



**UNIVERSIDAD
MICHOCANA DE SAN
NICOLÁS DE HIDALGO**



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

“Diseño Óptimo y Detallado de Redes C-H-O”

TESIS presentada por:

M.C. MARICRUZ JUÁREZ GARCÍA

**A la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química
como requisito parcial para obtener el grado de:**

DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

Dirigida por:

Director: Dr. José María Ponce Ortega

Co-Director: Dr. Juan Gabriel Segovia Hernández

Morelia, Michoacán

Febrero, 2023

RESUMEN

Diseño Óptimo y Detallado de Redes C-H-O

Por

M.C. Maricruz Juárez García

Marzo 2023

Dirigida por:

Director: Dr. José María Ponce Ortega y Co-director: Dr. Juan Gabriel Segovia Hernández

Las redes simbióticas Carbono-Hidrógeno-Oxígeno (CHOSYN) plantean un esquema de integración másica y energética entre plantas que procesan compuestos químicos cuyas moléculas están compuestas principalmente de átomos de carbono, hidrogeno y oxígeno. Desde un enfoque de programación matemática, la tarea de diseño de estas redes puede evolucionar en un problema altamente complejo, que involucre programación mixta entera no lineal y dependiendo del tamaño de la red puede ser un problema difícil de resolver. Aunado a esto, se debe tomar en cuenta el nivel de detalle para el modelado de los equipos de proceso, principalmente reactores y trenes de separación, lo que puede agregar más no linealidades al modelo. En este trabajo de investigación se propone una metodología con un enfoque secuencial que involucra el uso de ASPEN plus como herramienta de diseño que permita determinar configuraciones de la red con alto nivel de detalle y eludir a la vez las complejidades de utilizar programación matemática. El objetivo es agotar los recursos C-H-O disponibles en la red minimizando así el uso de recursos frescos y descargas de la red en general. Se presenta un caso de estudio para demostrar la aplicación de la metodología propuesta.

Palabras Clave: Redes de Carbono-Hidrógeno-Oxígeno, Diseño de procesos, Simulación de procesos, Intensificación de procesos, Sustentabilidad.

ABSTRACT

Optimal and Detailed Design of Carbon-Hydrogen- Oxygen Symbiosis Networks

The Carbon-Hydrogen-Oxygen Symbiotic Networks (CHOSYN) propose mass and heat integration scheme between plants that process chemical compounds whose molecules are mainly composed by carbon, hydrogen and oxygen atoms. From a mathematical programming approach, the design task can evolve into a highly complex problem involving mixed-integer nonlinear programming and, depending on the size of the network, it can be a difficult problem to solve. In addition, the level of detail for modelling the process equipment, mainly reactors and separation trains, must be taken into account, which can introduce further non-linearities into the model. This research proposes a methodology with a sequential approach using ASPEN plus as a design tool to determine a CHOSYN configuration with a high level of detail, while avoiding the problems of using mathematical programming. The aim is to deplete the C-H-O resources available in the network, thus minimizing the use of fresh resources and waste generation in general. A case study is presented to demonstrate the feasibility of the proposed methodology.

Key words: CHOSYN, Process design, Simulation, Intensification, Sustainability.

Dedicatoria

A mi mamá ejemplo de bondad, a mi papá ejemplo de fortaleza, a mi hermana Carmen ejemplo de convicción, a mi hermano Ricardo ejemplo de generosidad, a mi hermana Lucia ejemplo de resiliencia, a mi hermano Daniel ejemplo de serenidad, a mi hermano Eugenio ejemplo de perseverancia. A Aldyn, Guadalupe, Paula, María José, Emma, Liam y Diego que crezcan a través de ejemplos.

Agradecimientos

A Conacyt por el apoyo económico en el desarrollo de este proyecto, a mi asesor por la confianza y su apoyo a lo largo de estos años, a mi co-asesor por su tiempo, paciencia y el conocimiento adquirido. A mis amigos que siempre estuvieron presentes con palabras de aliento.

CONTENIDO

RESUMEN	I
ABSTRACT	II
LISTA DE FIGURAS	VI
LISTA DE TABLAS	VIII
CAPÍTULO 1. PRESENTACIÓN Y DESCRIPCIÓN DE LA TESIS	1
1.1 DESCRIPCIÓN DEL TEMA DE TESIS	1
1.2 DESCRIPCIÓN DE CADA CAPÍTULO	1
CAPÍTULO 2. INTRODUCCIÓN	3
2.1. INTRODUCCIÓN	3
2.2. ANTECEDENTES	6
CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS DE LA TESIS	9
3.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE LAS CHOSYNs	9
3.2 JUSTIFICACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN	11
3.3 HIPÓTESIS.	12
3.4 OBJETIVOS	12
3.4.1 <i>Objetivo General.</i>	12
3.4.2 <i>Objetivos Específicos.</i>	12
CAPÍTULO 4. MARCO TEÓRICO	14
4.1 MARCO TEÓRICO Y HERRAMIENTAS UTILIZADAS	14
4.1.1 Integración de Procesos	14
4.1.2 Simulación de procesos	15

4.1.3 Intensificación de procesos	17
4.1.4 Destilación térmicamente acoplada	18
4.1.5 Conceptos de sustentabilidad	19
CAPITULO 5. DISEÑO DE LA RED	23
5.1 METODOLOGÍA DE DISEÑO	23
5.1.2 Diseño de la red	23
5.2 CASO DE ESTUDIO	29
5.2.1 Plantas existentes	29
5.2.2 Descripción de las nuevas plantas	33
5.3. RESULTADOS DEL DISEÑO	35
CAPÍTULO 6. INTENSIFICACIÓN DE LA RED	46
6.1 METODOLOGÍA PARA ENCONTRAR LAS SOLUCIONES INTENSIFICADAS	46
6.2 RESULTADOS DE LA INTENSIFICACIÓN	48
6.3 EVALUACIÓN DE LOS INDICADORES DE SUSTENTABILIDAD	56
6.3.1 Evaluación económica	56
6.3.2 Evaluación ambiental	57
6.3.3 Evaluación de seguridad	59
CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES	61
7.1 CONCLUSIONES	61
BIBLIOGRAFÍA	64
APÉNDICE A. SIMULACIONES DE LOS DIAGRAMAS DE PROCESOS INVOLUCRADOS Y BALANCES DE MATERIA	69
APÉNDICE B. PRODUCTOS DEL PROYECTO	94

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 1.1. Representación esquemática de una red C-H-O.</i>	5
<i>Figura 4.1. Árbol de eventos para los incidentes continuos e instantáneos</i>	22
<i>Figura 5.1. Esquema condensado del método para el diseño de la red.</i>	25
<i>Figura 5.2. Secuencia de selección de las nuevas plantas.</i>	27
<i>Figura 5.3. Requerimiento de metanol en la planta MTP.</i>	32
<i>Figura 5.4. Requerimiento de ácido acético en la planta VAM</i>	33
<i>Figura 5.5. Orden de selección de las plantas para las diferentes soluciones.</i>	37
<i>Figura 5.6. Configuración de la red para la solución S1.</i>	39
<i>Figura 5.7. Configuración de la red para la solución S2.</i>	40
<i>Figura 5.8. Configuración de la red para la solución S3</i>	41
<i>Figura 5.9. Configuración de la red para la solución S4.</i>	42
<i>Figura 5.10. Comparación de costos variables para cada solución.</i>	44
<i>Figura 5.11. Comparación de costos fijos para cada solución</i>	44
<i>Figura 5.12. Costos variables vs costos fijos</i>	45
<i>Figura 6.1. Secuencia del método propuesto para intensificar las zonas de destilación de la red.</i>	47
<i>Figura 6.2. Resumen del problema de intensificación</i>	48
<i>Figura 6.3. Diagrama de flujo de la planta de producción de etileno</i>	49
<i>Figura 6.4. Diagrama de flujo intensificado y gráfico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción I</i>	50
<i>Figura 6.5. Diagrama de flujo intensificado y gráfico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción II.</i>	50

<i>Figura 6.6. Diagrama de flujo intensificado y grafico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción III.</i>	<i>51</i>
<i>Figura 6.7. Diagrama de flujo de la planta de producción de propileno.</i>	<i>52</i>
<i>Figura 6.8. Diagrama de flujo intensificado y grafico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción I.</i>	<i>53</i>
<i>Figura 6.9. Diagrama de flujo intensificado y grafico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción II.</i>	<i>53</i>
<i>Figura 6.10. Costos de equipo y costos de servicios para las distintas soluciones</i>	<i>56</i>
<i>Figura 6.11. TAC de las distintas soluciones</i>	<i>57</i>
<i>Figura 6.12. Valores para el Eco-Indicador 99</i>	<i>58</i>
<i>Figura 6.13. Valores para el índice de riesgo individual</i>	<i>60</i>

LISTA DE TABLAS

<i>Tabla 4.1. Categorías de impacto usadas para calcular el EI-99</i>	21
<i>Tabla 5.1. Condiciones de operación de las fuentes internas.</i>	32
<i>Tabla 5.2. Condiciones de los sumideros para el caso de estudio</i>	32
<i>Tabla 5.3. Plantas seleccionadas y sus capacidades para diferentes soluciones.</i>	37
<i>Tabla 6.1. Especificaciones de diseño para las columnas intensificadas</i>	54
<i>Tabla 6.2. Descripción de los flujos de interconexión de las secuencias destiladas.</i>	54
<i>Tabla 6.3. Costos y ahorros energéticos de las opciones intensificadas.</i>	55

CAPÍTULO 1. PRESENTACIÓN Y DESCRIPCIÓN DE LA TESIS

1.1 DESCRIPCIÓN DEL TEMA DE TESIS

En el área de estudio de la ingeniería de procesos se han desarrollado varias metodologías y herramientas que se han aplicado en el diseño y rediseño de distintos procesos y a diferentes niveles. Estas herramientas resultan particularmente útiles para el desarrollo de procesos bajo el punto de vista de una sustentabilidad integral. En esta tesis se hace uso de algunas de estas metodologías y son aplicadas al diseño de las redes C-H-O para llevar a cabo diferentes estudios que nos permitan evaluar el desempeño de estas redes bajo indicadores de sustentabilidad.

1.2 DESCRIPCIÓN DE CADA CAPÍTULO

El segundo capítulo de este trabajo nos permite entrar en el contexto de las redes C-H-O a través de la introducción y los antecedentes, donde no sólo se exponen los conceptos relacionados con el diseño de las redes C-H-O sino que también se detallan los esfuerzos a lo largo de los últimos años por desarrollar metodologías de diseño y el alcance e importancia de los resultados obtenidos.

En el tercer capítulo se expone el objeto de esta tesis; el problema de diseño de las redes C-H-O y su importancia mediante la justificación, así como los objetivos que se pretenden cubrir con el presente trabajo.

El marco teórico se encuentra en el cuarto capítulo, donde se detallan las herramientas que se emplearon en el desarrollo de la tesis.

El quinto capítulo plantea la metodología propuesta para lograr el diseño de la red, se detalla el caso de estudio utilizado y se muestran los resultados obtenidos en esta primera parte del trabajo.

En el sexto capítulo se plantea la metodología utilizada para intensificar las soluciones del capítulo anterior, estas intensificaciones se centran en los procesos de separación de la red, se muestran los resultados obtenidos del diseño y de los diferentes indicadores de sustentabilidad.

El séptimo capítulo presenta las conclusiones del presente trabajo.

CAPÍTULO 2. INTRODUCCIÓN

2.1. INTRODUCCIÓN

Desde hace ya algunas décadas, existe en el escenario industrial una preocupación creciente por la disponibilidad de recursos en general y el impacto ambiental que se genera en los procesos productivos, esto se debe principalmente al uso intensivo de los recursos debido a las limitaciones del diseño del proceso. Ante estas preocupaciones surgen en el área de ingeniería de procesos términos como sustentabilidad, economía circular y simbiosis industrial, donde el objetivo principal es aprovechar al máximo los recursos disponibles en los procesos minimizando requerimientos de materias primas, generación de desechos y costos.

En este contexto, la integración de procesos provee una herramienta eficaz para el uso eficiente de recursos dentro de un proceso [1], las redes de intercambio de calor y masa han sido ampliamente usadas para el diseño y desarrollo de procesos más sostenibles y eficientes. Las metodologías de integración se pueden implementar a distintos niveles de proceso: un equipo, una línea de proceso, un proceso o varios procesos, siendo este último nivel el caso de eco-parques industriales, refinerías y biorrefinerías. Las redes Carbono-Hidrogeno-

Oxígeno o CHOSYNs por sus siglas en inglés (Carbon-Hydrogen-Oxygen symbiosis networks) son un caso de estudio interesante de integración multi-planta debido al gran número de rutas y procesos químicos que pueden involucrarse en ellas; por ejemplo: la obtención de energéticos, combustibles, polímeros y sus precursores, alcoholes, solventes orgánicos, entre muchos otros compuestos cuya molécula se componga por átomos de carbono, hidrogeno y oxígeno.

Las CHOSYNs se han definido como un conjunto de plantas que procesan principalmente compuestos $C_{\alpha}H_{\beta}O_{\gamma}$, dispuestas geográficamente en un mismo punto y que comparten instalaciones diseñadas para permitir el intercambio, conversión, separación, tratamiento, división, mezclado y distribución de corrientes (ver *Figura 1.1*). Las instalaciones compartidas se definen como una red de intercepción, éstas constan de unidades de procesamiento las cuales se conocen como interceptores y cuyo propósito es el cambio de composición, presión y temperatura de estas corrientes con el fin de lograr las condiciones requeridas para el intercambio.

Es importante resaltar que las redes involucran el cambio químico de las corrientes según sea necesario para suministrar los requerimientos en otras plantas, o se pueden utilizar también para obtener productos de valor a partir de subproductos o desechos. Entonces, el objetivo de la integración a través de una CHOSYN es el máximo aprovechamiento de los recursos que se disponen en la red para minimizar así el uso de recursos frescos y de descargas, mejorando el desempeño económico y ambiental del sistema en general.

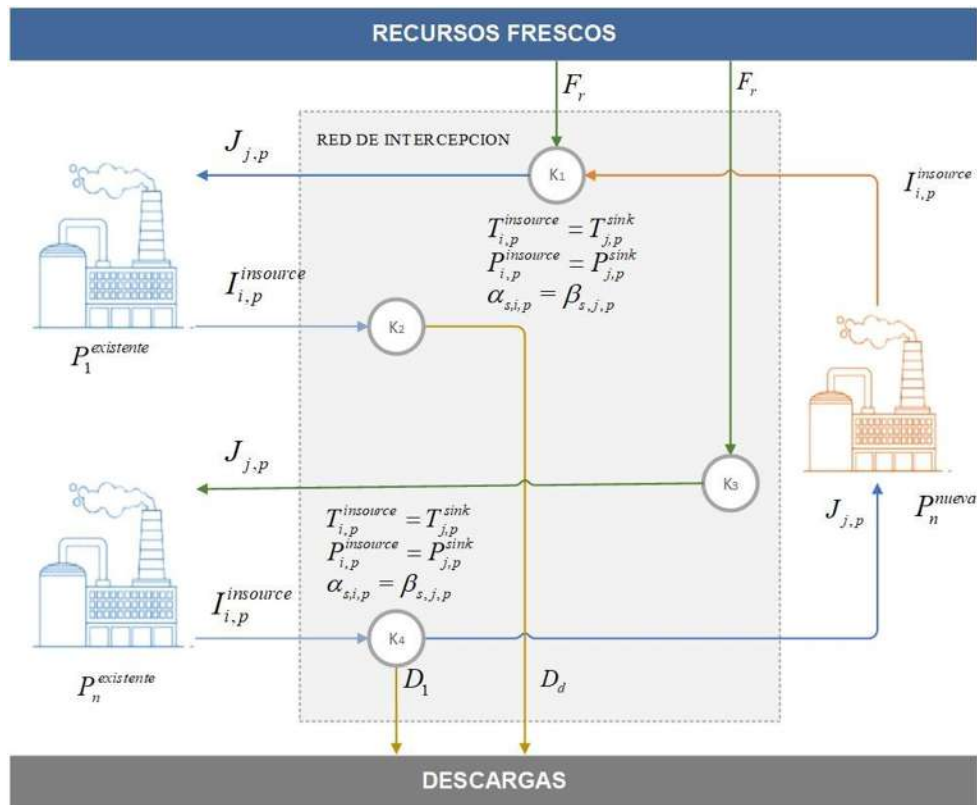


Figura 1.1 Representación esquemática de una red C-H-O.

Con la descripción anterior podemos señalar tres aspectos importantes en el diseño de las redes CHOSYN: las nuevas plantas de procesamiento e interceptores necesarios, la distribución de las corrientes que son intercambiadas a lo largo de la red y la cantidad de recursos frescos requeridos, así como la cantidad de desechos generados.

El problema de la integración de múltiples plantas se vuelve más arduo a medida que se requiere información más detallada para un diseño más descriptivo debido a la compleja relación entre las variables del proceso y la naturaleza de los procesos en sí, lo que involucra modelos termodinámicos y de transporte complejos para trenes de reacción y separación. La metodología que este trabajo propone para determinar la configuración final de una

CHOSYN tiene un enfoque secuencial e iterativo y plantea el uso de ASPEN plus como herramienta para el diseño. El simulador permitirá determinar la cantidad de recursos disponibles en la red en cualquier etapa del diseño, facilitará determinar el tamaño de las nuevas plantas de procesamiento y proporcionará información de desempeño y costos para determinar los costos totales de la red.

2.2. ANTECEDENTES

El concepto de las CHOSYNs aparece en la literatura por primera vez en 2015 [2], en este primer trabajo se establece la definición de las CHOSYNs como un conjunto de plantas ubicadas en un mismo punto geográfico que tienen instalaciones centrales compartidas diseñadas para el intercambio, conversión, separación, tratamiento, división, mezclado y distribución de corrientes que contienen compuestos formados por carbono, hidrógeno y oxígeno principalmente. Además de introducir el concepto se propuso un método de síntesis utilizando programación matemática y basada en la optimización de la superestructura de la red. En 2017, El-Halwagi [3] establece un método algebraico para la síntesis de las redes C-H-O, esta estrategia, también conocida como targeting atómico, consiste en utilizar los balances atómicos para determinar el déficit y excedente de los átomos C, H y O; de esta forma se diseña la red para satisfacer los requerimientos a partir de los excedentes.

En 2018, Topolsky et. al [4] proponen ver las CHOSYNs como un sistema “ancla-inquilino”, donde las plantas ancla son las plantas existentes o primarias que se han considerado como prioridad, y las plantas inquilino son las nuevas plantas que se pueden instalar de manera secundaria y estas pueden producir los requerimientos para las plantas existentes o solo producir productos de valor agregado a partir de las corrientes excedentes de las plantas

existentes. También proponen un método formal con un enfoque de programación matemática para la optimización del diseño de la red modelando estas interacciones anclanquinilino y buscando objetivos como el mínimo costo de la red o máxima ganancia. En este mismo, año Juárez-García et al. [5] establecen un modelo matemático disyuntivo para el diseño de las redes bajo el mínimo costo de la red y midiendo aspectos como la generación de desechos y emisiones al medio ambiente. Al-Fadhli et al. [6] propusieron hacer el diseño de la red con un enfoque multi-periodo donde se toma en cuenta los diferentes valores de los parámetros de diseño a diferentes intervalos de tiempo para optimizar la configuración de la CHOSYN. Además, Mukherjee y El-Halwagi [7] analizaron la fiabilidad de las redes por la incertidumbre asociada a las corrientes de la red.

En 2019, Panu et al. [8] enfocaron el diseño de las CHOSYNs como herramienta para la reducción de la huella de CO₂ a través de un método de optimización. Al-Fadhli et al. [9] propusieron un enfoque de diseño modular que además incluye restricciones sobre la disponibilidad de los recursos.

Para el 2020, Wang et al. [10] como contribución utilizaron un índice de seguridad para sintetizar las CHOSYNs. Un trabajo interesante fue propuesto por Topolsky et al. [11], donde el objetivo es lograr la integración simultánea de masa y energía en la red. Juárez-García et al. [12] también propusieron analizar el beneficio individual de las plantas que conforman la red a través del uso de esquemas de justicia para la síntesis de las redes.

En 2021, Farouk et al. [13] propusieron diseñar las redes de manera integral desde la etapa conceptual tomando en cuenta métricas de sustentabilidad. Farouk and Chew [14] priorizaron la integración de corrientes de agua dentro de las CHOSYNs en un modelo multiobjetivo para minimizar la generación de agua residual. Juárez-García et al. [15] abordaron el

problema de diseño a través del uso de simuladores en un enfoque sistemático y no de programación matemática donde se busca maximizar el uso de los recursos.

En 2022 se dieron nuevos enfoques para el uso de las CHOSYNs; por ejemplo, Goh et al. [16;17] propusieron las redes como una infraestructura que por sus ventajas de procesamiento integrado puede valorizar ciertos productos como lo son los bioplásticos [16] y el glicerol [17]. También, Juárez-García et al. [18] propusieron la intensificación de las secciones de separación de los procesos de la red para mejorar el desempeño sustentable de la red.

CAPÍTULO 3. JUSTIFICACIÓN Y OBJETIVOS DE LA TESIS

3.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE LAS CHOSYNs

Diferentes enfoques han sido utilizados en el problema de diseño de las CHOSYNs, principalmente se ha usado la programación matemática planteando modelos de optimización bajo uno o varios objetivos, y considerando varios aspectos de sustentabilidad como el costo de la red, el impacto ambiental y aspectos de seguridad. Sin embargo, debido a la naturaleza de estas redes donde se involucran una gran cantidad de procesos químicos que a su vez involucran un gran número operaciones y procesos unitarios, la precisión de los resultados de un diseño de una CHOSYN obtenida por estas metodologías tiene una fuerte dependencia del rigor y detalle de los modelos utilizados para todos los procesos de la red. En otras palabras, cuanto mayor sean las simplificaciones asumidas para plantear el modelo de optimización, mayor es la imprecisión de los resultados. Este problema parece obvio al igual que su solución, la cual implicaría utilizar un modelado riguroso de todo proceso y operación unitaria incluido en la red, sin embargo, en contrapeso se encuentra la dificultad de la resolución del problema de diseño que esto conllevaría. De los trabajos reportados para el

diseño de las CHOSYNs se concluye que el problema de diseño deriva invariablemente en un problema de programación mixto-entero, y si aunado a esto se considera modelar de manera rigurosa los procesos de la red, se origina ineludiblemente un modelo no lineal debido a las ecuaciones de diseño propias de la mayoría de los equipos de procesamiento. Aún más, debido a la naturaleza de estas redes existe un gran número de equipos que deberían ser tomados en cuenta para el diseño, lo que da como resultado un problema mixto-entero no lineal de gran tamaño.

El problema de diseño de las redes CHOSYNs consiste en dos tareas principales, primero determinar que nuevas plantas de procesamiento van a ser integradas y la capacidad de procesamiento requerida, la segunda tarea consiste en determinar la distribución de las corrientes, aquellas que van a ser integradas, a lo largo de toda la red. La ventaja que ofrece realizar el diseño a través de programación matemática es que estas tareas se realizan de manera simultánea asegurando así llegar a un punto óptimo dándole valores adecuados a las variables de decisión en una misma solución para uno o más objetivos. El método que este trabajo propone realiza estas tareas de forma secuencial y no podemos garantizar la optimalidad de la solución, pero su aplicación sistemática y sencilla permite generar una serie de soluciones ateniendo diferentes objetivos, después a través de un análisis usando diferentes métricas se puede evaluar el desempeño de las diferentes soluciones determinando así cual es la mejor solución de acuerdo a los intereses del tomador de decisiones.

3.2 JUSTIFICACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

Con las herramientas y recursos actuales en el área de optimización y programación matemática, este problema se puede resolver indudablemente, la cuestión es el trabajo que representa tanto plantear el problema como el resolverlo. La propuesta de este trabajo de investigación es evitar estos dos contratiempos utilizando otro enfoque de diseño basado en la simulación de procesos. Softwares comerciales de simulación de procesos permiten representar de manera exacta del diseño del proceso a través de los modelos matemáticos de los procesos y operaciones unitarias además de las propiedades termo-físicas de los compuestos y mezclas que forman parte del proceso. La interfaz intuitiva de estos softwares permite que simular procesos sea una tarea sencilla y directa en general. Por lo que la finalidad del uso de simuladores en este trabajo es precisamente facilitar la tarea del modelado y el diseño de la red. Además, este trabajo incluye como complemento llevar a cabo el análisis del diseño de las CHOSYNs mediante algunos indicadores de sustentabilidad.

El problema de utilizar modelos detallados recae en el conflicto entre el tamaño del modelo y su naturaleza, así como de los recursos necesarios para resolverlo. Una planta de procesamiento típicamente se puede dividir en tres zonas: pretratamiento, reacción y purificación. En la zona de pretratamiento se encuentran unidades y equipos que permiten a las corrientes de alimentación y recirculación alcanzar las condiciones necesarias para entrar a la zona de reacción, típicamente en intercambiadores de calor para alcanzar cierta temperatura o llegar al cambio de fase, y bombas o compresores para un cambio de presión; el reactor o reactores conforman prácticamente la zona de reacción. La zona de purificación consta de una serie de equipos para la separación del producto de los otros compuestos involucrados en el proceso, esta zona es la que contiene más unidades y con principios de

funcionamiento muy distintos, tanques flash, secuencias de destilación, compresores, intercambiadores de calor, etc. En un solo proceso se encuentran una gran cantidad de equipos, esto multiplicado por el número de procesos involucrados en la red, además considerando el conjunto de ecuaciones que conlleva el modelo riguroso de cada equipo da como resultado un modelo muy grande, con las variables y especificaciones de diseño de cada uno, las interacciones entre variables que conllevan a modelos no lineales, etc. Además, como el diseño de las redes CHOSYNs involucra la evolución e instalación de nuevas plantas esto lleva a utilizar variables booleanas lo que convierte el problema en un problema mixto-entero no lineal.

3.3 HIPÓTESIS.

Una metodología basada en simulación e integración de módulos de proceso para sintetizar redes C-H-O permitirá obtener un diseño más riguroso y preciso que los diseños de redes obtenidos mediante metodologías previas, incluyendo el uso más eficiente de los recursos y evitando problemas complejos de optimización.

3.4 OBJETIVOS

3.4.1 Objetivo General.

Desarrollar una metodología de diseño para redes C-H-O basado en el uso de un software de simulación de procesos para determinar una configuración final de la red de forma rigurosa y detallada, donde el objetivo bajo el cual se diseña la red es el máximo agotamiento de los recursos intercambiables disponibles en la red.

3.4.2 Objetivos Específicos.

- › Plantear la metodología y secuencia de diseño utilizando el simulador de procesos Aspen plus.

- › Demostrar la aplicabilidad de la metodología desarrollada mediante un caso de estudio. Este caso de estudio ha sido resuelto en trabajos previos a través de metodologías de programación matemática, se propone la comparación entre ambas soluciones para determinar el desempeño de la metodología que aquí se propone.
- › Determinar la conveniencia de utilizar procesos intensificados en la configuración de las redes C-H-O mediante una evaluación económica, ambiental y de seguridad entre una red que involucra procesos intensificados y una convencional.

CAPÍTULO 4. MARCO TEÓRICO

4.1 MARCO TEÓRICO Y HERRAMIENTAS UTILIZADAS

4.1.1 Integración de Procesos

La integración de procesos surgió en la década de 1970 con los primeros intentos para desarrollar de manera sistemática redes de intercambio energético, después estas técnicas e ideas se extrapolaron a otros aspectos de diseño como las redes de intercambio de masa, siendo las redes de intercambio de agua el ejemplo más representativo [19], seguido por las redes de hidrogeno [20], de combustible [9], gas de síntesis [21], entre otras.

Las redes de intercambio de masa pueden entenderse como un recicló fuente-sumidero [22], y las metodologías de diseño buscan una manera sistemática de asignar de manera óptima un conjunto de corrientes ricas en determinados componentes a un conjunto de corrientes pobres en dicho componente, o dirigirlas a un agente separador para asegurar la composición para ser desechadas o usadas en otras unidades de procesamiento. Este recicló fuente-sumidero tiene como objetivo minimizar el consumo de material y generación de residuos.

Las metodologías que se ha desarrollado para la síntesis de redes de intercambio de masa pueden ser clasificados en tres grupos principales: aquellos métodos basados en la tecnología

del pinch y secuenciales, los métodos simultáneos y los métodos híbridos. El primer grupo comprende todos los métodos que se han basado en la tecnología del pinch donde los diferentes objetivos del diseño son optimizados individualmente; en el segundo grupo están todos aquellos métodos que no requieren separar los objetivos de diseño, sino que todos estos aspectos son considerados de manera simultánea mientras que se busca optimizar uno o varios a la vez y estos utilizan programación matemática principalmente; en el tercer grupo están los métodos que en primer lugar utilizan una metodología targeting para determinar un objetivo de la red y luego a través de un modelo de programación matemática buscan la solución en torno al valor del primer objetivo [22].

4.1.2 Simulación de procesos

La simulación de procesos es una técnica que permite representar, a través de un modelo o réplica, las operaciones sucesivas e interrelacionadas de cualquier proceso real, ya sea de carácter natural o artificial, para conocer el comportamiento del sistema ante el cambio de las variables del proceso [23].

A través de un simulador se pueden determinar efectos de los posibles cambios sobre el proceso, predecir costos de capital y operación, calcular emisiones esperadas, y evaluar opciones de optimización e integración [24]. Para entender las aplicaciones de la simulación, se pueden analizar las distintas etapas en el desarrollo de un proyecto:

- a) investigación y desarrollo: probar la factibilidad técnica y económica del proyecto, se pueden probar diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación.
- b) Diseño: obtener todos los datos requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.

- c) Simulación de plantas existentes: para cambiar las condiciones de operación o sustituir materias primas.

Los problemas que se pueden resolver a través de simulación de procesos se dividen en tres [25]:

- a) Simulación: Se especifican las variables asociadas a las corrientes de alimentación y parámetros de diseño de los equipos, las incógnitas son las variables asociadas a las corrientes de salida.
- b) Diseño: en este problema se pueden especificar las principales variables y condiciones de alimentación y de salida y se pretende determinar especificaciones y dimensiones de los equipos.
- c) Optimización: en este caso se agrega una función objetivo y las variables sin especificar toman los valores que optimicen la función objetivo.

Actualmente existe una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, dentro de los más populares se pueden mencionar HYSYS, AspenPlus, ChemCad, ProModel, entre otros. Estos simuladores son poderosas herramientas de cálculo, cuentan con bastos bancos de datos para las propiedades de miles de compuestos y sustancias químicas, modelos termodinámicos, dimensionamiento de equipo y análisis de costos.

El Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos - Advanced System for Process Engineering (ASPEN) es un mercado líder en herramientas de modelado de proceso de diseño conceptual, optimización y monitoreo de desempeño para la industria química, polímeros, especialidades químicas, metales y minerales. Desarrollado en la década de 1970 por investigadores del Massachusetts Institute of Technology (MIT) y comercializado desde

1980 por una compañía denominada AspenTech. Aspen Plus es un simulador estacionario, secuencial modular (en las últimas versiones permite la estrategia orientada a ecuaciones). Aspen Plus tiene la base de datos más amplia entre los simuladores de procesos comerciales, simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra, además cuenta con herramientas para cálculos de costes y optimizaciones del proceso.

4.1.3 Intensificación de procesos

La intensificación de procesos es también una herramienta para el diseño sustentable y es más amplia que la integración de procesos, incluso se ha considerado como el caso límite de la integración [26], ambas ideas comparten objetivos en común como son la minimización del consumo de energía y generación de desechos con una mejora tanto económica como ambiental, sin embargo la intensificación de procesos pretende cumplir con otras tareas como mejorar la productividad, seguridad, flexibilidad y diseñar procesos simplificados [27]. Una definición aceptable de PI es cualquier cambio o desarrollo en el proceso que conduzca a una tecnología mucho más pequeña, limpia y eficiente energéticamente. La integración de proceso es capaz de reducir dramáticamente el inventario a través de equipo de menos tamaño, mayor eficiencia en los reactores, minimizar la materia prima necesaria, etc., de esta forma mejorando la seguridad del proceso [28]. Estas metodologías se pueden dividir en dos: aquellas aplicadas al equipo, que incluye reactores y equipos para transferencia de masa y energía; y aquellas aplicadas a los métodos, que son equipos híbridos como reacción-separación, o nuevos métodos de separación alternativa [29]. Una visión más general divide de las tecnologías de IP en cuatro categorías [30]: separación avanzada, reacción avanzada, reacción/separación combinadas y fuentes de energía alternativas. Los procesos de separación dentro de un proceso pueden suponer una gran fracción del capital total y de los

costos operativos [31], normalmente entre el 60 y el 80% del costo total del proceso en la mayoría de los procesos químicos [32] y entre el 40 y el 60% del consumo energético total del proceso [33]. Particularmente las unidades de operación de destilación son el proceso de separación más utilizado y una de las tecnologías más intensivas en el uso de energía y más costosas [34]. El principal interés de la intensificación de las secuencias de destilación es la búsqueda de la eficiencia energética, pero, además, las alternativas intensificadas presentan importantes ahorros de capital [35].

4.1.4 Destilación térmicamente acoplada

Las secuencias de destilación convencionales tienen ineficiencias producidas por la irreversibilidad termodinámica debida al efecto *remixing* de las corrientes de alimentación, fondos y domo de las columnas [36]. Para evitar estas ineficiencias se han desarrollado las secuencias de destilación térmicamente acopladas (TCDS) diseñadas para sistemas de destilación multicomponentes, que pueden reducir el consumo de energía hasta en un 30% en comparación con las configuraciones convencionales [37], arreglos como la columna Petlyuk pueden lograr ahorros de energía de hasta el 50% [38], también se producen ahorros de costos [39]. Ramírez-Corona et al. [40] resumieron los tipos de arreglos de destilación térmicamente acoplados más estudiados: columna principal con columna lateral (rectificador lateral y stripper lateral), columna Petlyuk; y sus alternativas simplificadas con interconexiones vapor-líquido. Caballero [36] destacó la importancia de tratar sólo alternativas termodinámicamente diferentes, ya que las diferencias entre alternativas termodinámicamente equivalentes sólo son importantes a nivel operativo. La disposición óptima suele situarse entre las secuencias totalmente acopladas y la configuración convencional, y la mejora conseguida por estas alternativas intensificadas depende de las condiciones y la composición de la alimentación.

4.1.5 Conceptos de sustentabilidad

Se han utilizado varias métricas para medir el nivel de sustentabilidad de los procesos químicos, estas no se basan únicamente en la generación de residuos y emisiones, sino en muchos otros aspectos como la eficiencia en el uso de recursos, la preservación del medio ambiente, la salud y la seguridad.

A pesar de las muchas definiciones del término sustentabilidad, es posible identificar algunos requisitos básicos que deben satisfacerse para hablar de que un proceso es sustentable. En particular, Jiménez-González [41] propuso estrategias matemáticas claras para evaluar esas métricas de sustentabilidad, en este sentido se pueden considerar como proceso sustentable que cumple cierto nivel en un marco de objetivos económicos, medioambientales, de seguridad inherente, entre otros. Según Curzons et al. [42], la evaluación de costos, la evaluación del impacto del ciclo de vida y la minimización de riesgos se encuentran dentro de este marco de desarrollo sostenible. En este trabajo se aborda la evaluación de la sostenibilidad de las CHOSYNs a través de los costos (capital y operación), el impacto ambiental (Eco-indicador 99) y la seguridad (índice de riesgo), que impactan directamente en los aspectos económicos, ambientales y sociales, respectivamente, y así en el diseño de la CHOSYNs.

4.1.6 Indicadores de desempeño usados en este trabajo

4.1.6.1 Económico

La evaluación económica de las configuraciones resultantes se aborda mediante el costo anual total de la red, esta incluye el costo total de inversión anualizado a lo largo del periodo de amortización y los costos de operación (véase la ecuación 1):

$$TAC = \left(\frac{\text{Costo total de Capital}}{\text{Periodo de retorno}} \right) + \text{Costos de Operación} \quad \text{Ecuación 1}$$

El costo de capital incluye el costo de equipo e instalación, el costo de operación incluye el costo de las materias primas y los costos de los servicios. Los parámetros para la evaluación económica se extraen de Aspen Plus y el periodo de amortización se considera de 10 años.

4.1.6.2 Eficiencia energética

Las secuencias de destilación térmicamente acopladas son energéticamente más eficientes y presentan un menor trabajo térmico que las secuencias convencionales para la misma separación, este ahorro viene determinado por la relación porcentual dada en la ecuación 2:

$$\text{Ahorro de energía} = \left(1 - \frac{Q^{\text{intensificado}}}{Q^{\text{convencional}}} \right) \times 100 \quad \text{Ecuación 2}$$

4.1.6.3 Impacto ambiental

El aspecto de impacto ambiental se evalúa mediante el Eco-indicador 99 (véase la ecuación 3). Esta metodología se basa en el análisis del ciclo de vida, en el que se ponderan diferentes categorías de daño que implica un proceso de producción, estas categorías son la salud humana, la calidad de ecosistema y uso de recursos, los minerales y los combustibles fósiles [43]. Tras ponderar cada categoría, se calcula una puntuación para el proceso global representada en una escala normalizada de puntos con resultados que permite la comparación objetiva entre un conjunto de opciones de proceso. El EI-99 puede expresarse matemáticamente mediante la ecuación 3, donde w es el factor de ponderación de los daños, es el valor de la categoría de impacto i , α_j es el valor de la subcategoría de impacto j .

$$EI99 = \sum_i \sum_j w c_i \alpha_j \quad \text{Ecuación 3}$$

Las subcategorías más importantes evaluadas son el acero necesario para los equipos, la electricidad para el bombeo y la compresión, y el vapor necesario para la calefacción; los valores de estas categorías de impacto figuran en el *Tabla 4.1*.

Tabla 4.1. Categorías de impacto usadas para calcular el EI-99

Categoría de impacto	Acero (puntos/kg) ($\times 10^{-3}$)	Vapor (puntos/kg)	Electricidad (puntos/kWh)
Carcinogénicos	1.29×10^{-3}	1.180×10^{-4}	4.360×10^{-4}
Cambio climático	1.31×10^{-2}	1.27×10^{-3}	4.07×10^{-3}
Radiación iónica	4.510×10^{-4}	1.91×10^{-6}	8.94×10^{-5}
Disminución del ozono	4.550×10^{-6}	7.78×10^{-7}	5.41×10^{-7}
Efectos respiratorios	8.010×10^{-2}	1.56×10^{-3}	1.01×10^{-5}
Acidificación	2.710×10^{-3}	1.21×10^{-4}	9.88×10^{-4}
Eco toxicidad	7.450×10^{-2}	2.85×10^{-4}	2.14×10^{-4}
Uso de suelo	3.730×10^{-3}	8.60×10^{-5}	4.64×10^{-4}
Combustibles fósiles	5.930×10^{-2}	1.24×10^{-2}	1.01×10^{-2}
Extracción de minerales	7.420×10^{-2}	8.87×10^{-6}	5.85×10^{-5}

4.1.6.4 Seguridad

La evaluación del riesgo se lleva a cabo mediante el Índice de Riesgo Individual, que pertenece a los métodos cuantitativos y se define como la frecuencia a la cual un individuo puede esperar un determinado nivel de daño como consecuencia de la ocurrencia de un determinado suceso accidental. Se determina por la frecuencia de incidentes y la probabilidad de lesión o muerte causada por estos incidentes y se establece matemáticamente mediante la ecuación 4, donde f_i es la frecuencia con la que se produce el accidente i y $P_{x,y}$ es la probabilidad de lesión o muerte causada por el mismo accidente.

$$IR = \sum f_i P_{x,y} \quad \text{Ecuación 4}$$

Para el desarrollo de este trabajo los accidentes considerados para el análisis de riesgos son jet fire, flash fire y la liberación tóxica para los accidentes de liberación continua, y la

explosión de vapor en expansión de líquido en ebullición (BLEVE), la explosión de nube de vapor (UVCE), el flash fire y la liberación tóxica para los accidentes de liberación instantánea. La frecuencia de ocurrencia de los accidentes [44] se muestra en la *Figura 4.1*.

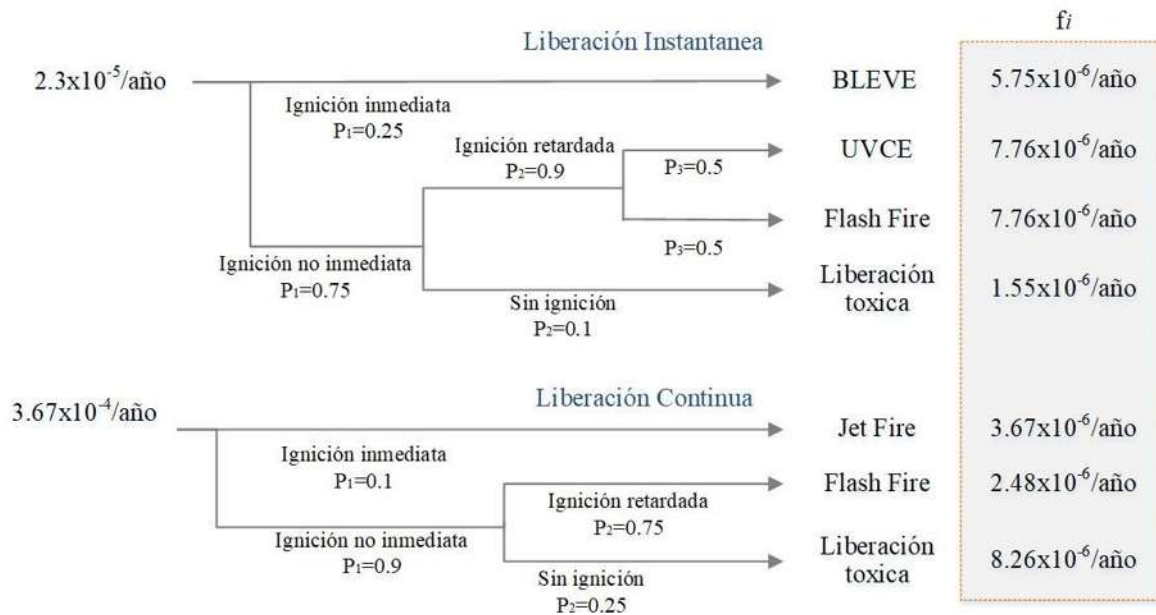


Figura 4.1 Árbol de eventos para los incidentes continuos e instantáneos

CAPITULO 5. DISEÑO DE LA RED

5.1 METODOLOGÍA DE DISEÑO

De manera general la metodología consta de una etapa de diseño donde se plantea la secuencia de diseño de la red utilizando un simulador en este caso Aspen plus para a continuación hacer una comparación entre las soluciones que se obtienen por medio de la metodología propuesta con las que se han obtenido anteriormente con otros enfoques como programación matemática en un caso de estudio, la comparación se centra en aspectos económicos y usos de recursos, pero también en el nivel de detalle de la configuración final de la red que provee la solución.

5.1.2 Diseño de la red

La metodología que se propone para el diseño de la configuración final una red CHOSYN se propone como enfoque secuencial e iterativo asistido por un simulador de procesos y en este caso se utilizará Aspen plus®. A través del simulador se determinará de forma rigurosa la cantidad de recursos disponibles en la red en cualquier etapa de diseño, también el simulador

facilitará la tarea para determinar el tamaño de las nuevas plantas de procesamiento que son invitadas a la red y que permiten convertir sustancias en otras que se requieren y aumentar el nivel de uso de los recursos. Además, el simulador brindará información de desempeño y costos para determinar los costos totales de la red, y la información de condiciones de las corrientes para proponer y evaluar las unidades necesarias para cambiar las condiciones temperatura y presión entre fuentes internas a sumideros.

La metodología mostrada en la *Figura 5.1* consta de tres tareas principales:

- 1) La identificación total de los recursos y requerimientos en los sumideros existentes.
- 2) La selección de las nuevas plantas, así como su capacidad de procesamiento.
- 3) Escalar, simular y acoplar la nueva planta a la red.

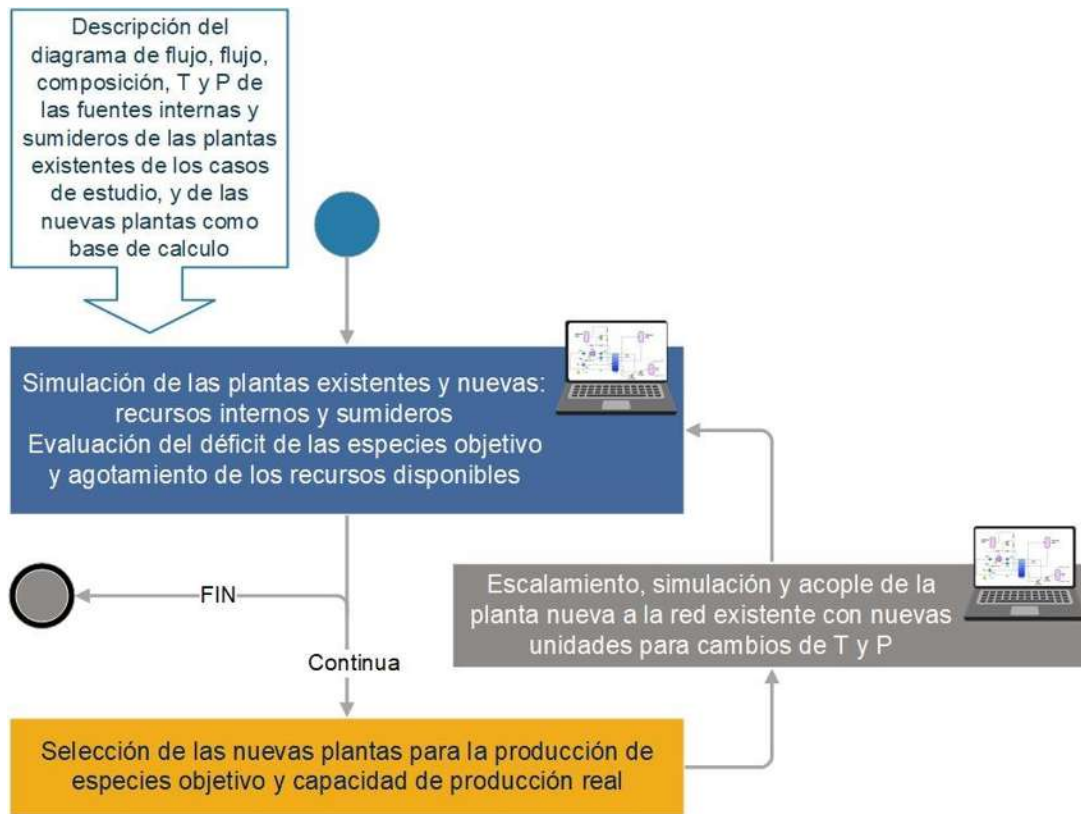


Figura 5.1. Esquema condensado del método para el diseño de la red.

Para identificar totalmente los recursos y requerimientos en los sumideros existentes se debe determinar el caudal, la composición, la presión y la temperatura que estos requieren en todas las plantas existentes. Para las nuevas plantas, primero se debe identificar el conjunto de posibles plantas nuevas de acuerdo con los recursos disponibles a través de las fuentes internas y los recursos necesarios en los sumideros. Como la capacidad de procesamiento de nuevas plantas aún no se determina en este punto, es necesaria una simulación como base de cálculo para la siguiente tarea, esta simulación se lleva a cabo con la información y descripción de los diagramas de flujo detallados de cada proceso.

Las nuevas plantas que serán integradas a la red, así como su capacidad de procesamiento, son seleccionadas a través de una estrategia iterativa. La Figura 4 muestra un diagrama de flujo detallado de la secuencia de la estrategia propuesta.

Para esto se definen como especies objetivo todas aquellas especies identificadas como requisitos en los sumideros de plantas existentes. Si estos requisitos pueden ser satisfechos a través de los recursos que ya están disponibles en la red que provienen de las otras plantas existentes no es necesario instalar plantas adicionales; de lo contrario, el siguiente paso es identificar el recurso más limitado y en qué proceso está involucrado. Este recurso más limitado se define como el recurso que está presente en las fuentes internas en menor cantidad. El tamaño de la nueva planta seleccionada está en función del recurso más limitado y su disponibilidad.

Las nuevas plantas se clasifican según sus productos en procesos directos e indirectos, el primer grupo son aquellos procesos que producen directamente una o más de las especies objetivo, los procesos indirectos son aquellos procesos que producen uno o más productos intermedios para ser posteriormente alimentados a un proceso directo. Además, los procesos se clasifican según su tipo de alimentación en proceso de alimentación interna, que son todos los procesos que operan solo con los recursos disponibles dentro de la red, y los procesos de alimentación externa que requieren materia prima desde fuentes externas.

La secuencia de selección de la *Figura 5.2* en esta metodología se propuso para llevar a cabo un agotamiento total o máximo posible de los recursos disponibles por lo que los procesos de alimentación externa son los últimos en ser seleccionados o no se seleccionan en absoluto, sin embargo, el método es general, y podría ser simplemente modificado de acuerdo con otro objetivo.

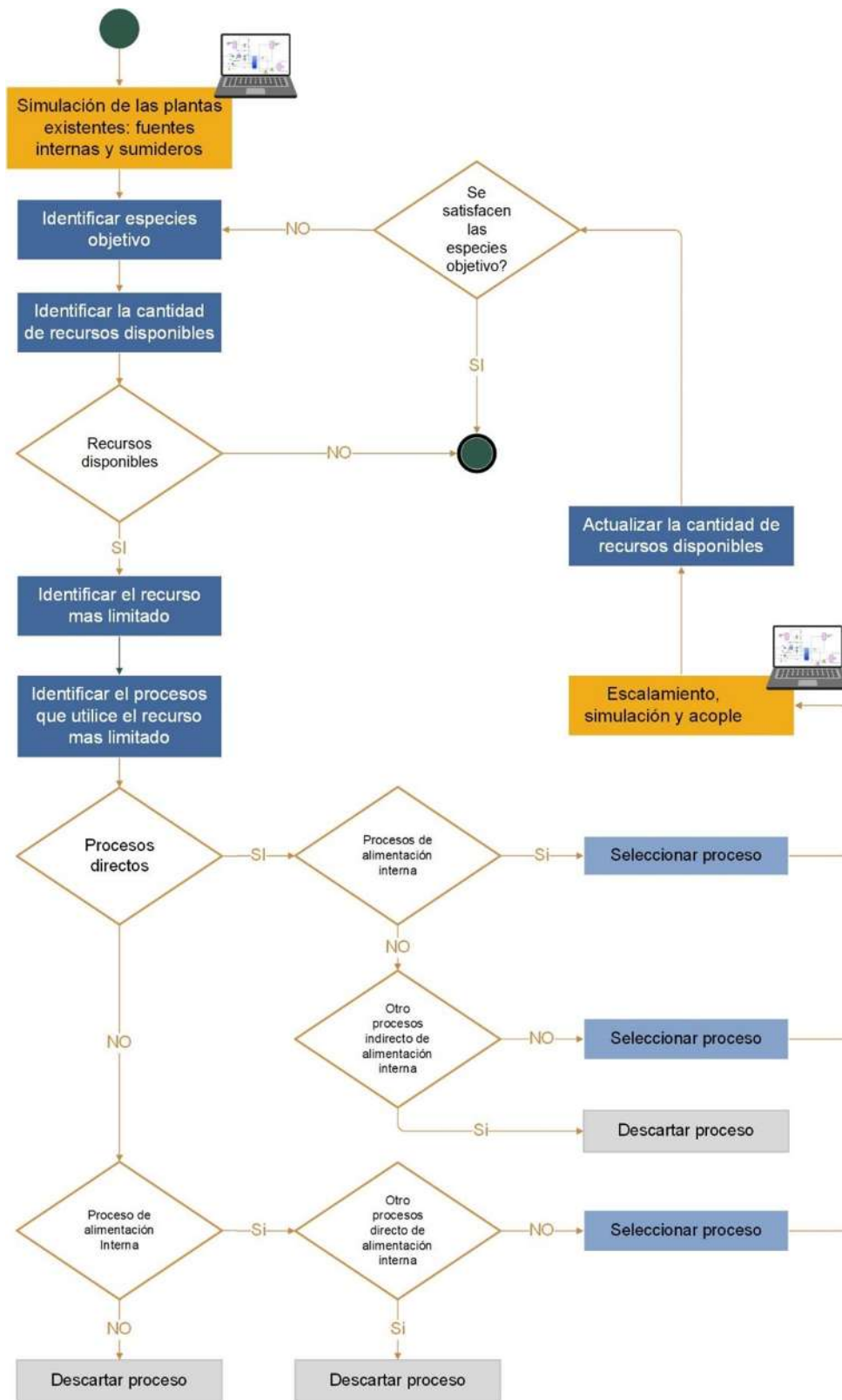


Figura 5.2. Secuencia de selección de las nuevas plantas.

La secuencia para la selección de una nueva planta se describe a continuación: se identifica el recurso más limitado y en que procesos se involucra este, si entre estos procesos hay un proceso directo con alimentación interna, se selecciona el proceso, si no es un proceso directo y tiene alimentación externa al proceso se descarta. Se selecciona un proceso indirecto con alimentación interna cuando no existe un proceso directo previamente seleccionado, y se selecciona un proceso directo con alimentación externa como última opción para satisfacer las especies objetivo. El tamaño de las nuevas plantas seleccionadas se elige de acuerdo con la cantidad del recurso más limitado para agotarlo en la iteración en curso.

Una vez seleccionado el nuevo proceso, este es escalado y simulado, inmediatamente se acopla con las plantas existentes anteriores agregando equipos necesarios para cambiar las condiciones de presión y temperatura y de esta forma vincular las fuentes internas a los sumideros, el dimensionamiento de este equipo también debe incluirse en el diseño de CHOSYN así como en la evaluación de costos. El siguiente paso es actualizar la cantidad de recursos disponibles. Si a través de la nueva planta instalada, se satisfacen los requisitos de las especies objetivo o no se pueden agregar más plantas debido al agotamiento de los recursos disponibles, concluye el método. De lo contrario, la siguiente iteración comienza a seleccionar otro proceso nuevo a partir del nuevo recurso más limitado.

Como resultado de este enfoque propuesto, hay una descripción más detallada de CHOSYN y la evaluación económica se vuelve más fácil debido a la herramienta de análisis económico asociada al software del simulador de procesos (por ejemplo, Aspen Economic Analyzer).

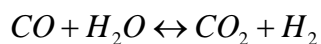
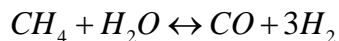
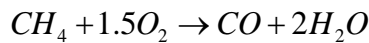
5.2 CASO DE ESTUDIO

El método se implementa en un caso de estudio propuesto que se ha resuelto mediante programación matemática en un trabajo previo [5]. Se compara el desempeño económico de las soluciones obtenidas y el uso de recursos disponibles en la red y recursos frescos.

El problema consiste en determinar la forma de satisfacer los requerimientos de metanol y ácido acético en los sumideros de dos plantas existentes mediante la explotación de las fuentes internas que ofrecen cinco plantas existentes en total. La descripción de las plantas consideradas es la siguiente.

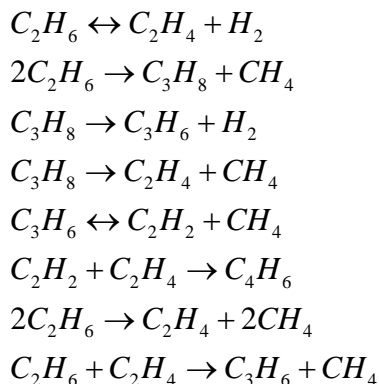
5.2.1 Plantas existentes

Proceso gas a líquido. El proceso gas a líquido incluye la auto reformación térmica (ATR) y oxidación parcial del metano [45]. Las siguientes reacciones químicas son consideradas en este proceso:



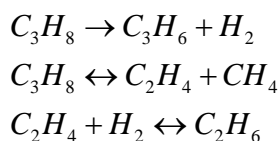
Se mezcla metano, agua y aire (oxígeno) en relaciones molares de $H_2O/CH_4 = 1.5$ y $O_2/CH_4 = 0.55$, después la mezcla es precalentada a 773 K a la entrada del reactor ATR [46].

Planta de etileno. El proceso de cracking con vapor del etano para producir etileno consta de tres secciones: craqueo y quenching, compresión y enfriamiento, y recuperación. El reactor es alimentado con una mezcla de etano con vapor de agua siendo el etileno el producto principal como se muestran en las siguientes reacciones principales [47].



El rendimiento de las olefinas se mejora reduciendo la presión parcial de los hidrocarburos, por lo que se recomienda una relación en peso vapor/etano en un rango de 0.3-0.5. Las reacciones de craqueo tienen lugar en el reactor a una temperatura entre 750-850 °C y una presión de 1.5 bar.

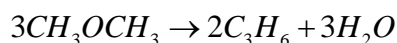
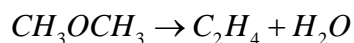
Planta de producción de propileno a partir de propano (PDH). La reacción principal en este proceso es la deshidrogenación del propano para producir propileno y las reacciones secundarias de craqueo de propano e hidrogenación del etileno [48].



El proceso incluye una sección de reacción que consta de un tren de cuatro reactores y debido a la reacción de craqueo altamente endotérmica se necesitan hornos entre reactores para mantener la temperatura entre 525-625 °C; además está la sección de separación que incluye tres etapas de compresión y enfriamiento, una Cold Box y una columna de separación propileno-propano.

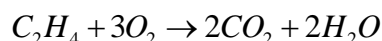
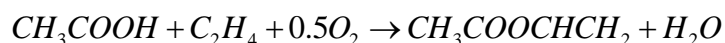
Proceso de producción de propileno a partir de metanol (MTP). El primer paso de este proceso consiste en la conversión del metanol en dimetil éter (DME) en un reactor adiabático,

este reactor es seguido por el reactor principal para donde se produce etileno, propileno y butenos [49].



La relación entre el etileno y propileno producido depende del catalizador, parámetros de la reacción y tecnología, y puede ajustarse en un rango [50], las condiciones en el reactor principal se fijan en 425 °C y 1.6 bar, y 300 °C y 1.6 bar en el pre-reactor DME [51].

Producción de acetato de vinilo (VAM). La alimentación al proceso consiste en etileno, oxígeno y ácido acético, la reacción se lleva a cabo en fase gaseosa produciendo así el acetato de vinilo, además de la reacción principal se lleva a cabo la oxidación de etileno que produce CO₂ [52].



Este proceso presenta una baja de ácido acético (0.2-0.35) con una alta selectividad hacia acetato de vinilo (0.95), esta selectividad se mantiene con una baja presión en el reactor y una temperatura entre 130-182 °C, a una temperatura más baja se presentaría condensación y degradación del catalizador [53].

Descripción de las fuentes internas de las plantas existentes

Las fuentes internas disponibles en la red por las plantas existentes se muestran en la *Tabla 5.1*. Los flujos de estas corrientes y sus condiciones de presión y temperatura se determinaron a través de la simulación de los procesos de las plantas existentes en Aspen Plus.

Tabla 5.1. Condiciones de operación de las fuentes internas.

Planta	Fuente interna
GTL	3991 kmo/h CO ₂ , 390°C, 1.1 bar 5570 kmol/h H ₂ , 390°C, 1.1 bar 930 kmol/h CO, 390°C, 1.1 bar
Etileno	140 kmol/h H ₂ , -114°C, 31 bar 35.5 kmol/h CH ₄ , -114°C, 31 bar
PDH	243 kmol/h CH ₄ , 5°C, 26 bar 2133 kmol/h H ₂ , 5°C, 26 bar
MTP	6457 kmol/h H ₂ O, 27°C, 1.4 bar
VAM	25.9 kmol/h CO ₂ , 80°C, 8.8 bar

Descripción de los sumideros

Los sumideros en cada proceso pueden ser considerados a la entrada del proceso o a la entrada del reactor. La descripción de los sumideros se muestra en la *Figura 5.3* y *Figura 5.4*, y se resumen en la *Tabla 5.2* (consulte apéndice A).

Tabla 5.2. Condiciones de los sumideros para el caso de estudio

Planta	Flujo	Entrada al reactor	En la alimentación del proceso
MTP	6500 kmol/h MeOH	(RX-401) 300°C, 2 bar	(F-MeOH) 25°C, 1 bar
VAM	140 kmol/h HAc	(RX-501) 149°C, 9 bar	(F-HAC) 30°C, 10 bar

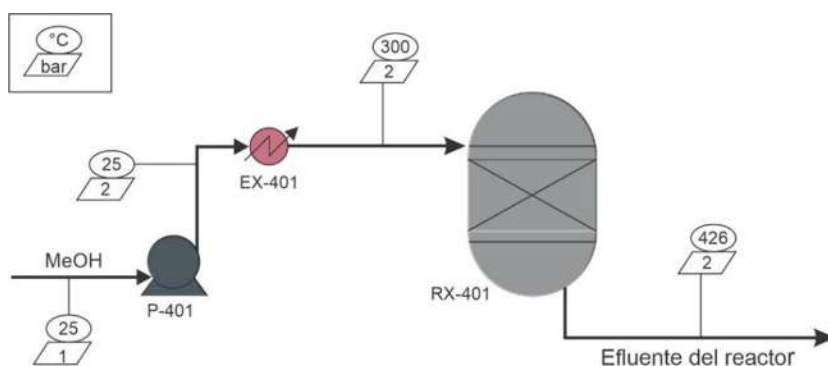


Figura 2.3. Requerimiento de metanol en la planta MTP.

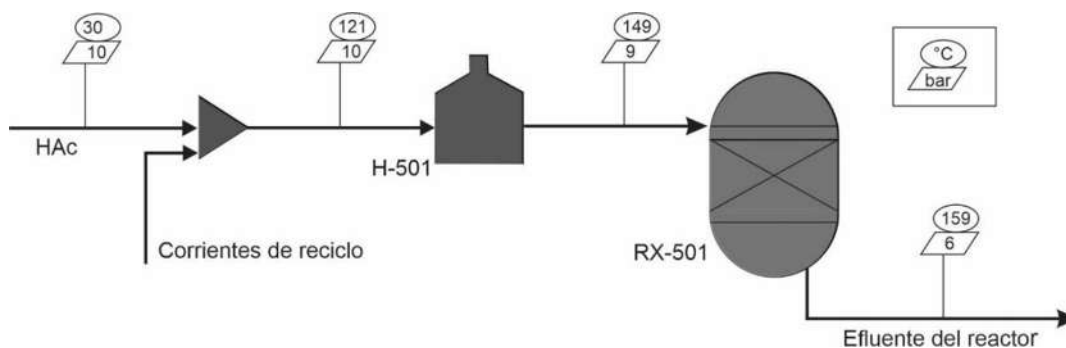
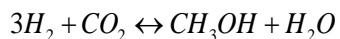
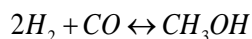


Figura 5.4. Requerimiento de ácido acético en la planta VAM

5.2.2 Descripción de las nuevas plantas

Se propone un conjunto de siete plantas nuevas que pueden ser integradas a la red CHOSYN y se describen a continuación.

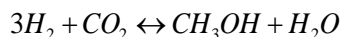
Metanol a partir de gas de síntesis. Este proceso incluye la hidrogenación del CO y CO₂ principalmente [54].



Las condiciones de reacción son 272°C y 106 bar [55], la relación de alimentación de Syngas H₂/CO debe de estar entre los 2.4-2.5 para este proceso [56]. Debido a que la conversión está limitada por el equilibrio, el reactor opera con un número estequiométrico (NS) igual a 2 para maximizar la eficiencia, el cual es establecido con la siguiente ecuación:

Síntesis de metanol vía CO₂ and H₂.

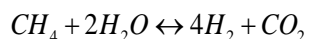
La hidrogenación catalítica de CO₂ se ha hecho competitiva con la producción de metanol vía syngas [57]. Considerando al CO₂ como la fuente de carbono en la síntesis de metanol, se pueden considerar las siguientes reacciones químicas [58]:



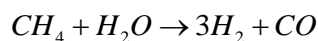
Una relación de H₂/CO₂=3 asegura que SN=2, y las condiciones del reactor son fijadas a 250°C and 50 bar [59].

$$SN = \frac{[H_2] - [CO_2]}{[CO] + [CO_2]}$$

Producción de CO₂ mediante reformado de metanol con vapor. En primera instancia, el metano reacciona con vapor a 815°C and 28 bares. Luego, se lleva a cabo la reacción conocida como “water gas shift reaction” en dos pasos para incrementar el rendimiento de hidrogeno: primero a alta temperatura (349°C) y luego a baja temperatura (204°C) [60]. Los productos de la reacción global del reformado de metano con vapor se establecen de la siguiente manera:

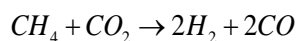


Producción de Syngas mediante reformado de metano con vapor (SMR). En este proceso, se considera solo el reformado de metanol con vapor con la siguiente reacción [61]:



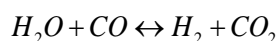
Resultando una relación alta H₂/CO (≈3), se requiere una temperatura alta cerca de 1430°C en el reformador para convertir completamente el metanol [62] y una presión baja de 2 bar.

Reformación en seco de metano (SMR). Este proceso consiste en la reformación de metano con CO₂:



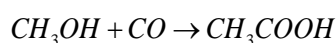
Este proceso genera gas de síntesis con una relación H₂/CO de alrededor de 1 [61], en el reactor las condiciones son 600°C y 2 bar.

Water gas shift reaction. La reacción reversible conocida como water gas shift reacción (WGSR) se utiliza para convertir el CO de la reformación de metano con vapor en hidrogeno adicional.



Las condiciones en el reactor son 470°C y 1.1 bar, y la relación de alimentación CO/H₂O≈0.8 [63].

Carbonilación de metanol para producir ácido acético. La química de este proceso es compleja y se forman varios subproductos, la reacción general puede presentarse como:



La reacción se lleva a cabo en el reactor en fase líquida en un rango de temperatura de 150-200°C y una presión entre 30-60 bar [64].

5.3. RESULTADOS DEL DISEÑO

El método iterativo secuencial para el diseño fue implementado, las simulaciones en Aspen Plus de todos los procesos involucrados en la red se encuentran en el Apéndice A. Los resultados obtenidos para el diseño de la CHOSYN incluyen las diferentes combinaciones de nuevas plantas seleccionadas y sus capacidades de proceso en cada configuración resultante,

así como las nuevas unidades de proceso o interceptores necesarios para enlazar las corrientes internas con los sumideros, también incluyen la composición, temperatura y presión para cada corriente intercambiable y sumidero. Se obtuvieron cuatro posibles configuraciones finales (S1, S2, S3 y S4) para la red en el escenario de máximo aprovechamiento de los recursos disponibles para satisfacer los requerimientos de las especies objetivo (metanol y ácido acético).

Las soluciones se obtuvieron siguiendo el diagrama de flujo para aplicar el planteamiento de soluciones con diferentes decisiones y rutas (véase la *Figura 5.2* y *Figura 5.5*). La primera planta se selecciona para agotar el CH₄ disponible, después se seleccionan algunas plantas para agotar el CO y, por último, el H₂; el CO₂ y el agua no se consumen totalmente. Se da prioridad a los procesos directos (procesos que producen metanol y ácido acético).

En cada iteración, la nueva planta seleccionada se simula y se acopla a las plantas existentes en la red a través de nuevas unidades operativas (principalmente compresores, calentadores y enfriadores) de acuerdo con la cantidad de recurso disponible y la relación con la alimentación del proceso. Una vez acopladas se evalúan los nuevos recursos disponibles y las condiciones para la siguiente iteración. Las plantas seleccionadas y su capacidad para las cuatro soluciones se muestran en la *Tabla 5.3*.

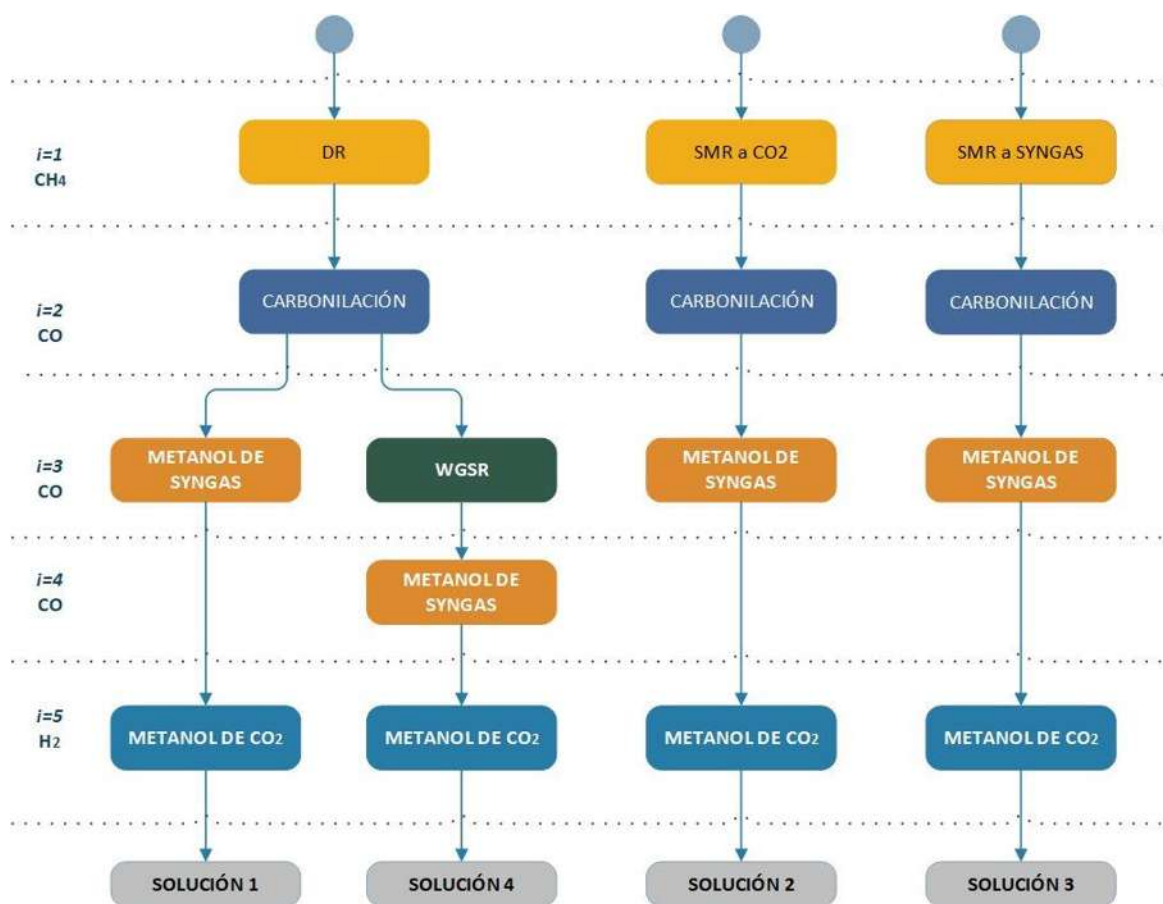


Figura 5.5. Orden de selección de las plantas para las diferentes soluciones.

Tabla 5.3. Plantas seleccionadas y sus capacidades para diferentes soluciones.

Planta	Capacidad de procesamiento (ton/día)			
	S1	S2	S3	S4
Carbonilación (HAc)	202	202	202	202
MeOH a partir de syngas (MeOH)	1, 110	680	882	680
MeOH a partir de CO ₂ (MeOH)	1, 872	2, 270	2, 152	2, 340
DR (Syngas)	382	-	-	382
SMR a CO ₂ (H ₂)	-	37.5	-	-
SMR a CO (Syngas)	-	-	253	-
WGSR (H ₂)	-	-	-	25

En las cuatro soluciones se consideran las dos tecnologías para la síntesis de metanol y, como la tecnología de carbonilación se incluye en la cuarta solución con el mismo tamaño, su requerimiento de metanol debe incluirse en el requerimiento global de metanol, de acuerdo con la simulación, necesita 145 kmol/h de MeOH, por lo que el requerimiento total es de 6640 kmol/h de MeOH.

La primera solución (S1) considera la planta de reformación en seco para consumir el metano aportado por las plantas de PDH y Etileno y el CO₂ de la GTL para producir syngas (382 ton/día), este flujo se envía a la planta de MeOH a partir de Syngas que produce 1110 ton de metanol al día, el H₂ restante se procesa totalmente en la planta de MeOH a partir de CO₂ que genera 1872 ton de metanol al día. Cabe destacar que siempre existe un compromiso entre ambas plantas de metanol según las relaciones de alimentación H₂/CO y H₂/CO₂ y los recursos limitados de H₂, el dimensionamiento de estas plantas depende sobre todo del CO disponible debido a las plantas existentes y al producido con las tecnologías de SMR y DR cuyo tamaño también es variable, y que depende a su vez del CH₄ disponible. La instalación de las nuevas plantas permite producir el 58,5% de la demanda de metanol fresco. La *Figura 5.6* muestra los nuevos equipos necesarios y la distribución de las fuentes internas a través del CHOSYN para la S1.

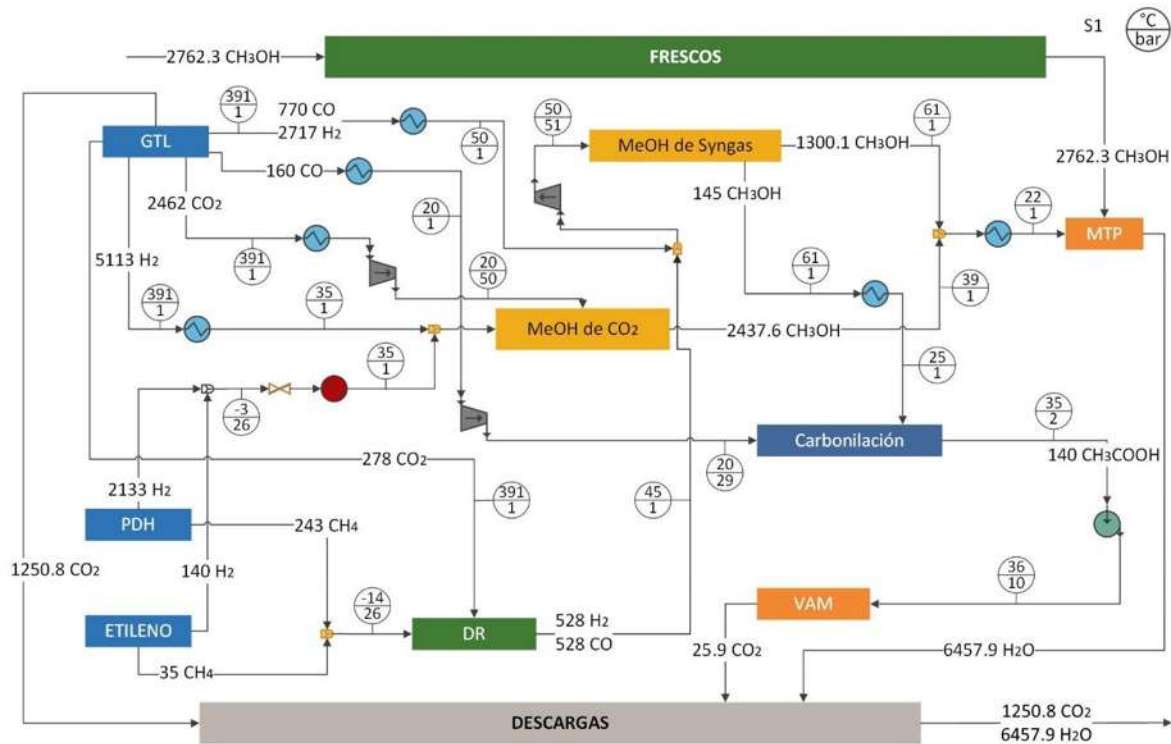


Figura 5.6. Configuración de la red para la solución S1.

En la segunda solución (S2), el metano se utiliza en la planta de reformación con vapor de agua a CO₂ (SMR1), el agua para producir el vapor necesario en el proceso se toma de la planta MTP (ver Figura 5.7). El H₂ producido (37,5 ton/día) se envía a la planta de MeOH a partir de CO₂, esta acción permite una mayor capacidad para esta planta (2270 ton/día). Sin embargo, como no hay más CO disponible, la planta de MeOH a partir de syngas adquiere la menor capacidad de procesamiento posible (680 ton/día de metanol), y como esta planta tiene un mayor rendimiento a metanol, el metanol total producido por la red sólo ahorra el 57,9% de la demanda total.

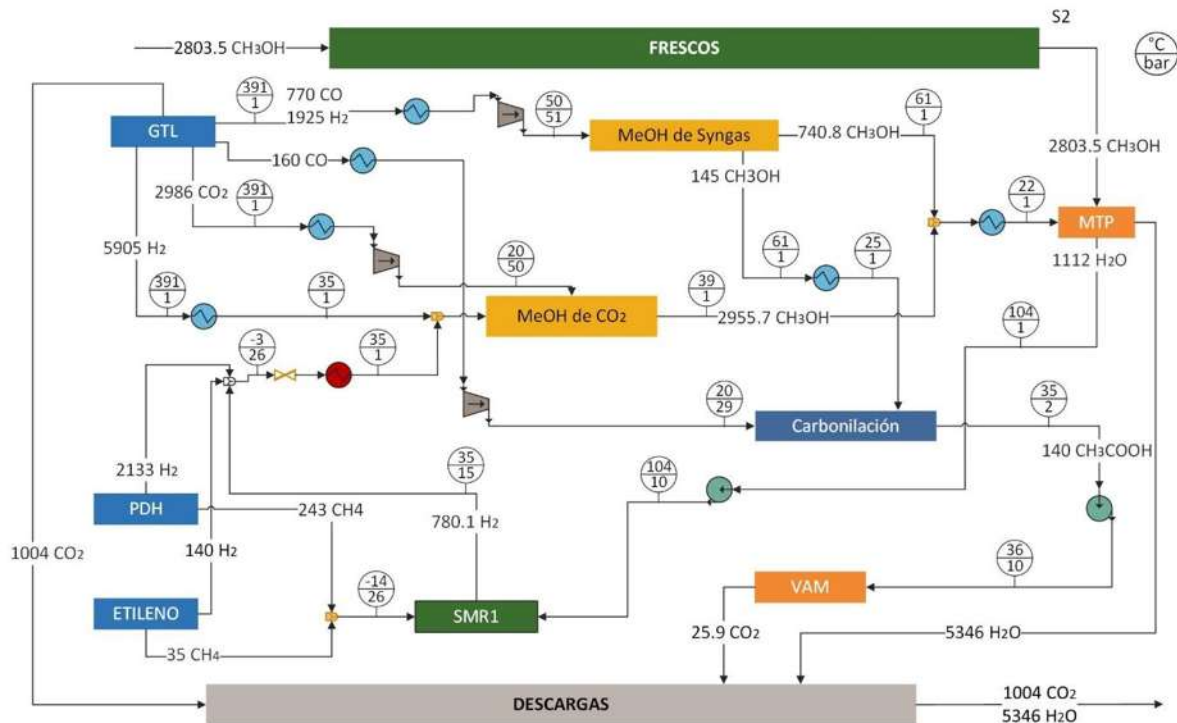


Figura 5.7. Configuración de la red para la solución S2.

La solución 3 (S3) se muestra en la Figura 5.8, en esta solución se utiliza la planta de reformación con vapor de agua hasta CO (SMR2) para producir un flujo de 253 toneladas de gas de síntesis al día, este flujo de syngas es rico en H₂ y pobre en CO (H₂/CO= 3,8), por lo que el CO sigue siendo el recurso más limitado, y la capacidad máxima para el proceso de MeOH a partir de syngas se establece para producir 882 ton de MeOH al día en esta solución; sin embargo, se producen 2152 ton de metanol al día de la planta de MeOH a partir de CO₂, por lo tanto esta solución representa el máximo ahorro en MeOH fresco produciendo el 60% del total fresco necesario.

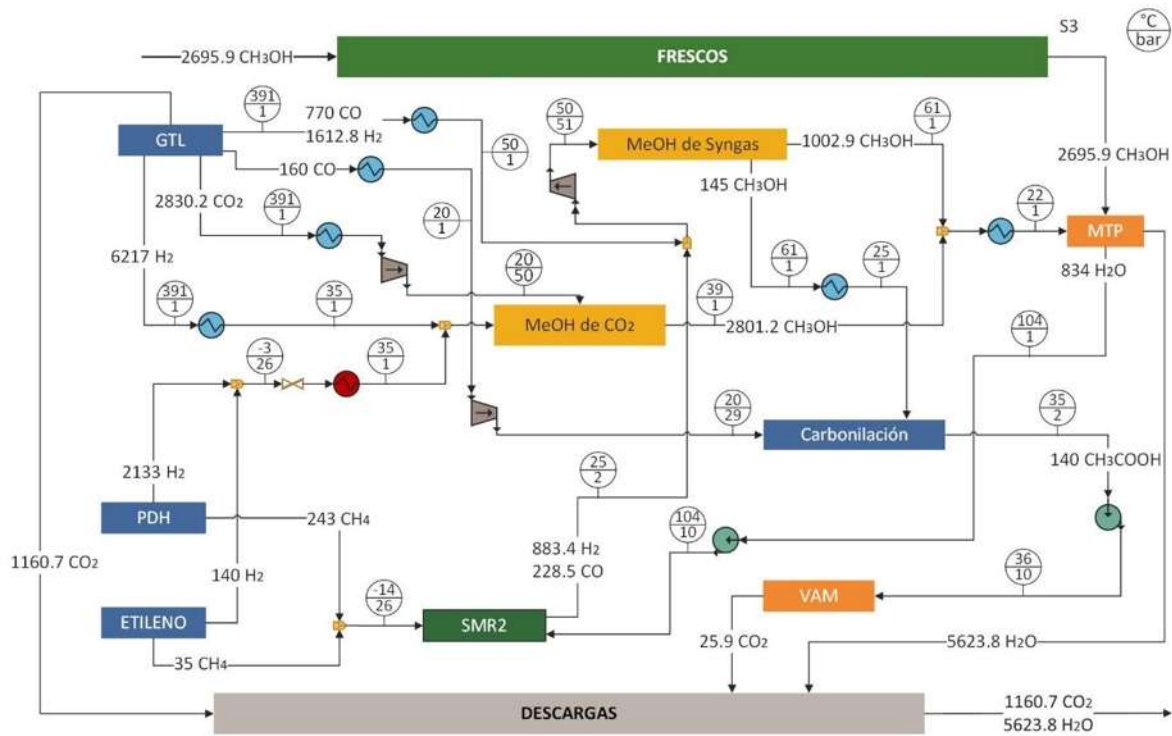


Figura 3. Configuración de la red para la solución S3

La solución 4 (S4) propone la instalación de una planta de reformado en seco (DR) para producir H_2 y luego utilizar la corriente resultante de CO en la unidad Water Gas Shift Reaction (WGSR) para producir una corriente adicional de H_2 (25 ton/día). Ambas corrientes de hidrógeno se envían al MeOH de la planta de CO_2 , que produce 2340 ton/día de metanol en total, esta es la mayor capacidad que puede adquirir esta planta con los recursos disponibles, aunque esta solución tiene el coste de inversión más elevado; y por el otro lado, como la planta MeOH a partir de CO es pequeña, el metanol producido disminuye y sólo representa el 59% de la demanda total (ver *Figura 5.9*).

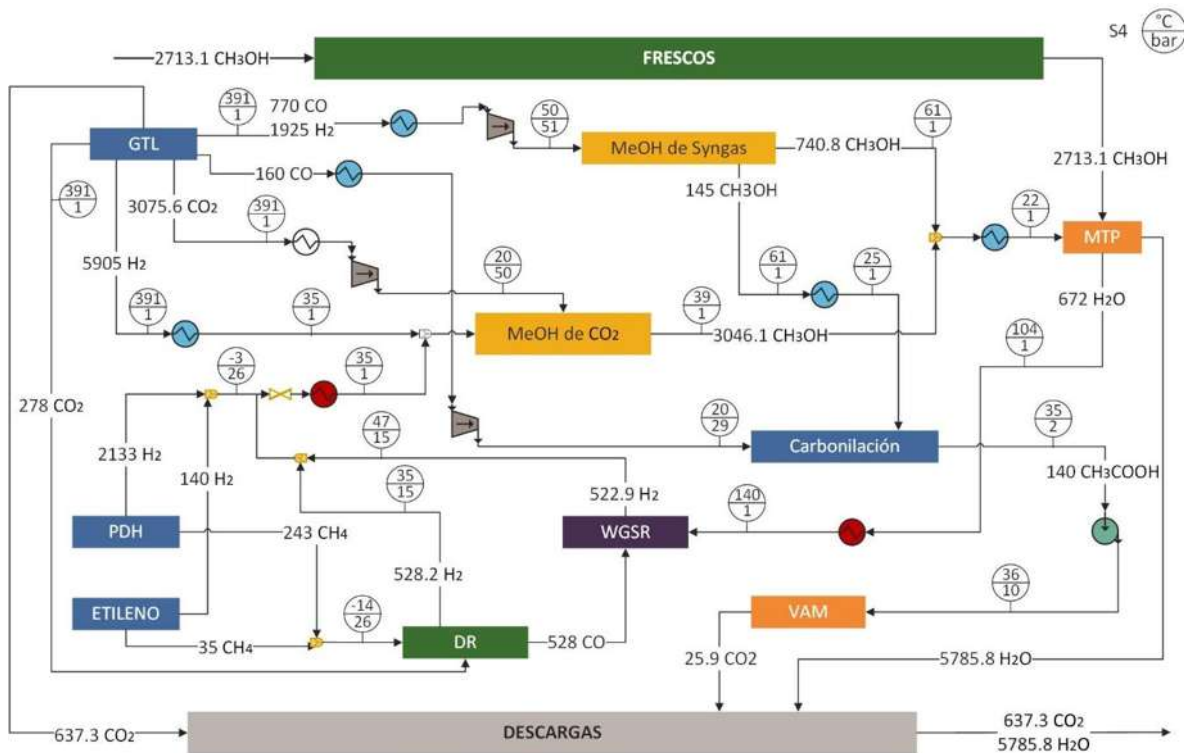


Figura 5.9. Configuración de la red para la solución S4.

Vale la pena implementar una comparación entre las tecnologías de producción de hidrógeno y syngas, la alta conversión de metano de SMR2 en S3 se debe a la alta temperatura en el reactor 1430°C, mientras que para SMR1 en S2 hay una alta presión de operación de 50 bar, siendo DR en S1 el proceso con condiciones de operación más moderadas con 600 °C y 2 bar. En un análisis más profundo de las condiciones de operación relacionadas con la seguridad y la operabilidad, éstas deberían tenerse en cuenta para discriminar entre las configuraciones resultantes.

En general, las nuevas unidades de procesamiento para integrar las corrientes desde las fuentes a los sumideros consisten en intercambiadores de calor y compresores, y todos sus

costos (de instalación y funcionamiento) se incluyen en la evaluación de costos de cada solución. La herramienta Economic Analyzer disponible en AspenPlus facilita la evaluación de los costos fijos y variables. Los resultados económicos que se muestran a continuación se basan en los parámetros de costo incluidos en AspenPlus.

El desempeño económico de las configuraciones resultantes incluye los costos de instalación de las nuevas plantas y unidades y los costos de operación, principalmente los relacionados con el costo de los servicios y la compra de materias primas. La solución del caso base (BS) es cuando no se instalan nuevas plantas (sin costo de inversión) y se compran en su totalidad el metanol y ácido acético requeridos, por lo tanto, esta solución representa el límite de los costos de compra de materias primas (469 millones de USD/año). La solución 3 tiene el costo de operación de 265 millones USD/año siendo el más bajo entre las soluciones ya que cuenta con la mayor producción de metanol, caso contrario el de la solución S2 con la menor producción de metanol tiene el costo de opera más alto de 271 millones USD/año. El costo de servicios está asociado principalmente a las condiciones de temperatura y presión de cada proceso, a los equipos necesarios para alcanzar estas condiciones y a la capacidad de procesamiento de cada planta. Sin embargo, los resultados muestran que la magnitud del costo de servicios no es significativa en comparación con el costo de la materia prima (*Figura 5.10*).

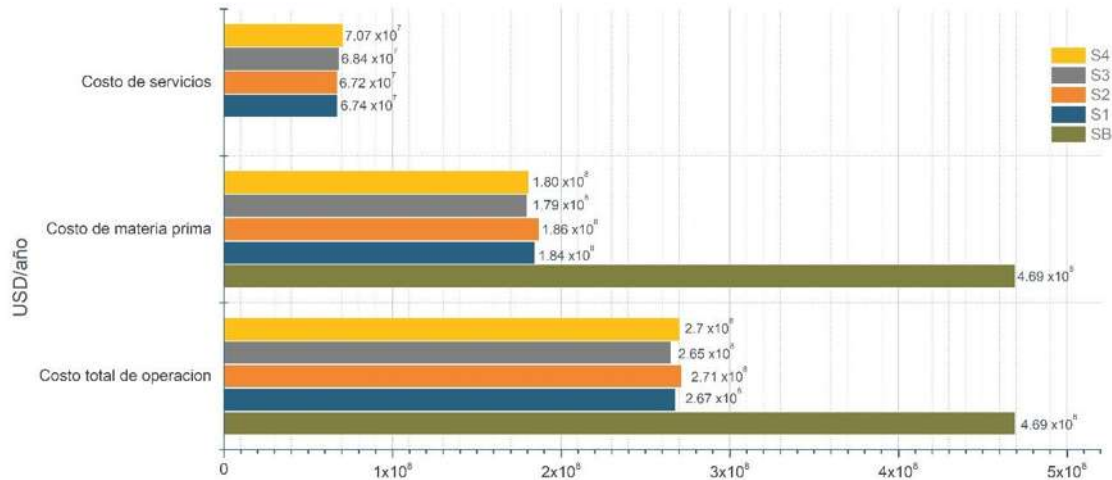


Figura 5.104. Comparación de costos variables para cada solución.

Para este caso los costos fijos se consideran como el costo total de capital (TCC), que incluye el costo de los equipos (nuevas plantas y nuevos interceptores). Como en la solución base no hay plantas nuevas instaladas, estos costos se reducen a cero. Como ya se dijo S4 tiene la mayor capacidad para la producción de metanol y el TCC más caro, mientras que S1 presenta el más bajo, con una diferencia de 25,6 millones de USD (véase la *Figura 5.11*).

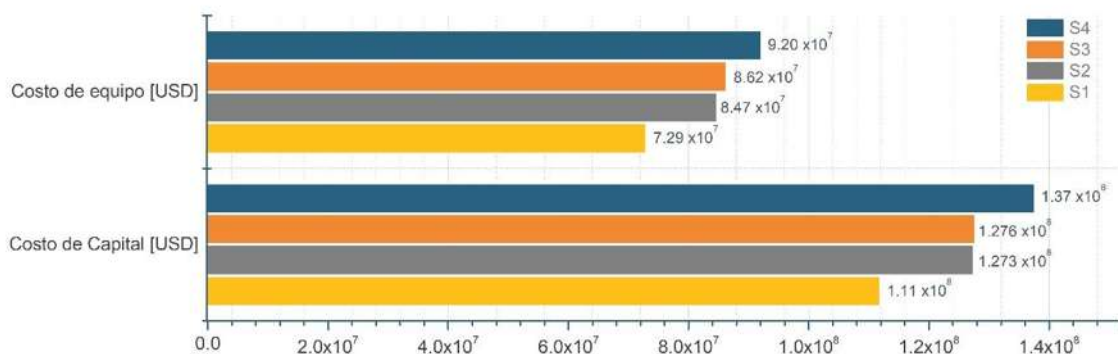


Figura 5.11. Comparación de costos fijos para cada solución

La *Figura 5.12* muestra una comparación de los costos fijos anualizados por un periodo de amortización de diez años y los costos variables, se puede notar claramente que las magnitudes de los costos variables son mayores que los costos de capital, y comparando la las soluciones con el caso base se puede ver que se tiene reducciones de casi 50% de estos costos variables debido a la producción interna de materia prima.

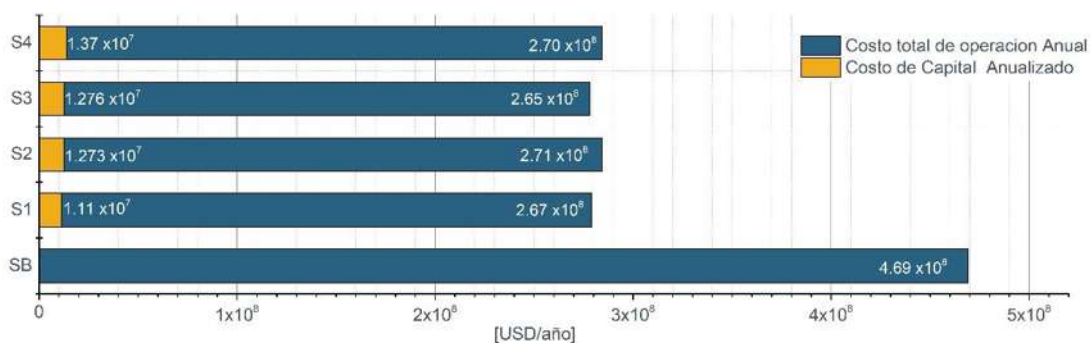


Figura 5.12. Costos variables vs costos fijos

CAPÍTULO 6. INTENSIFICACIÓN DE LA RED

6.1 METODOLOGÍA PARA ENCONTRAR LAS SOLUCIONES INTENSIFICADAS

Una vez que se logró el diseño de la red, la siguiente propuesta es utilizar métodos de intensificación de procesos para lograr intensificar las zonas de separación de las plantas de procesamiento involucradas en la red, esto como ya se menciono tiene por propósito mejorar los índices de sustentabilidad más allá de lo que permite la integración. La *Figura 6.1* muestra el diagrama de flujo del enfoque para llevar a cabo esta propuesta, una vez más, el método secuencial se propone para evitar el diseño simultáneo del CHOSYN, las secuencias térmicamente acopladas y su optimización.



Figura 6.1. Secuencia del método propuesto para intensificar las zonas de destilación de la red.

Se llevó a cabo una evaluación de cada uno de los diagramas de flujo de las plantas nuevas y existentes con el fin de determinar que procesos tienen el potencial para ser intensificados. Se seleccionaron dos trenes de separación compuestos por secuencias de destilación en el proceso de producción de etileno y en el proceso de metanol a propileno (MTP). En ambos casos se utilizó el método dinámico propuesto por Hernández y Jiménez [65].

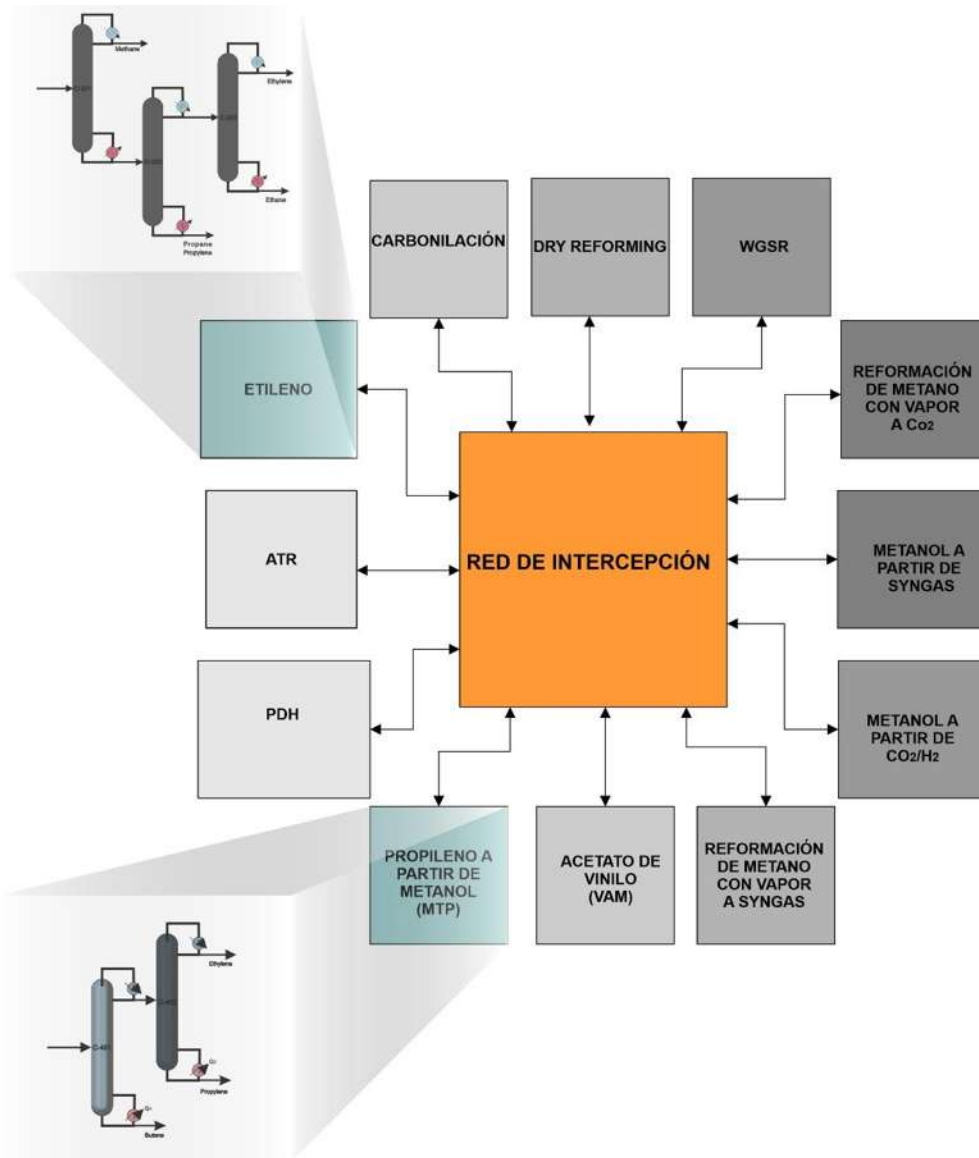


Figura 6.2. Resumen del problema de intensificación

6.2 RESULTADOS DE LA INTENSIFICACIÓN

La planta de etileno (ver Figura A2 del apéndice A) consiste en una zona de reacción donde en el reactor se lleva a cabo el cracking térmico con vapor del etano, dentro de los productos principales se encuentran metano, etileno, propileno, y butenos. La sección de separación tiene varias etapas siendo la última una secuencia de destilación de tres columnas mostrada en la Figura 6.3, en la columna uno se separa el metano y trazas ligeras por el domo, la

corriente de fondos pasa a una segunda columna donde los butenos y más pesados son separados por el fondo, el domo contiene el etileno y el etano, estos son separados en la tercera columna, el domo tiene una composición de 99.9% etileno y el fondo 99.9% etano.

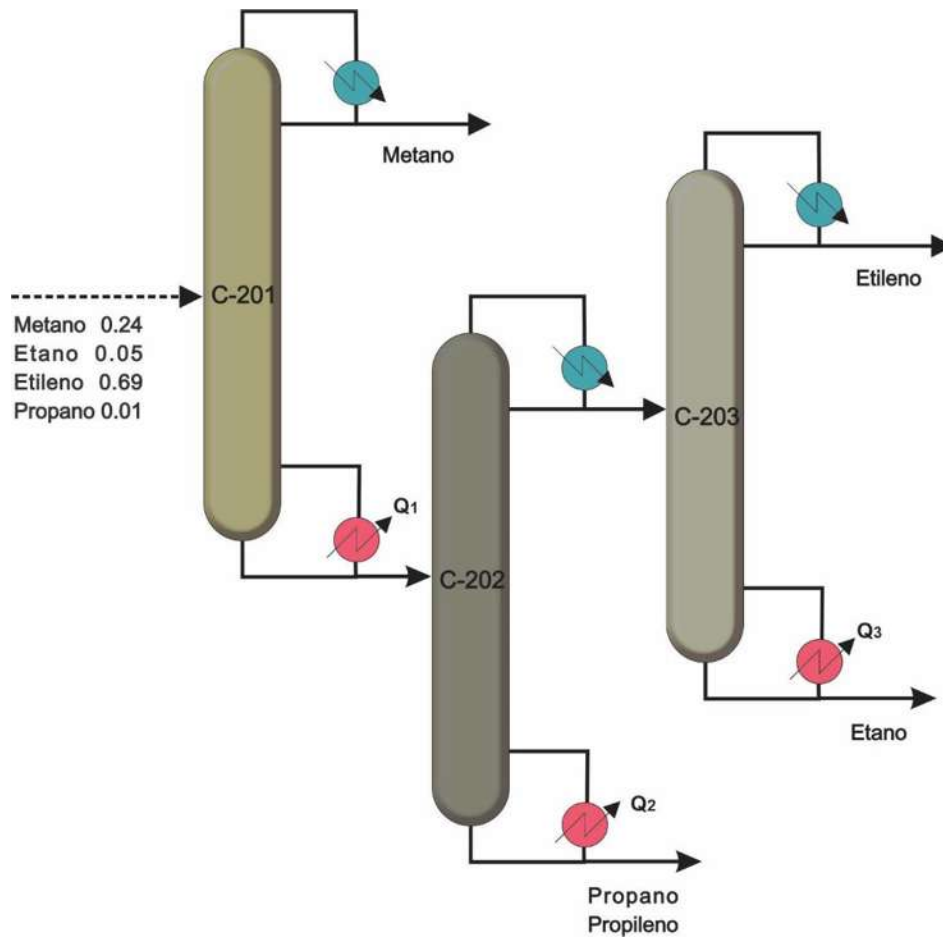


Figura 6.3. Secuencia de purificación de la planta de producción de etileno

Para este caso se llegó a las siguientes opciones intensificadas mostradas en las Figuras 6.4-6.6.

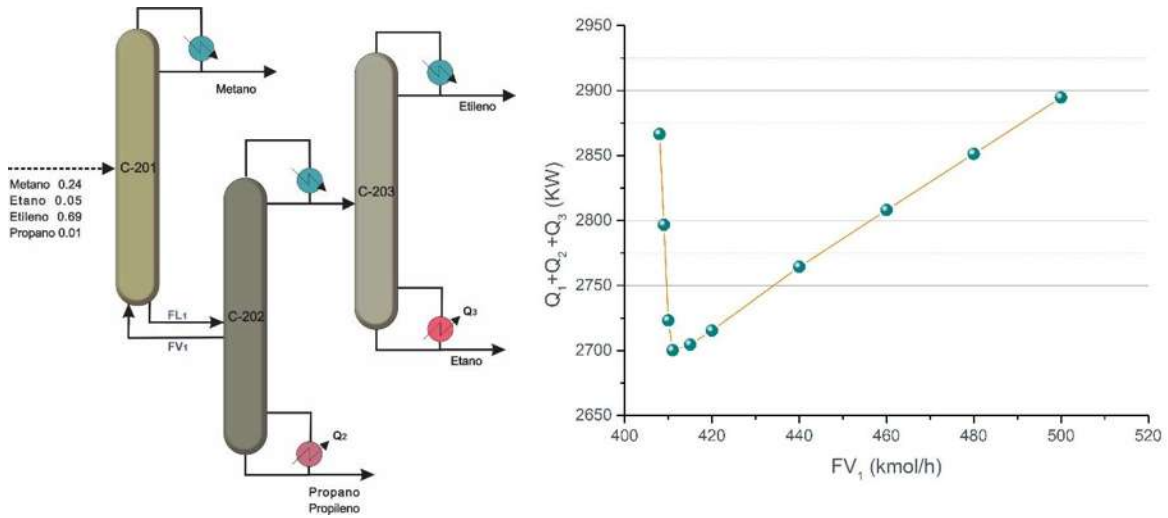


Figura 6.4. Diagrama de flujo intensificado y gráfico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción I

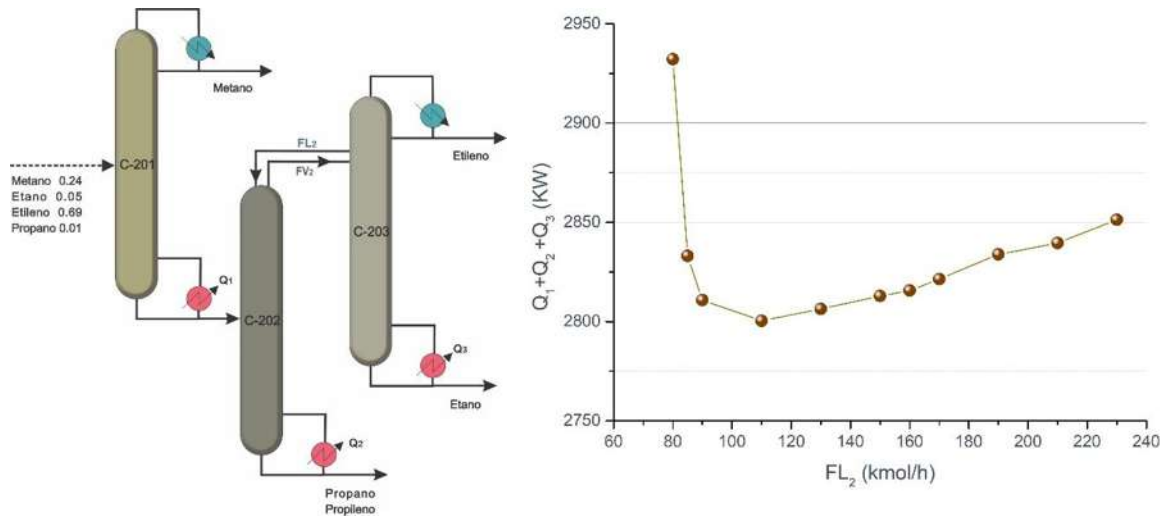


Figura 6.5. Diagrama de flujo intensificado y gráfico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción II.

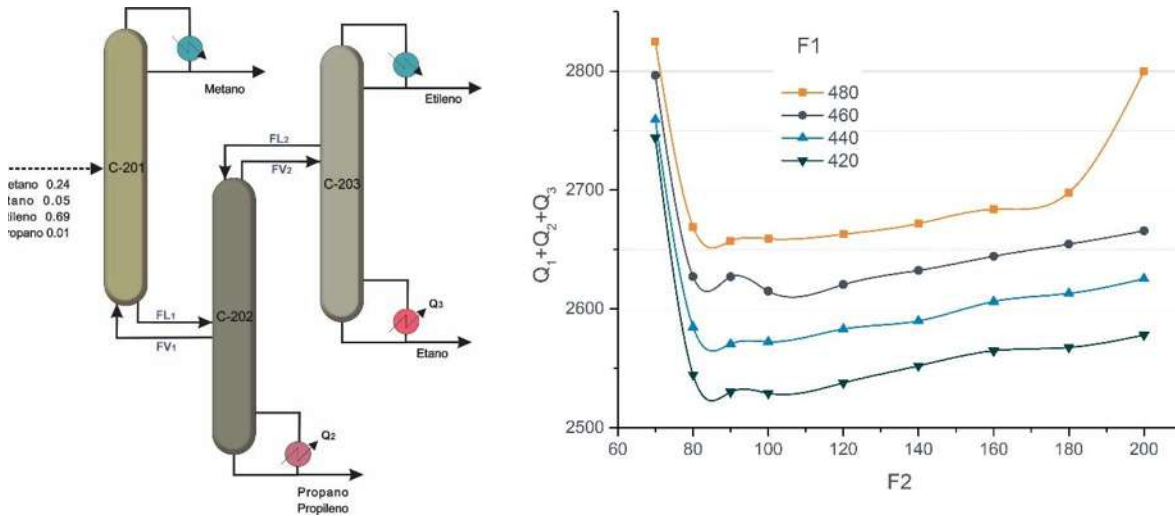


Figura 6.65. Diagrama de flujo intensificado y gráfico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción III.

La opción I representa un ahorro energético del 14%, la opción II del 11% y la tres 20%.

La planta de producción de propileno a partir del metanol (ver Figura A4 del apéndice A), consta de una zona de reacción con dos reactores el primero un pre-reactor donde el metanol es deshidratado a dimetil éter, y el segundo donde dimetil éter se convierte en propileno preferentemente, el efluente del reactor también contiene etileno, butenos y una gran cantidad de agua. El agua es eliminada en la primera etapa de separación y el propileno es purificado a un 99.9% en una secuencia de destilación indirecta (Figura 6.7).

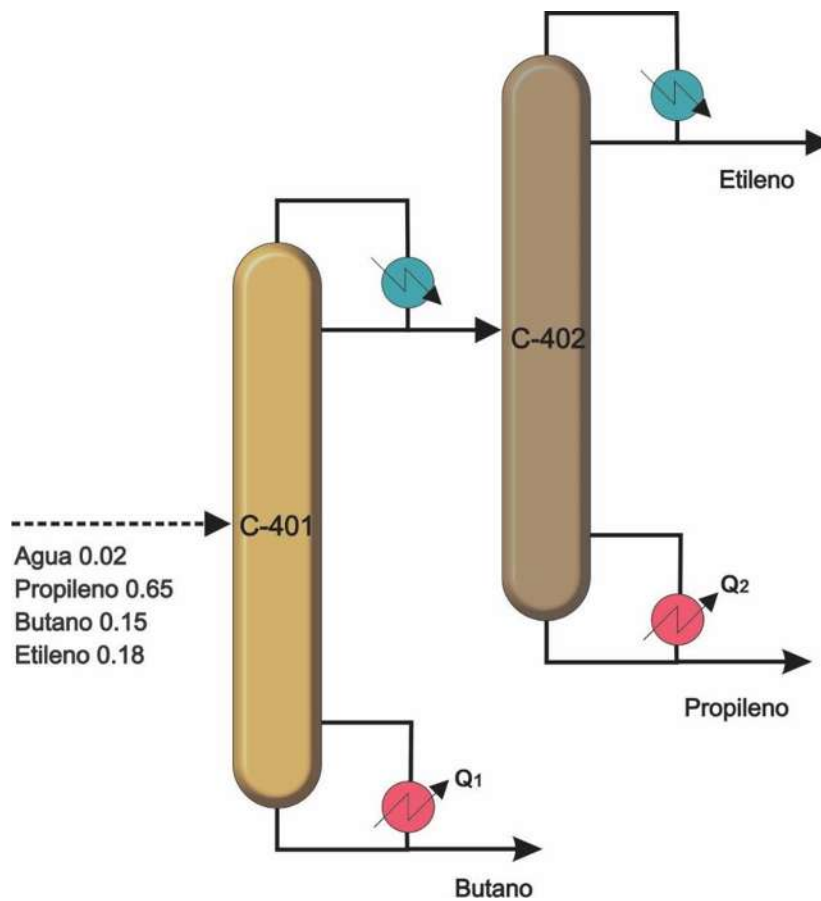


Figura 6.7. Secuencia de purificación de la planta de producción de propileno.

En este caso se obtuvieron dos soluciones intensificadas, una columna con un agotador lateral y una columna Petlyuk y se muestran en la *Figura 6.8* y *Figura 6.9*, respectivamente.

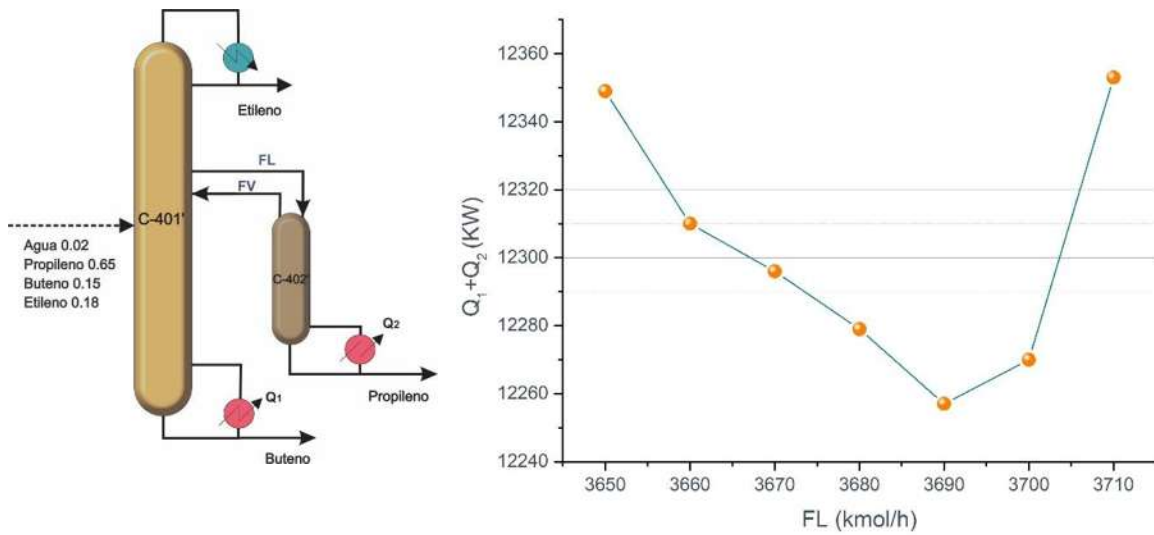


Figura 6.8. Diagrama de flujo intensificado y grafico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción I.

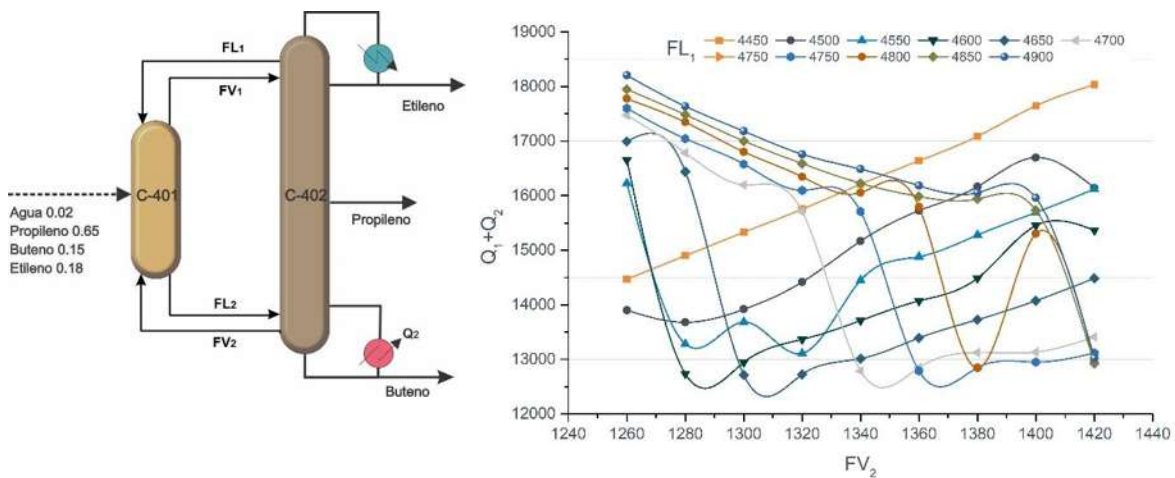


Figura 6.9. Diagrama de flujo intensificado y grafico de carga térmica vs flujo de interconexión para la opción II.

La solución I presenta un ahorro del 17% y la solución Petlyuk 14%. La Tabla 6.1 muestra la topología de los diseños intensificados y convencionales seleccionados para el presente análisis para la purificación de etileno y propileno. Según la relación de reflujo y el número de etapas, la secuencia de etileno no varía significativamente respecto al diseño

convencional; mientras que en la secuencia para el proceso MTP, el tamaño de la columna C-401 intensificada es notablemente mayor que el diseño convencional. La *Tabla 6.2* muestra un resumen de los flujos de interconexión.

Tabla 6.1. Especificaciones de diseño para las columnas intensificadas

		C-201	C-202	C-203	C-401	C-402
Etapas	Intensificado	26	42	86	68	15
	Convencional	26	42	86	50	33
Etapa de alimentación	Intensificado	8	20, liquido de C-201' 1, liquido de C-203'	47	44 19, vapor de C-402'	1, liquido de C-401'
	Convencional	8	20	47	26	18
Condensador	Intensificado	parcial	-	-	parcial	-
	Convencional	parcial	parcial	parcial	parcial	parcial
Reboiler	Intensificado	-	kettle	kettle	kettle	kettle
	Convencional	kettle	kettle	kettle	kettle	kettle
Relación de reflujo	Intensificado	6.5	0.356	5	23.6	1.66
	Convencional	9.47	0.45	4.05	2.45	11.3
Calor en el reboiler (kW)	Intensificado	0	1,523.9	1,005	6,028	6,257
	Convencional	1,159.6	570.1	1,433.02	9,169.7	5,694.5
Presión (bar)	Intensificado	28	28	28	28.5	28.5
	Convencional	28	28	28	28.5	28.5
Flujo de destilado (kmol/hr)	Intensificado	58.54	-	168.4	403	-
	Convencional	58.54	179.2	168.3	1,857.5	401.9
Flujo de fondos	Intensificado	-	6.4	4,724.4	351.1	1,478.4
	Convencional	185.69	6.4	10.87	375	1,455.5

Tabla 1.2. Descripción de los flujos de interconexión de las secuencias destiladas.

	Secuencia del Etileno				Secuencia del propileno	
	FV ₁	Fl ₁	FV ₂	FL ₂	FV	FL
kmol/hr	605.7	420	279.3	100	2,211.5	3,690
Desde	etapa 21, C-202	etapa 26, C-201	etapa 1, C-202	etapa 46, C-203	etapa 1, C-402	etapa 18, C-401
Hacia	etapa 26, C-201	etapa 20, C-202	etapa 47, C-203	etapa 2, C-202	etapa 19, C-401	etapa 1, C-402

El siguiente paso consiste en generar las soluciones obtenidas previamente con el método de diseño, pero introduciendo los esquemas intensificados y evaluar cómo actúa la intensificación sobre los indicadores de desempeño de la red. Se tienen 4 soluciones distintas que varían en la capacidad de procesamiento de las plantas de producción de metanol y en la selección de las plantas de uso de metano y generación de hidrogeno y gas de síntesis, también se tienen cinco esquemas intensificados lo cual nos da un campo de combinación de 24 posibles soluciones, sin embargo se propone identificar en primer lugar que soluciones intensificadas ofrecen el mayor ahorro energético y las que ofrezcan un mejor desempeño económico y se encontró que para el sistema de destilación de la planta de propileno el arreglo con el agotador lateral además de ofrecer el mayor ahorro energético también es el más barato, y para el tren de destilación de la planta de etileno el sistema con dos interconexiones ofrece también el máximo ahorro energético con el menor costo (ver *Tabla 6.3*).

Tabla 6.3. Costos y ahorros energéticos de las opciones intensificadas.

		Costo (USD)	Carga térmica (KW)	Ahorro
MTP	Petlyuk	\$ 10,565,700	12713	0.145
	Agotador	\$ 9,557,940	12257	0.175
Etileno	I	\$ 10,374,300	2700.1	0.146
	II	\$ 10,237,200	2800	0.115
	III	\$ 9,978,540	2528	0.201

Por lo tanto, solo se hace la combinación del agotador lateral para la planta MTP y el sistema de doble interconexión para la planta de Etileno y se generan solo cuatro soluciones. Para hacer la evaluación de los indicadores de funcionamiento de la red y comparar las soluciones convencionales con las intensificadas

6.3 EVALUACIÓN DE LOS INDICADORES DE SUSTENTABILIDAD

6.3.1 Evaluación económica

En este caso la intensificación no afecta a la distribución ni a la cantidad de recursos básicos necesarios, los costos asociados a estos recursos son equivalentes para las soluciones convencionales e intensificadas. En el caso de la secuencia de etileno, la intensificación permite prescindir de un condensador y un reboiler, lo que reduce el costo por equipo y por servicios (menores requerimientos de calentamiento y enfriamiento). En el caso de la secuencia intensificada MTP, el costo de los servicios también se reduce al prescindir del condensador de la segunda columna, pero en este caso aumenta el número de etapas de la primera columna y, por tanto, el tamaño de la columna, en consecuencia, el costo por equipo en las cuatro soluciones intensificadas se tiene un costo mayor de equipo que las convencionales, sin embargo la reducción de costos de servicios lo compensa (ver *Figura 6.10*).

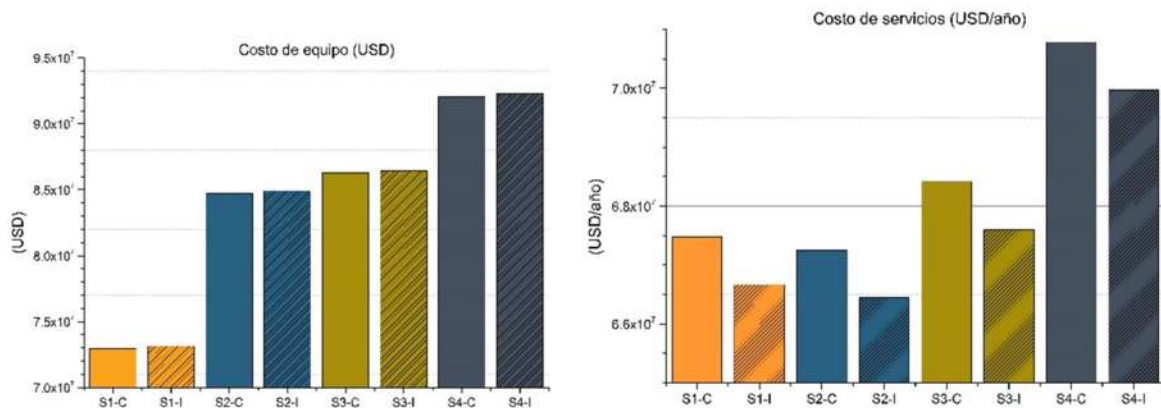


Figura 6.106. Costos de equipo y costos de servicios para las distintas soluciones

Para ver esta relación utilizamos la ecuación 1 para graficar el costo total anual (TAC) de soluciones convencionales e intensificadas. Como se puede ver en la *Figura 6.11* la intensificación mejoro el desempeño económico de las redes.

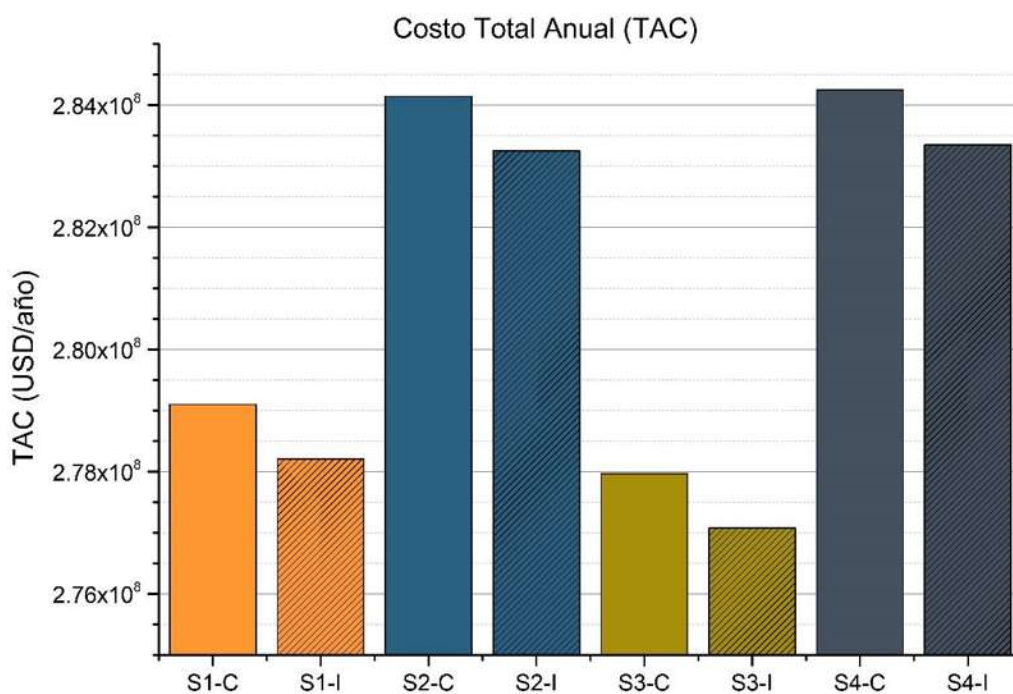


Figura 6.11. TAC de las distintas soluciones

6.3.2 Evaluación ambiental

La evaluación ambiental se llevó a cabo por medio del Eco-indicador 99, la magnitud de este indicador para la CHOSYN se debe al número de plantas seleccionadas y a su capacidad de procesamiento, para cada solución hay un gran número de unidades operativas y equipos implicados en las redes (146 para la solución con menos equipos): reactores, intercambiadores de calor, bombas, compresores, separadores flash y columnas de absorción y destilación se tuvieron en cuenta para la presente evaluación. Sin embargo, esta evaluación

no dice si el proceso es amigable con el medio ambiente, sino si las soluciones intensificadas del CHOSYN realmente mejoran este criterio. Las categorías de impacto seleccionadas para evaluar el EI-99 se ven directamente afectadas por la intensificación, aunque las columnas térmicamente acopladas para este caso presentan un diámetro mayor en ambas secciones intensificadas, todas las alternativas intensificadas presentan mejores valores para el EI-99 (ver *Figura 6.12*). La reducción de calentamiento y enfriamiento, además del hecho que se necesitan menos equipos de intercambio de calor reducen el efecto sobre las subcategorías de impacto: se necesita menos acero en la construcción de los equipos, se reduce el vapor y también la electricidad necesaria en las columnas intensificadas. Aunque la mejora del impacto medioambiental no es tan significativa en este caso de estudio, es innegable y sigue la misma dirección que el beneficio económico, y esto también se puede extrapolar a otros casos de estudio que, dependiendo de su topología, este impacto sería más notable.

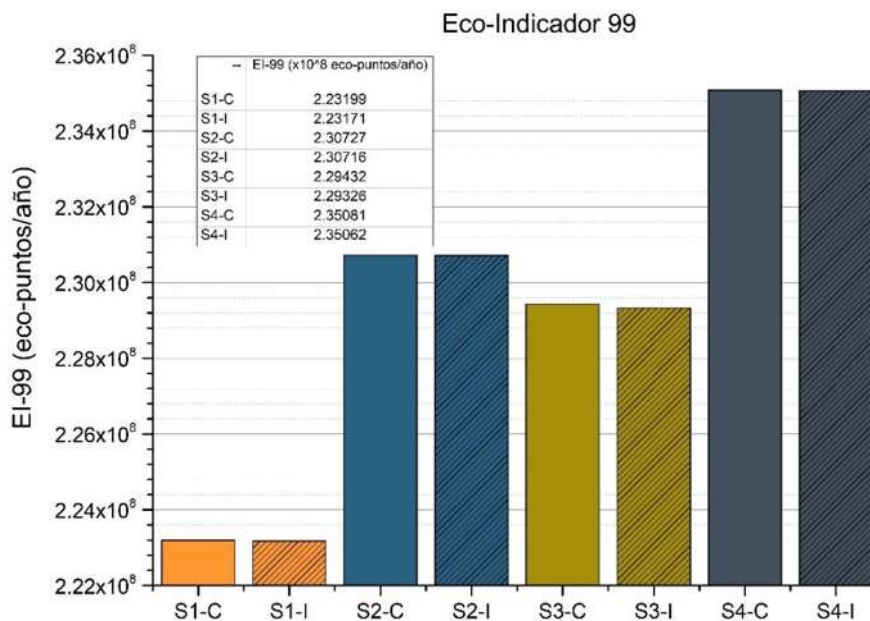


Figura 6.12. Valores para el Eco-Indicador 99

6.3.3 Evaluación de seguridad

La evaluación de la seguridad se hizo mediante el índice de riesgo individual, la *Figura 6.13* muestra los valores para los índices de riesgo para las distintas configuraciones, las variables que más afectan este índice para este caso son las condiciones de operación a las que operan algunos equipos, el tamaño de los equipos, el inventario y concentración de ciertas sustancias. En este caso, la presión apenas se ve afectada por la intensificación, las variaciones del perfil de temperatura a través de las columnas térmicamente acopladas son más notables en las secuencias de MTP en la primera columna (C-401'), y menos importantes en la secuencia de etileno. La relación de reflujo disminuye en las columnas C-201, C-202 y C-402, esto reduce los flujos internos que permiten diámetros de torre más pequeños, lo que en consecuencia reduce el riesgo asociado. En el caso contrario, para las columnas C-203 y C-401, los flujos internos aumentan junto con la relación de reflujo, esta variación es más importante para la C-401, que es entonces responsable del aumento del riesgo individual de la red ya que la disminución del riesgo de las columnas más pequeñas no compensa el riesgo de esta columna.

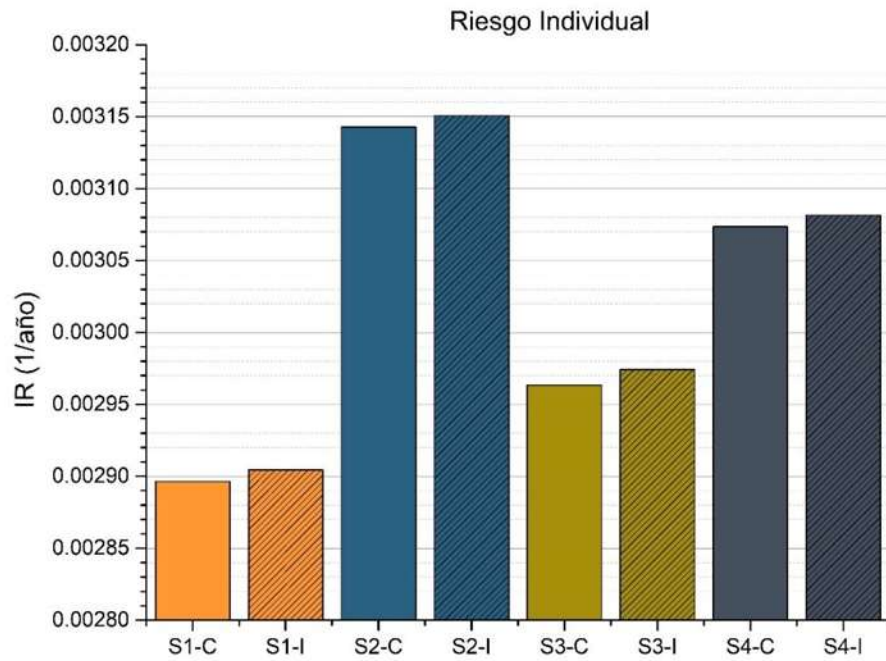


Figura 6.13. Valores para el índice de riesgo individual

CAPÍTULO 7. CONCLUSIONES

7.1 CONCLUSIONES

En este trabajo se utilizó la simulación de procesos como una herramienta de diseño de las CHOSYNs proporcionando así un diseño más detallado de lo que conlleva la integración en este tipo de sistemas que involucran un gran número de plantas. El enfoque propuesto consiste en un método secuencial para seleccionar en cada iteración una nueva planta de acuerdo con una secuencia jerárquica de decisiones, y su capacidad de procesamiento de acuerdo con los recursos disponibles con el fin de priorizar el uso óptimo de los recursos internos. La metodología propuesta consiste en maximizar el uso total de los recursos internos disponibles minimizando la generación de residuos mediante. Esta metodología contribuye a resolver el problema de diseño con:

- 1) Dimensionando fácilmente las nuevas plantas.
- 2) Proporcionando información de temperatura, presión, composición de las corrientes intercambiables.
- 3) Proporcionando la lista y el coste de los nuevos equipos, y

(4) Evaluando el rendimiento económico de la red a través de la herramienta económica incluida en el software de simulación.

Se abordó un caso de estudio con el objetivo de satisfacer la demanda de especies objetivo (metanol y ácido acético) de dos plantas existentes mediante fuentes internas de H_2 , CO , CO_2 , CH_4 y agua procedentes del resto de plantas existentes. Se presentaron cuatro soluciones para el caso de estudio propuesto. Las cuatro soluciones son factibles, y presentan diferentes combinaciones de plantas, tamaños y distribución de corrientes. Las soluciones se compararon en función del uso de los recursos y de los aspectos económicos. El software de simulación permite tener soluciones con alto nivel de detalle, lo que permite hacer evaluaciones de costo más exactas.

Los enfoques previamente reportados para el diseño de CHOSYNs se habían centrado en la integración óptima de las diferentes plantas y recursos de la red; sin embargo, hay que tener en cuenta que durante esta integración se generan varios procesos de separación que son los que más impactan en la sostenibilidad de la red porque son los procesos energéticamente más intensivos, especialmente las unidades de destilación, todo esto impacta sobre los objetivos económicos y de impacto ambiental, y según sus condiciones de operación también podrían impactar en la seguridad. Por ello, en este trabajo también propuso una estrategia para involucrar técnicas de intensificación de procesos en el diseño de CHOSYNs para abordar las ineficiencias energéticas producidas en las secuencias de destilación que no habían sido consideradas previamente. Esta estrategia se implementó en el mismo caso de estudio anterior, se demostró que la sustitución de las secuencias de destilación convencionales por secuencias acopladas térmicamente permite reducir el consumo de energía y presentar un importante ahorro energético de alrededor del 20% respecto a sus análogas convencionales.

En este trabajo se ha propuesto evaluar la sustentabilidad del sistema a través de los aspectos económico, medioambiental y de seguridad, de manera que una ganancia en todos o alguno de los aspectos significaría estrictamente una mejora en la sostenibilidad. En primer lugar, el objetivo económico, a pesar de que el costo de equipo es ligeramente superior al de las soluciones convencionales, el costo de los servicios se reduce notablemente, lo que también disminuye el costo total anual. El impacto al medio ambiente también se reduce con la intensificación. En el caso concreto de este caso de estudio, los resultados de la evaluación de riesgos no mejoran con la intensificación, debido al tamaño de las columnas y a los flujos internos; sin embargo, este impacto no es significativo en relación con los objetivos económicos y medioambientales. Por lo tanto, puede establecerse que, para un diseño óptimo de un CHOSYN, en el que los objetivos de sustentabilidad se han alcanzado mediante la integración de recursos, las técnicas de PI permiten mejorar aún más estos objetivos abordando las ineficiencias de las secuencias de destilación que se generan durante el diseño de la red.

- [1] M. M. El-Halwagi, “14 - Conserving material resources through Process Integration: Material Conservation Networks,” in *Woodhead Publishing Series in Energy*, J. J. B. T.-H. of P. I. (PI) (Second E. Klemeš, Ed. Woodhead Publishing, 2023, pp. 467–486.
- [2] M. M. B. Noureldin and M. M. El-Halwagi, “Synthesis of C-H-O Symbiosis Networks,” *AIChE J.*, vol. 61, no. 4, pp. 1242–1262, 2015.
- [3] M. M. El-Halwagi, “A Shortcut Approach to the Multi-scale Atomic Targeting and Design of C–H–O Symbiosis Networks,” *Process Integr. Optim. Sustain.*, vol. 1, no. 1, pp. 3–13, 2017.
- [4] K. Topolski, M. M. B. Noureldin, F. T. Eljack, and M. M. El-Halwagi, “An anchor-tenant approach to the synthesis of carbon-hydrogen-oxygen symbiosis networks,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 116, pp. 80-90, 2018.
- [5] M. Juárez-García, J. M. Ponce-Ortega, and M. M. El-Halwagi, “A Disjunctive Programming Approach for Optimizing Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks,” *Process Integr. Optim. Sustain.*, vol. 3, pp. 199-212, 2018.
- [6] F. M. Al-Fadhli, R. Mukherjee, W. Wang, and M. M. El-Halwagi, “Design of Multiperiod C–H–O Symbiosis Networks,” *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 6, no. 7, pp. 9130–9136, Jul. 2018.
- [7] R. Mukherjee and M. M. El-Halwagi, “Reliability of C-H-O Symbiosis Networks under Source Streams Uncertainty,” *Smart Sustain. Manuf. Syst.*, vol. 2, no. 2, pp. 132–153, Sep. 2018.
- [8] M. Panu, K. Topolski, S. Abrash, and M. M. El-Halwagi, “CO₂ footprint reduction via the optimal design of Carbon-Hydrogen-Oxygen SYmbiosis Networks (CHOSYNs),” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 203, pp. 1–11, 2019.
- [9] F. M. Al-Fadhli, H. Baaqeel, and M. M. El-Halwagi, “Modular Design of Carbon-Hydrogen-Oxygen Symbiosis Networks over a Time Horizon with Limited Natural Resources,” *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 141, p. 107535, 2019.
- [10] W. Wang, H. Deng, W. Lu, and T. Zhang, “Synthesis of C-H-O Symbiosis Networks Based on i-safe Index.” International Conference on Power, Energy, Electrical and Environmental Science, Guiyang, 2020.
- [11] K. Topolski, L. F. Lira-Barragán, M. Panu, J. M. Ponce-Ortega, and M. M. El-Halwagi, “Integrating Mass and Energy through the Anchor-Tenant Approach for the Synthesis of Carbon-Hydrogen-Oxygen Symbiosis Networks,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, no. 36, pp. 16761–16776, Sep. 2019.
- [12] M. Juárez-García, A. del C. Munguía-López, and J. M. Ponce-Ortega, “Optimization

Approach to Identify Fair Solutions in the Synthesis of Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 59, no. 13, pp. 5985–5995, Apr. 2020.

- [13] A. A. Farouk, M. M. El-Halwagi, D. C. Y. Foo, and I. M. L. Chew, “Development of a C–H–O Symbiosis Network during Conceptual Design via Economic, Sustainability, and Safety Metrics,” *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 9, no. 10, pp. 3735–3749, Mar. 2021.
- [14] A. Farouk and I. Chew, “Development of a Simultaneous Mass-Water Carbon-Hydrogen-Oxygen Symbiosis Network,” *Sustain. Prod. Consum.*, vol. 28, Jun. 2021.
- [15] M. Juárez-García, M. El-Halwagi, and J. Ponce-Ortega, “Systematic Approach for Synthesizing Carbon–Hydrogen–Oxygen Networks Involving Detailed Process Simulations,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 60, Nov. 2021.
- [16] Q. H. Goh, A. A. Farouk, and I. L. Chew, “Optimizing the bioplastic chemical building block with wastewater sludge as the feedstock using carbon-hydrogen-oxygen framework,” *Resour. Conserv. Recycl.*, vol. 176, p. 105920, 2022.
- [17] Q. H. Goh, A. A. Farouk, J.-Y. Lee, and I. M. L. Chew, “Synthesis of a Multiperiod C–H–O Symbiosis Network for the Potential Valorization of Glycerol to PHA Production,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 61, no. 43, pp. 16368–16382, Nov. 2022.
- [18] M. Juárez-García, G. Contreras-Zarazúa, J. G. Segovia-Hernandez, and J. M. Ponce-Ortega, “Improving sustainable CHOSYN’s targets through process intensification,” in *32 European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, vol. 51, L. Montastruc and S. B. T.-C. A. C. E. Negny, Eds. Elsevier, 2022, pp. 613–618.
- [19] M. M. El-Halwagi and V. Manousiouthakis, “Synthesis of mass exchange networks,” *AIChE J.*, vol. 35, no. 8, pp. 1233–1244, Aug. 1989.
- [20] C. Deng, Y. Zhou, C.-L. Chen, and X. Feng, “Systematic approach for targeting interplant hydrogen networks,” *Energy*, vol. 90, pp. 68–88, 2015.
- [21] D. J. Roddy, “A syngas network for reducing industrial carbon footprint and energy use,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 53, no. 2, pp. 299–304, 2013.
- [22] M. Short and A. J. Isafiade, “Thirty years of mass exchanger network synthesis – A systematic review,” *J. Clean. Prod.*, vol. 304, p. 127112, 2021.
- [23] J. C. Jiménez Ocaña, “Simulación de Procesos,” 2018.
- [24] T. E. Casavant and R. P. Côté, “Using chemical process simulation to design industrial ecosystems,” *J. Clean. Prod.*, vol. 12, no. 8, pp. 901–908, 2004.
- [25] V. H. Martínez Sifuentes, *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. Plaza y Valdes, 2000.
- [26] M. Baldea, “From process integration to process intensification,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 81, pp. 104–114, 2015.
- [27] P. Lutze, R. Gani, and J. M. Woodley, “Process intensification: A perspective on

-
- process synthesis,” *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 49, no. 6, pp. 547–558, 2010.
- [28] J. M. Ponce-Ortega, M. M. Al-Thubaiti, and M. M. El-Halwagi, “Process intensification: New understanding and systematic approach,” *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 53, pp. 63–75, 2012.
- [29] J. A. Moulijn, A. Stankiewicz, J. Grievink, and A. Górak, “Process intensification and process systems engineering: A friendly symbiosis,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 32, no. 1, pp. 3–11, 2008.
- [30] Y. Tian, S. E. Demirel, M. M. F. Hasan, and E. N. Pistikopoulos, “An overview of process systems engineering approaches for process intensification: State of the art,” *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 133, pp. 160–210, 2018.
- [31] J. G. Segovia-Hernández and E. Sánchez-Ramírez, “Current status and future trends of computer-aided process design, applied to purification of liquid biofuels, using process intensification: A short review,” *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 172, p. 108804, 2022.
- [32] N. V. D. Long, L. Q. Minh, F. Ahmad, P. Luis, and M. Lee, “Intensified Distillation-Based Separation Processes: Recent Developments and Perspectives,” *Chem. Eng. Technol.*, vol. 39, no. 12, pp. 2183–2195, Dec. 2016.
- [33] J. A. Chavez Velasco, M. Tawarmalani, and R. Agrawal, “Systematic Analysis Reveals Thermal Separations Are Not Necessarily Most Energy Intensive,” *Joule*, vol. 5, no. 2, pp. 330–343, 2021.
- [34] I. Dejanović, L. Matijašević, and Ž. Olujić, “Dividing wall column—A breakthrough towards sustainable distilling,” *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 49, no. 6, pp. 559–580, 2010.
- [35] J. A. Caballero and I. E. Grossmann, “Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled distillation systems,” *Comput. Chem. Eng.*, vol. 28, no. 11, pp. 2307–2329, 2004.
- [36] J. A. Caballero, “Thermally Coupled Distillation,” in *10th International Symposium on Process Systems Engineering: Part A*, vol. 27, R. M. de Brito Alves, C. A. O. do Nascimento, and E. C. B. T.-C. A. C. E. Biscaia, Eds. Elsevier, 2009, pp. 59–64.
- [37] S. Hernández, S. Pereira-Pech, A. Jiménez, and V. Rico-Ramírez, “Energy Efficiency of an Indirect Thermally Coupled Distillation Sequence,” *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 81, no. 5, pp. 1087–1091, Oct. 2003.
- [38] S. Hernández, J. Gabriel Segovia-Hernández, and V. Rico-Ramírez, “Thermodynamically equivalent distillation schemes to the Petlyuk column for ternary mixtures,” *Energy*, vol. 31, no. 12, pp. 2176–2183, 2006.
- [39] M. Emtir and A. Etoumi, “Enhancement of conventional distillation configurations for ternary mixtures separation,” *Clean Technol. Environ. Policy*, vol. 11, no. 1, pp. 123–131, 2009.

-
- [40] N. Ramírez-Corona, A. Jiménez-Gutiérrez, A. Castro-Agüero, and V. Rico-Ramírez, "Optimum design of Petlyuk and divided-wall distillation systems using a shortcut model," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 88, no. 10, pp. 1405–1418, 2010.
- [41] C. Jiménez-González, D. J. C. Constable, and C. S. Ponder, "Evaluating the 'Greenness' of chemical processes and products in the pharmaceutical industry—a green metrics primer," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 41, no. 4, pp. 1485–1498, 2012.
- [42] A. D. Curzons, D. J. C. Constable, D. N. Mortimer, and V. L. Cunningham, "So you think your process is green, how do you know?—Using principles of sustainability to determine what is green—a corporate perspective," *Green Chem.*, vol. 3, no. 1, pp. 1–6, 2001.
- [43] R. K. Singh, H. R. Murty, S. K. Gupta, and A. K. Dikshit, "An overview of sustainability assessment methodologies," *Ecol. Indic.*, vol. 9, no. 2, pp. 189–212, 2009.
- [44] G. Contreras-Zarazúa *et al.*, "Inherently Safer Design and Optimization of Intensified Separation Processes for Furfural Production," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, no. 15, pp. 6105–6120, Apr. 2019.
- [45] B. Bao, M. M. El-Halwagi, and N. O. Elbashir, "Simulation, integration, and economic analysis of gas-to-liquid processes," *Fuel Process. Technol.*, vol. 91, no. 7, pp. 703–713, 2010.
- [46] W. Wu and C. Tungpanututh, "Optimization of a methane autothermal reforming-based hydrogen production system with low CO₂ emissions," *IFAC Proc. Vol.*, vol. 45, no. 15, pp. 661–666, 2012.
- [47] P. Thiruvenkataswamy, F. T. Eljack, N. Roy, M. S. Mannan, and M. M. El-Halwagi, "Safety and techno-economic analysis of ethylene technologies," *J. Loss Prev. Process Ind.*, vol. 39, pp. 74–84, 2016.
- [48] E. V. Shelepova, A. A. Vedyagin, I. V. Mishakov, and A. S. Noskov, "Mathematical modeling of the propane dehydrogenation process in the catalytic membrane reactor," *Chem. Eng. J.*, vol. 176–177, pp. 151–157, Dec. 2011.
- [49] A. C. Dimian and C. S. Bildea, "Energy efficient methanol-to-olefins process," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 131, pp. 41–54, 2018.
- [50] S. Jasper and M. M. El-Halwagi, "A Techno-Economic Comparison between Two Methanol-to-Propylene Processes," *Processes*, vol. 3, no. 3, 2015.
- [51] D. F. Rodríguez-Vallejo, G. Guillén-Gosálbez, and B. Chachuat, "What Is the True Cost of Producing Propylene from Methanol? The Role of Externalities," *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 8, no. 8, pp. 3072–3081, Mar. 2020.
- [52] M. L. Luyben and B. D. Tyréus, "An industrial design/control study for the vinyl acetate monomer process," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 22, no. 7, pp. 867–877, 1998.
- [53] W. L. Luyben, "Design and Control of a Modified Vinyl Acetate Monomer Process," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 50, no. 17, pp. 10136–10147, Sep. 2011.

-
- [54] W. L. Luyben, "Design and Control of a Methanol Reactor/Column Process," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 49, no. 13, pp. 6150–6163, Jul. 2010.
- [55] R. De María, I. Díaz, M. Rodríguez, and A. Sáiz, "Industrial Methanol from Syngas: Kinetic Study and Process Simulation," *Int. J. Chem. React. Eng.*, vol. 11, no. 1, pp. 469–477, 2013.
- [56] M. Puig-Gamero, J. Argudo-Santamaria, J. L. Valverde, P. Sánchez, and L. Sanchez-Silva, "Three integrated process simulation using aspen plus®: Pine gasification, syngas cleaning and methanol synthesis," *Energy Convers. Manag.*, vol. 177, pp. 416–427, 2018.
- [57] G. Leonzio, "State of art and perspectives about the production of methanol, dimethyl ether and syngas by carbon dioxide hydrogenation," *J. CO2 Util.*, vol. 27, pp. 326–354, 2018.
- [58] M. Asif, X. Gao, H. Lv, X. Xi, and P. Dong, "Catalytic hydrogenation of CO2 from 600 MW supercritical coal power plant to produce methanol: A techno-economic analysis," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 5, pp. 2726–2741, 2018.
- [59] A. A. Kiss, J. J. Pragt, H. J. Vos, G. Bargeman, and M. T. de Groot, "Novel efficient process for methanol synthesis by CO2 hydrogenation," *Chem. Eng. J.*, vol. 284, pp. 260–269, 2016.
- [60] J. C. Molburg and R. D. Doctor, "Hydrogen from steam-methane reforming with CO2 capture," in *20th Annu. Int. Pittsburgh Coal Conf.*, 2003, pp. 40–41.
- [61] J. Baltrusaitis and W. L. Luyben, "Methane Conversion to Syngas for Gas-to-Liquids (GTL): Is Sustainable CO2 Reuse via Dry Methane Reforming (DMR) Cost Competitive with SMR and ATR Processes?," *ACS Sustain. Chem. Eng.*, vol. 3, no. 9, pp. 2100–2111, Sep. 2015.
- [62] H. Hiblot, I. Ziegler-Devin, R. Fournet, and P. A. Glaude, "Steam reforming of methane in a synthesis gas from biomass gasification," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 41, pp. 18329–18338, 2016.
- [63] I. I. Olateju, C. Gibson-Dick, S. C. O. Egede, and A. Giwa, "Process Development for Hydrogen Production via Water-Gas Shift Reaction Using Aspen HYSYS," *Int. J. Eng. Res. Africa*, vol. 30, pp. 144–153, 2017.
- [64] A. C. Dimian and A. A. Kiss, "Novel energy efficient process for acetic acid production by methanol carbonylation," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 159, pp. 1–12, 2020.
- [65] S. Hernández and A. Jiménez, "Design of optimal thermally-coupled distillation systems using a dynamic model," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 74, no. 3, pp. 357–362, 1996.

APÉNDICE A. SIMULACIONES DE LOS DIAGRAMAS DE PROCESOS INVOLUCRADOS Y BALANCES DE MATERIA

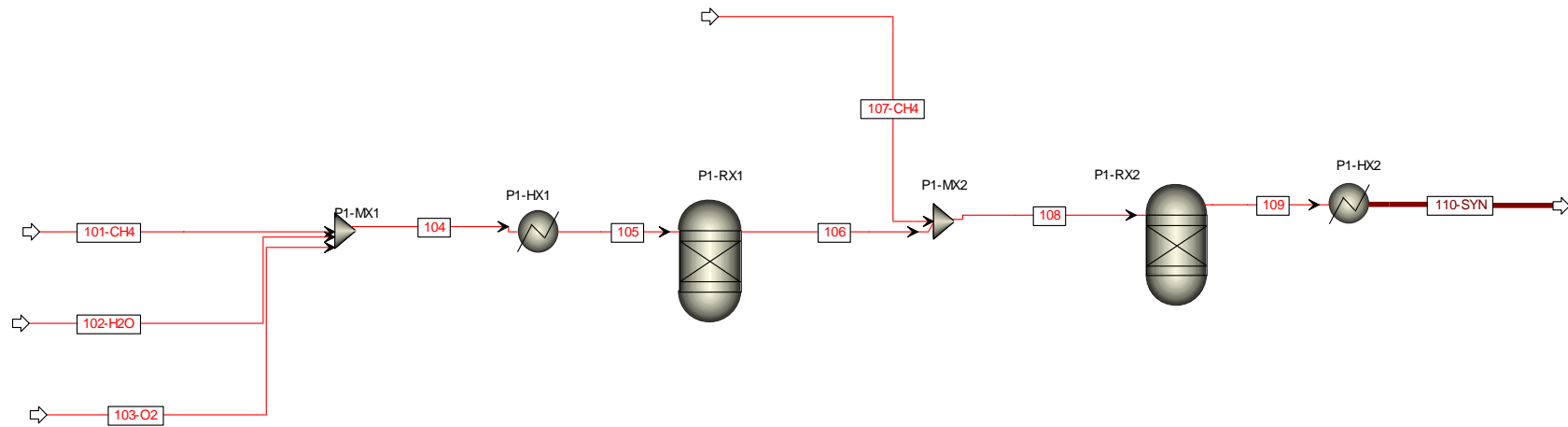


Figura A1. Simulación del proceso ATR

Tabla A1. Balance de materia para el proceso ATR

Corriente	Unidades	101-CH ₄	102-H ₂ O	103-O ₂	104	105	106	107-CH ₄	108	109	110-SYN
Temperatura	C	24	24	24	18	499	899	24	851	706	390
Presión	bar	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01	1.01
Fracción de vapor		1.00	0.00	1.00	0.52	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		0.00	1.00	0.00	0.48	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	8800	13200	4888	26888	26888	39596.5	1470	41066	43357	43357

Fracción mol											
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.49	0.00	0.47	0.55	0.55
H ₂ O		0.00	1.00	0.00	0.49	0.49	0.29	0.00	0.28	0.21	0.21
CH ₄		1.00	0.00	0.00	0.33	0.33	0.00	1.00	0.04	0.01	0.01
AIR		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.07	0.09	0.09
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.15	0.00	0.15	0.14	0.14
O ₂		0.00	0.00	1.00	0.18	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

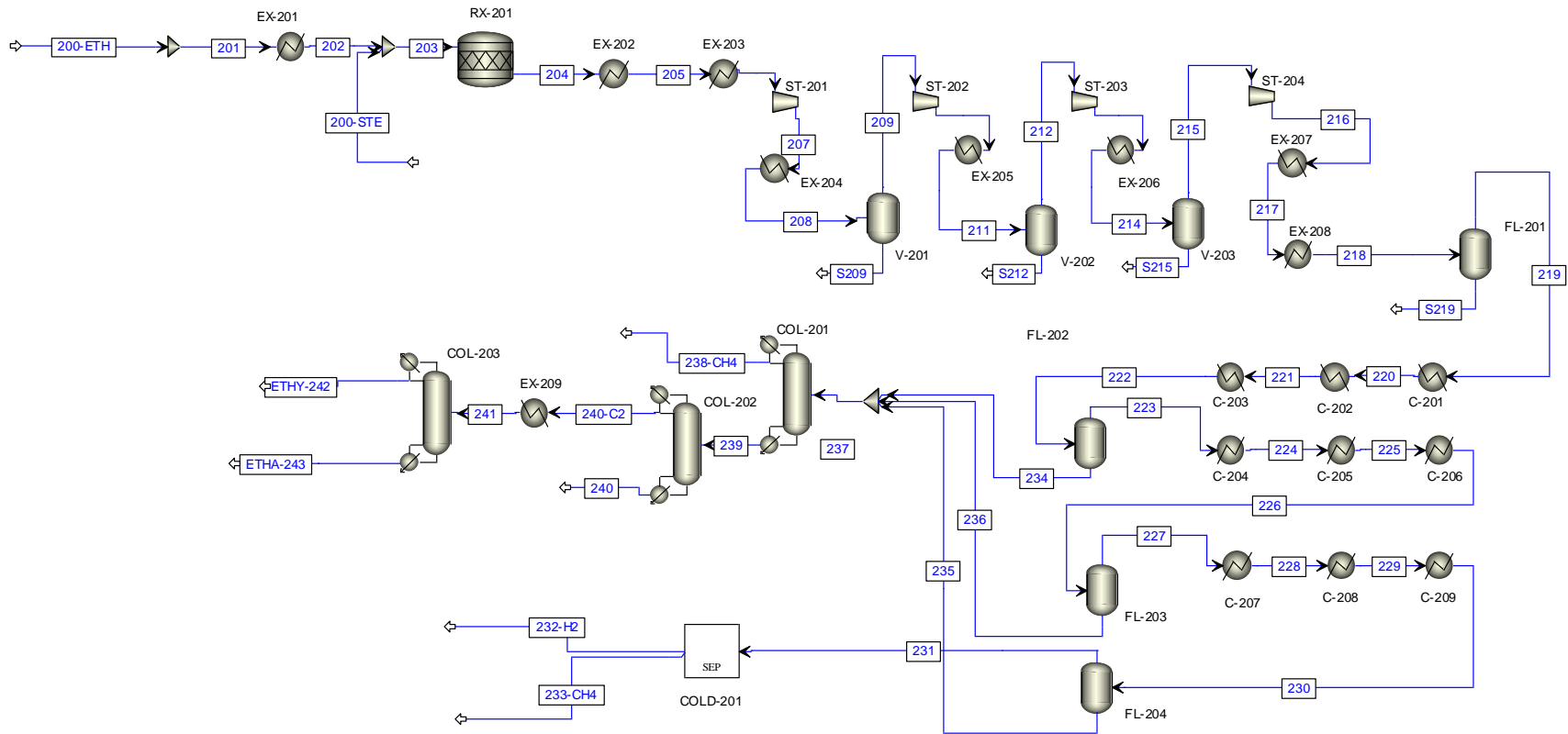


Figura A2. Simulación para el proceso de producción de etileno mediante el cracking térmico del etano.

Tabla A2. Balance de materia para el proceso de Etileno

Corriente	Unidades	200-ETH	200-STE	203	204	206	207	208	209	211
Temperatura	C	25	165	426	840	230	346	38	38	38
Presión	bar	3.00	7.00	2.00	1.00	1.00	2.40	2.40	2.40	6.00
Fracción de vapor		1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.68	1.00	0.98
Fracción del liquido		0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.00	0.02
Flujo molar	kmol/hr	250.00	210.00	460.00	644.75	644.75	644.75	644.75	438.08	438.08
Fracción molar										
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.22	0.22	0.22	0.22	0.32	0.32
CH ₄		0.00	0.00	0.00	0.15	0.15	0.15	0.15	0.22	0.22
H ₂ O		0.00	1.00	0.46	0.33	0.33	0.33	0.33	0.03	0.03
C ₂ H ₆		1.00	0.00	0.54	0.02	0.02	0.02	0.02	0.03	0.03
C ₂ H ₄		0.00	0.00	0.00	0.28	0.28	0.28	0.28	0.40	0.40
C ₂ H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₈		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₆		0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
BUTANE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTENE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Corriente	Unidades	212	214	215	218	219	222	223	226	227
Temperatura	C	38	38	38	15	15	-29	-29	-74	-74
Presión	bar	6.00	15.00	15.00	36.00	36.00	35.00	35.00	33.50	33.00
Fracción de vapor		1.00	0.99	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00	0.53	1.00
Fracción del liquido		0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.47	0.00
Flujo molar	kmol/hr	429.89	429.89	426.15	426.15	422.80	422.80	420.81	420.81	223.79
Fracción molar										
H ₂		0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.33	0.63
CH ₄		0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.22	0.24
H ₂ O		0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

C ₂ H ₆		0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.01
C ₂ H ₄		0.40	0.40	0.41	0.41	0.41	0.41	0.40	0.40	0.13
C ₂ H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₈		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₆		0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00
BUTANE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTENE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Corriente	Unidades	230	231	237	238-CH4	239	240-C2	241	ETHY-242	ETHA-243
Temperatura	C	-124	-114	-83	-218	-9	-17	75	-30	-9
Presión	bar	31.50	31.00	30.00	30.00	30.00	26.00	26.00	19.00	19.00
Fracción de vapor		0.76	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00	0.00
Fracción del líquido		0.24	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	223.79	178.55	244.25	62.00	182.24	176.19	176.19	164.76	11.43
Fracción molar										
H ₂		0.63	0.78	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CH ₄		0.24	0.20	0.24	0.94	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₆		0.01	0.00	0.05	0.00	0.06	0.06	0.06	0.00	0.99
C ₂ H ₄		0.13	0.02	0.69	0.06	0.90	0.94	0.94	1.00	0.01
C ₂ H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₈		0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₃ H ₆		0.00	0.00	0.02	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTANE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTENE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
BUTYNE		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

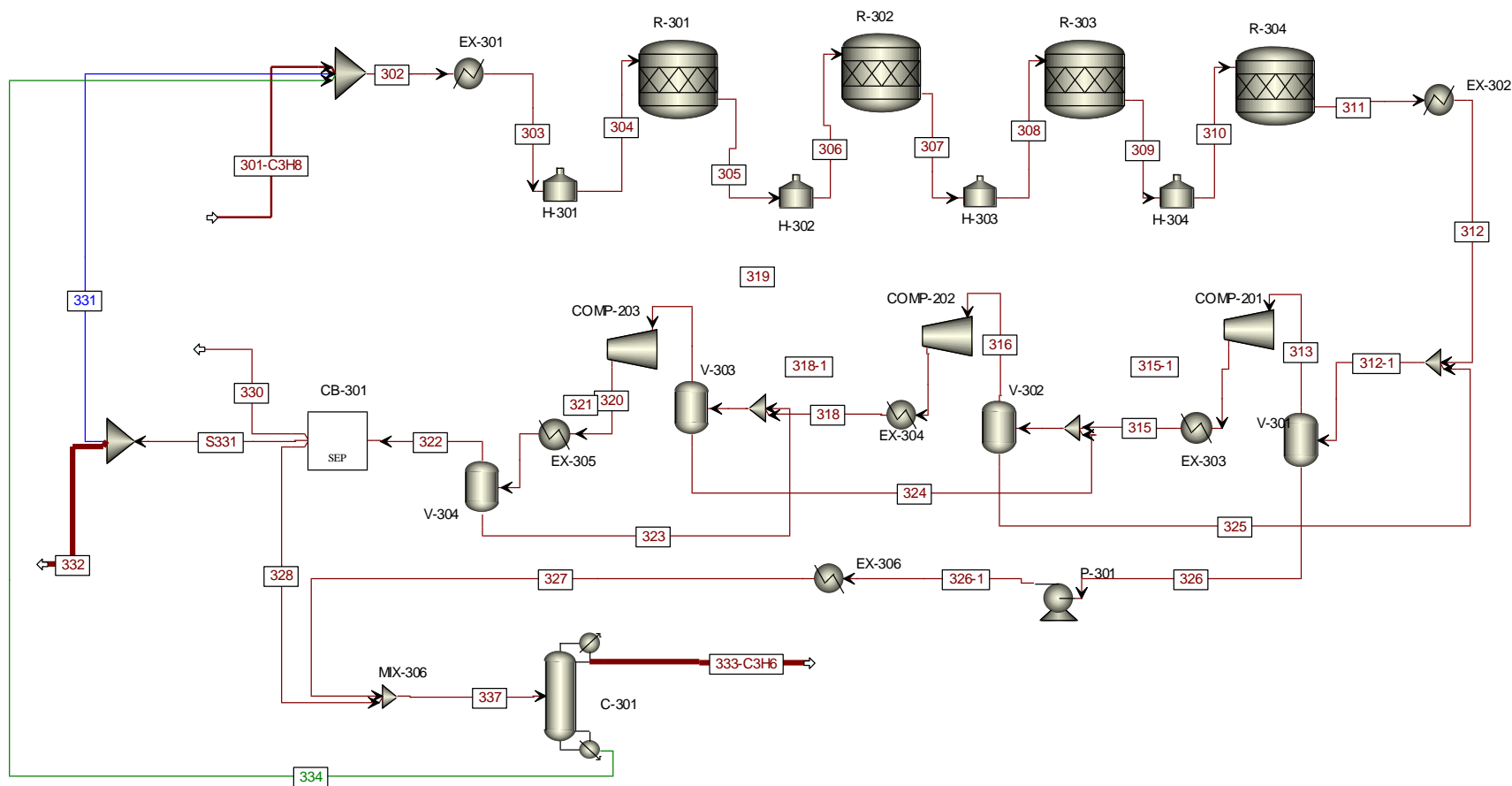


Figura A3. Simulación para el proceso de la deshidrogenación del propano a propileno (PDH)

Tabla A3. Balance de materia para el proceso PDH

Corriente	Unidades	301-C3H8	302	303	304	306	308	310	312	312-1
Temperatura	C	25	-21	566	628	628	628	628	25	-54
Presión	bar	4.05	4.05	1.32	1.32	1.32	1.32	1.32	1.11	1.11
Fracción de vapor		1.00	0.84	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		0.00	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	2500.00	8481.29	8481.29	8481.29	9499.86	10149.49	10581.97	10859.93	13778.87
Fracción molar										
C ₃ H ₈		1.00	0.66	0.66	0.66	0.48	0.39	0.33	0.29	0.35
C ₃ H ₆		0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.16	0.19	0.21	0.25
H ₂		0.00	0.33	0.33	0.33	0.40	0.43	0.45	0.46	0.36
C ₂ H ₄		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01
CH ₄		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.02	0.02	0.02
C ₂ H ₆		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01
Corriente	Unidades	313	315	315-1	316	318	318-1	319	320	321
Temperatura	C	-59	28	-3	-5	17	16	15	40	5
Presión	bar	1.11	9.24	9.24	9.12	18.20	18.20	18.20	26.00	26.00
Fracción de vapor		1.00	1.00	0.82	1.00	1.00	0.75	1.00	1.00	0.67
Fracción del liquido		0.00	0.00	0.18	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.33
Flujo molar	kmol/hr	10457.72	10457.72	14652.02	11733.01	11733.01	15384.62	11190.31	11190.31	11190.31
Fracción molar										
C ₃ H ₈		0.26	0.26	0.35	0.29	0.29	0.34	0.26	0.26	0.26
C ₃ H ₆		0.21	0.21	0.27	0.24	0.24	0.28	0.23	0.23	0.23
H ₂		0.48	0.48	0.34	0.43	0.43	0.33	0.45	0.45	0.45
C ₂ H ₄		0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
CH ₄		0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
C ₂ H ₆		0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
Corriente	Unidades	322	330	331	326	327	328	337	333-C3H6	334
Temperatura	C	5	5	-120	-59	-5	5	-1	37	58

Presión	bar	26.00	26.00	4.05	1.11	12.16	26.00	12.16	16.20	20.60
Fracción de vapor		1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	7539.19	469.28	2837.50	3321.15	3321.15	2098.78	5419.94	2276.18	3143.75
Fracción molar										
C ₃ H ₈		0.14	0.00	0.00	0.62	0.62	0.50	0.58	0.00	0.99
C ₃ H ₆		0.14	0.00	0.00	0.37	0.37	0.50	0.42	0.99	0.01
H ₂		0.66	0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄		0.02	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CH ₄		0.03	0.52	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₆		0.01	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00

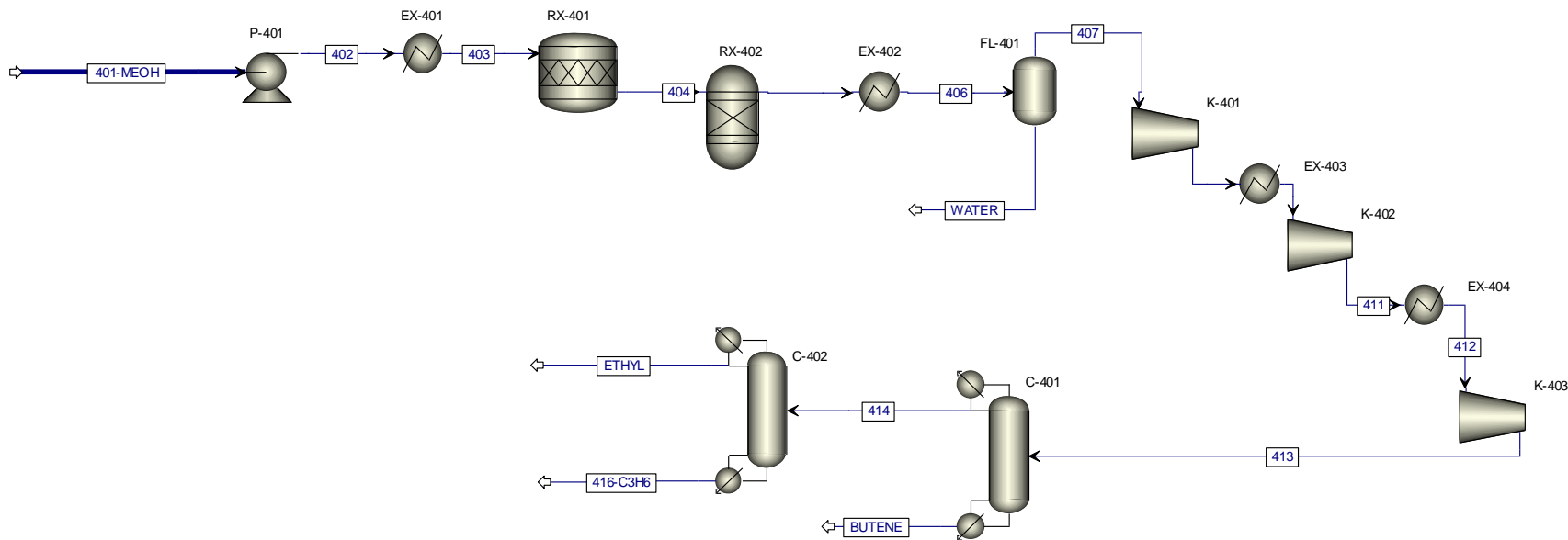


Figura A4. Simulación para el proceso metanol a propileno (MTP)

Tabla A4. Balance de materia para el proceso MTP

Corriente	Unidades	401-MEOH	402	403	404	405	406	407	409	410
Temperatura	C	22	22	300	426	424	40	27	114	62
Presión	bar	1.00	1.65	1.65	1.65	1.45	1.45	1.45	7.00	7.00
Fracción de vapor		0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	0.26	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.74	0.00	0.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	6500.00	6500.00	6500.00	6500.00	8690.56	8690.56	2232.61	2232.61	2232.61
Fracción molar										

METHA-01		1.00	1.00	1.00	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H2O		0.00	0.00	0.00	0.45	0.75	0.75	0.02	0.02	0.02
PROPY-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.17	0.17	0.65	0.65	0.65
1-BUT-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	0.15	0.15	0.15
DIMET-01		0.00	0.00	0.00	0.45	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
ETHYL-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.05	0.18	0.18	0.18
N-PEN-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Corriente	Unidades	411	412	413	414	416-C3H6	BUTENE	ETHYL	WATER	
Temperatura	C	118	86	115	39	63	126	-18	27	
Presión	bar	18.00	18.00	28.27	27.67	27.67	28.27	26.89	1.45	
Fracción de vapor		1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	
Flujo molar	kmol/hr	2232.61	2232.61	2232.61	1858.85	1455.91	373.76	402.94	6457.95	
Fracción molar										
METHA-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
H ₂ O		0.02	0.02	0.02	0.00	0.00	0.11	0.00	1.00	
PROPY-01		0.65	0.65	0.65	0.78	1.00	0.00	0.00	0.00	
1-BUT-01		0.15	0.15	0.15	0.00	0.00	0.89	0.00	0.00	
DIMET-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
ETHYL-01		0.18	0.18	0.18	0.22	0.00	0.00	1.00	0.00	
N-PEN-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

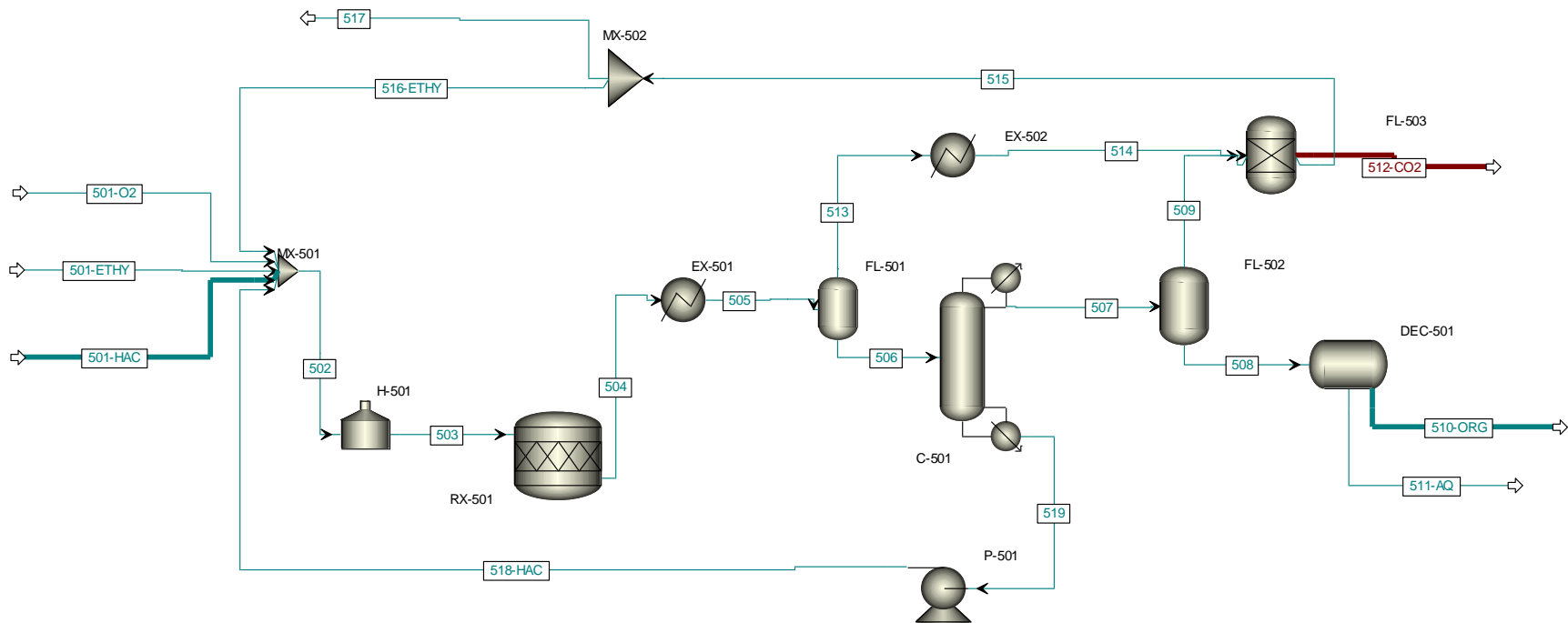


Figura A5. Simulación para el proceso de producción de monómero de acetato de vinilo (VAM)

Tabla A5. Balance de materia para el proceso VAM

Corriente	Unidades	501-ETHY	501-HAC	501-O2	503	505	506	507	508
Temperatura	C	30	30	30	148	135	153	153	80
Presión	bar	10.34	10.34	10.34	8.83	6.21	5.79	30.00	8.83
Fracción de vapor		1.00	0.00	1.00	0.19	0.13	0.00	0.00	0.00
Fracción del liquido		0.00	1.00	0.00	0.81	0.87	1.00	1.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	148.00	140.00	92.91	2747.60	2713.15	2170.52	165.22	165.22

Fracción molar									
O ₂		0.00	0.00	1.00	0.05	0.02	0.00	0.00	0.00
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.01	0.04	0.04	0.54	0.54
CO ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01
C ₂ H ₄		1.00	0.00	0.00	0.10	0.07	0.00	0.06	0.06
C ₂ H ₆		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄ O ₂		0.00	1.00	0.00	0.84	0.83	0.92	0.01	0.01
VINYL-01		0.00	0.00	0.00	0.01	0.03	0.03	0.37	0.37
Corriente	Unidades	510-ORG	511-AQ	514	512-CO2	515	516-ETHY	518-HAC	519
Temperatura	C	40	40	80	80	80	80	275	275
Presión	bar	1.24	1.24	8.83	8.83	8.83	8.83	10.34	30.00
Fracción de vapor		0.00	0.00	0.49	1.00	0.46	0.46	0.00	0.00
Fracción del líquido		1.00	1.00	0.51	0.00	0.54	0.54	1.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	77.82	87.40	542.63	26.38	516.25	361.38	2005.30	2005.30
Fracción molar									
O ₂		0.01	0.00	0.10	0.00	0.11	0.11	0.00	0.00
H ₂ O		0.03	1.00	0.04	0.00	0.04	0.04	0.00	0.00
CO ₂		0.02	0.00	0.05	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄		0.14	0.00	0.34	0.00	0.35	0.35	0.00	0.00
C ₂ H ₆		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄ O ₂		0.02	0.00	0.43	0.00	0.45	0.45	1.00	1.00
VINYL-01		0.79	0.00	0.05	0.00	0.05	0.05	0.00	0.00

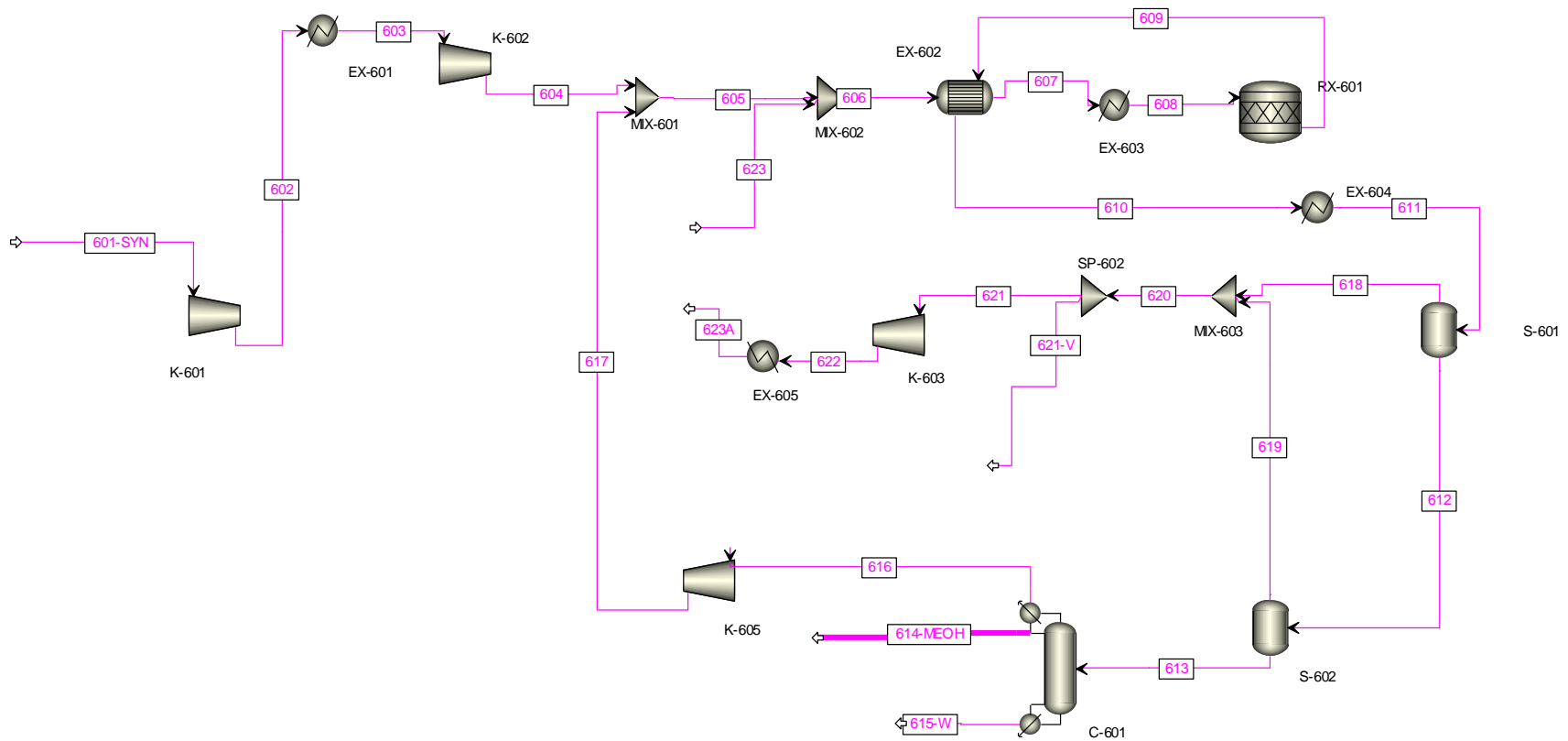


Figura A6. Simulación para el proceso de producción de metanol a partir de Syngas.

Tabla A6. Balance de materia para el proceso de producción de metanol a partir de Syngas.

Corriente	Unidades	601-SYN	603	604	605	606	608	609	611	612	613
Temperatura	C	49	48	99	111	69	149	271	37	37	37
Presión	bar	51.17	74.98	110.04	110.04	110.00	110.04	106.39	106.39	106.39	2.03
Fracción de vapor		1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.91	0.00	0.00
Fracción del liquido		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.09	1.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	3261.05	3261.05	3261.05	3311.04	18001.04	18001.04	15992.13	15992.13	1438.46	1287.08
Fracción molar											
METHA-01		0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.07	0.07	0.73	0.80
CO ₂		0.07	0.07	0.07	0.08	0.07	0.07	0.07	0.07	0.09	0.02
CO		0.24	0.24	0.24	0.23	0.12	0.12	0.09	0.09	0.01	0.00
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.16	0.18
H ₂		0.69	0.69	0.69	0.68	0.80	0.80	0.76	0.76	0.01	0.00
Corriente	Unidades	614-MEOH	615-W	616	617	618	619	620	621	622	623
Temperatura	C	52	99	52	526	37	37	37	37	865	60
Presión	bar	1.01	1.01	1.01	110.04	106.39	2.03	2.03	2.03	110.04	110.00
Fracción de vapor		0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	1017.10	220.00	49.99	49.99	14553.67	151.38	14705.05	14690.35	14690.35	14690.00
Fracción molar											
METHA-01		0.99	0.00	0.60	0.60	0.00	0.13	0.00	0.00	0.00	0.00
CO ₂		0.00	0.00	0.39	0.39	0.07	0.70	0.07	0.07	0.07	0.07
CO		0.00	0.00	0.01	0.01	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10
H ₂ O		0.01	1.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.83	0.06	0.82	0.82	0.82	0.82

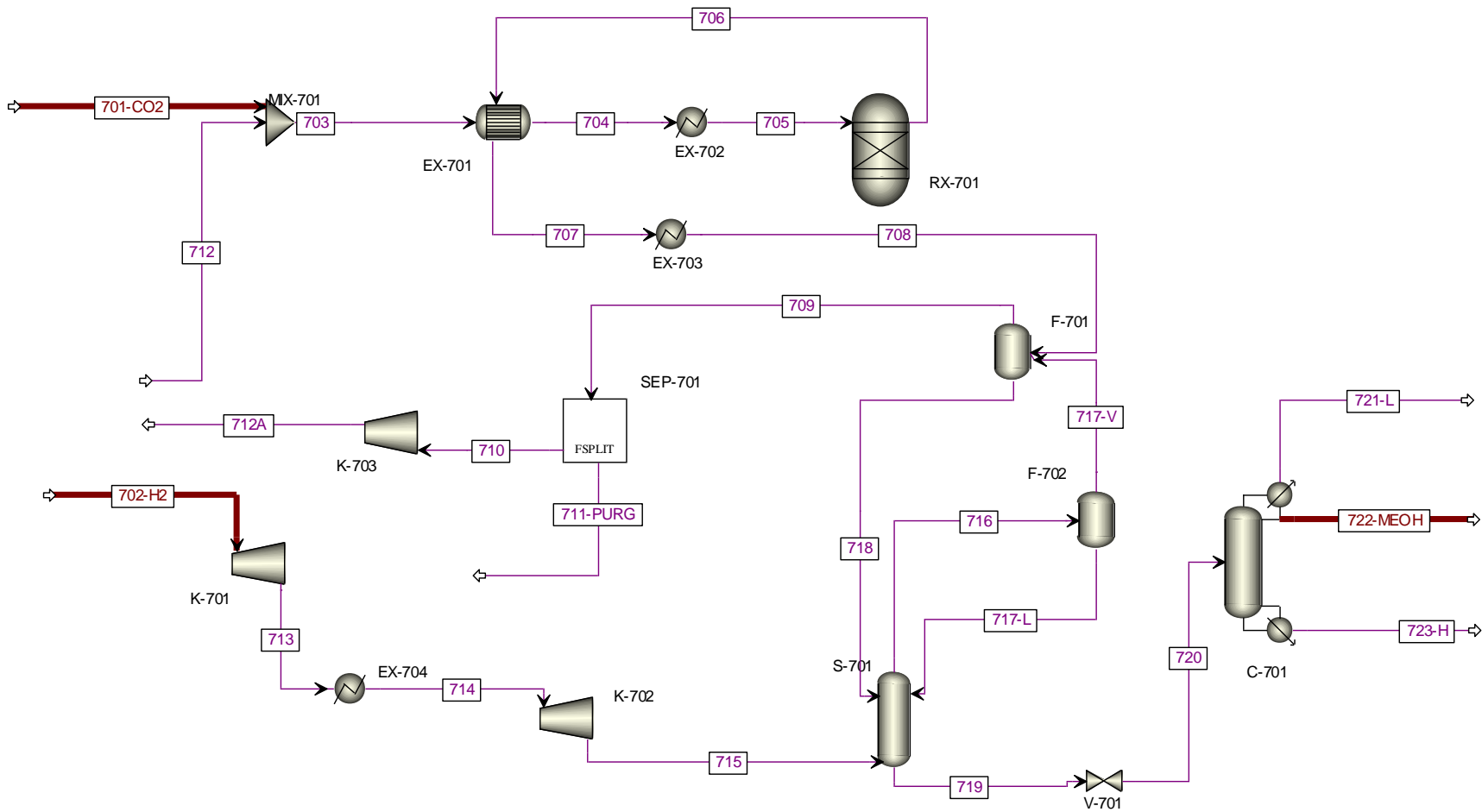


Figura A7. Simulación para el proceso de producción de metanol a partir de CO₂.

Tabla A7. Balance de materia para el proceso de producción de metanol a partir de CO₂.

Corriente	Unidades	701-CO₂	702-H₂	703	704	705	706	707	708	709
Temperatura	C	20	35	37	225	225	250	108	31	30
Presión	bar	50.00	1.10	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00	45.00
Fracción de vapor		1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.95	0.88	1.00
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.12	0.00
Flujo molar	kmol/hr	2674.48	6922.78	41598.88	41598.88	41598.88	37141.83	37141.83	37141.83	39507.88
Fracción molar										
CO		0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
CO ₂		1.00	0.00	0.34	0.34	0.34	0.32	0.32	0.32	0.30
H ₂		0.00	0.99	0.65	0.65	0.65	0.55	0.55	0.55	0.69
H ₂ O		0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.06	0.00
METHA-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.06	0.00
Corriente	Unidades	710	711-PURG	712	713	714	715	716	717-L	717-V
Temperatura	C	30	30	42	552	100	234	55	30	30
Presión	bar	45.00	45.00	50.00	18.00	20.00	45.00	45.00	45.00	45.00
Fracción de vapor		1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	39507.84	0.04	38924.40	6922.78	6922.78	6922.78	6978.12	58.72	6919.39
Fracción molar										
CO		0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO ₂		0.30	0.30	0.29	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01
H ₂		0.69	0.69	0.70	0.99	0.99	0.99	0.98	0.00	0.99
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	0.24	0.00
METHA-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.75	0.00

Corriente	Unidades	718	719	720	721-L	722-MEOH	723-H			
Temperatura	C	30	109	108	39	39	103			
Presión	bar	45.00	45.00	5.00	1.10	1.10	1.10			
Fracción de vapor		0.00	0.00	0.01	1.00	0.00	0.00			
Fracción del líquido		1.00	1.00	0.99	0.00	1.00	1.00			
Flujo molar	kmol/hr	4553.35	4556.73	4556.73	16.45	2320.31	2219.97			
Fracción molar										
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
CO ₂		0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00			
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.71	0.00	0.00			
H ₂ O		0.49	0.51	0.51	0.00	0.04	1.00			
METHA-01		0.49	0.49	0.49	0.28	0.96	0.00			

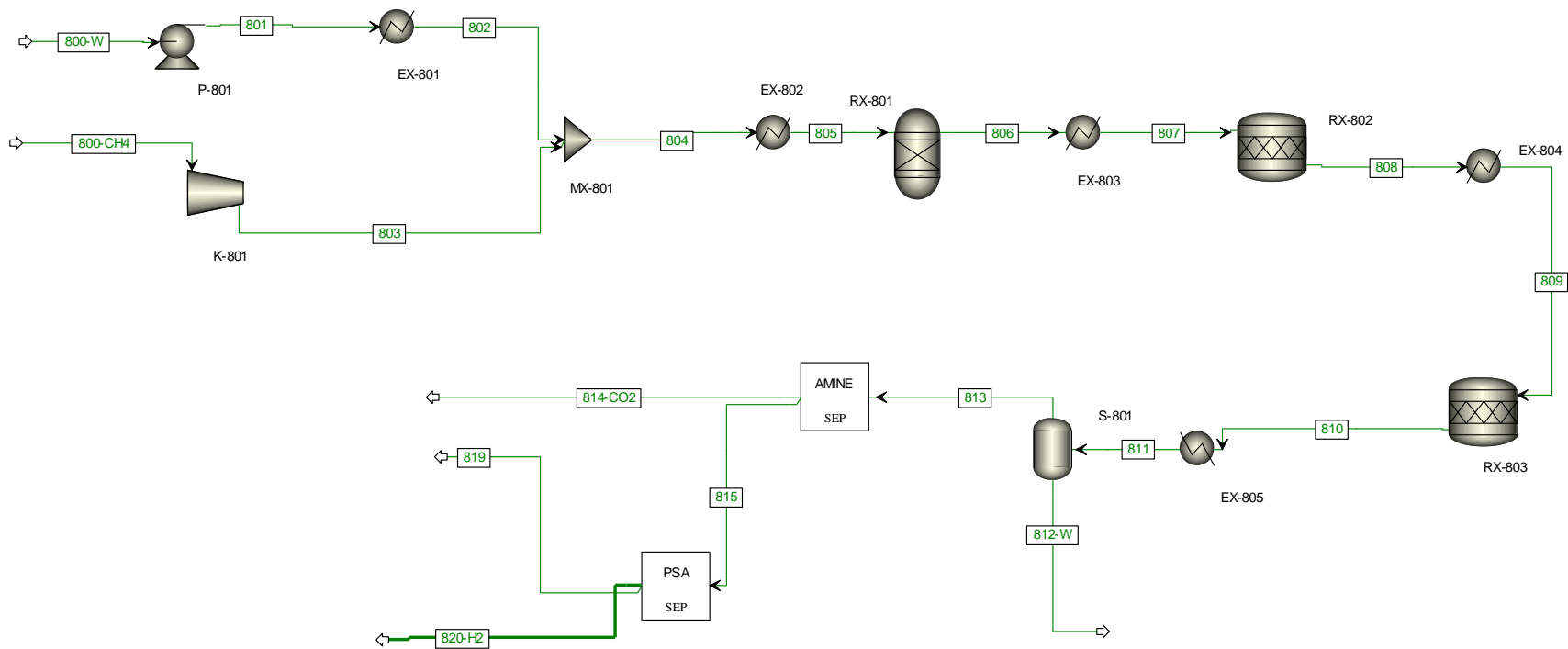


Figura A8. Simulación para el proceso de reformación de metano con vapor hacia CO₂.

Tabla A8. Balance de materia para el proceso de reformación de metano con vapor hacia CO₂.

Corriente	Unidades	800-CH4	800-W	801	802	803	804	805	806	807	808
Temperatura	C	15	15	15	231	375	264	815	815	349	349
Presión	bar	1.01	1.01	28.37	28.37	28.37	28.37	28.37	28.37	18.24	18.24
Fracción de vapor		1.00	0.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		0.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Flujo molar	kmol/hr	278.00	1112.00	1112.00	1112.00	278.00	1390.00	1390.00	1823.95	1823.95	1823.95
Fracción molar											
CH ₄		1.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.20	0.20	0.03	0.03	0.03
H ₂ O		0.00	1.00	1.00	1.00	0.00	0.80	0.80	0.43	0.43	0.38
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.42	0.42	0.47
CO ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.11
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.06	0.01
Corriente	Unidades	809	810	811	812-W	813	814-CO2	815	819	820-H2	
Temperatura	C	204	204	38	35	35	35	35	35	35	
Presión	bar	17.23	17.23	15.20	15.20	15.20	15.20	15.20	15.20	15.20	
Fracción de vapor		1.00	1.00	0.63	0.00	1.00	1.00	1.00	0.98	1.00	
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.37	1.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	
Flujo molar	kmol/hr	1823.95	1823.95	1823.95	675.70	1148.25	205.01	943.24	163.08	780.16	
Fracción molar											
CO		0.03	0.03	0.03	0.00	0.05	0.00	0.06	0.37	0.00	
CO ₂		0.38	0.37	0.37	1.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.00	
H ₂		0.47	0.48	0.48	0.00	0.75	0.00	0.92	0.53	1.00	
H ₂ O		0.11	0.12	0.12	0.00	0.19	1.00	0.01	0.07	0.00	
METHA-01		0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	

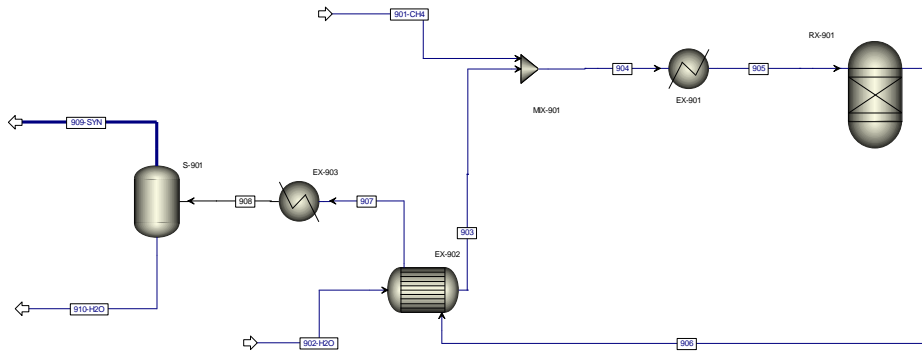


Figura A9. Simulación para el proceso de reformación de metano con vapor para producir Syngas

Tabla A9. Balance de materia para el proceso de reformación de metano con vapor para producir Syngas

Corriente	Unidades	901-CH4	902-H2O	903	904	905	906	907	908	909-SYN	910-H2O
Temperatura	C	126	26	1006	734	1249	1249	85	26	25	25
Presión	bar	2.03	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00	2.03	2.03
Fracción de vapor		1.00	0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.94	0.71	1.00	0.00
Fracción del liquido		0.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.06	0.29	0.00	1.00
Flujo molar	kmol/hr	278.00	834.00	834.00	1112.00	1112.00	1668.00	1668.00	1668.00	1175.15	492.84
Fracción molar											
CH ₄		1.00	0.00	0.00	0.25	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H ₂ O		0.00	1.00	1.00	0.75	0.75	0.30	0.30	0.30	0.01	1.00
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.53	0.53	0.53	0.75	0.00
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.14	0.14	0.14	0.19	0.00
CO ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.03	0.03	0.04	0.00

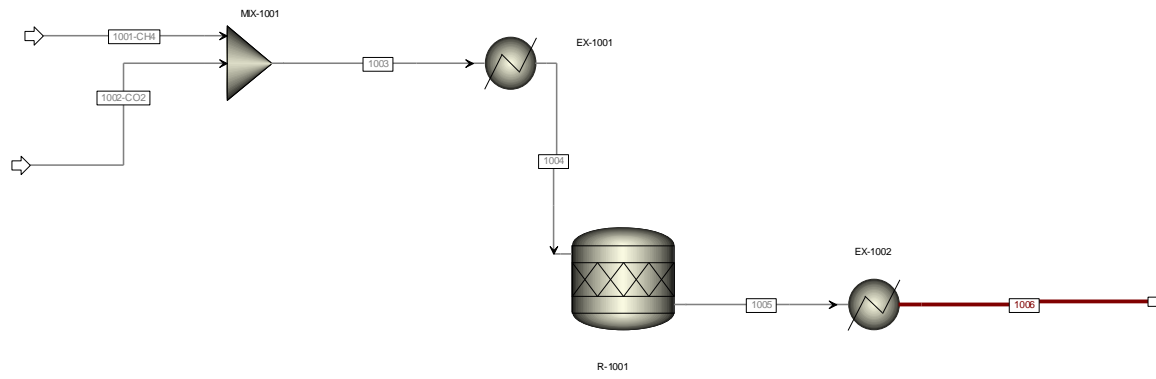


Figura A10. Simulación para el proceso del reformado del metano en seco (DR)

Tabla A10. Balance de materia para el proceso del reformado del metano en seco (DR).

Corriente	Unidades	1001-CH4	1002-CO2	1003	1004	1005	1006
Temperatura	C	-93	136	-50	599	599	210
Presión	bar	44.58	2.00	2.00	2.00	2.00	1.97
Fracción de vapor		0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Fracción del liquido		1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Flujo molar	kmol/hr	265.00	265.00	530.00	530.00	1033.50	1033.50
Fracción molar							
METHANE		0.99	0.00	0.49	0.49	0.01	0.01
WATER		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.00	0.49	0.49
CO ₂		0.00	1.00	0.50	0.50	0.01	0.01
N ₂		0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.49	0.49

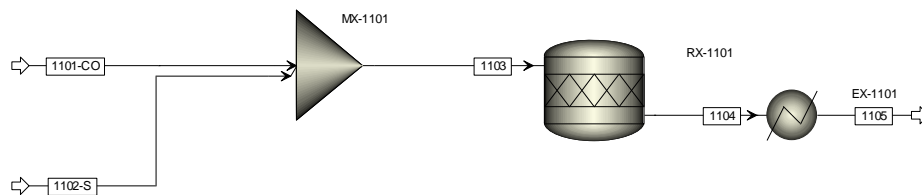


Figura A11. Simulación para el proceso Water Gas Shift Reaction (WGSR).

Tabla A11. Balance de materia para el proceso Water Gas Shift Reaction (WGSR).

Corriente	Unidades	1101-CO	1102-S	1103	1104	1105
Temperatura	C	25	100	84	469	-227
Presión	bar	101.30	1.01	1.01	1.01	1.01
Fracción de vapor		1.00	1.00	0.98	1.00	0.35
Fracción del líquido		0.00	0.00	0.02	0.00	0.65
Flujo molar	kmol/hr	55.00	70.00	125.00	125.00	125.00
Fracción molar						
CO		1.00	0.00	0.44	0.09	0.09
H ₂ O		0.00	1.00	0.56	0.21	0.21
H ₂		0.00	0.00	0.00	0.35	0.35
CO ₂		0.00	0.00	0.00	0.35	0.35

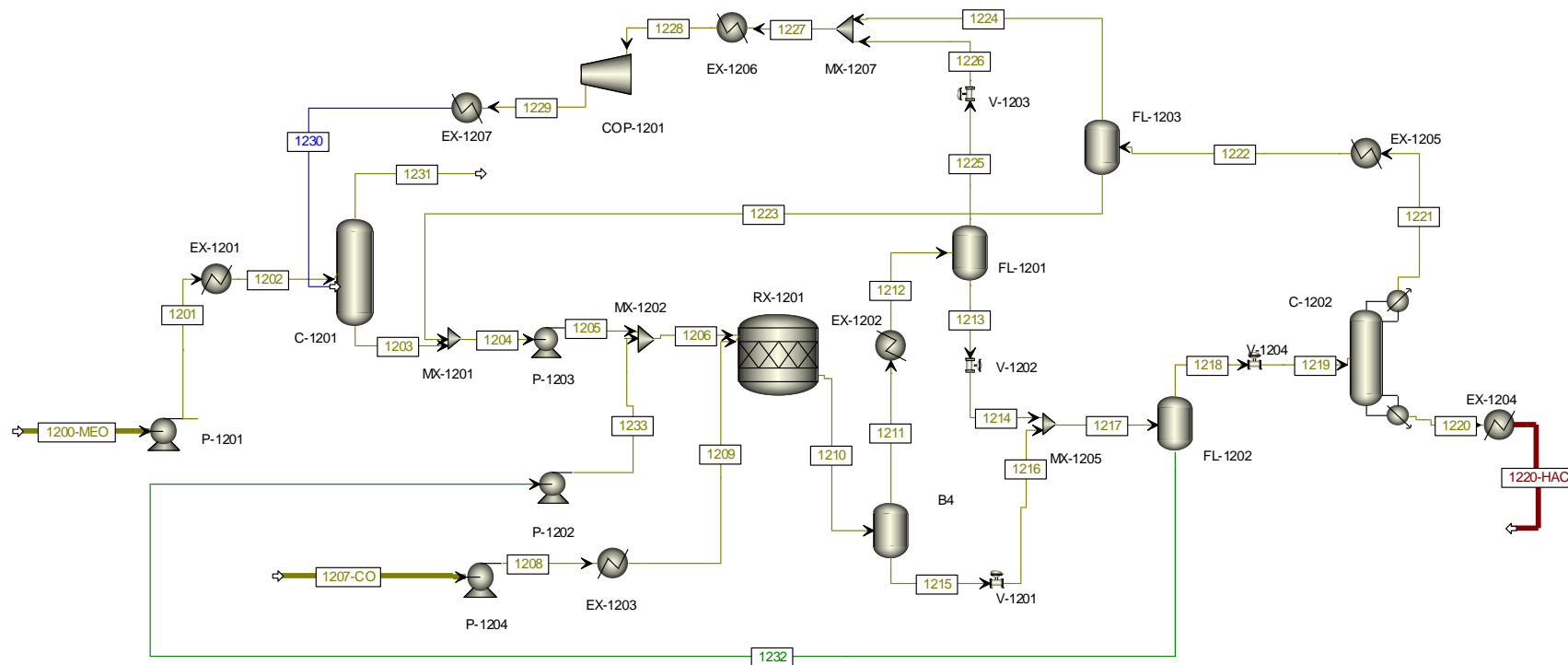


Figura A12. Simulación para el proceso de carbonilación del metanol para producir ácido acético.

Tabla A12. Balance de materia para el proceso de carbonilación del metanol para producir ácido acético.

Corriente	Unidades	1200-MEO	1202	1203	1204	1205	1206	1207-CO	1209	1210	1211	1212
Temperatura	C	25	5	4	22	23	116	-160	20	190	190	0.2
Presión	bar	1.00	1.50	1.50	1.50	29.00	29.00	15.00	29.00	29.00	29.00	29.00
Fracción de vapor		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00	1.00	0.70
Fracción del liquido		1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	1.00	0.00	0.30

Flujo molar	kmol/hr	145.00	145.00	144.70	452.35	452.35	2095.74	160.00	160.00	2107.87	2.46	2.46
Fracción molar												
METHA-01		1.00	1.00	1.00	0.33	0.33	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	1.00	0.01	0.70	0.70
METHY-02		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
METHY-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄ O ₂		0.00	0.00	0.00	0.67	0.67	0.93	0.00	0.00	0.99	0.30	0.30
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
PROPI-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Corriente	Unidades	1213	1214	1215	1216	1217	1218	1219	1220	1220-HAC	1221	1222
Temperatura	C	0.2	0.2	190	138	138	138	135	116	35	114	25
Presión	bar	25.00	24.80	29.00	2.25	2.25	2.24	1.10	1.10	1.50	1.10	1.00
Fracción de vapor		0.00	0.00	0.00	0.22	0.22	1.00	1.00	0.00	0.00	1.00	0.03
Fracción del liquido		1.00	1.00	1.00	0.78	0.78	0.00	0.00	1.00	1.00	0.00	0.97
Flujo molar	kmol/hr	0.74	0.74	2105.41	2105.41	2106.15	462.86	462.86	144.64	144.64	318.22	318.22
Fracción molar												
METHA-01		0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.01
CO		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.02	0.00	0.00	0.03	0.03
METHY-02		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
METHY-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
C ₂ H ₄ O ₂		0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.97	0.97	1.00	1.00	0.96	0.96
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
PROPI-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Corriente	Unidades	1223	1224	1225	1226	1227	1228	1230	1231	1232	1233	
Temperatura	C	25	25	0.2	-6.8	21	22	15	5	138	139	
Presión	bar	1.00	1.00	25.00	1.00	1.00	1.00	1.55	1.50	2.24	29.00	
Fracción de vapor		0.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	1.00	0.00	0.00	
Fracción del liquido		1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	1.00	1.00	
Flujo molar	kmol/hr	307.65	10.57	1.72	1.72	12.29	12.29	12.29	15.94	1643.29	1643.39	

Fracción molar												
METHA-01		0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00	
CO		0.00	0.98	1.00	1.00	0.99	0.99	0.99	0.97	0.00	0.00	
METHY-02		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
METHY-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
C ₂ H ₄ O ₂		0.99	0.02	0.00	0.00	0.01	0.01	0.01	0.00	1.00	1.00	
H ₂ O		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
PROPI-01		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	

APÉNDICE B. PRODUCTOS DEL PROYECTO

B1. Artículo: (2019) “A Disjunctive Programming Approach for Optimizing Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks” en la revista “Process Integration and Optimization for Sustainability”

Process Integration and Optimization for Sustainability
https://doi.org/10.1007/s41660-018-0065-y

ORIGINAL RESEARCH PAPER



A Disjunctive Programming Approach for Optimizing Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks

Maricruz Juárez-García¹ · José María Ponce-Ortega¹ · Mahmoud M. El-Halwagi^{2,3}

Received: 28 May 2018 / Revised: 5 August 2018 / Accepted: 7 August 2018
© Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2018

Abstract

Recently, the synthesis of carbon–hydrogen–oxygen symbiosis networks (CHOSYNs) has been proposed for the multi-scale integration of process industries that deal mainly with hydrocarbons while enabling chemical reactions, separation, heating/cooling, pressurization/depressurization, and allocation of the participating streams and species. Because of the complexity of the design problem, there is a need for efficient optimization approaches to solve the problem. In this paper, two optimization approaches are presented based on disjunctive programming. Several objective functions are used to target resource conservation (e.g., minimum fresh usage and minimum waste discharge) and economics (e.g., minimum cost, maximum profit). The optimization formulations include the tracking of species and streams, the potential installation of industrial facilities to carry out chemical conversions and other tasks, and the allocation of streams from sources to sinks via newly added interceptors. The first approach is a two-stage mathematical programming method. In the first stage, an optimization model based on atomic balances is used to determine the targets for fresh resources and discharges of the system. In the second stage, a disjunctive optimization model with an economic objective is employed to determine the configuration and allocation of the network considering existing and new industrial plants involved in the eco-industrial plant. The second approach is a simultaneous method based on a disjunctive optimization model to determine the targets and network configuration. A case study is presented to show the applicability of the proposed approaches.

Keywords Mass integration · Recycling and reuse networks · Eco-industrial parks · Optimization

Introduction

The proper use of resources in the chemical and petrochemical industries has been the subject of several research contributions in the past few decades. This is an important trend because raw material usage and waste discharge are among the most important factors impacting the cost and sustainability of industrial processes. Recently, there has been a growing

interest in integrating multiple industrial plants through the notion of industrial symbiosis (Chertow 2000). A primary approach to enhancing industrial symbiosis is the creation of eco-industrial parks (EIPs) that share natural resources, byproducts, wastes, and infrastructure (Lowe 1997). In this context, several optimization approaches have been developed to synthesize exchange, recycle, and reuse networks in EIPs for optimization of water usage and discharge using mass integration (Boix et al. 2015). For example, Chew et al. (2008) presented a mathematical programming approach for designing inter-plant water networks, Lovelady and El-Halwagi (2009) incorporated the management of external water resources in the design of EIPs, Aviso et al. (2010) involved fuzzy mathematical programming in designing EIPs, Rubio-Castro et al. (2010) reported a global optimization approach for designing EIPs, and Rubio-Castro et al. (2011) extended this model to consider multiple pollutants. Then, Rubio-Castro et al. (2013) incorporated property constraints in designing EIPs, and Lira-Barragan et al. (2013) accounted for the surrounding watershed. In addition to managing water

✉ José María Ponce-Ortega
jmponce@umich.mx

¹ Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mújica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio V1, 58060 Morelia, Michoacán, Mexico

² Chemical Engineering Department, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA

³ Adjunct Faculty at the Chemical and Materials Engineering Department, King Abdulaziz University, Jeddah, Saudi Arabia

Published online: 23 August 2018



B2. Artículo: (2020) “Optimization Approach to Identify Fair Solutions in the Synthesis of Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks” en la revista “Industrial & Engineering Chemistry Research”

Optimization Approach to Identify Fair Solutions in the Synthesis of Carbon, Hydrogen, and Oxygen Symbiosis Networks

Maricruz Juárez-García, Aurora del Carmen Munguía-López, and José María Ponce-Ortega*

Cite This: *Ind. Eng. Chem. Res.* 2020, 59, 5985–5995

Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

ABSTRACT: The concern about the proper use of mass and heat resources in the industry has led to adopt different alternatives for the operation and performance of the process systems. Schemes such as eco-industrial parks (EIPs) and sustainable cities have the purpose of enhancing the usage of the available resources through an exchange network where different resources are allocated among several industrial processes. Recently, the carbon–hydrogen–oxygen symbiosis networks (CHOSYNs) have been proposed as a special case of EIP, where the multiplant integration allows the exchange of carbon, hydrogen, and oxygen compounds among hydrocarbon processing plants. Previous CHOSYN designs have been focused on determining the most suitable allocation of resources to satisfy the material requirements for each industrial plant and obtain the best economic result for the total integrated system. Notwithstanding, this result usually provides unfair solutions, where the biggest industries have the main economic advantages, leaving aside the profitability of the smallest industries. This paper evaluates distinct allocation schemes in the synthesis of CHOSYNs through an optimization approach to identify fair solutions to allocate the available resources. A mathematical formulation is presented for three different justice schemes to design the material exchange network: social welfare, Rawlsian justice, and Nash schemes. The addressed case study has been previously analyzed through the optimization of the total annual profit, which allows comparing the utilities of all of the plants when the allocation schemes are included.



INTRODUCTION

Multiplant integration has been presented as a solution to improve the usage of different types of resources in industrial processes.^{1–3} Particularly, mass exchange networks (MENs) have been proposed to save resources such as water,⁴ hydrogen,^{5,6} and fuel gas^{7,8} in different industrial processes. For instance, Chew et al.⁹ proposed a mathematical programming model to design interplant water networks and compare direct and indirect integration. Also, an optimization approach to design property-based water networks for industrial facilities accounting for the surrounding watershed and wastewater has been reported.¹⁰ Similarly, the mass integration of eco-industrial parks (EIP) has been studied when considering the reuse of wastewater and environmental constraints through an optimization strategy.¹¹ Furthermore, MENs have been implemented in distinct scales in several industrial processes.^{12,13} Recently, carbon–hydrogen–oxygen symbiosis networks (CHOSYN) were proposed to design sustainable industrial cities and EIP, which involve industrial process plants that deal mainly with carbon, hydrogen, and oxygen compounds.¹⁴ After the introduction of this concept, some approaches have been developed for the design of CHOSYN that involve algebraic models,¹⁵ anchor-tenant approaches,¹⁶ mathematical programming,¹⁷ and also different operation modes in a multiperiod design.¹⁸ Simultaneous

energy and mass integration was also considered in the synthesis of the CHOSYN configuration.¹⁹

The wide integration among several process plants, as the case of CHOSYN, presents many opportunities to share mass and energy streams and save both resources. When the entire system is analyzed, the economic savings are very attractive. However, the individual benefit for each participating plant is not properly distributed. This occurs when several stakeholders compete for limited resources and benefits (in the case of unlimited resources, no competition among stakeholders exist). In the case of limited resources, usually, the greatest plants are the ones that obtain the greatest benefits. Unfortunately, they leave aside the smallest plants, but without these small plants, the integration is not possible. Therefore, the overall integration, considering the proper benefit for all participating plants (including the smallest ones), is needed. That is, besides finding the best economic solution for the whole system, the multiplant integration also requires to

Received: December 21, 2019

Revised: February 11, 2020

Accepted: March 5, 2020

Published: March 5, 2020

B3. Artículo: (2020) “Optimal Planning for Satisfying Future Electricity Demands Involving Simultaneously Economic, Emissions, and Water Concerns” en la revista “Process Integration and Optimization Sustainability”

Process Integration and Optimization for Sustainability
https://doi.org/10.1007/s41660-020-00125-8

ORIGINAL RESEARCH PAPER



Optimal Planning for Satisfying Future Electricity Demands Involving Simultaneously Economic, Emissions, and Water Concerns

Tania Itzel Serrano-Arévalo¹ · Maricruz Juárez-García¹ · José María Ponce-Ortega¹

Received: 17 April 2020 / Revised: 1 June 2020 / Accepted: 3 July 2020
© Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2020

Abstract

The main problem related to the electricity generation planning is to ensure the total satisfaction of the demanded power along a period of time considering the population growth. Since the power demand is function of the growing population, there is a fast depletion of the environment caused mainly by the harmful emissions produced and the big amounts of water consumed in large power generation plants. Therefore, when a power supply system is planning, it is important to evaluate the negative outcomes that could be generated in the environment and to balance them with the economic performance of the system. In this work is presented an optimization approach for the strategic planning of electricity generation, the model seeks the optimal selection of technologies for the new power generation capacity (clean and conventional) which will satisfy the power demand in different scenarios in a specific period of time. The proposed multi-objective model is solved using the ϵ -constraint method for determining a trade-off between economic, harmful emissions (CO₂, NO_x, SO₂ and particle emissions), and water consumption through a set of Pareto diagrams. The power demand and the resources available for electricity generation in Mexico are presented as a case study, where it is possible to reduce up to 38.4% of emissions and 41.58% of water consumed, by minimizing these two factors, which has a significant environmental impact.

Keywords Optimal planning · Electrical energy · Energy demand · Technologies · Power plants

Introduction

The major challenge in electricity supply planning is to ensure the production to satisfy the energy demand in the present as well as in the future according to the population growth, focusing especially in areas which have the largest percentages of population without access to electricity like Latin America, Asia, and sub-Saharan Africa (Panos et al. 2016), because the lack of access to electricity is embodied the poverty and low human development (Shyu 2014). Notwithstanding, providing to the world population general access to electricity represents a technical, economic, and environmental problem. The power supply chain design has considered mainly factors like capital investment in the long term and operating costs in the short term (Ding and Somani 2010; Ram et al. 2018). The

different configurations for the energy supply chain resulting from the economic analysis may derive in different consequences in the environmental impact, being the harmful emissions and the water consumption the main of these consequences. All this leads to a disjunctive situation; on the one hand, the major percent of electric power generation is from combustion of liquid, solid, or gaseous fossil fuels, and these technologies turn out in large amounts of harmful emissions and greenhouse gases (GHG) like nitrogen oxides, sulfur oxides, and carbonaceous particulates to mention the most important (Xu et al. 2017); besides, it is well known that technologies like thermoelectric generation spend large amounts of water (Wang et al. 2017), which aggravates the scarcity of this important natural source (Fang et al. 2019), along with other end-uses such as agriculture (Acemoglu et al. 2017). Therefore, there has been given priority to renewable energy to address the limitations of water in the energy sector (Fan et al. 2018). Nevertheless, power technologies based on fossil fuel combustion are the most common (Román-Figueroa et al. 2017) because of their large capacity of production and profitability (Asafu-Adjaye et al. 2016). On the other hand, renewable energy sources offer an ecofriendly option for power

✉ José María Ponce-Ortega
jmponce@umich.mx

¹ Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mujica, S/N, Ciudad Universitaria, Edificio V1, 58060 Morelia, Michoacán, Mexico

Published online: 25 July 2020

Springer

Este artículo fue merecedor del premio a mejor artículo del año 2020 en la revista “*Process Integration and Optimization for Sustainability*” por su relevancia y calidad del trabajo.



springer.com



Best Paper Award 2020
Process Integration and Optimization for Sustainability

Awarded to

Tania Itzel Serrano-Arévalo, Maricruz Juárez-García and José María Ponce-Ortega

for your paper titled

Optimal Planning for Satisfying Future Electricity Demands Involving Simultaneously Economic, Emissions, and Water Concerns

published in volume 4, issue 4, Dec 2020

Congratulations! You are entitled to a book voucher of EUR 1000 worth of Springer books.

Date Issued: January 26, 2021



Part of **SPRINGER NATURE**

B4. Artículo: (2021) “Systematic Approach for Synthesizing Carbon–Hydrogen–Oxygen Networks Involving Detailed Process Simulations” en la revista “Industrial & Engineering Chemistry Research”

* Unknown * | ACSJCA | JCA1125208/WJLibrary.x64 | manuscript.3f (RS.1J3:5008 | 2.1) 2021/07/12 08:51:00 | PROD-WS-121 | eq_2449148 | 11/02/2021 14:55:18 | 16 | JCA-DEFAULT

I&EC
research
Industrial & Engineering Chemistry Research

pubs.acs.org/IECR

Article

1 Systematic Approach for Synthesizing Carbon–Hydrogen–Oxygen 2 Networks Involving Detailed Process Simulations

3 Maricruz Juárez-García, Mahmoud M. El-Halwagi, and José María Ponce-Ortega*

 Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c02738>

 Read Online

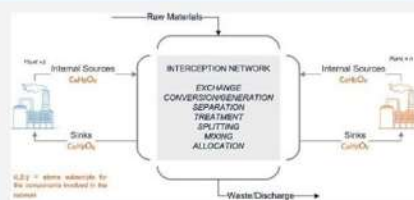
ACCESS |

 Metrics & More

 Article Recommendations

 Supporting Information

4 **ABSTRACT:** Carbon–hydrogen–oxygen symbiotic networks
5 (CHOSYNs) provide a systematic multiscale framework for
6 integrating multiple hydrocarbon processing plants. Earlier
7 approaches have focused on high-level performance benchmarking
8 using atomic and stoichiometric targeting techniques, which are
9 subsequently detailed to identify the implementation strategies for
10 allocation and processing. These sequential approaches are very
11 powerful for the cases involving benchmarks that are independent
12 of the system details (e.g., minimum usage of raw materials,
13 minimum discharge of wastes, maximum revenue). For objectives
14 involving detailed process information (e.g., capital cost
15 minimization), there is a need to include the system details early enough in optimization. This paper proposes a systematic
16 approach for incorporating detailed process simulations throughout the various stages of synthesizing a CHOSYN. The proposed
17 approach involves the use of computer-aided process simulators and simultaneous optimization for synthesizing a CHOSYN. Critical
18 data are generated and used at each design stage. For existing facilities, targeting uses the simulated data on available resources and
19 sinks (e.g., flow rate, composition, pressure, and temperature). Process synthesis is used to generate a set of candidate new units and
20 plants to be added, while detailed simulation is used to size these plants and identify the specific needs for flows and compositions.
21 The proposed approach is implemented for a case study that involves five existing plants and a set of seven candidate plants that can
22 induce symbiosis. The results show final configurations with the selection of new plants, the reduction of raw material, the allocation
23 of internal and external sources, and the details of process information, capital and operating costs, and flow rate, pressure, and
24 temperature of the exchangeable streams across the network.



25 ■ INTRODUCTION

26 Sustainable design of industrial processes may be defined as “the
27 design activities that lead to economic growth, environmental
28 protection, and social progress for the current generation
29 without compromising the potential of future generations to
30 have an ecosystem which meets their needs”.¹ Several strategies
31 have been proposed for enhancing the sustainability of industrial
32 processes such as resources conservation, economic profitability,
33 environmental enhancement, and safety and operational
34 concerns.^{2–5} Some of these goals can be simultaneously
35 achieved through resource integration,⁶ which allows reducing
36 fresh resource usage and waste generation by increasing the
37 resource throughput,⁷ which implies savings in operating
38 costs.^{8–11}

39 In addition to intraplant integration, multiple plants may also
40 be integrated (interplant integration). At a multiplant level,
41 resource integration provides a wide range of opportunities for
42 resource savings and economic enhancement.^{12–14} This is an
43 important element of industrial symbiosis, which motivates
44 traditionally separate industries to operate in a collective and
45 synergistic approach through the exchange of materials, energy,
46 water, and infrastructure.¹⁵ Methodologies for synthesizing mass
47 and energy integration networks have been applied at this level,

integrating several processes into industrial symbiosis net- 48
works.^{16,17} Water integration among several plants has received 49
much attention using optimization approaches.^{18–21} 50

A special class of industrial symbiosis deals with the 51
integration of hydrocarbon processing facilities through the 52
problem of synthesizing carbon–hydrogen–oxygen symbiosis 53
networks (CHOSYNs), which was introduced by Noureldin and 54
El-Halwagi.²² A CHOSYN is a cluster of multiple plants 55
designed to enable the exchange of material streams; this 56
exchange is accomplished through a set of processing units and 57
equipment known as interceptors intended for the conversion, 58
separation, treatment, splitting, mixing, and allocation of streams 59
containing C–H–O compounds (see Figure 1). Conversion of 60
C–H–O compounds includes chemical reactions for the 61
transformation of species to value-added products, intermedi- 62

Received: July 11, 2021

Revised: October 23, 2021

Accepted: October 25, 2021

 ACS Publications

© XXXX American Chemical Society

A

<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c02738>
Ind. Eng. Chem. Res. XXXX, XXX, XXX–XXX

B5. Artículo: (2022) “Sustainable Carbon–Hydrogen–Oxygen symbiosis networks: Intensifying separation sections” en la revista “Chemical Engineering and Processing - Process Intensification”



Sustainable Carbon–Hydrogen–Oxygen symbiosis networks: Intensifying separation sections

Maricruz Juárez-García^{a,*}, Gabriel Contreras-Zarazúa^b, Juan Gabriel Segovia-Hernández^c, José María Ponce-Ortega^a

^a Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58060, Mexico
^b CONACYT, CIATEC A.C. Center for Applied Innovation in Competitive Technologies, Omega 201, Col. Industrial Delta, León, Gto 37345, Mexico
^c Department of Chemical Engineering, Universidad de Guanajuato, Campus Guanajuato, Guanajuato 36050, Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:
Carbon–Hydrogen–Oxygen networks
Process intensification
Process integration
Sustainable design
Resource conservation

ABSTRACT

The Carbon–Hydrogen–Oxygen symbiosis networks (CHOSYNs) belong to the latest trend of sustainable process design whose main purpose is the efficient use of energy and mass resources. Processes intensification methodologies have been used to enhance the sustainability of several chemical processes; therefore, this work proposes to involve intensified processes in the synthesis of CHOSYNs to improve the sustainability of the network beyond the integration benefits. The main objective of this work is to evaluate the impact of incorporating intensified processes on the CHOSYN economic, environmental and safety performances. Due to the intensive energy use and low thermal efficiency in distillation sequences, the intensification is focused on these separation processes to improve energy efficiency and reduce operating costs. As a case study is proposed a CHOSYN with conventional processes; thermally couple equivalent configurations are obtained and optimized for suitable distillation sequences of the participant plants, then these sequences are integrated substituting the conventional ones in the final configuration of the CHOSYN. For the conventional and intensified solutions, the variable and fixed costs are determined, the eco-indicator 99 is used to evaluate the environmental aspect, and the safety of the process is assessed by the individual risk.

1. Introduction

The ongoing environmental problems, resource scarcities and the adverse global economic situation are the main drives to planning and developing more sustainable processing systems. This way, cleaner, cheaper and safer processes have been effectively developed through different strategies of process integration and intensification. In this context, the Carbon–Hydrogen–Oxygen symbiosis networks (CHOSYNs) are proposed [1], they are defined as a set of plants that deal mainly with carbon, hydrogen and oxygen compounds, the plants are oriented to share mass and energy resources with other plants through central shared facilities called interception networks. The interception network is made up of different processing units to enable the exchange, conversion, separation, treatment, splitting, mixing and allocation of the shared streams. The main advantage of these networks is the chemical conversion of wastes, by-products or products from one plant to needed compounds in other plants, in this way, it is possible to reduce wastes and raw materials by maximizing the recycling capability reducing the

overall need for fresh resources, dischargeable streams and heat requirements, which improve the overall sustainability of the system. The design and configuration of CHOSYNs have been addressed through different approaches and guided by different sustainability aspects, particularly profitability [2] and efficient resource utilization; in this sense, the first works focused on mass conservation using algebraic methods [3], mathematical programming [4], including limited resources [5] and involving water concerns [6], then the mass and heat simultaneous integration were considered [7]. Other sustainable criteria were proposed for an upgraded outcome, which include multicriteria optimization involving economic, sustainability and safety issues [8], the i-safe index was also incorporated [9], and CO₂ footprint restrictions on the network were considered through life-cycle analysis [10].

The previously reported approaches for the synthesis of the CHOSYNs are all based on the proper integration of the resources among the set of plants where the main purpose was to determine the integrated configuration of the CHOSYN: new processing units and new plants and the total allocation of the exchangeable streams. This integration was

* Corresponding author.
E-mail address: maricruzjg@umich.mx (M. Juárez-García).

<https://doi.org/10.1016/j.cep.2022.109092>
Received 29 April 2022; Received in revised form 5 July 2022; Accepted 4 August 2022
Available online 6 August 2022
0255-2701/© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.