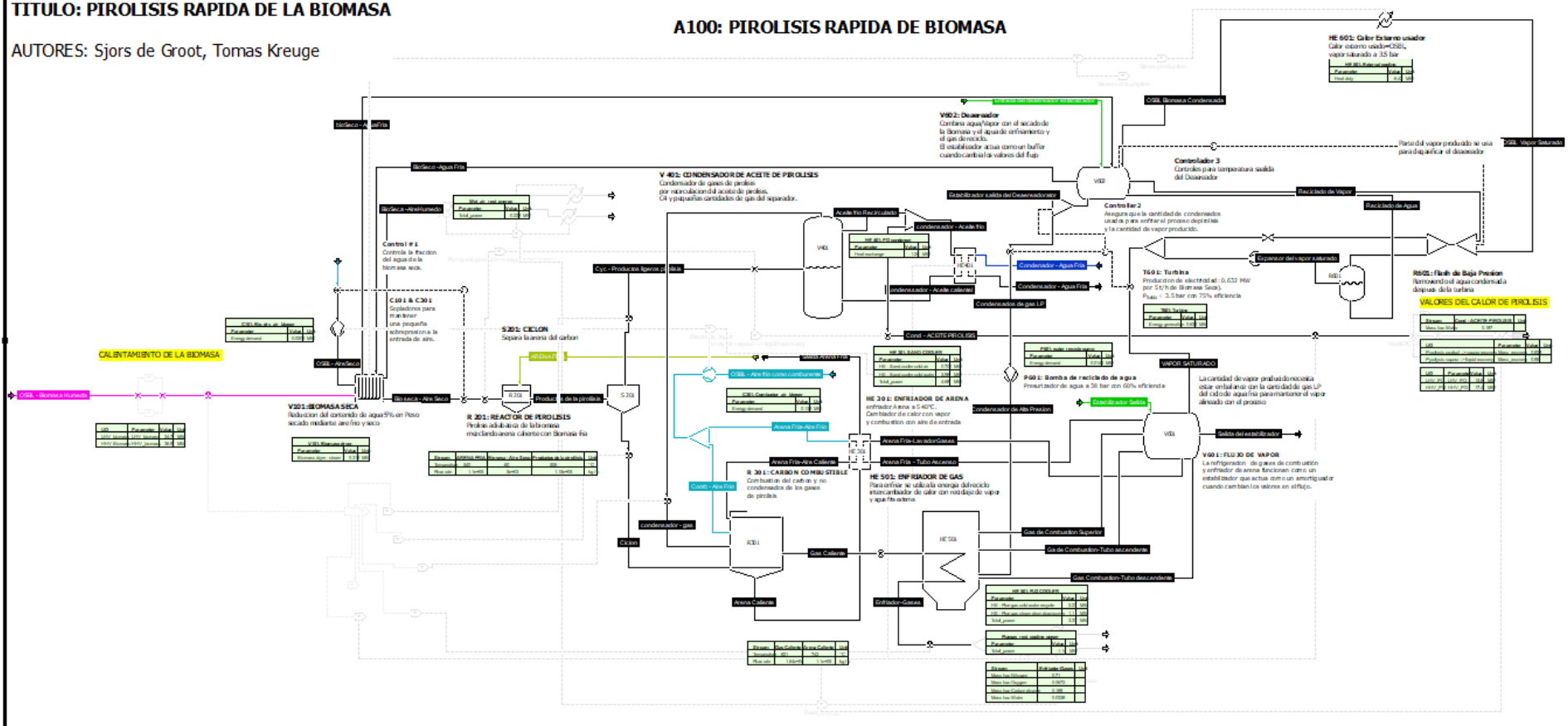


Fig. 1.24 Diagrama de flujo del proceso de Pirolisis Rápida de Biomasa

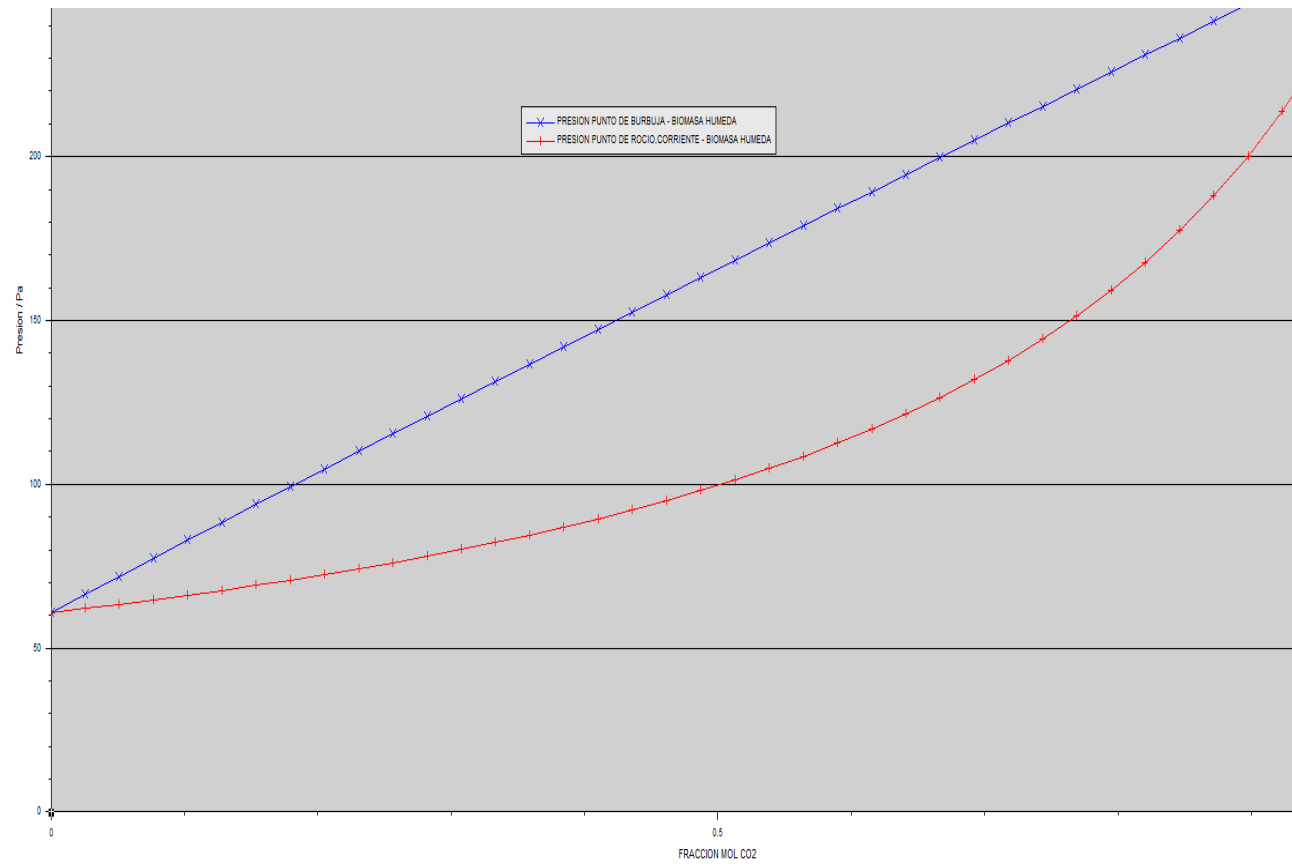


Fig. 1.25 Fracción Mol del CO con respecto a la Presión en el Reactor

1.3 Selección de procesos de separación

La finalidad de los procesos de separación consiste en transformar una mezcla de sustancias diferentes en sus componentes individuales. se pueden clasificar como un proceso físico de transferencia de masa.

Se pueden distinguir diferentes formas de separación de mezclas:

Separación por calor.

Destilación: Se suele usar para mezcla líquidas, o solidos disueltos en un líquido, basada principalmente en sus puntos de ebullición. fusión, cristalización entre otros

Evaporación: Eliminación de una mezcla, o disolución ya sea solido-liquido, liquido-gel, por eliminación del soluto siendo los más empleados.

Secado utilizado para la eliminación de líquido o de un sólido por medio de la vaporización

Absorción: Cuando se quiere retener el soluto en un sólido o en material poroso

Cristalización: Se utiliza para separar una mezcla con muy cercanos puntos de ebullición pero que representan diferencias significativas en sus propiedades de cristalización.

Decantación: este proceso de separación se basa principalmente en la diferencia de densidades de los líquidos involucrados

Electrolisis: Basado principalmente en las características electromagnéticas de sus componentes, por medio del ánodo y cátodo y un medio conductor entre ellos permite la transferencia de los compuestos en función de su carga electromagnética.

Electroforesis. Las moléculas contenidas en un gel se alinean con respecto a un campo eléctrico y ello origina su separación

Elutriacion Separación de las partículas más ligeras de las más pesadas por medio de una corriente de fluido

Floculación. El principio se basa en las diferentes densidades que se logra por medio de un floculante.

Separación magnética como su nombre lo indica tomando en cuenta las propiedades magnéticas de las componentes estas por medio de campos magnéticos se separan

Extracción: La extracción tiene diferentes vertientes como es la “Lixiviación” considerado un proceso unitario que permite la migración de una fase solida a una acuosa, extracción liquido-liquido o bien extracción con solventes o disolventes, o bien la extracción en fase sólida.

De una manera sistemática en las figuras 27 y 28 se resumen de una forma simplificada las estrategias generales a emplear para los diferentes métodos de separación a nivel laboratorio.

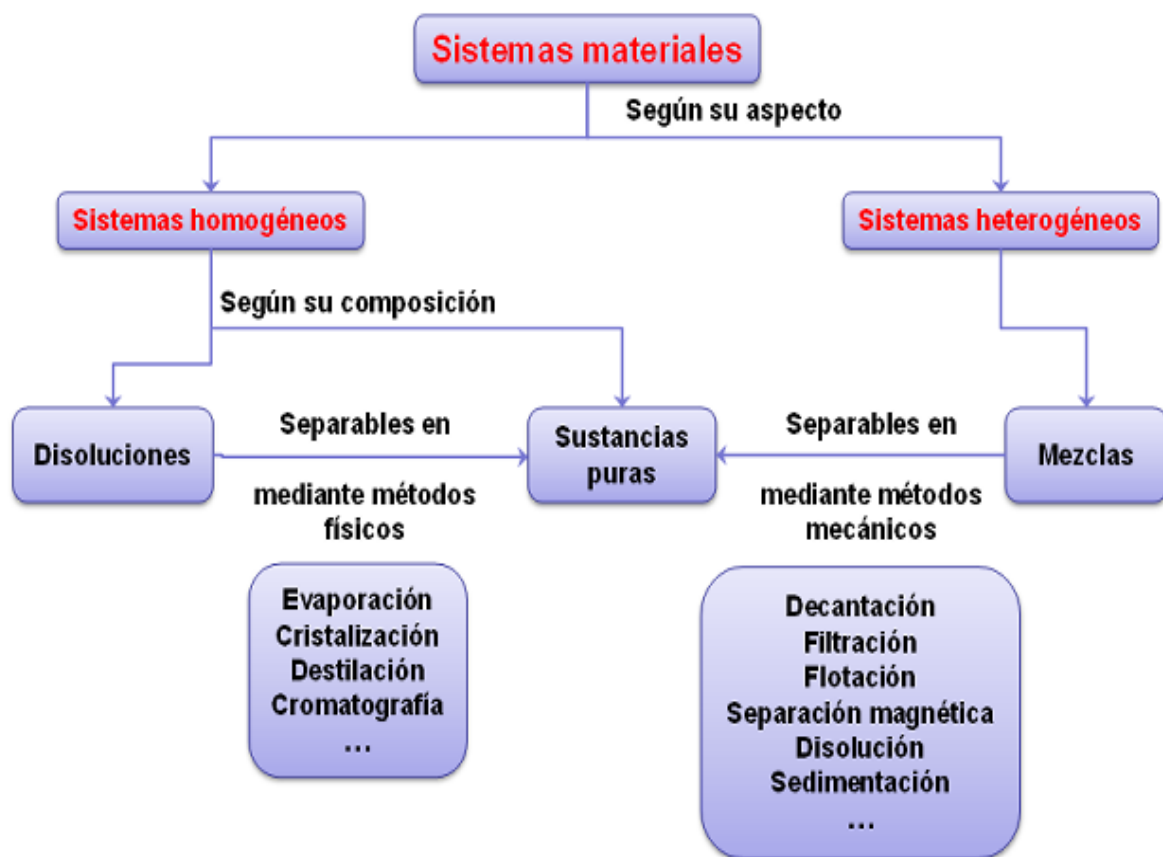


Fig. 1.26 Métodos generales de separación a nivel laboratorio

Métodos de separación de mezclas

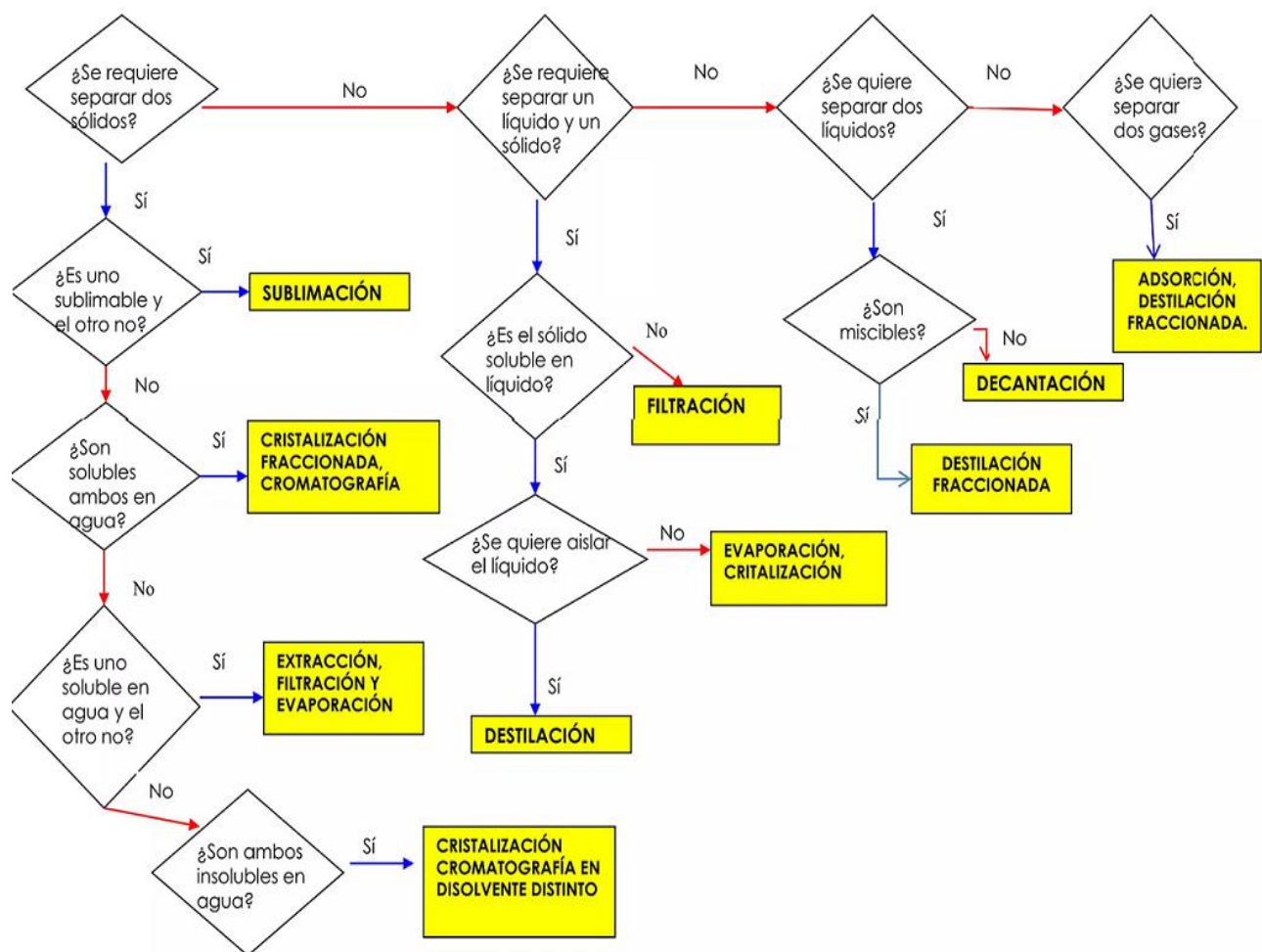


Fig. 1.27 Métodos generales de separación de mezclas a nivel laboratorio.

Las operaciones de separación siguen un orden lógico para garantizar que se cumplan las leyes de la termodinámica y las leyes de transferencia de calor y de masa y momentum, cuando todas ellas cumplen con esos requisitos, los procesos están sujetos a cambios que los ingenieros químicos deben ser capaces de analizar, resolver y poner en práctica.

La simulación de procesos es una de las herramientas útiles para analizar estos cambios, al describir y predecir el comportamiento de un sistema que puede incluir numerosas variables de operación

Los modelos usados en la simulación generalmente se alteran como una estrategia para observar los efectos de cambios internos y externos en el sistema permitiendo anticipar resultados que no estaban considerados en un sistema real.

Ejemplo:

Tomado de : Thomas Brouwer - Towards Sustainable Solvent-Based Affinity Separations - PhD 2021 University Twente

DOI 10.1002/jctb.6808

Published online in Wiley Online Library: 13 June 2021(wileyonlinelibrary.com)
DOI 10.1002/jctb.6808 Comparison of solvent-based affinity separation processes using Cyrene and Sulfolane for aromatic/aliphatic separations
Thomas Brouwer and Boelo Schuur

Resumen:

Recientemente se han informado de equilibrios vapor-liquido de hidrocarburos saturados e insaturados con el disolvente de base biológica dihidrolevoglucosenona, marca registrada como Cyrene, con el objetivo de utilizar el disolvente en la extracción líquido-líquido (LLX) y la destilación extractiva (ED).

En este trabajo para un sistema modelo compuesto de metilciclohexano (MCH) y tolueno (TOL), se compararon procesos basados en LLX y ED en una amplia gama de composiciones basadas en simulaciones como AspenplusV10.

Se realizó una evaluación económica basada en costos totales anuales y se compararon los procesos que utilizan Cyrene en procesos equivalentes utilizando el estándar Sulfolano

Diagrama del proceso.

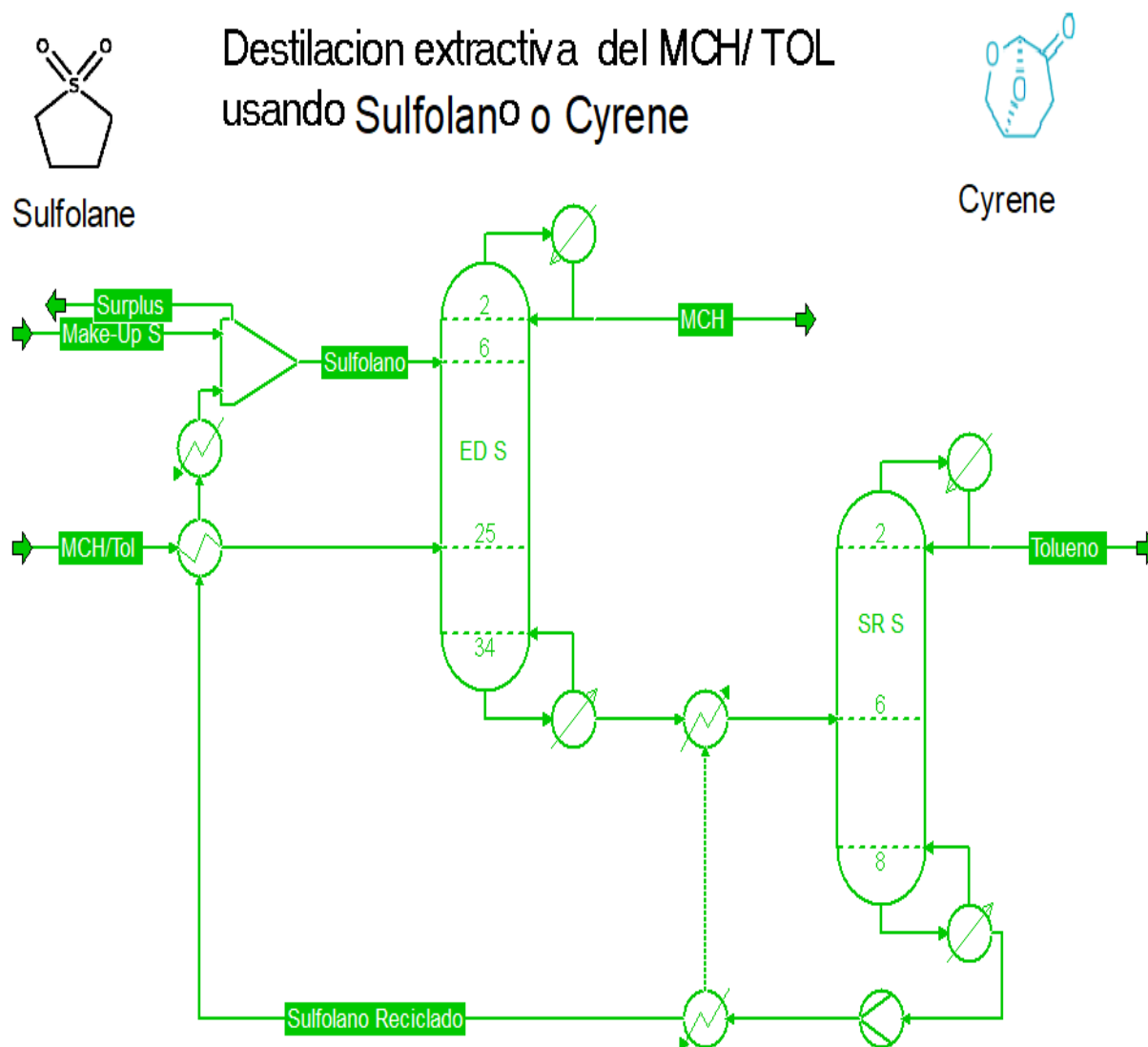


Fig. 1.28 Diagrama de proceso para la destilación extractiva MCH-TOL

Propiedades termodinámicas del Cyrene, tomadas de:

<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jced.3c00461>

Thermodynamic Properties and Phase Equilibria of Dihydrolevoglucosenone and Its Mixtures with Hydrocarbons

Vojtěch Jeřábek,* Vojtěch Štejfá, Martin Klajmon, and Karel Řehák



Cite This: *J. Chem. Eng. Data* 2023, 68, 3361–3376



Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

Supporting Information

ABSTRACT: Thermodynamic and computational study of a biomass-derived solvent dihydrolevoglucosenone (DLG) and its mixtures with hydrocarbons is presented in this work. Density and dynamic viscosity of DLG were measured within the temperature range of 293.15–353.15 K. Phase behavior of DLG above 183 K was analyzed using heat-flux differential scanning calorimetry, providing data on its melting temperature and enthalpy of fusion. Heat capacity of DLG was measured using a Tian-Calvet calorimeter at temperatures between 253 and 353 K. Two static apparatuses were utilized to measure the vapor pressure of DLG in the temperature range of 253–363 K. A thermodynamically consistent description was achieved by simultaneous correlation of experimental values of phase behavior, heat capacities, vapor pressures, and theoretical calculations. Liquid–liquid equilibria (LLE) data in four binary DLG and hydrocarbons (*n*-hexane, cyclohexane, *n*-decane, and *n*-tetradecane) systems were determined using a combination of volumetric, cloud-point, and direct analytical methods. The obtained

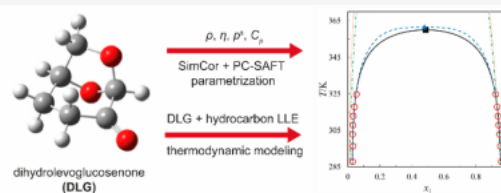


Fig. 1.29 Propiedades termodinámicas y equilibrio de fases del Cyrene.

Destilación extractiva del MCH/TOL usando Sulfolano

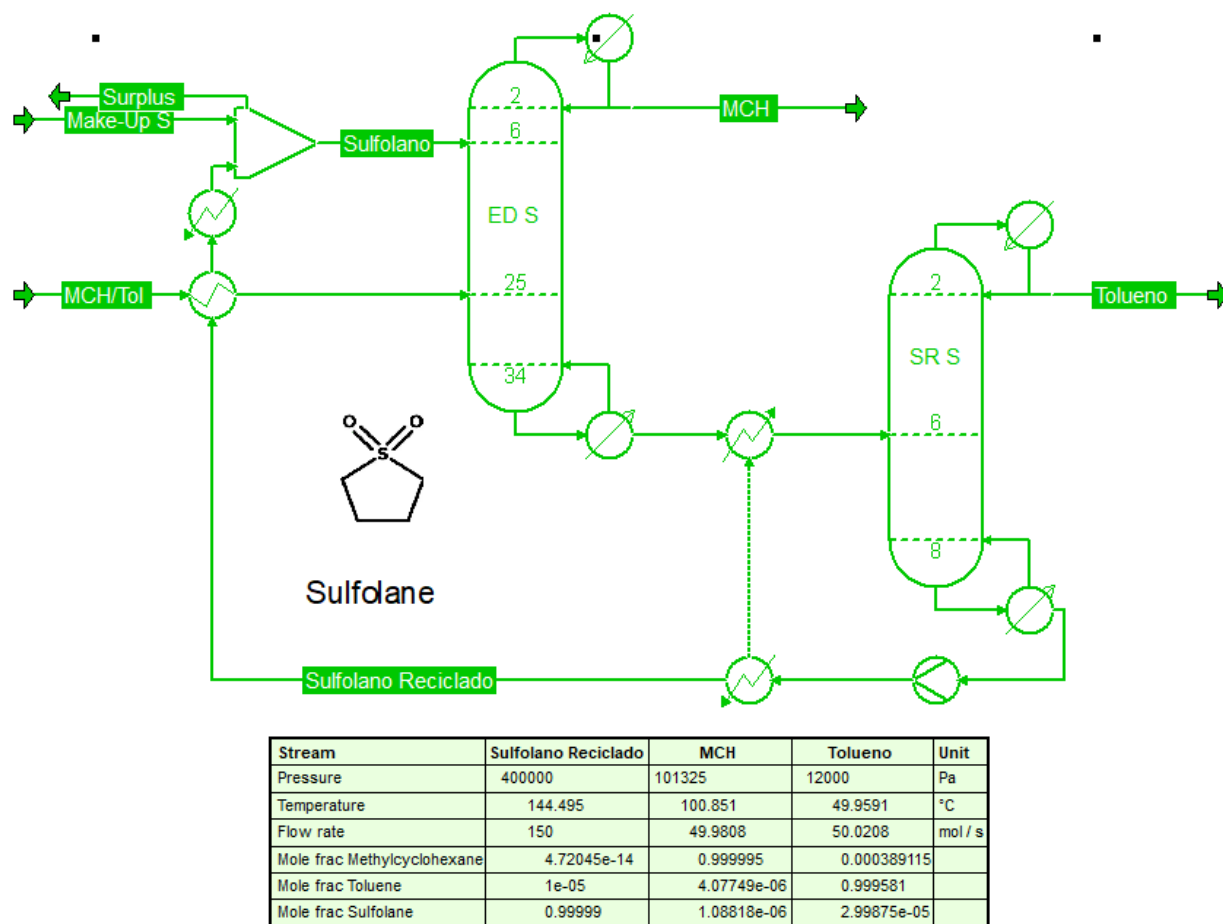
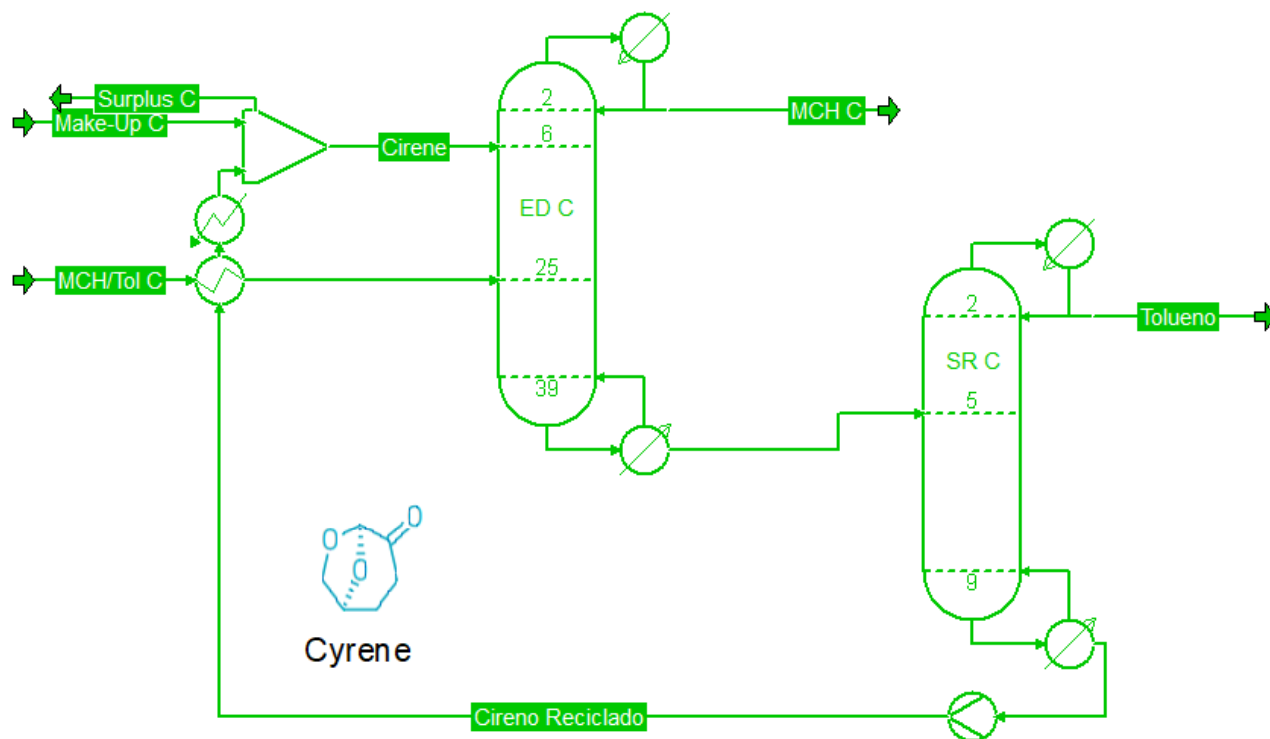


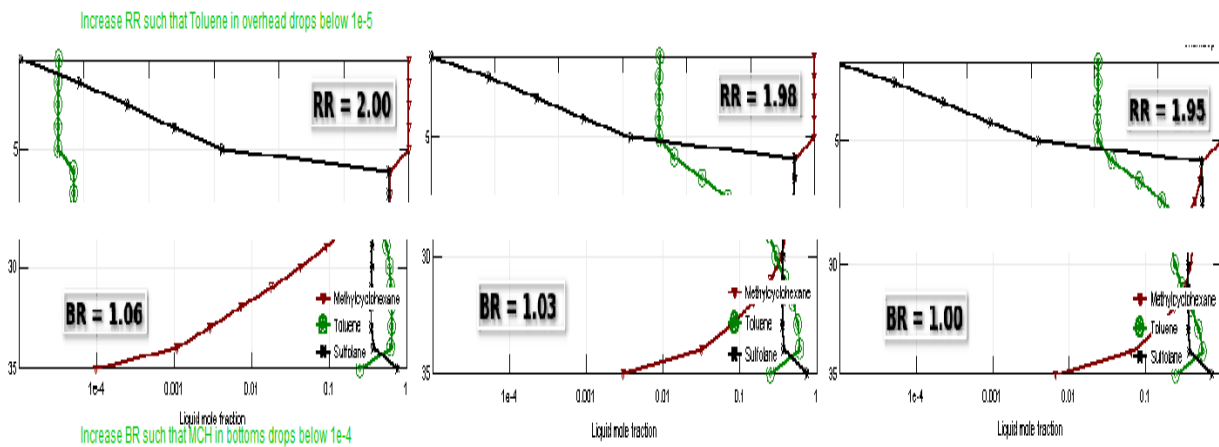
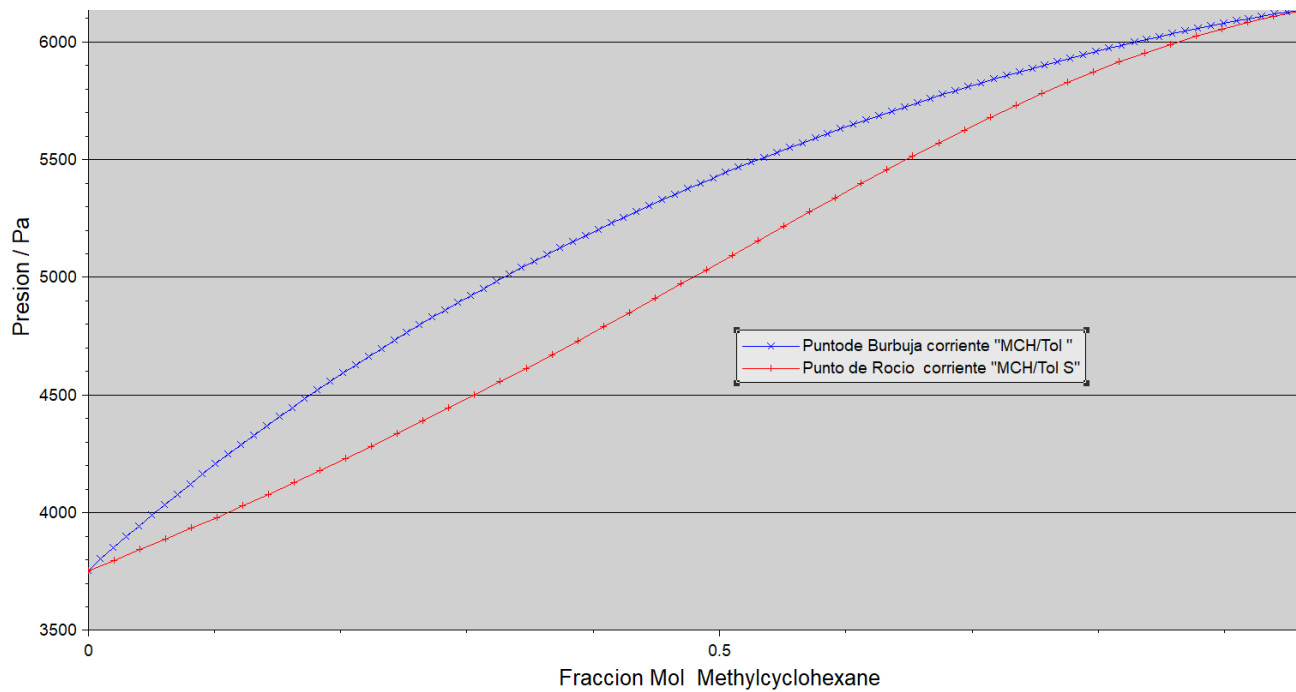
Fig. 1.30 Resultados Destilación extractiva MCH/TOL usando Sulfolane

Destilación extractiva del MCH/TOL usando Cirene



Stream	Cireno Reciclado	MCH C	Tolueno	Unit
Pressure	400000	101325	12000	Pa
Temperature	153.83	100.854	49.9613	°C
Flow rate	149.997	49.9899	50.0145	mol / s
Mole frac Methylcyclohexane	6.78427e-14	0.999917	0.000285736	
Mole frac Toluene	1e-05	6.20526e-06	0.999704	
Mole frac Cyrene	0.99999	7.67044e-05	1e-05	

Fig. 1.31 Resultados Destilación extractiva MCH/TOL usando Cirene



Conclusiones:

EL LLX con sulfolano es más económico con una concentración de alimentación $< 30\%$ mol mientras que para $> 30\%$ mol el proceso con Cirene es más económico.

El Cirene es una alternativa de base biológica apropiada para separar aromáticos y alifáticos

Ejemplo:

Tomado de:

Separation of Natural Gas - W.L. Luyben - Ind.Eng.Chem.Res. Vol. 52 pp. 10741-10753

ADVERTISEMENT

ACS Publications OL Organic Letters SPECIAL ISSUE Read Now

RETURN TO ISSUE < PREV ARTICLE NEXT >

Control of a Train of Distillation Columns for the Separation of Natural Gas Liquid

William L. Luyben*

View Author Information

Cite this: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2013, 52, 31, 10741–10753
Publication Date: July 5, 2013
<https://doi.org/10.1021/ie400869v>
Copyright © 2013 American Chemical Society
[Request reuse permissions](#)

Article Views	Altmetric	Citations
2331	3	18

[LEARN ABOUT THESE METRICS](#)

Share Add to Export

Industrial & Engineering Chemistry Research

Access Through Your Institution Other access options

SUBJECTS: Animal feed, Chemical structure, Distillation, Hydrocarbons, Impurities

Fig. 1.34 Artículo. Separación de líquidos del gas natural

Resumen:

La recuperación de hidrocarburos más pesados del gas natural se logra en una serie de cinco columnas de destilación.

La primera y segunda columnas son columnas criogénicas de alta presión en las que el metano y el etano se separan en el domo de la columna

La tercera columna produce un destilado de propano. La cuarta columna elimina el iso-butano y el n-butano que pasan a la quinta columna para su separación

El producto del fondo de la cuarta columna es una mezcla de hidrocarburos que son más pesados que los componentes C_4 .

La difícil separación de isobutanizador y de alta relación de reflujo está bien controlada mediante una estructura de control inusual que utiliza el funcionamiento del hervidor para controlar el nivel del sistema de reflujo.

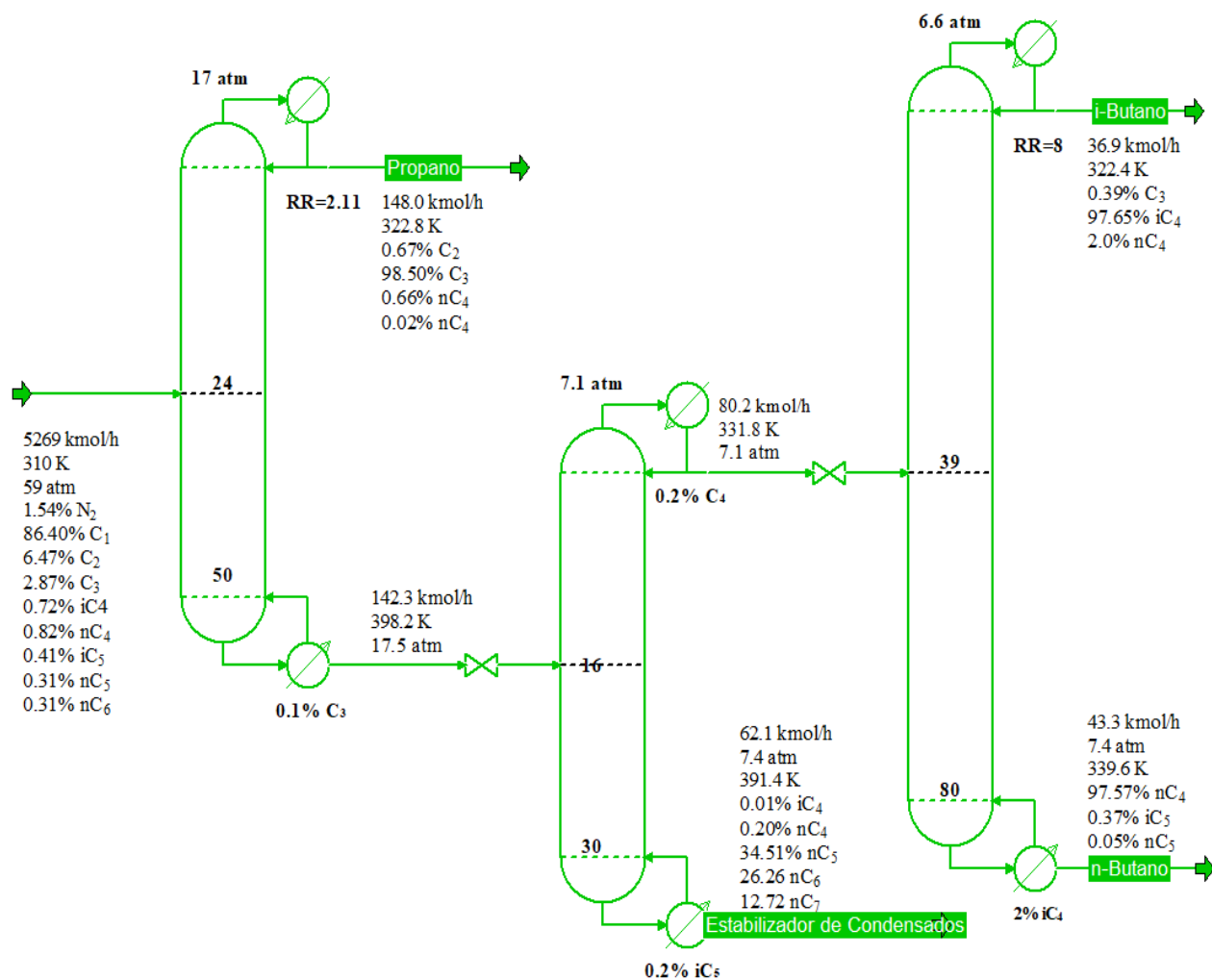


Fig. 1.35 Diagrama de proceso para la separación de Propano/n-Butano/i-Butano

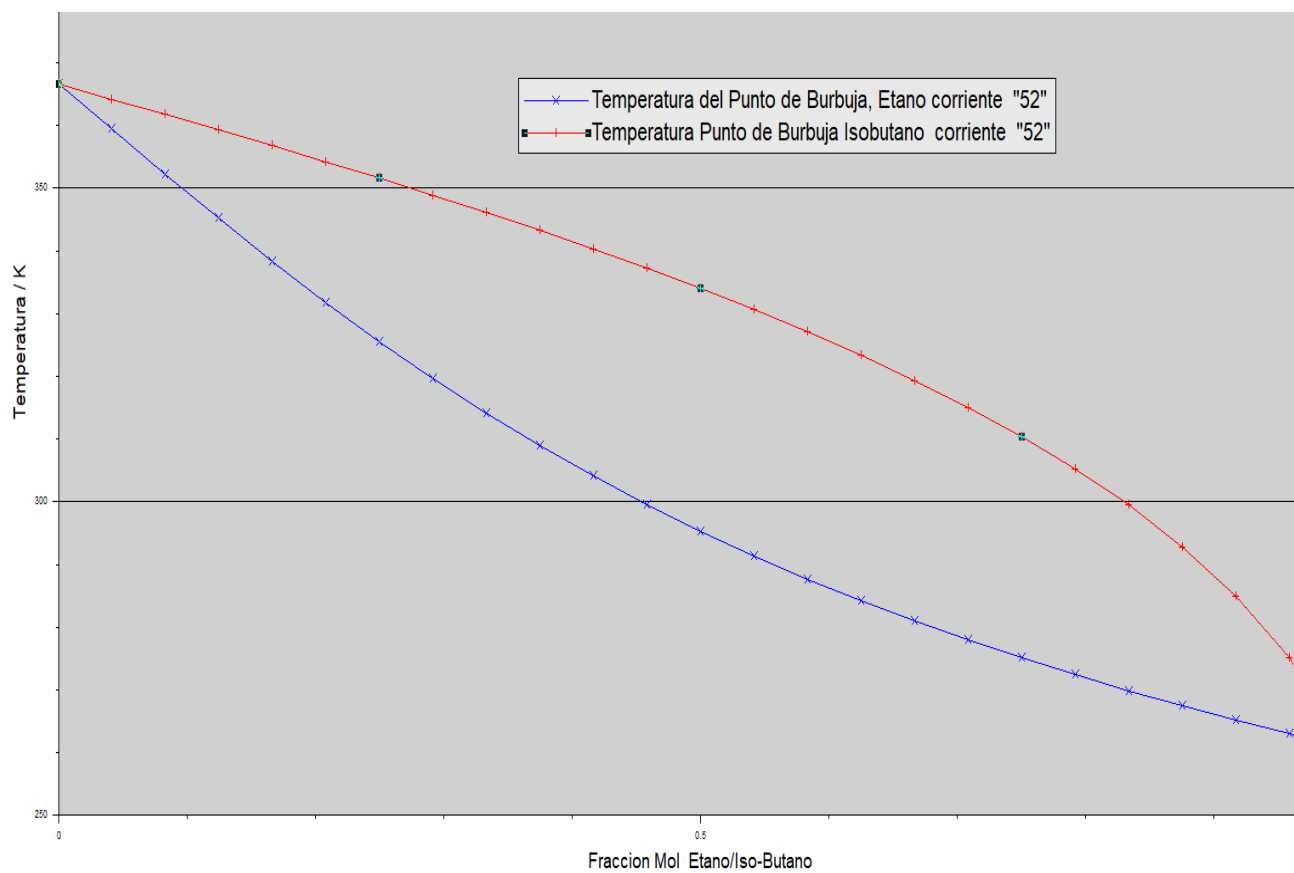


Fig. 1.36 Diagrama de fases de Etano/I-Butano

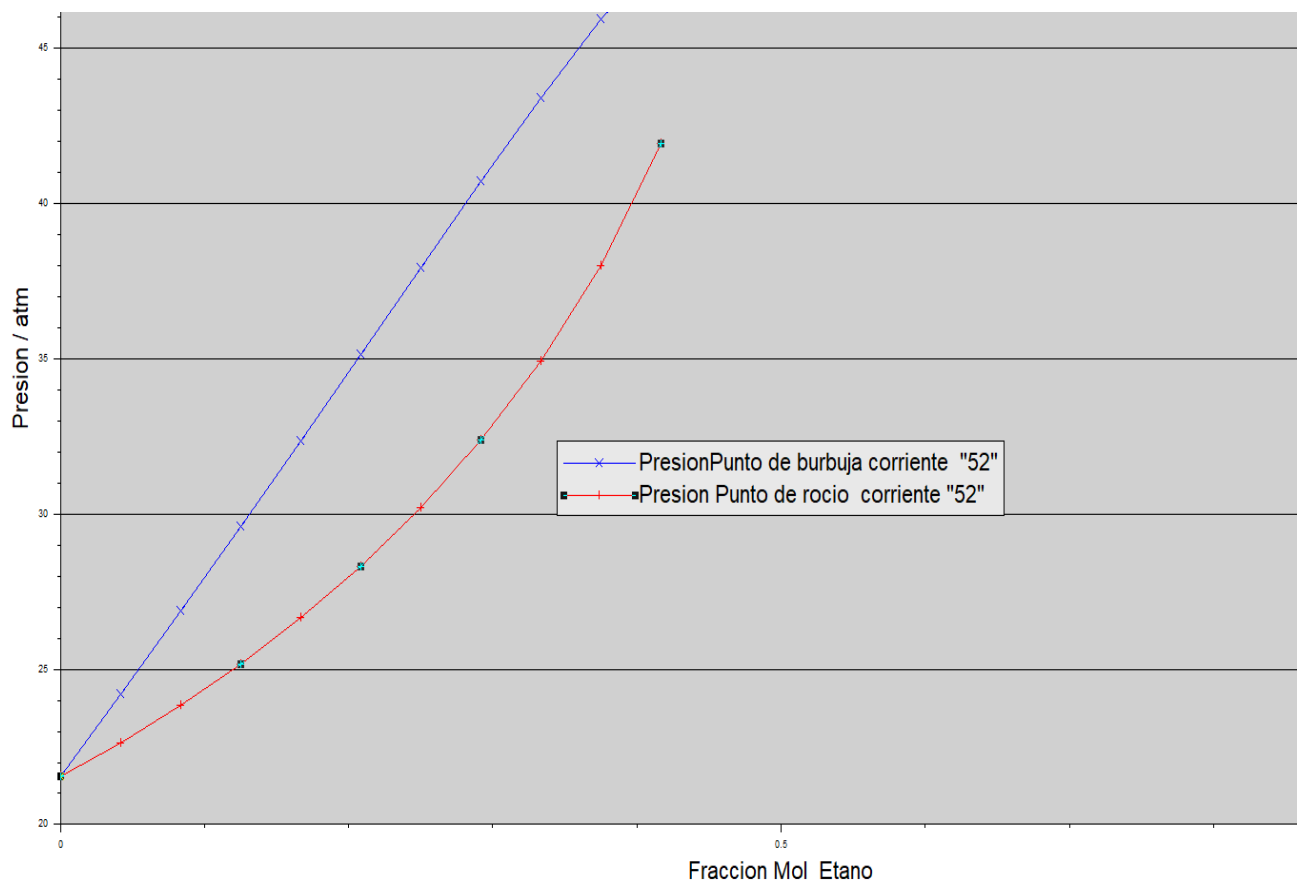


Fig. 1.37 Diagrama de Presión/Fracción mol Etano

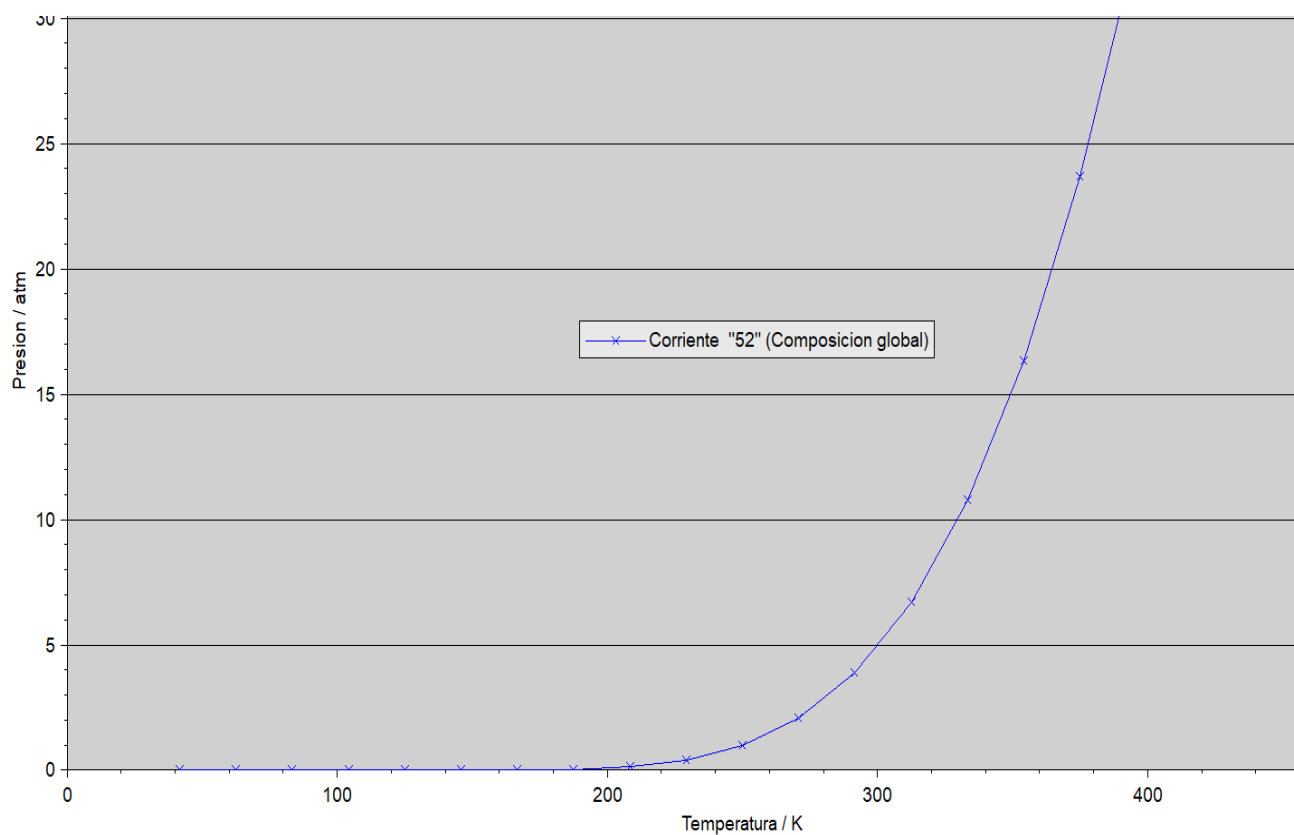


Fig. 1.38 Diagrama de Presión/Fracción mol Etano

Conclusiones:

Las condiciones de operación de las dos columnas y una estabilizadora para obtener en la primera 98.8 % de Propano, y en la segunda el 97.57 % de Butano no se lograrían si las condiciones de flujo y temperatura no fueran tan precisas.

Tema 2: Integración de Energía

2.1. Significado del acercamiento mínimo de energía

Considerando la segunda ley de la termodinámica que se refiere al calor que fluye de un objeto frío a un objeto caliente, este flujo energético es posible minimizar si hablamos de un sistema cerrado, con parámetros externos constantes y entropía constante, en estas condiciones la energía interna disminuirá y su valor será cercano al mínimo, todo esto en el equilibrio solamente.

La estabilidad de un sistema se alcanza al minimizar su energía total, es decir la búsqueda permanente de cualquier sistema sea biológico, químico, térmico etc. en donde la energía se transfiere hasta lograr un equilibrio térmico

La energía Libre, definida como la energía disponible para realizar un trabajo se minimiza en el estado de equilibrio termodinámico, lo cual lleva a un sistema más estable

La entropía mide la tendencia al desorden, al lograr el mayor desorden, máxima entropía, la energía se minimiza.

La naturaleza tiende a llevar sus procesos utilizando la menor cantidad de energía posible, y hace que el sistema se haga mas estable al reducir su energía total.

En la figura 2.1 observamos que mientras la entropía crece (S) la energía interna (U) disminuye y la propiedad extensiva, X_j^1 , mejora y el equilibrio del sistema aumenta, (E) hasta lograr su máximo.

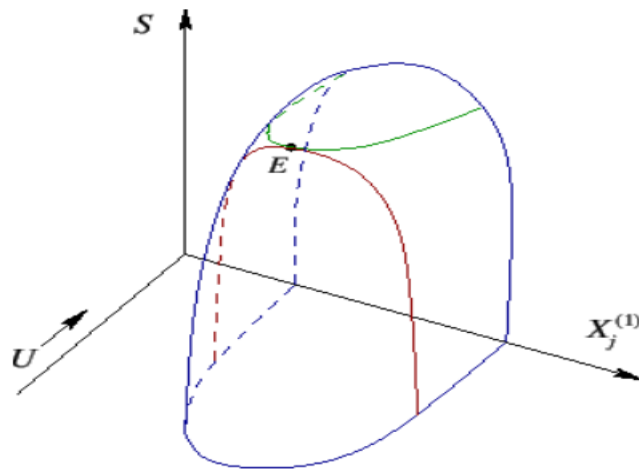


Fig. 2.1 Principio mínimo de energía

2.2. Determinación de redes con el método de diagramas de contenido de calor.

Para el diseño de una nueva planta industrial o en la optimización de una ya existente, es necesario lograr el uso eficiente de la energía y la reducción de sus efectos ambientales, y se basa principalmente en diseñar redes de intercambio de calor de tal manera que las corrientes calientes se enfríen calentando las corrientes frías, este proceso se denomina. Integración Energética.

Conceptos:

Valor energético:

Calor Sensible	$Q = mC_p(T_{entrada} - T_{salida})$
Calor latente:	$Q = m\lambda$

Con ($Q < 0$), la corriente es fría es necesario adicionar calor para obtener la temperatura de salida.

Con ($Q > 0$), la corriente es caliente es necesario quitar calor para obtener la temperatura de salida.

Calor neto:	$q = Q_i$
-------------	-----------

Para lograr el balance energético $q=0$ restando o sumando la cantidad de calor por cada corriente del sistema

Análisis PINCH.

El Análisis Pinch es un conjunto de herramientas que permiten diseñar redes de intercambio de calor

Es un método termodinámico que permite determinar los niveles mínimos de energía necesarios en un sistema.

Se basa en el cálculo de cambios de entalpías y la dirección del flujo de calor

Los intercambiadores de calor tienen una condición única basada en su configuración y sus condiciones de operación derivado de esto solo tienen un valor máximo de transferencia de calor

Existe un límite de transferencia basada en las temperaturas mínimas de cada corriente, la $\Delta T_{\min}$ es la diferencia mínima permitida.

Es necesario determinar la dirección del flujo de calor (de Temperatura alta a baja).

La $\Delta T_{\min}$ se conoce como punto o condición PINCH.

Objetivo del análisis PINCH

Generar un ahorro de costos derivado de una integración de los procesos de transferencia de calor, Identificar los costos energéticos

Determinación del punto PINCH

Método para el análisis PINCH

- 1.- Identificar las corrientes calientes, frías
- 2.-Obtener datos térmicos de las corrientes.
- 3.-Definir la $\Delta T_{\min}$.
- 4.-Construir las curvas compuestas y la curva compuesta total.
- 5.-Cumplir el objetivo en reducción del costo de energía.

DATOS:

- 1.-Temperatura de suministro (TS °C)
- 2.-Temperatura objetivo/meta (TO °C)
- 3.- Razón de flujo de capacidad calorífica (C, kW/ °C):
- 4.- Cambio de entalpía (ΔH)

$$C = m C_p$$

$$\Delta H = CP (TS - TO)$$

Donde:

C	Capacidad Calorífica
m	flujo másico
Cp	Calor específico
ΔH	Entalpia
TS	Temperatura de Suministro
TO	Temperatura Objetivo

,

EJEMPLO:

Tratamiento térmico convencional para un reactor de proceso

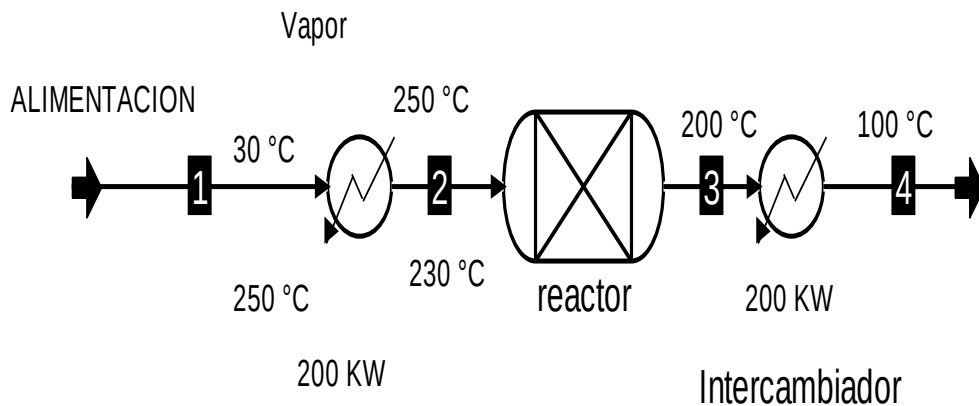


Fig 2.2 Diagrama de Flujo Inicial

Consideraciones generales:

- 1.- Costo del vapor a 260 °C, \$ 2.81/106 kJ
- 2.- Costo de agua fría a 20 °C , 0.496/106 kJ
- 3.- Costo de intercambiadores de calor: \$ 6,000 + (700)/m²)^{0.65}
(Correlación de diseño)
- 4.-Costo de operación: \$19,994.70 /año

Tabla 2.1 Datos de Corrientes

#	Nombre	T Suministro °C	T Objetivo °C	Flujo Cp (kW/°C)	ΔT kw
1	Alimentación	30	205	20	2900
2	Salida intercambiador	230	160	23	2100
3	Descarga Reactor	200	160	18	1980
4	Salida Producto	100	70	35	5250

Cálculo de la ΔT_{min} Inicial:

- 1.-Determinar el Coeficiente global de transferencia de calor, “U” que es la resistencia del intercambiador para la transferencia de calor
- 2- Geometría del intercambiador
- 3.- Para intercambiador de coraza y tubos generalmente procesos baja temperatura generalmente entre 3 – 5 °C
- 4.- Procesos de alta temperatura (refinación y petroquímica): entre 10 – 40 °C
- 5.- Para intercambiador de placas entre 2 – 3 °C
- 6.- La ecuación de transferencia de calor será:

$$Q = U \times A \times LMTD$$

Donde LMTD está dado por:

$$LMTD = \frac{(TSh - TTc) - (TTh - TSc)}{\ln [(TSh - TTc)/(TTh - TSc)]}$$

Criterios:

Si son iguales es una mala selección derivado a que aumentan costos

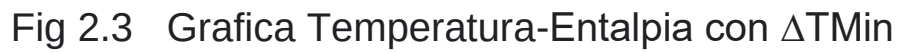


Diagrama de flujo de un reactor con intercambio de calor y vapor. El proceso comienza con la alimentación (ALIMENTACION) que entra en el reactor a 30 °C. El reactor produce vapor (VAPOR) a 250 °C y 80 KW. El vapor se condensa en un intercambiador de calor, liberando 120 KW. El agua fría (Agua Fria) entra en el intercambiador a 20 °C y sale a 160 °C. El producto (PRODUCTO) sale del reactor a 100 °C. El agua fría se calienta en el intercambiador y sale a 150 °C. El vapor se calienta en el intercambiador y sale a 230 °C. El agua fría se calienta en el intercambiador y sale a 160 °C. El producto se calienta en el intercambiador y sale a 100 °C.

ALIMENTACION

VAPOR

PRODUCTO

Agua Fria

reactor

Intercambiador

1

2

3

4

5

6

7

30 °C

250 °C

230 °C

200 °C

40 °C

20 °C

160 °C

100 °C

150 °C

80 KW

120 KW

Fig 2.4 Diagrama de Flujo Propuesto

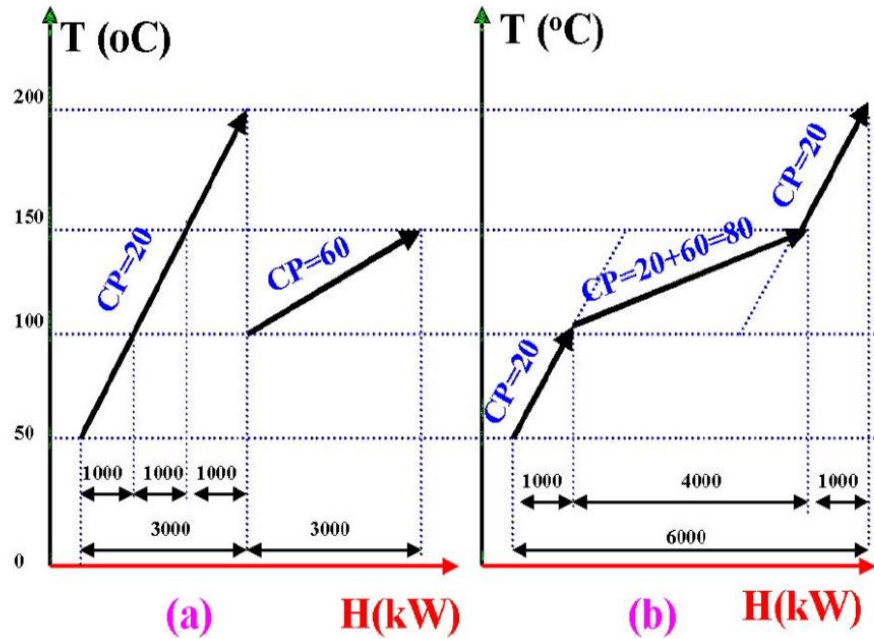


Fig 2.5 Curvas compuestas

El costo total dependera del numero de intercambiadores de calor, Area total y la forma en que los intercambiadores se distribullan en el proceso.

Un area de un intercambiador de calor simple se puede calcular por medio de:

$$A=Q/[U \times T_{LMTD}]$$

Se debe considerar un 10 % adicional, para el equipo de seguridad.

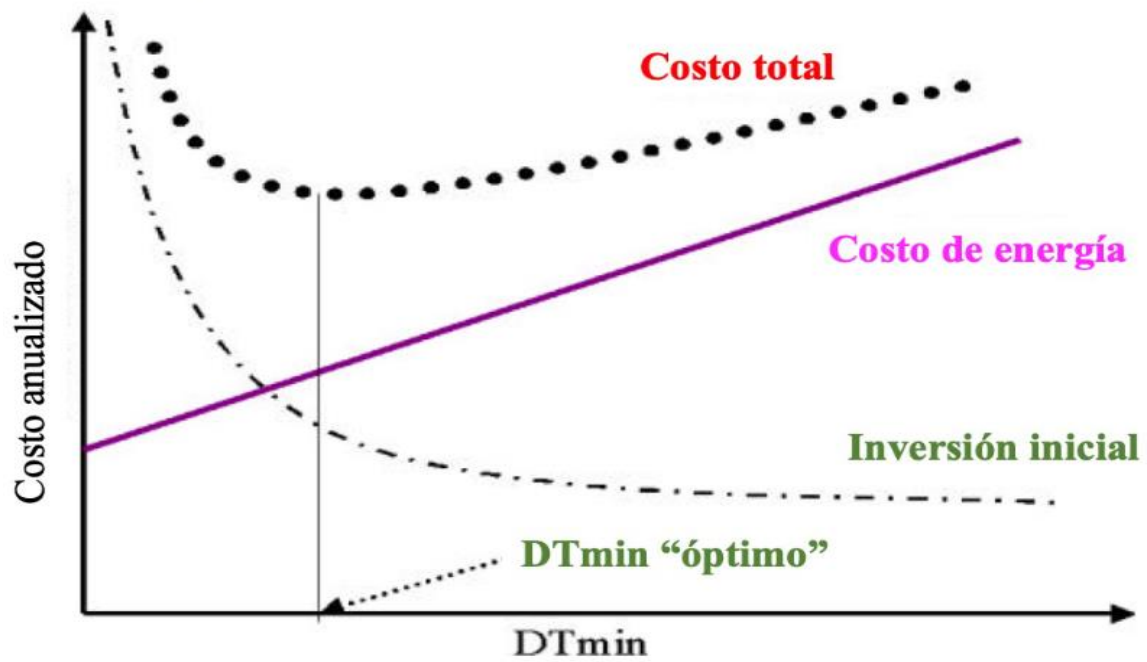


Fig 2.6 Inversion total de la red de intercambiadores

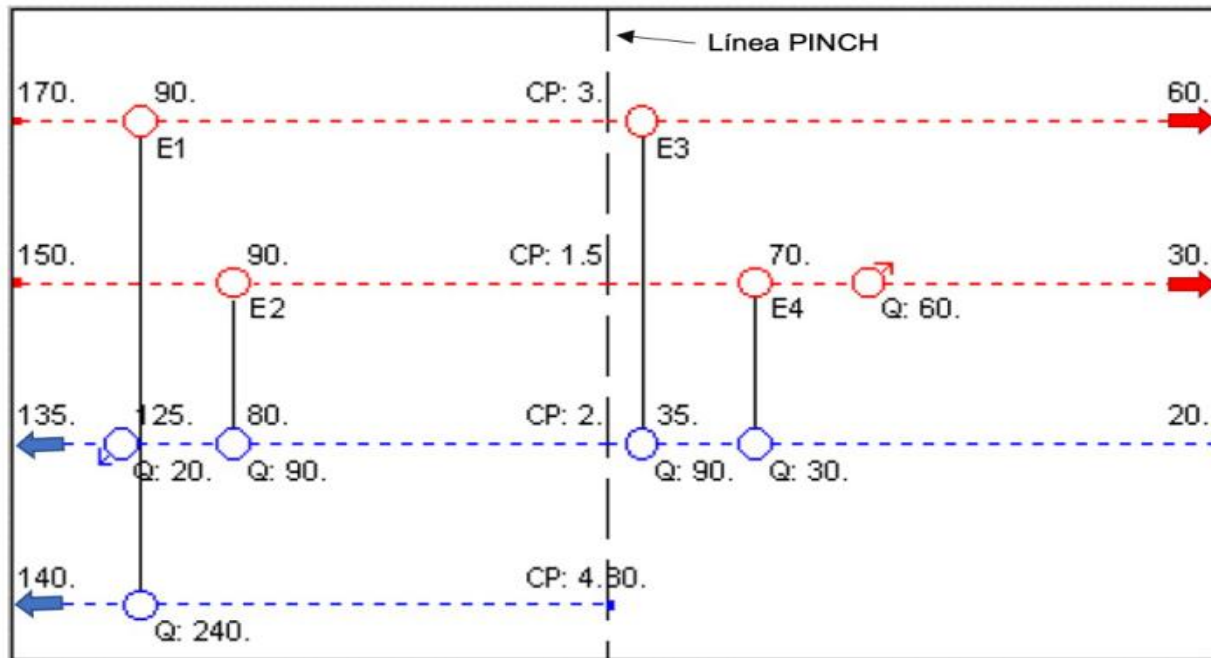


Fig 2.7 Diseño de la redes de intercambiadores

Conclusiones generales:

El punto pinch divide el sistema en dos elementos

Arriba del punto pinch se definen altas temperaturas

Abajo del punto pinch se define temperaturas bajas

Arriba de el punto pinch se requir enfriar y por debajo de el solo calentar

El punto pinch es unico para cada proceso

2.3. Determinación de redes con el método del punto de pliegue

La metodología de punto de pliegue es un desarrollo de redes de intercambio de calor óptimas, permitiendo utilizar su valor mínimo manteniendo un área mínima de intercambio de calor.

La flexibilidad en su diseño de redes de intercambio de calor da la posibilidad de escoger diferentes alternativas de solución.

Conceptos Generales:

Metas energéticas.

Previo al diseño de Intercambiadores de calor es necesario proporcionar METAS ENERGÉTICAS

Curvas Compuestas:

Se grafican los perfiles de temperatura tanto de las corrientes frías como calientes en un diagrama Temperatura Versus Entalpia

Curva compuesta Grand. (GCC)

Es la representación por medio de una gráfica de la cascada de toda la energía del proceso. Lo cual implica valles y colinas energética dentro del proceso

Metodología:

- 1.- Las temperaturas del proceso se transforman en función de la ΔT_{min}
- 2.- Se lleva a cabo los Balances de energía de las corrientes para cada intervalo
- 3.- El valor más negativo de la cascada de temperaturas es la cantidad que recibe el medio que proporciona el servicio de calentamiento.

Con este ajuste de cascada se puede calcular un determinado intervalo que tiende a cero, (denominado punto de pliegue) , se va a tener dos temperaturas una por arriba del punto de pliegue o otra por abajo.

Estos intervalos significan las cantidades tanto de calentamiento como de enfriamiento que necesita el sistema

Costos energéticos del proceso.

Teniendo la ΔT_{min} y los requerimientos energéticos se evalúan las curvas y el paso siguiente es obtener los costos energéticos

Metas de Capital.

Para lógralo es necesario obtener el ÁREA MÍNIMA de la red de intercambio de calor

Obtención del área mínima de la red de intercambio de calor.

El area minima se determina por medio de las curvas compuestas balanceadas, determinando el cambio de entalpia por intervalo, se emplean ecuaciones de diseño del intercambiador considerando los coeficientes de pelicula individuales y las unidades de transferencia de calor.

El Número mínimo de unidades de transferencia de calor, NUT permite determinar la recuperación máxima de energía, el cual se puede determinar por medio de:

$$U_{\min} = N - 1$$

Donde:

$U_{\min}$	Número mínimo de unidades de intercambio de calor.
N	Número de corrientes de proceso con las corrientes de los servicios auxiliares

Costos de capital.

Teniendo el área de la red de intercambiadores de calor las NUT's es posible determinar el costo de la red por medio de:.

Donde:

$$Costo = \left[N_{\min} \left(a + b \left(\frac{A_{\min}}{N_{\min}} \right)^c \right) \right]_{Arriba} + \left[N_{\min} \left(a + b \left(\frac{A_{\min}}{N_{\min}} \right)^c \right) \right]_{Abajo}$$

Donde:

$A_{\min}$	Area minima de transferencia
$N_{\min}$	Numero Minimo de Unidades de transferencia de calor
A, b, c	Constantes de la ecuacion de diseño del intercambiador

$$\text{Intercambiador}(\$) = a + b(\text{area})^c$$

Constantes de la ecuación del costo de un intercambiador de calor (no actualizado)

Tabla 2.2 Para el cálculo del costo del Intercambiador de calor.

CONSTANTE	VALOR
a	16000 USD
b	3200 USD / Area
c	0.7

Diseño para la recuperación máxima energética del proceso.

En el punto de pliegue las corrientes se enfrían o se calientan en función de su ubicación arriba o abajo del punto de pliegue.

Metodología para el diseño de la red de intercambio de calor óptima

- 1.- A partir del punto de pliegue el problema se puede dividir.
- 2.- El diseño inicia en el punto de pliegue.
- 3.- Cálculo de los C_p 's a partir del punto de pliegue
- 4.- Obtener las máximas cargas de calor.
- 5.- Maximizar la UTS

Caso de Estudio:

A partir de dos reactivos A y B se introducen en un reactor para producir una base de resina alquídica, el producto C se lleva a una torre de destilación para purificarlo. Antes de entrar a la columna el producto se precalienta y al salir se enfría.

El diagrama de proceso se presenta en la figura 2.14

Todos los datos relevantes encuentran en la tabla 2.

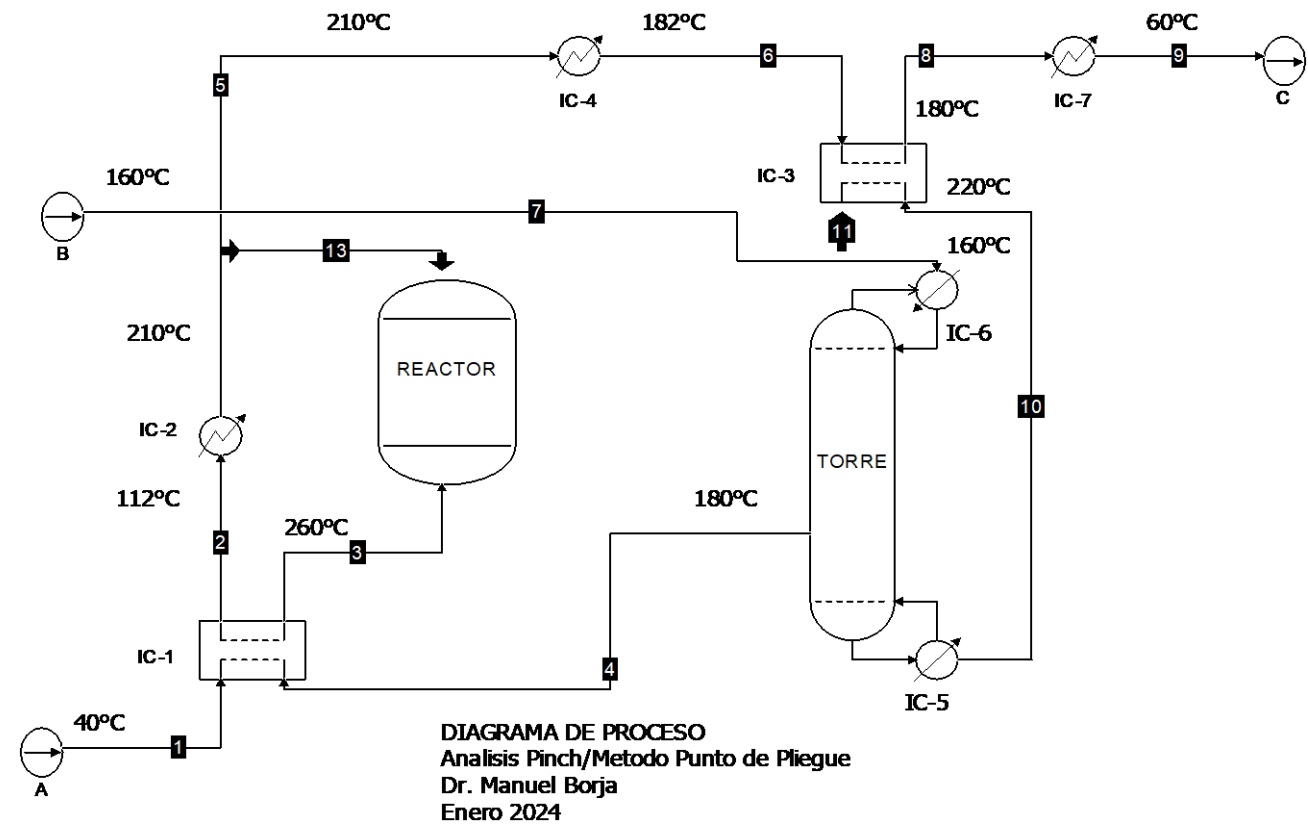


Fig 2.8 Diagrama de Proceso

Tabla 2.3 Valores de producción

Línea Producción	Kg/Seg	$C_p=[(Kj/Kg^{\circ}K)]$	$[W/m^2^{\circ}K]$
Reactante A	1	2.5	1.0
Reactante B	0.5	1.9	1.0
Mezcla Reactante	4.0	2.4	1.0
Producto C	1.5	2.5	1.0
Corriente Reciclado	2.5	2.0	1.0

La planta opera continuamente produciendo 7000Kg/año (7K)

Objetivo:

Establecer la condiciones y arreglos necesarios para aprovechar la energía disponible al máximo minimizando los servicios auxiliares tanto de calentamiento y enfriamiento.

Bases de diseño:

$\Delta T_{\min}$ si es grande: Disminuye el Tamaño del Intercambiador, pero aumentan los costos de los servicios auxiliares

Sucede el caso contrario si $\Delta T_{\min}$ es pequeña.

Los balances de materia, sin cambio de fase, se llevan a cabo con las siguientes ecuaciones de diseño:

$$Q = \Delta H = mC_p\Delta T = C_p(T_f - T_i)$$

Donde:

Q: Energía de intercambio

m: Caudal masico (Kg/s)

Cp: Capacidad calorífica (Kj/Kg°C)

CP: Capacidad calorífica total o de Flujo de calor (KW/°C)

Tabla 2.3 Información de las corrientes de proceso

Line de Producción	Ti (°C)	Tf(C)	Cp (KW/°C)
1-Caliente	260	180	18
2-Caliente	220	60	22
3-Fria	40	210	20
4_Fria	160	210	40

Situación Actual en calentamiento en: E-102 y E-104

$$Q = \Sigma(C_p\Delta T) = 20(210-112) + 40(210-182) = 3080 \text{ KW}$$

Situación actual enfriamiento: E-107

$$Q = \Sigma(C_p\Delta T) = 22(60-180) = -2640 \text{ KW}$$

1.- Se considera para este caso de estudio una $\Delta T_{\min}$ de 20 °C, y se realiza una suma/resta de $\frac{1}{2}(\Delta T_{\min})$, denominadas temperaturas desplazadas.

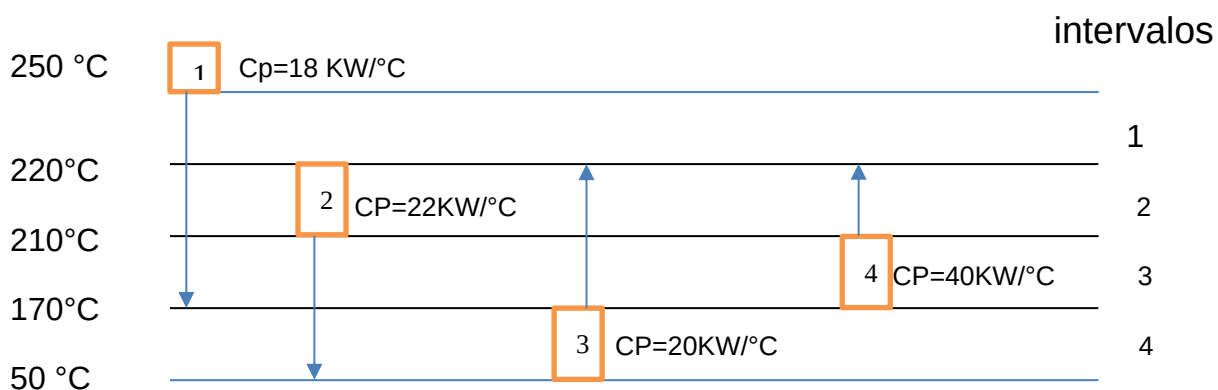
2.- Se construye la columna de intervalos de temperatura de mayor a menor y se eliminan las temperaturas repetidas., siendo:

Tabla 2.4 Tabla Problema

Línea producción	Ti(°C)	Tf(°C)	Cp(KW/°C)	Ti(°C)	Tf(°C)	ΔTemperatura
1-Caliente	260	180	18	250	170	250
2-Caliente	220	60	22	210	50	220
3-Fria	40	210	20	50	220	210
4-Fria	160	210	40	170	220	170
						50

Se construye el Diagrama de cascada tomado en cuenta los intervalos de temperatura.

Tabla 2.5 Diagrama de cascada



Se Construye la tabla de balances a partir de los intervalos de temperaturas desplazadas, es decir

$$Q=(\sum CP_{\text{Caliente}} - \sum CP_{\text{fría}}) \Delta T$$

Tabla 2.5 Tabla de Balances

intervalo	$\Delta T(^{\circ}\text{C})$	$\sum CP_{\text{Caliente}} - \sum CP_{\text{fría}} \text{ (KW/}^{\circ}\text{C)}$	Q(KW)	Observaciones
1=(250-220)	30	180-0=18	540	Exceso
2=(220-210)	10	18-(20+40)=-42	-420	Déficit
3=(210-170)	40	(18+22)-(20+40)=20	-800	Exceso
4=(170-50)	120	22-20=2	240	Déficit

Construyendo la Cascada de Calor para determinar Temperatura Pinch:

CASCADA INICIAL

Tabla 2.6 Cascada Inicial

calefaccion

		suministro Acumulado	
250°C		0 KW	
	540KW		
220°C		540 KW	
	-420KW		
210°C		120 KW	
			
	-800KW		
170 °C		-680 KW	Punto pinch.
			
	240KW	-440kW	
50 °C			
			Refrigeración

Con el valor mínimo -680 KW, o punto Pinch se construye la cascada viable siendo:

Tabla 2.7 Cascada Propuesta

	calefacción		
		suministro Acumulado	
250°C	_____	680 KW	
	540KW		
220°C	_____	1220 KW	
	-420KW		
210°C	_____	800 KW	
	-800KW		
170 °C	_____	0 KW	TEMPERATURA PINCH!!!
	240KW		
50 °C	_____		
	Refrigeración		

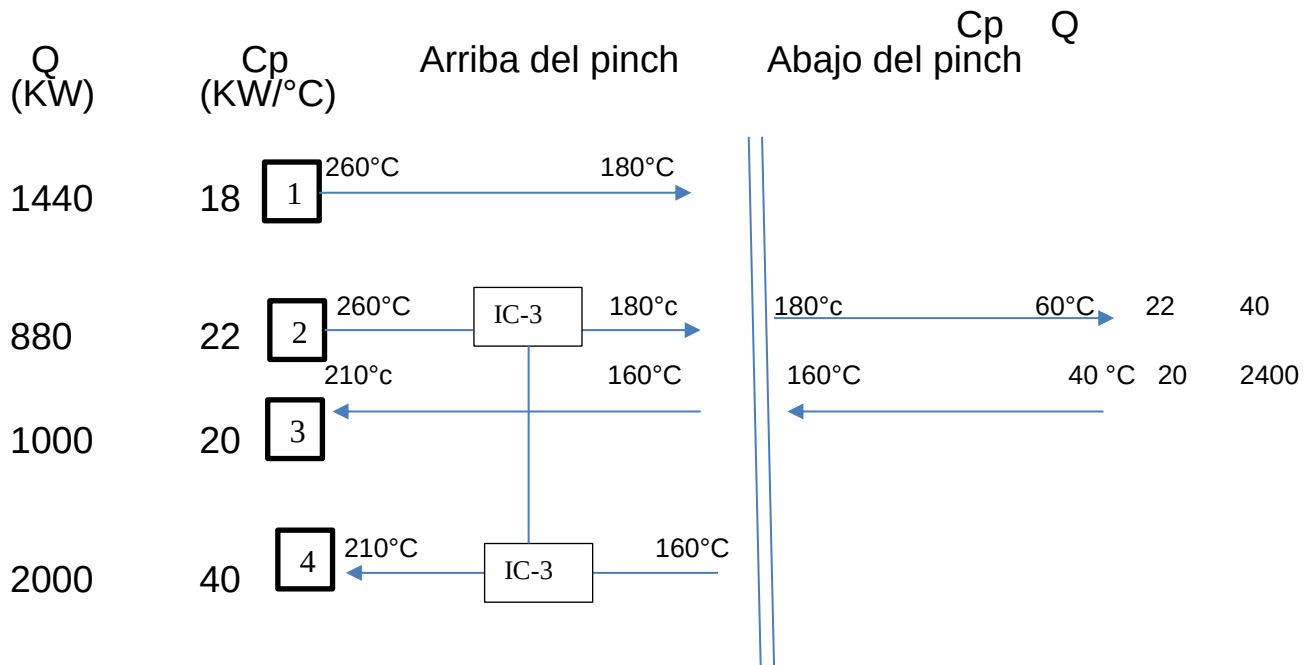
Siendo: (+/- 10)

T Pinch Caliente: 180 °C

T Pinch Fria: 160 °C

En base a estos datos se construye el “**Diagrama de Rejilla**”, tomando en cuenta los valores de arriba del Pinch y abajo del Pinch , siendo:

Tabla 2.8 Diagrama de Rejilla



Reglas de emparejamiento.

Arriba Punto Pinch.

$$Cp_{\text{entrante}} < Cp_{\text{saliente}}$$

El emparejamiento de la corriente 2 se dan con la corriente 4, derivado del Cp
De la corriente entrante es el mayor

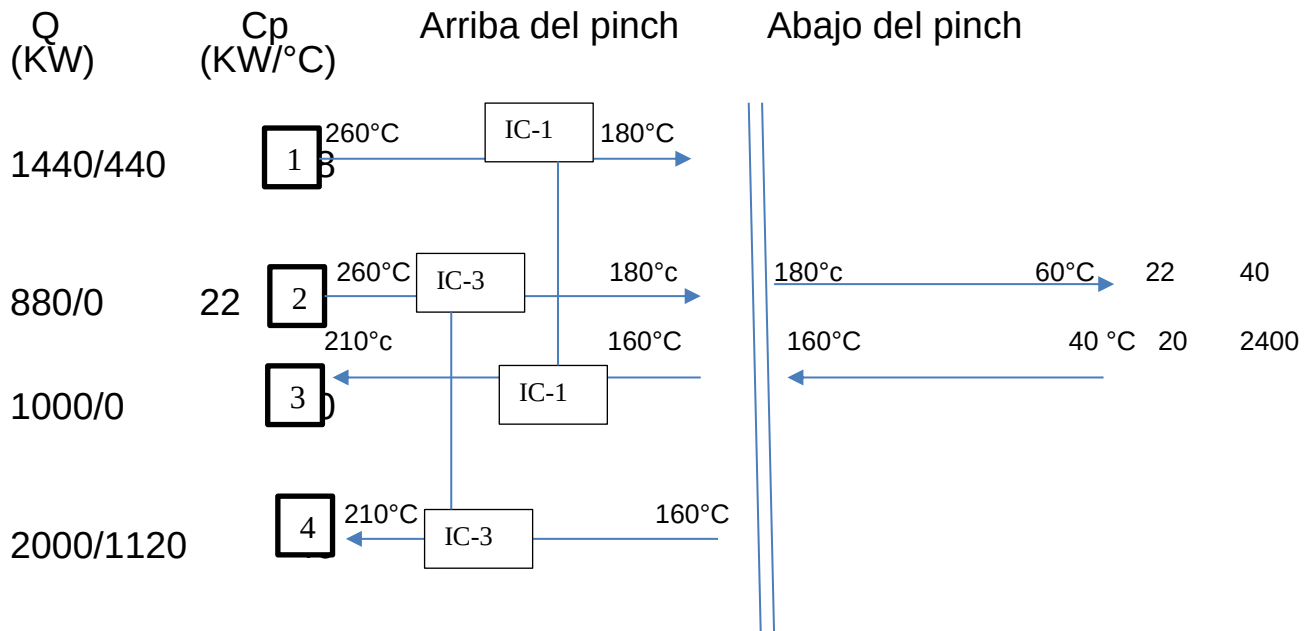
Una vez identificado se fija el emparejamiento, y se maximiza el caudal del calor

Se fija el intercambiador E-103 con 880 KW, siendo el intercambio de calor

$$2000 \text{ KW} - 880 \text{ KW} = 1120 \text{ KW}$$

Se regresa al procedimiento y se empareja la corriente 1 con la corriente 3
siendo:

Tabla 2.8 Emparejamiento de la corriente 1 con la 3, quedando una capacidad de intercambio de 1000 KW y un remanente de 440 KW



Para el remanente de energía, se puede agotar si se empareja las corrientes uno con la cuatro siendo:

Tabla 2.9 Emparejamiento de la corriente 1 con la 4

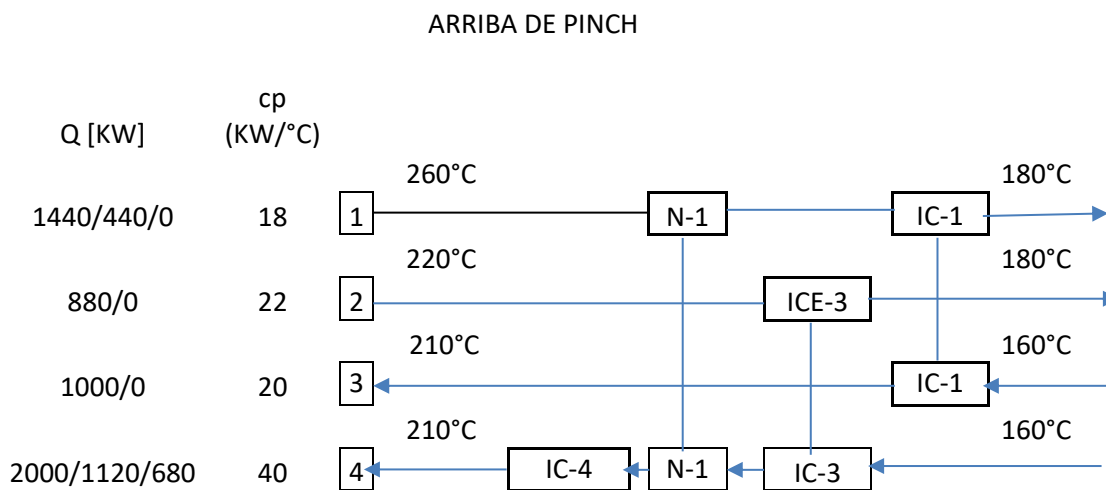
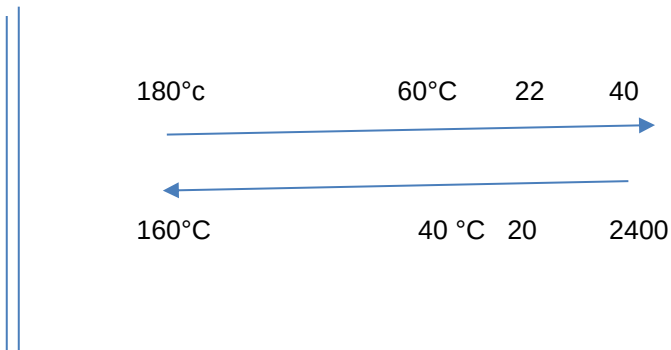


Tabla 2.10 Emparejamiento del intercambiador N-1, corriente 1 con la cuatro.

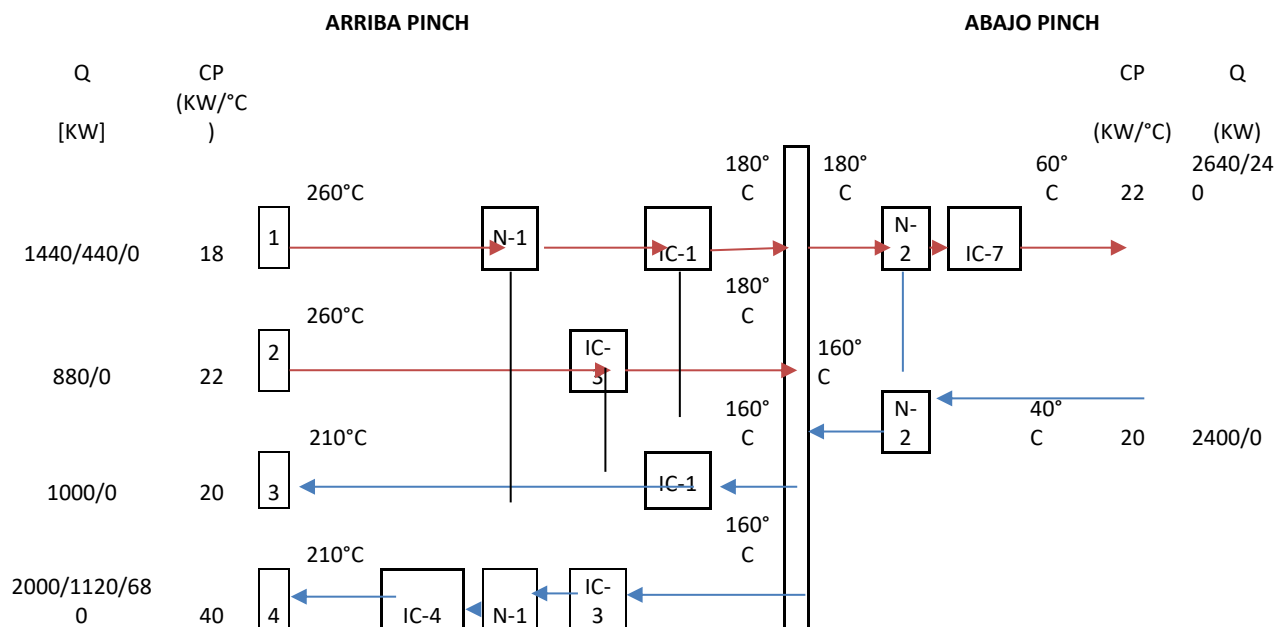
Abajo del pinch



Los 680 KW remanentes se pueden suministrar por servicios auxiliares al sistema con vapor de alta presión a 250 °C, instalando el intercambiador de calor IC-4, quedando al final.

Por debajo del Pinch se tiene:

Tabla 2.11 Emparejamiento abajo y arriba del punto pinch.



Los 240 KW se suplen con servicios de refrigeración, instalando el intercambiador de calor IC-7

Por último, el diagrama de flujo del proceso queda ajustado con la tecnología Pinch como se indica:

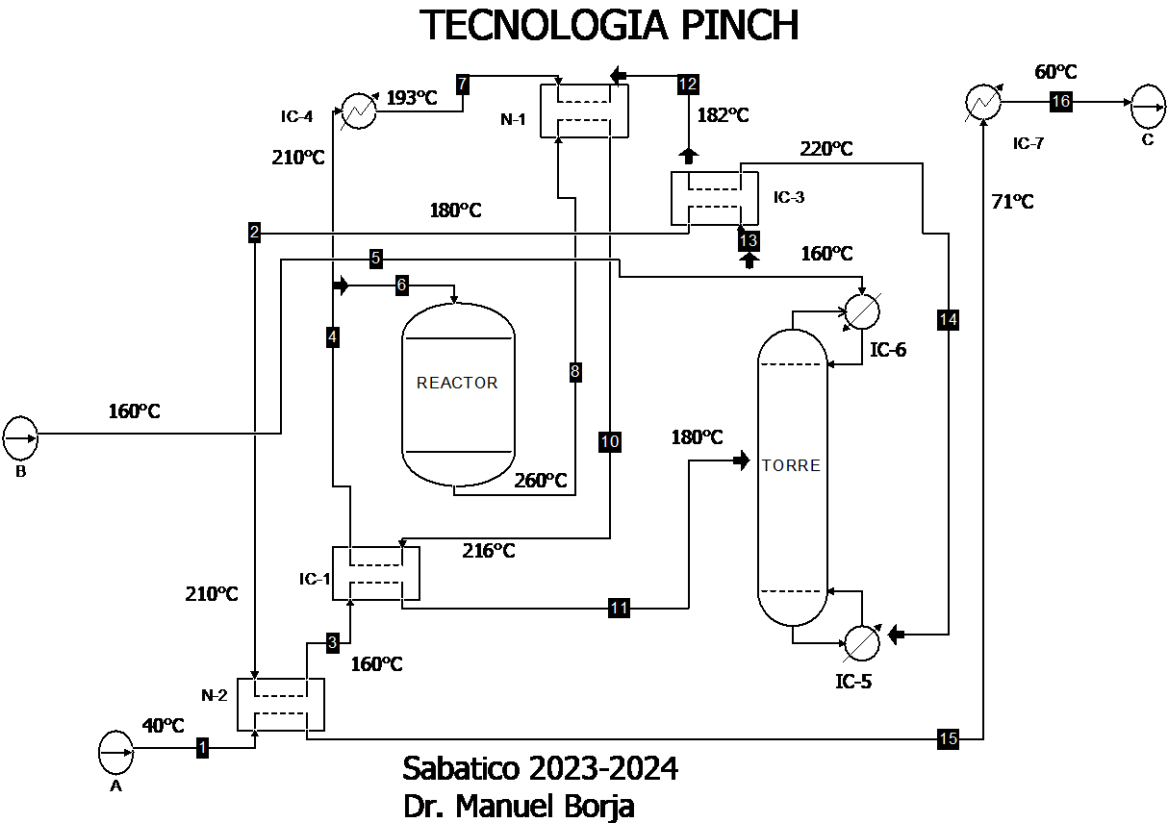


Fig 2.16 Diagrama propuesto usando Tecnologia Pinch.

Tabla 2.12 Resumen:

Servicio	Anterior	Pinch	ahorro	%
Calefaccion (Vapor 250°C)	3080	680	2400	78
Refrigeracion (Agua 25 °C)	2640	240	400	91

La corriente 3 es la unica entrada al pinch que se realiza con la corriente 3 y se empareja con la corriente 2 al tener un Cp mayor

Se agrega el intercambiador de calor N-2 con 2400KW

En el sistema de enfriamiento se agrega el equipo IC-7 de 240 KW

2.4. Predicción de requerimientos de áreas en redes de intercambiadores de calor

En la red de Internet existe una cantidad amplia de software libre que permite el cálculo de redes de intercambiadores de calor.

Uno de ellos es el software “OpenPinch” que es un software de aplicación libre y gratuito denominado open pinch toolkit. La dirección o url es el siguiente.

www.openpinch.com

fue creado por el Dr. Tim Walmsley, se puede descargar libremente y su licencia del MIT es la siguiente.

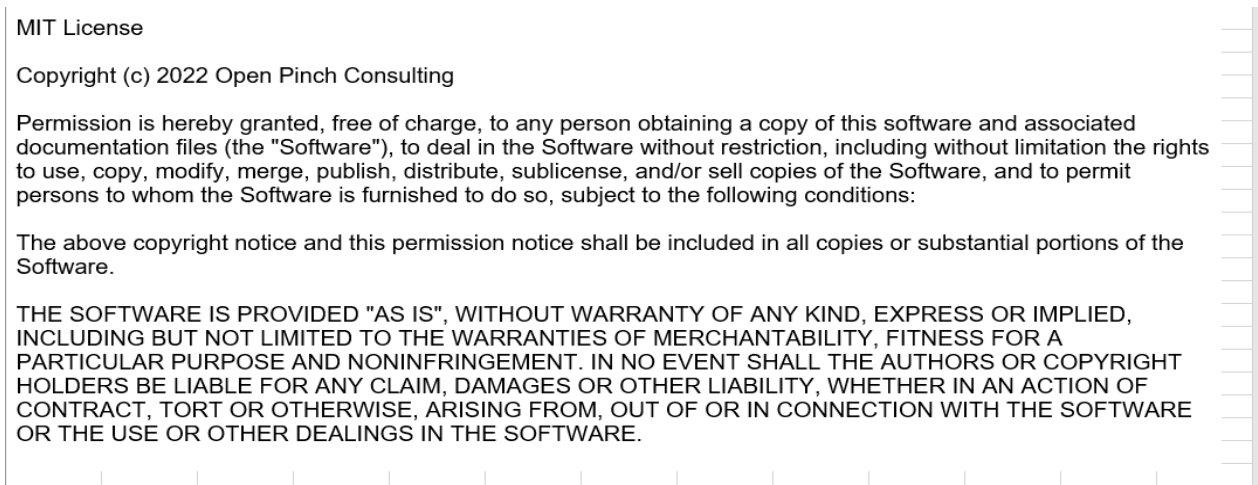


Fig 2.17 Licencia de uso de Open-Pinch

En la licencia se menciona el permiso de forma gratuita a cualquier persona para obtener una copia de este software y archivos de documentación asociados para tratar el software, incluida los derechos de uso sin restricción por los derechos de uso, copiar, modificar, distribuir, fusionar, publicar, sublicenciar y/o vender copias de este software... entre otras.

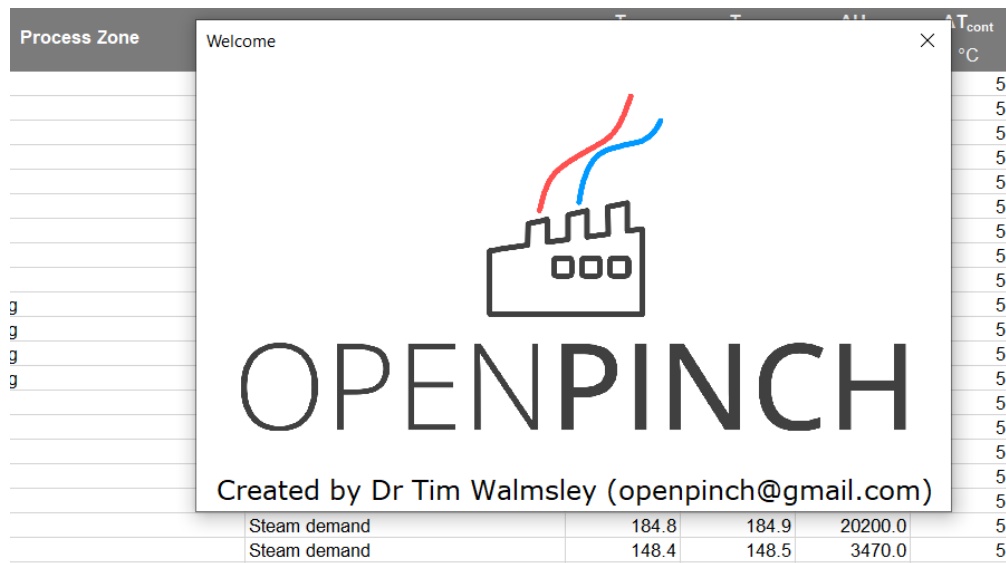


Fig. 2.18 Página de inicio de Open-Pinch

OpenPinch es un kit de herramientas en un libro de EXCEL fácil de usar. El código incorpora múltiples algoritmos de análisis PINCH, como la tabla de problemas, orientación a múltiples servicios

El usuario ingresa datos de flujo de proceso y los tipos de servicios auxiliares y posteriormente los módulos de análisis de su interés

El conjunto de herramientas incluye seis módulos desde Objetivos de proceso, hasta gráficos automatizados

Permite identificar Oportunidades de recuperación de calor, dimensionamiento de bombas de calor, precompresión mecánica de vapor entre otros.

El kit de herramienta incluye 6 módulos

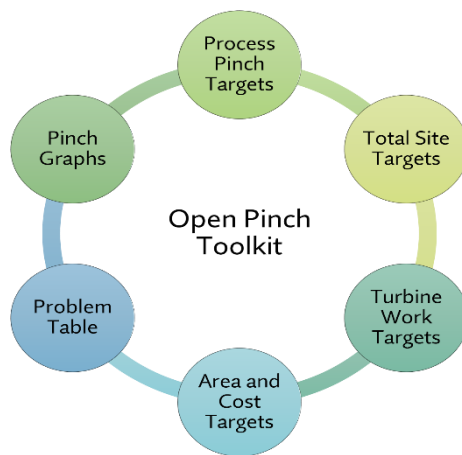


Fig 2.19 Kit de herramientas de Open-Pinch

Open-Pinch Dispone de seis módulos que corresponden al manejo de gráficos, procesos, análisis global energético, arreglos dinámicos de metas y objetivo, y el área especializada en costos energéticos, cada una de ellas pueden trabajar de manera independiente para posteriormente integrar todo el proceso, como se muestra en la Fig 2.19

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
Run	Targets	T_{Pinch} °C	ΣQ_H kW	ΣQ_C kW	ΣQ_R kW	Degree of %	HPS kW	Hot Utility LPS kW	HTHW kW	LTHW kW	LPS kW	HTHW kW	Cold Utility LTHW kW	C kW	Default kW	Utility Cost \$/y
Objetivo General de Integración		98	160,601	63,486	110,998	92%	27,740	132,861	0	0	0	41,033	22,453	0	0	50,207,033
<i>Objetivo Individual de Proceso</i>																
Blanqueador		7	32,536	0	14,122	100%	4,550	9,806	0	18,180	0	0	0	0	0	3,574,641
Alcalinizador	92.1; 153.4		865	7,735	940	100%	0	865	0	0	0	7,735	0	0	0	2,141,454
Digestor	98		23,412	21,252	4,281	81%	20,200	3,212	0	0	0	20,814	438	0	0	11,012,212
Zona de calentamiento	72		7,968	18,365	781	83%	0	7,968	0	0	0	0	18,365	0	0	1,984,037
Evaporador	61.3; 153.4		51,793	39,395	0	100%	0	51,793	0	0	0	0	39,395	0	0	12,896,457
Varios	60		3,435	11,162	8,359	90%	0	3,435	0	0	0	0	11,162	0	0	855,220
Cuarto de Papel	7		45,154	0	16,769	100%	0	29,458	6,625	9,071	0	0	0	0	0	8,984,724
Recuperador del Calentador	21		35,715	0	9,884	100%	2,990	32,590	0	134	0	0	0	0	0	8,859,564
Evaporador	69		3,812	0	11,774	100%	0	3,812	0	0	0	0	0	0	0	949,251
Lavado	82		0	9,664	0	100%	0	0	0	0	0	0	9,664	0	0	0
Objetivo Global del Proceso			204,690	107,574	66,910		27,740	142,939	6,625	27,385	0	28,549	79,025	0	0	51,257,558

Fig 2.20 Resumen del Proceso utilizando OpenPinch, incluye costos.

En la figura 2.20 esta resumida la información que OpenPinch requiere y calcula para su análisis, a saber, el objetivo general de integración así como el objetivo individual de proceso, es decir por cada unidad de análisis requerido para su integración energética, las diferencias entalpías, (Q_H), de cada unidad, las diferencias entalpías calculadas (Q_C) y las diferencias entalpías requeridas (Q_R)

Los porcentajes diferenciales de oportunidades energéticas, mostrado en KW.

Tanto en la sección de “calor útil”, como el de “frio útil” expresado en unidades de KiloWatts, los conceptos de LPS, HTHW y LTHW se refieren al potencial energético entre cada una de las vertientes, “Objetivo Individual de Proceso” para conformar las mejores topologías de redes de intercambio calórico, basado en su estructura de costos.

	A	B	C	D	E	F	G
1	Run	Process Zone	Stream	T _s	T _T	ΔH	ΔT _{cont}
2				°C	°C	kW	°C
							HTC kW/m ² /°C
3	Blanqueado 1	Coolin of BB2 to AWP white wash		82.7	77.8	4613.0	5.0
4	Blanqueador 2	Cooling of BB4		83.2	71.5	9216.0	5.0
5	Blanqueador 3	Gas cooling after srep 4		99.7	90.1	293.0	5.0
6	Blanqueador 4	Heating of KLR to filter 2&3		82.0	83.3	293.0	5.0
7	Blanqueador 5	Heating of water to filter 4		1.9	46.5	14337.1	5.0
8	Blanqueador 6	HW to diluter screw feeder		1.9	65.0	17729.8	5.0
9	Blanqueador 7	Steam demand		148.4	148.5	9748.0	5.0
10	Blanqueador 8	Steam demand Step 2		184.8	184.9	1498.0	5.0
11	Blanqueador 9	Steam demand Step 4		184.8	184.9	3052.0	5.0
12	Alcalinizdor 1	Cooling of green liquor		97.1	87.6	2322.0	5.0
13	Alcalinizdor 2	HW Heating		148.4	148.5	865.0	5.0
14	Alcalinizdor 3	HW to lime washer		1.9	70.0	939.8	5.0
15	Alcalinizdor 4	Mist condenser		84.1	68.4	6353.0	5.0
16	Digestor 1	Blowing Steam Condenser		103.3	103.2	16585.0	5.0
17	Digestor 2	Cooling od Acc.0		80.0	74.3	6041.0	5.0
18	Digestor 3	Cooling of hot liquor		165.4	146.5	1787.9	5.0
19	Digestor 4	Heating of white liquor		90.8	108.1	1788.0	5.0
20	Digestor 5	HW production		70.6	80.0	2235.0	5.0
21	Digestor 6	Steam demand		184.8	184.9	20200.0	5.0
22	Digestor 7	Steam demand		148.4	148.5	3470.0	5.0
23	Digestor 8	Turpentine Condenser		90.1	50.5	1119.9	5.0
24	Intercambiador 1	Cooling of V1		76.8	53.6	19146.0	5.0

Fig 2.21 Información generada por OpenPinch para cada corriente del proceso

La figura 2.21 expresa por cada zona del proceso, las corrientes que lo representan, así como las temperaturas de entrada y salida así como su diferencial entalpico en KiloWatts, el factor de ensuciamiento y su diferencial de temperatura

	A	B	C	D	E	F	G
Run	Utility	Type	T _s	T _t	ΔT _{cont}	Price	HTC
			°C	°C	°C	\$/MWh	kW/m ² /°C
HPS		Hot	210.0	209.9	1.0	30.0	1.0
LPS		Both	160.0	159.9	1.0	30.0	1.0
HTHW		Both	85.0	60.0	1.0	30.0	1.0
LTHW		Both	45.0	25.0	1.0	0.0	1.0
CW		Cold	25.0	40.0	1.0	0.0	1.0

Fig 2.22 Información proporcionada para el cálculo del costo

En la figura 2.22 se expresa la información requerida para hacer el análisis del costeo, basado en las temperaturas de entrada y salida así como la diferencial de temperaturas propuestas y el costo que representa, tomado en consideración el factor de ensuciamiento del intercambiador

	A	B	C	D	E	F	G	
1	Run	Process Zone	Stream	T _S	T _T	ΔH	ΔT _{cont}	HTC
2				°C	°C	kW	°C	kW/m ² /°C
3		Blanqueado 1	Coolin of BB2 to AWP white wash	82.7	77.8	4613.0	5.0	0.5
4		Blanqueador 2	Cooling of BB4	83.2	71.5	9216.0	5.0	0.5
5		Blanqueador 3	Gas cooling after srep 4	99.7	90.1	293.0	5.0	0.5
6		Blanqueador 4	Heating of KLR to filter 2&3	82.0	83.3	293.0	5.0	0.5
7		Blanqueador 5	Heating of water to filter 4	1.9	46.5	14337.1	5.0	0.5
8		Blanqueador 6	HW to diluter screw feeder	1.9	65.0	17729.8	5.0	0.5
9		Blanqueador 7	Steam demand	148.4	148.5	9748.0	5.0	0.5
10		Blanqueador 8	Steam demand	148.4	184.9	1498.0	5.0	0.5
11		Blanqueador 9	Steam demand	148.4	184.9	3052.0	5.0	0.5
12		Alcalinizdor 1	Cooling of		87.6	2322.0	5.0	0.5
13		Alcalinizdor 2	HW Heati		148.5	865.0	5.0	0.5
14		Alcalinizdor 3	HW to lim		70.0	939.8	5.0	0.5
15		Alcalinizdor 4	Mist cond		68.4	6353.0	5.0	0.5
16		Digestor 1	Blowing S		103.2	16585.0	5.0	0.5
17		Digestor 2	Cooling of		74.3	6041.0	5.0	0.5
18		Digestor 3	Cooling of not liquor	165.4	146.5	1787.9	5.0	0.5
19		Digestor 4	Heating of white liquor	90.8	108.1	1788.0	5.0	0.5
20		Digestor 5	HW production	70.6	80.0	2235.0	5.0	0.5
21		Digestor 6	Steam demand	184.8	184.9	20200.0	5.0	0.5
22		Digestor 7	Steam demand	148.4	148.5	3470.0	5.0	0.5
23		Digestor 8	Turpentine Condenser	90.1	50.5	1119.9	5.0	0.5
24		Intercambiador 1	Cooling of V1	76.8	53.6	19146.0	5.0	0.5
25		Intercambiador 2	District heating demand new mill	105.4	111.0	4128.0	5.0	0.5

Fig 2.23 integración de módulos

En la Figura 2.23 se muestra de una manera integrada todo el software, OpenPinch, de izquierda a derecha se tiene , las diferentes corrientes y áreas del proceso, el cálculo de temperaturas y topologías optimas basado en sus diferenciales, El módulo de manejo de turbinas, así como el cálculo y, optimización e “Integración” de la red.

En la parte inferior están los servicios de visualización a saber las impresiones de cada tabla energética, gráficos de diferenciales de temperatura, etc. y por último el botón de reinicio del proceso para una nueva corrida.

En la figura 2.24 se presenta la tabla en excell de adquisición de datos y la ventana de edición para la incorporación de información referentes al tipo de turbinas

En la figura 2.25 se observa los diferentes equipos de proceso y sus gráficos de diferenciales de temperatura

D22

6040.974

Run	Targets	T_{Pinch} °C	ΣQ_H kW	ΣQ_C kW	ΣQ_R kW	Degree of %	HPS	Hot Utility LPS	HTHW	LTHW	LPS	HTHW	LTHW	Cold Utility LTHW	C	Default	Utility Cost \$/y
5	Total Integrated Target	98	160,601	63,486	110,998	92%					0	0	41,033	22,453	0	0	50,207,033
7	Individual Process Targets																
8	Alcalinizador 1	92	0	2,322	0	100%					0	0	2,322	0	0	0	578,176
9	Alcalinizador 2	153	865	0	0	100%					0	0	0	0	0	0	215,385
10	Alcalinizador 3	7	940	0	0	100%					512	0	0	0	0	0	106,522
11	Alcalinizador 4	79	0	6,353	0	100%					0	0	0	6,353	0	0	0
12	Blanqueador 1	78	0	4,613	0	100%					0	0	0	4,613	0	0	0
13	Blanqueador 2	78	0	9,216	0	100%					0	0	0	9,216	0	0	0
14	Blanqueador 3	95	0	293	0	100%					0	0	293	0	0	0	72,955
15	Blanqueador 4	87	293	0	0	100%					0	0	0	0	0	0	72,955
16	Blanqueador 5	7	14,337	0	0	100%		0	0	2,411	11,926	0	0	0	0	0	600,327
17	Blanqueador 6	7	17,730	0	0	100%		0	0	7,305	10,424	0	0	0	0	0	1,819,065
18	Blanqueador 7	153	9,748	0	0	100%		0	9,748	0	0	0	0	0	0	0	2,427,252
19	Blanqueador 8	190	1,498	0	0	100%		1,498	0	0	0	0	0	0	0	0	373,002
20	Blanqueador 9	190	3,052	0	0	100%		3,052	0	0	0	0	0	0	0	0	759,948
21	Digestor 1	98	0	16,585	0	100%		0	0	0	0	0	16,585	0	0	0	4,129,665
22	Digestor 2	75	0	6,041	0	100%		0	0	0	0	0	0	6,041	0	0	0

Turbine Settings

Inlet Temperature, °C

450

Inlet Pressure, bar

90

Minimum (Fixed) Efficiency

0.1

Electricity Price, \$/MWh

100

Part Load Fraction

1.00

Mechanical Efficiency

1.00

Select Turbine Model

Medina-Flores et al. (2010)

☒ Pressurised Condensate Flash

Return

Fig 2.24 Integración de Turbinas

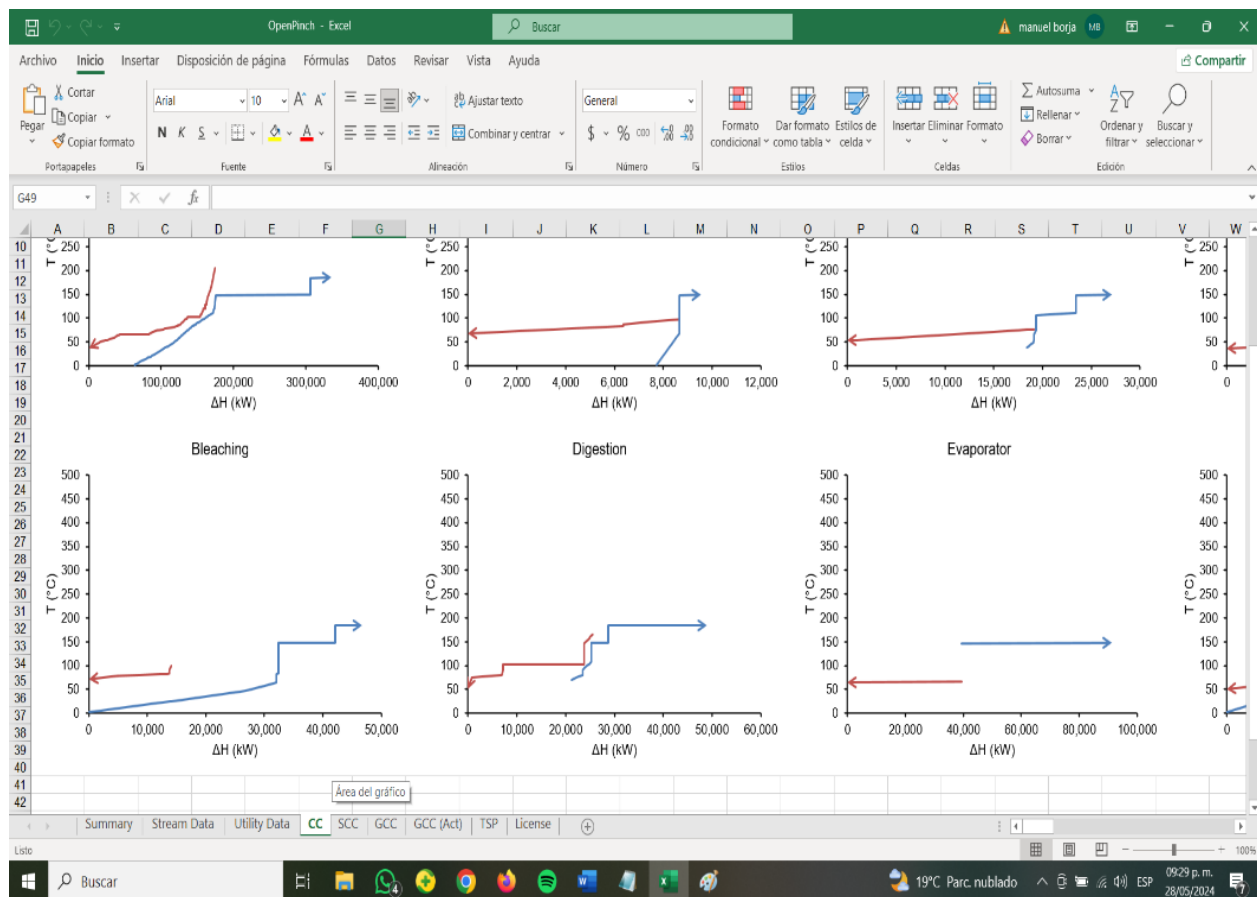


Fig 2.25 Graficas generadas por cada equipo de proceso

2.5. Revisión de redes de intercambiadores de calor existentes.

El diseño óptimo de una red de intercambiadores de calor implica conseguir la mayor integración entre las corrientes, esto es, aprovechar las corrientes calientes para calentar las frías.

Generalmente es improbable que la disminución de entalpía necesaria de las corrientes calientes, sea igual al aumento de entalpía necesario para las corrientes frías, se necesitarán servicios auxiliares como vapor o agua fría.

El diseño óptimo deberá minimizar el consumo de servicios auxiliares (y por tanto el consumo energético).

la Tecnología de Pinch permite obtener los valores mínimos para varios parámetros del proceso:

El cálculo de los servicios mínimos proporciona los *Costes de Operación*.

El cálculo del número mínimo de unidades de intercambio de calor, y el área de dichas unidades, proporciona una estimación de los *Costes energéticos*.

Para el cálculo del número de unidades de intercambio de calor se trabajará con "Grafos"

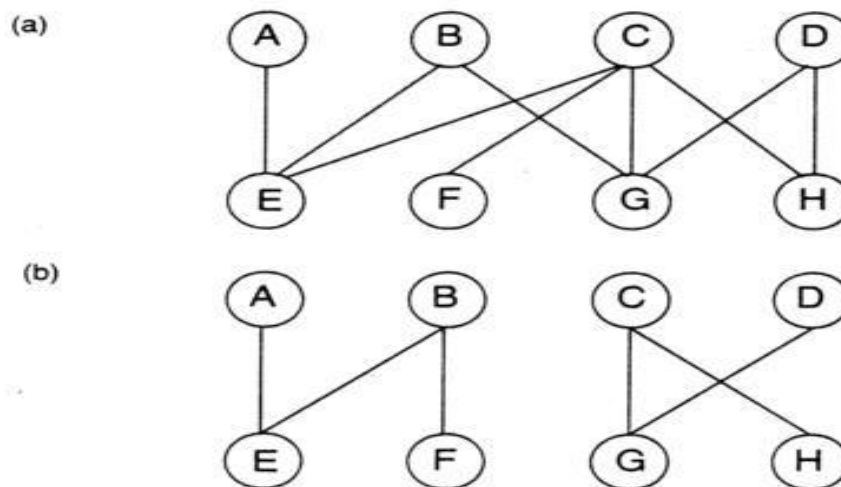


Figura: 2.26 Dos ejemplos de *grafos*

La *teoría de grafos* permite averiguar cuál es el número mínimo de unidades necesarias.

Un *grafo* es un conjunto de puntos que están unidos mediante líneas

Las líneas *BG*, *CE* y *CF* de la figura no se tocan.

Los puntos representarán corrientes del proceso o auxiliares, y las líneas intercambiadoras de calor que son las corrientes que se unen.

Un *camino* es una secuencia de líneas diferentes que están conectadas unas a otras. Por ejemplo, en la figura a, *AECGD* es un camino.

Para el cálculo del número mínimo de intercambiadores se utiliza la ecuación siguiente.

$$N_{\text{unidades}} = S + L - C \quad (2.4)$$

donde

N_{unidades} es el número de líneas (que se corresponderán con intercambiadores)

S es el número de puntos (que se corresponderán con corrientes en el proceso)

L es el número de anillos independientes

C es el número de componentes

El propósito es lograr una red de intercambiadores con el mínimo número de unidades, de manera que el coste fijo de la red sea mínimo. lo más normal es suponer que la red estará formada por un único componente, esto es $C = 1$. Por tanto, la ecuación se convierte en la

$$N_{\text{Unidades}} = S - 1$$

es decir, el número mínimo de unidades necesarias es igual al número de corrientes (incluyendo las corrientes de servicios auxiliares) menos uno

$$N_{\text{unidades}} = (S_{\text{sobrepinch}} - 1) + (S_{\text{bajopinch}} - 1)$$

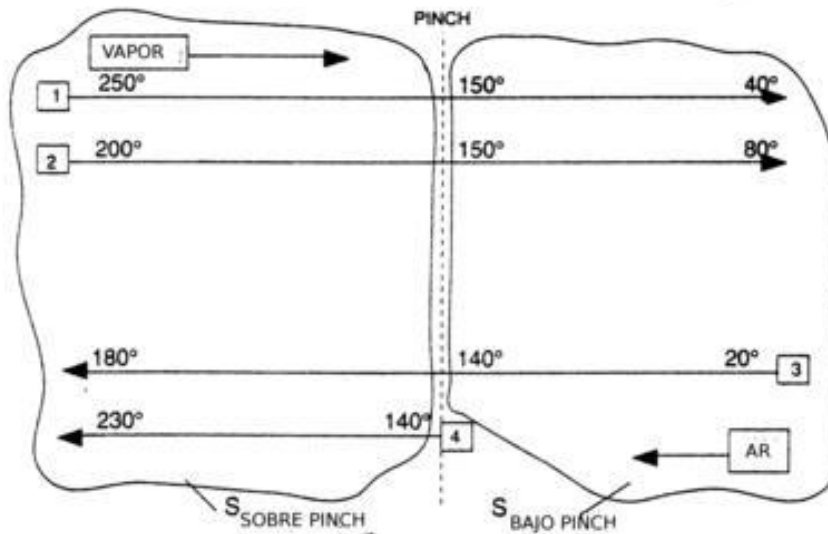


Fig 2.27 Para calcular el número mínimo de intercambiadores, hay que separar las corrientes por el punto pinch

Ejemplo.

Para el proceso que se muestra en la fig 2.16, calcular el número mínimo de intercambiadores necesarios, si la temperatura del punto pinch es 150 °C para las corrientes calientes y 140 °C para las frías.

Solución

Por encima del pinch hay cinco corrientes (incluyendo la de vapor).

Por debajo del pinch hay cuatro corrientes (incluyendo el agua de refrigeración).

Aplicando la ecuación

$$N_{\text{unidades}} = (5-1) + (4-1) = 7$$

En el diseño propuesto se emplearon solo 7 unidades, que son el mínimo posible.

Cálculo del área de la red de intercambiadores

Para el cálculo del área global de los intercambiadores de calor es necesario incluir la curva compuesta de las corrientes de servicios de calefacción y refrigeración, esta curva se conoce como “*curva compuesta balanceada*”

En la figura 2.28 se muestra una curva compuesta balanceada.

Para calcular el área global de la red de intercambiadores de calor, el primer paso es dividir la curva compuesta balanceada en tramos verticales de entalpía.

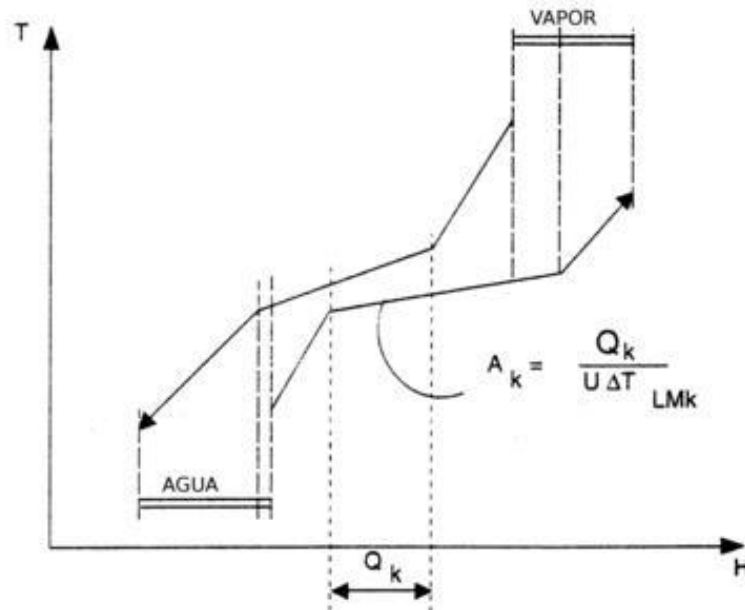


Fig 2.28 Curva compuesta balanceada, se ha dividido en tramos verticales de entalpía

El área de la red completa, esto es, de la suma de todos los tramos de entalpía, vendrá dada por la ecuación

$$A_k = (\Delta H_k) / (U \Delta T_k)$$

donde

A_k Area de intercambio de calor en el tramo de entalpías k

ΔH_k es la diferencia de entalpía del tramo k

ΔT_k es la media logarítmica de temperaturas para el tramo k

U es el coeficiente global de transferencia de calor

El área de la red completa, esto es, de la suma de todos los tramos de entalpía, vendrá dada por la ecuación.

$$A = \frac{1}{U} \sum_k^K \frac{\Delta H_k}{\Delta T_k}$$

Tabla 2.13 Datos Iniciales

#	Corriente	Tipo	Temperatura Suministro	Temperatura Objetivo	AH	m.CP
			Ts °C	Tt °C	MW	MW/°C
1	Alimentacion Reactor 1	Fria	20	180	32	0.2
2	Producto Reactor	Caliente	250	40	-31.5	0.15
3	Alimentacion Reactor 2	Fria	140	230	27	0.3
4	Producto Reactor 2	Calor	200	80	-30	0.25

Donde

A Área de la red completa

K Número total de tramos verticales de entalpía

Ejemplo.

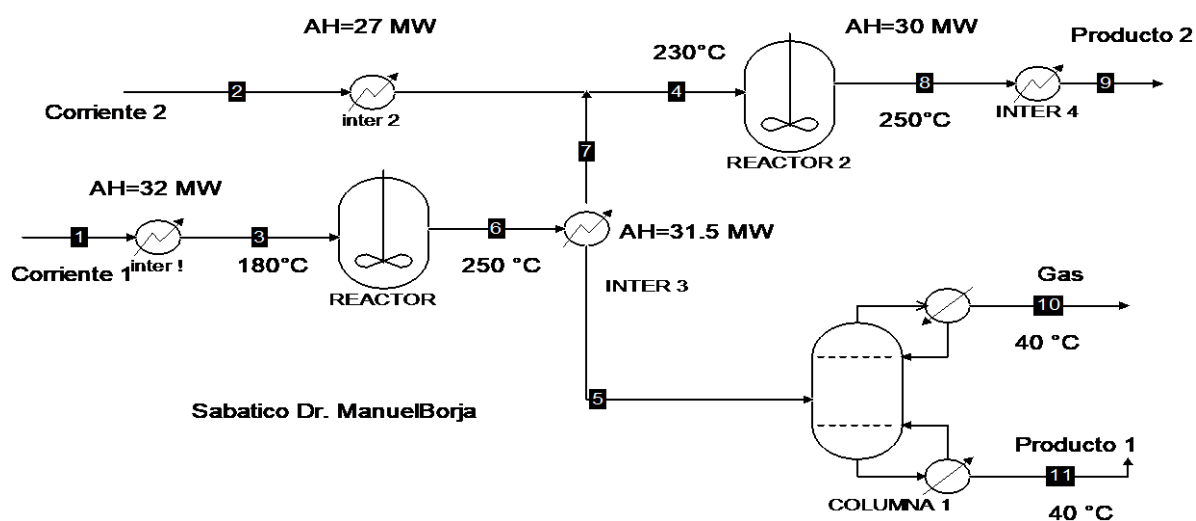
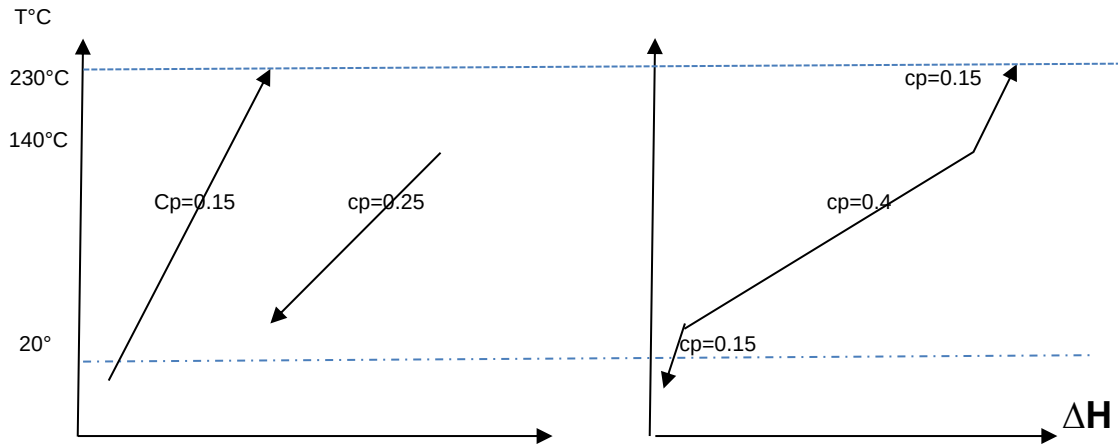


Fig 2.29 Diagrama Ejemplo

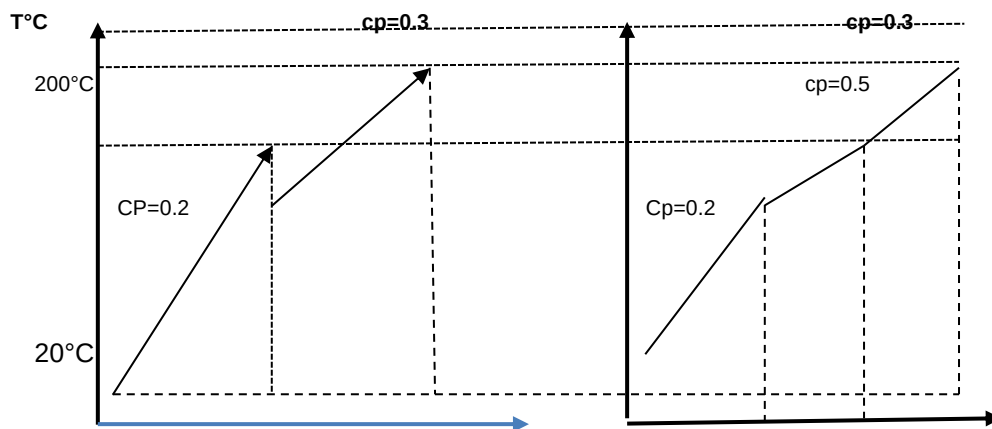
En una curva compuesta, los incrementos de entalpía son la suma de los incrementos de cada corriente. En la figura 2.30 se muestra la curva compuesta para las corrientes calientes y frías



a) Las corrientes calientes dibujadas por separado

b) Curva compuesta caliente

Fig 2.30 Curva compuesta Calientes



a) Corrientes Frías dibujadas por separado

b) Curvas compuestas frías

Fig 2.31 Curvas compuestas Frías

Las fig. 2.30 y 2.31 tienen un punto de diferencia de temperaturas menor a 10 °C

En la zona delimitada por las dos curvas, se puede transferir energía desde la corriente caliente a la fría. Las curvas son monótonamente decrecientes la caliente, y monótonamente creciente la fría, esto permite que la región de entalpías comunes a las dos curvas sea máxima, y por tanto se logre la máxima recuperación de calor.

Para este ejemplo en el que $\Delta T_{\min}$ es 10 °C la máxima cantidad de calor que se puede recuperar es $Q_{\text{rec}}=51.5 \text{ MW}$

En la zona en la que la curva compuesta fría se extiende más allá de la curva compuesta caliente fig.2.29, no es posible la recuperación de calor, por lo que la curva fría debe ser calentada mediante servicios auxiliares (como vapor).

El vapor debe suministrar a la corriente fría la cantidad $Q_{H\min}$, que para este caso es de 7.5 MW

Del mismo modo, en la zona en la que la curva caliente sobrepasa a la fría no es posible recuperar calor, y la corriente caliente debe ser enfriada con un servicio auxiliar, por ejemplo, agua.

La cantidad de calor que debe ser sustraída de esta corriente viene dada por $Q_{C\min}$, que en este problema es de 10 MW.

Introducción al entorno *PinchPython*

PinchPython es un entorno orientado a objetos para realizar el análisis pinch de procesos químicos. Este entorno permite calcular los consumos energéticos óptimos del proceso, el área de la red de intercambiadores, el número mínimo de unidades de la red de intercambiadores y el diseño de la red de intercambiadores, así como el rediseño de las redes ya existentes

Que se puede descarga libre y gratuito de:

<https://sourceforge.net/projects/gpinch/>

siendo:

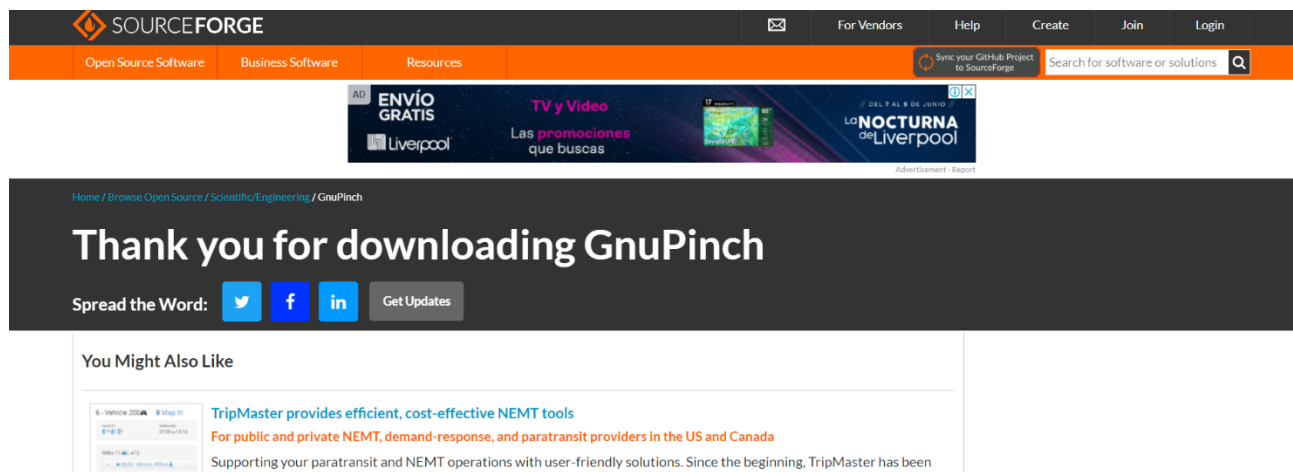


Fig 2.32 *PinchPython* y su descarga,

Instalación de PinchPython en ambiente Windows. En el Shell de anaconda se procede de la siguiente manera

```
(base) C:\Users\SONY>pip install Pinch
Collecting Pinch
  Downloading Pinch-0.1.7.tar.gz (12 kB)
  Preparing metadata (setup.py) ... done
Building wheels for collected packages: Pinch
  Building wheel for Pinch (setup.py) ... done
  Created wheel for Pinch: filename=Pinch-0.1.7-py3-none-any.whl size=25483 sha256=fd765f319436eb2f5d372d4eaf54c7d394c373ae71c1a2f55b37b40cc6be3d
  Stored in directory: c:\users\sony\appdata\local\pip\cache\wheels\de\c3\21\9b60dfc807cb867a656c99ed09fa6ea8139067e3797025b6
Successfully built Pinch
Installing collected packages: Pinch
Successfully installed Pinch-0.1.7

(base) C:\Users\SONY>
```

Fig.2.33 instalación de PinchPython

Valores de entrada:

Los archivos pueden ser planos o con excell, siendo:

PyPinch is a lightweight Python module that applies Pinch Technology principles, analysing a given set of stream data to find the Maximum Energy Recovery (MER) target.

A live version of a Jupyter Notebook using the code is available [via MyBinder](#).

Input:

A CSV set of stream data including:

- Stream Enthalpy CP (kW / °C)
- Stream Supply Temperature (T_S)
- Stream Target Temperature (T_T)

And a minimum temperature difference $\Delta T_{\min}$

Fig 2.34 Datos de entrada aplicación PinchPython

Salidas:

Output:

Currently, PyPinch can *calculate*, *plot*, and *export as CSV* the following:

- The Temperature Interval Diagram
- The Problem Table
- The Heat Cascade
- The Minimum Cold Utility Q_{Cmin} and the Minimum Hot Utility Q_{Hmin}
- The Pinch Point T_{pinch}
- The Shifted Temperature-Enthalpy Composite Diagram
- The Temperature-Enthalpy Composite Diagram
- The Grand Composite Curve

Fig 2.35 Datos de salida de la aplicación PinchPython

Una parte del código explicado:

```

9  # -*- coding: iso-8859-15 -*-
10 @author: BORJA y otros
11 """
12 # Empleamos el módulo PinchPython
13 from PinchPython import *
14
15 # Creamos Las cuatro corrientes
16 c1 = Corriente()
17 c2 = Corriente()
18 c3 = Corriente()
19 c4 = Corriente()
20
21 # Datos de La corriente 1
22 c1.setT0(20.)
23 c1.setTf(180.)
24 c1.setMCP(0.2)
25
26 # Datos de La corriente 2
27 c2.setT0(250.)
28 c2.setTf(40.)
29 c2.setMCP(0.15)

```

```

pinchpy-introduccion.py x PinchPython.txt x untitle0.py* x
31 # Datos de La corriente 3
32 c3.setT0(140.)
33 c3.setTf(230.)
34 c3.setMCP(0.3)
35
36 # Datos de La corriente 4
37 c4.setT0(200.)
38 c4.setTf(80.)
39 c4.setMCP(0.25)
40
41 # Vamos a usar la corriente ficticia para obtener las listas
42 # de corrientes frías y calientes
43
44 # Curva compuesta fría
45 compFria = CurvaCompuesta(corrienteFicticia.getListadeCorrientesFrias())
46 # Curva compuesta caliente
47 compCaliente = CurvaCompuesta(corrienteFicticia.getListadeCorrientesCalientes())
48
49 # Creamos la tabla del problema
50 tabla = TablaDelProblema(compFria,compCaliente,10.)
51
52 # Mostramos los resultados
53 print ('Qh = '+str(tabla.getQH())+' MW')
54 print ('Qc = '+str(tabla.getQC())+' MW')

```

Fig. 2.36 Código PinchPython Explicado

Resultados Gráficos:

Gráfica de las curvas compuestas

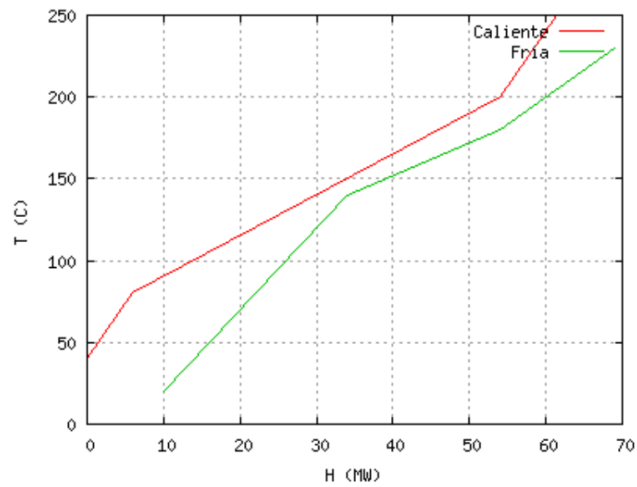


Fig 2.37 Curvas compuestas

Gráfica de la curva grand y los servicios auxiliares

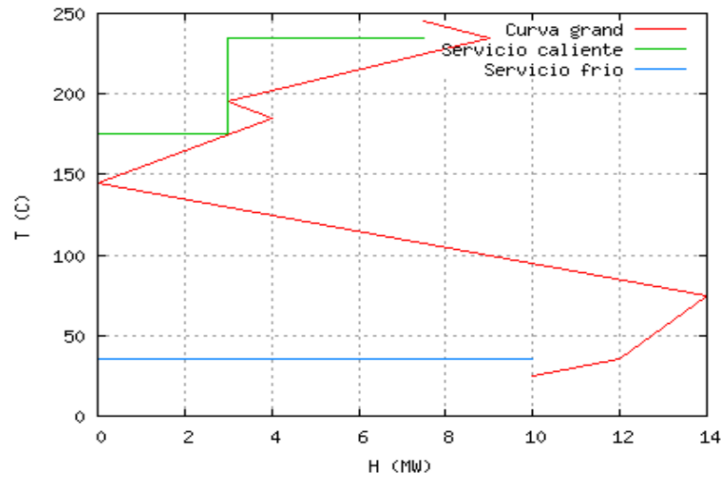


Fig 2.38 curva integral y los servicios auxiliares

Gráfica del coste de la red frente a la diferencia mínima de temperaturas (*supertargeting*)

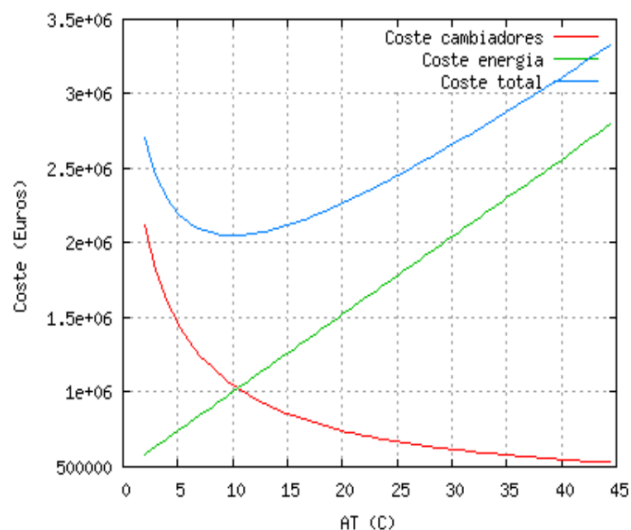


Fig 2.39 Costo de la red en función de la Diferencia Mínima

BIBLIOGRAFÍA:

Dunn RF, El-Halwagi MM. Process integration technology review: background and J.J. Klemeš et al. Renewable and Sustainable Energy Reviews 98 (2018) 439–468 461 applications in the chemical process industry. J Chem Technol Biotechnol 2003; 78:1011–21. <https://doi.org/10.1002/jctb.738>.

Foo DCY. State-of-the-art review of Pinch Analysis Techniques for Water Network Synthesis. Ind Eng Chem Res 2009; 48:5125–59. <https://doi.org/10.1021/ie801264c>.

Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL). Energy flow charts-energy. (flowcharts.llnl.gov/commodities/energy); 2018 [Accessed 30 May 2018].

Linnhoff B, Flower JR. Synthesis of heat exchanger networks: I. Systematic generation of energy optimal networks. AIChE J 1978; 24:633–42. <https://doi.org/10.1002/aic.690240411>.

Ozalp N, Hyman B. Allocation of energy inputs among the end-uses in the US petroleum and coal products industry. *Energy* 2007; 32:1460–70. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2006.09.006>.

Ritter Jr. B. LLNL Sankey diagram of U.S. national energy flows in 2017: What's possible, what's not, and who's responsible 2018 [Accessed 30 May 2018]. <https://667-per-cm.net/2018/04/26/llnl-sankey-diagram-of-u-s-national-energy-flows-in2017-whats-possible-whats-not-and-whos-responsible/>.

Srivastava SK. Green supply-chain management: a state-of-the-art literature review. *Int J Manag Rev* 2007; 9:53–80. <https://doi.org/10.1111/j.1468-2370.2007.00202.x>.

Tema 3: Evaluación económica de procesos

3.1 Selección de materiales

Por consideraciones lógicas de aprendizaje se verá primero el subcapítulo 3.2 y posteriormente el 3.1.

3.2. Técnicas de análisis económico de procesos.

```
(base) C:\Users\SONY>python -m pip install SomePackage
Collecting SomePackage
  Downloading somepackage-1.2.3.tar.gz (8.6 kB)
  Preparing metadata (setup.py) ... done
Building wheels for collected packages: SomePackage
  Building wheel for SomePackage (setup.py) ... done
  Created wheel for SomePackage: filename=somepackage-1.2.3-py3-none-any.whl size=9304 sha256=dbb1692c076c16b15dbbc7e846421ffb6b6477bc9ee597e25f27e21579aea42b
  Stored in directory: c:\users\sony\appdata\local\pip\cache\wheels\b3\cf\38\80a2152a47dc17e0a4bf3698b0493622d2f46bddb3c882eede
Successfully built SomePackage
Installing collected packages: SomePackage
Successfully installed SomePackage-1.2.3

(base) C:\Users\SONY>python -m pip install finance
Collecting finance
  Downloading finance-0.2502.tar.gz (45 kB)
  ----- 45.7/45.7 kB 251.3 kB/s eta 0:00:00
  Preparing metadata (setup.py) ... done
Building wheels for collected packages: finance
  Building wheel for finance (setup.py) ... done
  Created wheel for finance: filename=finance-0.2502-py3-none-any.whl size=49627 sha256=f168cff976f89ca1a2ebd7e5ca505a23f0ef6abe12145d4bb377dc933ccee98d
  Stored in directory: c:\users\sony\appdata\local\pip\cache\wheels\d7\9b\3e\6e4e10ee53b2c25e5aa4455705d1a57fea9f51eebf59800cc2
Successfully built finance
Installing collected packages: finance
Successfully installed finance-0.2502
```

Fig 3.1 Instalación Python Finance

Functions

<code>fv(rate, nper, pmt, pv[, when])</code>	Compute the future value.
<code>ipmt(rate, per, nper, pv[, fv, when])</code>	Compute the interest portion of a payment.
<code>irr(values)</code>	Return the Internal Rate of Return (IRR).
<code>mirr(values, finance_rate, reinvest_rate)</code>	Modified internal rate of return.
<code>nper(rate, pmt, pv[, fv, when])</code>	Compute the number of periodic payments.
<code>npv(rate, values)</code>	Returns the NPV (Net Present Value) of a cash flow series.
<code>pmt(rate, nper, pv[, fv, when])</code>	Compute the payment against loan principal plus interest.
<code>ppmt(rate, per, nper, pv[, fv, when])</code>	Compute the payment against loan principal.
<code>pv(rate, nper, pmt[, fv, when])</code>	Compute the present value.
<code>rate(nper, pmt, pv, fv[, when, guess, tol, ...])</code>	Compute the rate of interest per period.

Fig 3.2 Funciones de Numpy-Finance

Interés simple

Ejemplo 1

Supongamos que hoy se depositan \$100 en el banco. ¿Cuál será el valor 3 años después? si el banco nos ofrece una tasa de depósito anual del 1,5%?

$$FV = PV(1+R)^n$$

FV= Valor futuro

PV=Valor Presente

R=Tasa de deposito

n= numero de periodos

Siendo:

$$FV = PV * (1 + 0.015)^{**3}$$

$$FV = 100(1 + 0.015)^{**3}$$

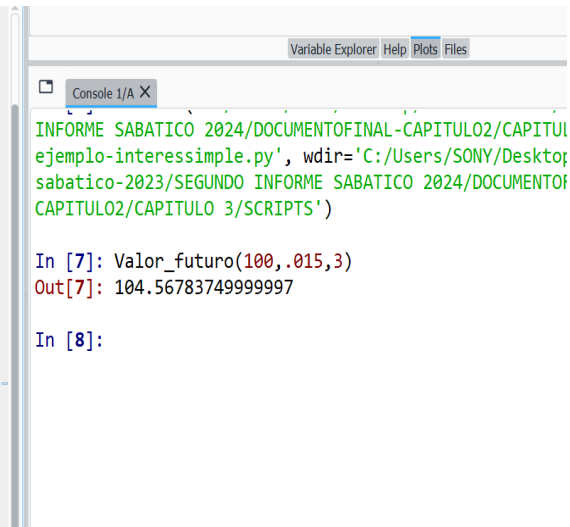
$$FV = 104.56783749999997$$

En Python escrito como una función:

```

5 @author: BORJA
6 """
7 """
8 Supongamos que hoy depositamos $100
9 en el banco. ¿Cuál será el valor 3 años
10 después?
11 si el banco nos ofrece una tasa de
12 depósito anual del 1,5%?
13 Los códigos relacionados
14 se muestran aquí.
15 FV=PV(1+R)**n
16 FV= Valor futuro
17 PV=Valor Presente
18 """
19 pv=100
20 R=0.015
21 n=3
22 def Valor_futuro(pv,R,n):
23     return (pv*(1+R)**n)

```



```

INFORME SABATICO 2024/DOCUMENTOFINAL-CAPITULO2/CAPITULO
ejemplo-interessimple.py', wdir='C:/Users/SONY/Desktop
sabatico-2023/SEGUNDO INFORME SABATICO 2024/DOCUMENTOF
CAPITULO2/CAPITULO 3/SCRIPTS')

In [7]: Valor_futuro(100,.015,3)
Out[7]: 104.56783749999997

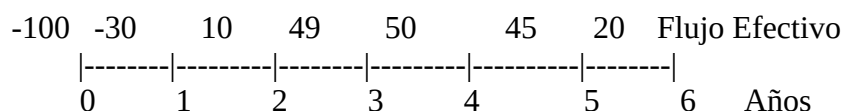
In [8]:

```

Fig 3.3 Calculo del interés simple

Ejemplo 2

Suponiendo que se invierte \$100 hoy y \$30 el año que viene, la entrada de efectivo futura será de \$10, \$49, \$50, \$45 y \$20 al final de cada año durante los próximos 5 años, comenzando al final del segundo año, vea el cronograma y su flujo de efectivo.



Una entrada de efectivo tiene un signo positivo mientras que una salida de efectivo tiene un signo negativo.

¿Cuál es el valor actual neto (VAN) si la tasa de descuento es del 3,5%? VAN se define como los valores presentes de todos los beneficios menos los valores presentes de todos los costos

el VPN (Valor Presente Neto), se define como la suma de los valores presentes de todos los flujos de efectivo.

fórmula:

$$PV=FV/(1+R)**n$$

Donde:

PV Valor presente,
FV Valor futuro,
R Tasa de descuento del período.
n Número de flujos de efectivo.

```
17  -100   -30      10      49      50      45
18  |-----|-----|-----|-----|-----|
19  0       1       2       3       4       5
20  ""
21  # ARREGLO DE FLUJO_Efectivo
22  import numpy as np
23  Flujo_Efectivo=np.array([-100,-30,10,49,50,45,20])
24  for cash in Flujo_Efectivo:
25      print(cash)
26
27
```

Example array:
wdir='C:/Users/SOI
sabatico-2023/SEGI
SABATICO 2024/DOCI
CAPITULO2/CAPITULI
-100
-30
10
49
50
45
20
In [13]:

Fig 3.4 Se define un arreglo con el flujo de efectivo

fv Calcula el Valor Futuro , sintaxis

`numpy_financial.fv(tasa, nper, pmt, pv, cuando='fin')`

Dado:

pv valor presente

rate tasa de interés compuesta una vez por período

nper Número de períodos de capitalización

pmt Pagos fijos

al principio (cuando = {'begin', 1}) o al final (cuando = {'end', 0}) de cada período

Ejemplo 2

¿Cuál es el valor futuro después de 10 años de ahorrar ahora \$100, con un ahorro mensual adicional de \$100? Supongamos que la tasa de interés es del 5% (anual) compuesta mensualmente.

```
8 @author: BORJA
9 ¿Cuál es el valor futuro después de 10 años
10 de ahorrar ahora $100, con un ahorro mensual
11 adicional de $100? Supongamos que la tasa de
12 interés es del 5% (anual) compuesta mensualmente.
13 """
14 import numpy as np
15 import numpy_financial as npf
16 Valor=npf.fv(0.05/12, 10*12, -100, -100)
17 print("Valor Futuro a 10 años es",Valor )
18
19
20
```

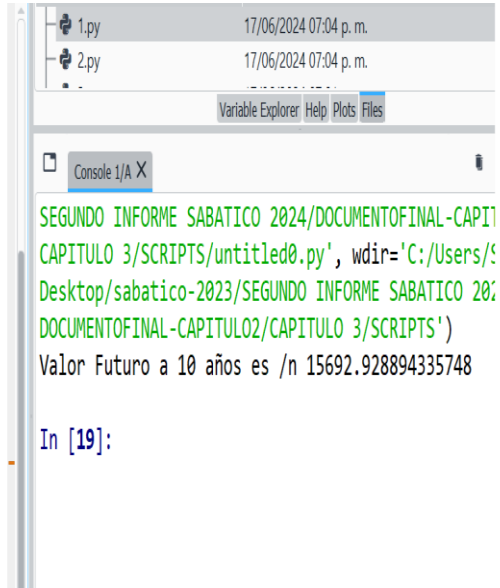


Fig 3.5 Valor futuro con ahorros mensuales y tasa de interés

Comparando diferentes tasas de interés del ejemplo 2

```
14 import numpy as np
15 import numpy_financial as npf
16 Valor=npf.fv(0.05/12, 10*12, -100, -100)
17 print("Valor Futuro a 10 años con i=0.05 es",Valor)
18
19 #COMPARANDO INTERESES
20
21 a = np.array((0.05, 0.06, 0.07))/12 #INTERESES DIF
22 interesesDiferentes=npf.fv(a, 10*12, -100, -100)
23 print("interes al 5%, 6% y 7%")
24 print(interesesDiferentes)
25
```

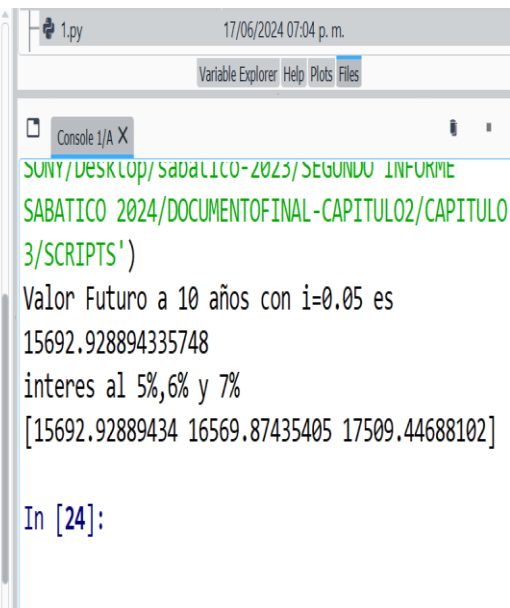


Fig 3.6 Comparación a diferentes tasas de interés

Tasa Interna de Retorno (TIR).

Sintaxis:

`numpy_financial.irr(valores)`

La **Tasa Interna de Retorno (TIR)** es el porcentaje de beneficio o pérdida que conlleva cualquier inversión.

Se ingresan los flujos de efectivo por períodos de tiempo.

Por convención, los “depósitos” netos son negativos y los “retiros” netos son positivos.

Por ejemplo, al menos el primer elemento de los valores, que representa la inversión inicial, normalmente será negativo.

Supongamos que uno invierte 100 unidades y luego realiza los siguientes retiros a intervalos regulares (fijos): 39, 59, 55, 20. Suponiendo que el valor final es 0, la inversión de 100 unidades rinde 173 unidades; sin embargo, debido a la combinación de capitalización y retiros periódicos, es la solución de la ecuación:

$$-100 + \frac{39}{1+r} + \frac{59}{(1+r)^2} + \frac{55}{(1+r)^3} + \frac{20}{(1+r)^4} = 0$$

En forma general seria:

$$\sum_{t=0}^M \frac{v_t}{(1+irr)^t} = 0$$

```

4
5 @author: BORJA
6 """
7 import numpy_financial as npf
8 TIR=round(npf.irr([-100, 39, 59, 55, 20]), 5)
9 print("Tasa Interna de Retorno", TIR)
10

```

```

.....
sabatico-2023/SEGUNDO INFORME SABATICO 21
DOCUMENTOFINAL-CAPITULO2/CAPITULO 3/SCRIP
Tasa Interna de Retorno 0.28095

In [28]:

```

Fig 3.7 Calculo de la tasa interna de retorno (**TIR**)

Cálculo del Valor Presente Neto de una serie de flujos de efectivo.

El VPN considera una serie de flujos de efectivo que comienzan en el presente ($t = 0$). El VPN también se puede definir como una serie de flujos de caja futuros, pagados al final, en lugar de al inicio, de cada período. Si se utilizan flujos de efectivo futuros, los primeros valores de flujo de efectivo [0] deben ponerse a cero y agregarse al valor presente neto de los flujos de efectivo futuros.

La fórmula general estaría dada por.

$$\sum_{t=0}^{M-1} \frac{values_t}{(1 + rate)^t}$$

Ejemplos.

Considere un proyecto potencial con una inversión inicial de \$40 000 y flujos de efectivo proyectados de \$5 000, \$8 000, \$12 000 y \$30 000 al final de cada período descontados a una tasa del 8% por período.

Encontrar el valor presente neto del proyecto:

```

5 @author: BoRJA
6 Considere un proyecto potencial con una inversión inicial de $40
7 proyectados de $5 000, $8 000, $12 000 y $30 000 al final de cad
8 a una tasa del 8% por período.
9 Encontrar el valor actual neto del proyecto:
10 """
11 import numpy as np
12 import numpy_financial as npf
13 rate, cashflows = 0.08, [-40_000, 5_000, 8_000, 12_000, 30_000]
14 Valor_Actual=npf.npv(rate, cashflows).round(5)
15 print("el valor actual del proyecto es $",Valor_Actual)
16
In [8]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/
sabatico-2023/SEGUNDO INFORME SABATICO 2024/
DOCUMENTOFINAL-CAPITULO2/CAPITULO 3/SCRIPTS/
VPNETOejmplo.py', wdir='C:/Users/SONY/Desktop/
sabatico-2023/SEGUNDO INFORME SABATICO 2024/
DOCUMENTOFINAL-CAPITULO2/CAPITULO 3/SCRIPTS')
el valor actual del proyecto es $ 3065.22267

In [9]:

```

Fig 3.8 Valor Presente Neto del proyecto.

Calcular el pago del capital del préstamo para el proyecto más los intereses

Sintaxis:

`numpy_financial.pmt (rate, nper, pv, fv=0, when='end')`

Siendo:

rate	Interés (por periodo)
nper	Numero de periodos de capitalización
pv	Valor Presente
fv=0	Valor Futuro

El pago se calcula resolviendo la ecuación:

$$fv + pv \cdot (1 + rate)^{nper} + pmt \cdot (1 + rate \cdot when) / rate \cdot ((1 + rate)^{nper} - 1) == 0$$

Si los intereses son cero.

$$fv + pv + pmt * nper == 0$$

ejemplo:

¿Cuál es el pago mensual necesario para liquidar un préstamo de \$200 000 en 15 años a una tasa de interés anual del 7,5%?

```

5 @author: BORJA
6 ¿Cuál es el pago mensual necesario para liquidar un préstamo
7 en 15 años a una tasa de interés anual del 7,5%?
8 """
9
10 import numpy_financial as npf
11 Pago_Mensual=npf.pmt(0.075/12, 12*15, 200000)
12 print("Pago Mensual $",Pago_Mensual)
13

```

Desktop/sabatico-2023/SEGUNDO INFORME
SABATICO 2024/DOCUMENTOFINAL-CAPITULO2/
CAPITULO 3/SCRIPTS')
Pago Mensual \$ -1854.0247200054619
In [11]:

Fig 3.9 Pago Mensual para liquidar préstamo

3.1 Selección de materiales.

Un buen ingeniero busca encontrar siempre el material idóneo para desarrollo de sus actividades cotidianas, de ahí depende en gran medida el éxito de sus actividades profesionales. En la Fig 3.10 se muestra una primera clasificación de los materiales, no se incluyen materiales nanométricos actuales. Este material debería cumplir cuando menos con uno de las siguientes características

- Cumplir con las especificaciones de calidad
- Respetuoso con el medio ambiente
- De preferencia biodegradable
- Resistente a la corrosión
- Relativamente barato y fácil de maquilar
- Ligero manteniendo sus propiedades estructurales
- Certificado de sus propiedades

Los gráficos “Ashby” permiten comparar propiedades específicas entre diferentes materiales, es de esperarse que los materiales se comportan

de manera diferente a diferentes condiciones de operación, así como al manejo de fluidos diferentes

la resistencia y densidad de materiales naturales, petroquímicos, entre otros.

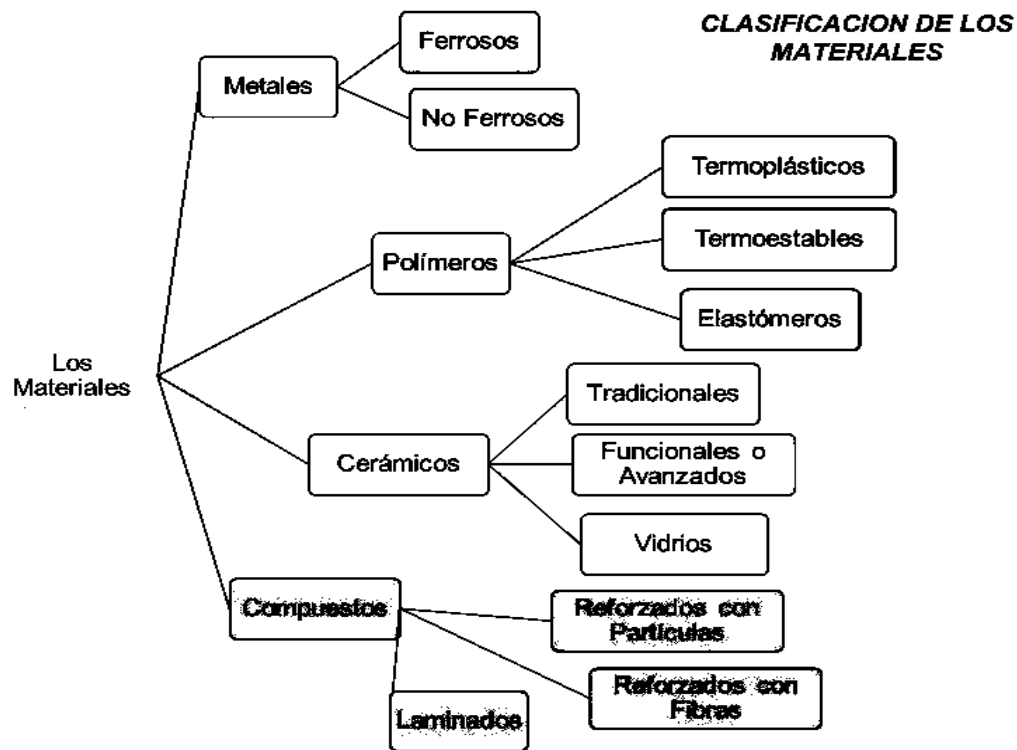


Fig 3.10 Clasificación de materiales

EJEMPLO

Se requiere un material ligero y a su vez rígido para implementarlo en el diseño de una cabeza toroidal de un recipiente.

1.- Coordinadas entre el diagrama “Módulo de Young” y su “Densidad”

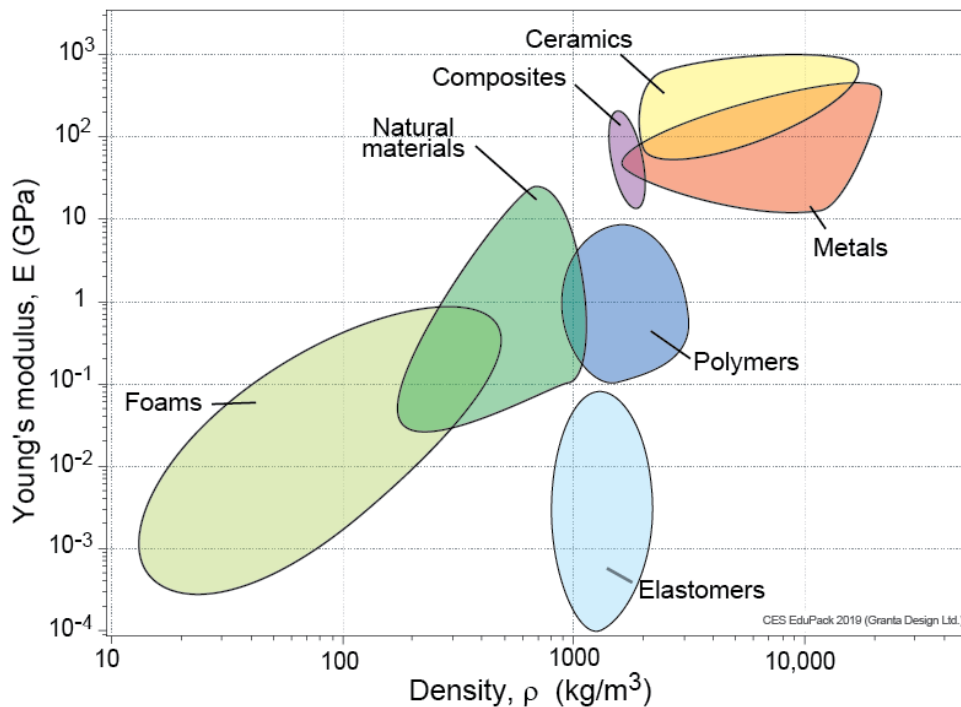


Fig 3.9 Modulo de Young-Densidad

Primeras conclusiones:

1. Los polímeros tienen valores de bajos en los módulos de Young
2. La mejor opción sería algunos metales, cerámicas estos compuestos podrían ser una mejor opción.

Analizando los costos y su tenacidad. La tenacidad es una propiedad que se define como la capacidad de absorber energía de deformación en grandes cantidades, antes de sufrir roturas.

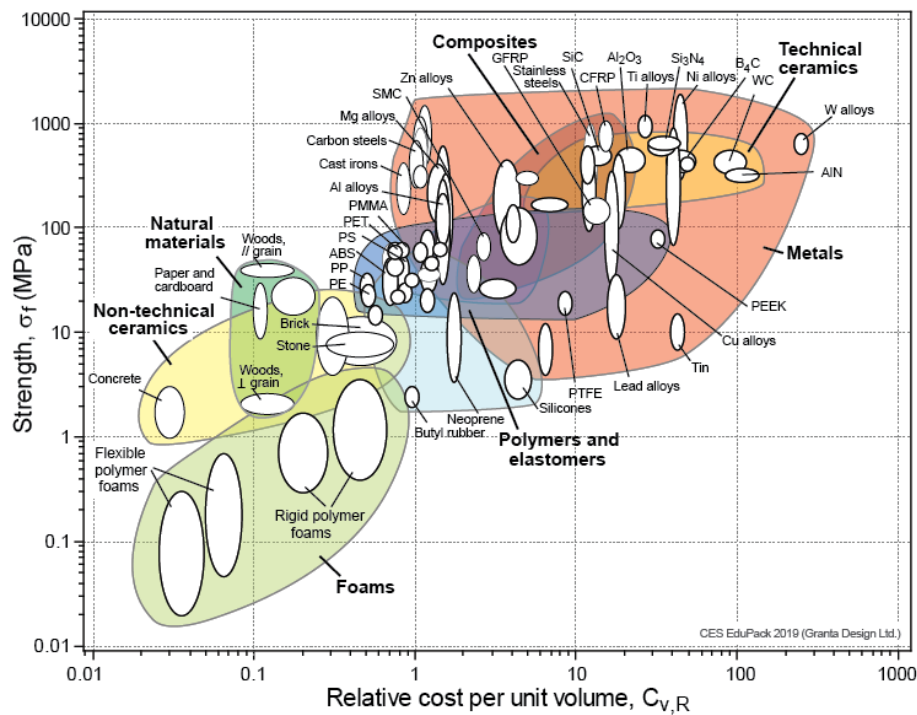


Fig 3.10 Tenacidad y costo

Los materiales compuestos son demasiado caros

La cerámica tiene la tenacidad suficiente pero la carga de compresión, tensión y flexión son no aptos.

Se puede asegurar que los metales ofrecen el mejor rendimiento general

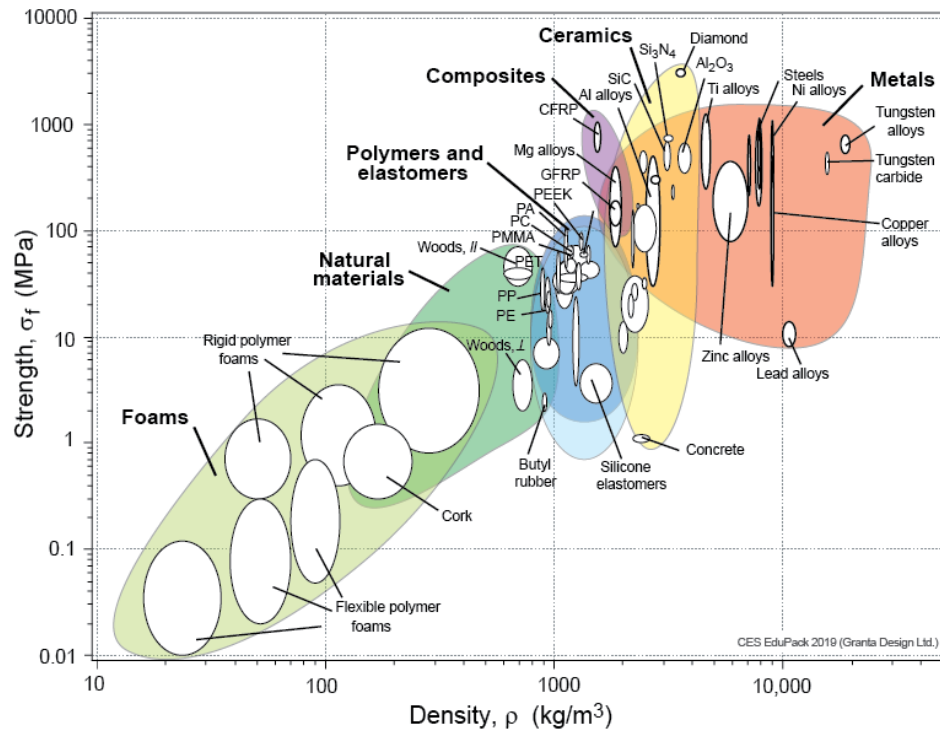


Fig 3.11 Metales y sus aleaciones

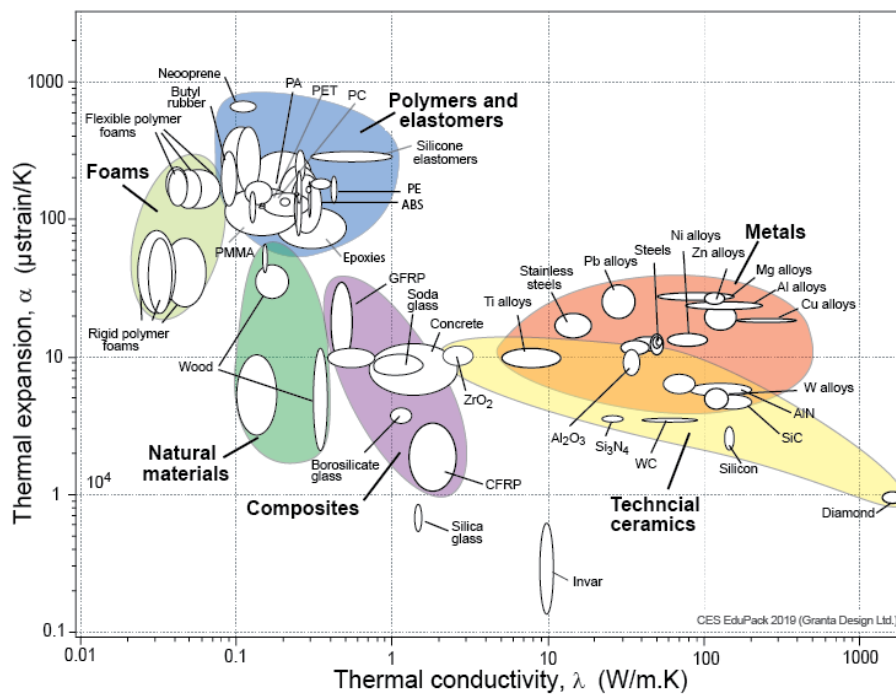


Fig 3.12 Conductividad Térmica - Expansión

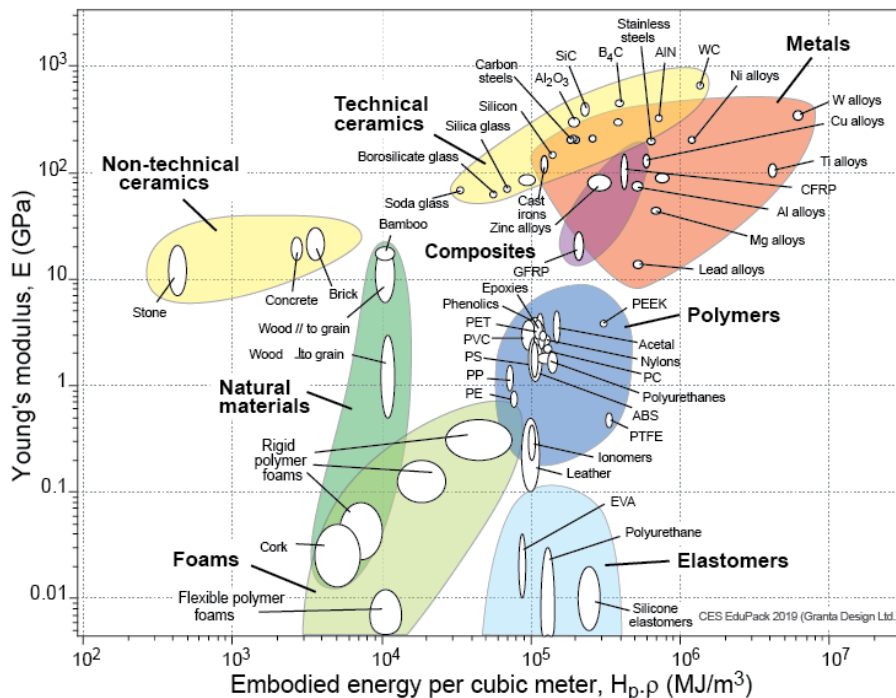


Figura 3.13. Módulo de Young frente a energía incorporada por unidad de volumen.

3.3. Estimación de costos de inversión y operación

Se describen métodos para estimar los costos de inversión y operación de procesos industriales, incluyendo el Método de Lang y el Método de Guthrie. El Método de Lang estima los costos totales de una planta multiplicando el costo de los equipos principales por un factor global que varía entre 3 y 4. El Método de Guthrie divide la planta en módulos y estima los costos aplicando factores a los costos base de cada módulo. Ambos métodos proveen estimaciones preliminares pero útiles para la planificación de proyectos industriales

Tipos de estimación de costos

Basado en “American Association of Cost Engineers (AACE)”

Tipo I. por Orden de Magnitud.

Se fundamenta en los costos de proyectos similares

La precisión de este tipo es de $\pm 30\%$.

Tipo II. Estimación proporcional.

El costo de capital se basa en el costo de los equipos principales.

Los demás costos se calculan como un porcentaje de los equipos principales.

La precisión es de $\pm 30\%$.

Tipo IV. Definitiva (control del proyecto).

Se consolida a partir de una planeación detallada y diagramas de Gantt adecuados día a día

La precisión probable es de $\pm 10\%$.

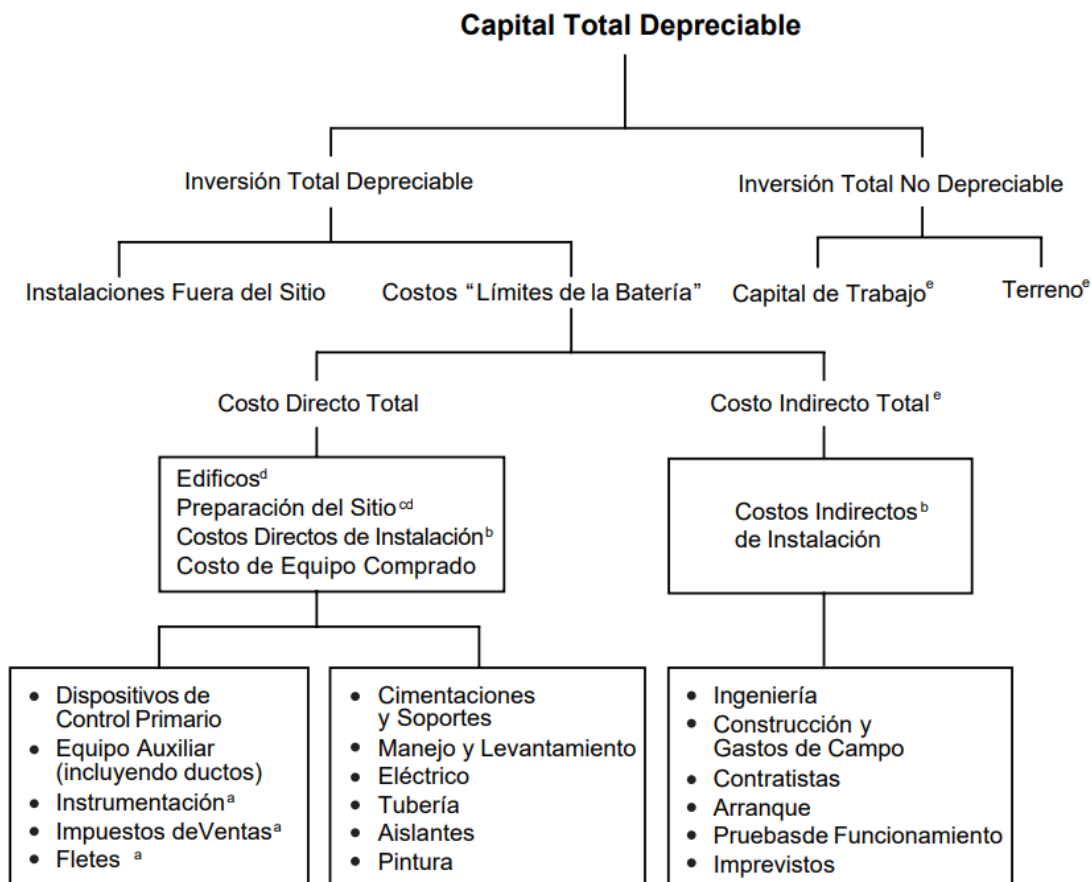


Fig 3.14 Capital Total Depreciable

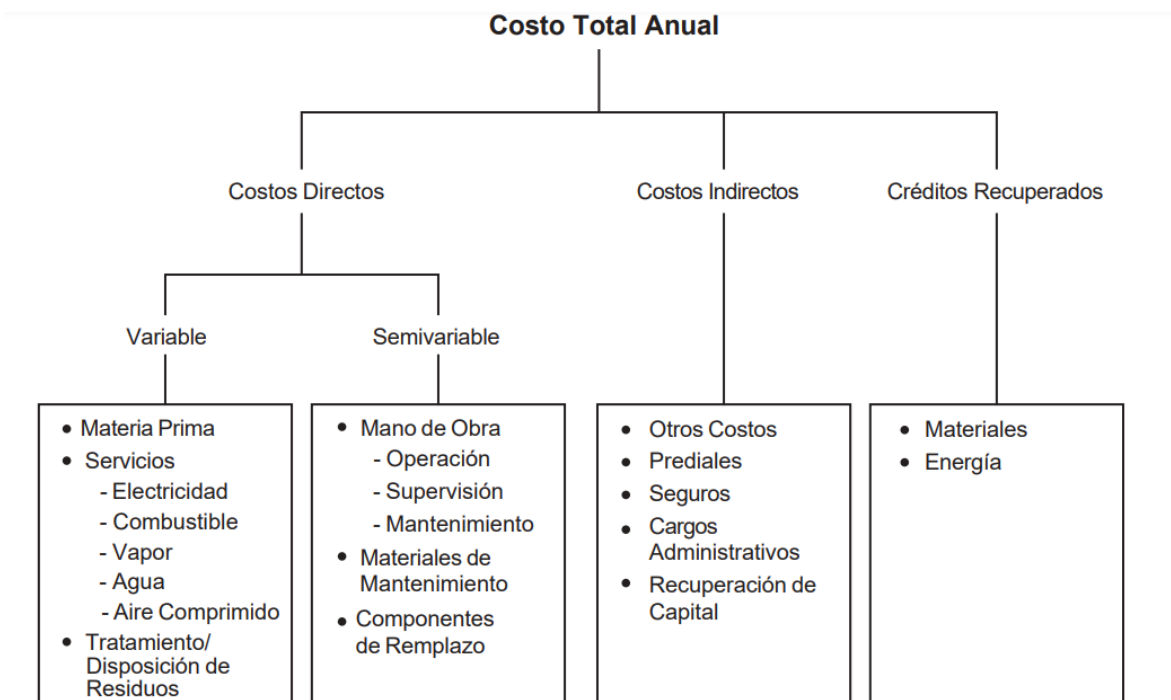


Fig 3.15 Elementos de costos anuales

Los Índices de costos se derivan del valor del dinero que no es constante en el tiempo, la tasa de variación del nivel de precios está sujeta a la “inflación”

La actualización de los costos para la estimación se utiliza los “índices de costes” (i), que permiten determinar el valor del bien a una fecha determinada.

$$\frac{C1}{C2} = \frac{I1}{I2}$$

El costo actual sería

$$C2 = C1 \frac{I2}{I1}$$

Los índices se publican periódicamente (menores a cinco años) por organizaciones especializadas, por ejemplo “Chemical Engineering (CE) Plant Cost Index”



Plant Cost Index

June 18, 2024

2024 CEPCI updates: April (prelim.) and March (final)

The preliminary value for the CE Plant Cost Index® (CEPCI) for April 2024 (most recent available) decreased slightly compared to the previous month, reversing a three-month string of small monthly increases. In April, declines in the Equipment and Buildings subindices...

Fig 3.16 “Chemical Engineering (CE) Plant Cost Index”



Department of Chemical Engineering

[Reactors](#)[Separations](#)[Fluid Mechanics](#)[About](#)

Chemical Engineering Plant Cost Index

Cost professionals recommend only using the index back 5 years due to changes in technology, construction practices, labor efficiency, and formulation of the index.

Chemical Engineering magazine publishes the Chemical Engineering Plant Cost Index, which is widely used to quickly evaluate equipment and plant costs for the chemical and process industries. As of 2002, the index consisted of the weighted average of 41 PPIs (industry and commodity indices) and 12 labor cost indices, all reported by the BLS.

The Chemical
Engineering Plant
Cost Index.
Chemical

Fig 3.17 “Chemical Engineering (CE) Plant Cost Index”(Manchester)

SEARCH

Enter search terms:

Search

in this series

[Advanced Search](#)

Notify me via email or [RSS](#)

[BROWSE](#)

Collections

Disciplines

Authors

CONTRIBUTORS

[Author FAQ](#)

[Home](#) > [LIBRARY](#) > [LIB_RESOURCES](#) > [COST](#) > 6

[< Previous](#) [Next >](#)

COST INDEXES

Marshall and Swift Equipment Cost Index (Q12015)

Download

Marshall and Swift

Abstract

Marshall & Swift Equipment Cost Index was created to make comparisons between two former quarters or years. Index comparisons are developed by dividing the index for the date for which a cost is desired by the index for the date of the known cost and multiplying the resulting factor by the known cost. The Marshall & Swift Equipment Cost Indexes are based on a national average for 47 different industries. A cost index is made up of a market basket of equipment and indicates the general direction in which equipment costs are moving. They



SHARE



Fig 3.18 Marshall and Swift Equipment Cost Index (Q12015)



Últimos datos



Resultados



Metodología



Enlaces relacionados

Fig 3.19 Índice de precios de consumo, INE.

El método para la estimación de los costos de capital se puede basar en el método de "Williams"

Este método basado en la economía de escala, el capital I y la capacidad de la planta o equipo (Q) están relacionados por una expresión exponencial con dos constantes a y b , siendo.

$$I = aQ^n$$

En dos instalaciones del mismo tipo, pero diferente capacidad, sería

$$\frac{I_2}{I_1} = \left[\frac{Q_2}{Q_1} \right]^n$$

n es un factor de escala empírico, varía entre 0.45 y 0.75 normalmente es 0.6.

Método de Peters y Timmerhaus:

Método tipo factorial, basado en la clasificación de plantas industriales realizada por Lang,

Los costos se agrupan como sigue:

Costos directos: Incluyen los costos de los equipos principales, así como su instalación, tuberías, instrumentación y control, sistema eléctrico construcciones y terrenos "

Costes Indirectos: Incluyen la ingeniería y supervisión, así como los gastos de construcción.

El capital circulante se considera que varía entre el 10-20% del capital inicial.

Costos de operación

Para estimar los costes de operación como primera aproximación se considera los datos obtenidos de proyectos similares

Peters y Timmerhaus (1991) agrupa los costos de operación

A. COSTES DE PRODUCCIÓN	
<i>1. COSTES DIRECTOS DE PRODUCCIÓN</i>	
1.1 Materia prima	10-50% del coste total del producto
1.2 Mano de obra	10-20% del coste total del producto
1.3 Mano de obra de supervisión y oficinas	10-25% de la mano de obra
1.4 Servicios	10-20% del coste total del producto
1.5 Mantenimiento y reparaciones	2-10% del capital inmovilizado
1.6 Operaciones de abastecimientos	10-20% del coste de mantenimiento o, 0,5-1% del capital inmovilizado
1.7 Gastos de laboratorio	10-20% de la mano de obra
1.8 Patentes y royalties	0-6% del coste total del producto
<i>2. CARGAS FIJAS</i>	
2.1 Amortizaciones	10% del capital inmovilizado
2.2 Impuestos locales	1-4% del capital inmovilizado
2.3 Seguros	0,4-1% del capital inmovilizado
2.4 Alquileres	8-12% del valor del alquiler de la tierra o edificios
<i>3. COSTES GENERALES DE PLANTA</i>	
Incluye salarios en general, servicios médicos, seguridad y protección, restaurantes y distracciones, laboratorios, etc.	50-70% del coste de mano de obra + el coste de supervisión + el coste de mantenimiento
B. GASTOS GENERALES	
1. Costes de Administración	15% del coste de mano de obra + el coste de supervisión + el coste de mantenimiento
2. Costes de Distribución y Ventas	2-20% del coste total del producto
3. Costes de Investigación y Desarrollo	5% del coste total del producto
4. Financiaciones (intereses)	0-10% del capital total

Fig 3.20 Costos de Operación.

Costos de producción:

Son los gastos directamente relacionados con el proceso de fabricación de un producto específico, se dividen en tres grupos:

Costes directos de producción: Incluyen los gastos de adquisición de la materia prima, la mano de obra en general, las reparaciones, los suministros, los controles y la transferencia de tecnología.

Gastos fijos: Se trata de gastos que permanecen invariables independientes del volumen producido

Gastos generales: Otros gastos como administración acceso a los mercados, desarrollo o financiación entre otros

Estimación de la rentabilidad

La rentabilidad relaciona el capital total invertido con los costos de producción y los Ingresos

$$\text{Rentabilidad} = \text{Costos/ingresos totales} * 100.$$

$$\text{Rentabilidad} = \text{Ingresos totales} - \text{Inversión}$$

Principales indicadores

Período de recuperación (“payback period”):

Tiempo que transcurre hasta que la inversión se paga a sí misma

Tasa de rentabilidad (“rate of return”):

Relación porcentual entre los beneficios en un período y la inversión inicial;

Valor presente neto, VPN (“net present value”, NPV):

Valor presente de un determinado número de flujos de caja futuros originados por una inversión,

$$VPN = \sum_1^n \frac{CF}{(1+i)^K} - I$$

Donde:

CF	flujo de caja en cada período k,
n	número de períodos considerado,
i	tasa de interés

I inversión inicial

Tasa interna de retorno, TIR (“discounted cash flow”, DCF):

Interés que se consigue de la inversión inicial hasta que se cobra.

$$\sum_{K=1}^n \frac{CF}{(1 + TIR)^k} = 0$$

Si:

TIR > i (Interés del mercado) El proyecto es rentable

Tema 4 Optimización de Procesos

4.1. Modelación de procesos.

La modelación de procesos es el intento de representar la realidad por medio de ecuaciones.

La modelación matemática de procesos en ingeniería química emana de los balances de materia, energía, cantidad de movimiento (momentum), los atributos específicos de cada sustancia involucrada y su rol en el proceso de transformación tanto físico, químico, biológico, eléctrico entre otros, tomando en consideración el tiempo o sin él y a su vez que refleje con la mayor precisión posible la realidad circundante.

Los diagramas de flujo de un proceso reflejan la manera en que fluye la información contenida en una transformación química o no y en general contiene las entradas, salidas y reflujos de un objeto (equipo) a otro.

Los diagramas de proceso se emplean para interpretar y analizar la viabilidad técnico-económica, así como el estado del arte de la transformación Físico-Química-Biológica-Eléctrica.

Analizar el proceso de transformación se basa en un modelo matemático cuyos atributos son las variables de proceso, como son temperatura, presión, caudal, composiciones, áreas superficiales, geometrías entre otras muchas, las etapas son las siguientes:

La aproximación se da al comparar la solución del modelo matemático con los resultados reales, experimentales, esa convergencia permite establecer con

mejor claridad el conocimiento de los diferentes tipos de fenómenos que están involucrados y su impacto en el proceso global.

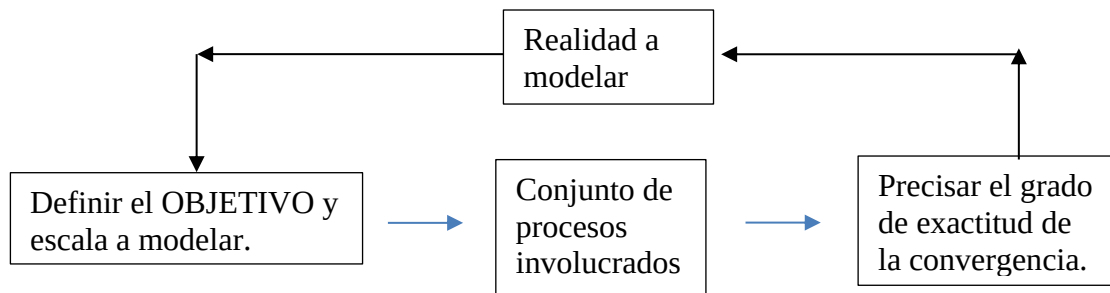


Fig 4.1 Elementos que definen un modelo matemático

Modelos matemáticos

Los modelos pueden ser matemáticos, lógicos, informacional, computacional entre otros, y existen modelos deterministas y estocásticos. y según su propósito pueden ser descriptivos, de optimización o de control.

Características básicas:

Variables: Son los objetos, (conceptos) que se busca comprender o analizar y las relaciones que se tienen entre ellos, la variable A con la variable G y con el todo.

Parámetros: Se trata de valores conocidos o controlables del modelo.

Restricciones: Son determinados límites que nos indican que los resultados del análisis son razonables.

Relaciones entre las variables: El modelo preestablece una determinada relación entre las variables

Representaciones simplificadas: entre las variables estudiadas por medio de funciones, ecuaciones, fórmulas, entre otros.

Atributos principales de un modelo matemático.

El modelo debe disponer de robustez y efectividad.

Simplicidad: Uno de los objetivos principales de un modelo matemático es simplificar la realidad y poder entenderla mejor.

Objetividad: Que sea congruente con las leyes básicas de la termodinámica.

Sensibilidad paramétrica que permita reflejar los efectos de pequeñas variaciones.

Estabilidad: Que no se modifique significativamente al existir pequeños cambios en las variables.

Universalidad: Que se pueda extrapolar a varios contextos y no sólo a un caso particular.

Como construir un modelo matemático

Definir el problema a modelar.

Establecer un modelo matemático a fin de representar el problema y establecer las variables dependientes e independientes.

Establecer hipótesis y un método de prueba de su veracidad.

Resolver el modelo matemático y extrapolarlo a las condiciones de experimentación.

Establecer las diferencias entre los datos experimentales con los datos del modelo matemático.

Interpretar los resultados y ajustar el modelo a los datos experimentales

Tipos de modelos matemáticos

De acuerdo a la información utilizada

Heurístico: Basado en posibles explicaciones sobre las causas de los fenómenos observados.

Empírico: Utiliza la información de la experimentación real.

Por tipo de representación

Cualitativos o conceptuales: Por ejemplo, se refieren a un análisis de la calidad o la tendencia de un fenómeno sin calcular un valor exacto.

Cuantitativos o numérico: Los resultados obtenidos tienen un valor concreto que tiene un cierto significado (puede ser exacto o relativo).

Según la aleatoriedad

Determinista: No hay incertidumbre, se conocen los valores.

Estocástico: Existe incertidumbre se representa como una función de la probabilidad

En función de su aplicación u objetivo

Simulación Los resultados se enfocan a predecir lo qué va suceder en determinadas condiciones.

Optimización: La solución se centra en encontrar la mejor relación entre variables para encontrar la función objetivo, maximizar un conjunto de variables y minimizar otras

De control: Se centra en mantener el control del sistema y determinar las variables que deben ajustarse para obtener los resultados buscados.

4.2. Optimización de una variable

El área de optimización ha recibido gran atención en los últimos años, principalmente por el rápido desarrollo de las ciencias de computación, incluido el desarrollo y la disponibilidad de herramientas de software sumamente amigables, procesadores paralelos de alta velocidad, y redes neuronales artificiales e inteligencia artificial.

La optimización es fundamental para cualquier problema relacionado con la toma de decisiones, ya sea en ingeniería o en ciencias económicas.

La tarea de tomar decisiones implica elegir entre varias alternativas esta opción va a estar gobernada por nuestro deseo de tomar la "mejor" decisión posible.

Las alternativas para la toma de decisiones esta descrita por la función objetivo o índice de rendimiento.

Los métodos de optimización ayudan a seleccionar la mejor alternativa de acuerdo a esta función objetivo dada.

El poder de los métodos de optimización reside en la posibilidad de determinar la solución óptima sin realmente tener que probar todos los casos posibles.

La programación lineal es un caso especial de optimización y el principal algoritmo que se utiliza es el método simplex.

Ejemplo:

Función a minimizar (una variable) $x^4 - 4x^3 - 2x^2 + 5x + 9$

En geogebra:

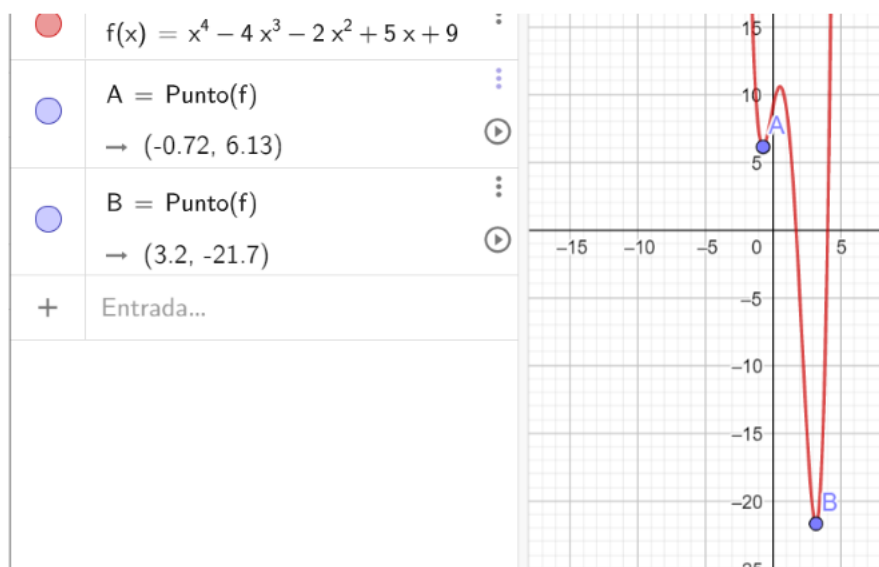


Fig 4.2 Minimización de una función, observe que existen dos mínimos A y B.

En Python

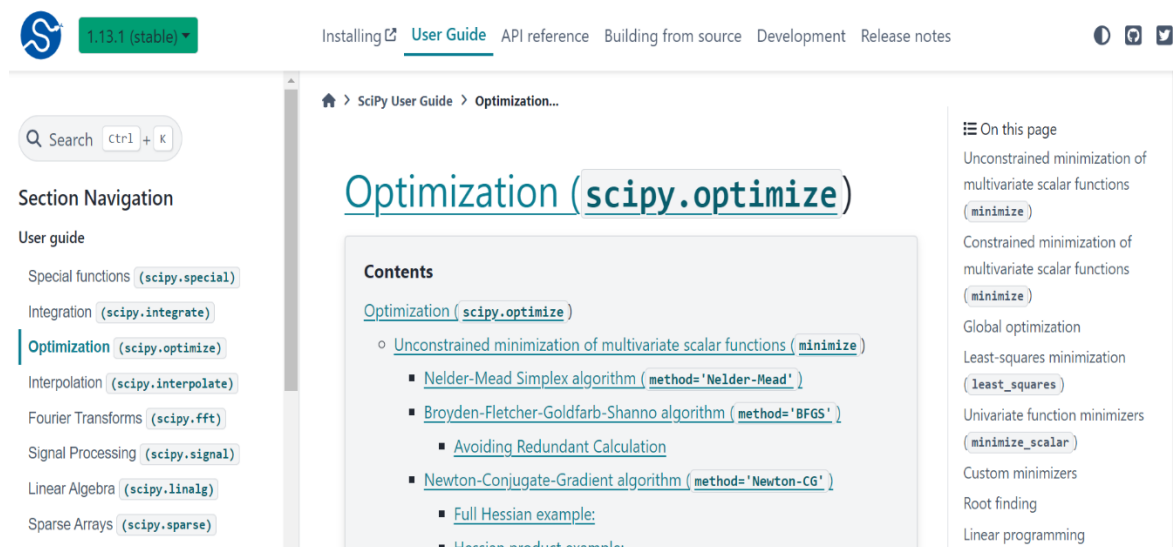


Fig 4.3 Métodos para la minimización de una función en Python

El paquete `scipy.optimize` proporciona varios algoritmos de optimización de uso común.

El módulo contiene:

Minimización no restringida y restringida de las funciones escalares multivariadas (minimizar) usando una variedad de algoritmos (por ejemplo, BFGS, Nelder-Mead simplex, Newton Conjugate Gradient, COBYLA o SLSQP).

Algoritmos de minimización por mínimos cuadrados (`least_squares`) y de ajuste de la curva (`curve_fit`).

Resolvedores de sistemas de ecuaciones de raíces multivariadas utilizando una variedad de algoritmos (por ejemplo, el híbrido Powell, Levenberg-Marquardt o métodos a gran escala como Newton-Krylov [KK]).

SINTAXIS:

Resultado=`optimize.minimize` (fun, 0, method='TNC', tol=1e-6)

(Nombre función, argumento, Método, Tolerancia)

Algunos Métodos:

`minimize(method='Nelder-Mead')`

`minimize(method='Powell')`

`minimize(method='CG')`

`minimize(method='BFGS')`

`minimize(method='Newton-CG')`

`minimize(method='L-BFGS-B')`

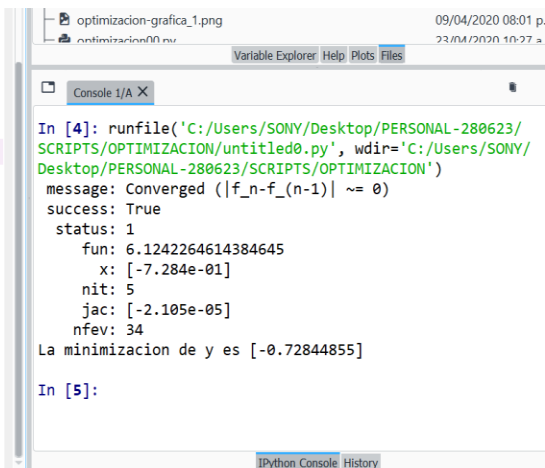
`minimize(method='TNC')`

entre otros métodos.

Ejemplos en Python.

Función a minimizar: $x^{**4} - 4*x^{**3} - 2*x^{**2} + 5*x + 9$

```
5 @author: BORJA
6 """
7
8 #Minimizar la funcion
9 #x^{4}-4x^{3}-2x^{2}+5x+9
10
11 import scipy.optimize as optimize
12 def fun(x):
13     return (x**4-4*x**3-2*x**2+5*x+9)
14
15 #tres formas de hacerlo
16 """
17 """
18 resultado=optimize.minimize(fun,0,method=
19                             'TNC',tol=1e-6)
20 print(resultado)
21 print("La minimizacion de y es",resultado.x)
```

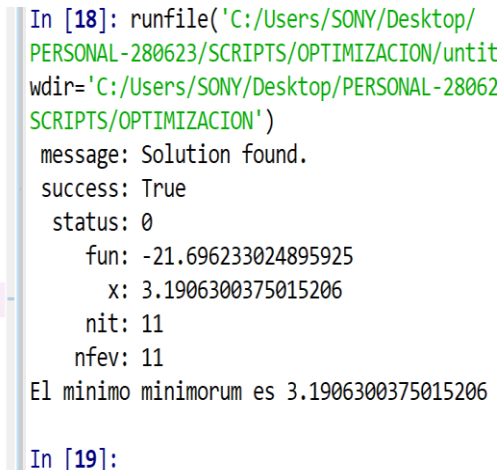


```
In [4]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-280623/
SCRIPTS/OPTIMIZACION/untitled0.py', wdir='C:/Users/SONY/
Desktop/PERSONAL-280623/SCRIPTS/OPTIMIZACION')
message: Converged (|f_n-f_{n-1}| ~ 0)
success: True
status: 1
fun: 6.1242264614384645
x: [-7.284e-01]
nit: 5
jac: [-2.105e-05]
nfev: 34
La minimizacion de y es [-0.72844855]

In [5]:
```

Fig 4.4 Solución numérica de Minimización de una función, observe que se obtuvo el primer mínimo

```
5 @author: BORJA
6 """
7 #otraforma de encontrar la solucion
8 import scipy.optimize as optimize
9 def fun(x):
10     return (x**4-4*x**3-2*x**2+5*x+9)
11
12 res=optimize.minimize_scalar(fun,bounds=(0,5),
13                             method='bounded')
14
15 print(res)
16 print("El minimo minimorum es",res.x)
```



```
In [18]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/
PERSONAL-280623/SCRIPTS/OPTIMIZACION/untit
wdir='C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-28062
SCRIPTS/OPTIMIZACION')
message: Solution found.
success: True
status: 0
fun: -21.696233024895925
x: 3.1906300375015206
nit: 11
nfev: 11
El minimo minimorum es 3.1906300375015206

In [19]:
```

Fig 4.5 Solución numérica de Minimización de una función, observe que con el método “bounded” obtuvo el mínimo-Minimorum en el rango (0,5)

4.3. Programación dinámica

Optimización Multivariable.

Ejemplo:

Determinar el valor mínimo de la función de dos variables X, Y
$$x^{**3}*y + 2*x*y^{**2} + 5*x*y + 35$$

Con dos variables X e Y en el intervalo de minimización [-1,1/2]

Para resolverlo manejamos cada variable como un vector, es decir

$$\begin{aligned} X &\longrightarrow X[0] \\ Y &\longrightarrow X[1] \end{aligned}$$

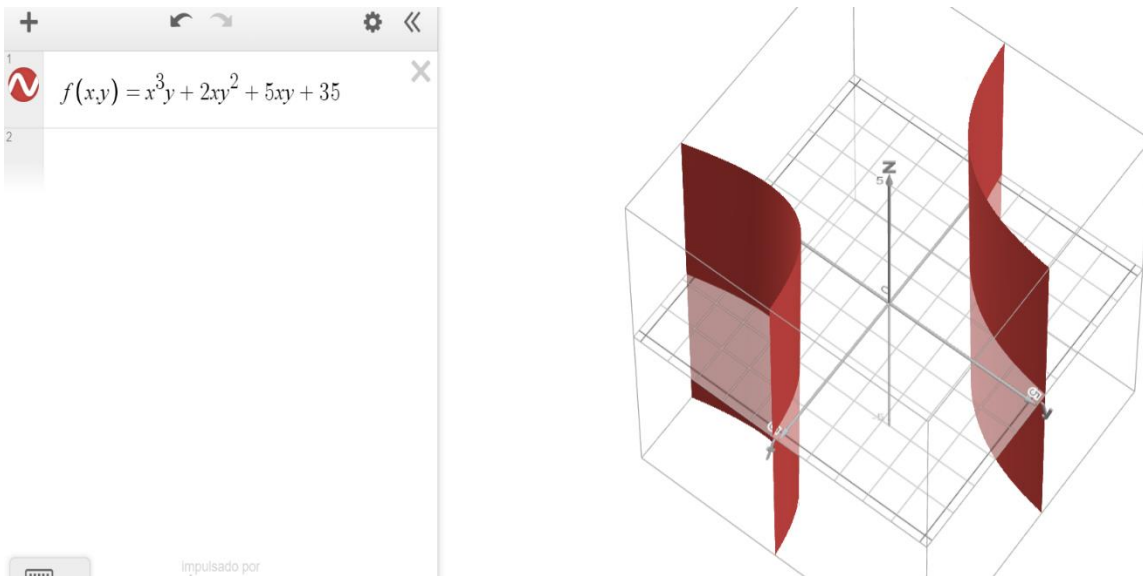


Fig 4.6 graficacion de la función $(x^{**3}*y + 2*x*y^{**2} + 5*x*y + 35)$

En Python:

```

5 @author: BORJA
6 """
7 import scipy.optimize as optimize
8 #Lo manejamos como un vector x -->[x0] , y-->[x1]
9 def fun(x):
10     return (x[0]**3*x[1]-2*x[0]*x[1]**2+5*x[0]*x[1]+35)
11 #Sin restricciones
12
13 resultado=optimize.minimize(fun,(-10,10),
14                             bounds=((-10,10),(0,20)),
15                             method='TNC',tol=1e-15)
16 print(resultado)
17 #solo en x
18 print(resultado.x)
19 print(resultado.nfev)
20 print("El minimo de la funcion (X,Y) es",resultado.x)
21
22

```

```

In [11]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-280623/SCRIPTS/OPTIMIZACION/untitled1.
wdir='C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-280623/SCR
OPTIMIZACION')
message: Local minimum reached (|pg| ~= 0)
success: True
status: 0
      fun: -12965.0
         x: [-1.000e+01  2.000e+01]
        nit: 1
         jac: [ 5.300e+03 -2.500e+02]
        nfev: 9
      [-10.  20.]
9
El minimo de la funcion (X,Y) es [-10.  20.]

In [11]:

```

Fig 4.7 Minimización de una función X, Y , solución numérica
el mínimo se encuentra en [-10,20]

Programación lineal con CVXopt

Ejemplo de programación lineal utilizando los métodos de optimización convexa que nos ofrece la librería CVXopt.

Es necesario recordar que la programación lineal es un caso especial de la optimización convexa y el principal algoritmo que se utiliza es el método simplex.

Para este ejemplo se va a maximizar la siguiente función objetivo:

$$f(x_1, x_2) = 50x_1 + 40x_2$$

con las siguientes restricciones:

$$x_1 + 1.5x_2 \leq 750$$

$$2x_1 + x_2 \leq 1000$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

Instalación del paquete : CVXopt.

```
(base) C:\Users\SONY>pip install cvxopt
WARNING: Ignoring invalid distribution ~azy-loader (C:\Users\SONY\anaconda3\Lib\site-packages)
Collecting cvxopt
  Obtaining dependency information for cvxopt from https://files.pythonhosted.org/packages/a3/52/2237d72cf007e6c36367ab8a776388a9f13511e4cfa8a71b79101ad6e0fa/cvxopt-1.3.2-cp311-cp311-win_amd64.whl.metadata
  Downloading cvxopt-1.3.2-cp311-cp311-win_amd64.whl.metadata (1.4 kB)
  Downloading cvxopt-1.3.2-cp311-cp311-win_amd64.whl (12.8 MB)
----- 12.8/12.8 MB 11.3 MB/s eta 0:00:00
WARNING: Ignoring invalid distribution ~azy-loader (C:\Users\SONY\anaconda3\Lib\site-packages)
Installing collected packages: cvxopt
Successfully installed cvxopt-1.3.2
```

Fig 4.8 Instalación de cvxopt

Ejemplo # 1

Los programas lineales pueden ser resueltos a través de la función

`solvers.lp()`

Minimizar: $2x_1 + x_2$

Restricciones:

$$\begin{aligned} -x_1 + x_2 &< 1 \\ x_1 + x_2 &> 2 \\ x_2 &> 0 \\ x_1 - 2x_2 &< 4 \end{aligned}$$

Como parte de la metodología las desigualdades deben apuntar hacia la ecuación, para ello multiplicamos por -1

```
5 @author: BORJA
6 """
7 """
8 Minimizar: 2x1 + x2
9 Restricciones:
10     -x1 + x2 < 1
11     x1 + x2 > 2
12     x2 > 0
13     x1 - 2x2 < 4
14 """
15 from cvxopt import matrix, solvers
16
17 A = matrix([ [-1.0, -1.0, 0.0, 1.0],          #Columna X1
18             [ 1.0, -1.0, -1.0, -2.0] ])      #Columna de X2
19
20
21 b = matrix([ 1.0, -2.0, 0.0, 4.0 ])          # Resultados de la desigualdad
22 c = matrix([ 2.0, 1.0 ])                    #Funcion a minimizar
23
24 solucion=solvers.lp(c,A,b)                  #Resolvidor
25
26 print("La solucion [X1,X2],es:",solucion['x']) #Imprimir en X
```

Algoritmo de la gradiente descendente - DNF Free Download files

Variable Explorer Help Plots Files

Console 1/A X

```
3: 2.4999e+00 2.4998e+00 1e-03 :
2e-04 5e-04
4: 2.5000e+00 2.5000e+00 1e-05 :
2e-06 5e-06
5: 2.5000e+00 2.5000e+00 1e-07 :
2e-08 5e-08
Optimal solution found.
La solucion [X1,X2],es: [ 5.00e-01
[ 1.50e+00]
```

In [28]:

Fig 4.9 solución numérica a un problema de optimización lineal

EJEMPLO # 2

Para este ejemplo se va a maximizar la siguiente función objetivo:

$$f(x_1, x_2) = 50x_1 + 40x_2$$

con las siguientes restricciones:

$$\begin{aligned}x_1 + 1.5x_2 &\leq 750 \\ 2x_1 + x_2 &\leq 1000 \\ x_1 &\geq 0 \\ x_2 &\geq 0\end{aligned}$$

Programa comentariado:

```
# Ejemplo programación lineal con CVXopt
# importando módulos necesarios

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy import optimize
import cvxopt

# Resolviendo el problema con cvxopt
A = cvxopt.matrix([[-1., -2., 1., 0.],
                  [-1.5, -1., 0., 1.]])
# columna de x1
# columna de x2

b = cvxopt.matrix([750., 1000., 0., 0.])
# resultados

c = cvxopt.matrix([50., 40.])
# función objetivo

# utilizando el resolvidor de cvxopt y resolviendo el problema en "solución"

solucion=cvxopt.solvers.lp(c,A,b)

#imprimiendo la solución.

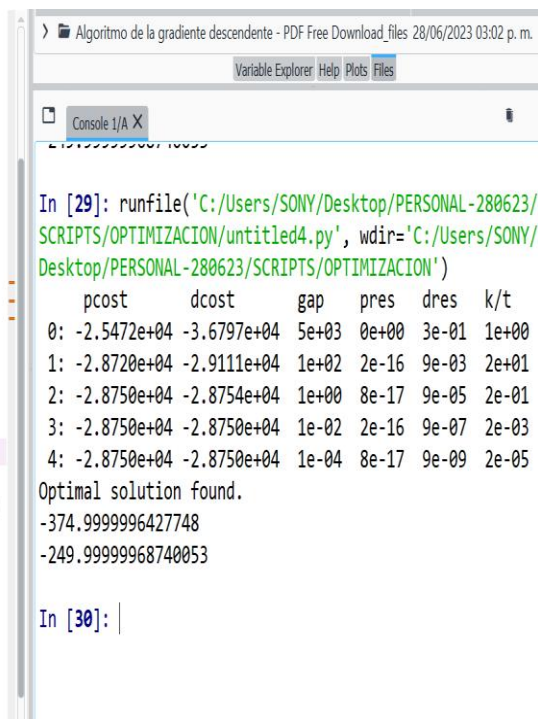
print(solucion['x'][0])      #Para el vector en X[0]
print(solucion['x'][1])      # Para el vector en X[1]
```

En Python se tiene:

```

8 @author: BORJA
9 """
10 #Programa comentariado:
11 # Ejemplo programación lineal con CVXopt
12 # importando modulos necesarios
13
14 import matplotlib.pyplot as plt
15 import numpy as np
16 from scipy import optimize
17 import cvxopt
18
19 # Resolviendo el problema con cvxopt
20 A = cvxopt.matrix([[-1., -2., 1., 0.],          # columna de x1
21                  [-1.5, -1., 0., 1.]])        # columna de x2
22 b=cvxopt.matrix([750., 1000., 0., 0.])        # resultados
23
24 c = cvxopt.matrix([50., 40.])                # funcion objetivo
25
26 # utilizando el resolvidor de cvxopt y resolviendo el problema en solucion
27
28 solucion=cvxopt.solvers.lp(c,A,b)
29
30 #imprimiendo la solucion.
31
32 print(solucion['x'][0])                      #Para el vector en X[0]
33 print(solucion['x'][1])                      # Para el vector en X[1]
34

```



```

> Algoritmo de la gradiente descendente - PDF Free Download_files 28/06/2023 03:02 p.m.
Variable Explorer Help Plots Files

Console 1/A X

In [29]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-280623/SCRIPTS/OPTIMIZACION/untitled4.py', wdir='C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-280623/SCRIPTS/OPTIMIZACION')

      pcost      dcost      gap      pres      dres      k/t
0: -2.5472e+04 -3.6797e+04 5e+03 0e+00 3e-01 1e+00
1: -2.8720e+04 -2.9111e+04 1e+02 2e-16 9e-03 2e+01
2: -2.8750e+04 -2.8754e+04 1e+00 8e-17 9e-05 2e-01
3: -2.8750e+04 -2.8750e+04 1e-02 2e-16 9e-07 2e-03
4: -2.8750e+04 -2.8750e+04 1e-04 8e-17 9e-09 2e-05
Optimal solution found.
-374.9999996427748
-249.99999968740053

In [30]:

```

Fig 4.10 Solución numérica a un problema de optimización lineal

Optimal solution found.
-374.9999996427748
-249.99999968740053

Resolviendo la optimización por medio de la representación gráfica.

Resolviendo la optimización gráficamente.

x_vals = np.linspace(0, 800, 10) # 10 valores entre 0 y 800

y1 = ((750 - x_vals)/1.5) # $x_1 + 1.5x_2 = 750$

y2 = (1000 - 2*x_vals) # $2x_1 + x_2 = 1000$

plt.figure(figsize=(10,8)) #Definiendo el tamaño figura

plt.plot(x_vals, y1) #El valor de la linea y1

plt.plot(x_vals, y2) #El valor de la linea y2

plt.plot(375, 250, 'b*', markersize=15) #El asterisco

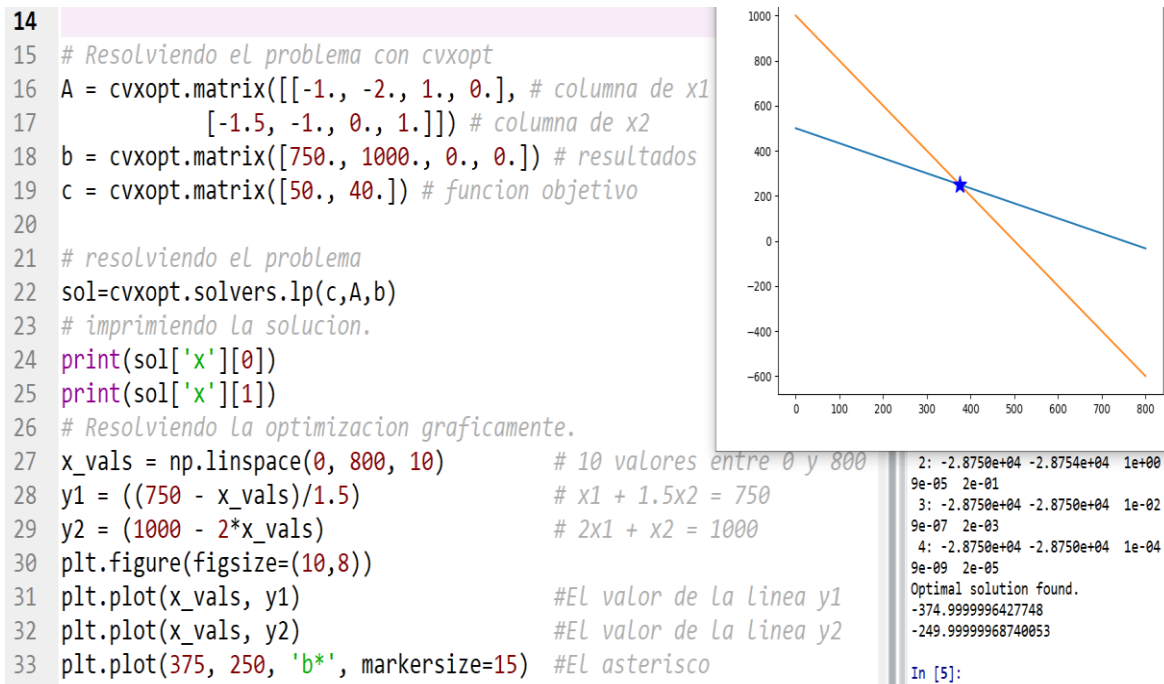


Fig 4.11 Solución grafica a un problema de optimización lineal, observe que la solución grafica coincide con la solución numérica

Colocando la región factible.

Región factible

y3 = np.minimum(y1, y2)

#Calculando el minimo

plt.fill_between(x_vals, 0, y3, alpha=0.15, color='b')

#Llenando entre limites

plt.axis(ymin = 0)

#Colocando ymin=0

plt.title('Optimización lineal')

#Titulo

plt.legend()

#Leyenda

plt.show()

#Mostrar

Quedando:

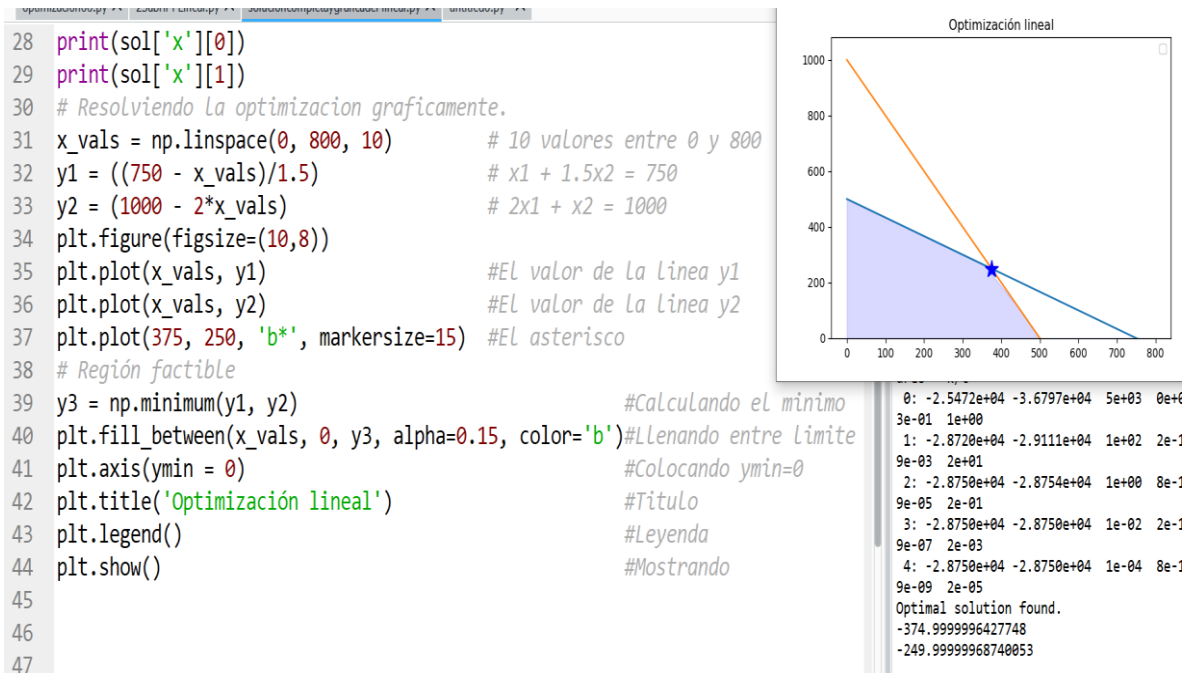


Fig 4.12 Representando la solución grafica a un problema de optimización lineal, con la región factible

Sea La producción de Sillas y Mesas bajo las siguientes restricciones productivas:

Objetivo Empresarial: (Función Objetivo)

Sillas = X
Mesas = Y
 $X \leq 4$
 $2Y \leq 12$
 $3X + 2Y \leq 18$
 $x \geq 0$
 $y \geq 0$
132

Función Objetivo: MAXIMIZAR: $3000X + 5000Y$

En geogebra:

- 1.- Escribir todas las ecuaciones en una sola entrada con la UNION de todas las restricciones
- 2.- Escribir las ecuaciones como igualdades
- 3.- Definir intersecciones en cada punto de la figura creada
- 4.- Escribir la función objetivo, igualando a cero
- 5.- En configuración poner objeto móvil
- 6.- Mover la línea de la función objetivo hasta lograr el máximo en un vértice, iniciamos en (0) hasta lograr el máximo

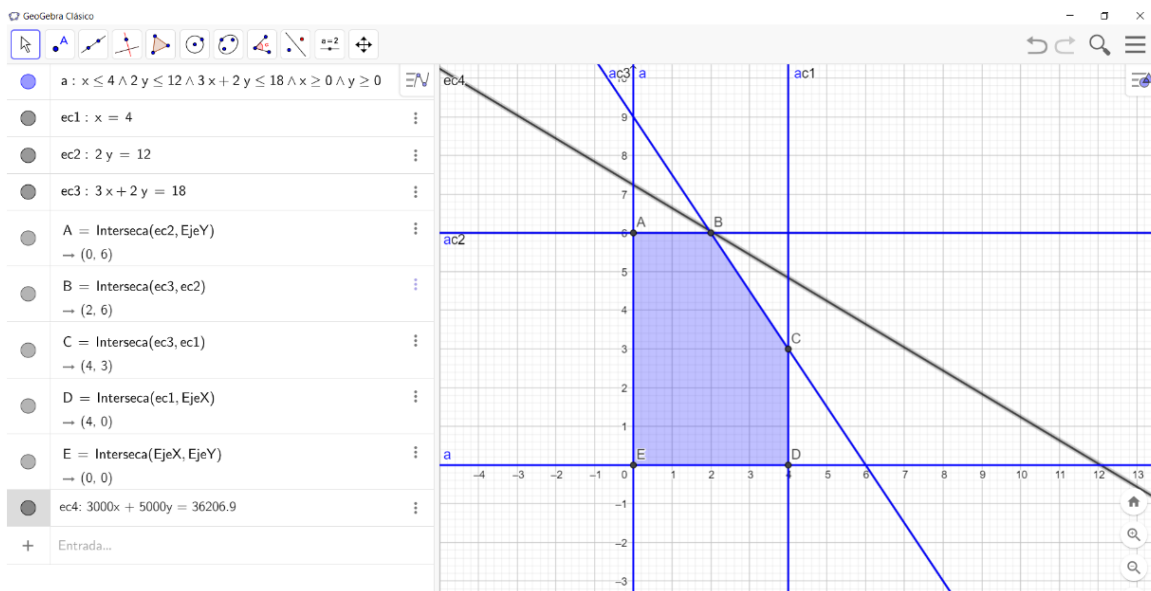


Fig 4.13 Solución grafica con geogebra a un problema de maximización simple

El valor máximo se encuentra en el vórtice B con (2,6)

Ejemplo: Maximización de Beneficios.

Los insumos de una empresa son los recursos que utiliza para producir bienes o servicios

Los insumos más comunes son el trabajo, el tiempo, la energía que las personas dedican a la producción, y el capital, es decir, las herramientas, maquinaria y edificios que se utilizan en el proceso productivo.

La “función de producción” establece la relación entre los insumos y la producción, siendo estos la cantidad de bienes que una empresa puede producir.

Ejemplo:

Una empresa tiene una restricción presupuestaria de \$500 no puede gastar más de \$500 para adquirir el capital y trabajo para su proceso productivo
El costo total para contratar trabajadores es $4 \cdot \text{Trabajadores}$ y $6 \cdot \text{Capital}$ unidades de capital y todo esto no puede superar los \$500.

Se Busca encontrar la combinación de trabajo y capital que maximicen la producción y los beneficios de esta empresa.

Siendo:

Función de Producción= $(\text{Trabajadores}^{1/4}) * (\text{Capital}^{1/4})$

Función de beneficios= $5 \cdot \text{funcion_produccion} \cdot \text{Capital} \cdot \text{Trabajadores} - 5 \cdot \text{Trabajadores} - 7 \cdot \text{Capital}$

Restricción Presupuestaria= $4 \cdot \text{Trabajadores} + 6 \cdot \text{Capital} - 500$

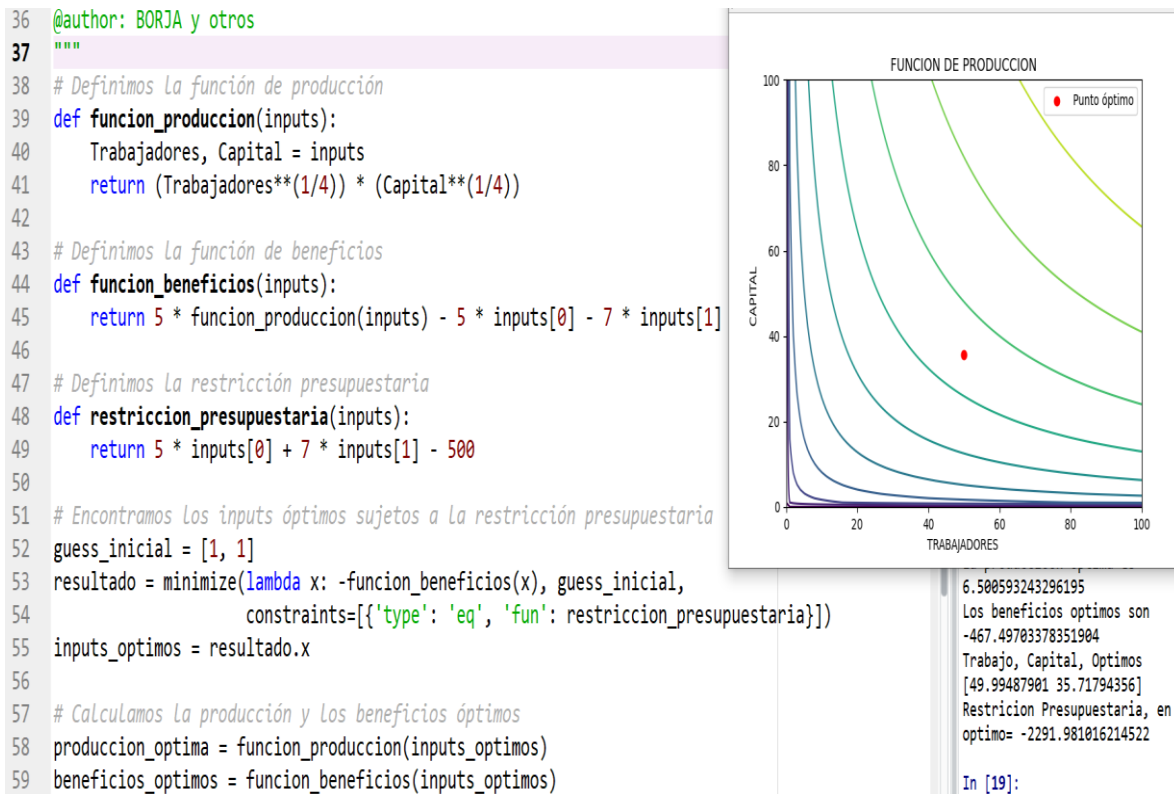


Fig 4.14 Optimización de la función objetivo de una empresa productiva

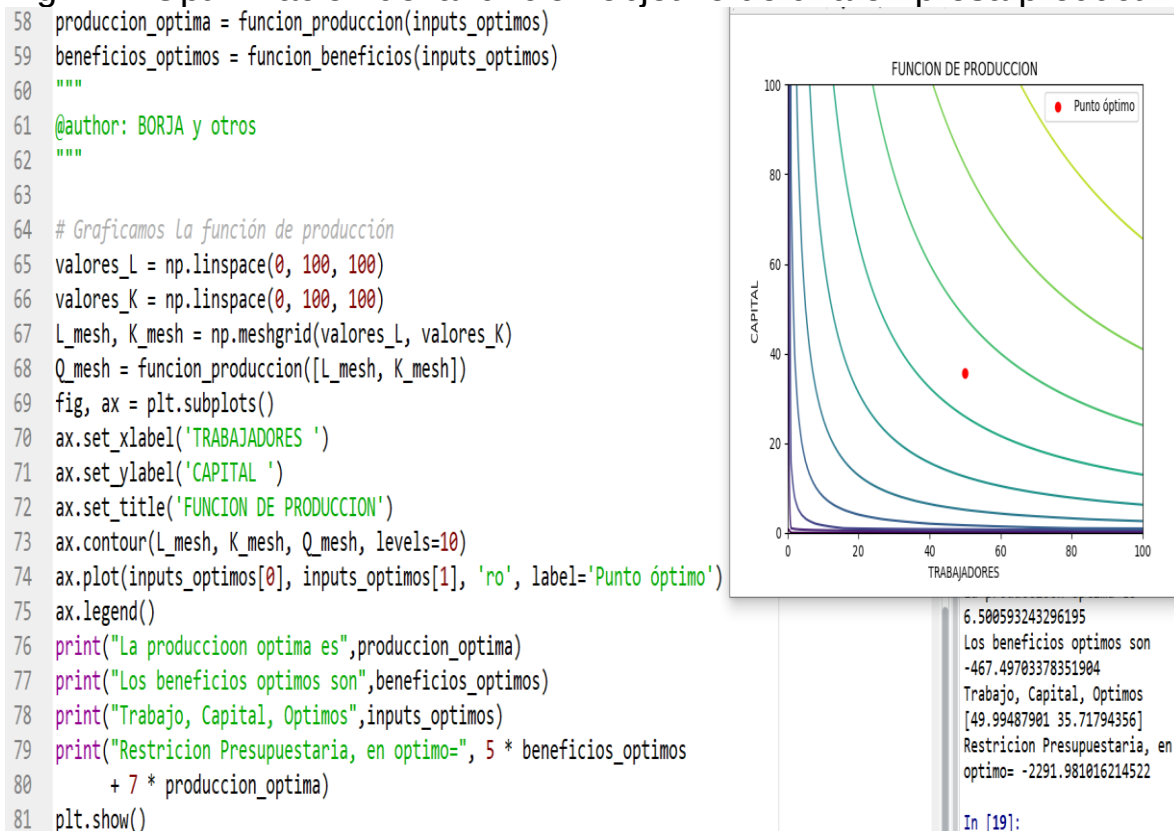


Fig 4.15 Graficacion de la función de producción

Conclusión:

Para lograr maximizar los beneficios la empresa debería utilizar aproximadamente 35.71 unidades de trabajadores y 49.99 unidades de capital por unidad de tiempo

Los Mínimos cuadrados pueden ser vistos como un problema de optimización derivado a que como su nombre lo indica, se debe minimizar la suma de los cuadrados de las diferencias entre los puntos generados por la función elegida y los correspondientes valores en los datos.

scipy.optimize ofrece algunos métodos para resolver este tipo de problemas utilizando técnicas de optimización, como por ejemplo el algoritmo Gauss-Newton.

Estos métodos pueden ser de mucha utilidad, sobre todo si la función tiene componentes no lineales.

Ejemplo

```
5 @author: Borja y otros
6 """
7 # importando modulos necesarios
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 import numpy as np
10 from scipy import optimize
11 #import cvxopt
12
13 beta = (0.25, 0.75, 0.5)
14 # funcion modelo
15 def f(x, b0, b1, b2):
16     return b0 + b1 * np.exp(-b2 * x**2)
17
18 # datos aleatorios para simular las observaciones
19 xdata = np.linspace(0, 5, 50)
20 y = f(xdata, *beta)
21 ydata = y + 0.05 * np.random.randn(len(xdata))
22
23 # función residual
24 def g(beta):
25     return ydata - f(xdata, *beta)
26
```

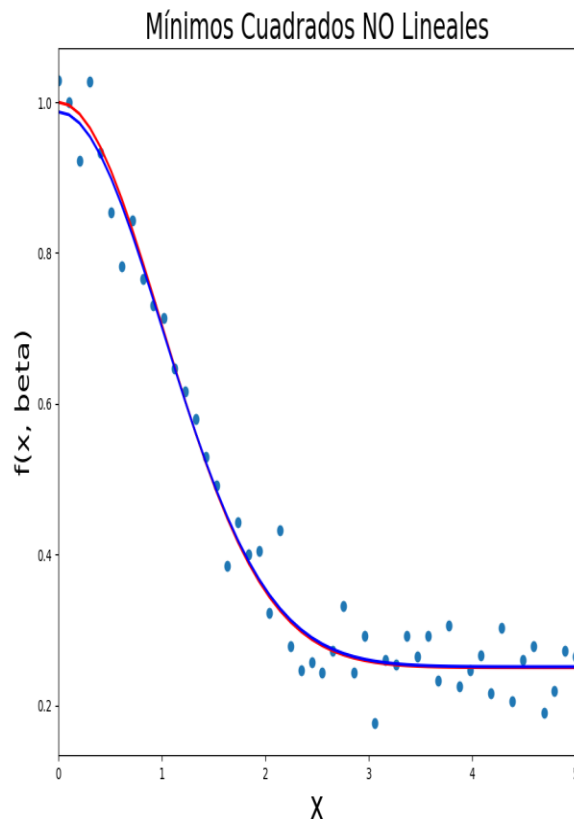


Fig 4.16 Optimización de una función utilizando mínimos cuadrados no lineales

```

24 def g(beta):
25     return ydata - f(xdata, *beta)
26
27 # comenzamos la optimización
28 beta_start = (1, 1, 1)
29 beta_opt, beta_cov = optimize.leastsq(g, beta_start)
30 beta_opt
31
32 np.array([ 0.24022514,  0.76030423,  0.48425909])
33
34 #graficamos
35 fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,8))
36 ax.scatter(xdata, ydata)
37 ax.plot(xdata, y, 'r', lw=2)
38 ax.plot(xdata, f(xdata, *beta_opt), 'b', lw=2)
39 ax.set_xlim(0, 5)
40 #ax.set_xlabel(r"$x$", fontsize=20)
41 ax.set_xlabel("x", fontsize=25)
42 ax.set_ylabel("f(x, beta)", fontsize=20)
43 ax.set_title('Mínimos Cuadrados NO Lineales', fontsize=23 )
44 plt.show()
45

```

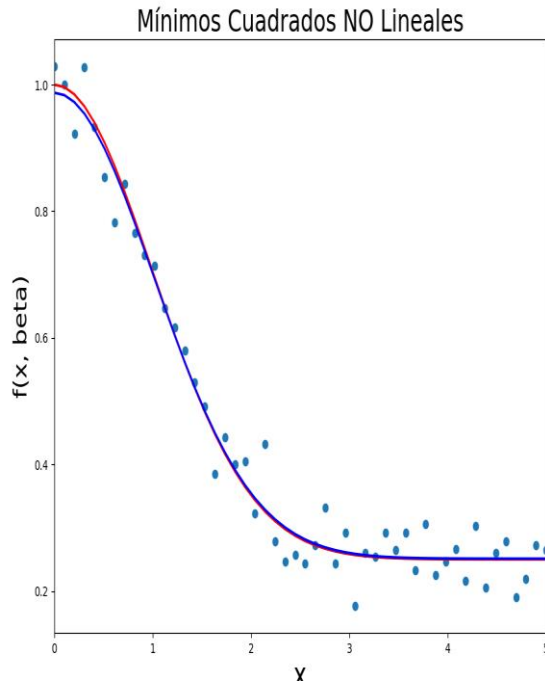


Fig 4.17 Graficación y Optimización de una función utilizando mínimos cuadrados no lineales

La curva roja es el ajuste por mínimos cuadrados no lineales que presenta una mejor aproximación que el tradicional en forma lineal exclusivamente.

Palabras Finales:

Si llegaste hasta aquí, muchísimas gracias por leer espero que lo aprendido te sirva como herramienta de trabajo para aplicar tus conocimientos en tu vida profesional.

El software libre, está ahí para provocar tu libertad. Tu libertad financiera, profesional y como persona libre dueñ@ de tu destino.

BIBLIOGRAFIA

Ashaka G.O. (2024), Python Applications in Chemical Engineering:: Process Simulation, Optimization, and Data Analysis, Ed. G.O. Ashaka

David Báez-López, David Alfredo Báez Villegas, (2024), Introduction to Python With Applications in Optimization, Image and Video Processing, and Machine Learning, Ed. Chapman & Hall

Bob Mather, (2014), Python for Finance, Ed. O'Reilly Media, Inc.

Christian Hill,(2023), Python for Chemists, Ed. Cambridge University Press

Dunn RF, El-Halwagi MM. Process integration technology review: background and J.J. Klemeš et al. Renewable and Sustainable Energy Reviews 98 (2018) 439–468 461 applications in the chemical process industry. J Chem Technol Biotechnol 2003; 78:1011–21. <https://doi.org/10.1002/jctb.738>

Foo DCY. State-of-the-art review of Pinch Analysis Techniques for Water Network Synthesis. Ind Eng Chem Res 2009; 48:5125–59. <https://doi.org/10.1021/ie801264c>.

GEKKO Optimization Suite (2023) GEKKO documentation. Retrieved from <https://gekko.readthedocs.io/>

Hill C. Basic NumPy. In: Python for Chemists. Cambridge University Press; 2023:82-101.

I. C. Kemp: Pinch Analysis and Process Integration – A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy. 2 nd Edition, Elsevier Butterworth-Heinemann, 2007 (ISBN 978-0-7506-8260-2)

L. J. Gitman, “Principles of Managerial Finance, Brief,” 3rd ed., Addison-Wesley, 2003, pg. 346.

Oladokun, O. *et al.* (2022). Gasific: A Python Tool for Biomass Gasification Process. In: Ayeni, A.O., Oladokun, O., Orodu, O.D. (eds) Advanced Manufacturing in Biological, Petroleum, and Nanotechnology Processing. Green Energy and Technology. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-95820-6_28

Ponce-Ortega José María, Ochoa-Barragán Rogelio Ochoa, Ramírez-Márquez César, (2024), Optimization of Chemical Processes. A Sustainable Perspective, Ed.

Ponce-Ortega, J.M., Ochoa-Barragán, R., Ramírez-Márquez, C. (2024). Optimization Using the Software Phyton with Spyder. In: Optimization of Chemical Processes. Springer, Cham. <https://doi.org/10.1007/978-3-031-57270-8> 14

PuLP: Python LP Modeler (2023) PuLP documentation. Recuperado de <https://coin-or.github.io/pulp/>

Python Software Foundation (2023) Python language reference. Recuperado de <https://docs.python.org/3/>

Sánchez Medina, Edgar Ivan; del Rio Chanona, Ehecatl Antonio; and Ganzer, Caroline. (2023). Machine Learning in Chemical Engineering (v1.0.0). Zenodo. Recuperado de: <https://doi.org/10.5281/zenodo.7986905>

Saurabh Chandrakar, Nilesh Bhaskarrao Bahadure ,(2023), Building Modern GUIs with tkinter and Python: Building user-friendly GUI applications with ease Ed.

Serovajsky Simon, (2024), Optimization 100 Examples, Ed. Chapman & Hal

Spyder IDE (2023) Spyder documentation. Recuperado de <https://docs.spyder-ide.org/>