



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLAS DE HIDALGO



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**Análisis de riesgo en una planta de generación de
energía de ciclo combinado con captura y
compresión postcombustión de CO₂**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRA EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

I.Q Sandra Cecilia Cerda Flores

Director: Dr. Fabricio Nápoles Rivera

Morelia Michoacán, Mayo de 2022



Asunto: Impresión de Tesis.

Lic. Ulises Gutiérrez Vazquez
Jefe del Departamento de Titulación de la
U.M.S.N.H.

Por este medio nos dirigimos a usted de la manera más atenta para notificarle, que después de haberle dado seguimiento al desarrollo de la tesis: "ANÁLISIS DE RIESGO EN UNA PLANTA DE GENERACIÓN DE ENERGÍA DE CICLO COMBINADO CON CAPTURA Y COMPRESIÓN POSTCOMBUSTIÓN DE CO₂", después de haber revisado el manuscrito que presentó la alumna Sandra Cecilia Cerda Flores con matrícula 0860289K concluimos que cumple con los requisitos académicos y con lo establecido en el Reglamento General de Estudios de Posgrado para el desarrollo de su Tesis.

Por lo anterior este Comité Tutorial da el aval para su impresión final.

Asesor: Dr. Fabricio Nápoles Rivera 12002518

Vocales:

Dr. José María Ponce Ortega 03002829

Dr. Roberto Guerra González 97003158

Dr. Agustín Jaime Castro Montoya 01000179

Dr. Luis Fernando Lira Barragán 0800447

Atentamente,
Morelia, Michoacán a 17 de mayo de 2022.


Dr. Luis Fernando Lira Barragán
Coordinador de la Maestría en Ciencias en Ingeniería Química.



FLB/mcpa.

DEPARTAMENTO DE POSGRADO

RESUMEN

La ingeniería de seguridad de procesos es un factor importante en el diseño de instalaciones y procesos químicos, y si se pasa por alto, puede dar lugar a accidentes que privan de la vida a los trabajadores y a las personas del entorno. Dichos accidentes también causan pérdidas económicas y daños al medio ambiente. Las aplicaciones matemáticas, como la optimización, la simulación y la inteligencia artificial, son herramientas que ayudan a predecir escenarios que podrían conducir a un accidente y sus consecuencias. Combinando estas aplicaciones con evaluaciones de riesgos, los tomadores de decisiones pueden reducirlos y así evitar accidentes. En este trabajo se realizó un análisis de riesgo cuantitativo para una central de ciclo combinado de gas natural con captura de CO₂ para obtener una función objetivo de riesgo a optimizar considerando la eficiencia global de las centrales y las emisiones de CO₂.

Palabras clave: Análisis de Riesgo Cuantitativo, Ciclo Combinado de Gas Natural, Captura de CO₂ Postcombustión, IA.

ABSTRACT

Process safety engineering is an important factor in the design of chemical facilities and processes, and if overlooked, can lead to accidents that deprive the lives of workers and people in the surroundings. Such accidents also cause economic losses and damage to the environment. Mathematical applications, such as optimization, simulation, and artificial intelligence, are tools that help predict scenarios that could lead to an accident and its consequences. Coupling these applications with risks assessments, decision makers can reduce risks. In this work, a quantitative risk analysis for a natural gas combined cycle power plant with CO₂ capture was carried out to obtain a risk objective function to optimize whilst considering the plants' overall efficiency and CO₂ emissions.

Keywords: Quantitative Risk Analysis, Natural Gas Combined Cycle, Post-combustion Carbon Capture, IA

NOMENCLATURA

IA Inteligencia Artificial

HRSG *Heat-Recovery Steam Generator* – generador de vapor de recuperación de calor

NGCC *Natural Gas Combined Cycle* – Ciclo combinado de gas natural

MEA Monoetanolamina

PCC *Post-combustion capture* – Captura postcombustión

QRA *Quantitative Risk Analysis* – Análisis de riesgo cuantitativo

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Fabricio,

Por su apoyo constante y consejos, desde la facultad hasta estos dos años de maestría. Le doy gracias por abrirme este camino y darme la confianza para continuar.

A mi comité tutorial,

Dr. José María Ponce Ortega, Dr. Agustín Jaime Castro Montoya, Dr. Luis Fernando Lira Barragán y Dr. Roberto Guerra González, por sus observaciones para mejorar este trabajo.

A mis papás,

Que siempre están presentes, hoy más que nunca entiendo la bendición de tener un soporte incondicional.

A mi familia,

Mis hermanos, Jaime y Pablo, mi abuelita Ma. de los Ángeles Ibarra, mis tíos y primos por su cariño y apoyo durante mi formación académica.

A mis amigos,

En especial a **Daniel Mendoza Espinosa[†]**. Aún es difícil aceptar que no estás, pero sigues presente en mi corazón.

A CONACyT,

Por el apoyo económico recibido durante la maestría.

Contenido

RESUMEN	3
ABSTRACT	4
NOMENCLATURA	5
AGRADECIMIENTOS	6
Índice de Figuras	9
Índice de Tablas.....	10
1. Introducción	11
1.1 Antecedentes.....	15
1.2 Justificación.....	18
1.3 Hipótesis	18
1.4 Objetivo General.....	19
1.5 Particulares	19
2. Marco teórico	20
Planta de generación de electricidad de ciclo combinado	20
Proceso de captura y compresión de CO ₂	20
Análisis de Riesgo Cuantitativo	22
Riesgo Individual.....	24
Algoritmos genéticos.....	24
Aprendizaje Automático.....	25
3. Metodología	27
4. Resultados	28
4.1. Análisis de Riesgo	28
Análisis de riesgo cualitativo.....	28
Análisis de Riesgo Cuantitativo	35

4.2 Análisis de sensibilidad	42
4.3 Optimización mediante el entrenamiento de la red y algoritmos genéticos.	49
Conclusiones.....	52
Recomendaciones	54
Bibliografía.....	55
Contribuciones académicas	60

Índice de Figuras

Figura 1. Tipos de Generación Eléctrica en México	14
Figura 2. Proceso de Generación de Ciclo Combinado.....	20
Figura 3. Diagrama de proceso de captura de CO ₂ postcombustión.....	22
Figura 4. Representación de una regresión lineal.....	26
Figura 5. Diagrama de Proceso correspondiente al Ciclo Brayton	28
Figura 6. Diagrama de Proceso correspondiente al Ciclo Rankine	31
Figura 7. Diagrama de Proceso correspondiente a la Captura de CO ₂	32
Figura 8. Diagrama de Proceso correspondiente a la Captura de CO ₂	34
Figura 9. Árbol de eventos para accidentes en la turbina.....	36
Figura 10. Equipos usados para el análisis de sensibilidad	43
Figura 11. Corriente S5	45
Figura 12. Gráfica del IR vs Potencia.....	46
Figura 13. Diagrama de Pareto IR, Potencia, Emisiones de CO ₂	48
Figura 14. Regresión lineal de los parámetros de salida	49
Figura 15. Resumen del modelo de entrenamiento de la red.....	49
Figura 16. Histograma de error del modelo de la red neuronal.....	50
Figura 17. Diagrama de Pareto de la optimización del sistema.....	51

Índice de Tablas

Tabla 1. Tipos de accidentes industriales	12
Tabla 2. Condiciones de operación en las corrientes del Ciclo Brayton	29
Tabla 3. Condiciones de operación en los equipos del Ciclo Brayton	29
Tabla 4. Condiciones de operación en las corrientes del Ciclo Rankine.....	31
Tabla 5. Condiciones de operación en los equipos del Ciclo Rankine.....	31
Tabla 6. Condiciones de operación en las corrientes de la Captura de CO ₂	32
Tabla 7. Condiciones de operación en los equipos de la Captura de CO ₂	33
Tabla 8. Condiciones de operación en los equipos de la Captura de CO ₂	34
Tabla 9. Frecuencias iniciales de pérdida de contención por liberación continua	36
Tabla 10. Frecuencias de tipo de accidente por equipo	37
Tabla 11. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC	39
Tabla 12. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC + PCC	40
Tabla 13. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC + PCC con integración energética.....	41
Tabla 14. Parámetros de IR, Potencia Global y Emisiones CO ₂	42
Tabla 15. Condiciones de operación evaluadas para cada caso en el análisis de sensibilidad	
Tabla 16. Flujos necesarios para energía de condensación	44
Tabla 17. Resultados de IR, Potencia y Emisiones de CO ₂	46
Tabla 18. Diferencial de potencias en los equipos	47

1. Introducción

A medida que crece la industria, crece la complejidad de los procesos, y por lo tanto crece la necesidad de tecnología de seguridad que satisfaga los riesgos que estos conllevan. En la actualidad, la seguridad industrial tiene que poseer la misma importancia que la producción en cualquier industria; por lo tanto, se ha convertido en una disciplina científica que incluye teorías y prácticas técnicas y complejas. Como ejemplo se tienen técnicas matemáticas que determinen las distintas maneras en que un proceso puede fallar, y la probabilidad de que esto suceda. Anteriormente, la palabra seguridad hacía énfasis en la seguridad del trabajador, e incluía reglas, regulaciones, y el uso de equipo de seguridad en la planta. Hoy en día esto también requiere de técnicas de identificación de riesgos, evaluaciones y el diseño ingenieril dentro del proceso para prevenir accidentes (Crowl, 2002). Es importante hacer la distinción entre los siguientes conceptos:

- **Riesgo** - Una medida de daño humano, ambiental o pérdida económica en términos de la probabilidad del accidente y la magnitud de la pérdida. Es una combinación de tres elementos, los eventos, las probabilidades y las consecuencias, así como una combinación de incertidumbre y daño.
- **Peligro** - Una condición física o química que tiene el potencial de causar daños a las personas, propiedad, o medio ambiente.

En el siglo XX, a partir de la segunda revolución industrial, han ocurrido cientos de accidentes que resultaron en miles de fatalidades, y en la mayoría de los casos se pudieron haber previsto o al menos minimizado los perjuicios, tanto humanos como económicos.

En 1984 en Bhopal, India, se presentó una fuga de gas isocianato de metilo en una fábrica de pesticidas formando una nube tóxica que envenenó a miles de personas en la ciudad. Las estimaciones de número de muertos varían, se han reportado hasta 8000 decesos y cientos de miles de personas lesionadas por el gas (Mandavilli, 2018).

En 1993, en Tailandia, ocurrió un incendio en una fábrica de juguetes, el cual resulto en 188 fatalidades y 500 personas heridas. La mayoría de las víctimas eran jóvenes trabajadoras de familias rurales (Symonds, 2018). La fábrica estaba tanto mal diseñada como construida. Las salidas de emergencia dibujadas en los planos del edificio no se construyeron, y las puertas externas existentes estaban cerradas.

El 4 de agosto de 2020 explotó una gran cantidad de nitrato de amonio almacenado en el puerto de la ciudad de Beirut, la capital del Líbano, en donde se almacenaban 2.750 toneladas de la sustancia. La explosión fue precedida por un incendio en el mismo almacén. Esta explosión arrebató la vida a 204 personas, hubo mínimo 6.500 heridos y se calcula una cantidad 15.000 millones de dólares en daños materiales, dejando un alrededor de 300.000 personas sin hogar.

Estos tres ejemplos ejemplifican los tres tipos de accidentes en una industria: incendios, explosiones, y tóxicos. La Tabla 1 muestra los tipos de accidentes industriales y su respectiva probabilidad de ocurrencia, el riesgo de muertes y el riesgo económico asociado.

Tabla 1. Tipos de accidentes industriales

Tipo de accidente	Probabilidad de ocurrencia	Riesgo de muertes	Riesgo económico
Incendio	ALTO	BAJO	INTERMEDIO
Explosiones	INTERMEDIO	INTERMEDIO	ALTO
Tóxico	BAJO	ALTO	BAJO

En México se estima que hay aproximadamente 1150 accidentes laborales al día (IMSS, 2018). La mayoría de los accidentes se llevan a cabo en tres pasos: inicio (la causa del accidente), propagación (los eventos que causan que el accidente se expanda) y final (el evento que finaliza el accidente o lo reduce). La ingeniería de seguridad implica eliminar el paso de inicio y reemplazar la propagación con la finalización del evento. El involucrar la seguridad como un criterio en el diseño de la planta, puede reducir los riesgos asociados con los accidentes. Las estrategias para reducir los riesgos se pueden dividir en cuatro categorías (Bollinger, 1996): inherente, pasiva, activa y de procedimiento.

Las primeras dos tratan de la eliminación y reducción riesgos, mientras que las últimas dos utilizan funciones diseñadas como controles, y sistemas de apagado de emergencia para detectar desviaciones de procesos potencialmente peligrosos y tomar medidas correctivas (activa) y de enfoques de gestión como procedimientos operativos, verificaciones administrativas y respuesta a emergencias para prevenir incidentes o minimizar los efectos de un incidente (de procedimiento). De estas cuatro categorías, se considera que las metodologías inherentes y pasivas tienen un mayor rango de confiabilidad, ya que dependen de las propiedades físicas y químicas del sistema en lugar de la operación o intervención adecuada y oportuna de dispositivos y personas.

Se dice que un proceso tiene seguridad inherente sí este tiene un bajo nivel de riesgo, reduciendo o eliminando peligros asociados con los materiales y operaciones en el proceso. Una planta con seguridad inherente es más tolerante a los errores del operador y condiciones anormales, y es esencial para la práctica industrial de la ingeniería química debido a su sustento en la química y física de los materiales, las transformaciones químicas y las separaciones moleculares involucradas en el procesamiento químico. Esto se puede llevar a cabo con los siguientes cuatro principios (Kletz, 1985)

- *Minimización:* reducir los peligros mediante el uso de pequeñas cantidades de sustancias peligrosas en los reactores, columnas de destilación, recipientes de almacenamiento y tuberías. Cuando sea posible, los materiales peligrosos se deben producir y consumir in situ, así minimizando el almacenamiento y transporte de materias primas peligrosas.
- *Sustitución:* Buscar opciones menos peligrosas, en químicos, materiales y procesos.
- *Moderación:* involucra llevar el proceso bajo condiciones menos peligrosas, por ejemplo, refrigerar para bajar la presión de vapor, manejar sólidos de partículas de mayor tamaño para minimizar el polvo, o procesar a condiciones de temperatura y presión menos severas.
- *Simplificación:* eliminar complejidad en los procesos, minimizando oportunidades de error.

Estos principios se pueden poner en práctica en cualquier etapa del diseño del proceso, sin embargo, las decisiones que más impacto tienen se llevan a cabo durante las fases iniciales,

y se ha observado que se tiende a tener mejores resultados (Khan, 2002). Un diseño de proceso inherentemente seguro es una manera muy diferente de idealizar el diseño de procesos y plantas químicas, ya que se enfoca más en la eliminación y reducción de riesgos en lugar de la gestión y control.

Por otra parte, con las preocupaciones actuales sobre la energía y el impacto ambiental, las plantas de gas natural de ciclo combinado desempeñan un papel importante en los complejos energéticos del mundo. La combinación de los ciclos termodinámicos logra obtener eficiencias de hasta el 60%, y por ello son la fuente principal de energía a nivel mundial. Se estima que este tipo de plantas desplazarán al carbón en el sector de generación de energía para el año 2050, ya que las emisiones de CO₂ son considerablemente más bajas (Boyce, 2012). Un estudio, publicado en el 2018 muestra que las unidades de gas natural tienen una tasa de emisión promedio de 405 kg de CO₂ por megavatio-hora (MWh), mientras que las unidades de carbón tienen una tasa de emisiones de 989 kg de CO₂ por MWh (EPA, 2018). Las unidades de ciclo combinado de gas natural generan aproximadamente el 40% de las emisiones de CO₂ en comparación con las unidades convencionales de carbón. En México, son el segundo tipo de generación eléctrica más utilizado, con 42 plantas en funcionamiento (CMIC,2020), generando el 57% de energía eléctrica en el país, mostrado en la Figura 1.

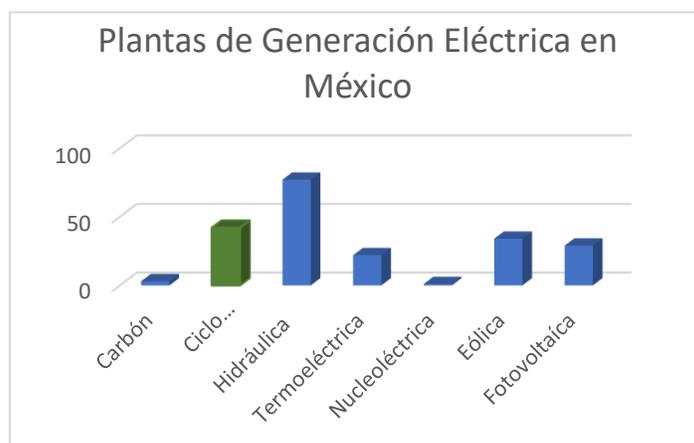


Figura 1. Tipos de Generación Eléctrica en México

1.1 Antecedentes

Las contribuciones científicas de seguridad a la industria química de procesos son extensas. La educación en seguridad de procesos se desarrolla debido a los accidentes en dichas industrias (Mkpat, 2018), puesto que estos tienden a tener graves consecuencias para personas, ambiente y los activos de la empresa. Estos accidentes se caracterizan por tener una frecuencia de ocurrencia baja y consecuencias de alto impacto. Los análisis de riesgo cuantitativo se aplican para mejorar condiciones de operación y diseño de plantas y así disminuir los niveles de riesgo. El término "evaluación de riesgos" se usa ampliamente tanto en la literatura como en la industria, y cubre una variedad de significados. En su sentido más estricto, una evaluación de riesgos cuantitativa implica la determinación de la probabilidad de una secuencia de eventos particular para un escenario dado (Rae, 2012). La optimización enfocada en funciones objetivo de seguridad tiene dos vertientes: de acuerdo con la planificación óptima de instalaciones de equipos para reducir pérdidas en caso de accidentes, y en función de las condiciones de los equipos para minimizar riesgos. Un estudio propuesto por Jung. S et al. (2010), integró un análisis de riesgos en la formulación de optimización, proponiendo así una asignación más segura para el diseño y la ubicación de las instalaciones para evitar riesgos asociados con la liberación tóxica de gases. También desarrolló una metodología para encontrar la ubicación óptima de una instalación con métodos de optimización auxiliados por técnicas estadísticas para encontrar la probabilidad de cada incidente. López-Molina et al., (2013) desarrollaron un enfoque para reducir la probabilidad de producir un efecto dominó en la industria de procesos, combinando la estimación de la probabilidad de daño debido a la sobrepresión, y los valores de umbral de escalada definidos, con otras restricciones de diseño típicas, así como también limitan la restricción de probabilidad, resultando en un problema MINLP no lineal. Se desarrolló un enfoque en el cual se considera un modelo donde al menos un gas tóxico es liberado, así determinando el peor de los casos en donde las condiciones del viento permanecen en calma dentro de una condición atmosférica rural y estable (Díaz-Ovalle, 2010). Los resultados muestran la funcionalidad de este modelo determinista para reducir el riesgo debido a la liberación de gases tóxicos asignando las instalaciones a una distancia más segura de la fuente de emisión. Sato Y (2012) llevó a cabo un estudio para optimizar la planificación

presupuestaria para la inversión en medidas de seguridad en una empresa química, abordando problemas de la toma de decisiones para la inversión estratégica para la seguridad combinando la programación lineal y el proceso de jerarquía analítica, mostrando cómo cuantificar los riesgos inherentes dentro de las plantas químicas. Se han aplicado métodos como el análisis de riesgo cuantitativo para estimar el riesgo asociado con un diseño específico, así comparando con otros se puede determinar cuál es inherentemente más seguro, como proponen Barnechea et al., (2014). El análisis de riesgos puede incorporar fenómenos complejos como el efecto dominó y los posibles impactos en elementos materiales y humanos vulnerables. Rahman S. et al., (2014) hicieron uso de un MILP para resolver el problema de optimización de diseño de una planta de amoníaco, seleccionando cuatro unidades de proceso críticas, considerando las ubicaciones de cuatro instalaciones para modelar las consecuencias de una liberación tóxica y la sobrepresión de explosión dado el peor escenario. Medina-Herrera et al., (2014) propusieron un modelo que incluye análisis de riesgos cuantitativos para identificar posibles resultados catastróficos en el layout de la planta de dos procesos propuestos, utilizando un enfoque sistemático para la integración de consideraciones económicas y escenarios de riesgo inciertos dentro del procedimiento de optimización. Martínez-Gómez et al., (2017) presentaron un enfoque basado en la optimización para incorporar consideraciones económicas y de seguridad en la selección de la tecnología para la producción de gas de síntesis a partir de shale gas, utilizando la integración coordinada de simulación de procesos y QRA para modelar el proceso bajo varias condiciones y cuantificar los riesgos asociados. Se han llevado a cabo modelos para prevenir riesgos de tal manera que la planta de proceso ahorre costos futuros para la compañía (Roy. S et al., 2019) quienes presentaron un marco de optimización de inversión en seguridad para una planta de proceso típica, buscando la reducción máxima de los valores de riesgo en todos los riesgos potenciales aplicando una restricción de presupuesto para la inversión de la planta.

Hay pocas investigaciones realizadas específicamente sobre el proceso de ciclo combinado de gas natural acoplado con captura de CO₂, en conjunto. Existen reportes sobre evaluación de riesgos en plantas específicas de ciclo combinado de gas natural (Mabaso, 2019), así como estudios usando el simulador de seguridad ALOHA para predecir accidentes de acuerdo con las frecuencias de accidentes por fugas en tuberías (Shao, 2012).

Para el proceso de captura de CO₂, hay investigaciones que usan el HAZOP (Krzemién, 2013) para realizar el análisis de riesgo, sin cuantificar daños, y otros como el realizado por Yuo et al., (2020), quienes llevaron a cabo una evaluación de riesgos para el proceso de captura de CO₂. Para lograr ese grado de detalle en el análisis QRA, se debe de contar con un diagrama de tuberías e instrumentación del proceso. Los autores obtuvieron una probabilidad de explosión de 3.55E-03 basado en contribuciones de 22 eventos básicos y 19 eventos intermedios.

En este trabajo se busca realizar un análisis de riesgos con la finalidad de obtener una función objetivo de seguridad. Esta función objetivo se evaluará para distintos escenarios de captura de dióxido de carbono para poder comparar el comportamiento entre el índice de riesgo, la potencia global de la planta y las emisiones de CO₂.

1.2 Justificación

La seguridad es un elemento clave en el diseño de las instalaciones y procesos industriales. Con los avances tecnológicos ahora es posible simular las posibles situaciones que podrían desatar un accidente y sus posibles consecuencias, y esto se lleva a cabo con evaluaciones de riesgo. En México, las plantas de ciclo combinado de gas natural continuarán estableciéndose entre las principales fuentes de generación eléctrica, con proyectos de seis nuevas instalaciones para el año 2024 (CFE, 2019). Por sus amplios beneficios, son los tipos de centrales eléctricas más estudiadas, sin embargo, hay pocos estudios que brinden información entre la interrelación de la seguridad con los aspectos técnicos, económicos y ambientales de las mismas.

1.3 Hipótesis

Si se emplean herramientas de simulación y análisis de riesgo en una central eléctrica de ciclo combinado de gas natural (NGCC) integrada con captura de carbono postcombustión (PCC) y compresión de CO₂, se podrá replantear el diseño de equipos para cumplir con las condiciones que garanticen el riesgo mínimo, considerando simultáneamente la posibilidad de aumentar la eficiencia del proceso y reducir el impacto energético de captura y compresión de CO₂.

1.4 Objetivo General

Emplear herramientas de simulación con un análisis de riesgo cuantitativo, en una central eléctrica de ciclo combinado de gas natural, ciclo combinado de gas natural integrada con captura de carbono postcombustión (PCC) y compresión de CO₂, y una NGCC con PCC y compresión de CO₂ con integración energética, a fin de evaluar el riesgo asociado y replantear el diseño de los equipos para cumplir con las condiciones del proceso que garantice el riesgo mínimo, maximizando la potencia y las emisiones totales.

1.5 Particulares

- Caracterizar el proceso del caso de estudio.
- Llevar a cabo el análisis de riesgo cuantitativo.
- Obtener las funciones objetivo de seguridad, mediante el uso de las frecuencias de fallo en los equipos del proceso.
- Generar superficies de respuesta para seleccionar las mejores condiciones de operación que permitan optimizar el proceso desde el punto de vista técnico, económico, ambiental y de seguridad
- Generar un modelo de aprendizaje automático que permita predecir el comportamiento del sistema para diferentes condiciones de operación.

2. Marco teórico

Planta de generación de electricidad de ciclo combinado

Este tipo de planta genera electricidad por medio de dos ciclos termodinámicos: el ciclo Brayton, y el ciclo Rankine. Para la primera parte del proceso, se comprime aire y se mezcla con una corriente de gas natural, llevándose a cabo una reacción de combustión; estos gases de escape accionan la turbina de gas, en la cual se genera electricidad; los gases residuales se aprovechan para la segunda parte del proceso, en donde pasan a través de una caldera de recuperación de calor, calentando agua y generando vapores de alta presión que accionan la turbina de vapor, generando electricidad adicional, tal como se muestra en la Figura 2.

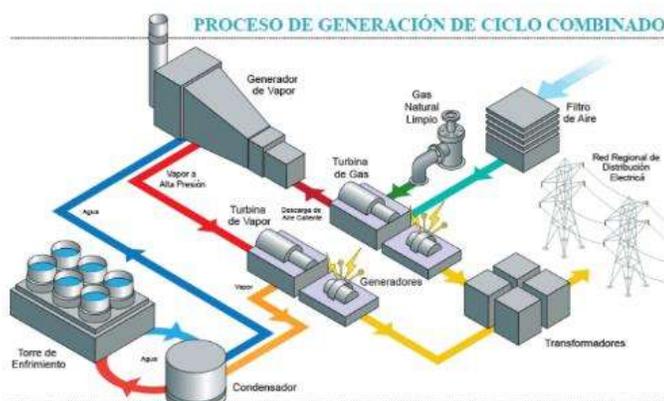


Figura 2. Proceso de Generación de Ciclo Combinado

Proceso de captura y compresión de CO₂

Una ventaja de las centrales eléctricas ciclo combinado de gas natural es que producen aproximadamente la mitad de las emisiones de gases efecto invernadero que las centrales eléctricas de carbón, sin embargo, para reducir significativamente estas emisiones, una opción viable ha sido acoplar ciclos de potencia con sistemas de captura y compresión de CO₂.

Existen diferentes tecnologías que se utilizan para separar CO₂, que se pueden clasificar como métodos de pre-combustión, poscombustión y oxicombustión. La captura previa a la combustión se relaciona con la eliminación de compuestos de carbono antes de introducir combustible en la cámara de combustión. Este método se utiliza principalmente en procesos

de gasificación integrada en ciclo combinado (IGCC) y puede lograr una alta eficiencia de eliminación de CO₂. Respecto a las tecnologías de oxidación, el combustible se quema con un exceso de O₂ y los gases de escape (CO₂ y vapor) se pueden separar fácilmente del vapor de agua mediante condensación.

Las tecnologías existentes para la captura de CO₂ postcombustión son diversas (Madejski, 2022), entre ellas la captura por absorción química, la separación física, la separación por membrana y los métodos criogénicos. En la adsorción física se utilizan materiales (como el carbón activo y las zeolitas) que pueden adsorber el CO₂ a altas temperaturas para posteriormente recuperarlos con procesos físicos. De manera general, en la separación por membranas el gas de combustión se lleva hacia el lado de la membrana que está a presión alta, y el dióxido de carbono se recupere del lado de presión baja. Los métodos criogénicos se caracterizan por el gas natural líquido a bajas temperaturas para otorgar la energía fría que captura el dióxido de carbono. La absorción química, mostrado en la Figura 3, es el método más utilizado y estudiado de captura de CO₂. Se basa en una reacción entre el dióxido de carbono y un solvente químico. Los disolventes que se suelen utilizar son las alcanolaminas, como la monoetanolamina (MEA), la dietanolamina (DEA) o la metildietanolamina (MDEA) en solución acuosa. El proceso se lleva a cabo en dos etapas: primero, el gas de combustión reacciona con el solvente (MEA) en el absorbedor para capturar CO₂. Posteriormente, la solución de carga rica en MEA se lleva al separador para regenerar CO₂ a temperaturas elevadas. La solución sin CO₂ se regresa a la columna de absorción. Una corriente de dióxido de carbono de alta pureza del desorbedor se transfiere para su compresión y almacenamiento o utilización. Las soluciones de MEA y MDEA al 30% típicamente utilizadas logran una alta eficiencia del proceso y un alto grado de pureza del dióxido de carbono. Sin embargo, para el caso específico de la planta de ciclo combinado de gas natural, la potencia global del proceso disminuye ya que una parte de la energía utilizada para la condensación del vapor de las turbinas para la generación de electricidad se utiliza para regenerar la amina en el proceso de captura de CO₂.

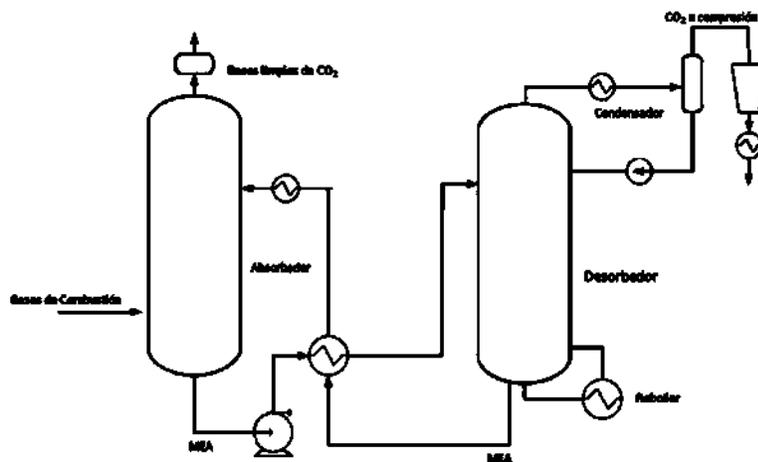


Figura 3. Diagrama de proceso de captura de CO₂ postcombustión

El dióxido de carbono capturado se puede utilizar en diversos procesos industriales, por ejemplo, para envasado de alimentos, carburación de bebidas, para la producción de urea, como refrigerante y en producción de distintos químicos como el metano, metanol y CO.

Análisis de Riesgo Cuantitativo

Existen distintos métodos para la identificación de riesgos, entre ellos el uso de listas y encuestas para evaluar los posibles problemas que los equipos y las sustancias utilizadas en el proceso puedan causar. Uno de los métodos más utilizados para la identificación de riesgos es el análisis funcional de operatividad, HAZOP por sus siglas en inglés (Hazard and Operative Study). Este es un estudio completo que se basa en la premisa de que los accidentes se producen como consecuencia de una desviación de las variables de proceso con respecto a los parámetros normales de operación, y se lleva a cabo por un equipo interdisciplinario de trabajo.

La evaluación de riesgos incluye determinar los eventos que puedan causar un accidente, la probabilidad de que ocurran dichos eventos y sus consecuencias. A este tipo de evaluación se le denomina análisis de riesgos cuantitativo (quantitative risk analysis – QRA), y es un método que identifica como la operación puede ser modificada para reducir el riesgo; la complejidad depende del objeto del estudio y de la información disponible. Esta herramienta

se utiliza para determinar el riesgo del uso, la manipulación, el transporte y el almacenamiento de sustancias peligrosas (De Haag, 2005). Los QRA tienen como finalidad demostrar el riesgo causado por la actividad y proporcionar a las autoridades competentes la información que permita tomar decisiones sobre la aceptabilidad del riesgo relacionado con los desarrollos en el lugar o en los alrededores del establecimiento o la ruta de transporte. El fundamento del QRA es identificar escenarios de incidentes y evaluar el riesgo mediante la definición de la probabilidad de fracaso, la probabilidad de diversas consecuencias y el impacto potencial de esas consecuencias. El riesgo se define en un QRA como una función de la probabilidad o frecuencia y la consecuencia de un escenario de accidente particular:

$$Riesgo = F(s, c, f)$$

s = escenario hipotético

c = consecuencia estimada

f = frecuencia estimada

En general, un análisis de riesgo cuantitativo se lleva a cabo con los siguientes pasos:

- a. Definir las posibles secuencias de eventos y los posibles incidentes, basándose en un análisis cualitativo de peligros.
- b. Evaluar los resultados del incidente.
- c. Estimar las frecuencias de incidentes potenciales.
- d. Estimar los impactos del incidente en las personas, el medio ambiente y la propiedad.
- e. Estimar el riesgo.
- f. Evaluar el riesgo, identificando las principales fuentes de riesgo para determinar si existen modificaciones rentables del proceso o de la planta que se pueden implementar para reducir el riesgo.
- g. Identificar y priorizar las posibles medidas de reducción del riesgo si el riesgo se considera excesivo.

Es importante seleccionar el número total de casos de resultados de los incidentes a estudiar sin introducir sesgos o perder resolución al pasar por alto incidentes significativos o resultados de incidentes, para construir un conjunto apropiado de incidentes necesarios para

satisfacer los requisitos del estudio que representan adecuadamente el espectro de incidentes enumerados.

Para poder llevar a cabo la cuantificación de riesgos, se han desarrollado índices como herramientas para la gestión de riesgos, los cuales miden algún aspecto de la seguridad inherente de un proceso, entre ellos los índices de Dow para incendios y explosiones, índice de Mond, índices de riesgo de toxicidad, entre otros.

Riesgo Individual

El riesgo individual hace referencia a la probabilidad de que en un año una persona sea víctima de un accidente si la persona queda permanentemente y desprotegida en un lugar determinado. Esta probabilidad se puede reemplazar por la frecuencia de ocurrencia por año.

Este cálculo involucra el uso de las funciones PROBIT, que proporcionan un vínculo entre la probabilidad de la respuesta esperada y la exposición de una población a un evento específico. El análisis probit puede proporcionar una estimación del porcentaje de ocupantes protegidos con potencial de respuesta adversa a un escape químico (James, 2014).

Algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos están basados en la población (Mirjalili, 2019). Cada solución corresponde a un cromosoma y cada parámetro representa un gen. Este algoritmo evalúa la aptitud de cada individuo dentro de una población haciendo uso de una función de aptitud (objetivo). Para mejorar las soluciones deficientes, las mejores soluciones se eligen al azar con un mecanismo de selección. Lo que aumenta el evitar puntos óptimos locales es la probabilidad de elegir soluciones subóptimas también. Esto significa que, si las buenas soluciones quedan atrapadas en una solución local, pueden extraerse con otras soluciones.

Lo que hace que este algoritmo sea confiable y capaz de estimar el óptimo global para un problema dado es el proceso de mantener las mejores soluciones en cada generación y usarlas para mejorar otras soluciones. Como tal, toda la población se vuelve mejor generación tras generación. El cruce entre individuos da como resultado la explotación del "área" entre las dos soluciones principales dadas.

Aprendizaje Automático

La inteligencia artificial es una rama de la ciencia y tecnología que crea máquinas inteligentes y programas informáticos para realizar diversas tareas que requieren inteligencia humana. Una de las subramas de la inteligencia artificial es el *machine learning*, el aprendizaje automático.

De forma general, el aprendizaje automático son los métodos computacionales que utilizan la experiencia para mejorar el rendimiento o hacer predicciones precisas, definiendo la experiencia como la información disponible, o sea, datos electrónicos recopilados y disponibles para su análisis (Mohri, 2018). Las redes reciben información de entrada, la procesan en conjunto y generan una salida con las predicciones establecidas en función de lo que se haya programado. Las siguientes son algunas tareas estándar de aprendizaje automático que se han estudiado ampliamente:

- Clasificación: El problema de asignar una categoría a cada artículo.
- Regresión: El problema de predecir un valor real para cada artículo. Ejemplos de regresión incluyen la predicción de valores de acciones o la de variaciones de variables económicas.
- Clasificación: El problema de aprender a ordenar artículos de acuerdo con algún criterio.
- Agrupamiento: El problema de particionar un conjunto de elementos en subconjuntos homogéneos. Esto se usa a menudo para analizar conjuntos de datos muy grandes.
- Reducción de dimensionalidad: Este problema consiste en transformar una representación inicial de elementos en una representación de menor dimensión conservando algunas propiedades de la representación inicial.

Para este caso de estudio, el análisis de regresión se utilizará para predecir el comportamiento del sistema para diferentes condiciones de operación. Para esto, se dan varias variables predictoras (explicativas) y una variable de respuesta continua (resultado), y se intenta encontrar una relación entre esas variables que permita predecir un resultado.

Por ejemplo (Raschka, 2015): Se tiene el interés de predecir las calificaciones de matemáticas de los estudiantes. Si existe una relación entre el tiempo dedicado a estudiar para el examen y los puntajes finales, se pueden utilizar como datos de entrenamiento para aprender un modelo que use el tiempo de estudio para predecir los puntajes de los futuros estudiantes que planean tomar el examen.

La Figura 4 ilustra el concepto de regresión lineal. Dada una variable de característica, x , y una variable de destino, y , se ajusta una línea recta a estos datos que minimiza la distancia, más comúnmente la distancia cuadrática promedio, entre los puntos de datos y la línea ajustada. Se puede utilizar la intersección y la pendiente aprendidas de estos datos para predecir la variable objetivo de nuevos datos.

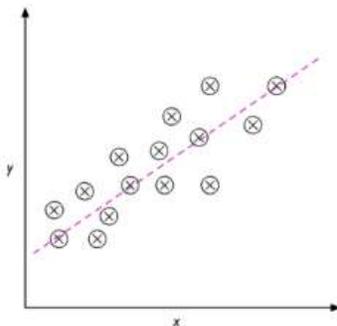


Figura 4. Representación de una regresión lineal.

3. Metodología

El presente proyecto de investigación se llevará a cabo en una serie de etapas descritas a continuación:

- Etapa 1

Investigación bibliográfica y de información.

En esta etapa se realizará una investigación bibliográfica con el fin de obtener información que permitirá el planteamiento de un modelo matemático, además de identificar los parámetros que se requieren para la formulación del mismo.

- Etapa 2

Caracterización del proceso

Se deberá caracterizar el proceso para poder identificar los riesgos más comunes, la tasa de fallo, los balances de masa y energía, y las propiedades físicas y químicas para llevar a cabo un análisis de riesgo cuantitativo (QRA).

- Etapa 3

Obtención de funciones objetivo de seguridad

Con la información obtenida del QRA, se identificarán los accidentes, para llevar a cabo el cálculo de las frecuencias de dichos accidentes y posteriormente obtener las funciones objetivo de seguridad a optimizar.

- Etapa 4

Análisis de resultados

4. Resultados

4.1. Análisis de Riesgo

Análisis de riesgo cualitativo

El caso de estudio es una planta de ciclo combinado de gas natural con captura de carbono post combustión de 453 MW (Esquivel-Patiño, 2019). La simulación de dicha planta se llevó a cabo en ASPEN de acuerdo con los datos obtenidos del reporte realizado por IEAGHG (2012).

El proceso se puede dividir en las siguientes secciones:

1. Ciclo Brayton
2. Ciclo Rankine
3. Captura de CO₂
4. Tren de compresión de CO₂

Los accidentes generalmente resultan de una pérdida de contención del material del proceso. El material tiene propiedades peligrosas, que pueden incluir propiedades tóxicas y contenido energético; a continuación, se presentan las tablas que contienen las sustancias y el flujo, temperatura y presión a las cuales fluyen a través de las corrientes simuladas la para central eléctrica de ciclo combinado de gas natural (NGCC) integrada con captura de carbono postcombustión (PCC) y compresión de CO₂.

1. Ciclo Brayton

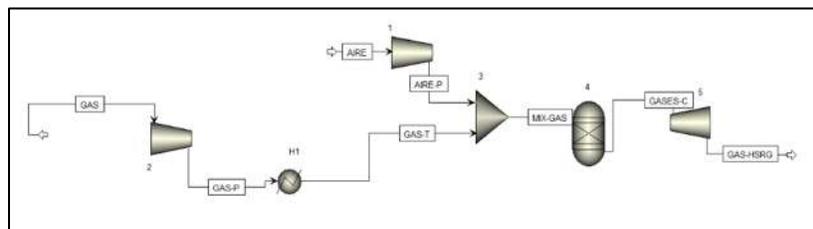


Figura 5. Diagrama de Proceso correspondiente al Ciclo Brayton

Tabla 2. Condiciones de operación en las corrientes del Ciclo Brayton

CORRIENTE	FASE	Frac.Vap	Frac.Liq	FLUJO (kg/h)	T (°C)	P (bar)	Fracciones Másicas								
							CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	BUTANO	PENTANO
AIRE	VAPOR	1	0	2365000	9	1.013	-	-	0.7699	0.2301	-	-	-	-	-
AIRE-P	VAPOR	1	0	2365000	273.27	6.3	-	-	0.7699	0.2301	-	-	-	-	-
GAS	VAPOR	1	0	59840	9	18	0.0516	-	0.0146	-	0.8377	0.0781	0.0159	0.0018	0.0002
GAS-P	VAPOR	1	0	59840	58.207	30.43	0.0516	-	0.0146	-	0.8377	0.0781	0.0159	0.0018	0.0002
GAS-T	VAPOR	1	0	59840	117	30.43	0.0516	-	0.0146	-	0.8377	0.0781	0.0159	0.0018	0.0002
MIX-GAS	VAPOR	1	0	2424840	263.6	6.3	0.0013	-	0.7512	0.2244	0.0207	0.0019	0.0004	0.0000	0.0000
GASES-C	VAPOR	1	0	2424840	1200	18.91	0.0650	0.0506	0.7512	0.1332	-	-	-	-	-
GAS-HRGS	VAPOR	1	0	2424840	639.48	1.039	0.0650	0.0506	0.7512	0.1332	-	-	-	-	-

Tabla 3. Condiciones de operación en los equipos del Ciclo Brayton

EQUIPO	#	P (bar)	T (°C)
Compresor	1	6.30	273.27
Compresor	2	30.43	58.21
Calentador	H1	30.43	117.00
Mezclador	3	6.30	263.60
Cámara de Combustión	4	18.91	1200.00
Turbina	5	18.91	639.48

En la parte del proceso operada por el ciclo Brayton, mostrado en la Figura 5, los componentes principales son el aire y gas natural. La Tabla 2 muestra las condiciones de operación de las corrientes en esta parte del proceso, donde se pueden apreciar las fracciones másicas de cada corriente, y sus condiciones de operación. Como se puede observar de la Tabla 3, que muestra las condiciones de operación en los equipos, el aire se presuriza al pasar por el compresor a 6.3 bar. El principal peligro asociado con los compresores (HSG39, 1998) es la sobre presurización, la cual puede ser causada por:

- a. Una restricción al flujo;
- b. Falla de los controles automáticos;
- c. Mal funcionamiento del compresor;
- d. Un incendio externo cerca del sistema de presión; y
- e. El sobrecalentamiento y la acumulación de depósitos carbonosos, los cuales pueden provocar incendios o explosiones.

Por su parte, el aire comprimido a alta presión puede penetrar la piel, los recipientes que lo contienen pueden explotar si se pierde integridad, y el aire sucio o húmedo puede provocar corrosión y válvulas bloqueadas, lo cual vuelve el sistema inseguro.

Las complejas tuberías de suministro de combustible a las turbinas de alta presión dan lugar a un riesgo de explosión en caso de pequeñas fugas. Las turbinas de gas deben operar sin vibraciones excesivas, y los detectores de vibraciones se instalan a menudo, pero no siempre, en unidades más grandes para detectar fallas (Santon, 1998). Dicha vibración también podría causar fallas en las uniones de las tuberías de combustible. Una fuga de combustible de una válvula de control, una tubería flexible o una unión de tubería bridada, atornillada o soldada es un peligro contra el cual se deben tomar las precauciones adecuadas.

La composición del gas natural es metano (+- 95% v/v), con otros componentes incluyendo el etano, propano y nitrógeno. Dada la flamabilidad y la naturaleza explosiva del gas natural, los peligros asociados con la transferencia de gas son incendios y explosiones de vapor. No son compatibles con oxidantes fuertes y pueden resultar en incendios y explosiones en su presencia. El gas natural no es tóxico, sin embargo, se considera asfixiante.

Generalmente los límites de inflamabilidad/explosión, la energía de explosión (o la presión máxima de explosión) y la tasa de aumento de la presión son los parámetros más importantes para caracterizar el riesgo y la gravedad de la explosión (Huang, 2019). Los límites se consideran como las concentraciones de combustible que la llama es capaz de propagar desde la fuente de ignición a través de la mezcla. Para las mezclas de gas natural y aire, el límite inferior de explosión (LEL) está limitado por la concentración de combustible, mientras que el límite superior de explosión (UEL) está limitado por la concentración de oxígeno.

2. Ciclo Rankine

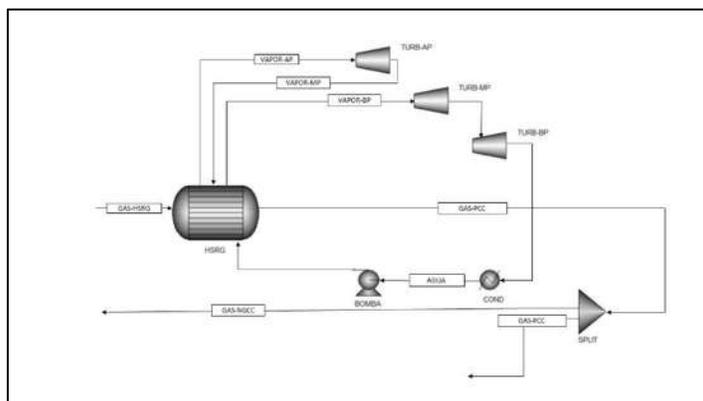


Figura 6. Diagrama de Proceso correspondiente al Ciclo Rankine

En la Figura 6 se muestra la parte del proceso correspondiente al ciclo Rankine, el cual opera con vapor de agua; en este caso, el gas residual que viene por el corriente gas HSRG calienta el agua en circulación en la caldera para la generación de vapor de alta, media y baja presión. El vapor de alta presión se lleva a una turbina donde se produce energía cinética para la generación de electricidad; el vapor residual se lleva a un condensador, que pasa a estado líquido y se bombea para ser introducido de nuevo a la caldera. Las Tablas 4 y 5 describen las condiciones de operación en los equipos y las corrientes del ciclo Rankine. Donde se puede identificar áreas de riesgo principalmente en la caldera de recuperación de calor y las turbinas.

Tabla 4. Condiciones de operación en las corrientes del Ciclo Rankine

	Frac.Vap	Frac.Liq	FLUJO (kg/h)	T (°C)	P (bar)	CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	BUTANO	PENTANO
GAS HSRG	1	0	2424840	639.479	1.039	0.0650	0.0506	0.7512	0.1332	-	-	-	-	-
VAPOR-AP	1	0	313300	601.7	172.5	-	1.0000	-	-	-	-	-	-	-
VAPOR-MP	1	0	354700	601.5	41.4	-	1.0000	-	-	-	-	-	-	-
VAPOR-BP	1	0	138500	309.1	5.81	-	1.0000	-	-	-	-	-	-	-
GAS-PCC	1	0	2424839.928	81.99	1.01325	0.0650	0.0506	0.7512	0.1332	-	-	-	-	-
AGUA	0.871067	0.128933	413900	28.529103	0.039	-	1.0000	-	-	-	-	-	-	-
AGUA-B	0	1	413900	28.5291	0.039	-	1.0000	-	-	-	-	-	-	-
GAS-NGCC	1	0	59840	107.01	30.43	0.0516	-	0.0146	-	0.8377	0.0781	0.0159	0.0018	0.0002
GAS-PCC-S	1	0	2351952.973	33	2.0265	0.0670	0.0212	0.7745	0.1373	-	-	-	-	-

Tabla 5. Condiciones de operación en los equipos del Ciclo Rankine

EQUIPO	#	P (bar)	T (°C)
Turbina	TURB-AP	42.64	378.352
Turbina	TURB-MP	5.9	311.574
Turbina	TURB-BP	0.039	28.5291
Condensador	COND	0.039	28.37
Bomba	BOMBA	6.283	28.5772344
Separador	SPLIT	0.039	28.53
Caldera Recuperación de Vapor	HSRG	1.039	639.479

3. Captura de CO₂

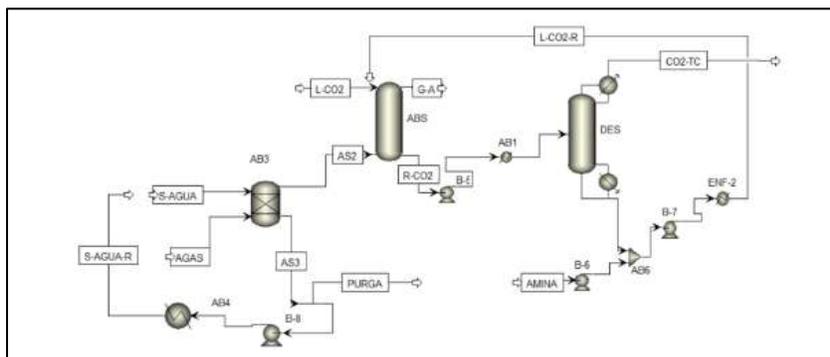


Figura 7. Diagrama de Proceso correspondiente a la Captura de CO₂

En el proceso de captura de CO₂, mostrado en la Figura 7, el gas de combustión sin procesar de una planta de energía se depura primero con agua circulante a 35°C para eliminar las impurezas. El gas pretratado entra por la parte inferior del absorbedor mientras que la solución MEA ingresa por la parte superior, lo que lleva al contacto entre el CO₂ y el solvente MEA en un absorbedor empacado. El gas de combustión tratado, que consiste principalmente en N₂ y O₂ con una pequeña cantidad de agua, sale por la parte superior del absorbedor. La amina rica que sale por la parte inferior del absorbedor se bombea al intercambiador de calor cruzado para ser precalentada por un solvente de amina regenerada. El CO₂ se separa de la MEA en el desabsorbedor, y se manda al tren de compresión para su almacenamiento.

Tabla 6. Condiciones de operación en las corrientes de la Captura de CO₂

CORRIENTE	Frac.Vap	Frac.Liq	FLUJO (kg/h)	T (°C)	P (bar)	Fracción Másica							
						CO ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂	MEA [C2H7NO]	MEA+[C2H8NO+]	MEACOO-[C3H6NO3-]	HCO3-
L-CO2-R	0	1	1750884.54	34.95	5.00	0.04	0.61	0.00	8.37E-06	0.35	4.17E-05	6.98E-05	3.90E-09
L-CO2	0	1	1723181.91	34.95	5.00	0.04	0.61	-	-	0.35	-	-	-
G-A	1	0	2177868.39	29.35	1.50	2.21E-03	1.41E-02	0.84	0.15	4.04E-07	-	-	-
AS2	1	0	2351952.97	33.00	2.03	0.07	0.02	0.77	0.14	-	-	-	-
R-CO2	0	1	1897266.49	36.35	1.57	2.99E-03	0.56	7.58E-04	3.44E-04	8.40E-08	0.16	0.27	3.60E-09
AAS2	0	1	1897266.49	36.56	9.81	2.99E-03	0.56	7.58E-04	3.44E-04	8.40E-08	0.16	0.27	3.60E-09
AS8	0	1	1897266.46	105	9.81	2.99E-03	0.56	7.58E-04	3.44E-04	8.40E-08	0.16	0.27	3.60E-09
CO2-TC	1	0	157983.99	-73.31	2.40	0.9869	-	9.01E-03	4.04E-03	-	-	-	-
AS12	0	1	1739282.51	65.84	2.41	0.0385	0.61	7.72E-06	8.42E-06	0.35	4.19E-05	7.03E-05	3.92E-09
AMINA	0	1	11602.03	30.00	1.01	-	0.37	-	-	0.63	-	-	-
AS5	0	1	11602.03	30.01	1.11	-	0.37	-	-	0.63	-	-	-
AS6	0.02	0.98	1750884.54	60.82	1.11	0.02	0.84	6.74E-06	6.44E-06	0.14	1.65E-05	1.65E-05	1.57E-09
AAS3	0	1	1750884.54	67.08	5.00	0.04	0.61	7.67E-06	8.37E-06	0.35	4.17E-05	6.98E-05	3.90E-09
S-AGUA	0	1	4016251.04	30.00	4.04	-	1.00	-	-	-	-	-	-
AGAS	1	0	2424839.93	81.99	1.01	0.06	0.05	0.75	0.13	-	-	-	-
AS3	0	1	4089138.00	39.88	1.01	7.73E-08	0.99997	2.23E-05	9.51E-06	-	-	-	-
AS4	0	1	4016299.89	39.88	1.01	7.73E-08	0.99997	2.23E-05	9.51E-06	-	-	-	-
AAS1	0	1	4016299.89	39.90	5.00	7.73E-08	0.99997	2.23E-05	9.51E-06	-	-	-	-
S-AGUA-R	0	1	4016299.89	30.00	5.00	7.73E-08	0.99997	2.23E-05	9.51E-06	-	-	-	-

Los actores principales de esta parte del proceso son el CO₂ y la monoetanolamina, como se puede observar en la Tabla 6. El principal efecto que produce el CO₂ es la asfixia por desplazamiento del oxígeno; en concentraciones altas, cercanas a la 30.000 ppm, puede causar dolores de cabeza, falta de concentración, somnolencia, mareos y problemas respiratorios. La MEA es uno de los compuestos más utilizados en la industria (DOW, 2020) gracias a sus cualidades surfactantes, inhibidoras de corrosión, purificadora de gases y de base débil. En caso de incendio, el humo puede contener el material original junto a productos de la combustión de composición variada que pueden ser tóxicos y/o irritantes, los cuales pueden incluir óxidos de nitrógeno, CO y CO₂. La Tabla 7 muestra las condiciones de operación de los equipos en esta parte del proceso, que a primera vista parecen ser más estables, comparando con las condiciones de operación en los equipos anteriores. Sin embargo, existe riesgo de explosión en el absorbedor y desorbedor, y en relación con las concentraciones de MEA, riesgos por intoxicación.

Tabla 7. Condiciones de operación en los equipos de la Captura de CO₂

EQUIPO	#	P (bar)	T (°C)
Absorbedor	ABS	2.03	33.00
Desorbedor	DES	2.40	-73.31
Bomba	B-5	9.81	36.56
Calentador	AB1	8.80	105.00
Bomba	B-5	6.28	28.58
Bomba	B-6	1.11	30.01
Mezclador	AB6	1.11	60.82
Bomba	B-7	5.00	67.08
Enfriador	ENF-2	3.99	35.95
Separador	AB3	4.04	30.00
Bomba	B-8	5.00	39.90
Enfriador	AB4	3.99	30.00

4. Tren de compresión de CO₂

En la última parte del proceso, se comprime el CO₂ capturado para su almacenamiento, como se muestra en la Figura 8.

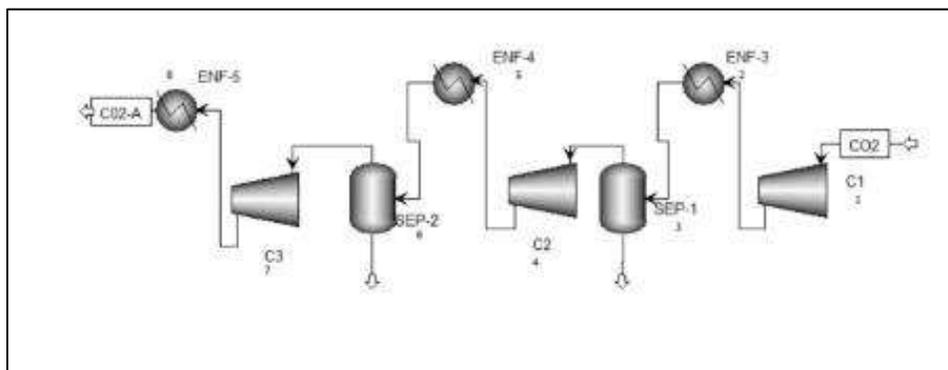


Figura 8. Diagrama de Proceso correspondiente a la Captura de CO₂

Como se puede observar a continuación, en la Tabla 8, el tren de compresión culmina en condiciones de operación altas en el compresor 3 y el enfriador; de acuerdo con los riesgos mencionados anteriormente respecto al compresor, en esta parte del proceso se considera la explosión por sobrepresión como posible consecuencia de un incidente. Por las concentraciones de CO₂ en el sistema, también se puede considerar la liberación tóxica bajo presión.

Tabla 8. Condiciones de operación en los equipos de la Captura de CO₂

EQUIPO	#	P (bar)	T (°C)
Compresor	C1	3.01	201.19
Enfriador	ENF-3	2.00	30.00
Separador	SEP--1	2.00	30.00
Compresor	C2	8.33	156.16
Enfriador	ENF-4	7.32	30.00
Separador	SEP--2	7.32	30.00
Compresor	C3	110.91	301.02
Enfriador	ENF-5	109.90	30.00

Análisis de Riesgo Cuantitativo

El riesgo se define como una medida de pérdida económica, daño humano o daño ambiental en términos tanto de la probabilidad como de la magnitud de la pérdida o daño (CCPS,2000).

$$IR_{x,y} = \sum_{i=1}^n IR_{x,y,i}$$

$IR_{x,y}$ = Riesgo de muerte total individual en un sitio geográfico x,y (muertes/año)(y^{-1})

$IR_{x,y,i}$ = Riesgo de muerte total individual en un sitio geográfico x,y por un incidente i (y^{-1})

n = el número total de incidentes considerados en el análisis

$$IR_{x,y,i} = f_i P_{f,i}$$

f_i = frecuencia del incidente i

$P_{f,i}$ = probabilidad de que el resultado del incidente, el caso i , resulte en una muerte en la ubicación x, y , a partir de los modelos de consecuencias y efectos

De acuerdo con el análisis de riesgo cualitativo, los riesgos de accidentes en este proceso en función de los materiales utilizados y las condiciones de operación en los equipos son las explosiones y la liberación tóxica debida a una fuga o a una explosión por sobrepresión. Las explosiones ocurren cuando la concentración de un componente inflamable disminuye desde el punto de liberación hasta por debajo de los límites explosivos más bajos, en las cuales, debido a la concentración, ya no puede encenderse. La detonación repentina de una masa explosiva causaría sobrepresiones que podrían resultar en lesiones o daños a la propiedad.

Una explosión de vapor puede ocurrir cuando un gas tóxico se libera bajo presión, el líquido tóxico se derrama y se evapora, o si los componentes se queman o reaccionan formando un gas tóxico. Un antecedente a una explosión son los incendios repentinos, en este caso en el ciclo de Brayton hay una mayor exposición a este riesgo. En las plantas de proceso, las emisiones con ignición ocurren normalmente como resultado de fugas o derrames.

De forma general, los riesgos mencionados suelen precederse por una pérdida de contención del material dentro de los equipos/tuberías en el proceso. Por esta razón se tomarán los datos

descritos en la Tabla 9 como la base para iniciar los cálculos para el riesgo individual en el proceso de ciclo combinado de gas natural con captura y compresión de CO₂.

Tabla 9. Frecuencias iniciales de pérdida de contención por liberación continua

Frecuencias iniciales de pérdida de contención [y ⁻¹]	
EQUIPOS	Liberación Continúa
Recipientes bajo presión	5.00E-07
Recipientes atmosféricos	5.00E-06
Reactor	5.00E-06
Bombas	5.00E-04
Turbinas	1.90E-05
Intercambiador de calor	1.00E-05

Para obtener las frecuencias para cada tipo de accidente se utiliza el árbol de eventos, como se demuestra a continuación en la Figura 9 para los accidentes en la turbina:

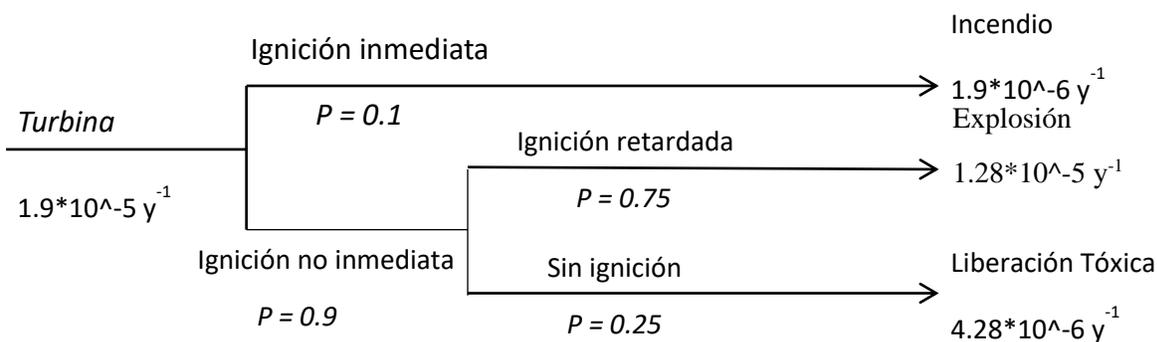


Figura 9. Árbol de eventos para accidentes en la turbina

De manera similar se obtendrán las frecuencias a partir de las frecuencias iniciales para cada equipo mencionado en la Tabla 10:

Tabla 10. Frecuencias de tipo de accidente por equipo

EQUIPO (j)	Accidente (i)			
	Frecuencia por liberación continúa (y-l)	Frecuencia por incendio repentino (y-l)	Frecuencia por explosión (y-l)	Frecuencia por liberación tóxica(y-l)
Absorbedor/desorbedor	5.00E-07	5.00E-08	3.38E-07	1.13E-07
Reactor	5.00E-06	5.00E-07	3.38E-06	1.13E-06
Bombas	5.00E-04	5.00E-05	3.38E-04	1.13E-04
Turbinas	1.90E-05	1.90E-06	1.28E-05	4.28E-06
Intercambiador de calor	1.00E-05	1.00E-06	6.75E-06	2.25E-06

El cálculo del Riesgo Individual implica calcular la probabilidad de muerte de una persona en una exposición determinada. La probabilidad de muerte se calcula utilizando funciones *probit*.

Forma general de la función PROBIT

$$Y = a + b \ln(V)$$

V representa la variable física del accidente y a, b son constantes

Un reporte realizado por el organismo HSE (2013), el cual garantiza la salud, la seguridad y el bienestar de las personas en el trabajo encontró las siguientes relaciones de las funciones probit en función de la presión [j]:

Función probit para en función de la exposición toxica:

$$Pr_{tox} = 1.47 + 1.37 \ln(P)$$

Función probit para muertes debido a explosión por sobrepresión

$$Pr_{exp} = 5.13 + 1.37 \ln(P)$$

P = Presión (bar)

Las personas que están expuestas a sobrepresiones de explosión no tienen tiempo para reaccionar o refugiarse; así, el tiempo no entra en la relación. A partir de estas ecuaciones se podrán establecer las funciones objetivo de seguridad, de acuerdo con cada equipo y sus condiciones de operación, las cuales se podrán manipular:

$$IR_{x,y,i} = f_i Pr_{f,i}$$

Para el reactor,

$$f_{explosion} = 3.38 \times 10^{-6}$$

$$f_{liberacion} = 1.13 \times 10^{-6}$$

$$IR_{x,y,i} = 3.38 \times 10^{-6} Pr_{explosion} + 1.13 \times 10^{-6} Pr_{tox}$$

Para el desorbedor/absorbedor

$$f_{explosion} = 3.38 \times 10^{-7}$$

$$f_{liberacion} = 1.13 \times 10^{-7}$$

$$IR_{x,y,i} = 3.38 \times 10^{-7} Pr_{explosion} + 1.13 \times 10^{-7} Pr_{tox}$$

Para las bombas:

$$f_{explosion} = 3.38 \times 10^{-4}$$

$$f_{liberacion} = 1.13 \times 10^{-4}$$

$$IR_{x,y,i} = 3.38 \times 10^{-4} Pr_{explosion} + 1.13 \times 10^{-4} Pr_{tox}$$

Para las turbinas/compresores

$$f_{explosion} = 1.28 \times 10^{-5}$$

$$f_{liberacion} = 4.28 \times 10^{-6}$$

$$IR_{x,y,i} = 1.28 \times 10^{-5} Pr_{explosion} + 4.28 \times 10^{-6} Pr_{tox}$$

Para los intercambiadores de calor

$$f_{explosion} = 6.75 \times 10^{-6}$$

$$f_{liberacion} = 2.25 \times 10^{-6}$$

$$IR_{x,y,i} = 6.75 \times 10^{-6} Pr_{explosion} + 2.25 \times 10^{-6} Pr_{tox}$$

Tabla 11. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC

No.	Equipo	P (bar)	Frecuencia por liberación continua (y^{-1})	Frecuencia por explosión (y^{-1})	Frecuencia por liberación tóxica (y^{-1})	Pr tox	Pr exp	Riesgo Individual (IR)
1	Compresor	6.30	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	3.992	7.652	1.15E-04
2	Compresor	30.43	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	6.149	9.809	1.52E-04
3	Calentador	30.43	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	6.149	9.809	8.00E-05
4	Mezclador	6.30	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.992	7.652	3.03E-06
5	Reactor Gibbs	18.91	5.00E-06	3.38E-06	1.13E-06	5.497	9.157	3.71E-05
6	Turbina	18.91	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	5.497	9.157	1.17E-04
7	Turbina	42.64	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	6.611	10.271	1.32E-04
8	Turbina	5.90	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	3.902	7.562	9.70E-05
9	Turbina	0.04	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	-2.975	0.685	8.79E-06
10	Mezclador	28.53	5.00E-07	3.38E-07	0.00E+00	6.061	9.721	3.28E-06
11	Enfriador	0.04	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	-2.975	0.685	4.63E-06
12	Bomba	6.28	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	3.988	7.648	2.58E-03
13	Bomba	43.49	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	6.638	10.298	3.48E-03
14	Bomba	180.90	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	8.591	12.251	4.13E-03
	IR							0.0109419

Tabla 12. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC + PCC

No.	Equipo	P (bar)	Frecuencia por liberación continua (y^{-1})	Frecuencia a por explosión (y^{-1})	Frecuencia por liberación tóxica (y^{-1})	Pr tox	Pr exp	Riesgo Individual (IR)
1	Compresor	6.30	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	3.992	7.652	1.15E-04
2	Compresor	30.43	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	6.149	9.809	1.52E-04
3	Calentador	30.43	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	6.149	9.809	8.00E-05
4	Mezclador	6.30	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.992	7.652	3.03E-06
5	Reactor Gibbs	18.91	5.00E-06	3.38E-06	1.13E-06	5.497	9.157	3.71E-05
6	Turbina	18.91	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	5.497	9.157	1.17E-04
7	Turbina	42.64	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	6.611	10.271	1.32E-04
8	Turbina	5.90	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	3.902	7.562	9.70E-05
9	Turbina	0.04	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	-2.975	0.685	8.79E-06
10	Mezclador	28.53	5.00E-07	3.38E-07	0.00E+00	6.061	9.721	3.28E-06
11	Enfriador	0.04	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	-2.975	0.685	4.63E-06
12	Bomba	6.28	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	3.988	7.648	2.58E-03
13	Bomba	43.49	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	6.638	10.298	3.48E-03
14	Bomba	180.90	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	8.591	12.251	4.13E-03
15	Absorbedor	5.00	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.676	7.336	2.89E-06
16	Bomba	9.81	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	4.599	8.259	3.30E-03
17	Calentador	9.81	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	4.599	8.259	5.57E-05
18	Desorbedor	9.81	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	4.599	8.259	3.30E-06
19	Bomba	1.11	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	1.619	5.279	1.96E-03
20	Bomba	5.00	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	3.676	7.336	2.89E-03
21	Enfriador	5.00	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	3.676	7.336	5.78E-05
22	Bomba	5.00	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	3.676	7.336	2.89E-03
23	Enfriador	5.00	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	3.676	7.336	5.78E-05
24	Compresor	3.01	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	2.981	6.641	9.79E-05
25	Enfriador	2.00	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	2.420	6.080	4.65E-05
26	Separador	2.00	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	2.420	6.080	2.32E-06
27	Compresor	8.33	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	4.375	8.035	1.22E-04
28	Enfriador	7.32	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	4.197	7.857	6.25E-05
29	Separador	7.32	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	4.197	7.857	3.12E-06
30	Compresor	110.91	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	7.921	11.581	1.82E-04
31	Enfriador	109.90	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	7.908	11.568	9.59E-05
	IR							0.022778822

Tabla 13. Cálculo del riesgo individual por equipo del proceso NGCC + PCC con integración energética

No.	Equipo	P (bar)	Frecuencia por liberación continua (y ⁻¹)	Frecuencia por explosión (y ⁻¹)	Frecuencia por liberación tóxica(y ⁻¹)	Pr tox	Pr exp	Riesgo Individual (IR)
1	Compresor	6.3	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	3.992	7.652	1.15E-04
2	Compresor	30.43	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	6.149	9.809	1.52E-04
3	Intercambiador de calor	30.43	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	6.149	9.809	8.00E-05
4	Mezclador	6.3	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.992	7.652	3.03E-06
5	Calentador	30.43	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	6.149	9.809	8.00E-05
6	Reactor Gibbs	18.1	5.00E-06	3.38E-06	1.13E-06	5.437	9.097	3.68E-05
7	Turbina	18.1	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	5.437	9.097	1.17E-04
8	Turbina	42.64	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	6.611	10.271	1.32E-04
9	Turbina	5.9	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	3.902	7.562	9.70E-05
10	Turbina	0.039	1.90E-05	1.28E-05	0.00E+00	-2.975	0.685	8.79E-06
11	Enfriador	1	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	1.470	5.130	3.46E-05
12	Mezclador	0.039	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	-2.975	0.685	-1.03E-07
13	Condensador	0.039	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	-2.975	0.685	4.63E-06
14	Bomba	6.283	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	3.988	7.648	2.58E-03
15	Bomba	43.49	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	6.638	10.298	3.48E-03
16	Bomba	180.9	5.00E-04	3.38E-04	0.00E+00	8.591	12.251	4.13E-03
17	Enfriador	5.0033	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	3.676	7.336	5.78E-05
18	Absorbedor	5.0033	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.676	7.336	2.89E-06
19	Separador	4.0429	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	3.384	7.044	2.76E-06
20	Bomba	5.0033	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	3.676	7.336	2.89E-03
21	Bomba	9.8133	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	4.599	8.259	3.30E-03
22	Enfriador	5.0033	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	3.676	7.336	5.78E-05
23	Intercambiador de calor	9.8133	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	4.599	8.259	6.61E-05
24	Calentador	9.8133	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	4.599	8.259	5.57E-05
25	Desorbedor	9.8133	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	4.599	8.259	3.30E-06
26	Bomba	1.1146	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	1.619	5.279	1.96E-03
27	Bomba	5.0033	5.00E-04	3.38E-04	1.13E-04	3.676	7.336	2.89E-03
28	Mezclador	1.1146	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	1.619	5.279	1.96E-06
29	Intercambiador de calor	30.43	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	6.149	9.809	8.00E-05
30	Compresor	2	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	2.420	6.080	8.83E-05
31	Enfriador	2	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	2.420	6.080	4.65E-05
32	Separador	2	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	2.420	6.080	2.32E-06
33	Compresor	9.3465	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	4.532	8.192	1.24E-04
34	Enfriador	7.32	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	4.197	7.857	6.25E-05
35	Separador	7.32	5.00E-07	3.38E-07	1.13E-07	4.197	7.857	3.12E-06
36	Compresor	110.91	1.90E-05	1.28E-05	4.28E-06	7.921	11.581	1.82E-04
37	Enfriador	109.9	1.00E-05	6.75E-06	2.25E-06	7.908	11.568	9.59E-05
38	Calentador	2.46	1.00E-05	6.75E-06	0.00E+00	2.703	6.363	4.30E-05
	Suma IR							0.023076

La Tabla 11 muestra la parte del proceso de ciclo combinado de gas natural, y tienen un riesgo individual de 0.011. La mayor parte de los equipos de esta sección manejan agua, por lo cual su frecuencia por liberación toxica es cero. La Tabla 12 corresponde al proceso NGCC con captura y compresión de CO₂, y la sumatoria del riesgo individuales 0.022, mientras que la Tabla 13 cuantifica el riesgo individual al proceso integrado energéticamente, dando un valor de 0.023.

4.2 Análisis de sensibilidad

Si se analizara este proceso únicamente evaluando la parte de seguridad, se podría tener una solución obvia: reducir la presión en los equipos con más riesgo a un accidente. Sin embargo, esto ocasionaría que la potencia del proceso disminuyera, y en turno, se generaría una menor cantidad de electricidad, lo cual es un resultado negativo. Por lo tanto, se requiere de otra variable de decisión a considerar; esta segunda variable es la potencia del proceso, la cual se cuantificará como la potencia neta en las turbinas. Por otra parte, un aspecto adicional a considerar son las emisiones de CO₂, puesto que la finalidad de agregar la parte de captura de carbono postcombustión es reducir la cantidad de dióxido de carbono que emite el proceso. Estos tres aspectos se resumen en la Tabla 13, de acuerdo con los resultados reportados por Esquivel-Patiño (2021):

Tabla 14. Parámetros de IR, Potencia Global y Emisiones CO₂

	Riesgo Individual	Potencia Global [MW]	Emisiones de CO ₂ [kg/MWh]
NGCC	0.01094	451.74	379.01
NGCC + CAPTURA CO ₂	0.02278	391.73	47.28
NGCC + CAPTURA CO ₂ INT	0.02308	393.64	47.08

Como se puede observar, a medida que al proceso se le agregan más equipos, el riesgo individual del mismo aumenta. El proceso de NGCC sin captura y compresión es más seguro, sin embargo, las emisiones de CO₂ al medio ambiente son considerablemente más altas sin llevar a cabo la captura de dióxido de carbono; al agregar la parte de captura y compresión de CO₂, el riesgo aumenta un 208% (esto es, tomando como base inicial el proceso NGCC sin captura), y también disminuye considerablemente la potencia global del proceso. Ahora si este mismo proceso es integrado energéticamente, aumenta el riesgo individual un 211%. Esto se traduce a una reducción en utilidades, y por lo tanto un ahorro en servicios, lo

cual significa que es un proceso con menor impacto ambiental, por el hecho de que el agua se reutiliza para calentar y enfriar corrientes y así mismo reducir el uso de energías. Sin embargo, se observa que al comparar las emisiones de CO₂ entre el proceso de captura integrado y sin integrar, hay una diferencia en emisiones de 0.2 kg/MWh. Analizando estos resultados desde la perspectiva de seguridad, el incremento de riesgo individual en el proceso con integración energética no es atractivo. En la Tabla 15 se describen las condiciones de operación para el reactor 1 y 2, que se utilizaron para llevar a cabo el análisis de sensibilidad. En la Figura 16 se muestran los equipos utilizados realizar dicho análisis.

Tabla 15. Condiciones de operación evaluadas para cada caso en el análisis de sensibilidad

#CASO	P COMP 1 (BAR)	P COMP 2 (BAR)	P REACTOR (BAR)
1	4.2	28.4	16.3
2	4.4	28.6	16.5
3	4.6	28.8	16.7
4	4.8	29	16.9
5	5	29.2	17.1
6	5.2	29.4	17.3
7	5.4	29.6	17.5
8	5.6	29.8	17.7
9	5.8	30	17.9
10	6	30.2	18.1
11	6.3	30.43	18.365
12	6.6	30.6	18.6
13	6.8	30.8	18.8
14	7	31	19
15	7.2	31.2	19.2
16	7.4	31.4	19.4
17	7.6	31.6	19.6
18	7.8	31.8	19.8
19	8	32	20
20	8.2	32.2	20.2

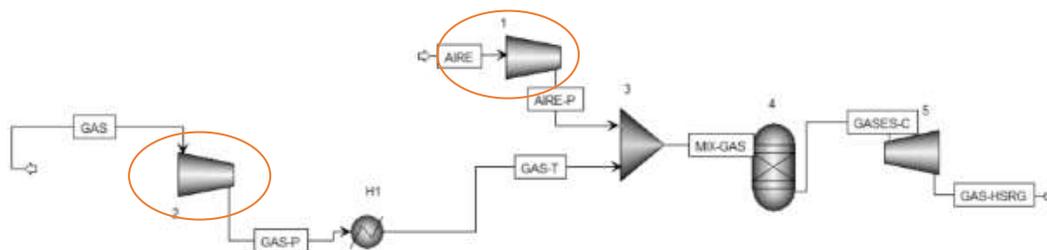


Figura 10. Equipos usados para el análisis de sensibilidad

Cada corrida se llevó a cabo para cuatro diferentes escenarios:

1. Para una captura del CO₂ del 95%
2. Para una captura del CO₂ del 90%
3. Para una captura del CO₂ del 85%
4. Para una captura del CO₂ del 80%

El caso base con el cuál se realizó la simulación del proceso se llevó a cabo con una captura de CO₂ del 90%. Para modificar el porcentaje de captura de cada proceso, se llevó a cabo un análisis de sensibilidad en ASPEN® para calcular la cantidad de energía necesaria para condensar el agua en la turbina de baja presión, ya que es en este equipo donde se cede la energía para la regeneración de la amina. En la Tabla 16 se muestran los resultados de dicho análisis, y los flujos y potencias correspondientes para modificar la captura del proceso.

Tabla 16. Flujos necesarios para energía de condensación

FLUJO [kg/h] POTENCIA [MW]			FLUJO [kg/h] POTENCIA [MW]		
1	235800	-160.180062	21	271800	-184.635033
2	237600	-161.40281	22	273600	-185.857782
3	239400	-162.625559	23	90% 275400	-187.08053
4	241200	-163.848307	24	277200	-188.303279
5	243000	-165.071056	25	279000	-189.526027
6	80% 244800	-166.293805	26	280800	-190.748776
7	246600	-167.516553	27	282600	-191.971524
8	248400	-168.739302	28	284400	-193.194273
9	250200	-169.96205	29	286200	-194.417022
10	252000	-171.184799	30	288000	-195.63977
11	253800	-172.407547	31	95% 289800	-196.862519
12	255600	-173.630296	32	291600	-198.085267
13	257400	-174.853045	33	293400	-199.308016
14	85% 259200	-176.075793	34	295200	-200.530764
15	261000	-177.298542	35	297000	-201.753513
16	262800	-178.52129	36	298800	-202.976262
17	264600	-179.744039	37	300600	-204.19901
18	266400	-180.966787	38	302400	-205.421759
19	268200	-182.189536	39	304200	-206.644507
20	270000	-183.412284	40	306000	-207.867256

Tomando como base el flujo total en la turbina de baja del proceso de NGCC sin captura de CO₂, que es la suma de la corriente S5+H = 413900 kg/h. Para cada porcentaje de captura, se restó el flujo obtenido de la Tabla 15, y este resultado se utilizó como el flujo correspondiente de la corriente S5, la turbina de baja presión, mostrado en la Figura 11.

S5	399169	S5	399169	S5	399169	S5	399169				
H	14731	H	14731	H	14731	H	14731				
TOTAL	413900	TOTAL	413900	TOTAL	413900	TOTAL	413900				
	80%	169100		85%	154700		90%	138500		95%	124100

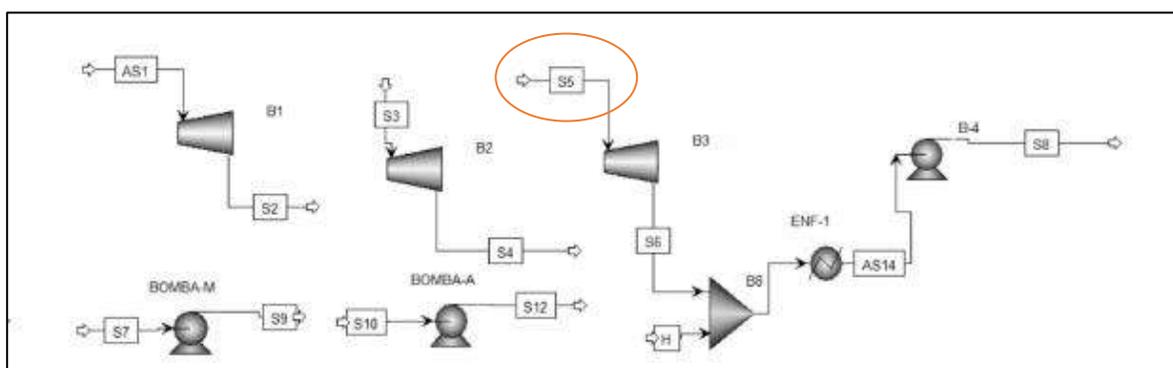


Figura 11. Corriente S5

Tabla 17. Resultados de IR, Potencia y Emisiones de CO₂

	IR	POTENCIA (MW)				EMISIONES CO ₂ (kg/MWh)			
		80%	85%	90%	95%	20%	15%	10%	5%
1	0.0227570	428.96	425.91	422.45	419.40	79.83	60.31	40.53	20.41
2	0.0227586	425.06	422.00	418.57	415.49	80.56	60.87	40.91	20.60
3	0.0227602	421.30	418.24	414.81	411.74	81.28	61.41	41.28	20.79
4	0.0227617	417.67	414.62	411.19	408.11	81.99	61.95	41.64	20.98
5	0.0227632	414.18	411.12	407.69	404.61	82.68	62.48	42.00	21.16
6	0.0227647	410.79	407.74	404.30	401.23	83.36	62.99	42.35	21.34
7	0.0227661	407.52	404.46	401.03	397.95	84.03	63.51	42.69	21.51
8	0.0227674	404.34	401.29	397.85	394.78	84.69	64.01	43.04	21.69
9	0.0227688	401.26	398.21	394.77	391.70	85.34	64.50	43.37	21.86
10	0.0227701	398.27	395.21	391.78	388.70	85.98	64.99	43.70	22.02
11	0.0227718	393.73	390.68	387.25	384.17	86.97	65.75	44.21	22.28
12	0.0227734	389.21	386.16	382.72	379.65	87.98	66.52	44.74	22.55
13	0.0227746	386.53	383.47	380.04	376.96	88.59	66.98	45.05	22.71
14	0.0227758	383.90	380.85	377.41	374.34	89.20	67.44	45.37	22.87
15	0.0227769	381.34	378.29	374.85	371.78	89.80	67.90	45.68	23.03
16	0.0227780	378.84	375.78	372.35	369.27	90.39	68.35	45.98	23.18
17	0.0227791	376.39	373.33	369.90	366.83	90.98	68.80	46.29	23.34
18	0.0227802	373.99	370.94	367.50	364.43	91.56	69.25	46.59	23.49
19	0.0227812	371.64	368.59	365.15	362.08	92.14	69.69	46.89	23.64
20	0.0227820	369.34	366.29	362.85	359.78	92.71	70.12	47.19	23.79

En la Tabla 17 se revelan los resultados del análisis de sensibilidad. Al incrementar la presión en los equipos mencionados, aumenta el riesgo individual. Esto es evidente definición; recordando que una manera de aplicar la seguridad inherente en un proceso es por medio de la minimización, en este caso este concepto se pone en práctica al disminuir la presión en los compresores 1 y 2 a la entrada del proceso.

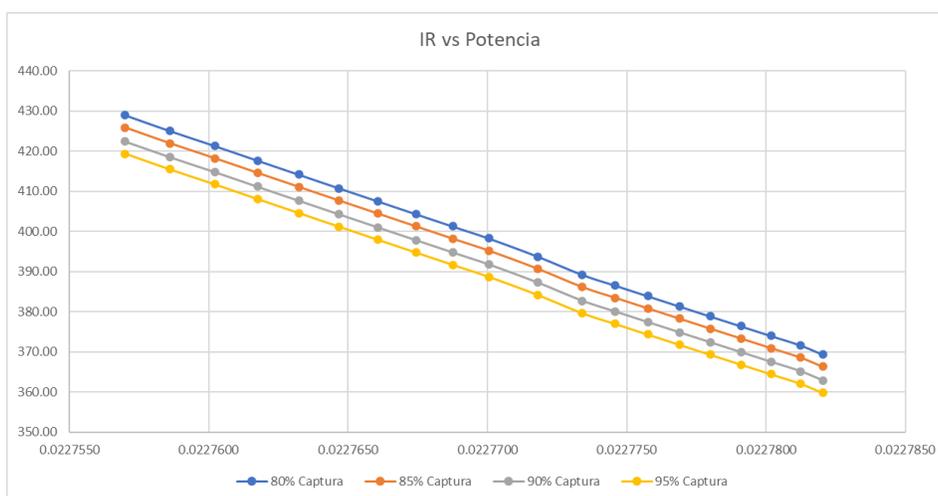


Figura 12. Gráfica del IR vs Potencia

Observando la Figura 12, se nota un resultado pertinente para este trabajo: el índice de riesgo parece ser inversamente proporcional a la potencia del proceso. Al incrementar la presión en un compresor, la potencia de este aumenta. El mismo principio aplica para las turbinas.

La potencia global del proceso se calculó con la siguiente expresión:

$$POTENCIA_T = W_{turb\ gas} + W_{turb\ AP} + W_{turb\ MP} + W_{turb\ BP} - \sum W_{compresores} - \sum W_{bombas}$$

Se reviso cada uno de los equipos involucrados en el cálculo de la potencia global del proceso para verificar que este principio se cumpla; la Tabla 18 demuestra que efectivamente, al aumentar la presión aumentan la potencia en los equipos pertinentes (T5 = turbina de gas, C1 = compresor de aire, C2 = compresor de gas natural), sin embargo, se nota que ese diferencial de 0.2 en el compresor de aire aumenta en promedio 4630 kW, mientras que la turbina de gas aumenta 1345 kW. Al momento de hacer la sumatoria, este diferencial influye en la disminución para la potencia global.

Tabla 18. Diferencial de potencias en los equipos

	P COMP 1	P COMP2	NW T5	Δ T5	NW TB1	Δ TB1	NW C1	Δ C1	NW C2	Δ C2
A1	4.2	28.4	457634		36873.6		130138		1444.82	
A2	4.4	28.6	459063	1429	36772.7	100.9	135351	5213	1437.8	7.02
A3	4.6	28.8	460472	1409	36673.6	99.1	140396	5045	1460.63	22.83
A4	4.8	29	461859	1387	36575.7	97.9	145286	4890	1483.33	22.7
A5	5	29.2	463226	1367	36479.1	96.6	150033	4747	1505.92	22.59
A6	5.2	29.4	464573	1347	36383.9	95.2	154645	4612	1528.39	22.47
A7	5.4	29.6	465901	1328	36289.8	94.1	159132	4487	1550.74	22.35
A8	5.6	29.8	467211	1310	36196.8	93	163501	4369	1572.97	22.23
A9	5.8	30	468502	1291	36105.1	91.7	167760	4259	1595.09	22.12
A10	6	30.2	469775	1273	36014.4	90.7	171915	4155	1617.1	22.01
A11	6.3	30.43	471435	1660	35895.9	118.5	176964	5049	1642.26	25.16
A12	6.6	30.6	472882	1447	35792.5	103.4	183811	6847	1660.77	18.51
A13	6.8	30.8	474096	1214	35705.6	86.9	187603	3792	1682.44	21.67
A14	7	31	475294	1198	35619.7	85.9	191316	3713	1704.01	21.57
A15	7.2	31.2	476476	1182	35534.8	84.9	194954	3638	1725.47	21.46

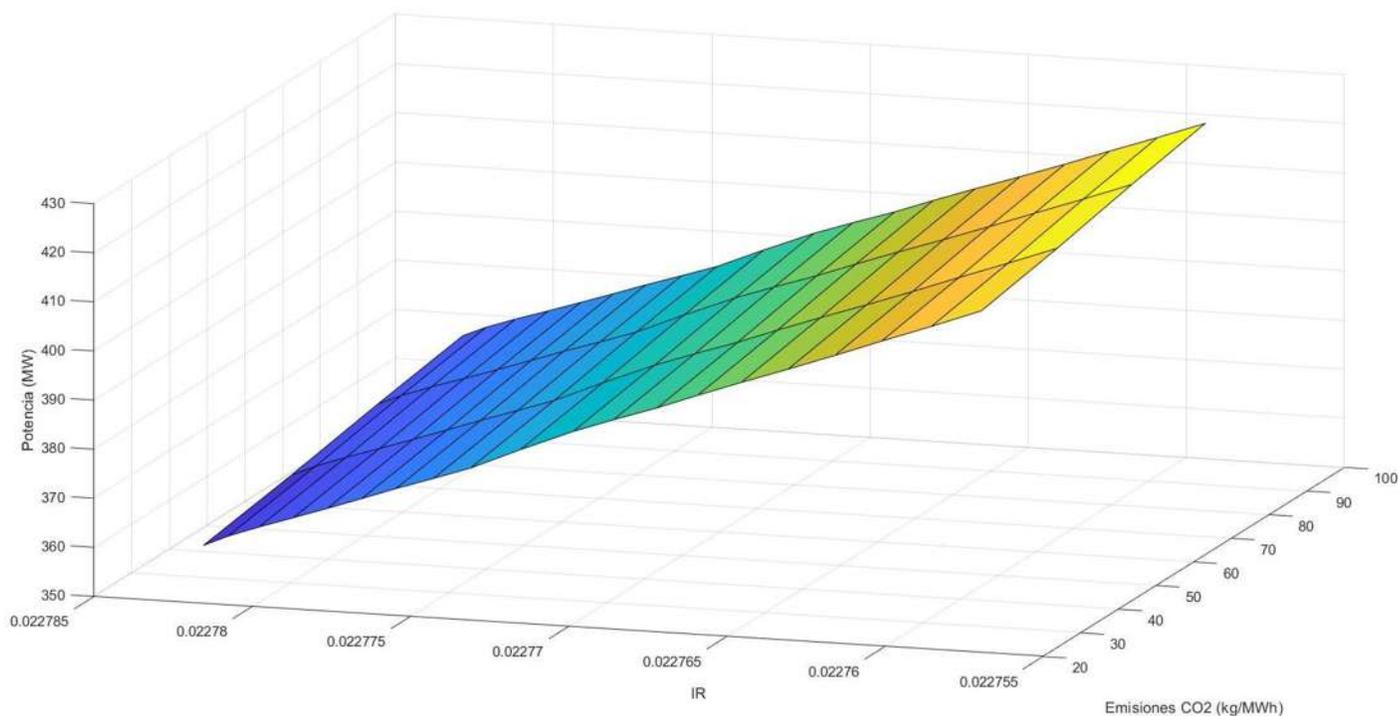


Figura 13. Diagrama de Pareto IR, Potencia, Emisiones de CO₂

La Figura 13 muestra la relación entre las tres vertientes: el riesgo individual, la potencia global del proceso y las emisiones de CO₂. Los índices de riesgo se mantienen constantes para cada evaluación debido a que los cálculos involucrados para la modificación de la captura de CO₂ afectan directamente sobre el flujo de la turbina de baja presión, la cual modifica la potencia total del ciclo dependiendo de cada nivel de captura establecido. Se observa en el diagrama que el área azul corresponde a la zona con el mayor índice de riesgo y menor potencia, mientras que la zona amarilla muestra un riesgo individual menor y una mayor potencia de acuerdo con el porcentaje de CO₂ capturado.

4.3 Optimización mediante el entrenamiento de la red y algoritmos genéticos.

Los datos obtenidos en el análisis de sensibilidad se utilizaron en la aplicación de MATLAB *Neural Net Fitting*® para entrenar una red neuronal que permitirá predecir valores de salida de riegos individual, potencia y emisiones de CO₂. Para una mejor aproximación, se normalizaron los resultados del análisis de sensibilidad para tener las tres variables de respuesta en un rango entre 0 y 1. Para entrenar la red, como variable de entrada se escogió la presión del compresor 1 y la presión del compresor 2. Como se observa en la Figura 14, el algoritmo utilizado para entrenar la red fue el Levenberg-Marquardt, ya que, de los tres algoritmos disponibles, fue del que se obtuvo una mejor regresión, como se puede apreciar en la Figura 15.

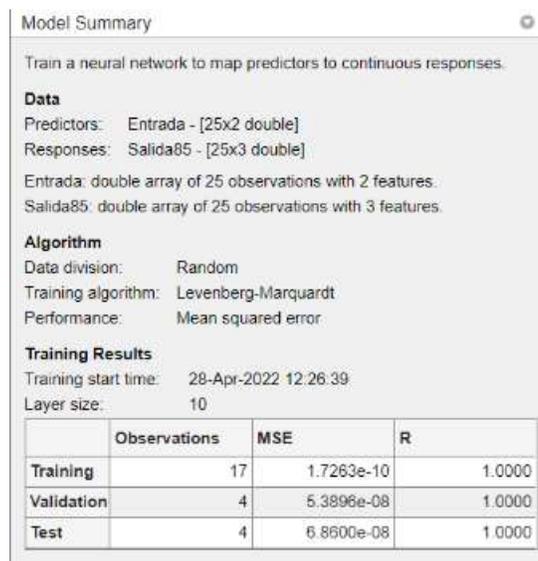


Figura 14. Resumen del modelo de entrenamiento de la red.

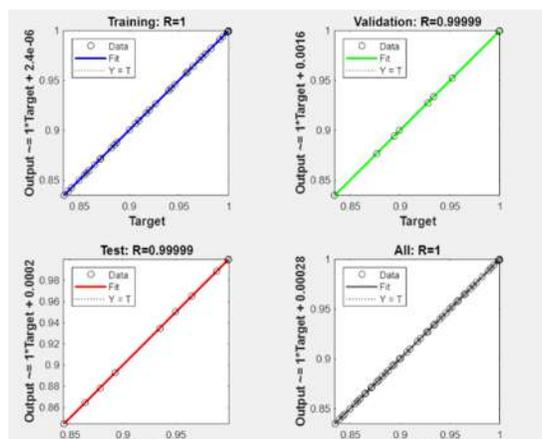


Figura 15. Regresión lineal de los parámetros de salida

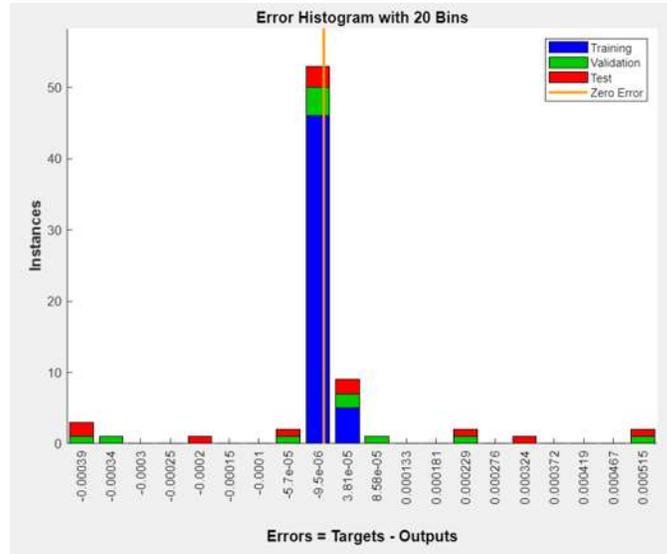


Figura 16. Histograma de error del modelo de la red neuronal.

La Figura 16 muestra el histograma de errores para la red neuronal, el cual muestra los errores entre los valores objetivo y los valores predichos después de entrenar la red neuronal. Como estos valores de error indican cómo los valores predichos difieren de los valores objetivo, pueden ser negativos. Se puede apreciar que el error en la fase de entrenamiento de la red es muy pequeño, por lo tanto, es una red neuronal confiable.

A continuación, se llevó a cabo la optimización utilizando algoritmos genéticos en MATLAB®, para obtener la curva de Pareto de las funciones objetivo de la función fitness, que, en este caso, es la red neuronal entrenada. Se tienen dos variables, las presiones de los compresores 1 y 2, y tres funciones objetivo:

Objetivo 1: min IR

$$IR_{x,y} = \sum_{i=1}^n IR_{x,y,i}$$

Objetivo 2: Max Potencia

$$POTENCIA_T = W_{turb\ gas} + W_{turb\ AP} + W_{turb\ MP} + W_{turb\ BP} - \sum W_{compresores} - \sum W_{bombas}$$

Objetivo 3: min GWP [kgCO₂emitidos/MWh]

El programa se corrió con 100 generaciones y 10000 individuos, lo cual generó una curva de resultados con 3500 valores para cada función objetivo, mostrado en la Figura 17:

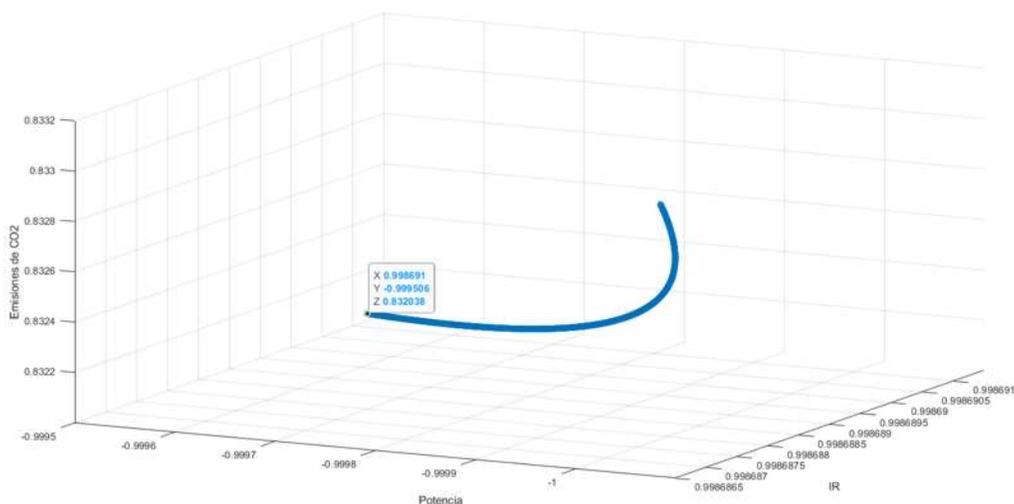


Figura 17. Diagrama de Pareto de la optimización del sistema

Considerando que se busca un compromiso entre el riesgo del proceso, las emisiones de CO₂ al medio ambiente y la potencia del proceso, el punto [0.998691, 0.999506, 0.832038] es una buena relación. Al traducir estos valores normalizados a sus valores reales, se obtiene un índice de riesgo de 0.022757, una potencia del proceso de 425.9103 MW y 60.13032 kg/MWh de emisiones de CO₂, que corresponde a una presión del compresor 1 de 4.2478 bar y una presión del compresor 2 de 28.4478 bar. Con estos valores, al ser evaluados en ASPEN®, se obtuvo un riesgo individual de 0.022754, una potencia de 424.995MW y 60.2953 kg/MWh, obteniéndose un margen de error de ±0.2%.

Conclusiones

En el presente trabajo se llevó a cabo un análisis de riesgos cuantitativo para una planta de gas natural de ciclo combinado con captura de CO₂. De acuerdo con las sustancias y equipos involucrados en el proceso, se identificaron los accidentes que pueden suceder dentro del mismo, siendo estos los incendios, explosiones y liberación tóxica.

En base a ello, se propuso una función objetivo de seguridad para poder optimizar el sistema. Esta función objetivo sólo considero la presión de dos componentes del proceso, el compresor a la entrada de gas natural y el compresor de aire, puesto que era una variable manipulable. Para considerar la temperatura y los accidentes por incendios, se debe de evaluar la radiación térmica de acuerdo con las distancias entre personas y accidente.

Se obtuvieron y cuantificaron los parámetros de riesgo individual mediante el inventario del proceso de ciclo combinado de gas natural, ciclo combinado de gas natural con captura y compresión de CO₂ tanto integrado como sin integrar, utilizando las funciones probit para calcular las probabilidades y estas, al ser multiplicadas por las frecuencias, dan como resultado el riesgo individual del equipo. El riesgo individual total viene dado por la suma total de IR.

La función objetivo de seguridad está limitada, no sólo por evaluar el proceso conforme a la presión de dos equipos, sino que también no cuantifica daños y pérdidas económicas. Sin embargo, si muestra una sensibilidad ante la potencia del sistema y las emisiones de CO₂.

Comparando los tres procesos (NGCC, NGCC+PCC, NGCC+PCC con integración energética) de acuerdo con las tres variables de decisión (IR, potencia, emisiones de CO₂), se observa que entre más complejo es el proceso aumenta el riesgo individual. El proceso NGCC tiene el menor riesgo y la mayor generación de potencia, que se traduce a más ingresos económicos, pero las emisiones de CO₂ son significativas.

Hoy en día, un proceso que sea más amigable al medio ambiente es más atractivo para poder mantener las emisiones por debajo de los acuerdos internacionales. Comparando los dos procesos con la captura y compresión de CO₂, es interesante ver que no hay una diferencia abismal respecto las emisiones de dióxido de carbono, ni la potencia producida; observando

el riesgo individual, desde la perspectiva de seguridad, es preferible no llevar a cabo la integración.

Con el análisis de sensibilidad, se entrenó una red neuronal en MATLAB® con el fin de obtener una curva para poder predecir valores de IR, potencia y emisiones de CO₂ de acuerdo con los valores de presión elegidos. En base a ello se optimizó el sistema utilizando algoritmos genéticos, y los resultados obtenidos conllevan un error del 0.2% al momento de realizar la simulación en ASPEN®.

En México, este tipo de planta de generación eléctrica continuará siendo opción por su eficiencia e impacto ambiental relativamente bajo, en comparación con otras formas de obtención con combustibles no renovables. Por lo tanto, es relevante seguir investigando como hacerlo un proceso sostenible, lo cual requiere de un compromiso social con la ciudadanía, que sea ambiental y económicamente viable para enfrentar los retos hacia la descarbonización.

Recomendaciones

1. Para llevar a cabo un análisis de riesgos más preciso, será necesario tener un diagrama de tuberías e instrumentación del proceso a evaluar.
2. Se recomienda hacer uso de la metodología propuesta por Khan et al. (2004), para poder llevar a cabo la evaluación por daños económicos, ya que se considera directamente para el cálculo del índice integrado de seguridad inherente, el cuál es la relación entre el índice de potencial de seguridad inherente (*Inherent Safety Potential Index* - ISPI) y índice de riesgo (*hazard index* – HI). Este último se compone por dos subíndices, el índice de daño y el índice de control de procesos y peligros. El índice de daño toma en cuenta los principales accidentes industriales, incendios, explosiones, toxicidad, además del daño ambiental. Por su parte, el ISPI considera el índice de seguridad inherente (*inherent safety index* - ISI). Este trabajo hace uso de los principios de seguridad inherente en términos de reducir la presión en los equipos (minimización), sin embargo, el uso de esta metodología será más apropiado y objetivo.
3. Para aumentar las eficiencias de las redes neuronales, se deberá trabajar con una base de datos más amplia para poder incrementar su precisión.

Bibliografía

Bernechea, E. J., & Arnaldos, J. (2014). Optimizing the design of storage facilities through the application of ISD and QRA. *Process Safety and Environmental Protection*, 92(6), 598–615. doi:10.1016/j.psep.2013.06.002

Bollinger, R.E., D.G. Clark, A.M. Dowell III, R.M. Ewbank, D.C. Hendershot, W.K. Lutz, S.I. Meszaros, D.E. Park and E.D. Wixom, “Inherently Safer Chemical Processes: A Life Cycle Approach”, D.A. Crowl, Ed., American Institute of Chemical Engineers, New York, NY (1996).

Boyce, M. P. (2012). Combined cycle power plants. *Combined Cycle Systems for Near-Zero Emission Power Generation*, 1–43.

Bravo, Julio; Charles, Joshua; Neti, Sudhakar; Caram, Hugo; Oztekin, Alparslan; Romero, Carlos (2020). Integration of solar thermal energy to improve NGCC with CO₂ capture plant performance. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 100(), 103111–.

Cámara Mexicana de la Industria de la Construcción. (2020). *Infraestructura Sector Energético*.

Carbon Dioxide Safety Data Sheet. 2015 [online] Available at: <<https://mcf.tamu.edu/wp-content/uploads/2016/07/CO2.pdf>>.

CPS, Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis, 2d ed. (New York: Center for Chemical Process Safety. AIChE. 2000

Crowl, D. A., & Louvar, J. F. (2019). *Chemical process safety: Fundamentals with applications*. Boston: Pearson.

De Haag, P. U., & Ale, B. J. (2005). Guidelines for quantitative risk assessment: purple book. Ministerie van Volkshuisvesting en Ruimtelijke Ordening (VROM).

Díaz-Herrera, P. R., Ascanio, G., Romero-Martínez, A., Alcaraz-Calderón, A. M., & González-Díaz, A. (2020). Theoretical comparison between post-combustion carbon capture technology and the use of blue and green H₂ in existing natural gas combined cycles as CO₂

mitigation strategies: A study under the context of mexican clean energy regulation. *International Journal of Hydrogen Energy*.

Díaz-Ovalle, C., Vázquez-Román, R., & Sam Mannan, M. (2010). An approach to solve the facility layout problem based on the worst-case scenario. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(3), 385–392.

Environmental Protection Agency. 2018. Emissions and Generation Resource Integrated Database (eGRID). Available: <https://www.epa.gov/energy/emissions-generation-resource-integrated-database-egrid>.

Esquivel Patiño, G. G. (2021). *Optimización de Plantas de Potencia Convencionales Acopladas con Procesos de Captura de CO₂ y con Procesos de Utilización de Energías Residuales Considerando Aspectos Energéticos y Ambientales* (Doctorado). Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

Esquivel-Patiño, Gerardo Geovanni; Serna-González, Medardo; Nápoles-Rivera, Fabricio (2017). Thermal integration of natural gas combined cycle power plants with CO₂ capture systems and organic Rankine cycles. *Energy Conversion and Management*, 151(), 334–342.

Farid Kadri, Eric Chatelet, Patrick Lallement. The Assessment of Risk Caused By Fire and Explosion in Chemical Process Industry: A Domino Effect-Based Study. *Journal of Risk Analysis and Crisis Response*, 2013, 3 (2), pp.66-76.

HSE (2013). Methods of approximation and determination of human vulnerability for offshore major accident hazard assessment.

HSG39 (1998). Compressed Air Safety. Health and Safety Executive.

Huang, L., Pei, S., Wang, Y., Zhang, L., Ren, S., Zhang, Z., & Xiao, Y. (2019). Assessment of flammability and explosion risks of natural gas-air mixtures at high pressure and high temperature. *Fuel*, 247, 47–56.

IEAGHG (2012). CO₂ Capture at Gas Fired Power Plants. International Energy Agency.

Instituto Mexicano del Seguro Social – IMSS. (2018). Memoria Estadística 2018. <http://www.imss.gob.mx/conoce-al-imss/memoria-estadistica-2018>. México.

- James, M. (2014). Simplified methods of using probit analysis in consequence analysis. *Process Safety Progress*, 34(1), 58–63. doi:10.1002/prs.11686
- Jung, S., Ng, D., Laird, C. D., & Mannan, M. S. (2010). A new approach for facility siting using mapping risks on a plant grid area and optimization. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(6), 824–830.
- Jung, S., Ng, D., Lee, J.-H., Vazquez-Roman, R., & Mannan, M. S. (2010). An approach for risk reduction (methodology) based on optimizing the facility layout and siting in toxic gas release scenarios. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(1), 139–148.
- Khan, F. I., & Amyotte, P. R. (2002). Inherent safety in offshore oil and gas activities: A review of the present status and future directions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 15, 279–289.
- Khan, F. I., & Amyotte, P. R. (2004). Integrated inherent safety index (I2SI): A tool for inherent safety evaluation., 23(2), 136–148. doi:10.1002/prs.10015
- Kletz, T. A. (1985). Inherently safer plants. *Plant/Operations Progress*, 4, 164–167.
- Krzemień, A., Więckol-Ryk, A., Duda, A., & Koterak, A. (2013). Risk Assessment of a Post-Combustion and Amine-Based CO₂ Capture Ready Process. *Journal of Sustainable Mining*, 12(4), 18–23.
- López-Molina, A., Vázquez-Román, R., Mannan, M. S., & Félix-Flores, M. G. (2013). An approach for domino effect reduction based on optimal layouts. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26(5), 887–894.
- M.P. Boyce, in *Combined Cycle Systems for Near-Zero Emission Power Generation*, 2012.
- Mabaso, M. G. (2019). Quantitative risk assessment for the proposed richards bay combined cycle power plant near Richards Bay, Kwazulu natal province.
- Madejski, P., Chmiel, K., Subramanian, N., & Kuś, T. (2022). Methods and Techniques for CO₂ Capture: Review of Potential Solutions and Applications in Modern Energy Technologies. *Energies*, 15(3), 887.

Mandavilli, Apoorva (9 July 2018). "The World's Worst Industrial Disaster Is Still Unfolding". The Atlantic.

Martinez-Gomez, J., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M., & El-Halwagi, M. M. (2017). Optimization of the production of syngas from shale gas with economic and safety considerations. *Applied Thermal Engineering*, 110, 678–685.

Medina-Herrera, N., Jiménez-Gutiérrez, A., & Grossmann, I. E. (2014). A mathematical programming model for optimal layout considering quantitative risk analysis. *Computers & Chemical Engineering*, 68, 165–181.

Mkpat, E., Reniers, G., & Cozzani, V. (2018). Process safety education: A literature review. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 54, 18–27.

Mirjalili, Seyedali (2019). [Studies in Computational Intelligence] Evolutionary Algorithms and Neural Networks Volume 780 || Genetic Algorithm., 10.1007/978-3-319-93025-1(Chapter 4), 43–55.

Monoethanolamine Safety Data Sheet. 2020. Dow Química Mexicana S.A de CV

Mohri, M., Rostamizadeh, A., & Talwalkar, A. (2018). Foundations of machine learning. MIT press.

Rae, A., McDermid, J., & Alexander, R. (2012). The science and superstition of quantitative risk assessment. *Journal of Systems Safety*, 48(4), 28.

Rahman, S. M. T., Salim, M. T., & Syeda, S. R. (2014). Facility Layout Optimization of an Ammonia Plant Based on Risk and Economic Analysis. *Procedia Engineering*, 90, 760–765.

Roy, S., & Gupta, A. (2019). Safety investment optimization in process industry: A risk-based approach. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 104022.

Santon, R. C. (1998). Explosion Hazards at Gas Turbine Driven Power Plants. Volume 4: Heat Transfer; Electric Power; Industrial and Cogeneration.

Sato, Y. (2012). Optimal budget planning for investment in safety measures of a chemical company. *International Journal of Production Economics*, 140(2), 579–585.

Raschka, S. (2015). Python machine learning. Packt publishing ltd.

Shao, H., & Duan, G. (2012). Risk Quantitative Calculation and ALOHA Simulation on the Leakage Accident of Natural Gas Power Plant. *Procedia Engineering*, 45, 352–359. doi:10.1016/j.proeng.2012.08.170

Storm, K. (2020). *Industrial Construction Estimating Manual*. Gulf Professional Publishing.

Symonds, Peter (16 May 2003). "Thai toy factory fire: 10 years after the world's worst industrial inferno". World Socialist Web Site.

Yuo, C., & Kim, J. (2020). Quantitative risk assessment of an amine-based CO₂ capture process. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 37(10), 1649-1659.

Review

Applications of Multi-Objective Optimization to Industrial Processes: A Literature Review

Sandra C. Cerda-Flores, Arturo A. Rojas-Punzo and Fabricio Nápoles-Rivera *

Department of Chemical Engineering, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Santiago Tzuc 405, Centro, Morelia 58000, Mexico; 06602894@umich.mx (S.C.F.); 3142020@umich.mx (A.A.R.-P.)

* Correspondence: frapo@umich.mx; Tel.: +52-4433223500

Abstract: Industrial processes provide several of the products and services required for society. However, each industry faces different challenges from different perspectives, all of which must be reconciled to obtain profitable, productive, controllable, safe and sustainable processes. In this context, multi-objective optimization has become a powerful tool to aid the decision-making mechanism in the synthesis, design, operation and control of such processes. The solution to the mathematical models provides the necessary tools to assess the system performance in terms of different metrics and evaluate the trade-offs between the objectives in conflict. The number of applications of multi-objective optimization in industrial processes is ample and each application has its own challenges. In the present literature review, a broad panorama of the applications in multi-objective optimization is presented, including future perspectives and open questions that still need to be addressed.

Keywords: multi-objective optimization; industrial processes; optimization



Citation: Cerda-Flores, S.C.; Rojas-Punzo, A.A.; Nápoles-Rivera, F. Applications of Multi-Objective Optimization to Industrial Processes: A Literature Review. *Processes* **2022**, *10*, 133. <https://doi.org/10.3390/pr1001133>

Academic Editor: Juan-Tzuc Cortez

Received: 7 December 2021

Accepted: 5 January 2022

Published: 30 January 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Industrial activity provides most of the products and services required for the population's well-being, for example, food, clothing, energy, water, drugs, vehicles and computers, all of which are obtained in processing facilities. Since the products and services that can be manufactured in industrial facilities are so diverse, the challenges that every industry faces are enormous and specific. From the design, construction, operation and process control, the involved stakeholders are always concerned about how to perform these tasks in an optimal manner. Then, the question is, optimal from what perspective? Usually, investors seek to optimize the process profit and the process engineer might be interested in increasing yield and controllability; for the workers, increasing safety (reducing the risk) is of paramount interest, while, for governments, increasing the number of jobs or reducing the environmental impact are primal objectives. As it can be seen, the objectives can be diverse and, sometimes, these objectives are in conflict with each other. This means that the best solution for a given objective could be the worst for another. Consequently, multi-objective optimization becomes crucial as a problem-solving tool in industrial processes.

Multi-objective optimization (MCO) refers to the application of mathematical programming techniques to the solution of optimization problems in which more than one performance index (objective function) must be improved (maximized or minimized). MO problems can be classified as MO-LP if all the objective and constraints are linear, MO-NLP if the model includes at least one nonlinear equation in the objectives or constraints, MO-MIP if the model consists of linear equations and integer and continuous variables and MO-MINLP if the model includes nonlinear equations and integer and continuous variables. The solution to multiple objectives is difficult; instead, the concept of Pareto dominance is usually adopted [1]. This way, instead of obtaining a single solution, a set of Pareto optimal solutions are obtained. To obtain these solutions, two main approaches can be used; the first one consists in classical methods, such as scalarization-based methods, for example, weighted sum [2] or goal programming [3]. The second type of methods uses

Optimal Management of Multistakeholder Macroscopic Water Networks with Social, Economic, and Environmental Considerations

Juan José Olivarez-Areyan, Sandra Cecilia Cerda-Flores, Fabricio Nápoles-Rivera,^{*} and Mahmoud M. El-Halwagi

Cite This: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c03998>

Read Online

ACCESS |

Metrics & More

Article Recommendations

Supporting Information

ABSTRACT: This work presents an optimization model for macroscopic water networks, considering wastewater treatment, rainwater harvesting, allocation, and recycle/reuse. Given the pressing problem of water scarcity the world faces, it is important to address it while considering all of the stakeholders from various sectors. Furthermore, several intertwining objectives must be considered, including water resource conservation, social progress, and economic benefits. A systematic optimization approach is proposed to solve this problem. Trade-offs are established among the unsatisfied demand for domestic users, system profit, and the dynamic level of water wells. A superstructure is developed to embed configurations, considering domestic and industrial users. The users' water demands are seasonally dependent. Treatment options are considered to render the water in acceptable quality for its end use. The system has different storage devices that can be introduced at different locations in the targeted region. The solution of the optimization formulation provides a characterization of the design and operation of the macroscopic water system while providing the decision-makers with rigorous trade-offs and synergistic opportunities.



1. INTRODUCTION

Over the last hundred years, water use has increased globally, twice the rate of population growth. Numerous regions worldwide are facing or looming into water poverty. It is expected that by 2025, nearly 2 billion people will live in absolute water scarcity conditions and two-thirds of the world's inhabitants could experience water stress,¹ turning this crisis into one of the greatest challenges to overcome for the 21st century human development. Consequently, individual countries and regions must urgently address the critical issues posed by water stress through water management strategies, technologies, and regulations that address water availability, demand, treatment, discharge, and socioeconomic issues.^{2–4} Decision-making approaches for water management must adopt a multiobjective framework through which it is possible to model the water systems, supply, demand, technologies, sustainability, and socioeconomic objectives and constraints. Solving water optimization problems in real scenarios becomes subjective according to the demands of each stakeholder, and identifying an optimal solution is a complex task. In the context of macroscopic water systems, previous studies have emphasized the importance of integrating rainwater into water distribution networks to reduce stress on water resources and meet socioeconomic objectives.^{4–7} Hashempour et al.⁸ developed a methodology that accounted for water resource capacity and water demand uncertainties to determine the optimum annual water allocation, using an optimization model based on the conditional value at risk, which was used to minimize the water supply risk for the foreseeable future. It is also relevant to take note of the current necessity of optimizing

water use in industrial parks since around 40% of total water is destined to be used in manufacturing, and many of these facilities operate in regions with water scarcity. Therefore, researchers seek to minimize freshwater consumption and total water network costs. An optimization-based approach⁹ was proposed, using a property interception network to minimize the total cost of the network in an industry subject to flowrate and property constraints. A synthesis approach¹⁰ was developed for the macroscopic water integration network within industrial cities, which would reduce the consumption of freshwater and discharge wastewater in a profitable manner accounting for emissions and costs, finding a compromise solution to satisfy the demands of all participants. Other studies show the importance of water integration in industrial parks to lower utility costs as well as optimize the use of freshwater and wastewater,^{11–13} minimizing network connections to further enhance the networks. Optimization of cooling water systems was considered as part of optimizing water usage in industrial facilities.¹⁴ Although a multiobjective approach is used to optimize issues regarding water use, it is important to analyze the weight of the stakeholders to estimate a more realistic approach. Strategies such as game theory for a selection of sustainable water reuse applications¹⁵ and for

Received: October 6, 2021

Revised: February 16, 2022

Accepted: February 16, 2022