



## **Diseño de refrigerantes mediante optimización de la estructura molecular**

Espinel Cadena, Pablo Sebastian

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Ingeniería en Petroquímica

Trabajo de titulación, previo a la obtención del título de Ingeniero en Petroquímica

Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.

Latacunga, 17 de marzo de 2021



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA  
CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA**

**Certificación**

Certifico que el trabajo de titulación, “**Diseño de refrigerantes mediante optimización de la estructura molecular**” fue realizado por el señor **Espinel Cadena, Pablo Sebastian** el cual ha sido revisado y analizado en su totalidad por la herramienta de verificación de similitud de contenido; por lo tanto cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que lo sustente públicamente.

Latacunga, 17 de marzo de 2021



Firmado digitalmente por:  
**PABLO VINICIO  
TUZA ALVARADO**

---

**Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.**

C. C.: 1104063241



## Urkund AnalysisResult

Analysed Document: Tesis\_Espinel\_Sebastian.pdf  
(D98551938)

aprobado.pdf (D54403984) Submitted: 3/16/2021 5:53:00 PM

Submitted By: pvtuza@espe.edu.ec

Significance: 0 %

Sources included in the report:

Instances where selected sources appear:



PABLO VINICIO  
TUZA ALVARADO

Tuza Alvarado, Pablo Vinicio, D. Sc.

**DIRECTOR**



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA  
CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA**

**Responsabilidad de autoría**

Yo, **Espinel Cadena, Pablo Sebastian**, con cédula de ciudadanía n° 0503779670, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de titulación: **“Diseño de refrigerantes mediante optimización de la estructura molecular”** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 17 de marzo de 2021

.....  
**Espinel Cadena, Pablo Sebastian**

C.C.: 0503779670



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA  
CARRERA DE INGENIERÍA EN PETROQUÍMICA**

**Autorización de publicación**

Yo **Espinel Cadena, Pablo Sebastian**, con cédula de ciudadanía n° 0503779670, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de titulación: **“Diseño de refrigerantes mediante optimización de la estructura molecular”** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, 17 de marzo de 2021

**Espinel Cadena, Pablo Sebastian**

C.C.: 0503779670

## **Dedicatoria**

A mis padres, por brindarme el apoyo y recursos necesarios para iniciar mi carrera universitaria.

A mis hermanos mayores, por sus palabras de aliento y afecto.

A mi hermano menor, a quién quiero apoyar e inspirar para que se encamine en el sendero correcto.

A mis sobrinos que espero algún día puedan leer este trabajo

Siempre serán una parte importante en mi vida.

## Agradecimiento

Agradezco muy especialmente a mis queridos padres Bolívar y Anita por haberme dado la oportunidad de iniciarme en este grandioso camino de la ciencia y educación, sé que estarán muy felices por mí, este logro también es de ustedes.

Agradezco profundamente a mis instructores de curso por no haber puesto el camino tan fácil y con esto obligarme a superarme y ser mejor cada día, de ellos aprendí que la universidad no es una carrera de velocidad sino de resistencia y que los retos y obstáculos fortalecen el espíritu y forjan el carácter del futuro profesional.

Un agradecimiento muy especial a mi director de proyecto PhD. Pablo Tuza por su exigencia, paciencia y tutela a lo largo de todo este tiempo para poder concluir con mi trabajo de titulación, aprendí que siempre hay nuevas maneras para conseguir un mismo objetivo.

A mi director de carrera PhD. Roman Rodríguez, que a pesar de cualquier adversidad siempre supo dar soluciones a todas las inquietudes y dificultades que se presentaron a lo largo de este camino, su trabajo dedicación y esfuerzo no pasan desapercibidos.

A mis compañeros y amigos de salón que hicieron que los últimos semestres se vuelvan anécdotas inolvidables, gracias por el apoyo y la amistad y gracias por hacer llevadero el final de este camino, siempre los llevaré presentes.

*“En la vida no se pierde cuando se tropieza, menos cuando se cae, se pierde cuando dejas de intentarlo”*

<b>Tabla de contenido</b>	
<b>Carátula</b> .....	<b>1</b>
<b>Certificación</b> .....	<b>2</b>
<b>Reporte Urkund</b> .....	<b>3</b>
<b>Responsabilidad de autoría</b> .....	<b>4</b>
<b>Autorización de publicación</b> .....	<b>5</b>
<b>Dedicatoria</b> .....	<b>6</b>
<b>Agradecimiento</b> .....	<b>7</b>
<b>Tabla de contenidos</b> .....	<b>8</b>
<b>Índice de tablas</b> .....	<b>13</b>
<b>Índice de figuras</b> .....	<b>14</b>
<b>Resumen</b> .....	<b>15</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>16</b>
<b>Introducción</b> .....	<b>17</b>
<b>Antecedentes</b> .....	<b>17</b>
<b>Planteamiento del problema</b> .....	<b>18</b>
<b>Justificación e importancia</b> .....	<b>21</b>
<b>Objetivos</b> .....	<b>22</b>
<i>Objetivo general</i> .....	<b>22</b>
<i>Objetivos específicos</i> .....	<b>22</b>
<b>Hipótesis</b> .....	<b>23</b>
<b>VARIABLES DE LA INVESTIGACIÓN</b> .....	<b>23</b>
<i>Variable dependiente</i> .....	<b>23</b>
<i>Variable Independiente</i> .....	<b>23</b>
<b>Fundamentación teórica</b> .....	<b>24</b>
<b>Refrigerantes</b> .....	<b>24</b>
<i>Definición de refrigerante</i> .....	<b>24</b>

<i>Tipos de refrigerantes</i> .....	24
<i>Generaciones de los refrigerantes</i> .....	25
Usos e importancia de los refrigerantes.....	26
<i>Antecedentes de los refrigerantes</i> .....	26
<i>Usos de refrigerantes</i> .....	26
<i>Aplicaciones frecuentes de los refrigerantes</i> .....	27
<i>Refrigerantes y su relación con la población humana</i> .....	27
<i>Criterios para elegir un refrigerante</i> .....	28
Programación no lineal.....	28
<i>Definición</i> .....	28
Función objetivo.....	29
<i>Definición</i> .....	29
Restricciones.....	29
<i>Generalidades</i> .....	29
Obtención de moléculas refrigerantes.....	30
<i>Antecedentes</i> .....	30
<i>Características de un refrigerante</i> .....	30
<i>Metodología para la obtención de moléculas refrigerantes</i> .....	30
Optimización para encontrar la estructura molecular .....	31
<i>Métodos de estimación de propiedades</i> .....	31
<i>Viabilidad estructural</i> .....	31
Diseño de refrigerantes .....	32
<i>Ecuación para combinar grupos moleculares</i> .....	32
Cálculo de propiedades físicas normales y críticas .....	32
<i>Temperatura normal de ebullición</i> .....	33
<i>Temperatura crítica</i> .....	33
<i>Presión crítica</i> .....	33

<i>Presión reducida de vapor</i> .....	33
<i>Calor específico del líquido</i> .....	34
<i>Calor latente de vaporización a cualquier temperatura</i> .....	34
<i>Calor latente de vaporización a la temperatura normal de ebullición</i> .....	34
Potencial de agotamiento de ozono ODP .....	35
<i>Definición</i> .....	35
Restricciones de construcción de la estructura molecular.....	36
<i>Restricciones de asignación</i> .....	36
<i>Restricción de viabilidad estructural</i> .....	36
<i>Restricción de formación de enlaces múltiples</i> .....	37
<i>Restricción de cantidad de grupos moleculares</i> .....	37
<i>Restricción de coexistencia de grupos alcohol, halógenos y aminas</i> .....	37
<i>Restricción de coexistencia de grupos halógenos y nitrógeno</i> .....	38
<i>Restricción de las propiedades físicas de las moléculas refrigerantes</i> .....	38
Impacto ambiental y toxicidad de los refrigerantes .....	39
<i>Generalidades</i> .....	39
<i>Impacto de los refrigerantes en la capa de ozono</i> .....	40
<i>La crisis del ozono y su impacto en la industria</i> .....	41
<i>Medidas ambientales para el uso de refrigerantes</i> .....	41
Mercado nacional e internacional de los refrigerantes.....	42
<i>Mercado internacional</i> .....	42
<i>Mercado nacional</i> .....	42
Algoritmo de solución GRG no lineal .....	42
Algoritmo genético de Matlab .....	43
Metodología.....	44
Búsqueda de funciones objetivo.....	44
<i>Aspectos básicos</i> .....	44

<i>Ecuaciones consideradas</i> .....	44
<i>Prueba y optimización de funciones</i> .....	48
Uso de Solver de Excel .....	50
<i>Generalidades</i> .....	50
<i>Consideraciones</i> .....	50
Configuraciones .....	51
<i>Configuración 1</i> .....	51
<i>Configuración 2</i> .....	51
<i>Configuración 3</i> .....	52
<i>Configuración 4</i> .....	53
<i>Configuración 5</i> .....	54
<i>Configuración 6</i> .....	56
<i>Configuración 7</i> .....	57
<i>Configuración 8</i> .....	58
Programación en Matlab .....	59
<i>Asignación de Variables</i> .....	59
<i>Cálculos previos</i> .....	60
<i>Planteamiento de funciones objetivo</i> .....	61
<i>Planteamiento de restricciones no lineales</i> .....	62
<i>Planteamiento de restricciones lineales</i> .....	64
<i>Solución del problema con MINLP</i> .....	66
<i>Diagrama de flujo de la metodología</i> .....	68
Resultados y discusión .....	69
Análisis de resultados .....	69
Discusión de resultados .....	111
Conclusiones y recomendaciones .....	114
Conclusiones .....	114

<b>Recomendaciones.....</b>	<b>115</b>
<b>Bibliografía.....</b>	<b>116</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>121</b>

## Índice de tablas

Tabla 1 <i>Resultados del diseño de refrigerantes sin ODP</i> .....	20
Tabla 2 <i>Resultados del diseño de refrigerantes con ODP</i> .....	20
Tabla 3 <i>Resultados del diseño de refrigerantes, <math>P_s \geq 1,4</math> bar</i> .....	20
Tabla 4 <i>Resultados del diseño de refrigerantes, <math>P_s \geq 1,0</math> bar</i> .....	21
Tabla 5 <i>Propiedades físicas de cada grupo enlazante</i> .....	35
Tabla 6 <i>Ecuaciones evaluadas en el proceso de optimización</i> .....	45
Tabla 7 <i>Datos de partida para el diseño de refrigerantes</i> .....	49
Tabla 8 <i>Contribuciones grupales de las especies consideradas</i> .....	50
Tabla 9 <i>Adición de grupos de carbono para la configuración 5</i> .....	55
Tabla 10 <i>Resultados de la optimización para la configuración 1</i> .....	69
Tabla 11 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 1</i> ...73	
Tabla 12 <i>Resultados de la optimización para la configuración 2</i> .....	74
Tabla 13 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 2</i> ...78	
Tabla 14 <i>Resultados de la optimización para la configuración 3</i> .....	79
Tabla 15 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 3</i> ...83	
Tabla 16 <i>Resultados de la optimización para la configuración 4</i> .....	83
Tabla 17 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 4</i> ...88	
Tabla 18 <i>Resultados de la optimización para la configuración 5</i> .....	89
Tabla 19 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 5</i> ...93	
Tabla 20 <i>Resultados de la optimización para la configuración 6</i> .....	93
Tabla 21 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 6</i> ...97	
Tabla 22 <i>Resultados de la optimización para la configuración 7</i> .....	98
Tabla 23 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 7</i> .102	
Tabla 24 <i>Resultados de la optimización para la configuración 8</i> .....	102
Tabla 25 <i>Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 8</i> .106	
Tabla 26 <i>Moléculas halladas en la optimización de funciones</i> .....	107
Tabla 27 <i>Resultados finales de la investigación</i> .....	109
Tabla 28 <i>Evaluación de las funciones finales en Matlab</i> .....	110
Tabla 29 <i>Comparación de los resultados obtenidos en Excel y Matlab</i> .....	111
Tabla 30 <i>Moléculas obtenidas con Solver de Excel y su referencia de reporte</i> ....	112
Tabla 31 <i>Moléculas obtenidas con Matlab y su referencia de reporte</i> .....	113

## Índice de figuras

Figura 1 <i>Formación del agujero en la capa de ozono</i> .....	20
Figura 2 <i>Formación del agujero en la capa de ozono</i> .....	40
Figura 3 <i>Parámetros de solver para la configuración 1</i> .....	51
Figura 4 <i>Parámetros de solver para la configuración 2</i> .....	52
Figura 5 <i>Parámetros de solver para la configuración 3</i> .....	53
Figura 6 <i>Parámetros de solver para la configuración 4</i> .....	54
Figura 7 <i>Parámetros de solver para la configuración 5</i> .....	56
Figura 8 <i>Parámetros de solver para la configuración 6</i> .....	57
Figura 9 <i>Adición de grupos de carbonos para la configuración 7</i> .....	58
Figura 10 <i>Datos de entrada para la configuración 8</i> .....	59
Figura 11 <i>Planteamiento de variables en Matlab</i> .....	60
Figura 12 <i>Cálculo de propiedades y contribuciones grupales en Matlab</i> .....	61
Figura 13 <i>Planteamiento de la función objetivo en Matlab</i> .....	62
Figura 14 <i>Planteamiento de la función restricción en Matlab</i> .....	63
Figura 15 <i>Planteamiento de restricciones no lineales en Matlab</i> .....	64
Figura 16 <i>Planteamiento de restricciones lineales en Matlab</i> .....	66
Figura 17 <i>Solución del problema con MINLP en Matlab</i> .....	67
Figura 18 <i>Resultados de la resolución del MINLP en Matlab</i> .....	68

## Resumen

En el presente trabajo se expone el diseño de moléculas refrigerantes que poseen propiedades físicas que satisfacen condiciones de presión y temperatura acordes a las especificaciones del problema. Las moléculas son encontradas mediante el planteamiento y solución de diferentes funciones objetivo que se maximizan o minimizan para encontrar el valor óptimo de la relación entre las propiedades físicas de la molécula candidata en dichas funciones. Para dar solución a las funciones objetivo se emplea el método de cálculo de programación no lineal de enteros mixtos (mixed integer non linear programming MINLP). Con el uso de solver de Excel y su algoritmo de gradiente generalizado no lineal (GRG no lineal) e incrementando las posibilidades de solución a través de diferentes configuraciones en las cuales se modifica parámetros como el límite inferior de la presión de vapor, la cantidad de grupos considerados y la manera en que se forman las uniones entre estos grupos, se encuentran moléculas candidatas a refrigerantes que no se encuentran reportadas en la literatura. Una vez establecidas las configuraciones que proporcionan los resultados esperados, se escribe el código fuente para Matlab de la resolución del problema obteniendo satisfactoriamente los scripts que permite optimizar funciones objetivo con la función "ga" (genetic algorithm por sus siglas en inglés). Posteriormente se comparan las moléculas obtenidas con solver de Excel y las obtenidas con Matlab para una misma función objetivo con el fin de observar el comportamiento de solución de cada algoritmo. Como nuevas moléculas candidatas a refrigerantes se encuentra  $\text{CH}_2 = \text{CFCH}_3$ ,  $\text{F}_2\text{O}_2$ , y  $\text{CH}_2\text{OF}_2$  las cuales cumplen todos los parámetros y restricciones del problema de estudio.

Palabras clave:

- **MINLP**
- **REFRIGERANTES**
- **DISEÑO MOLECULAR**
- **MATLAB**
- **SOLVER**

## Abstract

In this work, the design of refrigerant molecules with physical properties that satisfy pressure and temperature conditions according to the specifications of the problem is reported. Molecules are found by generating and solving different objective functions that are maximized or minimized to find out the optimal value of the relationship between the physical properties of the candidate molecule. To solve the objective functions, the mixed integer non-linear programming method (MINLP) was used. With the use of Solver from Microsoft Excel, its generalized non-linear gradient algorithm (non-linear GRG) and by increasing the possibilities of solution through different configurations in which parameters such as the lower limit of the vapor pressure, the number of Groups considered and the way in which the bonds between these groups were formed, candidate molecules for refrigerants which are not reported in the literature were found out. Once the refrigerant molecules were obtained using Solver from Excel, the source code for Matlab to solve the problem was written, successfully obtaining the scripts which allow to optimize the objective functions with the "ga" function (ga function: genetic algorithm function). Subsequently, the molecules obtained with Solver and those obtained with Matlab for the same objective function were compared to observe the solution behavior from each algorithm. New candidate molecules for refrigerants include  $\text{CH}_2 = \text{CFCH}_3$ ,  $\text{F}_2\text{O}_2$ , y  $\text{CH}_2\text{OF}_2$ , which meet all the parameters and restrictions of the study problem.

Key words:

- **MINLP**
- **REFRIGERANTS**
- **MOLECULAR DESIGN**
- **MATLAB**
- **SOLVER**

## Capítulo I

### 1. Introducción

#### 1.1 Antecedentes

El estudio de Scacco y Vargas (2016) expone que es necesario la fabricación en Ecuador de un refrigerante para motores, en base a las principales necesidades de las fábricas automotrices y las empresas que proveen autorrepuestos en el país, debido a que los refrigerantes que existen actualmente en el mercado no cumplen con las especificaciones necesarias se fomenta a que las empresas automotrices tengan que importar este producto. Considerando posibles daños a los automotores, la altitud, el clima y otras características geográficas, se determina que las condiciones de operación de los productos refrigerantes del mercado local están orientadas para condiciones geográficas distintas. Interviniendo con normas, técnicas, herramientas e instrumentos de laboratorio instalados en una pequeña industria se puede llegar a comprobar las características físicas-químicas de un refrigerante de producción local, los componentes que lo hacen idóneo y la forma de fabricación, cubriendo las necesidades de los vehículos y las exigencias de calidad de los ensambladores automotrices con el objetivo de aportar a la matriz productiva ayudando a bajar el número de importaciones en este segmento y colaborando con mano de obra ecuatoriana.

Según el estudio de Gani (2004) en el diseño de productos químicos moleculares, se intenta encontrar una especie que exhiba ciertas propiedades funcionales acorde a la aplicación deseada. En el diseño de productos químicos (formulación), se intenta encontrar un aditivo que, cuando se agrega a otro producto químico o no químico, mejore sus propiedades funcionales deseables. El diseño de productos químicos (DPQ), por lo tanto, implica la generación y el cribado de una gran cantidad de moléculas químicas y/o mezclas de moléculas, y el espacio de búsqueda potencial es muy grande.

En concordancia con lo expuesto en el trabajo de Garg y Achenie (2001) en la programación no lineal de enteros mixtos (MILNP por sus siglas en inglés), se formula un objetivo de rendimiento que se debe optimizar (por ejemplo, la maximización de la temperatura de ebullición), junto con un conjunto de restricciones que se deben satisfacer (por ejemplo, la temperatura de ebullición no debe ser inferior a un valor aceptable dado). Además, es necesario identificar un conjunto de variables (por

ejemplo, un conjunto de descriptores de una molécula) que cambian sistemáticamente para optimizar el objetivo de rendimiento al mismo tiempo que se satisfacen las restricciones. Esto significa necesariamente que tanto el objetivo de desempeño como las restricciones deben depender del conjunto de variables dado.

El diseño molecular asistido por computadora (CAMD) emplea un enfoque de ingeniería inversa que incorpora especificaciones de propiedades y rendimiento directamente en el diseño del compuesto. La disponibilidad y la precisión de las técnicas de estimación de propiedades empleadas para predecir las propiedades objetivo restringen el alcance de CAMD (Gani, *et al.*, 1991).

Adicionalmente en el estudio de Gani *et al.* (1991) se ha esbozado un enfoque CAMD flexible y estructurado que implica la preselección de grupos estructurales, seguida de la generación de compuestos químicos estructuralmente factibles utilizando un sistema basado en el conocimiento de la estructura molecular y las propiedades físicas deseadas de la molécula a obtener. Posteriormente, las propiedades se predicen utilizando métodos de contribución grupal. Finalmente, los compuestos se clasifican en términos de un índice de rendimiento, que es una función de las propiedades objetivo explícitas.

## **1.2 Planteamiento del problema**

En la industria química actual, los ingenieros se enfrentan a la necesidad de desarrollar nuevos productos que satisfagan las necesidades de los consumidores, es decir, la búsqueda de moléculas apropiadas o mezclas de moléculas para satisfacer especificaciones de propiedades que se alinean estrechamente con las necesidades del cliente. Tal es el caso de los refrigerantes, los cuales deben poseer propiedades fisicoquímicas acordes al medio y la aplicación en donde serán usados, puesto que, de no ser así, estos no desempeñarán su función de una manera óptima.

Actualmente, en el plan nacional de desarrollo 2017-2021 se tiene que uno de los desafíos principales es impulsar el cambio de la matriz productiva a través de la vinculación entre el sector público, productivo y las universidades. Por lo que es preciso proponer nuevas maneras de potenciar la industria y mano de obra nacional a través de la elaboración de productos que se ajusten a las necesidades y requerimientos locales como es el caso de los refrigerantes que son usados en el sector productivo y automotor del país.

En el estudio reportado por Seider *et al.* (2009) y en el artículo publicado por Duvedi y Achenie (1996) se reporta la obtención de moléculas de refrigerante mediante la optimización de la estructura molecular. En estos se ha encontrado diferentes moléculas factibles que cumplen las restricciones planteadas, muchas de ellas se repiten, sin embargo, otras se pueden hallar en función de la variabilidad de las propiedades físicas, los grupos enlazantes considerados, restricciones y funciones objetivo, tal es el caso de los resultados obtenidos en el trabajo de Tawarmalani (2002) los cuales se muestran en la Figura 1, las moléculas halladas por Seider *et al.*, (2009) que se exponen en la Tabla 1 y 2; y, adicionalmente las moléculas resultantes de la investigación de Duvedi y Achenie (1996) que están disponibles en la Tabla 3 y 4.

### Figura 1

#### Resultado del diseño de refrigerantes

	Molecular Structure	$\frac{\Delta H_{ve}}{C_{pla}}$		Molecular Structure	$\frac{\Delta H_{ve}}{C_{pla}}$
FNO	F - N = O	1.2880	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> F	CH ≡ C - CH <sub>2</sub> - F	0.7802
FSH	F - SH	1.1697	CHF <sub>2</sub> Cl	(F-)(F-) > CH - Cl	0.7770
CH <sub>3</sub> Cl	CH <sub>3</sub> - Cl	1.1219	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> OF	CH <sub>2</sub> = CH - O - F	0.7685
CIFO	(Cl-)(-O-)(-F)	0.9822	NF <sub>2</sub> Cl	(F-)(F-) > N - Cl	0.7658
C <sub>2</sub> HClO <sub>2</sub>	O = C < (-CH = O)(-Cl)	1.1207	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NF	(CH <sub>3</sub> -)(CH <sub>3</sub> -) > N - F	0.6817
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	CH <sub>3</sub> - CH = C = O	0.9619	N <sub>2</sub> HF <sub>3</sub>	(F-)(F-) > N - NH - F	0.6711
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>3</sub> - C ≡ CH	0.9278	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> = C < (-O - F)(-F)	0.6705
C <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	F - C ≡ C - F	0.9229	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	(F-)(F-) > CH - C ≡ CH	0.6686
CH <sub>2</sub> CIF	F - CH <sub>2</sub> - Cl	0.9202	C <sub>2</sub> HNF <sub>2</sub>	CH ≡ C - N < (-F)(-F)	0.6587
C <sub>2</sub> HO <sub>2</sub> F	F - O - CH = C = O	0.8705	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> F <sub>2</sub>	(F-)(F - CH <sub>2</sub> -) > C = CH <sub>2</sub>	0.6377
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	CH <sub>2</sub> = C = CH <sub>2</sub>	0.8656	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> F <sub>2</sub>	(F-)(F-) > CH - CH = CH <sub>2</sub>	0.6263
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	CH <sub>3</sub> - CH <sub>3</sub>	0.8632	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> = CH - N < (-F)(-F)	0.6176
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> FO	(F-)(CH <sub>3</sub> -) > C = C = O	0.8531	CH <sub>3</sub> NOF <sub>2</sub>	(F-)(CH <sub>3</sub> -) > N - O - F	0.6139
NHF <sub>2</sub>	F - NH - F	0.8468	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> F <sub>3</sub>	(r > CH - 'r) <sub>3</sub> (-F) <sub>3</sub>	0.5977
C <sub>2</sub> HOF	CH ≡ C - O - F	0.8263			

Nota. Tomado de *Convexification and Global Optimization in Continuous and Mixed-Integer Nonlinear Programming* (p.251, 252), por Tawarmalani, M. (2002), Springer Science.

**Tabla 1**

Resultados del diseño de refrigerantes sin ODP

Compuesto	$\Delta H_v(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ bar	$P_s(43, 3\text{ }^\circ\text{C})$ bar
$\text{CCl}_2\text{F}_2$	18,76	27,1	2,94	10,67
$\text{CF}_3\text{OH}$	19,77	24,7	2,69	13,57
$\text{CH}_3\text{Cl}$	20,37	17,4	2,39	8,72

Nota. Tomado de *Product and Process Design Principles* (Tercera ed.) (p.71) por Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009), John Wiley & Sons, Inc.

**Tabla 2**

Resultados del diseño de refrigerantes con ODP

Compuesto	$\Delta H_v(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ bar	$P_s(43, 3\text{ }^\circ\text{C})$ bar	ODP
$\text{SF}_2$	18,3	16,0	3,84	13,9	0
$\text{CH}_3\text{CHF}_2$	20,6	21,9	2,08	7,91	0

Nota. Tomado de *Product and Process Design Principles* (Tercera ed.) (p.71) por Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009), John Wiley & Sons, Inc.

**Tabla 3**

Resultados del diseño de refrigerantes,  $P_s \geq 1,4$  bar

Itm	Compuesto	Fun. Obj.	$\Delta H_v(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1\text{ }^\circ\text{C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ bar	$P_s(43, 3\text{ }^\circ\text{C})$ bar
0	$\text{F}_{1,38}\text{I}_{0,62}$	1,9985	21,91	10,96	1,40	6,17
1	$\text{CH}_3\text{OF}$	1,0266	21,81	21,24	1,79	8,60
2	$\text{CH}_3\text{Cl}$	1,1737	20,44	17,42	2,45	9,19

Nota. Tomado de *Designing Environmentally Safe Refrigerants Using Mathematical Programming* (p.23), por Duvedi, A., & Achenie, L. (1996), Chemical Engineering Science, 51, 1-46.

**Tabla 4**

Resultados del diseño de refrigerantes,  $P_s \geq 1,0$  bar

Itm	Compuesto	Fun. Obj.	$\Delta H_v(-1, 1^\circ\text{C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1^\circ\text{C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1^\circ\text{C})$ bar	$P_s(43, 3^\circ\text{C})$ bar
0	$F_{1,38}I_{0,62}$	2,0519	23,03	11,23	1,00	4,66
1	$\text{CH}_3\text{OF}$	1,0266	21,81	21,24	1,79	8,60
2	$\text{CH}_3\text{Cl}$	1,1737	20,44	17,42	2,45	9,19
3	$\text{CH}_3\text{FCl}$	1,1372	22,69	19,95	1,24	5,40

Nota. Tomado de *Designing Environmentally Safe Refrigerants Using Mathematical Programming* (p.23), por Duvedi, A., & Achenie, L. (1996), *Chemical Engineering Science*, 51, 1-46.

En los citados trabajos se emplean dos funciones objetivo que son la maximización del cociente entre la entalpía de vaporización y el calor específico, así como también se usa la maximización de la entalpía, es decir, se emplean únicamente dos funciones objetivo, lo que evidencia que se puede encontrar moléculas de refrigerante que no han sido reportadas en la literatura mediante el uso de funciones objetivo diferentes.

### 1.3 Justificación e importancia

Para proporcionar enfriamiento para alimentos, productos farmacéuticos y similares, en refrigeradores y congeladores, así como espacios de aire cerrados, se requieren ciclos de refrigeración, estos últimos involucran evaporadores, compresores, condensadores y válvulas (o turbinas). Por lo tanto, cuando se busca un refrigerante (es decir, un fluido de trabajo en un ciclo de refrigeración), es importante localizar compuestos volátiles estables que hiervan a temperaturas típicas de refrigeración (Seider *et al.*, 2009).

Puesto que el uso de fluidos refrigerantes se extiende para aplicaciones en el área doméstica, farmacéutica, automotriz e industrial, es sustancial hallar combinaciones de átomos que proporcionen moléculas refrigerantes adecuadas para cada aplicación, a la vez que, en caso de una fuga por accidente o descuido, su liberación al entorno tenga el menor impacto ambiental y riesgo a las personas posible. Todo esto debido a que en el Ecuador al contar con cuatro diferentes regiones naturales

como son litoral, sierra, oriental e insular, las condiciones ambientales de presión atmosférica, temperatura y humedad ambiental son totalmente diferentes, por lo que, para cada caso los requerimientos de enfriamiento y las propiedades físicas de las sustancias también son diferentes.

El desarrollo del presente proyecto tiene singular relevancia puesto que sembrará un precedente para que las futuras promociones de la carrera de Petroquímica de la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE extensión Latacunga puedan tener una base para dar continuidad al mismo, ya sea desarrollando un proceso de síntesis orgánica para obtener un refrigerante estimado para una aplicación específica, desarrollando y construyendo un sistema de refrigeración útil para prácticas de laboratorio en la asignatura de Plantas Petroquímicas, o para la correspondiente comercialización en el mercado. Además, mediante el uso de nuevas funciones objetivo o funciones objetivo reportadas en la literatura se buscarán moléculas de refrigerante que no hayan sido reportadas en la literatura.

## **1.4 Objetivos**

### ***1.4.1 Objetivo general***

Obtener moléculas refrigerantes a través de la optimización de la estructura molecular.

### ***1.4.2 Objetivos específicos***

- Buscar funciones objetivo que permitan maximizar la entalpía de vaporización y minimizar el valor del calor latente de vaporización de la molécula candidata.
- Determinar nuevas moléculas de refrigerante mediante solver de Excel.
- Elaborar un programa en Matlab que permita optimizar la estructura molecular a través de programación no lineal.
- Buscar nuevas moléculas de refrigerante mediante Matlab y la correspondiente comparación de resultados con los obtenidos con solver de Excel.

## 1.5 Hipótesis

¿Se pueden encontrar refrigerantes mediante optimización de la estructura molecular y funciones objetivo que no se hayan empleado para dicha finalidad?

## 1.6 Variables de la investigación

### 1.6.1 *Variable dependiente*

Estructura molecular del Refrigerante

### 1.6.2 *Variable Independiente*

Función Objetivo que no haya sido empleada para la búsqueda de refrigerantes

## Capítulo II

### 2. Fundamentación teórica

#### 2.1 Refrigerantes

##### 2.1.1 Definición de refrigerante

De manera general, cualquier fluido que esté en la capacidad de retirar calor de otro cuerpo o fluido puede considerarse como refrigerante (Plazas, 2012). En referencia al fenómeno de refrigeración mecánica por compresión, un refrigerante comprende al medio que transporta calor desde donde se absorbe al evaporarse, a baja temperatura y presión, hasta donde se lo desprende al condensarse a temperatura y presión altas. Existe un número muy grande de fluidos refrigerantes que se pueden someter fácilmente a procesos de licuefacción, sin embargo, sólo unos cuantos son utilizados en la actualidad. Algunos se utilizaron mucho en el pasado, pero se eliminaron al desarrollar otros con ciertas ventajas y características. A partir del año 2000, se decide discontinuar la fabricación de algunos de esos refrigerantes, tal es el caso del R-11, R-12, R-113, R-115, etc., debido al deterioro que causan en la capa de ozono (Plazas, 2012). En su lugar, se utilizaron otros refrigerantes como el R-123, el R-134a y algunas mezclas ternarias. Los grandes fabricantes de refrigerantes siguen trabajando en el desarrollo de nuevos productos (Plazas, 2012).

##### 2.1.2 Tipos de refrigerantes

De acuerdo con su característica química los fluidos refrigerantes pueden ser halocarburos (compuestos orgánicos que contienen flúor y/o cloro), hidrocarburos (como propano) e inorgánicos (como amoníaco). La elección del fluido refrigerante depende de algunos factores como la temperatura y presión de operación, la toxicidad y la inflamabilidad entre los principales. El Freón-12 ( $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ) era un fluido refrigerante muy utilizado que ha sido desplazado por la evidencia de que los hidrocarburos clorados contribuyen al agotamiento de la capa de ozono por reacciones fotoquímicas, estos fluidos clorados están siendo sustituidos por hidrocarburos que contengan átomos de flúor (Murphy, 2007). El amoníaco se emplea en gran medida como refrigerante en la fabricación de alimentos; tiene excelentes propiedades termodinámicas y es relativamente benigno para el ambiente. Pero, por aspectos de toxicidad, el amoníaco se puede emplear sólo donde no hay mucha gente presente (Murphy, 2007).

### **2.1.3 Generaciones de los refrigerantes**

De acuerdo con lo expuesto por Calm (2007), desde inicios de la invención de los primeros refrigeradores ha surgido la necesidad de usar fluidos refrigerantes seguros a nivel doméstico e industrial y que al mismo tiempo cause el menor impacto ambiental posible. A lo largo de la historia se pueden diferenciar cuatro generaciones de fluidos refrigerantes las cuales se han ido perfeccionando para estar al margen de la conciencia ambiental y el cambio climático, estas generaciones de refrigerantes son:

*Primera generación (1830-1930):* es conocida como la generación de refrigerantes “que funcionan” y en esta se encuentran clasificados principalmente los dañinos clorofluorocarbonos (**CFC's**), pero también se encuentran gases triatómicos como el  $\text{SO}_2$  y el  $\text{CO}_2$ , los cuales cumplían la función de refrigeración, pero eran tóxicos o corrosivos y en el caso de los CFC's deterioran la capa de ozono (Calm, 2007).

*Segunda generación (1931-1990):* en esta generación se realizó esfuerzos por encontrar moléculas refrigerantes que sean seguras de usar y relativamente duraderas. Aquí los descubrimientos apuntaron a los compuestos orgánicos que contenían hidrógeno, cloro, flúor y carbono en su estructura (**HCFC's**) como moléculas refrigerantes idóneas (Calm, 2007).

*Tercera generación (1990-2010):* el deterioro del agujero en la capa de ozono fue razón suficiente para impulsar los esfuerzos por diseñar moléculas refrigerantes que no sigan agotando este recurso. Estudios demostraron que los átomos de cloro eran los principales responsables de este agotamiento por lo que los países desarrollados prohibieron la fabricación y venta de refrigerantes del tipo CFC y HCFC en su territorio. En este punto se estudia las moléculas que contienen hidrógeno, flúor y carbono en su estructura (**HFC's**) las cuáles muestran propiedades refrigerantes satisfactorias para su aplicación doméstica e industrial y al mismo tiempo no son perjudiciales para la capa de ozono (Calm, 2007).

*Cuarta generación (2010 en adelante):* si bien con la tercera generación de refrigerantes se logra mermar el deterioro de la capa de ozono, paralelamente se encuentra una relación estrecha entre el fenómeno del calentamiento global y la emisión de gases de efecto invernadero como  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NO}_2$ , HFC's, perfluorocarbonos (PFC's) y el hexafluoruro de azufre. Con estos antecedentes se realiza un enfoque en el diseño de nuevas moléculas refrigerantes orientado a la obtención de hidrofluoroolefinas

(HFO's) las cuales además de no contribuir al agotamiento de la capa de ozono por la ausencia de cloro en su estructura tampoco son consideradas como gases de efecto invernadero por lo que son las moléculas refrigerantes idóneas (Calm, 2007).

## **2.2 Usos e importancia de los refrigerantes**

### **2.2.1 Antecedentes de los refrigerantes**

El primer refrigerante utilizado fue el éter etílico para el comercio de sistemas por compresión de vapor en 1850, y le siguieron otros como amoníaco, dióxido de carbono, cloruro metílico, dióxido de azufre, butano, etano, propano, isobutano, gasolina, y los clorofluorocarbonos, entre otros. Los sectores industriales y del gran comercio estaban muy satisfechos con el amoníaco, y aún lo están, aunque este compuesto es tóxico. Las ventajas del amoníaco sobre otros refrigerantes son su bajo costo, altos coeficientes de desempeño (COP por sus siglas en inglés) y, en consecuencia, menores costos de energía, sus propiedades termodinámicas y de transporte más favorables y, por ello, coeficientes de transferencia de calor más altos (requiere intercambiadores de calor más pequeños y de menor costo), mayor detectabilidad en el caso de una fuga y ningún efecto en la capa de ozono. La principal desventaja del amoníaco es su toxicidad, que lo hace inadecuado para el uso doméstico. El amoníaco se usa predominantemente en las instalaciones de refrigeración de alimentos como la preservación de frutas frescas, vegetales, carnes y pescado; la refrigeración de bebidas y productos lácteos como la cerveza y el vino, la leche y el queso, estos dos últimos que poseen amplia producción en la provincia de Cotopaxi (Bravo, 2019); el congelamiento de helados y otros alimentos; la producción de hielo, y la refrigeración a baja temperatura en las industrias farmacéutica y algunas otras (Cengel & Boles, 2012).

### **2.2.2 Usos de refrigerantes**

En la industria química, frecuentemente existe la necesidad de enfriar las corrientes de proceso; por ejemplo, para cristalizar un producto de una mezcla líquida, enfriar un reactor exotérmico o evitar el sobrecalentamiento de un circuito integrado de computadora. A menudo el aire y el agua se utilizan como fluidos fríos para propósitos de enfriamiento por su fácil accesibilidad y bajo costo de manipulación. Los ventiladores pueden soplar aire frío a través de superficies calientes, el agua fría de los ríos, lagos cercanos u océanos puede servir como disipador térmico para las plantas industriales, etc. Es común observar que las grandes plantas de fabricación generan su propia agua refrigerante en torres de enfriamiento misma que es útil para enfriar corrientes de 25 a

30 °C, no obstante, para enfriar corrientes de proceso a temperaturas por debajo de la ambiental se necesitan refrigerantes que satisfacen las condiciones de operación del proceso (Murphy, 2007).

### **2.2.3 Aplicaciones frecuentes de los refrigerantes**

Como lo expuesto por Plazas (2012) las aplicaciones de fluidos refrigerantes son variadas, pero se puede destacar de entre muchas otras, la climatización, para alcanzar un grado de confort térmico adecuado para la habitabilidad de un edificio o medio de transporte de acuerdo a las exigencias climáticas del entorno; la conservación de alimentos, medicamentos u otros productos que se degraden con el calor; la producción de hielo o nieve, la conservación de órganos en medicina o el transporte de alimentos perecederos. Dentro del contexto industrial se puede encontrar aplicaciones que requieren reducir la temperatura de maquinaria o materiales para su correcto desarrollo, algunos ejemplos son el mecanizado, la fabricación de plásticos, la producción de energía nuclear. Asociado al campo de la ciencia también se emplean en la criogenia o enfriamiento a muy bajas temperaturas, empleada para licuar algunos gases o para investigaciones científicas.

### **2.2.4 Refrigerantes y su relación con la población humana**

Cuando los primeros refrigeradores fueron fabricados a principios del siglo XX, estos empleaban dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) y cloruro de metilo (CH<sub>3</sub>Cl) como fluido refrigerante los mismos que son gases muy venenosos para los organismos vivos. En realidad, muchos países prohibieron las “hieleras con gases mortales” luego de que algunas familias murieron por fugas del refrigerante. Los refrigeradores domésticos se hicieron más comunes a partir de que Thomas Midgley inventó la familia de refrigerantes freones. Los freones eran inocuos y no inflamables, lo cual representó una enorme mejora sobre los gases mortales anteriores. Sin embargo, en 1973, James Lovelock informó que la atmósfera contenía casi tanto R-11 (CFCl<sub>3</sub>, uno de los freones más comunes) como la cantidad total producida desde 1933, y así la notable estabilidad e inercia química del refrigerante quedaba avalada por este hecho. Por otra parte, la evidencia de que el R-11 y otros hidrocarburos clorados contribuían al agotamiento del ozono, ha motivado las acciones para buscar refrigerantes novedosos, más benignos para el ambiente (Murphy, 2007).

Estos compuestos químicos forman parte del eje de la movilidad demográfica debido a su aplicación en motores de combustión interna: en la zona de las paredes de

los cilindros y en las culatas de los motores se producen temperaturas muy altas que es necesario refrigerar mediante un circuito cerrado donde una bomba envía el líquido refrigerante a las galerías que hay en el bloque motor y la culata y de allí pasa a un radiador de enfriamiento y un depósito de compensación. El líquido refrigerante que se utiliza es agua destilada con aditivos que rebajan sensiblemente el punto de congelación para preservar al motor de sufrir averías cuando se producen temperaturas bajo cero. Y por último una de las últimas aplicaciones se da en máquinas-herramientas las cuales llevan incorporado un circuito de refrigeración y lubricación para bombear el líquido refrigerante que utilizan llamado taladrina o aceite de corte sobre el filo de la herramienta para evitar un calentamiento excesivo que la pudiese deteriorar rápidamente (Plazas, 2012).

### **2.2.5 Criterios para elegir un refrigerante**

El coeficiente de desempeño de los refrigeradores (COP por sus siglas en inglés) depende en cierta medida del refrigerante, su cantidad y propiedades termodinámicas. A pesar de esto, características tales como su toxicidad, inflamabilidad, costo, propiedades de corrosión y presión de vapor con respecto a la temperatura son de gran importancia en la elección del refrigerante. Para que el aire no pueda filtrarse hasta el sistema de refrigeración, y en consecuencia alterar el ciclo de refrigeración, la presión de vapor del refrigerante a la temperatura del evaporador deberá ser mayor que la presión atmosférica. Por otra parte, la presión del vapor a la temperatura del condensador no debe ser excesivamente alta, debido al costo inicial y al gasto de operación del equipo de alta presión. Estos dos requerimientos limitan la elección del refrigerante a relativamente poco fluidos. En tal caso, la selección final depende de las otras características ya mencionadas (Smith, Van Ness, & Abbott, 2007).

## **2.3 Programación no lineal**

### **2.3.1 Definición**

Para Cantu (1996) al conjunto de técnicas usadas para que una función objetivo sea optimizada se denomina programación no lineal, aquí, una o más variables consideradas no es lineal y está sujeta a un conjunto de restricciones que condicionan el problema, tal es el caso de las propiedades físicas de los grupos enlazantes que se consideran en el estudio del diseño de refrigerantes. En el evento particular cuando una función objetivo es de carácter lineal y las restricciones del problema representan

desigualdades lineales y/o ecuaciones lineales, se convierte en un problema de programación lineal clásico.

La programación lineal es una técnica de optimización matemática. Por técnica de optimización, se concibe la idea de un método que intenta maximizar o minimizar un objetivo establecido, como por ejemplo la maximización de utilidades o la reducción de los costos. La programación lineal constituye un subconjunto de un área mayor denominada programación matemática (Budnick, 2007).

A la programación lineal, se la considera como una herramienta de fundamental importancia, esto gracias a que, mediante su aplicación, se pueden obtener soluciones cuantitativas a problemas de ingeniería, buscando mejorar el resultado y orientando a una óptima toma de decisiones. En cualquier problema de programación matemática se toman decisiones, las cuales se representan mediante variables de decisión  $x_j$  utilizadas en cualquier modelo de programación lineal, es importante señalar que ésta última es un caso particular de la programación no lineal en donde se aplican todos los principios fundamentales propios de esta área de estudio (Puente & Gavilánez, 2018).

## **2.4 Función objetivo**

### **2.4.1 Definición**

Para cualquier tipo de programación matemática la función objetivo es la meta que en varios casos puede ser considerada como el rendimiento total, el nivel de utilidades, los costos generados, niveles de contaminación, participación en el mercado, la rentabilidad sobre una inversión, concentración química, propiedades físicas, etc. (Puente & Gavilánez, 2018).

## **2.5 Restricciones**

### **2.5.1 Generalidades**

Al conjunto de restricciones, se les considera como las condiciones que debe cumplir o satisfacer los diferentes niveles de las variables de decisión, están sujetas a límites superiores e inferiores dentro de los cuáles las variables pueden tomar valores que hagan que la función objetivo se optimice y que a la vez cumpla las restricciones dentro de un intervalo de valores posibles establecido. La resolución de problemas de programación lineal se lleva a cabo mediante el desarrollo de tres fases (Puente & Gavilánez, 2018): Planteamiento del modelo matemático que relaciona las variables de interés.

- 1) Resolución del modelo del problema.
- 2) Análisis de resultados para tomar decisiones.

## **2.6 Obtención de moléculas refrigerantes**

### **2.6.1 Antecedentes**

Desde el descubrimiento de los fluidos refrigerantes ha resultado de gran interés hallar moléculas adecuadas para aplicaciones específicas de remoción de calor, este fue el desafío al que se enfrentó Thomas Midgely, Jr., quien buscó desarrollar un producto refrigerante para una amplia gama de aplicaciones domésticas, automotrices e industriales. En 1937, Midgely, que trabajaba para General Motors, publicó el primer estudio exhaustivo del diseño de moléculas pequeñas para refrigerantes. A través de la examinación de la tabla periódica, concluyó que los gases inertes tienen puntos de ebullición muy bajos para la mayoría de las aplicaciones, y que los metales no son prácticos debido a su potencial de congelación cuando el sistema de refrigeración está apagado. En consecuencia, se concentró en compuestos que incluían átomos de C, N, O, S y H, y los halógenos, F, Cl, Br y I (Seider *et al.*, 2009).

### **2.6.2 Características de un refrigerante**

Si bien es cierto los compuestos que contienen F son inflamables, se considera que su toxicidad baja es una ventaja. Se tiene en cuenta además, que los compuestos que contienen Br y I son demasiado tóxicos. Midgely también reconoció la conveniencia de que los refrigerantes tengan: (1) un gran calor latente de vaporización, para reducir su rendimiento al eliminar una carga térmica especificada; (2) una viscosidad baja, para reducir la potencia de recirculación; y (3) un punto de congelación bajo, para reducir la posibilidad de congelación. Su trabajo condujo al desarrollo de varios refrigerantes que contienen átomos de C, Cl y F, llamados Freones®. Futuros trabajos condujeron a refrigerantes de Freón® adicionales que también contienen átomos de H, es importante además que los refrigerantes deben hervir y condensar a las temperaturas deseadas y bajas presiones, sin reaccionar con el ozono (Seider *et al.*, 2009). Adicionalmente, es importante mencionar que los refrigerantes que contienen cloro se excluyen debido a su capacidad para degradar la capa de ozono (Nimitz y Skaggs, 1992).

### **2.6.3 Metodología para la obtención de moléculas refrigerantes**

En el estudio de Duvedi & Achenie (1996) se utiliza una metodología basada en MINLP (programación no lineal de enteros mixtos) para diseñar refrigerantes con las propiedades físicas deseadas. Diferentes combinaciones de grupos estructurales

preseleccionados conducen a la formación de diferentes compuestos químicos. Decidir qué grupos estructurales incluir y cuáles no incluir en la base depende del problema. Por ejemplo, en el diseño de refrigerantes, los grupos con un número igual a dos o tres enlaces pueden hacer muy posible que los compuestos resultantes polimericen en un período de tiempo relativamente corto. Por tanto, estos grupos quedan excluidos de la base. Además, se excluirán todos aquellos grupos estructurales para los que no se disponga de los parámetros necesarios para estimar las propiedades físicas relevantes. La elección del conjunto de grupos estructurales puede basarse en los grupos presentes en los refrigerantes actualmente disponibles.

## 2.7 Optimización para encontrar la estructura molecular

### 2.7.1 Métodos de estimación de propiedades

De acuerdo con lo mencionado por Seider *et al.* (2009) el diseño de estructuras moleculares se basa en métodos precisos de estimación de propiedades. Al calcular la estructura molecular es necesario que los átomos y moléculas estén presentes de tal manera que se pueda minimizar el cuadrado de la suma de las diferencias de cada propiedad deseada y los valores especificados por el problema, de acuerdo con la ecuación:

$$\min_n \sum_{j=1}^P (p_j\{n\} - p_j^{spec})^2 \quad (1)$$

donde  $p_j^{spec}$  es proporcionada por el problema planteado para la propiedad del grupo de tipo  $j$  de la molécula en una matriz de  $P$  propiedades objetivo. Frecuentemente se establece límites superior e inferior para llevar a cabo la minimización; por ejemplo:

$$p_j^L \leq p_j\{n\} \leq p_j^U \quad (2)$$

y

$$n_j \in \{n_j^L, n_j^U\}, \quad j = 1, \dots, N \quad (3)$$

donde  $n_j$  es el número de grupos de tipo  $j$  en la molécula, y  $N$  es el número total de tipos de grupos moleculares en la molécula.

### 2.7.2 Viabilidad estructural

Cuando se añade un nuevo grupo molecular es importante verificar que no exista uniones libres en el resultado y que exista dos uniones libres cuando se añada a

una unidad repetitiva de un polímero. La cantidad de uniones libres se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$f = \sum_{i=1}^N (v_j - 2)n_j + 2 \quad (4)$$

donde  $v_j$  es la valencia, o número de enlaces libres, asociados con el grupo molecular  $j$  y  $N$  representa el total de grupos enlazantes que se consideran. Un grupo molecular se puede agregar a una molécula siempre que  $f = 0$  y a una unidad repetitiva cuando  $f = 2$ . Para hallar la mejor estructura molecular, la función objetivo (1) se combina con las restricciones (2) - (4) en un programa no lineal de enteros mixtos (MINLP), que se resuelve mediante un algoritmo desarrollado en Excel, Matlab o cualquier otra herramienta matemática.

## 2.8 Diseño de refrigerantes

### 2.8.1 Ecuación para combinar grupos moleculares

En el estudio de Joback y Stephanopoulos (1989) inicialmente se elige  $k$  grupos moleculares, cada uno de los cuales puede aparecer en un refrigerante candidato  $n$  veces, hasta  $n_{max}$  veces, el número de diseños moleculares distintos es:

$$\sum_{n=2}^{n_{max}} C\{k, n\} = \sum_{n=2}^{n_{max}} \frac{(k + n - 1)!}{n! (k - 1)!} \quad (5)$$

donde  $C\{k, n\}$  es el número de combinaciones de  $k$  grupos tomados  $n$  a la vez. Evidentemente la cantidad de combinaciones para tan solo 10 grupos moleculares puede ser de varios millones. Hay que tener en cuenta que Joback y Stephanopoulos (1989) resolvieron inicialmente una formulación menos restrictiva. Más adelante, Gani *et al.* (1991) excluyeron los átomos de oxígeno y agregaron restricciones que limitaron el alcance de la búsqueda de nuevas moléculas. En el trabajo hecho por Duvedi y Achenie (1996) se proporciona átomos de oxígeno para plantear la formulación.

## 2.9 Cálculo de propiedades físicas normales y críticas

En el estudio de Duvedi y Achenie (1996) se hallan las siguientes propiedades físicas para encontrar la estructura molecular adecuada que se ajuste a los requerimientos de enfriamiento citadas del trabajo de Joback & Reid (1987):

### 2.9.1 Temperatura normal de ebullición.

$$T_b = 198,2 + \sum_{j=1}^N T_b n_j \quad (6)$$

### 2.9.2 Temperatura crítica

$$T_c = T_b \left[ 0,584 + 0,965 \sum_{j=1}^N T_c n_j - \left( \sum_{j=1}^N T_c n_j \right)^2 \right]^{-1} \quad (7)$$

### 2.9.3 Presión crítica

$$P_c = \left( 0,113 + 0,0032 n_A - \sum_{j=1}^N P_{c_j} n_j \right)^{-2} \quad (8)$$

en donde la temperatura y presión se mide en K y bar respectivamente, y  $n_A$  es el número total de átomos en la molécula.

### 2.9.4 Presión reducida de vapor.

$$\ln P_r^s = \frac{-G[1 - T_r^2 + k(3 + T_r)(1 - T_r)^3]}{T_r} \quad (9)$$

$$G = 0,4835 + 0,4605h \quad (10)$$

$$h = T_{br} \frac{\ln P_c}{1 - T_{br}} \quad (11)$$

$$k = \frac{\left[ \frac{h}{G} - (1 + T_{br}) \right]}{(3 + T_{br})(1 - T_{cr})^2} \quad (12)$$

en donde G, h y k son parámetros de correlación de propiedades críticas y el subíndice r significa que la propiedad es de característica reducida, además se debe tener en cuenta que:

$$P_r^s = \frac{P^s}{P_c} \quad (13)$$

$$T_{br} = \frac{T_b}{T_c} \quad (14)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (15)$$

### 2.9.5 Calor específico del líquido.

$$c_{pl} = 0239 \sum_{j=1}^N c_{plj} n_j \quad (16)$$

donde  $c_{pl}$  está en unidades de J/mol K. Esta ecuación es estimada en base a la temperatura promedio del caso de estudio, 70 °F (21,1 °C).

### 2.9.6 Calor latente de vaporización a cualquier temperatura.

$$\Delta H^v\{T\} = \Delta H_b^v \left[ \frac{1 - \frac{T}{T_c}}{1 - \frac{T_b}{T_c}} \right]^n \quad (17)$$

$$n = \left[ \frac{0,00264(\Delta H_b^v)}{RT_b} + 0,8794 \right]^{10} \quad (18)$$

$$R = 8,314 \frac{J}{mol K} \quad (19)$$

donde el calor latente de vaporización está en J/mol, n es un parámetro adimensional de correlación de la entalpía y temperatura normal de ebullición y R es la constante universal de los gases.

### 2.9.7 Calor latente de vaporización a la temperatura normal de ebullición.

$$\Delta H_b^v = S_{vb} T_b \quad (20)$$

$$S_{vb} = 44,367 + 15,33 \log(T_b) + \frac{0,39137 T_b}{M} + \frac{0,00433 T_b^2}{M} - \frac{5,627 \times 10^{-6} T_b^3}{M} \quad (21)$$

en donde  $S_{vb}$  es la entropía de vaporización a la temperatura normal de ebullición en J/(mol K) y M es la masa molar en g/mol del grupo enlazante correspondiente (Duvedi & Achenie, 1996).

Para poder emplear las ecuaciones planteadas se recurre a los datos de valores experimentales propuestos en el trabajo de Seider *et al.*, (2009) y citados de Joback y Reid (1987) para cada uno de los grupos enlazantes, estos datos se representan en la Tabla 5.

**Tabla 5**

*Propiedades físicas de cada grupo enlazante*

Grupo $n_j$	Valencia $v_j$	Tc (K)	Pc (bar)	$V_c$ $\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}\right)$	$T_b$ (K)	$n_i$	$C_{pl}$ $\left(\frac{\text{J}}{\text{mol K}}\right)$	M $\left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)$
-CH3	1	0,0141	-0,001	65	23,58	4	36,8	15,04
>CH2	2	0,0189	0	56	22,88	3	30,4	14,03
>CH-	3	0,0164	0,002	41	21,74	2	21	13,02
>C<	4	0,0067	0,0043	27	18,25	1	7,36	12,01
-OH	1	0,0741	0,0112	28	92,88	2	44,8	17,01
-O-	2	0,0168	0,0015	18	22,42	1	35	16
-NH2	1	0,0243	0,0109	38	73,23	3	58,6	16,03
>NH-	2	0,0295	0,0077	35	50,17	2	43,9	15,02
>N-	3	0,0169	0,0074	9	11,74	1	31	14,01
-S-	2	0,0119	0,0049	54	68,78	1	33	32,07
-SH	1	0,0031	0,0084	63	63,56	2	44,8	33,08
-F	1	0,0111	-0,006	27	-0,03	1	17	19
-Cl	1	0,0105	-0,005	58	38,13	1	36	35,45

*Nota.* Tomado de *Product and Process Design Principles* (Tercera ed.) (p.71) por Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009), John Wiley & Sons, Inc.

## 2.10 Potencial de agotamiento de ozono ODP

### 2.10.1 Definición

En la investigación de Nimitz y Skaggs (1992) se expone que los compuestos con un mínimo de un grupo de cloro, bromo o yodo tienen un potencial de agotamiento del ozono (ODP) diferente de cero, es decir, eliminan la capa de ozono. Sin embargo, los datos de ODP son escasos y se limitan a unos pocos compuestos halogenados. Se han informado los valores de ODP para varios clorofluorocarbonos (CFC) con uno o dos átomos de carbono. Usando estos valores, se formula las siguientes expresiones

generales para el ODP de CFC con uno o dos átomos de carbono (Solomon *et al.*, 1992):

$$ODP = 0,585602n_{Cl}^{-0,0035}e^{\frac{M}{238,563}} \quad \text{para un carbono} \quad (22)$$

$$ODP = 0,0949956n_{Cl}^{-0,0404477}e^{\frac{M}{83,7953}} \quad \text{para dos carbonos} \quad (23)$$

en donde  $n_{Cl}$  representa la cantidad de átomos de cloro presente en la molécula diseñada y M es la masa molar de en g/mol de la misma molécula. Es preciso señalar que si una molécula diseñada tiene más de 2 átomo de carbono o no posee átomos de cloro, las expresiones (22) y (23) no se pueden aplicar.

## 2.11 Restricciones de construcción de la estructura molecular

En concordancia con lo expuesto por Duvedi y Achenie (1996) podemos tener en cuenta tres tipos fundamentales de restricciones, las cuales se enumeran a continuación:

### 2.11.1 Restricciones de asignación

Son lineales y cuyo valor debe ser un número entero positivo

### 2.11.2 Restricción de viabilidad estructural

Las consideraciones que hay que tener presente al momento de armar una molécula son las expuestas por las reglas de construcción asociadas a la química orgánica para compuestos orgánicos y átomos no metálicos, obteniendo las siguientes expresiones (Odele y Macchietto, 1993):

$$\sum_j (2 - v_j)n_j = 2m \quad (24)$$

esta restricción asegura que los grupos candidatos para armar la molécula cumplan con la regla del octeto y no queden átomos sin enlazar. La variable m puede tomar valores de 1, 0 y -1 cuando la molécula sea acíclica, monocíclica y bicíclica respectivamente. Debido a que los refrigerantes convencionales son en su mayoría acíclicos, se adoptará el valor de  $m=1$  para resolver el problema. Cabe mencionar que la ecuación (24) es únicamente válida para compuestos de enlace simple.

### 2.11.3 Restricción de formación de enlaces múltiples

En base a lo anterior, la expresión (25) asegura que los grupos moleculares considerados no formen enlaces múltiples en la molécula.

$$\sum_j n_j \geq n_j(v_j - 1) + 2 \quad (25)$$

en donde  $\sum_j n_j$  representa la cantidad total de los diferentes grupos moleculares que conformarán la molécula.

### 2.11.4 Restricción de cantidad de grupos moleculares

Debido a las bajas presiones de vapor en los compuestos orgánicos mayores que C4 y a la disminución de la precisión de la predicción de propiedades físicas a medida que aumenta la cantidad de grupos moleculares candidatos, se restringe la búsqueda únicamente a los compuestos que comprendan entre 1 y 4 átomos de carbono teniendo en cuenta que al tratarse de enlaces simples el máximo número de grupos presentes en la molécula ( $n_{max}$ ) puede ser 14 de acuerdo la expresión  $C_nH_{2n+2}$ . Adicionalmente para formar una molécula factible, se necesitan enlazar al menos dos grupos moleculares, lo cual se representa en la expresión (26) (Duvedi & Achenie, 1996)

$$2 \leq \sum_j n_j \leq n_{max} \quad (26)$$

### 2.11.5 Restricción de coexistencia de grupos alcohol, halógenos y aminas

El manejo de varios grupos halógenos, alcoholes y aminas en una molécula induce a una desviación en la precisión de las propiedades físicas estimadas, por lo que, estos grupos funcionales deben ser restringidos a un máximo ( $f_{max}$ ) de 10 para una cadena de 4 átomos de carbono y a un mínimo de cero, ya que es posible formar refrigerantes que no contengan los grupos mencionados. Esta condición se establece en la expresión (27).

$$0 \leq \sum_j n_j \leq f_{max} \quad (27)$$

### 2.11.6 Restricción de coexistencia de grupos halógenos y nitrógeno

Como lo advierte Gani *et al.* (1991) los compuestos que poseen altas presiones de vapor y que contienen halógenos y nitrógeno en su estructura, tienen una fuerte tendencia a explotar por lo que no se desea que estos dos tipos de grupos coexistan simultáneamente en una molécula, además es deseable solamente tener la presencia de un átomo de nitrógeno en cualquiera de sus formas (NH<sub>2</sub>, NH, N). La expresión (28) explica esta restricción.

$$n_R + f_{max} (n_{NH_2} + n_{NH} + n_N) \leq f_{max} \quad (28)$$

Todas las ecuaciones y expresiones expuestas hasta este punto se combinan en un problema de programación matemática no lineal, el cual hallará la combinación adecuada de grupos moleculares para las necesidades de diseño del refrigerante.

### 2.11.7 Restricción de las propiedades físicas de las moléculas refrigerantes

Como lo exponen Tawarmalani (2002) y Seider *et al.*, (2009) se toma como base el caso del sistema de refrigeración de un automóvil convencional en el cual se necesita que el refrigerante candidato se pueda evaporar a una temperatura de 30°F (-1,1 °C) y se condense a una temperatura estimada de 110°F (43,3°C). Es necesario indicar que la temperatura promedio de este caso es de 70°F (21,1°C) y es en base a esta temperatura que se realiza el cálculo del  $c_{pl}$  como se indicó en la ecuación (16).

De acuerdo con lo que propone Tawarmalani (2002) el refrigerante idóneo debe tener mejores o iguales características que el refrigerante R-12 (CCl<sub>2</sub>F<sub>2</sub>) en el mismo rango de temperaturas expuesto anteriormente y cuyos valores de propiedades físicas se muestran en las ecuaciones (29) a la (32). Un valor mayor de entalpía de vaporización  $\Delta H_v$  reduce la cantidad necesaria de refrigerante a ser usado en circuito de refrigeración, el calor específico del líquido  $c_{pl}$  debe ser pequeño para reducir la cantidad de refrigerante que pasa por la válvula de expansión del sistema, la presión de vapor a la menor temperatura (evaporación) debe ser mayor a la atmosférica para evitar infiltraciones de aire o humedad en el sistema; finalmente, la presión de vapor a la mayor temperatura (condensación) debe ser menor a 14 para asegurar que la relación de compresión no sea superior a 10 (Tawarmalani, 2002).

$$\Delta H_v \geq 18400 \frac{J}{mol} \quad (29)$$

$$c_{pl} \leq 32,2 \frac{J}{mol K} \quad (30)$$

$$P_{si} \geq 1,4 \text{ bar} \quad (31)$$

$$P_{si} \leq 14 \text{ bar} \quad (32)$$

## 2.12 Impacto ambiental y toxicidad de los refrigerantes

### 2.12.1 Generalidades

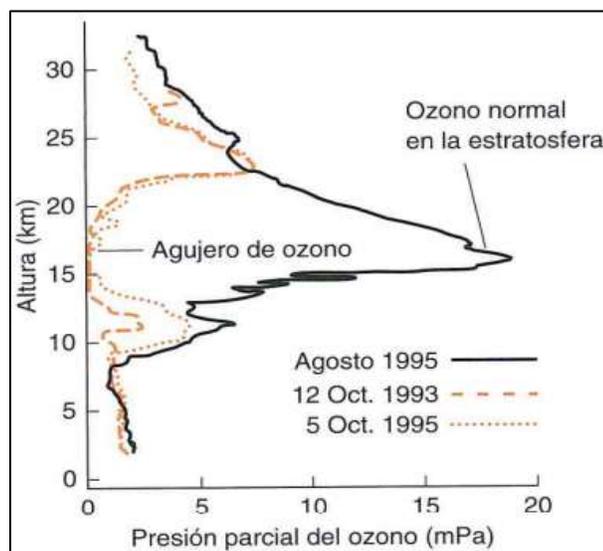
Como lo indica Harris (2003), el ozono ( $O_3$ ) en la estratósfera se forma por acción de la radiación ultravioleta solar ( $h\nu$ ) sobre el  $O_2$  como se indica en las expresiones (33) y (34). El ozono es importante debido a que absorbe la radiación ultravioleta, que es la principal responsable de quemaduras y cáncer en la piel



El Servicio de Inspección Británico de la Antártida del año de 1885 informó que el ozono total en la estratosfera de la Antártida había disminuido en aproximadamente un 50% al inicio de la primavera, en relación con los niveles observados en los 20 años anteriores. Observaciones hechas desde tierra, aire y satélites mostraron que el agujero de ozono tiene lugar sólo al principio de la primavera (ver figura 2), y que cada vez empeora (Harris, 2003).

## Figura 2

Formación del agujero en la capa de ozono



Nota. Tomado de *Análisis químico cuantitativo* (Sexta ed.) (p.12), por Harris, D. C., 2003, Reverté S.A.

### 2.12.2 Impacto de los refrigerantes en la capa de ozono

La mejor explicación de este fenómeno se relaciona con los clorofluorocarburos, como el freón-12 ( $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ), procedentes de las correspondientes aplicaciones, por ejemplo, frigoríficos y acondicionadores de aire, o fugas de este mismo compuesto. Estos compuestos de larga vida, que no se encuentran en la naturaleza, se difunden a la estratosfera donde catalizan la descomposición del ozono de acuerdo con las siguientes expresiones (Harris, 2003):



en donde (35) representa la formación fotoquímica de Cl y las expresiones (36) a (38) evidencian la destrucción catalítica del ozono, adicionalmente, el Cl producido en (38) vuelve a reaccionar en (36), de modo que un único átomo de Cl puede destruir más de  $1 \times 10^5$  moléculas de  $O_3$ . La cadena termina cuando el Cl o el ClO reaccionan con hidrocarburos o con  $NO_2$ , para formar HCl o  $ClONO_2$  respectivamente (Harris, 2003).

### **2.12.3 La crisis del ozono y su impacto en la industria**

La crisis del ozono ha ocasionado una gran agitación en la industria de la refrigeración y el aire acondicionado, y ha generado un análisis crítico de los refrigerantes actuales. A mitad de la década de 1970 se reconoció que los CFC permitían más radiación ultravioleta en la atmósfera de la Tierra, ya que destruyen la capa protectora de ozono y por lo tanto contribuyen al efecto invernadero que a su vez ocasiona el calentamiento global. En consecuencia, el uso de algunos CFC se ha prohibido por medio de tratados internacionales. Los CFC completamente halogenados (como el R-11, R-12 y R-115) son responsables de la mayor parte del daño de la capa de ozono. Los refrigerantes no completamente halogenados como el R-22 tienen cerca de 5 por ciento de la capacidad destructiva del ozono que posee el R-12. En la actualidad, se están desarrollando refrigerantes favorables a la capa de ozono, que protejan a la Tierra de los dañinos rayos ultravioleta. El refrigerante R-12 fue en gran parte reemplazado por el recientemente desarrollado R-134a, libre de cloro (Cengel & Boles, 2012).

La producción de R-12 cesó en Estados Unidos en 1995, y el R-22 fue eliminado posteriormente. Se está empleando el R-134a y ciertas mezclas (que no atentan contra la capa de ozono) en remplazo de los compuestos clorados. El R-410A es una popular mezcla 50/50 de R-32 y R-125 que comienza a sustituir al R-22. Todos estos cambios permiten cumplir con normas de protección del medio ambiente (Plazas, 2012).

### **2.12.4 Medidas ambientales para el uso de refrigerantes**

Actualmente, la Agencia de Protección Ambiental (USEPA, por sus siglas en inglés), tiene en efecto la legislación llamada Clean Air Act Amendment de 1990 que, entre otras cosas, legisla para la eliminación de la producción de los CFC en territorio de los Estados Unidos, al igual que su uso, manejo y disposición. Bajo el título VI de esta reglamentación, está prohibido el descargar intencionalmente el CFC en el curso de mantenimiento, servicio, reparación y disposición de aire acondicionado o equipos de

refrigeración. En los Estados Unidos es ilegal la manufactura de CFC y para poder usarlos y disponer de ellos se necesitan licencias especiales (Plazas, 2012).

## **2.13 Mercado nacional e internacional de los refrigerantes**

### **2.13.1 Mercado internacional**

El mercado actual se ha visto influenciado por la incursión de productos importados, muchos de ellos con características y normas que nuestra localidad no lo requiere. La durabilidad del refrigerante en los automóviles y la composición química que exigen las empresas ensambladoras son puntos importantes de decisión al momento de realizar la compra de refrigerante. Esto ha obligado a los dueños de vehículos a tener preferencia por productos económicos que no son de buena calidad y no cumplen con las normas ni requerimientos de los fabricantes de automotores, es por esto que resultan económicos, esto nos lleva a 2 características muy importantes que se va a tomar en cuenta, la calidad y precio (Scacco, 2016).

### **2.13.2 Mercado nacional**

Como lo expone Scacco (2016) actualmente en el Ecuador se distribuyen marcas de refrigerantes como: Abro, Prestone, Freezetone, Bosch, Simonize, Bardahl, Motorex, Acdelco, Frixide; son importados y reconocidas en el mercado donde los consumidores se inclinan por la marca al momento de decidir qué refrigerante poner en sus vehículos no optando por los requerimientos que la topografía y el clima de acuerdo con nuestras condiciones locales, por altura o por temperatura (Scacco, 2016). En el Ecuador no existen empresas que fabriquen refrigerantes, únicamente se abastece de este producto de importaciones, principalmente de empresas estadounidenses.

## **2.14 Algoritmo de solución GRG no lineal**

La herramienta computacional Excel tiene usos variados, puede usarse como una simple calculadora, como un organizador de información, incluso puede usarse para resolver problemas complejos con gran cantidad de datos (Mendoza, Trasviña, & Gutiérrez, 2018).

Cuando se emplea la herramienta Solver de Excel en el caso de la programación no lineal, es preciso usar el algoritmo GRG no lineal (gradiente reducido generalizado por sus siglas en inglés) cuyo funcionamiento básico es partir de una solución canónica conocida como punto de partida desde el cual se irá desplazando hacia una solución óptima dentro de la región factible hasta que ya no exista ninguna solución mejor, dicho

desplazamiento tiene lugar cada vez que se ejecute el algoritmo y termina cuando se ha encontrado una solución que satisfaga todas las condiciones del problema planteado (Mendoza, Trasviña, & Gutiérrez, 2018)

### **2.15 Algoritmo genético de Matlab**

El algoritmo genético (“ga” por sus siglas en inglés) es un método que proporciona soluciones a problemas de optimización restringidos o no, con variables continuas o discretas (Gilat, 2005). Su principio de funcionamiento se basa en un proceso de selección natural que imita la evolución biológica, es decir, a diferencia de un algoritmo convencional que parte de un punto inicial para empezar a obtener soluciones factibles el algoritmo genético modifica repetidamente una población de soluciones individuales factibles y en cada paso de avance selecciona soluciones individuales aleatorias para engendrar nuevas soluciones factibles hasta eventualmente obtener la mejor solución que satisfaga todas las condiciones de un problema planteado (Gilat, 2005).

## Capítulo III

### 3. Metodología

#### 3.1 Búsqueda de funciones objetivo

##### 3.1.1 Aspectos básicos

En esta sección se procede con una revisión exhaustiva de artículos científicos, libros y patentes que contengan información acerca del diseño de refrigerantes, propiedades físicas de las moléculas, programación no lineal, sus aplicaciones y principios de la estructura molecular. El propósito de este paso es relacionar toda la información encontrada para llegar a determinar una función objetivo que pueda ser optimizada de acuerdo con los requerimientos de las propiedades físicas de las moléculas refrigerantes candidatas. Además, es indispensable hallar información que permita plantear restricciones para la conformación de una molécula como las expuestas en el trabajo de Duvedi y Achenie (1996) que posteriormente serán implementadas en un programa de enteros mixtos no lineal.

##### 3.1.2 Ecuaciones consideradas

Se considera un conjunto amplio de funciones que son probadas en la etapa de optimización, para cada función se obtiene el valor de la función objetivo y los valores de las propiedades físicas consideradas, en este, caso la entalpía de vaporización  $\Delta H_v$ , calor específico de líquido  $C_{pl}$ , presión de vapor a la menor temperatura  $P_s(-1,1\text{ }^\circ\text{C})$  y presión de vapor a la mayor temperatura  $P_s(43,3\text{ }^\circ\text{C})$  los cuales se presentan en el capítulo 4 de este trabajo.

A continuación, en la Tabla 6 se presenta el conjunto de ecuaciones que fueron exploradas a lo largo de la investigación del presente trabajo de titulación, las cuáles relacionan las propiedades físicas antes mencionadas para obtener diferentes resultados.

Tabla 6

Ecuaciones evaluadas en el proceso de optimización

Función	Función	Función	Función	Función	Función
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	$\tan\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s^2(43,3 \text{ °C})}{P_s^3(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1 \text{ °C})}}$	$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	$\frac{P_s^2(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s^2(43,3 \text{ °C})}{P_s^2(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{\sqrt{P_s(43,3 \text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1 \text{ °C})}}$	$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	$\frac{P_s^3(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s^3(43,3 \text{ °C})}{P_s^3(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(-1,1 \text{ °C})}{P_s(43,3 \text{ °C})}$	$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s^2(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{\sqrt{P_s(43,3 \text{ °C})}}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(-1,1 \text{ °C})}{P_s(43,3 \text{ °C})}$	$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$
$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$
= 1,0	= 1,1	= 1,2	= 1,3	= 1,4	= 1,5
$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$	$\frac{P_s(43,3 \text{ °C})}{P_s(-1,1 \text{ °C})}$
= 1,6	= 1,7	= 1,8	= 1,9	= 2,0	= 2,1





Función	Función	Función	Función	Función	Función
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$					
= 0,63	= 0,64	= 0,65	= 0,66	= 0,67	= 0,68
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$					
= 0,69	= 0,7	= 0,71	= 0,72	= 0,73	= 0,74
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$					
= 0,75	= 0,76	= 0,77	= 0,78	= 0,79	= 0,8
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$					
= 0,81	= 0,82	= 0,83	= 0,84	= 0,85	= 0,86
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$		
= 0,87	= 0,88	= 0,89	= 0,9		

*Nota. Se analiza un total de doscientas treinta y cuatro funciones.*

### **3.1.3 Prueba y optimización de funciones**

Para evaluar las funciones y realizar todos los cálculos de las propiedades físicas y las contribuciones grupales se colocan correctamente todos los datos en una hoja de cálculo de Excel la cuál será la base para obtener todos los resultados de este trabajo, todo esto se muestra en las Tablas 7 y 8 respectivamente

**Tabla 7***Datos de partida para el diseño de refrigerantes*

Grupo $n_j$	Valencia $v_j$	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ $\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}\right)$	$T_b$ (K)	$n_i$	$C_{pl}$ $\left(\frac{\text{J}}{\text{mol K}}\right)$	$M$ $\left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)$	Nº grupos
-CH3	1	0,0141	-0,001	65	23,58	4	36,8	15,04	1
>CH2	2	0,0189	0	56	22,88	3	30,4	14,03	1
>CH-	3	0,0164	0,002	41	21,74	2	21	13,02	1
>C<	4	0,0067	0,0043	27	18,25	1	7,36	12,01	1
-OH	1	0,0741	0,0112	28	92,88	2	44,8	17,01	1
-O-	2	0,0168	0,0015	18	22,42	1	35	16	1
-NH2	1	0,0243	0,0109	38	73,23	3	58,6	16,03	1
>NH-	2	0,0295	0,0077	35	50,17	2	43,9	15,02	1
>N-	3	0,0169	0,0074	9	11,74	1	31	14,01	1
-S-	2	0,0119	0,0049	54	68,78	1	33	32,07	1
-SH	1	0,0031	0,0084	63	63,56	2	44,8	33,08	1
-F	1	0,0111	-0,006	27	-0,03	1	17	19	1
-Cl	1	0,0105	-0,005	58	38,13	1	36	35,45	1

*Nota.* Tomado de *Product and Process Design Principles*. (Tercera ed.) (p.71) por Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009), John Wiley & Sons, Inc.

**Tabla 8***Contribuciones grupales de las especies consideradas*

Grupo $n_j$	$n_j^*T_c$	$n_j^*P_c$	$n_j^*V_c$	$n_j^*T_b$	$n_i^*n_j$	$n_j^*C_{pl}$	$n_j^*M$	$n_j^*(2-v_i)$	$n_j^*(v_i-1)+2$
-CH3	0,0141	-0,0012	65	23,58	4	36,8	15,04	1	2
>CH2	0,0189	0	56	22,88	3	30,4	14,03	0	3
>CH-	0,0164	0,002	41	21,74	2	21	13,02	-1	4
>C<	0,0067	0,0043	27	18,25	1	7,36	12,01	-2	5
-OH	0,0741	0,0112	28	92,88	2	44,8	17,01	1	2
-O-	0,0168	0,0015	18	22,42	1	35	16	0	3
-NH2	0,0243	0,0109	38	73,23	3	58,6	16,03	1	2
>NH-	0,0295	0,0077	35	50,17	2	43,9	15,02	0	3
>N-	0,0169	0,0074	9	11,74	1	31	14,01	-1	4
-S-	0,0119	0,0049	54	68,78	1	33	32,07	0	3
-SH	0,0031	0,0084	63	63,56	2	44,8	33,08	1	2
-F	0,0111	-0,0057	27	-0,03	1	17	19	1	2
-Cl	0,0105	-0,0049	58	38,13	1	36	35,45	1	2
	0,2543	0,0465	519	507,33	24	439,66	251,77	2	37

### 3.2 Uso de Solver de Excel

#### 3.2.1 Generalidades

Una vez planteadas las funciones objetivo que serán exploradas y las restricciones acordes al problema, se procede con la colocación de estas en una hoja de cálculo de Excel junto con los datos de propiedades físicas de los grupos moleculares considerados para que puedan ser asociados y procesados en la búsqueda de resultados. Los cálculos se realizan en base a las ecuaciones y restricciones indicadas en el capítulo 2 de este trabajo.

#### 3.2.2 Consideraciones

A través de todo el desarrollo de este proyecto se realiza modificaciones en las hojas de cálculo para ampliar las posibilidades de obtener nuevos resultados, cada una de estas modificaciones se presenta oportunamente con el nombre de "configuración". Cada configuración proporciona resultados diferentes en el valor de optimización de las funciones y en consecuencia una estructura molecular diferente. El propósito de las modificaciones es obtener moléculas y funciones objetivo que no hayan sido reportadas en la literatura.

### 3.3 Configuraciones

#### 3.3.1 Configuración 1

En esta primera configuración se evalúa todas las funciones con todas las restricciones y ecuaciones planteadas en el apartado 2.11 de este trabajo, la ventana de solver en la que constan dichos planteamientos se muestra en la Figura 3.

**Figura 3**

Parámetros de solver para la configuración 1

Establecer objetivo:

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

\$J\$3:\$J\$15 = entero
\$J\$3:\$J\$15 >= 0
\$J\$3:\$J\$15 <= 7
\$J\$18 <= 1
\$J\$18 >= 0
\$J\$17 <= 10
\$J\$16 >= \$I\$31
\$J\$16 >= \$I\$32
\$J\$16 >= \$I\$33
\$J\$16 >= 2
\$H\$34 = 2
\$J\$16 >= \$I\$28
\$J\$16 >= \$I\$27

Una vez que se evalúan todas las funciones propuestas, se agrupa los resultados previos en la Tabla 10 de los resultados, es importante indicar que no todas las funciones son optimizables bajo los parámetros configurados en la ventana de solver.

#### 3.3.2 Configuración 2

Todas las configuraciones que se presentan en adelante siguen el mismo modelo de la configuración 1, las modificaciones que se realicen en cada configuración se detallan en la misma.

Para esta configuración se extiende la región de búsqueda modificando la restricción que compara el límite de la presión de vapor a la menor temperatura  $P_s(1,1^\circ\text{C})$  que ahora debe ser superior o igual a 1 bar, es decir,  $P_s(1,1^\circ\text{C}) \geq 1$  bar. La

ventana de los parámetros de solver con la modificación indicada se presenta en la Figura 4 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 11 de los resultados.

#### Figura 4

##### Parámetros de solver para la configuración 2

*Nota.* A excepción de la celda D52, las condiciones se mantienen igual que en la configuración 1.

### 3.3.3 Configuración 3

Para esta configuración se extiende la región de búsqueda modificando la restricción representada en la ecuación (28) que corresponde a la coexistencia de los grupos halógeno y nitrógeno en una misma molécula (ver apartado 2.11.6) y reformulándola de tal manera que los grupos nitrógeno se mantengan en el rango de 0 a 1 y los grupos halógenos puedan existir libremente, estas consideraciones se representan en las ecuaciones (39), (40) y (41) respectivamente. Adicionalmente se fija el límite de la presión de vapor a la menor temperatura en 1,4 bar.

$$f_{max} (n_{NH_2} + n_{NH} + n_N) \leq 1 \quad (39)$$

$$f_{max} (n_{NH_2} + n_{NH} + n_N) \geq 0 \quad (40)$$

$$n_R \geq 0 \quad (41)$$

en donde  $n_R$  representa la cantidad de grupos halógenos presentes en la molécula. Los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 13 y la ventana de solver en la Figura 5.

**Figura 5**

*Parámetros de solver para la configuración 3*

Establecer objetivo:  ↑

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:  ↑

Sujeto a las restricciones:

- SKS16 >= SJ\$27
- SJ\$34 = 2
- SKS16 >= 2
- SKS16 >= SJ\$33
- SKS16 >= SJ\$32
- SKS16 >= SJ\$31
- SKS17 <= 10
- SKS18 >= 0
- SKS18 <= 1
- SKS19 >= 0
- SKS3:SKS15 <= 7
- SKS3:SKS15 >= 0
- SKS3:SKS15 = entero

*Nota.* A excepción de las modificaciones descritas, todas las condiciones se mantienen igual que las anteriores configuraciones.

### 3.3.4 Configuración 4

Para esta configuración se extiende la región de búsqueda modificando la celda que corresponde al límite de la presión de vapor a la menor temperatura a 1 bar, es decir,  $P_s(-1,1\text{ °C}) \geq 1\text{ bar}$ , las restricciones y consideraciones de la configuración 3 se mantienen. La ventana de los parámetros de solver se presenta en la Figura 6 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 15.

**Figura 6**

Parámetros de solver para la configuración 4

Establecer objetivo:

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

- \$J\$3:\$J\$15 >= 0
- \$D\$52 >= 1
- \$D\$47 <= 32,2
- \$J\$3:\$J\$15 = entero
- \$J\$3:\$J\$15 <= 7
- \$J\$19 >= 0
- \$J\$16 >= \$I\$30
- \$J\$18 >= 0
- \$J\$17 <= 10
- \$J\$16 >= 2
- \$J\$18 <= 1
- \$J\$16 >= \$I\$31
- \$J\$16 >= \$I\$33

*Nota.* La celda D52 indica la modificación considerada.

### 3.3.5 Configuración 5

Para esta configuración se extiende la región de búsqueda agregando grupos de carbono que pueden formar enlaces dobles (ver Tabla 9) y fijando el límite de la presión de vapor a la menor temperatura a 1,4 bar, es decir,  $P_s(-1,1\text{ °C}) \geq 1,4\text{ bar}$ .

Adicionalmente se omite la restricción de formación de dobles enlaces (ecuación 25). La ventana de los parámetros de solver se presenta en la Figura 7 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 10.

**Tabla 11**

Adición de grupos de carbono para la configuración 5

Grupo $n_j$	Valencia $v_j$	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ $\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}\right)$	$T_b$ (K)	$n_i$	$C_{pl}$ $\left(\frac{\text{J}}{\text{mol K}}\right)$	$M$ $\left(\frac{\text{g}}{\text{mol}}\right)$
-CH3	1	0,0141	-0,001	65	23,58	4	36,8	15,04
>CH2	2	0,0189	0	56	22,88	3	30,4	14,03
>CH-	3	0,0164	0,002	41	21,74	2	21	13,02
>C<	4	0,0067	0,0043	27	18,25	1	7,36	12,01
-OH	1	0,0741	0,0112	28	92,88	2	44,8	17,01
-O-	2	0,0168	0,0015	18	22,42	1	35	16
-NH2	1	0,0243	0,0109	38	73,23	3	58,6	16,03
>NH-	2	0,0295	0,0077	35	50,17	2	43,9	15,02
>N-	3	0,0169	0,0074	9	11,74	1	31	14,01
-S-	2	0,0119	0,0049	54	68,78	1	33	32,07
-SH	1	0,0031	0,0084	63	63,56	2	44,8	33,08
-F	1	0,0111	-0,006	27	-0,03	1	17	19
-Cl	1	0,0105	-0,005	58	38,13	1	36	35,45
CH2=	1	0,0113	-0,0028	56	18,18	3	21,8	14,03
-CH=	2	0,0129	-0,0006	46	24,96	2	21,3	13,02
>C=	3	0,0117	0,0011	38	24,14	1	15,9	12,01

Nota. Las tres últimas filas corresponden a los grupos añadidos. Tomado de *Estimation of pure-component properties from group-contributions* (p.236), por Joback, K. G., & Reid, R. C. (1987), *Chemical Engineering Communications*, 233-243.

**Figura 7**

Parámetros de solver para la configuración 5

Establecer objetivo:

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

\$J\$3:\$J\$18 >= 0
\$J\$3:\$J\$18 <= 7
\$J\$3:\$J\$18 = entero
\$D\$53 <= 32,2
\$J\$19 >= 2
\$J\$21 >= 0
\$J\$22 >= 0
\$J\$19 <= 14
\$J\$21 <= 1
\$J\$20 <= 10
\$D\$54 >= 18400
\$D\$59 <= 14
\$D\$58 >= 1,4

*Nota.* A excepción de la restricción que asocia la presión de vapor a la menor temperatura (celda D58) las condiciones se mantienen igual que en la configuración 4.

### 3.3.6 Configuración 6

En esta configuración se modifica la región de búsqueda fijando el límite de la presión de vapor a la menor temperatura a 1 bar, es decir,  $P_s(-1,1\text{ °C}) \geq 1\text{ bar}$ . Todas las condiciones y restricciones se mantienen igual que en la configuración 5. La modificación de la ventana de los parámetros de solver se presentan en la Figura 8 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 20 de la sección correspondiente.

**Figura 8**

*Parámetros de solver para la configuración 6*

Establecer objetivo:

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

\$J\$3:\$J\$18 = entero
\$D\$53 <= 32,2
\$J\$21 <= 1
\$J\$21 >= 0
\$J\$19 >= 2
\$J\$20 <= 10
\$J\$22 >= 0
\$J\$19 <= 14
\$J\$3:\$J\$18 >= 0
\$D\$58 >= 1
\$D\$54 >= 18400
\$D\$59 <= 14
\$H\$40 = 2

*Nota.* La celda D58 es la que corresponde a la presión de vapor a la menor temperatura para esta configuración y es la que se modifica para la resolución.

### 3.3.7 Configuración 7

En esta configuración se modifica la región de búsqueda fijando el límite de la presión de vapor a la menor temperatura a 1,4 bar, es decir,  $P_s(-1,1\text{ °C}) \geq 1,4\text{ bar}$ . Todas las condiciones y restricciones se mantienen igual que en la configuración 6. Adicionalmente, se añade una nueva restricción (ecuación 42) que limita a 2 la existencia de los grupos carbono que forman doble enlace. La ventana de los parámetros de solver se presentan en la Figura 9 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 22 respectivamente.

$$\sum n_{dj} = 2 \quad (42)$$

donde  $n_{dj}$  representa la cantidad de cada grupo carbono que puede formar doble enlace.

**Figura 9**

*Adición de grupos de carbonos para la configuración 7*

Establecer objetivo:

Para:  Máx  Mín  Valor de:

Cambiando las celdas de variables:

Sujeto a las restricciones:

- \$J\$3:\$J\$18 >= 0
- \$K\$19 = 2
- \$J\$3:\$J\$18 <= 7
- \$J\$3:\$J\$18 = entero
- \$D\$53 <= 32,2
- \$J\$21 <= 1
- \$J\$22 >= 0
- \$J\$19 <= 14
- \$J\$16 <= 1
- \$J\$21 >= 0
- \$J\$20 <= 10
- \$J\$19 >= 2
- \$D\$54 >= 18400

*Nota.* La celda K19 representa la sumatoria de los grupos carbono que forman doble enlace.

### 3.3.8 Configuración 8

En esta configuración se modifica la región de búsqueda fijando el límite de la presión de vapor a la menor temperatura a 1 bar, es decir,  $P_s(-1,1\text{ °C}) \geq 1\text{ bar}$ . Todas las condiciones y restricciones se mantienen igual que en la configuración 7. La ventana de los parámetros de solver se presentan en la Figura 10 y los resultados de la evaluación de las funciones consideradas se muestran en la Tabla 21.

**Figura 10**

*Datos de entrada para la configuración 8*

Establecer objetivo: SLS29

Para:  Máx  Mín  Valor de: 10

Cambiando las celdas de variables: \$J\$3:\$J\$18

Sujeto a las restricciones:

- \$J\$3:\$J\$18 = entero
- SD\$53 <= 32,2
- \$J\$19 <= 14
- \$J\$21 <= 1
- \$J\$22 >= 0
- \$J\$20 <= 10
- \$J\$21 >= 0
- \$J\$19 >= 2
- \$J\$16 <= 1
- SD\$54 >= 18400
- SD\$58 >= 1
- SD\$59 <= 14
- SH\$40 = 2

Botones: Agregar, Cambiar, Eliminar, Restablecer todo, Cargar/Guardar

*Nota.* La celda D58 representa la modificación realizada en esta configuración.

### 3.4 Programación en Matlab

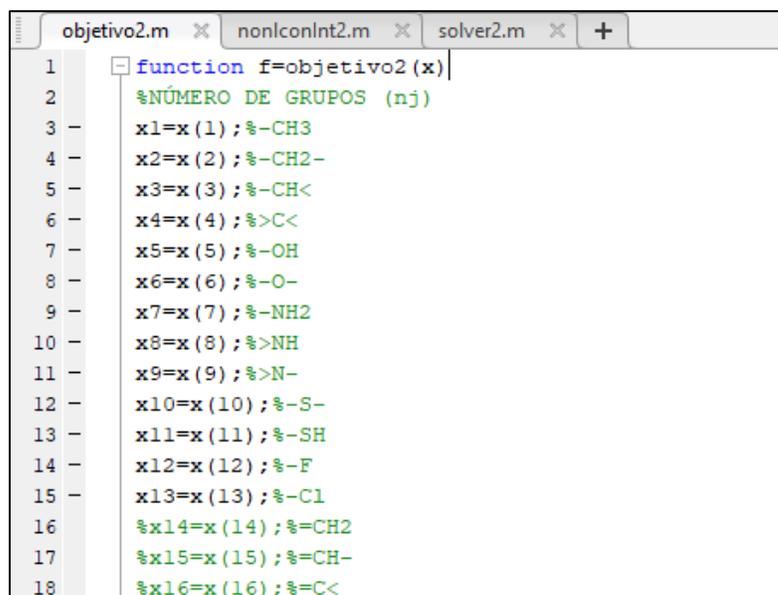
En esta sección se presenta el procedimiento seguido para llevar a cabo la formulación del problema en el programa Matlab versión 2015 mismo que tiene la correspondiente licencia de uso proporcionada por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE. El código completo para cada script usado en la resolución del problema se adjunta en el Anexo 1 de este trabajo.

#### 3.4.1 Asignación de Variables

En este apartado se plantea inicialmente un vector  $x$  que contiene a las variables consideradas en cada caso, siendo un total de 13 las que contiene a los grupos principales considerados en este trabajo pero que pueden extenderse a 16 para incluir los grupos carbono que pueden formar enlaces dobles, todas estas variables se disponen en un solo script que contendrá a la función objetivo, las variables, todos los cálculos de propiedades y contribuciones grupales. Este planteamiento se presenta en la Figura 11.

**Figura 11**

*Planteamiento de variables en Matlab*



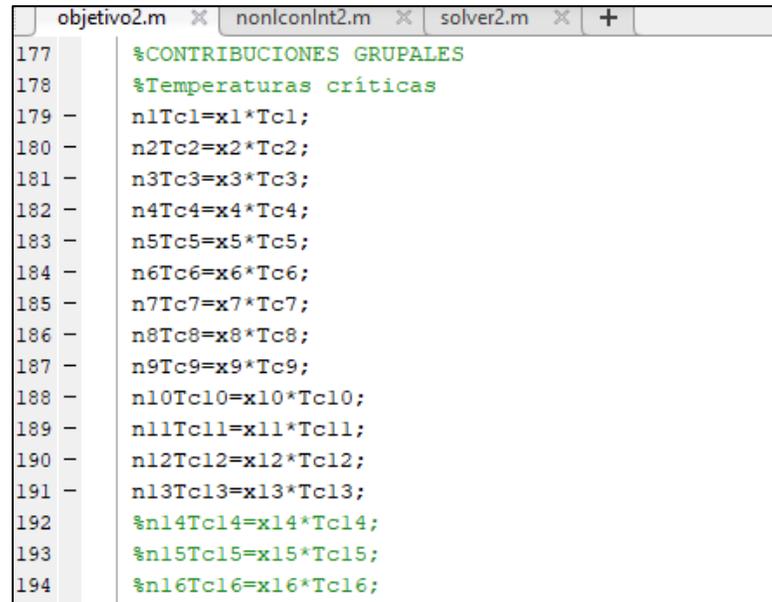
```
objetivo2.m x nonconInt2.m x solver2.m x +
1 function f=objetivo2(x)
2 %NÚMERO DE GRUPOS (nj)
3 x1=x(1);% -CH3
4 x2=x(2);% -CH2-
5 x3=x(3);% -CH<
6 x4=x(4);% >C<
7 x5=x(5);% -OH
8 x6=x(6);% -O-
9 x7=x(7);% -NH2
10 x8=x(8);% >NH
11 x9=x(9);% >N-
12 x10=x(10);% -S-
13 x11=x(11);% -SH
14 x12=x(12);% -F
15 x13=x(13);% -Cl
16 %x14=x(14);% =CH2
17 %x15=x(15);% =CH-
18 %x16=x(16);% =C<
```

### **3.4.2 Cálculos previos**

Una vez ingresadas las variables necesarias, se procede a plantear los cálculos de contribuciones grupales y propiedades físicas del problema (ver Figura 12), se toma como base las hojas de cálculo para cada una de las configuraciones presentadas en este capítulo.

**Figura 12**

Cálculo de propiedades y contribuciones grupales en Matlab



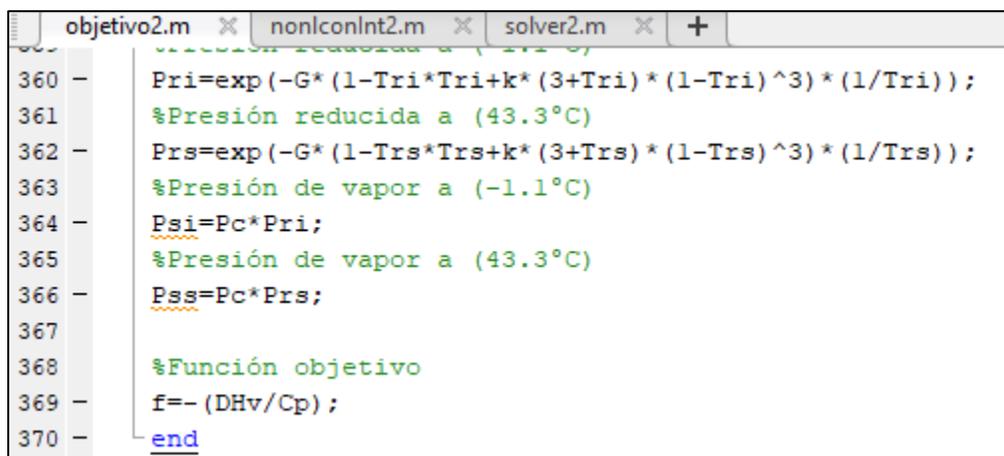
```
objetivo2.m x nonconInt2.m x solver2.m x +
177 %CONTRIBUCIONES GRUPALES
178 %Temperaturas críticas
179 - n1Tc1=x1*Tc1;
180 - n2Tc2=x2*Tc2;
181 - n3Tc3=x3*Tc3;
182 - n4Tc4=x4*Tc4;
183 - n5Tc5=x5*Tc5;
184 - n6Tc6=x6*Tc6;
185 - n7Tc7=x7*Tc7;
186 - n8Tc8=x8*Tc8;
187 - n9Tc9=x9*Tc9;
188 - n10Tc10=x10*Tc10;
189 - n11Tc11=x11*Tc11;
190 - n12Tc12=x12*Tc12;
191 - n13Tc13=x13*Tc13;
192 %n14Tc14=x14*Tc14;
193 %n15Tc15=x15*Tc15;
194 %n16Tc16=x16*Tc16;
```

### 3.4.3 Planteamiento de funciones objetivo

Como se puede apreciar en la Figura 13, una vez planteados todos los cálculos previos, se procede a fijar la función objetivo deseada al final del script, finalizando así el primer archivo necesario para la resolución del problema. Es preciso recordar que se puede modificar la función objetivo en el script tanto como se necesite, además, debido a que en el programa Matlab únicamente se puede minimizar funciones, se coloca un signo negativo a la función si el objetivo es maximizarla.

Figura 13

Planteamiento de la función objetivo en Matlab



```

objetivo2.m x nonconInt2.m x solver2.m x +
360 - Pri=exp(-G*(1-Tri*Tri+k*(3+Tri)*(1-Tri)^3)*(1/Tri));
361 - %Presión reducida a (43.3°C)
362 - Prs=exp(-G*(1-Trs*Trs+k*(3+Trs)*(1-Trs)^3)*(1/Trs));
363 - %Presión de vapor a (-1.1°C)
364 - Psi=Pc*Pri;
365 - %Presión de vapor a (43.3°C)
366 - Pss=Pc*Prs;
367
368 - %Función objetivo
369 - f=-(DHv/Cp);
370 - end

```

*Nota.* La función mostrada en esta figura lleva un signo negativo debido a que el objetivo es maximizarla.

#### 3.4.4 Planteamiento de restricciones no lineales

Para este planteamiento se crea un nuevo script de función en el cual se coloca nuevamente las variables y cálculos realizados en la sección 3.4.3 como se muestra en la Figura 14. Una vez ubicados todos los cálculos mencionados se finaliza el script declarando las restricciones en lenguaje de programación de acuerdo con lo expuesto en el capítulo 2 de este trabajo (ver figura 15).

Figura 14

Planteamiento de la función restricción en Matlab

```

objetivo2.m x nonlconInt2.m x solver2.m x +
1 function [C,Ceq]=nonlconInt2(x)
2 %variables
3 %NÚMERO DE GRUPOS (nj)
4 x1=x(1); %-CH3
5 x2=x(2); %-CH2-
6 x3=x(3); %-CH<
7 x4=x(4); %>C<
8 x5=x(5); %-OH
9 x6=x(6); %-O|
10 x7=x(7); %-NH2

```

*Nota.* C representa las restricciones no lineales de desigualdad y Ceq las restricciones no lineales de igualdad.

Claramente se concluye que las únicas restricciones con ecuaciones no lineales en el problema son las que se exponen en el capítulo 2 y que se muestran a continuación:

$$\Delta H_v \geq 18400 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

$$c_{pl} \leq 32,2 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$$

$$P_s(43,3^\circ\text{C}) \leq 14 \text{ bar}$$

$$P_s(-1,1^\circ\text{C}) \geq 1,4 \text{ bar}$$

Debido a que Matlab únicamente admite restricciones de la forma  $C \leq 0$  y  $Ceq \leq 0$  en el caso de las restricciones de igualdad, se reorganiza y escribe estas restricciones en el lenguaje de Matlab de tal manera que cumplan con el formato de ingreso de datos del programa (ver Figura 15).

Figura 15

Planteamiento de restricciones no lineales en Matlab

```

objetivo2.m x nonlconInt2.m x solver2.m x +
364 %Presión de vapor a (-1.1°C)
365 - Psi=Pc*Pri;
366 %Presión de vapor a (43.3°C)
367 - Pss=Pc*Prs;
368
369 %RESTRICCIONES
370 - C(1)=-DHv+18400;
371 - C(2)=Pss-14;
372 - C(3)=1.4-Psi;
373 - Ceq=[];
374 - end

```

*Nota.* No existen restricciones no lineales de igualdad por lo tanto se escribe un par de corchetes para que el programa interprete la inexistencia de dichas restricciones.

### 3.4.5 Planteamiento de restricciones lineales

En esta sección se escribe todas las restricciones lineales usadas a lo largo del trabajo en función de las variables de decisión del programa ( $x_1$  a  $x_{16}$ ) y luego se transforma dichas restricciones a su forma matricial de la forma  $A \leq b$  donde  $A$  representa la matriz de restricciones en función de las variables de decisión y el vector  $b$  contiene los valores con los cuales se comparan dichas restricciones. Es necesario indicar que en el caso de que cualquier restricción sea diferente de la forma  $A \leq b$  se la opera lo necesario para que esté acorde a los requerimientos. A continuación, se muestra las desigualdades que se usan en las configuraciones 7 y 8 y en la Figura 16 la representación en forma de matriz de dichas desigualdades.

- 1) Sumatoria total de grupos moleculares ( $\sum n_j$ )

$$-x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5 - x_6 - x_7 - x_8 - x_9 - x_{10} - x_{11} - x_{12} - x_{13} - x_{14} - x_{15} - x_{16} \leq -2$$

- 2) Existencia de grupos alcohol, nitrógeno y haluros ( $f_{max}$ )

$$x_5 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{12} + x_{13} \leq 10$$

3) Calor específico del líquido  $c_{pl} = 0,239 * \sum n_j * c_{pl,j}$

$$8,7952x_1 + 7,2656x_2 + 5,019x_3 + 1,75904x_4 + 10,7072x_5 + 8,365x_6 + 14,0054x_7 \\ + 10,4921x_8 + 7,409x_9 + 7,887x_{10} + 10,7072x_{11} + 4,063x_{12} + 8,604x_{13} \\ + 5,2102x_{14} + 5,0907x_{15} + 3,8001x_{16} \leq 32,2$$

4) Existencia del grupo (= CH<sub>2</sub>)

$$x_{14} \leq 1$$

5) Existencia de grupos nitrógeno

$$-x_7 - x_8 - x_9 \leq 0$$

$$x_7 + x_8 + x_9 \leq 1$$

6) Existencia de grupos halógenos

$$-x_{12} - x_{13} \leq 0$$

7) Existencia máxima de grupos moleculares

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12} + x_{13} + x_{14} + x_{15} + x_{16} \\ \leq 14$$

8) Regla del octeto  $\sum_j (2 - v_j) n_j = 2$

$$x_1 - x_3 - 2x_4 + x_5 + x_7 - x_9 + x_{11} + x_{12} + x_{13} + x_{14} - x_{16} \leq 2,00001$$

$$-x_1 + x_3 + 2x_4 - x_5 - x_7 + x_9 - x_{11} - x_{12} - x_{13} - x_{14} + x_{16} \leq 1,99999$$

9) Existencia máxima de grupos con dobles enlaces ( $\sum n_{dj} = 2$ )

$$x_{14} + x_{15} + x_{16} \leq 2,00001$$

$$-x_{14} - x_{15} - x_{16} \leq 1,99999$$

Es importante mencionar que la función que se usa para resolver este problema en Matlab no admite restricciones lineales de igualdad (=), es por esta razón que las restricciones correspondientes al numeral 8 y 9 se escriben entre los límites de 1,99999 y 2,00001.

Figura 16

Planteamiento de restricciones lineales en Matlab

```

objetivo3.m x nonconInt3.m x solver3.m x +
1 -   clc;clear
2 -   rng(1,'twister')
3 -   A=[-1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1
4 -       0 0 0 0 1 0 1 1 1 0 0 1 1 0 0 0
5 -       8.7952 7.2656 5.019 1.75904 10.7072 8.365 14.0054 10.4921 7.409 7.887
6 -       0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0
7 -       0 0 0 0 0 0 -1 -1 -1 0 0 0 0 0 0 0
8 -       0 0 0 0 0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0
9 -       0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 -1 0 0 0
10 -      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
11 -      1 0 -1 -2 1 0 1 0 -1 0 1 1 1 1 0 -1
12 -     -1 0 1 2 -1 0 -1 0 1 0 -1 -1 -1 -1 0 1
13 -      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1
14 -      0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1 -1 -1];
15 -   b=[-2;10;32.2;1;0;1;0;14;2.00001;-1.99999;2.00001;-1.99999];

```

*Nota.* Se puede modificar la matriz A y el vector b de acuerdo con las restricciones que se necesite plantear.

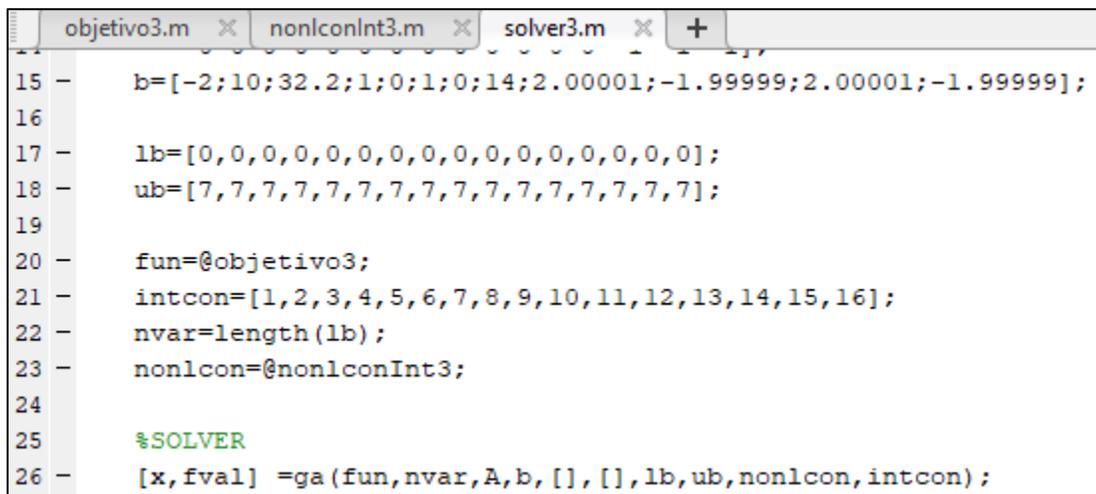
### 3.4.6 Solución del problema con MINLP

Después de tener listos los scripts de la función objetivo y de restricciones no lineales se crea un nuevo script para la resolución del problema que en este trabajo se denomina “solver” y es en este archivo en el cual se guardan las restricciones lineales antes descritas (ver Figura 16). El programa base se puede editar de acuerdo con las necesidades de cálculo, es decir, se puede modificar parámetros como el límite inferior de la presión de vapor, el calor específico, agregar, quitar o modificar restricciones, añadir u omitir grupos moleculares, etc.

La única función que permite resolver problemas de MINLP en Matlab es la función “ga” (genetic algorithm por sus siglas en inglés) la cuál necesita de la existencia de los parámetros mostrados en la Figura 17 para que pueda ejecutarse sin problemas.

Figura 17

Solución del problema con MINLP en Matlab



```

objetivo3.m x nonlconInt3.m x solver3.m x +
15 -     b=[-2;10;32.2;1;0;1;0;14;2.00001;-1.99999;2.00001;-1.99999];
16
17 -     lb=[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0];
18 -     ub=[7,7,7,7,7,7,7,7,7,7,7,7,7,7,7];
19
20 -     fun=@objetivo3;
21 -     intcon=[1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16];
22 -     nvar=length (lb) ;
23 -     nonlcon=@nonlconInt3;
24
25 -     %SOLVER
26 -     [x,fval] =ga (fun,nvar,A,b, [], [], lb,ub,nonlcon,intcon) ;

```

Nota. Esta figura es la continuación de la Figura 16.

Los vectores “*lb*” y “*ub*” representan los límites inferior y superior, respectivamente, de las variables de decisión ( $x_1$  a  $x_{16}$ ) en tanto que el vector “*intcon*” asegura que los valores de las variables de decisión sean enteros positivos.

Una vez que se ejecuta el programa, los valores de las variables de decisión se guardan en el vector “*x*” (ver Figura 18) y el valor de la función objetivo en la matriz “*fval*”. Los corchetes en la línea 26 de código de la función “*ga*” indican la inexistencia de la matriz de restricciones de igualdad  $A_{eq}$  y por ende también la ausencia del vector de valores  $b_{eq}$ .

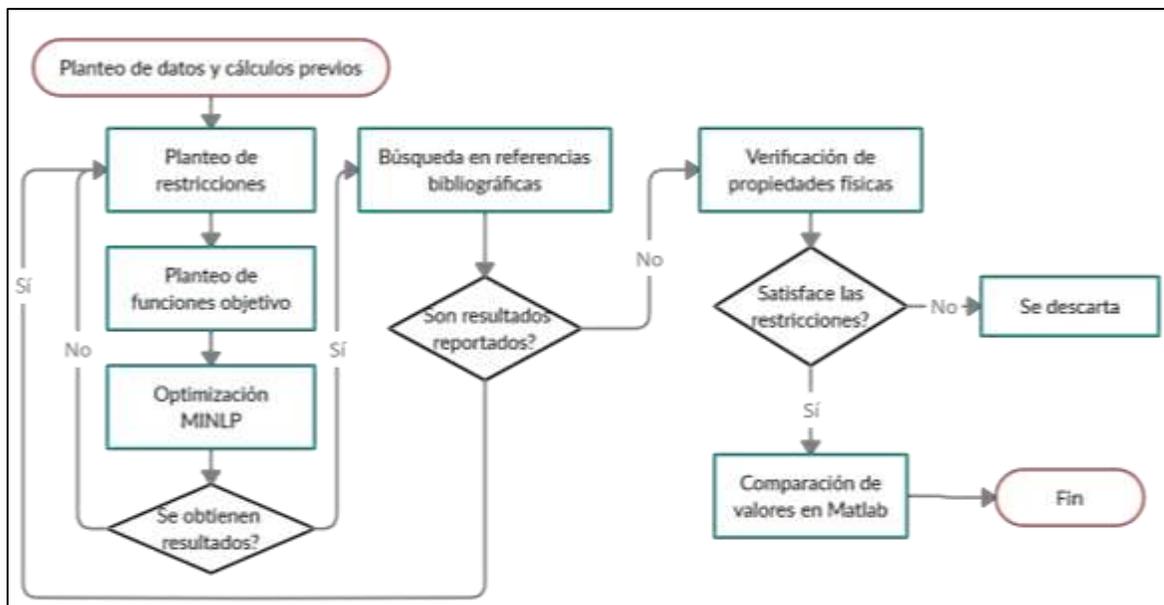
**Figura 18**

*Resultados de la resolución del MINLP en Matlab*

Name ▲	Value
A	12x16 double
b	12x1 double
fun	@objetivo3
fval	-0.8764
intcon	1x16 double
lb	1x16 double
nonlcon	@nonlconInt3
nvar	16
ub	1x16 double
x	1x16 double

*Nota.* Para observar los resultados de la optimización se abre el vector x.

### 3.4.7 Diagrama de flujo de la metodología



## Capítulo IV

### 4. Resultados y discusión

#### 4.1 Análisis de resultados

En el desarrollo de este trabajo se obtuvo un total de treinta y nueve moléculas diferentes que cumplen con las restricciones propuestas para este problema (ver Tabla 26) y que son estructuralmente factibles, posteriormente se realiza una búsqueda y comparación de las moléculas presentadas en artículos científicos y libros relacionados al estudio para determinar si las mismas ya han sido reportadas o no como moléculas candidatas a refrigerantes.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para cada una de las configuraciones indicadas en el capítulo 3 de este trabajo.

**Tabla 20**

*Resultados de la optimización para la configuración 1*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,0006623	HSF
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	1509,7172	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	102,21373	HSF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	10,1100807	HSF
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	38,855080	HSF
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	6,920267	HSF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	1413,9849	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	101,7473	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	6,9181	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	386,0275	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	92222,3567	CH <sub>3</sub> CL
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,999584777	CH <sub>3</sub> OF
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	0,983484648	HSF

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,000854427	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-0,180991567	HSF
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,180991567	HSF
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999781	HSF
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999408	CH <sub>3</sub> OF
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,874924938	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-34,69035695	CH <sub>3</sub> OF
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,000854427	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	26,01255334	HSF
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	9803177,935	HSF
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	5,100250321	HSF
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	1,974927456	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,256388006	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	0,240665987	HSF
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,58115E-08	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009783421	HSF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	4,38742E-07	HSF
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,098911179	HSF
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,02573666	HSF
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	1,33211E-12	HSF
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,144503089	HSF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	2,90612E-10	HSF
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000707221	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009828267	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,144547934	HSF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000217195	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,002590489	HSF
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,78698E-08	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	4,40753E-07	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	6,48231E-06	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	9,74022E-09	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,51436E-07	CH <sub>3</sub> Cl

Una vez exploradas las ecuaciones propuestas se presentan los datos de las propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la Tabla 11.

**Tabla 31**

*Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 1*

Molécula	$\Delta H_v(-1, 1 \text{ }^\circ\text{C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1 \text{ }^\circ\text{C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1 \text{ }^\circ\text{C})$ bar	$P_s(43, 3 \text{ }^\circ\text{C})$ bar	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
HSF	22298,8259	14,7702	1,5066	6,2603	1509,71
CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	20587,3602	17,5904	2,7103	9,4976	1170,37
CH <sub>3</sub> Cl	22042,1143	17,3992	1,5898	6,2009	1266,84
CH <sub>3</sub> OF	19502,9465	21,2232	2,9862	11,0069	918,94
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	19612,9072	20,1238	2,8521	10,2168	974,61

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 1.

Como se puede observar en la Tabla 11 se obtienen un total de cinco moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 12**

*Resultados de la optimización para la configuración 2*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	1509,717265	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	102,213732	HSF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar		HSF
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	38,855080	HSF
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	6,920267	HSF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	1413,9849	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	101,7473	HSF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	6,9181	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	386,0275	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	92222,3567	CH <sub>3</sub> CL
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,999584777	CH <sub>3</sub> OF
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,999965376	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,00130571	CH <sub>3</sub> OF
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,936697024	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,922810811	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999384	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999408	HSF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\tan\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,874924938	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\tan\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,373803848	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> F
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001305711	CH <sub>3</sub> OOF
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	40,57023324	CH <sub>3</sub> OF
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	9803177,935	HSF
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,369476685	CH <sub>3</sub> OF
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,120331706	CH <sub>3</sub> OOF
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,2224295	CH <sub>3</sub> OOF
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	0,285367192	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	2,97045E-08	HSF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009783421	HSF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	4,38742E-07	HSF
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,098911179	HSF
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,00017235	HSF
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,02573666	HSF
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	-	-
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,144503089	HSF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	2,90612E-10	HSF
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000707221	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009828267	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,144547934	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000217195	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,002590489	HSF
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,78698E-08	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	7,32405E-07	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	6,48231E-06	HSF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	9,74022E-09	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,16172E-07	HSF

**Tabla 13**

*Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 2*

Molécula	$\Delta H_v(-1, 1 \text{ °C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1 \text{ °C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1 \text{ °C})$ bar	$P_s(43, 3 \text{ °C})$ bar	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
HSF	22298,8259	14,7702	1,5066	6,2603	1509,71
CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	20587,3602	17,5904	2,7103	9,4976	1170,37
CH <sub>3</sub> Cl	22042,1143	17,3992	1,5898	6,2009	1266,84
CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	23392,0864	25,9554	1,1824	4,9978	901,24
CH <sub>3</sub> OF	19502,9465	21,2232	2,9862	11,0069	918,94
CH <sub>3</sub> OOF	22660,6211	29,5882	1,2528	5,6324	765,86
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	23543,1524	24,856	1,1567	4,7298	947,18
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	19612,9072	20,1238	2,8521	10,2168	974,61
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> F	22878,5280	27,3894	1,1946	5,0199	835,30

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 2.

Como se puede observar en Tabla 13 se obtienen un total de nueve moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 14***Resultados de la optimización para la configuración 3*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,0006623	HSF
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	1509,7172	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	102,21373	HSF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	10,1100807	HSF
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	38,855080	HSF
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,9834846	HSF
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	0,0011053	NF <sub>2</sub> Cl
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	-0,9149587	CF <sub>3</sub> Cl
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	-	-
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,9865567	FOCl
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,8292875	CH <sub>3</sub> OCF <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,9999997	HSF
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,9999991	F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,9834846	CH <sub>2</sub> FCl
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-7,5608012	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,0011053	CF <sub>3</sub> Cl
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	36,5984606	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	847801063,3	NHF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,0496661	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,0305053	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> NF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,2456254	NHF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	0,2853671	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	4,58764 E-08	FOCl
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	9,64873 E-07	FOCl

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,09891117	HSF
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	9,64873 E-07	NF <sub>2</sub> Cl
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	9,47775 E-10	FOCl
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,0009733	CH <sub>2</sub> FCl
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,17156 E-08	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	9,67054 E-07	FOCl
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	6,48231 E-06	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,5491 E-08	NF <sub>2</sub> Cl
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	2,12574 E-07	FOCl

**Tabla 15***Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 3*

<b>Molécula</b>	$\Delta H_v(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ <b>J/mol</b>	$C_{pl}(21, 1\text{ }^\circ\text{C})$ <b>J/mol K</b>	$P_s(-1, 1\text{ }^\circ\text{C})$ <b>bar</b>	$P_s(43, 3\text{ }^\circ\text{C})$ <b>bar</b>	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
HSF	22298,8259	14,7702	1,5066	6,2603	1509,71
FOCl	21411,4209	21,0320	1,7083	7,0594	1018,04
F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	18883,7228	24,8560	3,3122	12,8578	759,72
CF <sub>3</sub> Cl	20401,9149	22,5520	1,9796	7,6439	904,66
CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	20587,3602	17,5904	2,7103	2,4976	1170,37
NF <sub>2</sub> Cl	19537,5151	24,139	2,6532	10,4145	809,37
NHF <sub>2</sub>	20042,6460	18,6181	2,6921	10,9602	1076,51
CH <sub>2</sub> FCl	21505,7869	19,9326	1,6538	6,6097	1078,92
CH <sub>3</sub> OCF <sub>3</sub>	21579,7553	31,1082	1,4735	6,1724	693,69
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	19612,9072	20,1238	2,8521	10,2168	974,61
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> NF <sub>2</sub>	20801,6204	31,5958	1,8932	7,8059	658,36

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 3.

Como se puede observar en la Tabla 15 se obtienen un total de once moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 16***Resultados de la optimización para la configuración 4*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,0006623	HSF
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	1509,7172	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	102,21373	HSF

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	10,1100807	HSF
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	38,855080	HSF
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	101,7473409	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	6,918120311	HSF
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	154265,9607	HSF
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,988511034	CHF <sub>2</sub> Cl
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,999965376	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,00128472	CF <sub>3</sub> NHF
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,000662376	HSF
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,977338207	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,922810811	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999335	CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999389	CF <sub>3</sub> Cl
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	4,651728801	CH <sub>2</sub> FCl
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-6,539989318	CHF <sub>2</sub> Cl
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001284721	CF <sub>3</sub> NHF
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	36,5984606	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	3067582,785	SF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,0496661	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,176955146	CH <sub>3</sub> NHF
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,197283579	NHFOF
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	0,256388006	CH <sub>3</sub> Cl
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,11619E-08	SF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009783421	HSF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	1,32906E-06	CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,02573666	HSF
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	1,37468E-12	SF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	1,5322E-09	CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000707221	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,009828267	HSF
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000213855	NH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,3108E-08	SF <sub>2</sub>
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,33182E-06	CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	6,48231 E-06	HSF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	9,73336E-09	SF <sub>2</sub>
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,26644E-07	SF <sub>2</sub>

**Tabla 17***Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 4*

<b>Molécula</b>	$\Delta H_v(-1, 1\text{ °C})$ <b>J/mol</b>	$C_{pl}(21, 1\text{ °C})$ <b>J/mol K</b>	$P_s(-1, 1\text{ °C})$ <b>bar</b>	$P_s(43, 3\text{ °C})$ <b>bar</b>	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
HSF	22298,8259	14,7702	1,5066	6,2603	1509,71
SF <sub>2</sub>	21411,4209	21,0320	1,7083	7,0594	1018,04
CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	18883,7228	24,8560	3,3122	12,8578	759,72
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	19612,9072	20,1238	2,8521	10,2168	974,61
NH <sub>2</sub> F	24552,5984	18,0684	1,0277	4,9280	1358,86
NHFOF	23251,6928	26,9831	1,0597	5,3716	861,71
CH <sub>3</sub> Cl	22042,1143	17,3992	1,5898	6,2009	1266,84
CF <sub>3</sub> Cl	20401,9149	22,5520	1,9796	7,6439	904,66
CH <sub>3</sub> NHF	23942,1418	23,3503	1,0054	4,7649	1025,34
CF <sub>3</sub> NHF	22186,2568	28,5031	1,2661	5,9232	778,37
CHF <sub>2</sub> Cl	21082,0248	21,749	1,7378	6,9556	969,33
CH <sub>2</sub> FCl	21505,7869	19,9326	1,6538	6,6097	1078,92
CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	23392,0864	25,9554	1,1824	4,9978	901,24
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	23543,1524	24,856	1,1567	4,7298	947,18
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	22393,8948	29,2058	1,2528	5,2791	766,76

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 4.

Como se puede observar en Tabla 17 se obtienen un total de quince moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 18***Resultados de la optimización para la configuración 5*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	899,9627312	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	4445,661037	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	29,99937885	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	864,5337778	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	3697,211572	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	0,966920657	CH <sub>3</sub> NCH <sub>3</sub> F
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,977338207	-
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,922810811	-
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999383	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999389	-
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	9,621310756	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-34,69035695	CH <sub>3</sub> OF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	-	-
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111158	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	531,4080195	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,689400785	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,026223687	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,243570801	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,05973E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	1,23467E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000224938	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,033334024	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	2,30398E-12	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	1,37191E-09	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001156693	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000270474	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,26708E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23674E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23162E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	2,52015E-07	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

**Tabla 19**

*Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 5*

<b>Molécula</b>	$\Delta H_v(-1, 1\text{ °C})$ <b>J/mol</b>	$C_{pl}(21, 1\text{ °C})$ <b>J/mol K</b>	$P_s(-1, 1\text{ °C})$ <b>bar</b>	$P_s(43, 3\text{ °C})$ <b>bar</b>	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
CH <sub>3</sub> OF	19502,9465	21,2232	2,9862	11,0069	918,94
CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	18967,4146	23,7566	3,1516	11,8755	798,40
CH <sub>3</sub> NCH <sub>3</sub> F	21220,2707	29,0624	1,8124	7,2894	730,16
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F	21960,8005	24,4019	1,4072	5,7774	899,96

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 5.

Como se puede observar en Tabla 19 se obtienen un total de cuatro moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 20**

*Resultados de la optimización para la configuración 6*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001372171	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	798,4061119	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	4084,025302	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	28,25608097	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	766,1558792	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	3465,606583	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001055763	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,00137217	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-0,00832144	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,00832144	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999059	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999165	CF <sub>3</sub> CF = CH <sub>2</sub>
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-0,077461084	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-34,69035695	CH <sub>3</sub> OF
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001055764	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001372172	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,112548602	FCH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,224071479	FCH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,99547E-08	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	1,88285E-06	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000244856	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,037042825	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	2,61962E-12	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	2,5836E-09	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001415864	CH <sub>2</sub> CINF <sub>2</sub>
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,00028855	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	6,18638E-08	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,37894E-07	CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>

**Tabla 21**

*Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 6*

<b>Molécula</b>	$\Delta H_v(-1, 1 \text{ °C})$ <b>J/mol</b>	$C_{pl}(21, 1 \text{ °C})$ <b>J/mol K</b>	$P_s(-1, 1 \text{ °C})$ <b>bar</b>	$P_s(43, 3 \text{ °C})$ <b>bar</b>	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	18967,4146	23,75	3,15	11,87	798,40
CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>	22886,7990	31,40	1,04	4,90	728,77
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	23543,1524	24,85	1,15	4,72	947,18
CF <sub>3</sub> CF = CH <sub>2</sub>	20904,3092	27,02	1,68	6,70	773,62
CH <sub>3</sub> OF	19502,9465	21,22	2,98	11,006	918,94
FCH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> F	22360,3623	31,02	1,26	5,65	720,78

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 6.

Como se puede observar en Tabla 21 se obtienen un total de seis moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 22***Resultados de la optimización para la configuración 7*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	899,9627312	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	9,644203346	CH <sub>2</sub> = CHF
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	4445,661037	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	29,99937885	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	6,475306719	CH <sub>2</sub> = CHF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	864,5337778	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	3697,211572	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	180,6860791	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	33189,1033	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,994642031	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,493730104	CHF = CF <sub>2</sub>
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,103379057	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	0,103379057	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999383	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999219	F <sub>2</sub> C = CF <sub>2</sub>
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	9,621310756	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-0,091170782	CH <sub>2</sub> = CFOF

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001111158	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\tan\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111158	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	23,71979435	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	5346461,112	CH <sub>2</sub> = CHCHF <sub>2</sub>
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,42499897	CH <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	2,026223687	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,243570801	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,05973E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	1,23467E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000224938	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,033334024	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	2,30398E-12	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,154432839	CH <sub>2</sub> = CHF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	0,001156693	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001415864	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,154484949	CH <sub>2</sub> = CHF
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000270474	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,005534461	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,26708E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23674E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,01304E-05	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23162E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	2,52015E-07	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

**Tabla 23***Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 7*

<b>Molécula</b>	$\Delta H_v(-1, 1\text{ °C})$ <b>J/mol</b>	$C_{pl}(21, 1\text{ °C})$ <b>J/mol K</b>	$P_s(-1, 1\text{ °C})$ <b>bar</b>	$P_s(43, 3\text{ °C})$ <b>bar</b>	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F	21960,8005	24,40	1,40	5,77	899,96
CH <sub>2</sub> = CHCHF <sub>2</sub>	21913,3396	23,44	1,42	5,81	934,63
CH <sub>2</sub> = CHF	19190,1099	14,36	3,20	11,20	1335,99
CHF = CF <sub>2</sub>	19414,5594	21,07	2,64	9,88	921
CH <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	18634,2706	17,13	3,35	11,76	1087,41
CF <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	19087,2450	23,85	2,76	10,37	800,22
CH <sub>2</sub> = CFOF	21868,9936	25,50	1,44	6,13	857,56

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 7.

Como se puede observar en Tabla 23 se obtienen un total de siete moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

**Tabla 24***Resultados de la optimización para la configuración 8*

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0, 0,001111157	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	Maximizar	899,9627312	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^2$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{\Delta H_v}}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{\Delta H_v}{\sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	4445,661037	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}}$	Maximizar	29,99937885	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^3}{C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}^3}$	Maximizar	6,475306719	CH <sub>2</sub> = CHF
$\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)^3$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	864,5337778	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	3697,211572	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	180,6860791	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^2}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + C_{pl}^3}$	Maximizar	33189,1033	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}}}$	Maximizar	-	-
$\frac{\Delta H_v^2}{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}$	Maximizar	-	-
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\text{sen}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	0,411407034	$\text{CH}_2 = \text{CF}_2$
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001166094	$\text{CH}_2 = \text{CFOF}$
$\text{sen}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111157	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	0,992517765	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_3$
$\text{cos}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-	-
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,999999383	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$
$\text{cos}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,999999219	$\text{F}_2\text{C} = \text{CF}_2$
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Maximizar	9,621310756	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$
$\text{tan}\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	Minimizar	-92,58441351	$\text{CH}_2 = \text{CHNF}_2$
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Maximizar	0,001166094	$\text{CH}_2 = \text{CFOF}$
$\text{tan}\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	Minimizar	0,001111158	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	23,71979435	$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	864413830	$\text{CH}_2 = \text{CHF}$
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s^2(43,3\text{ °C})}{P_s^2(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-

<b>Función</b>	<b>Optimización</b>	<b>Valor objetivo</b>	<b>Molécula resultante</b>
$\frac{P_s^3(43,3\text{ °C})}{P_s^3(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{P_s(-1,1\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(43,3\text{ °C})}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	6,42499897	CH <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>
$\frac{\sqrt{P_s(43,3\text{ °C})}}{\sqrt{P_s(-1,1\text{ °C})}}$	Maximizar	-	-
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Minimizar	0,243570801	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{P_s(-1,1\text{ °C})}{P_s(43,3\text{ °C})}$	Maximizar	-	-
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,05973E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^2$	Minimizar	1,23467E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}}{\sqrt{\Delta H_v}}$	Minimizar	-	-
$\frac{\sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000224938	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\sqrt{\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}}$	Minimizar	0,033334024	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}}{\Delta H_v^3}$	Minimizar	2,30398E-12	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,154432839	CH <sub>2</sub> = CHF
$\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)^3$	Minimizar	1,37191E-09	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,001156693	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-

Función	Optimización	Valor objetivo	Molécula resultante
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v}$	Minimizar	-	-
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,000270474	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v}$	Minimizar	0,005534461	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	5,26708E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^2}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23674E-06	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + C_{pl}^3}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	3,01304E-05	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	1,23162E-08	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F
$\frac{1 + \sqrt{C_{pl}^3}}{\Delta H_v^2}$	Minimizar	2,52015E-07	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F

**Tabla 25**

*Propiedades físicas de las moléculas obtenidas en la configuración 8*

Molécula	$\Delta H_v(-1, 1 \text{ °C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1 \text{ °C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1 \text{ °C})$ bar	$P_s(43, 3 \text{ °C})$ bar	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F	21960,8005	24,40	1,40	5,77	899,96
CH <sub>2</sub> = CHF	19190,1099	14,36	3,20	11,20	1335,99
CH <sub>2</sub> = CHNF <sub>2</sub>	20332,3303	25,83	2,15	8,61	786,97
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>3</sub>	22399,5024	21,86	1,35	5,42	1024,28
CH <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	18634,2706	17,13	3,35	11,76	1087,41
CF <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	19087,2450	23,85	2,76	10,37	800,22
CH <sub>2</sub> = CFOF	21868,9936	25,50	1,44	6,13	857,56

*Nota.* Estos datos son tomados de la hoja de cálculo para la configuración 8.

Como se puede observar en Tabla 25 se obtienen un total de siete moléculas diferentes, todas ellas cumplen con las restricciones planteadas para esta configuración.

Los resultados se organizan de manera decreciente en función del valor de la entalpía de vaporización, pero se pueden reorganizar en función de cualquiera de los parámetros mostrados en la Tabla 26 según se requiera.

**Tabla 26**

*Moléculas halladas en la optimización de funciones*

Molécula	$\Delta H_v(-1, 1\text{ °C})$ J/mol	$C_{pl}(21, 1\text{ °C})$ J/mol K	$P_s(-1, 1\text{ °C})$ bar	$P_s(43, 3\text{ °C})$ bar	$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$
NH <sub>2</sub> F	24552,5984	18,0684	1,0277	4,9280	1358,86
CH <sub>3</sub> NHF	23942,1418	23,3503	1,0054	4,7649	1025,34
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	23543,1524	24,856	1,1567	4,7298	947,18
CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	23392,0864	25,9554	1,1824	4,9978	901,24
NHFOF	23251,6928	26,9831	1,0597	5,3716	861,71
CH <sub>2</sub> ClNF <sub>2</sub>	22886,7990	31,40	1,04	4,90	728,77
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> F	22878,5280	27,3894	1,1946	5,0199	835,30
CH <sub>3</sub> OOF	22660,6211	29,5882	1,2528	5,6324	765,86
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>3</sub>	22399,5024	21,86	1,35	5,42	1024,28
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CHF <sub>2</sub>	22393,8948	29,2058	1,2528	5,2791	766,76
FCH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> F	22360,3623	31,02	1,26	5,65	720,78
HSF	22298,8259	14,7702	1,5066	6,2603	1509,71
CF <sub>3</sub> NHF	22186,2568	28,5031	1,2661	5,9232	778,37
CH <sub>3</sub> Cl	22042,1143	17,3992	1,5898	6,2009	1266,84
CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>2</sub> F	21960,8005	24,4019	1,4072	5,7774	899,96
CH <sub>2</sub> = CHCHF <sub>2</sub>	21913,3396	23,44	1,42	5,81	934,63
CH <sub>2</sub> = CFOF	21868,9936	25,50	1,44	6,13	857,56
CH <sub>3</sub> OCF <sub>3</sub>	21579,7553	31,1082	1,4735	6,1724	693,69
CH <sub>2</sub> FCI	21505,7869	19,9326	1,6538	6,6097	1078,92
FOCl	21411,4209	21,0320	1,7083	7,0594	1018,04
SF <sub>2</sub>	21411,4209	21,0320	1,7083	7,0594	1018,04
CH <sub>3</sub> NCH <sub>3</sub> F	21220,2707	29,0624	1,8124	7,2894	730,16
CHF <sub>2</sub> Cl	21082,0248	21,749	1,7378	6,9556	969,33
CF <sub>3</sub> CF = CH <sub>2</sub>	20904,3092	27,02	1,68	6,70	773,62
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> NF <sub>2</sub>	20801,6204	31,5958	1,8932	7,8059	658,36
CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	20587,3602	17,5904	2,7103	9,4976	1170,37
CF <sub>3</sub> Cl	20401,9149	22,5520	1,9796	7,6439	904,66
CH <sub>2</sub> = CHNF <sub>2</sub>	20332,3303	25,83	2,15	8,61	786,97

<b>Molécula</b>	<b><math>\Delta H_v(-1, 1\text{ °C})</math> J/mol</b>	<b><math>C_{pl}(21, 1\text{ °C})</math> J/mol K</b>	<b><math>P_s(-1, 1\text{ °C})</math> bar</b>	<b><math>P_s(43, 3\text{ °C})</math> bar</b>	<b><math>\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}</math></b>
NHF <sub>2</sub>	20042,6460	18,6181	2,6921	10,9602	1076,51
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> F	19612,9072	20,1238	2,8521	10,2168	974,61
NF <sub>2</sub> Cl	19537,5151	24,139	2,6532	10,4145	809,37
CH <sub>3</sub> OF	19502,9465	21,2232	2,9862	11,0069	918,94
CHF = CF <sub>2</sub>	19414,5594	21,07	2,64	9,88	921
CH <sub>2</sub> = CHF	19190,1099	14,36	3,20	11,20	1335,99
CF <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	19087,2450	23,85	2,76	10,37	800,22
CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	18967,4146	23,7566	3,1516	11,8755	798,40
F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	18883,7228	24,8560	3,3122	12,8578	759,72
CH <sub>3</sub> CHF <sub>2</sub>	18883,7228	24,8560	3,3122	12,8578	759,72
CH <sub>2</sub> = CF <sub>2</sub>	18634,2706	17,13	3,35	11,76	1087,41

*Nota.* Se puede organizar los resultados en función de cualquier parámetro de la tabla.

Se presentan un total de tres moléculas que no han sido reportadas como candidatas a refrigerantes. Los resultados y detalles de la obtención de cada molécula se detallan en la Tabla 27 teniendo en cuenta que estos resultados se presentan desde el punto de vista de la factibilidad de su uso como moléculas refrigerantes en base a la entalpía de vaporización, calor específico del líquido, presión de evaporación y presión de condensación únicamente. En la tabla 28 se presentan los resultados de la evaluación de las tres funciones finales en Matlab para comparar los resultados obtenidos en cada programa.

Es importante indicar que en las tablas de resultados finales se omiten las moléculas que contienen grupos nitrógeno y halógenos al mismo tiempo debido a que moléculas con dichos tipos de átomos, con bajo valor de punto de ebullición, presentan tendencia a la explosión según el estudio de Duvedi y Achenie (1996).

**Tabla 27***Resultados finales de la investigación*

	<b>Config. 6</b>	<b>Config. 8</b>	<b>Config. 3</b>
Función	$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	$\cos\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	$\cos\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$
Optimización	Maximizar	Maximizar	Minimizar
Valor objetivo	766,15	0,9925	0,9999
Molécula resultante	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>3</sub>	F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
$\Delta H_v(-1,1\text{ °C})$ J/mol	18967,41	22845,53	18883,72
$C_{pl}(21,1\text{ °C})$ J/mol K	23,75	21,86	24,85
$P_s(-1,1\text{ °C})$ bar	3,15	1,35	3,31
$P_s(43,3\text{ °C})$ bar	11,87	5,42	12,85
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	798,62	1045,08	759,72

*Nota.* Estas moléculas no se han reportado en la literatura como candidatas a refrigerantes.

**Tabla 28***Evaluación de las funciones finales en Matlab*

	<b>Config. 6</b>	<b>Config. 8</b>	<b>Config. 3</b>
Función	$\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	$\cos\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	$\cos\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$
Optimización	Maximizar	Maximizar	Minimizar
Valor objetivo	1332,4	0,8764	-0.9999
Molécula resultante	SF <sub>2</sub>	FCH = CHCH <sub>3</sub>	FCl
$\Delta H_v(-1,1\text{ °C})$ J/mol	22668.56	23584,64	18313,58
$C_{pl}(21,1\text{ °C})$ J/mol K	16,01	23,0396	12,66
$P_s(-1,1\text{ °C})$ bar	1,22	1,01	3,92
$P_s(43,3\text{ °C})$ bar	5,37	4,32	13,48
$\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}$	1415,64	1023,66	1445,77

*Nota.* Todos estos resultados fueron obtenidos en Matlab

## 4.2 Discusión de resultados

A continuación, en la Tabla 29 se presenta la comparación de los resultados obtenidos con solver de Excel y por otro lado en Matlab para una misma función objetivo. Para una misma función objetivo, las moléculas encontradas usando Solver de Excel y Matlab son diferentes (ver Tabla 29), lo cual se atribuye al algoritmo de cálculo empleado para la obtención de dichas moléculas. Para problemas de MINLP, en Solver de Excel se emplea el de gradiente reducido generalizado no lineal (GRG no lineal) en el cual se parte de una solución factible propuesta y consecutivamente se direcciona el algoritmo hacia la solución más apropiada (Mendoza, Trasviña, & Gutiérrez, 2018). En Matlab por otro lado se usa el algoritmo genético (“ga” por sus siglas en inglés) para el mismo propósito en el cual se modifica consecutivamente una población inicial de soluciones factibles y conforme avanza el algoritmo se selecciona aleatoriamente soluciones ideales hasta eventualmente obtener la mejor solución (Gilat, 2005).

**Tabla 29**

*Comparación de los resultados obtenidos en Excel y Matlab*

Función	EXCEL		MATLAB	
	Molécula	Valor objetivo	Molécula	Valor objetivo
MÁX. $\cos\left(\frac{\Delta H_v}{C_{pl}}\right)$	CH <sub>2</sub> = CFCH <sub>3</sub>	0,9925	FCH = CHCH <sub>3</sub>	0,8764
MÍN. $\cos\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$	F <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0,9999	FCl	0,9999
MÁX. $\frac{\Delta H_v}{1 + C_{pl}}$	CH <sub>2</sub> OF <sub>2</sub>	766,15	SF <sub>2</sub>	1332,4

*Nota.* Además del valor de la función objetivo, se puede usar cualquier propiedad física calculada para efectos comparativos.

Para una misma función objetivo, es interesante notar que con un algoritmo diferente se puede obtener variedad de moléculas y que como en el caso de la minimización de la función  $\cos\left(\frac{C_{pl}}{\Delta H_v}\right)$  una variación inclusive en la séptima cifra decimal puede cambiar totalmente el resultado en la estructura molecular. En la Tabla 30 se muestra las moléculas encontradas por solver de Excel y la referencia en dónde han sido reportadas en la literatura y en la Tabla 31 las moléculas halladas con Matlab con la referencia bibliográfica correspondiente.

Tabla 30

Moléculas obtenidas con Solver de Excel y su referencia de reporte

Molécula	Referencia
$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_2\text{F}$	Abbas (2018)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$	Abdel & Bozzelli (2020)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHF}_2$	Abdel & Bozzelli (2020)
$\text{CH}_2 = \text{CF}_2$	Ankit & Sachin (2014)
$\text{CF}_2 = \text{CF}_2$	Dragea (2006)
$\text{CH}_2\text{FCl}$	Duvedi & Achenie (1996)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$	Duvedi & Achenie (1996)
$\text{CH}_3\text{OF}$	Duvedi & Achenie (1996)
$\text{CF}_3\text{Cl}$	Ernst, Gurtner, & Wirbser (1977)
$\text{FCH}_2\text{OCH}_2\text{F}$	Gallou (2007)
$\text{CF}_3\text{CF} = \text{CH}_2$	Ghandili & Moeini (2020)
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$	Ghodbane (1999)
$\text{CH}_2 = \text{CFCH}_3$	No reportada
$\text{CH}_2\text{OF}_2$	No reportada
$\text{F}_2\text{O}_2$	No reportada
$\text{NHFOF}$	No se considera
$\text{CH}_2\text{ClNF}_2$	No se considera
$\text{CF}_3\text{NHF}$	No se considera
$\text{CH}_3\text{NCH}_3\text{F}$	No se considera
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NF}_2$	No se considera
$\text{CH}_2 = \text{CHNF}_2$	No se considera
$\text{CH}_3\text{Cl}$	Seider (2009)
$\text{SF}_2$	Seider (2009)
$\text{CH}_3\text{CHF}_2$	Seider (2009)
$\text{CH}_2 = \text{CHF}$	Sittig (1994)
$\text{NH}_2\text{F}$	Tawarmalani (2002)
$\text{CH}_3\text{NHF}$	Tawarmalani (2002)
$\text{HSF}$	Tawarmalani (2002)
$\text{CH}_2 = \text{CHCHF}_2$	Tawarmalani (2002)
$\text{CH}_2 = \text{CFOF}$	Tawarmalani (2002)
$\text{FOCl}$	Tawarmalani (2002)
$\text{CHF}_2\text{Cl}$	Tawarmalani (2002)
$\text{CH}_3\text{CH}_3$	Tawarmalani (2002)
$\text{NHF}_2$	Tawarmalani (2002)
$\text{NF}_2\text{Cl}$	Tawarmalani (2002)
$\text{CH}_3\text{OCH}_3$	Urata & Sekiya (2003)
$\text{CH}_3\text{OCF}_3$	Urata & Sekiya (2003)
$\text{CHF} = \text{CF}_2$	Woolf (1993)
$\text{CH}_3\text{OOF}$	Zheng & Cheng (2004)

*Nota.* Las moléculas con el ítem “no se considera” incumplen los requisitos planteados por Duvedi & Achenie (1996), por esta razón se omiten del estudio.

En el caso de las moléculas el  $CH_2 = CFCH_3$ ,  $F_2O_2$  y  $CH_2OF_2$  que aparecen como no reportadas en la Tabla 30 pueden ser consideradas como candidatas a refrigerantes puesto que cumplen con todas las restricciones de las propiedades físicas expuestas en el trabajo de Duvedi & Achenie (1996).

Para la molécula  $CH_2OF_2$ , un isómero con la misma fórmula molecular es reportado por el National Center for Biotechnology Information (NCBI, 2021) en la forma de  $F_2CHOH$ , sin embargo, la molécula encontrada por Solver de Excel es de la forma  $FCH_2OF$  por la combinación de los grupos moleculares considerados, lo que hace que dicha molécula sea un nuevo resultado.

**Tabla 31**

*Moléculas obtenidas con Matlab.*

<b>Molécula</b>	<b>Referencia</b>
FCH = CHCH <sub>3</sub>	Yaws (2009)
FCl	Dicelio (1979)
SF <sub>2</sub>	Seider (2009)

## Capítulo V

### 5. Conclusiones y recomendaciones

#### 5.1 Conclusiones

Se puede encontrar un satisfactorio conjunto de funciones matemáticas que con su correspondiente optimización permiten encontrar moléculas de refrigerante.

Relacionar la entalpía de vaporización ( $\Delta H_v$ ) con el calor específico del líquido ( $C_{pl}$ ) de una molécula refrigerante por medio de una función matemática diferente a las ya propuestas en la literatura referente al estudio extiende las posibilidades de hallar nuevas moléculas que se puedan usar en aplicaciones de refrigeración, además se puede relacionar las presiones de vapor en funciones matemáticas para obtener nuevos resultados.

Las moléculas candidatas a refrigerantes  $\text{CH}_2 = \text{CFCH}_3$ ,  $\text{F}_2\text{O}_2$ , y  $\text{CH}_2\text{OF}_2$  cumplen con todos los requerimientos estimados en el planteamiento de este problema gracias al uso de la herramienta solver de Excel que proporciona valores satisfactorios en la optimización de todas las funciones objetivo evaluadas durante la investigación. Solver demostró una gran adaptabilidad y facilidad de manejo en el planteamiento y resolución de problemas de programación no lineal de enteros mixtos (MINLP por sus siglas en inglés), adicionalmente éstas no han sido reportadas en la literatura como moléculas candidatas a refrigerantes.

En la evaluación con Matlab de las funciones objetivo que proporcionaron las nuevas moléculas de refrigerante usando Solver de Excel se encuentran las moléculas:  $\text{FCH} = \text{CHCH}_3$ ,  $\text{FCl}$  y  $\text{SF}_2$  que cumplen con las propiedades físicas del problema pero que ya han sido reportadas en bibliografía, esto debido a la diferencia de cada algoritmo al iniciar el proceso de búsqueda de la mejor solución

## 5.2 Recomendaciones

Explorar la mayor cantidad de modificaciones factibles a las restricciones y ecuaciones que relacionen las propiedades físicas de interés como la entalpía de vaporización o el calor específico del líquido aumentará la posibilidad de encontrar nuevos resultados, se puede elegir entre varios modelos matemáticos que estén reportados en la literatura y modificarlos de acuerdo a los requerimientos. El alcance de dicho análisis se limitó al tiempo disponible para el proceso de realización de el presente trabajo de titulación, pero se recomienda continuar con el análisis en trabajos futuros para encontrar más moléculas candidatas a refrigerantes.

Se recomienda además que las funciones objetivo modificadas o planteadas relacionen únicamente dos variables como por ejemplo la entalpía de vaporización y el calor específico del líquido o la relación de las presiones de vapor a la mayor y menor temperatura.

Para continuar ampliando la región de soluciones factibles en el problema de diseño de refrigerantes se recomienda probar el uso de algoritmos diferentes al GRG no lineal usado en este trabajo; puede usarse el algoritmo Simplex LP o Evolutionary en el caso de que se cumplan las condiciones necesarias para usar cada uno de dichos algoritmos integrados en Solver de Excel.

En el caso de que se desee omitir los resultados con variables del tipo enteras se recomienda usar la función "fmincon" integrada en Matlab para resolver el problema planteado en este trabajo, esta función admite la inserción de restricciones de igualdad y desigualdad que facilitan el cálculo de las posibles soluciones. También se puede usar el método Monte Carlo como algoritmo de cálculo para hallar soluciones diferentes a las ya presentadas en este trabajo.

Se recomienda además usar otro tipo de software de optimización como GAMS para explorar y evaluar funciones objetivo y así encontrar soluciones diferentes, esto debido a que cada programa cuenta con su propio algoritmo de búsqueda de soluciones óptimas y como se presentó en este trabajo, un cambio de software proporciona resultados diferentes para un mismo planteamiento.

## Bibliografía

- Abbas, L. (2018). *Estados Unidos, Patente nº WO 2018/165003 A1*. Recuperado el 10 de marzo de 2021 de <https://patents.google.com/patent/WO2018165003A1/en>
- Abdel, H., & Bozzelli, J. (2020). Gaussian M-062x/6-31+g (d,p) Calculation of Standard Enthalpy, Entropy and Heat Capacity of Some Fluorinated Alcohol's and Its Radicals at Different Temperatures. *American Journal of Physical Chemistry*, 101-111. Recuperado el 14 de enero de 2021 de doi:10.11648/j.ajpc.20200904.13
- Ankit, T., & Sachin, B. (2014). Variation of Performance of Refrigeration System at different Temperature. *International journal of engineering sciences & research technology*, 2-5. Recuperado el 10 de febrero de 2021
- Blanke, W., & Weib, R. (1992). Isochoric (p,v,T) Measurements on C2H4F2 (R152a) in the Liquid State from the Triple Point to 450 K and at Pressures up to 30 MPa. Elsevier Science Publishers B.V. Recuperado el 11 de marzo de 2021
- Budnick, F. (2007). *Matemáticas aplicadas para la administración, economía y ciencias sociales*. The McGraw-Hill Companies, Inc. Recuperado el 16 de noviembre de 2020
- Calm, J. (2007). La próxima generación de refrigerantes. *ACR Latinoamérica*, 21-25. Recuperado el 5 de diciembre de 2020
- Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2012). *Termodinámica*. (Séptima ed.). The McGraw-Hill Companies, Inc. Recuperado el 30 de septiembre de 2020
- Cantu, R. (1996). *Programación no lineal* [Tesis de grado, Universidad Autónoma de Nuevo León]. Recuperado el 7 de septiembre de 2020 de <http://eprints.uanl.mx/393/1/1080072405.PDF>
- Dicelio, Lelia Elina. (1979). La cinética y el mecanismo de la descomposición fotoquímica del hipoclorito de trifluorometilo en presencia de monóxido de carbono. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Recuperado el 12 de marzo de 2021 de [http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis\\_1595\\_Dicelio.pdf](http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1595_Dicelio.pdf)

- Dragea, E. (2006). FTIR spectroscopy and estimation of the global warming potential of CF<sub>3</sub>Br and C<sub>2</sub>F<sub>4</sub>. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 44–56. Recuperado el 21 de febrero de 2021 de <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2005.05.071>
- Duvedi, A., & Achenie, L. (1996). Designing Environmentally Safe Refrigerants Using Mathematical Programming. *Chemical Engineering Science*, 51, 1-46. Recuperado el 3 de septiembre de 2020 de [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(96\)00224-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(96)00224-2)
- Ernst, G., Gurtner, J., & Wirbser, H. (1977). Flow-calorimetric massic heat capacities at low pressures of CF<sub>3</sub>Cl and CHF<sub>3</sub>(refrigerants R13 and R23) and C<sub>6</sub>F<sub>14</sub>(perfluoro-2-methyl-pentane); vapour pressure curve and critical data of C<sub>6</sub>F<sub>14</sub>. *Chemical Thermodynamics*, 1125-1128. Recuperado el 1 de marzo de 2021 de <https://doi.org/10.1006/jcht.1997.0234>
- Gallou, F. (2007). Bis(fluoromethyl)ether. *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis.*, 1. Recuperado el 4 de marzo de 2021 de <https://doi.org/10.1002/047084289X.rn00747>
- Gani, R. (2004). Computer-Aided Methods and Tools for Chemical Product Design. *Chemical Engineering Research and Design*, 1494-1504. Recuperado el 16 de septiembre de 2021 de <https://doi.org/10.1205/cerd.82.11.1494.52032>
- Gani, R., Nielsen, B., & Fredenslund, A. (1991). A Group Contribution Approach to ComputerAided Molecular Design. *AIChE Journal*, 1318-1332. Recuperado el 25 de septiembre de 2020 de <https://doi.org/10.1002/aic.690370905>
- Garg, S., & Achenie, L. E. (2001). Mathematical Programming Assisted Drug Design for Nonclassical Antifolates. *Biotechnology Progress*, 412-418. Recuperado el 9 de noviembre de 2020 de <https://doi.org/10.1021/bp010034q>
- Ghandili, A., & Moeini, V. (2020). A new analytical modeling for the determination of thermodynamic quantities of refrigerants. *AIChE Journal*, 2-18. Recuperado el 23 de octubre de 2020 de <https://doi.org/10.1002/aic.16293>
- Ghodbane, M. (1999). An Investigation of R152a and Hydrocarbon Refrigerants in Mobile Air Conditioning. *Sae Technical Paper Series*, 1-12. Recuperado el 10 de enero de 2021 de <https://doi.org/10.4271/1999-01-0874>

- Gilat, A. (2005). *Matlab: Una Introducción con ejemplos prácticos*. Reverté S.A. Recuperado el 19 de febrero de 2021.
- Harris, D. C. (2003). *Análisis químico cuantitativo* (Sexta ed.). Reverté S.A. Recuperado el 10 de enero de 2021.
- Joback, K. G., & Reid, R. C. (1987). Estimation of pure-component properties from group-contributions. *Chemical Engineering Communications*, 233-243. Recuperado el 22 de octubre de 2020 de <https://doi.org/10.1080/00986448708960487>
- Joback, K. y Stephanopoulos, G. (1989). *Designing Molecules Possessing Desired Physical Property Values* [Tesis de posgrado, Massachusetts Institute of Technology]. Recuperado el 3 de septiembre de 2020 de <http://hdl.handle.net/1721.1/14191>
- Nimitz, J. S., & Skaggs, S. (1992). Estimating Tropospheric Lifetimes and Ozone-Depletion Potentials of One and Two-Carbon Hydrofluorocarbons and Hydrochlorofluorocarbons. *Environmental Science and Technology*, 739-744. Recuperado el 19 de diciembre de 2020 de <https://doi.org/10.1021/es00028a011>
- Mendoza, C., Trasviña, X., & Gutiérrez, A. (2018). Empleo del algoritmo GRG Nonlinear en el cálculo de intensidades de lluvia. *Revista NTHE*, 11-15.
- Murphy, R. (2007). *Introducción a los Procesos Químicos*. McGraw-Hill. Recuperado el 18 de noviembre de 2020
- National Center for Biotechnology Information (2021). PubChem Compound Summary for CID 17789749, Difluoromethanol. Recuperado el 10 de marzo de 2021 de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Difluoromethanol>.
- Odele, O., & Macchietto, S. (1993). Computer Aided Molecular Design: A Novel Method for Optimal Solvent Selection. *Fluid Phase Equilibria*, 47-54. Recuperado el 27 de diciembre de 2020 de [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(93\)87127-M](https://doi.org/10.1016/0378-3812(93)87127-M)
- Plazas, J. (2012). *Los Refrigerantes Y El Medio Ambiente* [Tesis de grado, Universidad Politécnica de Catalunya]. Recuperado el 10 de agosto de 2020 de <http://hdl.handle.net/2099.1/16336>
- Puente, M., & Gavilánez, O. (2018). *Programación Lineal para la toma de decisiones*. Escuela Politécnica de Chimborazo. Recuperado el 20 de diciembre de 2020

- Scacco, M. y Vargas, K. (2016). *Estudio de la factibilidad para la fabricación local de refrigerante en los motores de combustión interna* [Tesis de grado, Universidad Internacional del Ecuador]. Recuperado el 10 de septiembre de 2020 de <http://repositorio.uide.edu.ec/handle/37000/1589>
- Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009). *Product and Process Design Principles*. (Tercera ed.). John Wiley & Sons, Inc. Recuperado el 10 de diciembre de 2020
- Sittig, M. (1994). *World-Wide Limits for Toxic and Hazardous Chemicals in Air, Water and Soil*. Elsevier Science. Recuperado el 14 de noviembre de 2021
- Smith, J., Van Ness, H., & Abbott, M. (2007). *Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química*. McGraw-Hill. Recuperado el 10 de octubre de 2020
- Solomon, S., Mills, M., Heidt, L. E., Pollock, W. H., & Tuck, A. F. (1992). On the Evaluation of Ozone Depletion Potentials. *Journal of Geophysical Research*, 825-842. Recuperado el 19 de septiembre de 2020 de <https://doi.org/10.1029/91JD02613>
- Tawarmalani, M. (2002) *Convexification and Global Optimization in Continuous and Mixed-Integer Nonlinear Programming*. Springer Science. Recuperado el 10 de septiembre de 2020
- Urata, S., & Sekiya, A. (2003). Analysis of the Intermolecular Interactions between CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>OCF<sub>3</sub>, and CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CHF<sub>3</sub>. *National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*, 448-461. Recuperado el 10 de marzo de 2021 de <https://doi.org/10.1002/jcc.10395>
- Woolf, A. (1993). Interconversion of ASHRAE Refrigerant Numbers and Chemical Compositions. *Journal of Chemical Education*, 35. Recuperado el 11 de marzo de 2021 de <https://doi.org/10.1021/ed070p35>
- Yaws, C. (2009). *Transport Properties of Chemicals and Hydrocarbons*. William Andrew Inc. Recuperado el 8 de marzo de 2021
- Zheng, Y. Z., & Cheng, X. L. (2004). Vibrational Analysis for Decomposition Reactions. *of Fluorochloromethanol and Its Isomers*, 185-194. Recuperado el 11 de marzo de 2021 de <https://doi.org/10.1023/B:STUC.0000021526.85876.e4>



Anexos