



**UNIVERSIDAD MICHOACANA  
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



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

**OPTIMIZACIÓN DEL NEXO AGUA-ENERGÍA EN LOS  
PROCESOS DE FRACTURA HIDRÁULICA**

**TESIS presentada por  
I.Q. MOISES FERREYRA QUIROZ**

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

**MAESTRO EN CIENCIAS  
EN  
INGENIERÍA QUÍMICA**

Dirigido por Dr. José María Ponce Ortega y Dr. Luis Fernando Lira Barragán.

**Morelia, Michoacán a Octubre del 2022**

## RESUMEN

### OPTIMIZACIÓN DEL NEXO AGUA-ENERGÍA EN LOS PROCESOS DE FRACTURA HIDRÁULICA

Por

I.Q. Moises Ferreyra Quiroz

Agosto del 2022

Maestro en Ciencias en Ingeniería Química

Dirigida por: Dr. José María Ponce Ortega y Dr. Luis Fernando Lira Barragán

La fractura hidráulica o fracking es una técnica para la extracción de gas y petróleo de yacimientos no convencionales, generalmente de formaciones de esquistos (shale). Sin embargo, la demanda de agua para realizar la fractura es enorme y conlleva problemas asociados al consumo y contaminación de agua. En el presente trabajo se propone usar el CO<sub>2</sub> proveniente de una planta de potencia para suplir parcial o totalmente al agua como fluido de fractura, ya que las propiedades del CO<sub>2</sub> en su estado supercrítico son muy similares a las del agua y permiten fracturas tridimensionales, las cuales facilitan la liberación del gas shale. Por otra parte, el uso de CO<sub>2</sub> como fluido de fractura representa un incremento en los costos del proceso debido a que el CO<sub>2</sub> proveniente de una planta de potencia se tiene que llevar al estado supercrítico en una planta de adsorción. Sin duda, la parte económica tiene mucho peso en este tipo de decisiones, por lo que la función objetivo es minimizar el costo total anual. El presente trabajo propone desarrollar una formulación de programación matemática basada en una superestructura para sintetizar redes de agua y CO<sub>2</sub> asociadas con operaciones de fracturación hidráulica de gas shale, tratamiento y disposición del agua, captura y adsorción de CO<sub>2</sub>, mientras se tiene en cuenta la incertidumbre del sistema y los aspectos ambientales en la decisión de la localización de los pozos. La formulación propuesta conlleva una planificación estratégica que minimiza el costo considerando los requisitos de agua, generación y captación del CO<sub>2</sub>, así como la capacidad de los equipos para tecnologías de tratamiento, transportación, unidades de almacenamiento y disposición. Las incertidumbres claves están relacionadas con el uso de agua y CO<sub>2</sub> para la fracturación y el retorno del agua de reflujó basado en el tiempo. La función objetivo está orientada a la minimización del costo total anual, que da cuenta de los costos operativos y de capital asociados a la red de agua y CO<sub>2</sub>.

**Palabras clave:** Fractura hidráulica, CO<sub>2</sub>, integración, optimización, redes de agua.

## Abstract

Hydraulic fracturing or fracking is a technique for extracting gas and oil from unconventional reservoirs, generally shale formations. However, the demand for water to carry out the fracture is enormous and involves problems associated with water consumption and pollution. In the present work, it is proposed to use CO<sub>2</sub> as fracture fluid, coming from a power plant, to replace the water partially or even totally since the properties of CO<sub>2</sub> in its supercritical state are very similar to those of water, besides CO<sub>2</sub> allows three-dimensional fractures, which facilitate the release of shale gas. On the other hand, the use of CO<sub>2</sub> as fracture fluid represents an increase in the process costs because the CO<sub>2</sub> provided by the power plant must be in a supercritical state which is done by an adsorption plant. Undoubtedly, the economic part has a lot of weight in this type of decision, so the objective function is to minimize the total annual cost. This paper proposes to develop a mathematical programming formulation based on a superstructure to synthesize water and CO<sub>2</sub> networks associated with shale gas hydraulic fracturing, water treatment and disposal, CO<sub>2</sub> capture and adsorption operations, while accounting for the uncertainty of the system and the environmental aspects in the decision of the location of the wells. The proposed formulation entails a strategic planning that minimizes the cost considering the requirements of water, generation and capture of CO<sub>2</sub>, as well as the capacity of the equipment for treatment technologies, transportation, storage and disposal units. The key uncertainties are related to the use of water and CO<sub>2</sub> for fracture and the return of flowback water based on time. The objective function is aimed at minimizing the total annual cost, which accounts for the operating and capital costs associated with the water and CO<sub>2</sub> network.

**Keywords:** Hydraulic fracturing, CO<sub>2</sub>, integration, optimization, water networks.

## Índice

<b>Resumen.....</b>	<b>ii</b>
<b>Abstract .....</b>	<b>iii</b>
<b>Índice de tablas.....</b>	<b>vi</b>
<b>Índice de figuras.....</b>	<b>vii</b>
<b>Nomenclatura .....</b>	<b>ix</b>
<b>Agradecimientos .....</b>	<b>xvi</b>
<b>Capítulo 1. Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Generalidades .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Objetivos .....</b>	<b>2</b>
<b>1.2.1 Objetivo General.....</b>	<b>2</b>
<b>1.2.2 Objetivos Particulares.....</b>	<b>2</b>
<b>1.3 Justificación .....</b>	<b>2</b>
<b>1.4 Antecedentes .....</b>	<b>3</b>
<b>1.5 Alcance .....</b>	<b>6</b>
<b>1.6 Hipótesis .....</b>	<b>7</b>
<b>Capítulo 2. Marco Teórico .....</b>	<b>7</b>
<b>2.1 Aspectos Generales de la Fractura Hidráulica .....</b>	<b>7</b>
<b>2.2 Problemas después de la Fractura .....</b>	<b>12</b>
<b>2.3 Planteamiento del Problema .....</b>	<b>13</b>
<b>2.4 Superestructura .....</b>	<b>14</b>
<b>Capítulo 3. Formulación del Modelo Matemático sin Incertidumbre .....</b>	<b>18</b>
<b>3.1 Metodología .....</b>	<b>18</b>
<b>3.2 Modelo Matemático .....</b>	<b>19</b>
<b>3.3 Resultados y Discusiones .....</b>	<b>33</b>

<b>Caso A.....</b>	<b>40</b>
<b>Caso B.....</b>	<b>46</b>
<b>Caso C.....</b>	<b>49</b>
<b>Capítulo 4. Formulación del Modelo Matemático con incertidumbre.....</b>	<b>56</b>
<b>4.1 Metodología .....</b>	<b>56</b>
<b>4.2 Formulación Matemática .....</b>	<b>56</b>
<b>Caso D.....</b>	<b>69</b>
<b>Conclusión .....</b>	<b>73</b>
<b>Referencias Bibliográficas .....</b>	<b>75</b>

## Índice de tablas

<b>Tabla 3.1</b> Resultados del monitor de sequía a nivel municipal para Reynosa, TAM y Ojinaga, CHH.....	36
<b>Tabla 3.2</b> Información para unidades de almacenamiento, disposición y tratamiento/adsorción.....	38
<b>Tabla 3.3</b> Costos unitarios de transporte asociados con el agua y CO <sub>2</sub> .....	39
<b>Tabla 3.4</b> TACs y su incremento para las distintas disponibilidades de Agua fresca a distintos porcentajes CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O .....	42
<b>Tabla 3.5</b> Total de Agua fresca requerida a distinto porcentaje de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O para diferente disponibilidad semanal .....	43
<b>Tabla 3.6</b> Agua total usada a diferentes porcentajes de % CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O para diferentes disponibilidades de agua fresca anuales .....	48
<b>Tabla 3.7</b> CO <sub>2</sub> total requerido para diferentes porcentajes de % CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O para el Caso B.....	49
<b>Tabla 3.8</b> TWR con la misma disponibilidad de agua fresca para las localizaciones de Ojinaga y Reynosa.....	50
<b>Tabla 3.9</b> TWR para las localidades de Ojinaga y Reynosa con diferente disponibilidad de agua.....	52
<b>Tabla 3.10</b> Incremento del TAC para las localidades de Reynosa y Ojinaga a distintos porcentajes de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O en la alimentación del fluido de fractura. ....	55
<b>Tabla 4.1.</b> Incremento del ETAC a distintos porcentajes de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O en la alimentación del fluido de fractura para las localidades de Reynosa y Ojinaga. ....	70
<b>Tabla 4.2</b> Comparación de los costos totales anuales y agua requerida de las localizaciones de Reynosa y Ojinaga para casos C y D. ....	71

## Índice de Figuras

<b>Figura 2.1</b> Diagrama del proceso de fractura hidráulica.....	8
<b>Figura 2.2</b> Geología esquemática de recurso del gas natural (USGS, 2002) .....	9
<b>Figura 2.3</b> Composición volumétrica del fluido de fracturación. Extraída de “Fracking: Extracción de gas y petróleo no convencional, y su impacto ambiental” .....	10
<b>Figura 2.4</b> Posibles fallas en el proceso de fractura hidráulica. (SINTEF Petroleum Research, 2013) .....	13
<b>Figura 2.5</b> Superestructura general de proceso para el fracking considerando H <sub>2</sub> O y CO <sub>2</sub> como fluido de fractura.....	15
<b>Figura 2.6</b> Esquema y diagrama de flujo para la obtención de energía eléctrica y gases de combustión.....	16
<b>Figura 2.7</b> Superestructura del uso de agua para la fractura hidráulica.....	17
<b>Figura 3.1</b> Diagrama de flujo para la simulación.....	19
<b>Figura 3.2</b> Programación de la fase de terminación en cada pozo.....	38
<b>Figura 3.3</b> TAC y TWR para las diferentes disponibilidades de agua fresca por semana.....	40
<b>Figura 3.4a</b> Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 9000 m <sup>3</sup> /semana.....	44
<b>Figura 3.4b</b> Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 4000 m <sup>3</sup> /semana.....	44
<b>Figura 3.4c</b> Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 1000 m <sup>3</sup> /semana.....	45
<b>Figura 3.4d</b> Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 100 m <sup>3</sup> /semana.....	45
<b>Figura 3.4e</b> Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 0 m <sup>3</sup> /semana.....	46
<b>Figura 3.5</b> TACs para las disponibilidades anuales de agua fresca.....	47
<b>Figura 3.6</b> TAC y TWR a diferentes porcentajes de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O e igual disponibilidad de agua fresca para Ojinaga and Reynosa.....	50
<b>Figura 3.7</b> Curva de Pareto del primer sub escenario para Reynosa.....	51
<b>Figura 3.8</b> Curva de Pareto del primer sub escenario para Ojinaga.....	52
<b>Figura 3.9</b> TAC y TWR a diferentes porcentajes de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O con diferente disponibilidad de agua dulce para las localidades de Ojinaga y Reynosa.....	53
<b>Figura 3.10</b> Curva de Pareto del segundo sub escenario para Reynosa.....	54
<b>Figura 3.11</b> Curva de Pareto del segundo sub escenario para Ojinaga.....	54

<b>Figura 4.1</b> ETAC y ETWR a distintos porcentajes de CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O en la alimentación del fluido de fractura para Ojinaga y Reynosa.....	69
<b>Figura 4.2</b> Curva de Pareto para Reynosa, Caso D.....	71
<b>Figura 4.3</b> Curva de Pareto para Ojinaga, Caso D.....	72

## Nomenclatura

### Parámetros

$AvailVCO_{2t}^{produced\_max}$	Máxima disponibilidad de dióxido de carbono m <sup>3</sup> /semana
$AvailVW_t^{fresh\_max}$	Máxima disponibilidad de agua m <sup>3</sup> /semana
$FCc^{storage}$	Cargo fijo por la unidad de almacenamiento para el CO <sub>2</sub> en la función de costo de capital, \$
$FCc^{treat}$	Cargo fijo por la unidad de tratamiento para el CO <sub>2</sub> en la función de costo de capital, \$
$FCW^{storage}$	Cargo fijo por la unidad de almacenamiento para el agua en la función de costo de capital, \$
$FCW^{treat}$	Cargo fijo por la unidad de tratamiento para el agua en la función de costo de capital, \$
$FCW^{waste}$	Cargo fijo por la unidad de deshecho para el agua en la función de costo de capital, \$
$FC_{n,t}^{well\_in}$	Flujo de entrada de dióxido de carbono requerido en los pozos m <sup>3</sup> /d
$FT_{n,t}^{well\_in}$	Flujo total de entrada a los pozos (agua/CO <sub>2</sub> ) m <sup>3</sup> /d
$FW_{n,t}^{well\_in}$	Flujo de entrada de agua requerido en los pozos m <sup>3</sup> /d
$FW_{n,t}^{well\_out}$	Flujo de agua saliendo de los pozos m <sup>3</sup> /d
$H^{time}$	Factor de conversión de tiempo d/semana
$UCC^{produced}$	Costo unitario del CO <sub>2</sub> producido, \$/m <sup>3</sup>
$UOCc_j^{treat}$	Costo operativo unitario para la planta de absorción de CO <sub>2</sub> , \$/m <sup>3</sup>
$UTCc_j^{produced\_treat}$	Costo unitario de transporte para el CO <sub>2</sub> producido en la planta de potencia hacia las plantas de absorción \$/m <sup>3</sup>

$UTCc_n^{sto}$	Costo unitario de transporte del CO <sub>2</sub> hacia los pozos, de \$/m <sup>3</sup>
$UTCc_{j,s}^{treat\_sto}$	Costo unitario de transporte para el CO <sub>2</sub> de las plantas de absorción hacia las unidades de almacenamiento
$UOCw_i^{treat}$	Costo operativo unitario de unidades de tratamiento de agua, \$/m <sup>3</sup>
$UTCw_n^{fresh}$	Costo unitario de transporte del agua fresca, \$/m <sup>3</sup>
$UTCw_{s,n}^{sto\_well}$	Costo unitario de transporte del agua reutilizada desde el almacenamiento hasta los pozos, \$/m <sup>3</sup>
$UTCw_{i,d}^{treat\_dis}$	Costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento hasta la eliminación, \$/m <sup>3</sup>
$UTCw_{i,s}^{treat\_sto}$	Costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento hasta el almacenamiento, \$/m <sup>3</sup>
$UTCw_{n,i}^{used}$	Costo unitario de transporte del agua de retorno desde los pozos hasta el tratamiento, \$/m <sup>3</sup>
$VCc^{storage}$	Cargo variable por la unidad de almacenamiento del CO <sub>2</sub> en la función de costo de capital, \$/m <sup>3</sup>
$VCc^{treat}$	Cargo variable por la unidad de tratamiento del CO <sub>2</sub> en la función de costo de capital, \$/m <sup>3</sup>
$VCw^{storage}$	Cargo variable por la unidad de almacenamiento del agua en la función de costo de capital, \$/m <sup>3</sup>
$VCw^{treat}$	Cargo variable por la unidad de tratamiento del agua en la función de costo de capital, \$/m <sup>3</sup>
$VCw^{waste}$	Cargo variable por la unidad de deshecho del agua en la función de costo de capital, \$/m <sup>3</sup>

### **Símbolos Griegos**

$\alpha_i^{treat}$	Factor de eficiencia volumétrica para la unidad de tratamiento
--------------------	--

$\alpha_j^{treat}$	Factor de eficiencia volumétrica para la planta de absorción
$\beta_C^{storage}$	Exponente asociado a las economías escala para las unidades de almacenamiento de $CO_2$
$\beta_C^{treat}$	Exponente asociado a las economías escala para las unidades de de adsorción
$\beta_W^{disp}$	Exponente asociado a las economías escala para las unidades de deshecho de agua
$\beta_W^{storage}$	Exponente asociado a las economías escala para las unidades de almacenamiento de agua
$\beta_W^{treat}$	Exponente asociado a las economías escala para las unidades de tratamiento de agua
$\gamma_j$	Factor de eficiencia de absorción del $CO_2$
<b>Variables</b>	
$CapCost_C^{storage}$	Costo capital para el almacenamiento del $CO_2$ , \$
$CapCost_C^{treatment}$	Costo capital para el tratamiento del $CO_2$ , \$
$CapCost_W^{storage}$	Costo capital para el almacenamiento del agua, \$
$CapCost_W^{treatment}$	Costo capital para el tratamiento del agua, \$
$CapCost_W^{waste}$	Costo capital para el deshecho del agua, \$
$Cost_C^{op\_treat}$	Costos operativos de absorción para el $CO_2$ , \$
$Cost_C^{produced}$	Costos operativos de producción del $CO_2$ , \$
$Cost_C^{trans\_pp\_treat}$	Costos de transporte para el $CO_2$ de las plantas de potencia hacia la planta de absorción, \$
$Cost_C^{trans\_sto}$	Costos de transporte para el $CO_2$ de las unidades de almacenamiento hacia los pozos, \$

$Cost_{CO_2}^{trans\_treat\_sto}$	Costos de transporte para el CO <sub>2</sub> de las plantas de absorción hacia las unidades de almacenamiento, \$
$Cost_w^{fresh}$	Costo del agua fresca, \$
$Cost_w^{op\_treat}$	Costos operativos del tratamiento del agua, \$
$Cost_w^{trans\_fb}$	Costo de transporte del agua de retorno desde los pozos hasta el tratamiento, \$
$Cost_w^{trans\_fresh}$	Costos del transporte del agua fresca, \$
$Cost_w^{trans\_sto\_well}$	Costo de transporte del agua reutilizada desde el almacenamiento hasta los pozos, \$
$Cost_w^{trans\_treat\_dis}$	Costo de transporte del agua tratada desde el tratamiento hasta la eliminación, \$
$Cost_w^{trans\_treat\_sto}$	Costo de transporte del agua tratada desde el tratamiento hasta el almacenamiento, \$
$FC_t^{produced}$	Flujo de CO <sub>2</sub> producido, m <sup>3</sup> /d
$FC_{s,t}^{storage\_in}$	Flujo entrante de CO <sub>2</sub> a las unidades de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d
$FC_{s,t}^{storage\_out}$	Flujo saliente de CO <sub>2</sub> de las unidades de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d
$FC_j^{treat\_cap}$	Capacidad de flujo de CO <sub>2</sub> de las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FC_j^{treat\_max}$	Fujo máximo de CO <sub>2</sub> para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FC_{j,t}^{treat\_in}$	Flujo de entrada de CO <sub>2</sub> para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FC_{j,t}^{treat\_out}$	Flujo de salida de CO <sub>2</sub> para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_t^{fresh}$	Flujo de agua fresca, m <sup>3</sup> /d
$FW_{s,t}^{storage\_in}$	Flujo entrante de agua a las unidades de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_{s,t}^{storage\_out}$	Flujo saliente de agua a las unidades de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d

$FW_i^{treat\_cap}$	Capacidad de flujo de agua de las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_{i,t}^{treat\_in}$	Flujo de entrada de agua para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_i^{treat\_max}$	Flujo máximo de agua para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_{i,t}^{treat\_out}$	Flujo de salida de agua para las unidades de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$FW_{d,t}^{waste}$	Flujo de desechos, m <sup>3</sup> /d
$ffc_{j,t}^{produced\_treat}$	Flujo segregado de CO <sub>2</sub> desde la planta de potencia a la planta de absorción, m <sup>3</sup> /d
$ffc_{s,n,t}^{storage}$	Flujo segregado de CO <sub>2</sub> desde el sistema de almacenamiento a los pozos, m <sup>3</sup> /d
$ffc_{j,s,t}^{treat\_sto}$	Flujo segregado de CO <sub>2</sub> desde la planta de absorción hacia el sistema de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d
$ffw_{n,t}^{fresh}$	Flujo segregado de agua fresca hacia los pozos, m <sup>3</sup> /d
$ffw_{s,n,t}^{storage}$	Flujo segregado de agua desde el sistema de almacenamiento a los pozos, m <sup>3</sup> /d
$ffw_{i,d,t}^{treat\_dis}$	Flujo segregado de agua desde el sistema de tratamiento a los desagües, m <sup>3</sup> /d
$ffw_{i,s,t}^{treat\_sto}$	Flujo segregado de agua desde el sistema de tratamiento al sistema de almacenamiento, m <sup>3</sup> /d
$ffw_{n,i,t}^{well}$	Flujo segregado de agua desde los pozos al sistema de tratamiento, m <sup>3</sup> /d
$TAC$	Costo total anual, \$
$TCC$	Costo total de capital, \$
$TCR$	Flujo total de CO <sub>2</sub> requerido, m <sup>3</sup>

$TOC$	Costo total de operación, \$
$TWR$	Flujo total de agua requerida, m <sup>3</sup>
$V_{C_{s,t}}^{storage}$	Volumen de tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> , m <sup>3</sup>
$V_{C_{s,t-1}}^{storage}$	Volumen de tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> en el periodo anterior m <sup>3</sup>
$V_{C_s}^{storage\_cap}$	Capacidad para tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> , m <sup>3</sup>
$V_{C_s}^{storage\_initial}$	Volumen inicial de tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> , m <sup>3</sup>
$V_{C_s}^{storage\_max}$ m <sup>3</sup>	Volumen máximo de tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup>
$V_{W_{s,t}}^{storage}$	Volumen de tanques/pilas de almacenamiento para el agua, m <sup>3</sup>
$V_{W_{s,t-1}}^{storage}$	Volumen de tanques/pilas de almacenamiento para el agua en el periodo anterior m <sup>3</sup>
$V_{W_s}^{storage\_cap}$	Capacidad para tanques/pilas de almacenamiento para el agua, m <sup>3</sup>
$V_{W_s}^{storage\_initial}$	Volumen inicial de tanques/pilas de almacenamiento para el agua, m <sup>3</sup>
$V_{W_s}^{storage\_max}$	Volumen máximo de tanques/pilas de almacenamiento para CO <sub>2</sub> m <sup>3</sup>
$V_{W_d}^{waste\_cap}$	Capacidad para deshechos, m <sup>3</sup>
$V_{W_d}^{waste\_max}$	Volumen máximo para deshechos, m <sup>3</sup>
$y_{C_{sg}}^{storage}$	Variable binaria utilizada para modelar la existencia de las unidades de almacenamiento para el CO <sub>2</sub>

$y_{sw}^{storage}$	Variable binaria utilizada para modelar la existencia de las unidades de almacenamiento para el agua
$y_i^{treat}$	Variable binaria utilizada para modelar la existencia de las unidades de tratamiento del agua
$y_c_j^{treat}$	Variable binaria utilizada para modelar la existencia de las unidades de adsorción/desorción del CO <sub>2</sub>
$y_d^{waste}$	Variable binaria utilizada para modelar la existencia de las eliminaciones

### **Sets**

$I$	$\{i \mid i \text{ es una unidad de tratamiento}\}$
$J$	$\{j \mid j \text{ es la planta de absorción de CO}_2\}$
$D$	$\{d \mid d \text{ is a disposal}\}$
$N$	$\{n \mid n \text{ es un pozo}\}$
$S$	$\{s \mid s \text{ es un tanque/pila de almacenamiento}\}$
$T$	$\{t \mid t \text{ es un periodo de tiempo}\}$

### **Subíndices y superíndices**

$i$	unidad de tratamiento
$j$	planta de absorción de CO <sub>2</sub>
$d$	desagüe
$n$	pozo
$h$	almacenamiento/pila para el agua
$g$	almacenamiento/pila para el CO <sub>2</sub>
$t$	periodo de tiempo

## **Agradecimientos**

Desde mi infancia y formación educativa, siempre he contado con la fortuna de tener a gente a mi alrededor apoyándome y creyendo en mi cuando a veces ni yo mismo lo hacía, y no me queda nada más que decir que decir una palabra: ¡gracias!

### ***A mis Asesores. Dr. José María Ponce Ortega y Dr. Luis Frenando Lira Barragán***

Le agradezco muy profundamente a mi tutor por su dedicación y paciencia, sin sus palabras y correcciones precisas no hubiese podido lograr llegar a esta instancia tan anhelada. Gracias por su guía y todos sus consejos, los llevaré grabados para siempre en la memoria en mi futuro profesional. Son muchos los docentes que han sido parte de mi camino universitario, y a todos ellos les quiero agradecer por transmitirme los conocimientos necesarios para hoy poder estar aquí. Sin ustedes los conceptos serían sólo palabras, y las palabras se las lleva el viento.

### ***Al Comité Tutorial. Dr. Fabricio Nápoles Rivera, Dr. Agustín Jaime Castro Montoya, y Dr. Cesar Ramírez Márquez***

Por sus aportaciones y mejoras.

### ***Al Conacyt***

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por el apoyo que me otorgaron para realizar mis estudios de Maestría. Gracias por su valioso patrocinio.

### ***A mis padres: Alberto Ferreyra García y Leticia Ferreyra Quiroz***

Gracias a mis padres que siempre han sido mi motor y mi mayor ejemplo, si tuviera que describir el significado de esfuerzo, trabajo, dedicación, lucha, humildad, perseverancia y amor tendría solamente que presentarles a mis padres. Nunca fui un niño sencillo de lidiar, era travieso, necio y hasta veces arrogante, pero con su educación y ejemplo me enseñaron a moldearme a mí mismo para evolucionar y siempre ser la mejor versión de mí tanto como persona como profesional, esto no hubiera sido posible de no ser por ustedes. Agradezco a la vida por tener a mis mas grandes maestros siempre a mi lado, este logro es mas de ustedes que mío.

### ***A Mis Hermanos: Alberto, Eunice, Josue, Abraham, Jonathan, Leticia y Saray Ferreyra Quiroz***

Gracias por todo su apoyo son mis mayores ejemplos de vida, todos escogieron caminos distintos pero cada uno ha cumplido todas sus metas y formado un estilo de vida que cualquier persona seria digno de seguir.

*A mi tía Adriana Quiroz Diaz y sus Hijos Efraín y Martin Leyva Quiroz*

Gracias por siempre apoyarme cuando lo necesité, por preocuparse por mi bienestar cuando estuve solo.

*A Mi prometida Marlen Alejandra Marín Gonzales*

Por último, pero no menos importante agradecer a la persona que siempre ha estado mi lado en los últimos 8 años: mi futura esposa. Me has enseñado desde lo más básico, un hola, hasta lo más complejo en esta vida, amar. Este logro no hubiera sido posible sin tu ayuda, esos días de oscuridad donde todo era estrés, desánimos, desilusiones y decepción tu fuiste la vela que alumbro mi camino y ahora ere mi faro que me ayuda siempre a llegar mi destino, nadie sabe lo difícil que es lidiar con una persona como yo, con todos mis defectos y virtudes, tú has logrado entender bien mi persona y ayudarme a ser la mejor versión de mí.

Los amo a todos ustedes y no tengo nada más que agradecerles.

## Capítulo 1. Introducción

### 1.1 Generalidades

Una de las principales preocupaciones sobre el crecimiento económico y el desarrollo social en la actualidad es la demanda de energía en constante aumento [1]. El estudio de la Administración de Información de Energía de Estados Unidos ha pronosticado un aumento del 28% en el consumo de energía en el mundo de 2015 a 2040 [2]. Sin embargo, recientes estimaciones prevén que el consumo mundial de energía aumente en un 41% en dos décadas [3]. El aumento en el consumo de energía ha permitido identificar importantes impactos económicos y ambientales [4]. Si bien hay un progreso constante año tras año para el desarrollo de las energías renovables, el uso de fuentes fósiles (petróleo, carbón y gas natural) sigue siendo dominante, y sigue siendo indispensable en un futuro próximo [5]. Entre los recursos energéticos fósiles, el gas natural presenta un interés particular por su mayor contenido energético ( $55,7 \text{ kJ g}^{-1}$  si se basa completamente en metano como su componente principal) que el carbón ( $39,3 \text{ kJ g}^{-1}$ ) así como su reducida emisión de  $\text{CO}_2$  (50% menos que el carbón y 30% menos que el petróleo). Además, las reservas de gas natural en todo el mundo son abundantes, alcanzando unos 193,5 billones de metros cúbicos a finales de 2017 [6]. Como resultado, el gas natural ha representado el mayor incremento (24%) en el principal consumo de energía en la última década hasta el 2017, y se ha sugerido como sustituto del petróleo y el carbón como fuente de energía líder en el futuro para los próximos 20 años [7]. En respuesta a esto, existe un gran número de esfuerzos de investigación y desarrollo cada año sobre el despliegue de gas natural para su uso en varios sectores, incluidos el industrial, residencial, eléctrico, de transporte y muchos otros [8]. Como resultado de las recientes innovaciones en perforación horizontal y fracturación hidráulica, el gas shale se ha convertido en un importante suministro energético mundial. Este proceso demanda enormes cantidades de agua, siendo el fluido de fractura que se inyecta en los pozos para liberar el gas. Sin embargo, los problemas de consumo y eliminación de agua asociados con el desarrollo de gas shale, junto con el crecimiento de la industria, suscita preocupaciones sobre los posibles impactos adversos y ha generado la necesidad de estrategias sofisticadas de gestión del agua [9].

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivo General

- ❖ Proponer una estrategia de optimización general que permita la integración de CO<sub>2</sub>, plantas de potencia y el agua fresca en las operaciones de fractura hidráulica para producir gas shale.

### 1.2.2 Objetivos particulares

- Encontrar una planificación estratégica que considere la incertidumbre generada por los distintos escenarios posibles y los riesgos asociados con la gestión de agua y producción de CO<sub>2</sub>.
- Mediante un programa de optimización mixto-entero lineal (MILP), incorporar una función objetivo que minimice tanto el costo total anual como el consumo de agua fresca en los pozos.
- Determinar la mejor opción respecto a la cantidad de agua y CO<sub>2</sub> requeridas en la alimentación de los pozos para obtener la mayor ganancia posible a través de la generación de curvas de Pareto.

## 1.3 Justificación

El uso de combustibles fósiles ha llevado a la comunidad científica a buscar alternativas que sustituyan a estos combustibles por otros que sean más limpios. El gas shale representa actualmente un factor determinante en el sector energético mundial y éste muestra un crecimiento exponencial. Además, el gas shale junto al gas natural tiene un menor índice de huella de carbón comparado a los combustibles convencionales. Particularmente, en el caso de México este gas shale no ha sido explotado aun cuando existen grandes reservas de este recurso y entre las razones de esta situación se debe a que en las zonas en donde se encuentran dichas reservas tienen un severo problema de escasez de agua. Debido a esto y a que la fractura hidráulica demanda una gran cantidad de agua, existen diferentes desafíos asociados a la producción del gas shale como serían la recuperación y tratamiento del agua de reflujos, el diseño de equipo para el tratamiento y almacenamiento del agua, la optimización que minimice los costos anuales de operación y el desecho óptimo de residuos (agua y CO<sub>2</sub>). Por lo tanto, es necesario encontrar una alternativa que reduzca el consumo de agua al momento de hacer la fractura en el subsuelo. El uso del CO<sub>2</sub> como sustituto del agua permite crear fracturas tridimensionales con una mayor extensión vertical y a mucha menor presión, mientras que las fracturas hechas con agua o hidrocarburos viscosos tienden

a generar facturas planares. En este sentido, es necesario contar con un diseño óptimo del sistema de producción de gas shale en México. Para realizar este estudio se deben tomar en cuenta diversos factores técnicos y económicos (donde instalar los pozos, la red de distribución y almacenamiento), así como las consecuencias ambientales, de seguridad y sociales. Particularmente, debido a la enorme incertidumbre asociada al sistema es requerido desarrollar los modelos y técnicas de optimización adecuados para resolver el problema bajo estudio.

#### **1.4 Antecedentes**

Los recientes aumentos en la producción de gas no convencional han influenciado a las empresas de petróleo y gas en la capacidad para cumplir con la demanda mundial de energía, particularmente en Norte América. Esto ha llevado a desarrollar investigaciones para la obtención de combustibles que puedan llenar la demanda energética; recientemente, han sido encontradas reservas substanciales de gas shale en Norte América [10]. Avances tecnológicos en la perforación horizontal y fractura hidráulica de multi etapas fueron los dos factores principales que contribuyeron a un auge sin precedentes del gas shale durante la década pasada en los Estados Unidos de América [11]. Según la Administración de Información Energética (IEA), para el año 2035 se espera que el gas shale proporcione aproximadamente la mitad del suministro total de gas natural en los Estados Unidos de América [12]. El desarrollo del gas shale depende en gran medida en desarrollar una fractura hidráulica de múltiples etapas para maximizar la viabilidad comercial de acuerdo con la demanda energética. El estudio sobre la combustión del gas natural ha sido ampliamente usado en los últimos años, ya que ha mostrado ser un combustible con menor trazas de contaminantes comparados a los combustibles convencionales. En este sentido, Gloria Villafior y col. [13] desarrollaron una simulación en donde determinaron cuales son las variables significativas del proceso de combustión de gas natural. Veselý y col. [14] simularon el proceso de combustión de gas natural determinando la temperatura y los perfiles de concentración de metano, oxígeno, monóxido y dióxido de carbono a la salida de la cámara de combustión. Por otra parte, Khoshnoodi y Lim [15] realizaron la simulación de la primera etapa de la producción de gas de síntesis a partir de gas natural utilizando una herramienta de análisis de sensibilidad paramétrica que les permitió encontrar la temperatura óptima del reactor para maximizar la producción de CO en el gas de síntesis. Weber y col. [16] simularon una cámara de combustión a altas temperaturas y grandes cantidades de gas observando que el proceso de combustión fue mucho más lento que

el proceso tradicional, así como la presencia de flujos de calor radiactivo en alta proporción y emplearon un modelo químico simplificado para estas nuevas condiciones de combustión. Sonibare y Akeredolu [17] simularon la combustión de gas natural de Nigeria, utilizando un modelo teórico basado en las ecuaciones de balance de materia, determinando cuáles son las condiciones operativas que favorecen la combustión completa y cuáles llevan a la combustión incompleta. También, analizaron el efecto de impurezas en el gas natural que llegan a cambiar las condiciones anteriormente determinadas. Westbrook y col. [18] realizaron una revisión sobre los progresos realizados en los últimos 50 años en el campo de la computación aplicada al proceso de combustión, prestando atención particularmente a los distintos modelos desarrollados para fluidodinámica y cinética química. Sin embargo, esto conlleva ciertos problemas que afectan a la sociedad y al medio ambiente. Los pozos son fracturados hidráulicamente tradicionalmente con grandes cantidades de “fluido de fractura” (agua fresca o alguna mezcla de agua, aditivos y otros compuestos químicos). Este fluido de fractura es inyectado dentro de los pozos a altas presiones para liberar el gas que se encuentra atrapado en las rocas de poca permeabilidad. Al hacer esto permite que el gas natural fluya libremente a través del pozo y, a su vez, aumenta la recuperación.

Los trabajos de fractura usan un aproximado de 1-3 millones de galones de agua por cada pozo de gas shale, en algunos casos esto excede hasta los 5 millones de galones de agua [19]. Después de cada extracción la presión es liberada y junto con el gas natural el agua de reflujo y el agua producida regresan a la superficie. El agua producida se refiere al agua que se encuentra en el subsuelo mientras que la de reflujo es el agua inyectada que se recupera al término de la fractura [20]. Tanto el reflujo de fractura como las aguas producidas generalmente contienen altos niveles de sólidos disueltos totales (TDS) y otros contaminantes. Consecuentemente, diferentes desafíos se generan y tienen que ser atendidos con demasiada importancia. Estos incluyen problemas de agua asociados a la producción de gas shale, tal como el satisfacer la cantidad de agua necesaria para completar cada fase de extracción, la captación del agua de reflujo, el diseño óptimo y operación del equipo para el tratamiento y almacenamiento del agua usada, la disposición óptima de las corrientes de aguas residuales y finalmente la optimización de las tareas de transportación.

Si el agua de reflujo es tratada y almacenada puede ser reusada para reducir el consumo de agua fresca y las aguas de desecho; reduciendo los costos correspondientes. Como fue mencionado anteriormente, el uso del CO<sub>2</sub> como fluido de fractura puede reducir significativamente el consumo

de agua. El incremento en las emisiones de CO<sub>2</sub> tiene gran relevancia en el calentamiento global, por lo tanto, la captación y almacenamiento de dióxido de carbono se ha convertido en un tema de importancia en recientes estudios como una herramienta importante para disminuir las emisiones de CO<sub>2</sub> en la atmosfera [21-23]. Varios trabajos se han enfocado en desarrollar síntesis en redes de reciclaje y reusó del agua y CO<sub>2</sub>. Estas técnicas se han clasificado como enfoques gráficos, algebraicos o matemáticos. Algunos ejemplos de enfoques algebraicos son los que presentaron Almutlaq [24] y Qin [25]. Los enfoques matemáticos hacen uso de técnicas de programación y simulación que de un acercamiento al valor real (Gabriel y El-Halwagi [26], Yang y Grossman [27], Yu y col. [28], Ponce-Ortega y col. [29, 30], Nápoles-Rivera y col. [31] y Lira-Barragán y col. [32-34]). Todos los trabajos formulados anteriormente han sido desarrollados para la industria tradicional, por lo tanto, no son aplicables de manera directa para la producción del gas shale. Cafaro y Grossmann [35] presentaron un modelo para planificar la cadena de suministro del gas shale y determinar el número de pozos, el tamaño de las plantas de procesamiento, las secciones y longitud de las tuberías para la recolección del gas crudo y suministro de gas procesado; para los productos la potencia de los compresores, la cantidad de agua fresca requerida para la perforación y fractura hidráulica de los yacimientos con el fin de maximizar el valor presente neto del proyecto. Chen [36] desarrolló un modelo detallado para el diseño óptimo de la cadena de suministro de Marcellus Shale, donde el desempeño económico y ambiental del ciclo de vida se considera bajo incertidumbre. Wang y Xu [37] propusieron una nueva metodología para la operación simultánea de gas shale, recuperación de NGL y regasificación LNG 59, considerando la incertidumbre de la velocidad de alimentación de gas shale. Knudsen y col. [38] presentaron una formulación matemática para la programación del pozo utilizando una relajación lagrangiana. Gao y You [39] diseñaron y planearon el suministro de gas shale bajo la incertidumbre, incluyendo la perforación, la producción, procesamiento y transporte.

La incertidumbre es una condición inherente en el diseño y planificación para sistemas de producción de energía y gestión del agua. Consecuentemente, este aspecto ha sido considerado ampliamente para la síntesis de redes de agua. Nápoles-Rivera y col. [40] propusieron una metodología para el uso sustentable de agua bajo la incertidumbre paramétrica in redes macroscópicas de agua, Broad y col. [41] incorporaron la incertidumbre en una aproximación sistemática para los sistemas de distribución del agua, mientras que Khor y col. [42] integraron la síntesis de una red de agua bajo incertidumbre y riesgo de gestión. Además, Ahn y Kang [43]

introdujeron un plan de largo plazo para una cadena de suministro sustentable del agua considerando futuras incertidumbres en las demandas del agua y disponibilidad de la fuente. Islam y col. [44] examinaron las incertidumbres en los sistemas tradicionales de suministro del agua. Mientras que Yang y col. [45] desarrollaron un enfoque para redes de agua que tengan en cuenta modelos de atajos realistas y específicos de la unidad, así como la incertidumbre en la carga masiva de contaminantes. Lira-Barragán y col. [46] presentaron una formulación de programación matemática para la gestión óptima del agua de reflujo en pozos de gas de esquisto. La formulación tiene en cuenta la generación basada en el tiempo del agua de reflujo, las opciones de tratamiento, almacenamiento, reutilización y eliminación. Se consideran los objetivos económicos y ambientales. La función objetivo económica consiste en determinar el costo mínimo del agua dulce, tratamiento, almacenamiento, disposición y transporte. Los objetivos ambientales se cuantifican a través del consumo de agua dulce y la descarga de aguas residuales.

Por otra parte, considerando la inyección de dióxido de carbono como fluido de fractura, podría mejorar la recuperación de hidrocarburos de los depósitos de petróleo/gas del suelo y captar los gases que provocan el efecto invernadero; contribuyendo de manera simultánea al medio ambiente. Kang y col. [47] estudiaron la desorción de CO<sub>2</sub> en dos pozos de Barnett como resultado demostraron que la adsorción del CO<sub>2</sub> fue 5 a 10 veces mayor que la adsorción de CH<sub>4</sub> y ambas adsorciones se ajustaron a la ecuación de Langmuir. Por lo tanto, las reservas de gas shale son lugares prometedores de almacenamiento para el CO<sub>2</sub>. Dahaghi [48] y Schepers y col. [49] utilizaron COMET3 y Eclipse para la simulación de yacimientos de inyección de CO<sub>2</sub> en los pozos de gas shale en Devónico de Eastern Kentucky, basado en la suposición de que el transporte de la matriz de dióxido de carbono es un fluido viscoso.

### **1.5 Alcance**

La aportación de este trabajo es la formulación de un modelo matemático para la optimización del proceso de fractura para la obtención de gas shale usando como fluido de fractura una de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en diferentes proporciones con el fin de reemplazar el agua parcialmente o sustituir por completo al agua como fluido de fractura. Esto tendrá un gran impacto ambiental y también en los costos del proyecto ya que la demanda de agua fresca será menor a medida que el porcentaje de CO<sub>2</sub> aumente en el fluido de fractura; sin embargo, esto también tendrá un aumento en el costo

total anual porque el costo del CO<sub>2</sub> es mayor al del agua debido a que el CO<sub>2</sub> proveniente de una planta potencia, tiene que ser tratado por una planta de adsorción de CO<sub>2</sub>.

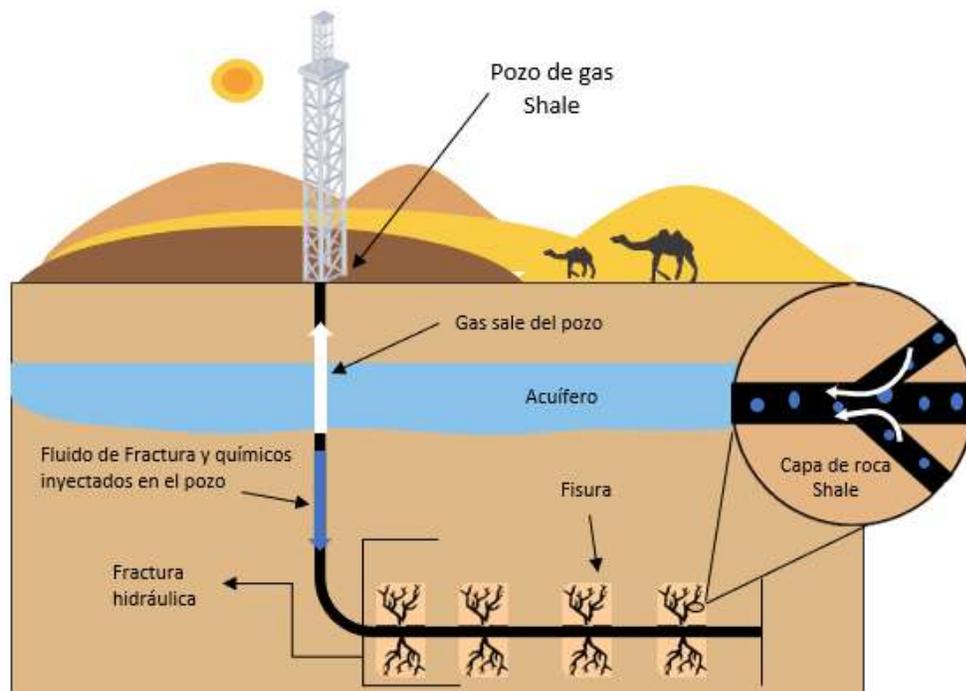
### **1.6 Hipótesis**

La aplicación de un modelo multiobjetivo mixto-entero no lineal que considere aspectos económicos y ambientales en el proceso de fractura hidráulica para la producción de gas shale, permitirá la planificación óptima para la extracción de gas shale; reduciendo el consumo de agua fresca usando CO<sub>2</sub> como alternativa para fluido de fractura y así generar la mayor ganancia posible. Esta metodología podrá ser empleada en todas las zonas donde exista gas shale y que al mismo tiempo la disponibilidad de agua sea un problema grave y que al mismo tiempo exista una planta de potencia con el fin de integrar ambas industrias.

## Capítulo 2. Marco Teórico

### 2.1 Aspectos generales de la fractura hidráulica

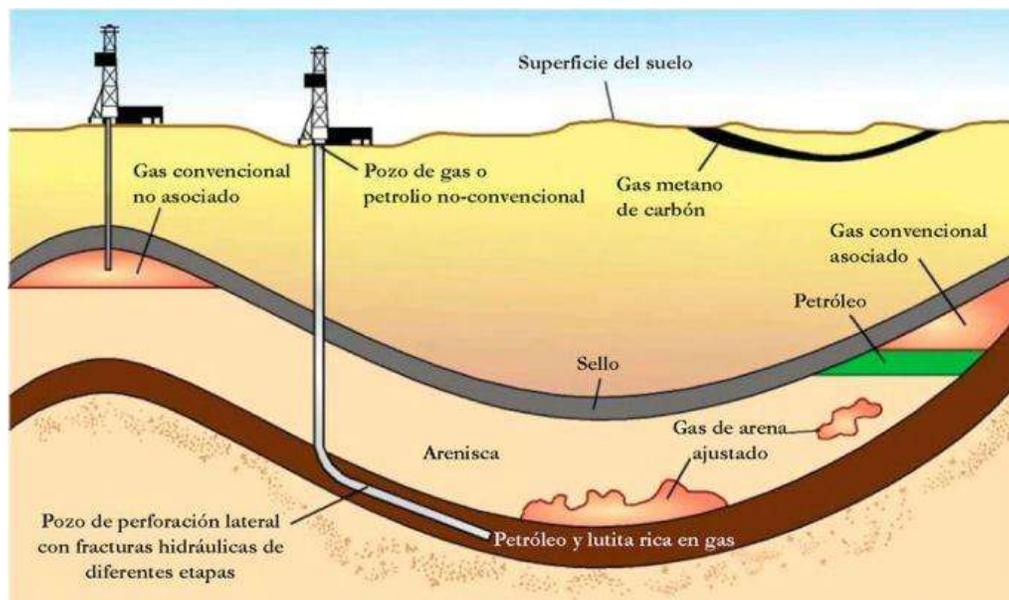
La fractura hidráulica o *fracking* es una técnica para la extracción de gas y petróleo de yacimientos no convencionales, generalmente de formaciones de esquistos (shale). Esta técnica consiste en la perforación de un pozo vertical atravesando capas de roca y acuíferos desde la plataforma en la superficie hacia donde se encuentra la capa de esquisto, la cual puede llegar hasta 3000 m de profundidad. Antes de llegar a la capa de esquisto la tubería se desvía progresivamente a la horizontal (50 a 100 m) creando mayor área de contacto y optimizando la recuperación del recurso natural, se utilizan explosivos para crear pequeñas grietas alrededor del orificio de producción. Para extender las fracturas en diferentes direcciones se bombea un fluido a una elevada presión entre 345 y 690 atmósferas equivalentes a la presión que hay bajo el mar a una profundidad de 3450-6900 m alcanzando longitudes de uno a un kilómetro y medio con el objetivo de ampliar las fracturas existentes en el sustrato rocoso que encierra el gas o el petróleo y favoreciendo así su salida hacia el exterior. La Figura 2.1 muestra de manera simple como se obtiene el gas shale mediante la fractura hidráulica



**Figura 2.1** Diagrama del proceso de fractura hidráulica

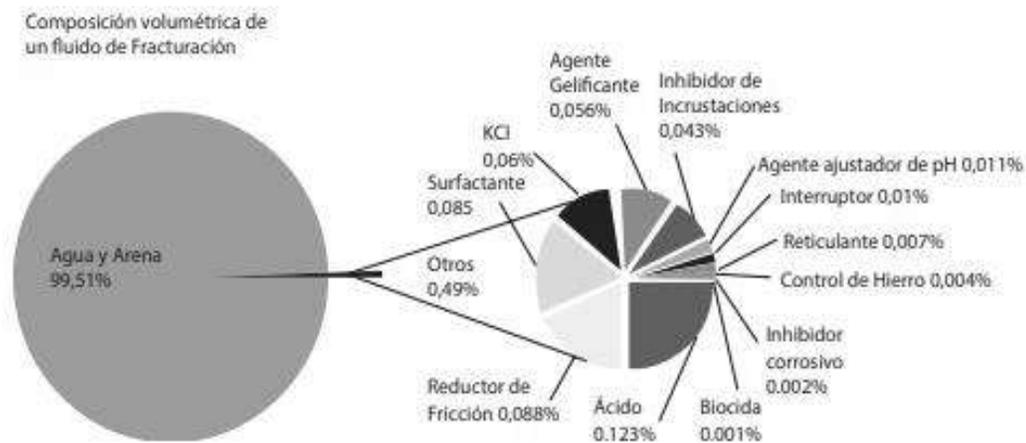
Habitualmente, el material inyectado es agua con arena y productos químicos, aunque ocasionalmente se pueden emplear espumas o gases. Los reservorios no convencionales se refieren a petróleo y/o gases alojados en formaciones de muy baja permeabilidad que requieren de técnicas especiales de estimulación. La Figura 2.2 muestra las distintas capas del subsuelo y los distintos recursos naturales que se obtienen en cada una de ellas. Según el reservorio que los aloja reciben la denominación de: Gas de Areniscas Compactas (Tight Gas Sands), Petróleo en Rocas de Baja Permeabilidad (Low Perm Oil), Gas o Petróleo en Pelitas (Shale Gas y Shale Oil) y Petróleo Pesado (Heavy Oil). Para su explotación y desarrollo suelen combinarse dos técnicas conocidas: la perforación (horizontal o vertical) y la fractura hidráulica [50]

Las técnicas de fracturación para estimular la producción de gas natural y aceite datan de fines del siglo XIX, pero su desarrollo se dio en el siglo pasado hasta los años 50 y mediados de los 70 donde se comenzaron a desarrollar programas de investigación para la producción comercial de gas natural en formaciones no muy profundas del este de los Estados Unidos. Los proyectos piloto experimentaron tecnologías que más tarde se convertirían en precursoras de la producción comercial de gas shale.



**Figura 2.2** Geología esquemática de recurso del gas natural [51]

Una de las principales características del fracking es la aplicación de grandes cantidades de agua ya que resulta esencial para realizar esta técnica. El agua es aplicada a yacimientos de lutita, cuya baja viscosidad permite que el fluido se filtre lentamente mediante muchas grietas pequeñas de la roca natural. A partir de 1940 el gas de esquisto extraído del yacimiento Barnett Shale, centro-norte de Texas, constituyó sólo un 2% de la producción total hasta el 2000 para el 2007 se incrementó al 8,1% y en un sorprendente 29% para 2011 frente al 40% de la producción de gas en el 2012. En el 2013, existieron más de 40,000 productores de pozos de gas de esquisto. La Figura 2.3 demuestra la composición volumétrica del fluido de fractura compuesto principalmente por agua.



**Figura 2.3** Composición volumétrica del fluido de fracturación. Extraída de “Fracking: Extracción de gas y petróleo no convencional, y su impacto ambiental” [52].

Las reservas de gas shale y las de shale oil, son codiciadas por diferentes empresas que utilizan la técnica de la fractura hidráulica para su extracción, esta técnica ha sido señalada y prohibida en diferentes países y provincias por la enorme contaminación que genera tanto al medio ambiente como a las poblaciones en donde se practica. En países como Estados Unidos, Canadá, Sudáfrica, Australia, Francia, España e Inglaterra la comunidad científica ha manifestado su preocupación por los efectos nocivos que genera la práctica del fracking, especialmente en el consumo y contaminación de agua. Por lo que la comunidad científica ha buscado alternativas de fluido para la fractura que puedan sustituir el agua completa o parcialmente, mejorando así el proceso de fracking y reduciendo el impacto ambiental.

La revista Petroquímica [53] informa que la compañía San Antonio Internacional fracturó otro pozo no convencional en Aguada del Cajón, Neuquén. La gran novedad es que esta vez en vez de usar agua se usó dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) para fracturar la formación gasífera. La fractura con CO<sub>2</sub> se realiza siguiendo los mismos pasos que durante la fractura con agua, aunque se usan distintos equipos para comprimir el CO<sub>2</sub> y mezclarlo con la arena y los necesarios productos químicos. Cuando se usa CO<sub>2</sub> en vez de agua, el problema es cómo hacer para que el CO<sub>2</sub> pueda transportar el agente de sostén hasta el fondo del pozo y dentro de las fracturas. Para solucionar este problema, se lleva al CO<sub>2</sub> al llamado estado *súper-crítico* de presión y temperatura, lo cual lo convierte en una espuma con características tanto líquidas como gaseosas. La capacidad de transportar el agente de sostén depende de la viscosidad del CO<sub>2</sub> y su capacidad de permanecer en estado *súper-crítico*. La limitada experiencia actual indica que las fracturas hechas con CO<sub>2</sub> producen inicialmente más gas o petróleo porque desarrollan una red de fracturas más extensa y compleja que las hechas con agua [54]. La bajísima viscosidad del CO<sub>2</sub> permite crear fracturas tridimensionales con una mayor extensión vertical y a mucha menor presión, mientras que las fracturas hechas con agua o hidrocarburos viscosos tienden a generar facturas planares [55].

Sin embargo, se han documentado ciertos problemas que han surgido al emplear esa nueva tecnología. El límite a la presión que se pueda hacer durante la fractura, y ese límite está dado por la necesidad de controlar la extensión de la fractura. En otras palabras, si bien fracturar con CO<sub>2</sub> puede resultar en un aumento de la productividad inicial del pozo todavía falta una evaluación más completa de los beneficios o problemas que puedan resultar de la aplicación de esta técnica. Hace sólo un par de años, General Electric (GE) todavía estaba desarrollando este método, pero lo consideraba en un estado muy primitivo. En ese momento no se creía que pudiera reemplazar al agua para las fracturas debido a los desafíos técnicos para conseguir la viscosidad adecuada del CO<sub>2</sub> y la infraestructura necesaria para implementarla [56]. Al mismo tiempo, GE fue cautelosa al indicar los probables riesgos ambientales resultantes de la captura, compresión, transporte y uso del CO<sub>2</sub> en estas operaciones. Entre estos riesgos se menciona la imposibilidad de construir tuberías que transporten el CO<sub>2</sub> hasta cada uno de los pozos para su uso en fractura, indicando que el transporte de CO<sub>2</sub> requerirá un tránsito mucho mayor de camiones, con el consiguiente impacto en la red vial, la seguridad de las personas y el riesgo de fugas.

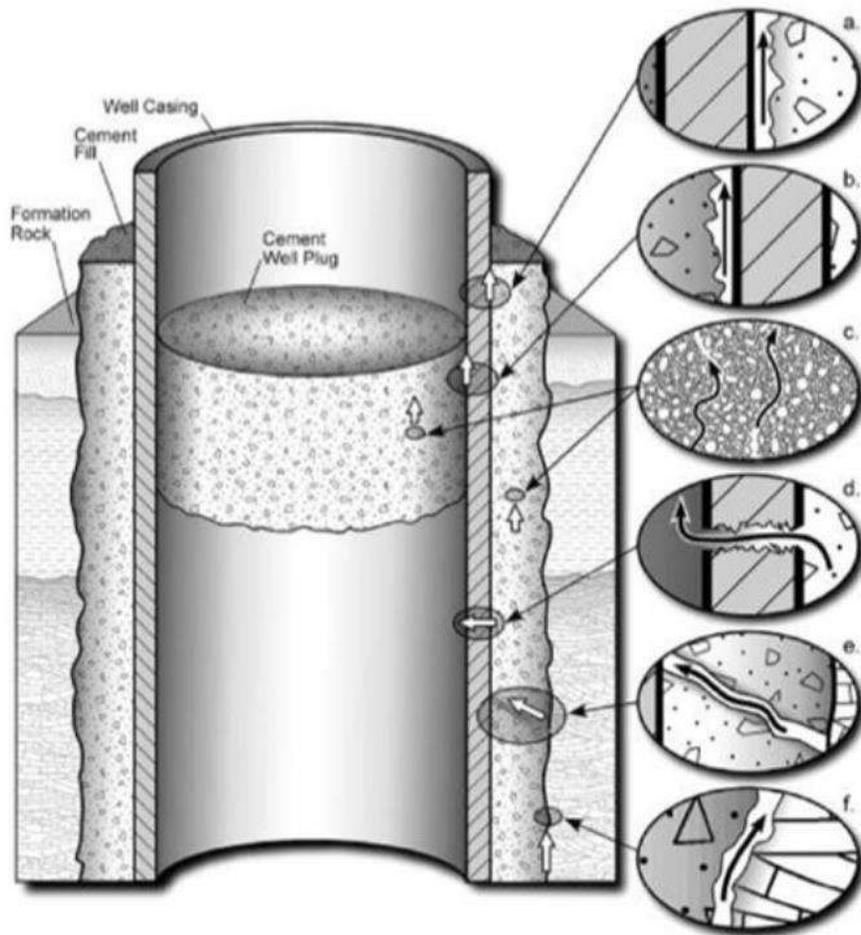
## **2.2 Problemas después de la fractura**

Una vez completada la fractura, le sigue un proceso de purga y venteo para eliminar subproductos indeseables del gas natural recuperado en superficie. Si bien el CO<sub>2</sub> se inyecta en estado súper-crítico, después de la fractura el gas natural producido lo empuja a la superficie llegando no ya en estado súper crítico sino simplemente en su forma gaseosa normal.

Si no se le captura, el CO<sub>2</sub> queda liberado a la atmósfera durante la purga posterior a la fractura contribuyendo de esta manera al efecto invernadero y el consecuente calentamiento global. Sin embargo, capturar el CO<sub>2</sub> en la boca de pozo y separarlo del gas natural producido por el fracking no es una tarea fácil ni barata dado que se requieren altas inversiones en equipamiento especial para separar el CO<sub>2</sub> de los otros gases y luego transportarlo y almacenarlo en forma segura.

Una vez capturado el CO<sub>2</sub> se puede reusar en otra fractura o se puede inyectar bajo tierra según el procedimiento conocido como *Captura y Almacenamiento de Carbono*. La publicación de la *Revista Petroquímica* [53] no menciona que se haya capturado el CO<sub>2</sub> resultante de esa fractura, lo cual implica que San Antonio liberó a la atmósfera las 597 toneladas usadas de CO<sub>2</sub>. Al contribuir a la liberación de gases de efecto invernadero, este experimento contradice los esfuerzos que se hacen a escala mundial para detener el calentamiento global.

Para almacenar el carbono primero hay que perforar un pozo hasta encontrar una formación permeable rodeada por dos formaciones impermeables que impidan escapes del CO<sub>2</sub>. Luego se inyecta el dióxido de carbono llenando las porosidades de las rocas con este gas a gran presión. Como medida de seguridad se instalan válvulas de control en el pozo para prevenir posibles escapes del gas hacia la superficie. Sin embargo, los pozos usados para almacenar el CO<sub>2</sub> tienen las mismas limitaciones que todo otro pozo usado en la industria petrolera, es decir fallas estructurales que impiden una buena aislación de las formaciones geológicas. Estudios independientes demuestran que las cementaciones usadas para aislar las cañerías de entubación desarrollan fallas que permiten el escape del CO<sub>2</sub> o cualquier otro gas que se quiera almacenar [57]. La Figura 2.4 muestra como suceden las fallas que permiten el escape de gases almacenados.



**Figura 2.4** Posibles fallas en el proceso de fractura hidráulica [58]

### 2.3 Planteamiento del Problema

Un grupo de pozos de gas esquisto (shale) deberán de ser completados usando el proceso de fracturación hidráulica (fracking), en el cual las sustancias usadas como fluidos de fractura en el proceso serán el agua y CO<sub>2</sub>; dicho proceso puede ser llevado a cabo simultáneamente por uno o varios equipos de fractura. Además, los requerimientos del agua, el agua de reflujo obtenida y la cantidad de CO<sub>2</sub> inyectado operen bajo cierta incertidumbre. La explotación del gas shale a través de la fractura hidráulica será integrado en un proceso cíclico con una planta de potencia en el cual el gas shale extraído sea utilizado como combustible de la caldera de la planta generadora de electricidad y a su vez ésta producirá el CO<sub>2</sub> y parte del agua que serán inyectados en los pozos para volver a extraer el gas sale. El problema a resolver con ayuda de un software de optimización (GAMS) y la aplicación de un modelo multiobjetivo mixto-entero lineal será integrar todos los procesos mencionados tomando en cuenta los costos de consumo de agua, transportación de agua,

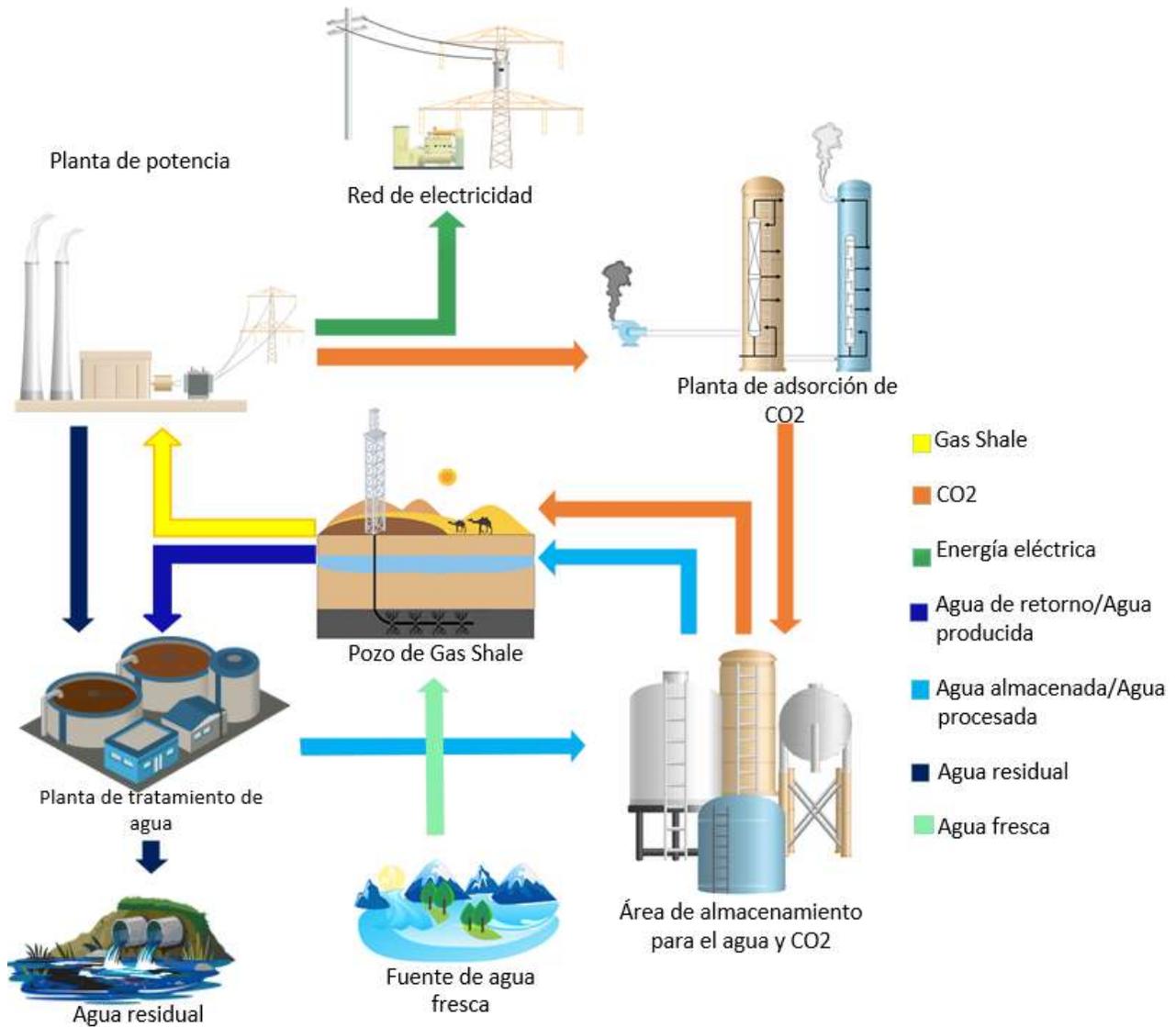
producción de energía y la captación y compresión de CO<sub>2</sub>. Todo con la finalidad de optimizar el nexo agua-energía y reducir el consumo de agua fresca para la fractura, lo cual daría mejor margen en la ganancia y en ahorro de recursos hídricos.

## 2.4 Superestructura

De acuerdo con lo planteado por Corsano [59], la metodología usada para la resolución que contempla en forma esquemática todas las posibles configuraciones de una planta química en un mismo modelo y que es formulada de acuerdo al conocimiento del diseñador, se le denomina "superestructura". En base a esto, el presente proyecto involucra todos los sectores de manera cíclica con el fin optimizar el nexo agua-energía. Como ya se mencionó anteriormente, se pretende hacer el uso del CO<sub>2</sub> producido por la planta potencia para usarse como fluido de fractura. Además, la planta potencia generará agua (gases de combustión) que podrá usarse como fluido de fractura junto con el agua fresca requerida y el agua almacenada proveniente de la planta de tratamiento. Por lo tanto, hay dos principales esquemas que conforman nuestra superestructura: esquema de la planta potencia (involucrando la adsorción y producción del CO<sub>2</sub>) y el esquema de agua para la fractura hidráulica. La **Figura 2.5** presenta el esquema general donde muestra la configuración y conexiones de los sectores involucrados de nuestro proceso cíclico. El enfoque principal de este proyecto es la fracturación hidráulica para la obtención del gas shale. En base a la superestructura propuesta, el fluido de fractura (agua y CO<sub>2</sub>) puede suministrarse de agua fresca, del almacenamiento de agua, así como del CO<sub>2</sub> capturado y llevado a condiciones supercríticas mientras que a la salida de la fractura se obtendrá el gas shale y el agua de retorno. El gas shale se envía a la planta de tratamiento para la producción de energía eléctrica. El CO<sub>2</sub> se envía a la planta de adsorción y el agua producida en la planta potencia y el agua de retorno se mandan a la planta de tratamiento, una vez tratada el agua se dispone a ser almacenada para su reusó al igual que el CO<sub>2</sub>.

Cabe mencionar que el agua de retorno después de los primero diez días no se puede reutilizar ya que es difícil de tratar debido a los contaminantes presentes en ella, por lo tanto, se le da un tratamiento para poder ser desechada como agua residual.

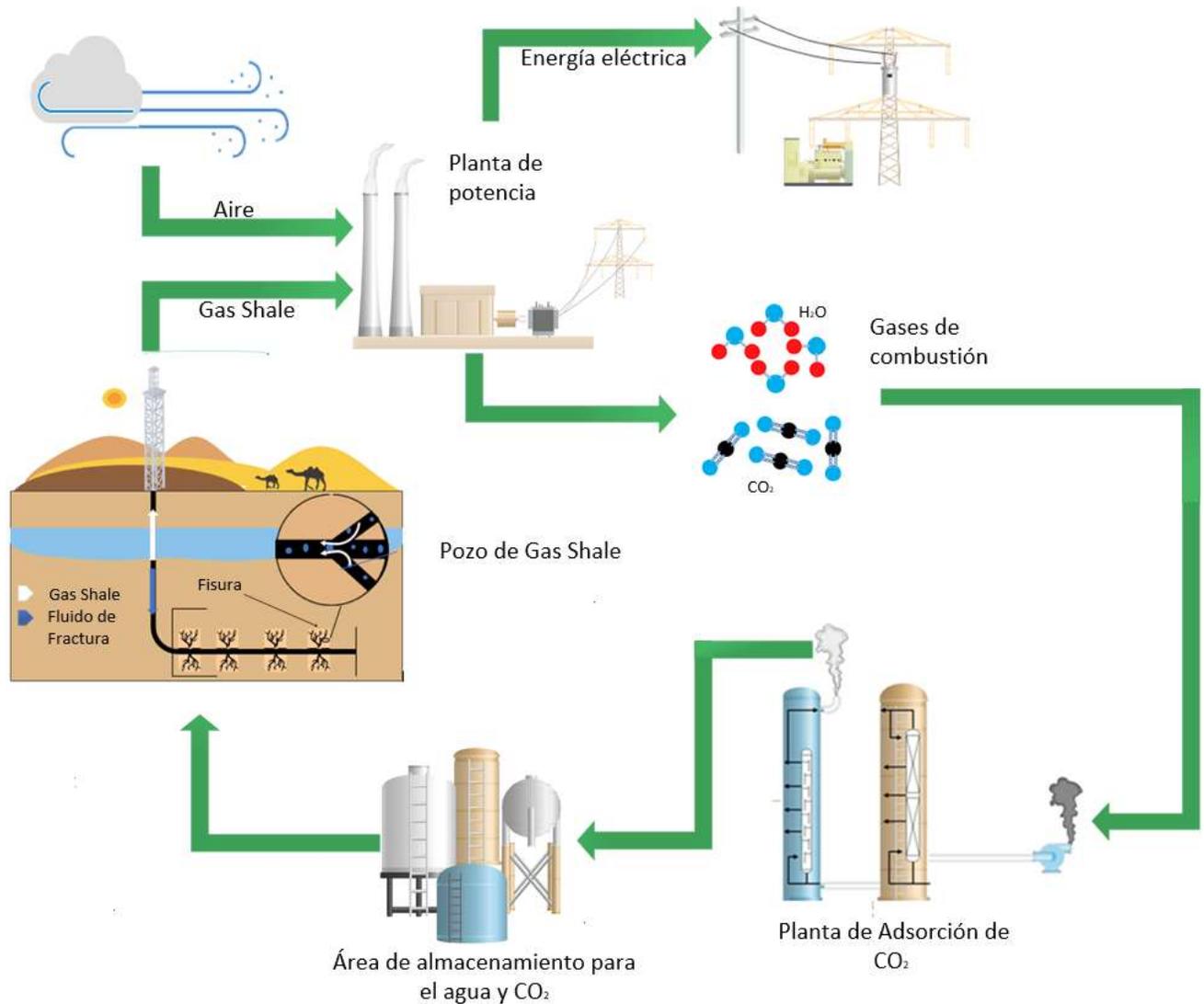
## Superestructura General de Proceso



**Figura 2.5** Superestructura general de proceso para el fracking considerando H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub> como fluido de fractura

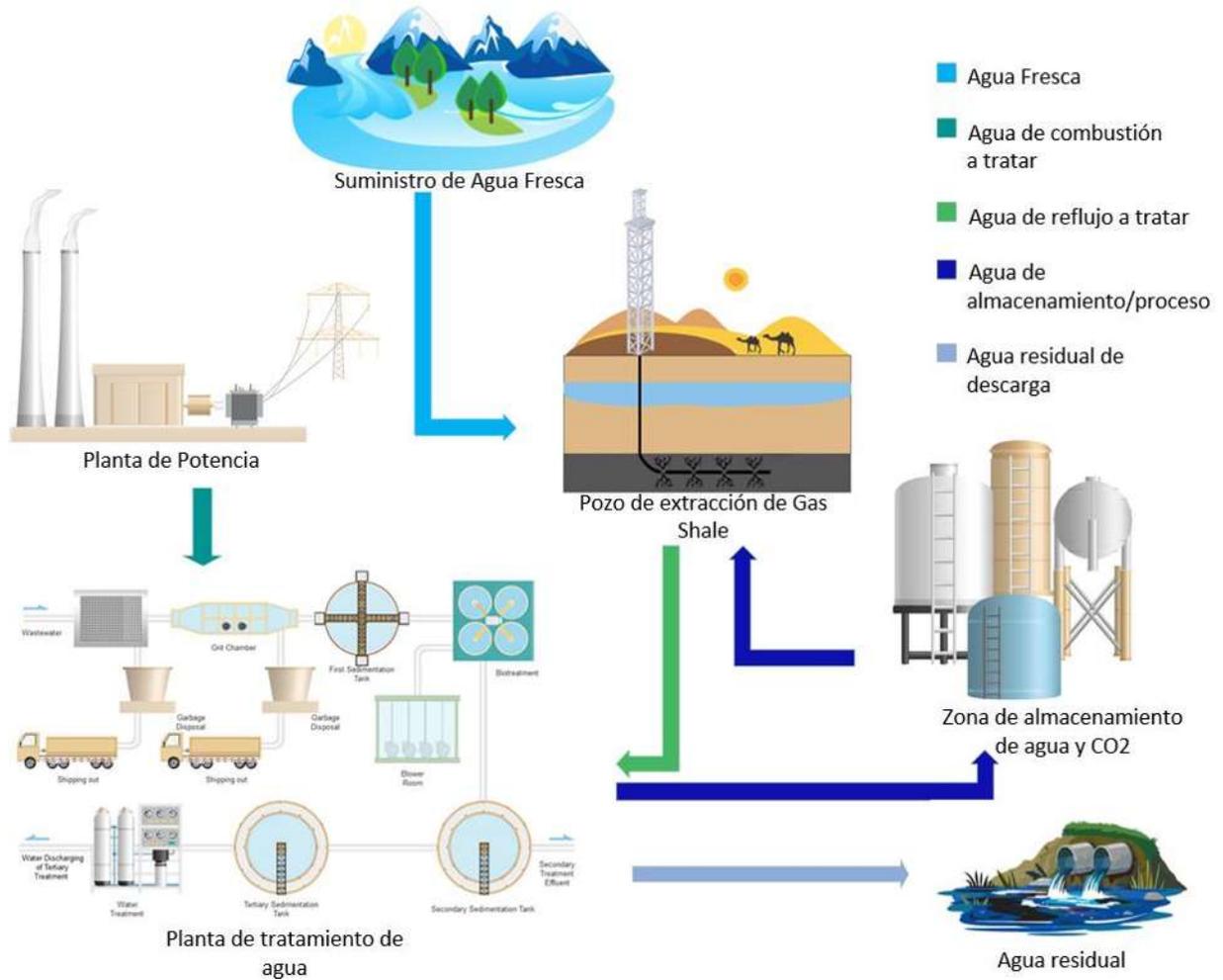
El esquema de la planta potencia está representado por la **Figura 2.6**, aquí se muestra el proceso de combustión del gas shale para la producción de energía eléctrica y las distintas etapas por las que pasa el fluido de fractura (agua y CO<sub>2</sub>). Por último, la **Figura 2.7** muestra el esquema de agua para la fractura hidráulica donde se contempla la configuración de las redes de agua. Cabe mencionar que en la **Figura 2.7** si se observa una ruta de tratamiento y disposición para el agua después de ser inyectada al pozo, en cambio en la **Figura 2.6** esto no existe para el CO<sub>2</sub> ya que es

liberado hacia el medio ambiente y la mezcla de CO<sub>2</sub> y gas shale es tratada por la planta potencia, proceso que no se incluye dentro del modelo matemático (costos de operación, costos de transporte y costos de capital).



**Figura 2.6** Esquema y diagrama de flujo para la obtención de energía eléctrica y gases de combustión

## Esquema de Agua para Fractura Hidráulica

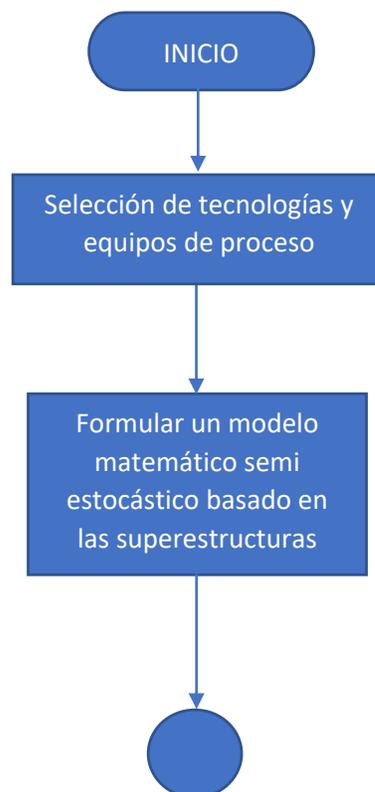


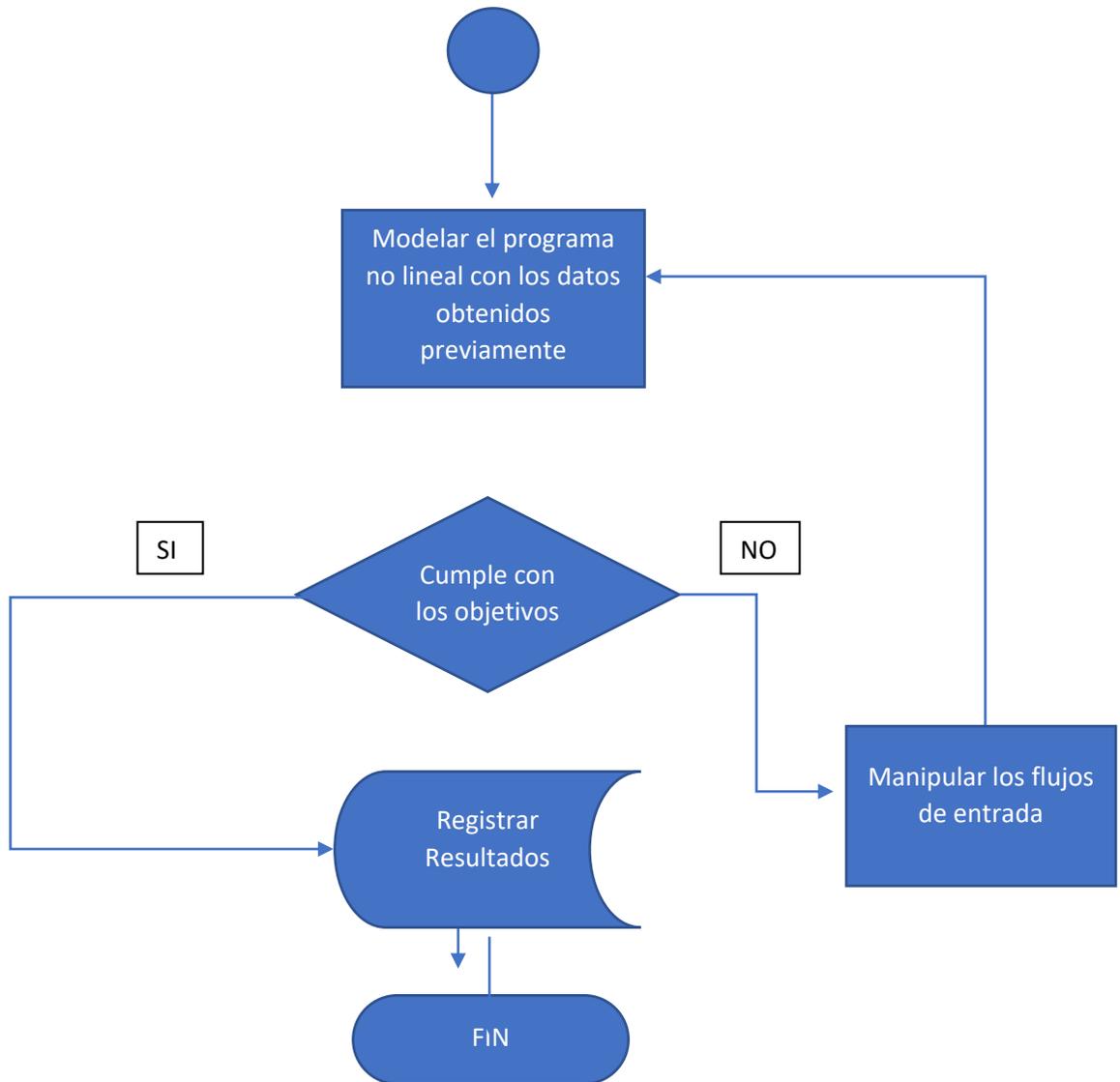
**Figura 2.7** Superestructura del uso de agua para la fractura hidráulica

## Capítulo 3. Formulación del Modelo Matemático sin incertidumbre

### 3.1 Metodología

El presente trabajo se plantea analizar los aspectos relacionados con el análisis del tamaño de los equipos que vienen dados por el cálculo de lo que se necesita producir en cada sector cumpliendo con la capacidad total de la planta, para lo cual se establecen balances de interconexiones entre etapas. Estos requisitos del tamaño del equipo deben ser fijos. Aspecto de vital importancia y que le aporta robustez al estudio, es tratar cada una de las etapas involucradas en el proceso de acuerdo a los modelos que la describen. Dichos modelos pueden ser fenomenológicos con las principales ecuaciones de diseño para el diseño como tal de la etapa y/o apoyados por modelos estadísticos que ayudan a determinar los valores experimentales de cada una de las variables involucradas en el proyecto [60]. En la Figura 3.1 se muestra el diagrama de flujo para llevar a cabo la simulación del modelo matemático.





**Figura 3.1** Diagrama de flujo para la simulación

### 3.2 Modelo Matemático

Para completar todos los procesos especificados en la Superestructura General de Procesos y lograr los objetivos mencionados en este trabajo, la metodología propuesta requiere una programación fija para la fractura hidráulica y extracción de gas sale de los pozos; en este caso, el enfoque considera la programación proyectada para una o varios equipos de fractura hidráulica, los cuales dependiendo si las condiciones son las óptimas, pueden operar simultáneamente en diferentes pozos. Por consiguiente, se pueden determinar los períodos de tiempo para la captación de agua y la producción de CO<sub>2</sub> para realizar la fractura hidráulica tomando como referencia la

finalización de cada fase. Por lo tanto, para un horizonte de tiempo dado se pueden planificar períodos de tiempo en los que se requiera agua y CO<sub>2</sub> para la fractura. En este trabajo, el objetivo es estimar la cantidad de agua y CO<sub>2</sub> necesarios para cada pozo y especificar si existe una relación de alimentación óptima entre el agua y el CO<sub>2</sub>. En consecuencia, es necesario considerar dos caudales que ingresan al pozo incluso si varios equipos de fractura hidráulica están operando simultáneamente. Los caudales se representarán como  $F_w$  y  $F_c$  para el agua y el CO<sub>2</sub>, respectivamente. Los caudales que ingresan al pozo  $n$  en el tiempo  $t$  ( $F_{w_{n,t}}^{well\_in}$  y  $F_{c_{n,t}}^{well\_in}$ ). Asimismo, al final del proceso de fractura, el agua de retorno y el CO<sub>2</sub> saldrán del pozo; por lo que las tasas de retorno del pozo  $n$  durante el período de tiempo  $t$  están representadas por  $F_{w_{n,t}}^{well\_out}$  y  $F_{c_{n,t}}^{well\_out}$ . Es importante mencionar que el agua puede ser tratada y almacenada para ser reutilizada o enviada a disposición final mientras el CO<sub>2</sub> se libera al ambiente (ver Figura 2.5).

Como vemos claramente en la Figura 2.5, todo el proceso se puede especificar como cíclico, por lo que sería muy útil dividirlo en 2 bloques: producción / adsorción de CO<sub>2</sub> y esquema de agua fresca / tratada.

La formulación de optimización propuesta contiene simulaciones y relaciones matemáticas para modelar todos los procesos involucrados en la extracción de gas shale utilizando agua y CO<sub>2</sub> como fluidos de fractura, donde una parte importante de éstas tiene que ver con las limitaciones para la disponibilidad de agua y de CO<sub>2</sub>. Las relaciones necesarias son las siguientes:

### ***Limitaciones de disponibilidad de agua fresca y CO<sub>2</sub>***

Uno de los grandes retos para la industria del gas de shale es la disponibilidad del agua fresca necesaria para completar cada pozo, especialmente en regiones con grandes problemas de escasez de agua. En este sentido, un aporte significativo de este trabajo es que contabiliza el agua y el CO<sub>2</sub> disponibles para ser empleados durante la fase de fracturación hidráulica de cada pozo.

$$F_{w_t}^{fresh} \leq \left( \frac{AvailVw_t^{fresh\_max}}{H^{time}} \right), \quad \forall t \quad (3.1)$$

donde  $F_{w_t}^{fresh}$  representa el consumo de agua fresca durante un periodo de tiempo  $t$ ,  $AvailVw_t^{fresh\_max}$  es la disponibilidad del agua durante el periodo de tiempo  $t$  y  $H^{time}$  es un factor

de conversión del tiempo. De manera similar, la disponibilidad de CO<sub>2</sub> se da de la siguiente manera:

$$F C_t^{used} \leq \left( \frac{AvailVCO_2^{used\_max}}{Htime} \right) \quad \forall t \quad (3.2)$$

### ***Disponibilidad para el Agua generada***

El agua que se genera en la planta potencia se envía a la planta de tratamiento, esta se define como:

$$F W_t^{generated} \leq (AvailVW_t^{generated\_max}) \quad \forall t \quad (3.3)$$

donde  $F W_t^{generated}$  representa la producción de agua durante el período de tiempo  $t$ ,  $AvailVW_t^{generated\_max}$  es la disponibilidad de agua durante el período de tiempo  $t$ .

### ***Segregación de agua fresca, agua generada y CO<sub>2</sub>***

El agua fresca es segregada y enviada a cada pozo  $n$  mientras que el agua generada y el CO<sub>2</sub> son segregados y enviados a las plantas de tratamiento  $i$  y plantas de adsorción  $j$ , para el proceso de terminación.

$$F W_t^{fresh} = \sum_n ffw_{n,t}^{fresh}, \quad \forall t \quad (3.4)$$

$$F C_t^{used} = \sum_j ff c_{j,t}^{used}, \quad \forall t \quad (3.5)$$

$$F W_t^{generated} = \sum_i ffw_{i,t}^{generated}, \quad \forall t \quad (3.6)$$

### ***Abastecimiento de agua y CO<sub>2</sub> a los pozos***

Los requerimientos de agua durante la fase de fractura hidráulica en cada pozo  $n$  ( $F W_{n,t}^{well\_in}$ ) son proporcionados por la fuente de agua fresca ( $ffw_{h,n,t}^{fresh}$ ) más el agua que proviene del sistema de almacenamiento

$$F W_{n,t}^{well\_in} = ffw_{n,t}^{fresh} + \sum_h ffw_{h,n,t}^{storage}, \quad \forall n, \forall t \quad (3.7)$$

De la misma forma, el CO<sub>2</sub> requerido por cada pozo  $n$  ( $FCO_{2,n,t}^{well\_in}$ ) se define como la fuente de CO<sub>2</sub> proveniente del sistema de almacenamiento ( $ffc_{g,n,t}^{storage}$ ).

$$FC_{n,t}^{well\_in} = \sum_g ffc_{g,n,t}^{storage}, \quad \forall n, \forall t \quad (3.8)$$

### ***Agua de Retorno***

Una vez terminada la fase de finalización, se obtiene agua de retorno en cada pozo ( $FW_{n,t}^{well\_out}$ ) que se segrega y se envía a un conjunto de unidades de tratamiento ( $ffw_{n,i,t}^{well}$ )

$$FW_{n,t}^{well\_out} = \sum_i ffw_{n,i,t}^{well}, \quad \forall n, \forall t \quad (3.9)$$

Cabe señalar que toda el agua de retorno es tratada, evitando el almacenamiento o desecho del fluido de fracturación hidráulica sin tratar.

### ***Entrada de agua y CO<sub>2</sub> a unidades de tratamiento y adsorción***

El modelo considera una red de interceptación compuesta por varias unidades de tratamiento típicamente utilizadas para tratar el fluido de fracturación hidráulica. De la misma manera, se pueden encontrar en la literatura artículos científicos con información relevante sobre las unidades de tratamiento utilizadas en los yacimientos de gas de esquisto existentes. Sin embargo, el único requisito a considerar en este modelo para cualquier tecnología de tratamiento es que los efluentes presenten una buena calidad y las condiciones adecuadas para ser reutilizados o desechos, esto evitará la generación de problemas ambientales o inconvenientes técnicos en el proceso. Asimismo, esta metodología incluye unidades de adsorción para la captura del CO<sub>2</sub>, normalmente consideradas para tratar los gases de combustión de las centrales eléctricas y los requisitos considerados para esta tecnología son el estado de la materia (líquido) y la pureza del CO<sub>2</sub> (90%). Por lo tanto, todas las tecnologías probadas eficientemente para tratar el agua de reflujos y capturar CO<sub>2</sub> pueden considerarse incluso si implican diferentes costos y capacidades. Finalmente, el modelo es capaz de seleccionar las tecnologías requeridas (si considera unidades diferentes) y determinar el número de tecnologías de tratamiento/adsorción y tamaño para cada una.

Una vez que se segrega el flujo de agua de reflujos, el balance para el mezclador en la entrada de cada unidad de tratamiento establece que el flujo de entrada para la unidad  $i$  durante el período

$t (Fw_{i,t}^{treat\_in})$  está dado por la suma del flujo de agua separado a la salida de los pozos al mismo tiempo y enviado a la unidad ( $ffw_{n,l,t}^{well}$ ) más el flujo de agua generado en la central ( $ffw_{i,t}^{generated}$ ).

$$Fw_{i,t}^{treat\_in} = \sum_n ffw_{n,i,t}^{well} + \sum_i ffw_{i,t}^{generated}, \quad \forall i, \forall t \quad (3.10)$$

Además, el balance de CO<sub>2</sub> para el mezclador en la entrada de cada unidad de adsorción establece que el flujo de entrada para la unidad  $j$  durante el período  $t (Fc_{j,t}^{treat\_in})$  se define como la suma de CO<sub>2</sub> en la corriente de gas de combustión producida por la central ( $ffc_{j,t}^{used}$ ).

$$Fc_{j,t}^{treat\_in} = \sum_j ffc_{j,t}^{used}, \quad \forall j, \forall t \quad (3.11)$$

### **Salida de agua y CO<sub>2</sub> de las unidades de tratamiento/adsorción**

De acuerdo con la superestructura propuesta hay un divisor a la salida de cada unidad de tratamiento  $i$ , donde el flujo de salida ( $Fw_{i,t}^{treat\_out}$ ) puede enviarse a las unidades de almacenamiento ( $ffw_{i,h,t}^{treat\_sto}$ ) o disposición final ( $ffw_{i,d,t}^{treat\_dis}$ ) durante el período  $t$ :

$$Fw_{i,t}^{treat\_out} = \sum_h ffw_{i,h,t}^{treat\_sto} + \sum_d ffw_{i,d,t}^{treat\_disp}, \quad \forall i, \forall t \quad (3.12)$$

De manera similar, hay una salida de CO<sub>2</sub> en la unidad de adsorción  $j$ , donde el flujo de salida ( $Fc_{j,t}^{treat\_out}$ ) se envía a las unidades de almacenamiento ( $ffc_{j,g,t}^{treat\_sto}$ ).

$$Fc_{j,t}^{treat\_out} = \sum_g ffc_{j,g,t}^{treat\_sto}, \quad \forall j, \forall t \quad (3.13)$$

### **Balance hídrico para la eliminación y descarga de desechos.**

Las corrientes de aguas residuales generadas por el proyecto ( $Fw_{d,t}^{waste}$ ) provienen de la red de interceptación, donde la calidad del agua cumple con la normativa ambiental para los contaminantes:

$$Fw_{d,t}^{waste} = \sum_i ffw_{i,d,t}^{treat\_disp}, \quad \forall d, \forall t \quad (3.14)$$

### **Entrada de agua y CO<sub>2</sub> a unidades de almacenamiento.**

El caudal de agua de almacenamiento ( $FW_{h,t}^{storage\_in}$ ) es alimentado al sistema de almacenamiento por las corrientes residuales tratadas en la red de interceptión, mientras que el caudal de almacenamiento de CO<sub>2</sub> ( $FC_{g,t}^{storage\_in}$ ) es suministrado por el CO<sub>2</sub> adsorbido en la unidad de adsorción, cumpliendo los requisitos de calidad para su reutilización:

$$FW_{h,t}^{storage\_in} = \sum_i ffw_{i,h,t}^{treat\_sto}, \quad \forall h, \forall t \quad (3.15)$$

$$FC_{g,t}^{storage\_in} = \sum_j ffc_{j,g,t}^{treat\_sto}, \quad \forall g, \forall t \quad (3.16)$$

### ***Salida de agua y CO<sub>2</sub> de las unidades de almacenamiento***

Una vez que se almacenan el agua y el CO<sub>2</sub>, los flujos de ( $ffw_{h,n,t}^{storage}$  and  $ffc_{g,n,t}^{storage}$ ) desde las unidades de almacenamiento  $h$  y  $g$ , para agua y CO<sub>2</sub> respectivamente, durante un período  $t$  están representados por:

$$FW_{h,t}^{storage\_out} = \sum_n ffw_{h,n,t}^{storage}, \quad \forall h, \forall t \quad (3.17)$$

$$FC_{g,t}^{storage\_out} = \sum_n ffc_{g,n,t}^{storage}, \quad \forall g, \forall t \quad (3.18)$$

### ***Balances en unidades de tratamiento y adsorción***

La mayoría de las unidades de tratamiento involucran pérdidas de agua durante su operación; mientras que las unidades de adsorción involucran la cantidad de CO<sub>2</sub> que se puede absorber, estos dos aspectos se pueden modelar de la siguiente manera:

$$FW_{i,t}^{treat\_out} = \alpha W_i^{treat} FW_{i,t}^{treat\_in}, \quad \forall i, \forall t \quad (3.19)$$

$$FC_{j,t}^{treat\_out} = \alpha C_j^{treat} FC_{j,t}^{treat\_in}, \quad \forall j, \forall t \quad (3.20)$$

donde  $\alpha W_i^{treat}$  y  $\alpha C_j^{treat}$  representan el factor de eficiencia en términos de flujo volumétrico para la unidad  $i$  y  $j$ , respectivamente.

### ***Balances de agua y CO<sub>2</sub> en unidades de almacenamiento***

El desarrollo típico de una plataforma de pozo implica la fase de terminación donde se lleva a cabo el proceso de fractura hidráulica. Este paso requiere la inyección de grandes cantidades de agua y CO<sub>2</sub> en los pozos como fluido de fractura hidráulica, lo que suele demorar entre 1 y 3 meses. Una vez finalizada esta etapa, una parte importante del total de agua inyectada se obtiene en los pozos como agua de retorno, mientras que el CO<sub>2</sub> se libera al medio ambiente. El agua de reflujos se puede reutilizar en procesos de fractura hidráulica para reducir el consumo de agua fresca; sin embargo, este flujo debe ser tratado y almacenado. Entonces, considerando un cronograma de las fases de terminación de un conjunto de pozos realizadas por varios equipos de fractura hidráulica, la importancia del almacenamiento consiste en ahorrar el agua de reflujos tratada y el CO<sub>2</sub> absorbido para ser utilizados durante los períodos en que se implemente el proceso de fractura; esta agua también representa un recurso de respaldo para períodos con baja disponibilidad de agua fresca.

En este contexto, el balance de acumulación para los pozos de almacenamiento en los momentos que el volumen en el pozo  $s$  en el tiempo  $t$  ( $VW_{h,t}^{storage}$ ) es igual al del final del período de tiempo anterior ( $VW_{h,t-1}^{storage}$ ), más la diferencia de los flujos de entrada y salida multiplicado por el factor de conversión de tiempo:

$$VW_{h,t}^{storage} = VW_h^{storage\_initial} + H^{time} (FW_{h,t}^{storage\_in} - FW_{h,t}^{storage\_out}), \quad \forall h, \forall t=1 \quad (3.21)$$

$$VW_{h,t}^{storage} = VW_{h,t-1}^{storage} + H^{time} (FW_{h,t}^{storage\_in} - FW_{h,t}^{storage\_out}) \quad \forall h, \forall t > 1 \quad (3.22)$$

Cabe señalar que para el primer periodo de tiempo se considera un valor conocido del volumen inicial de la fosa ( $V_h^{storage\_initial}$ ). Adicionalmente, se requiere garantizar la continuidad de los ciclos, por esta razón el volumen inicial es igual al último volumen en el pozo/almacenamiento  $h$ :

$$VW_{sw}^{storage\_initial} = VW_{sw,t}^{storage}, \quad \forall t = t^{final} \quad (3.23)$$

De manera similar, para el CO<sub>2</sub>, el balance de acumulación de los tanques de almacenamiento establece que el volumen en el tanque  $sg$  en el período  $t$  ( $VC_{g,t}^{storage}$ ) es igual al volumen al final del período anterior ( $VC_{g,t-1}^{storage}$ ), más la diferencia de las entradas y salidas multiplicada por el factor de conversión de tiempo:

$$VC_{g,t}^{storage} = VC_g^{storage\_initial} + H^{time} (FC_{g,t}^{storage\_in} - FC_{g,t}^{storage\_out}), \quad \forall g, \forall t=1 \quad (3.24)$$

$$Vc_{g,t}^{storage} = Vc_{g,t-1}^{storage} + H^{time} (Fc_{g,t}^{storage\_in} - Fc_{g,t}^{storage\_out}), \quad \forall g, \forall t > 1 \quad (3.25)$$

Garantizando la continuidad de los ciclos, el volumen inicial es igual al último volumen en el pozo  $g$ :

$$Vc_g^{storage\_initial} = Vc_{g,t}^{storage}, \quad \forall g, \forall t = t^{final} \quad (3.26)$$

### **Capacidad y existencia de unidades de tratamiento y adsorción**

Algunos de los puntos clave que se tienen en cuenta en este modelo de optimización es determinar el número de unidades, tecnologías y disposiciones finales para el tratamiento de agua y adsorción de CO<sub>2</sub>, así como el tamaño de cada una. Adicionalmente, para las unidades de tratamiento y adsorción, las siguientes relaciones seleccionan si las unidades  $i$  y  $j$  son necesarias o no (la existencia de las unidades de tratamiento y adsorción se modela a través de las variables binarias:  $yw_i^{treat}$  and  $yc_j^{treat}$ , por lo tanto, la capacidad operativa para cada unidad de ( $Fw_i^{treat\_cap}$ ) y adsorción ( $Fc_j^{treat\_cap}$ ) se representa de la siguiente manera:

$$Fw_i^{treat\_cap} \geq Fw_{i,t}^{treat\_in}, \quad \forall i, \forall t \quad (3.27)$$

$$Fw_i^{treat\_cap} \leq Fw_i^{treat\_max} yw_i^{treat}, \quad \forall i \quad (3.28)$$

$$Fc_j^{treat\_cap} \geq Fc_{j,t}^{treat\_in}, \quad \forall j, \forall t \quad (3.29)$$

$$Fc_j^{treat\_cap} \leq Fc_j^{treat\_max} yc_j^{treat}, \quad \forall j \quad (3.30)$$

Donde  $Fw_i^{treat\_max}$  y  $Fc_j^{treat\_max}$  representan un límite superior para la capacidad operativa asociada con las unidades  $i$  y  $j$ .

### **Capacidad y existencia de unidades de almacenamiento**

De manera similar, para las unidades de almacenamiento/fosas, se necesitan las siguientes relaciones:

$$Vw_h^{storage\_cap} \geq Vw_{h,t}^{storage}, \quad \forall h, \forall t \quad (3.31)$$

$$Vw_h^{storage\_cap} \leq Vw_h^{storage\_max} yw_h^{storage}, \quad \forall h \quad (3.32)$$

$$Vc_g^{storage\_cap} \geq Vc_{g,t}^{storage}, \quad \forall g, \forall t \quad (3.33)$$

$$Vc_g^{storage\_cap} \leq Vc_g^{storage\_max} y_c^{storage}, \quad \forall g \quad (3.34)$$

Donde  $VW_h^{storage\_cap}$  y  $Vc_g^{storage\_cap}$  denotan la capacidad optima de las unidades de almacenamiento  $h$  and  $g$ . Por otro lado,  $VW_h^{storage\_max}$  y  $Vc_g^{storage\_max}$  representan las capacidades máximas de las unidades de almacenamiento/fosas  $h$  y  $g$ . Las variables binarias  $y_c^{storage}$  y  $yW_h^{storage}$  son usadas para modelar la existencia de las unidades de almacenamiento/fosas.

### **Capacidad y existencia de enajenaciones**

Finalmente, los deshechos finales acumulan todo el caudal vertido sobre ellas durante todo el horizonte temporal dado. De esta forma, la capacidad operativa para la disposición d ( $V_d^{waste\_cap}$ ) se determina de la siguiente manera:

$$VW_d^{waste\_cap} = H^{time} \sum_t Fw_{d,t}^{waste}, \quad \forall d \quad (3.35)$$

$$VW_d^{waste\_cap} \leq VW_d^{waste\_max} y_d^{waste}, \quad \forall d \quad (3.36)$$

Donde  $VW_d^{waste\_max}$  es la capacidad máxima para cada deshecho y la existencia de cada disposición se modela a través de la variable binaria  $yW_d^{waste}$ . De esta forma, se puede determinar el número de tecnologías de tratamiento, almacenamientos/fosas y eliminaciones de forma óptima, así como sus capacidades.

### **Agua total utilizada**

Aunque se pueden superar las limitaciones de agua, es importante cuantificar el agua total requerida para completar todos los pozos propuestos. Por lo tanto, la siguiente relación determina las necesidades totales de agua (TWR):

$$TWR = H^{time} \left( \sum_t Fw_t^{fresh} \right) \quad (3.37)$$

### **Total de CO<sub>2</sub> usado**

Es importante cuantificar el CO<sub>2</sub> total requerido para completar todos los pozos propuestos. Por lo tanto, la siguiente relación determina los requisitos totales de CO<sub>2</sub> (TCR):

$$TCR = H^{time} \sum_t Fc_t^{used} \quad (3.38)$$

Considerando las preocupaciones hídricas actuales es importante conocer los requerimientos totales de agua de la industria del gas shale para explotar un cierto número de pozos debido a que desde el punto de vista ambiental, la minimización del agua utilizada tiene una mayor relevancia que los aspectos económicos. En este caso, la mejor solución económica suele corresponder al consumo mínimo de agua fresca; sin embargo, para algunos casos donde los costos de almacenamiento son significativamente mayores que los costos asociados al agua fresca y disposición final, es posible que los objetivos ambientales y económicos se contradigan, y como consecuencia, las curvas de Pareto pueden ser muy útiles para mostrar soluciones que compensen los objetivos contradictorios

### ***Costos de operación***

Los costos operativos considerados en este proyecto corresponden al costo del agua fresca, los costos operativos de las unidades de tratamiento y los costos de transporte (incluyendo todas las trayectorias), los cuales se describen en detalle a continuación.

### ***Costo del agua fresca***

El costo del agua fresca ( $Costw^{fresh}$ ) se obtiene multiplicando la suma del agua requerida durante todos los períodos por el costo unitario del agua fresca ( $UCw^{fresh}$ ) y el factor de conversión de tiempo

$$Costw^{fresh} = H^{time} UCw^{fresh} \sum_t Fw_t^{fresh} \quad (3.39)$$

El costo del CO<sub>2</sub> se calcula de la misma manera que el agua fresca usando el costo unitario asociado con el CO<sub>2</sub> ( $UCc^{used}$ ):

$$Costc^{used} = H^{time} UCc^{used} \sum_t Fc_t^{used} \quad (3.40)$$

### ***Costos operativos de las unidades de tratamiento y de adsorción***

Los costos operativos de tratamiento y adsorción se determinan de la siguiente manera:

$$Costw^{op\_treat} = H^{time} \sum_i \sum_t UOCw_i^{treat} Fw_{i,t}^{treat\_in} \quad (3.41)$$

$$Costc^{op\_treat} = H^{time} \sum_j \sum_t UOCc_j^{treat} Fc_{j,t}^{treat\_in} \quad (3.42)$$

Donde  $UOCw_i^{treat}$  es el costo operativo unitario para la unidad de tratamiento  $i$  y  $UOCc_j^{treat}$  es el costo operativo unitario para la unidad de adsorción  $j$ .

### **Costos de transporte del agua fresca y CO<sub>2</sub>**

El costo de transporte de agua fresca ( $Costw^{trans\_fresh}$ ) se puede calcular multiplicando las tasas de flujo de agua fresca enviada al pozo  $n$  en el período  $t$  por el costo unitario de transporte ( $UTCw_n^{fresh}$ ):

$$Costw^{trans\_fresh} = H^{time} \sum_n \sum_t UTCw_n^{fresh} ffw_{n,t}^{fresh} \quad (3.43)$$

Por otro lado, el costo de transporte de CO<sub>2</sub> se calcula multiplicando los caudales de CO<sub>2</sub> enviados al pozo  $n$  desde el tanque de almacenamiento  $g$  en el período  $t$  por el costo unitario de transporte:

$$Costc^{trans\_sto} = H^{time} \sum_g \sum_n \sum_t UTCc_n^{sto} ffc_{g,n,t}^{storage} \quad (3.44)$$

Cabe señalar que los costos unitarios son diferentes para cada pozo considerando la distancia geográfica entre agua fresca, CO<sub>2</sub> y cada pozo. Es importante mencionar que, para algunos campos de gas de shale existentes, el recurso de agua fresca está disponible a distancias significativas de los pozos; por lo tanto, en casos como el de la región de gas de shale de Marcellus, el costo del transporte de agua fresca es varias veces mayor que el costo del agua fresca [26].

### **Costo de transporte del agua de retorno**

El agua de reflujó obtenida de los pozos es transportada a la red de interceptación y el costo asociado a esta operación se considera a través de la siguiente expresión:

$$Costw^{trans\_fb} = H^{time} \sum_n \sum_i \sum_t UTCw_{n,i}^{used} ffw_{n,i,t}^{well} \quad (3.45)$$

Donde  $UTCw_{n,i}^{used}$  es el costo unitario de transporte del agua de retorno en la ruta seleccionada para el pozo  $n$  y el tratamiento  $i$ . Aquí, el costo unitario puede cambiar para cada ruta.

### ***Costo de transporte del agua tratada a disposición final***

El caudal que sale del tratamiento puede ser enviado a disposición y los costos de transporte que se generan son los siguientes:

$$C Costw^{trans\_treat\_disp} = H^{time} \sum_i \sum_d \sum_t UTCw_{i,d}^{treat\_disp} ffw_{i,d,t}^{treat\_disp} \quad (3.46)$$

Donde  $UTCw_{i,d}^{treat\_disp}$  es el costo unitario de transporte para el agua tratada proveniente del tratamiento  $i$  hacia la disposición o deshecho  $d$ .

### ***Costo de transporte de agua tratada/CO<sub>2</sub> adsorbido al almacenamiento***

El agua tratada y CO<sub>2</sub> adsorbido pueden ser enviados al sistema de almacenamiento con los siguientes costos:

$$Costw^{trans\_treat\_sto} = H^{time} \sum_i \sum_h \sum_t UTCw_{i,h}^{treat\_sto} ffw_{i,h,t}^{treat\_sto} \quad (3.47)$$

$$Costc^{trans\_treat\_sto} = H^{time} \sum_j \sum_g \sum_t UTCC_{j,g}^{treat\_sto} ffc_{j,g,t}^{treat\_sto} \quad (3.48)$$

Donde  $UTCw_{i,h}^{treat\_sto}$  representa el costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento  $i$  hasta los pozos de almacenamiento  $h$ , mientras que  $UTCCO_{2,j,g}^{treat\_sto}$  representa el costo unitario de transporte del CO<sub>2</sub> adsorbido desde el tratamiento  $j$  hasta los tanques de almacenamiento  $g$ .

### ***Costo de transporte del agua reutilizada a los pozos***

El agua almacenada en los tanques/almacenamiento se transporta a los pozos para su reutilización y el costo asociado se contabiliza en la siguiente relación:

$$Costw^{trans\_sto\_well} = H^{time} \sum_h \sum_n \sum_t UTCw_{h,n}^{sto\_well} ffw_{h,n,t}^{storage} \quad (3.49)$$

Donde  $UTCw_{h,n}^{sto\_well}$  es el costo unitario de transporte del agua reutilizada desde el área almacenamiento  $h$  hasta el pozo  $n$ .

### ***Costo de transporte del agua generada a la unidad de tratamiento***

El caudal de agua que sale de la planta de energía puede ser enviado a la unidad de tratamiento y los costos de transporte generados son los siguientes:

$$\text{Costw}^{\text{trans\_pp\_treat}} = H^{\text{time}} \sum_i \sum_t \text{UTCw}_i^{\text{generated\_treat}} \text{ffw}_{i,t}^{\text{generated}} \quad (3.50)$$

Donde  $\text{UTCw}_i^{\text{generated\_treat}}$  es el costo unitario de transporte del agua generada por la planta de energía que se envía a la unidad de tratamiento  $i$ .

### **Costo de transporte del CO<sub>2</sub> usado a la unidad de adsorción**

Similarmente, el costo unitario de transporte de CO<sub>2</sub> se calcula de la siguiente manera:

$$\text{Costc}^{\text{trans\_pp\_treat}} = H^{\text{time}} \sum_j \sum_t \text{UTCc}_j^{\text{used\_treat}} \text{ffc}_{j,t}^{\text{used}} \quad (3.51)$$

Donde  $\text{UTCc}_j^{\text{used\_treat}}$  es el costo unitario de transporte del CO<sub>2</sub> producido por la planta de energía que se envía a la unidad de tratamiento  $j$ .

### **Abastecimiento total a pozos**

El fluido de fractura requerido (CO<sub>2</sub> y agua) se puede calcular por la suma del agua más el CO<sub>2</sub> que se inyectará en los pozos  $n$  durante un período  $t$ .

$$\text{FT}_{n,t}^{\text{well\_in}} = \text{FW}_{n,t}^{\text{well\_in}} + \text{FC}_{n,t}^{\text{well\_in}}, \quad \forall n, \forall t \quad (3.52)$$

### **Costo operativo total**

Finalmente, la suma de todos los costos operativos descritos anteriormente produce el costo operativo total (TOC) del proyecto:

$$\begin{aligned} \text{TOC} = & \text{Costw}^{\text{fresh}} + \text{Costw}^{\text{op\_treat}} + \text{Costw}^{\text{trans\_fresh}} + \text{Costw}^{\text{trans\_fb}} + \text{Costw}^{\text{trans\_treat\_disp}} \\ & + \text{Costw}^{\text{trans\_treat\_sto}} + \text{Costw}^{\text{trans\_sto\_well}} + \text{Costw}^{\text{trans\_pp\_treat}} + \text{Costc}^{\text{used}} + \text{Costc}^{\text{op\_treat}} \\ & + \text{Costc}^{\text{trans\_sto}} + \text{Costc}^{\text{trans\_treat\_sto}} + \text{Costc}^{\text{trans\_pp\_treat}} \end{aligned} \quad (3.53)$$

### **Costos de capital**

La adquisición de unidades de tratamiento, unidades de adsorción, unidades de almacenamiento, así como la creación de disposición final genera costos de capital, los cuales se incluyen económicamente en la función objetivo.

### **Costo de capital para unidades de tratamiento de agua y unidades de adsorción de CO<sub>2</sub>**

El costo de capital para las unidades de tratamiento de agua involucra un cargo fijo ( $FCW^{treat}$ ) y un cargo variable ( $VCW^{treat}$ ) que depende del caudal tratado, el costo se define de la siguiente manera:

$$CapCostw^{treatment} = k_F w \sum_i \left[ FCW^{treat} yw_i^{treat} + VCW^{treat} (FW_i^{treat\_cap})^{\beta w^{treat}} \right] \quad (3.54)$$

Donde  $k_{Fw}$  es un factor utilizado para anualizar la inversión, mientras que  $\beta w^{treat}$  representa el exponente asociado a las economías de escala para las unidades de tratamiento.

Por otro lado, el costo de capital para el CO<sub>2</sub> se calcula de la misma manera que el agua:

$$CapCostc^{treatment} = k_F c \sum_j \left[ FCC^{treat} yc_j^{treat} + VCC^{treat} (FC_j^{treat\_cap})^{\beta c^{treat}} \right] \quad (3.55)$$

### **Costo de capital para almacenamiento de agua, almacenamiento de CO<sub>2</sub> y unidades de eliminación**

De igual forma para las unidades de almacenamiento y deshechos:

$$CapCostw^{storage} = k_F w \sum_h \left[ FCW^{storage} yw_h^{storage} + VCW^{storage} (VW_h^{storage\_cap})^{\beta w^{storage}} \right] \quad (3.56)$$

$$CapCostw^{waste} = k_F w \sum_d \left[ FCW^{waste} yw_d^{waste} + VCW^{waste} (VW_d^{waste\_cap})^{\beta w^{waste}} \right] \quad (3.57)$$

$$CapCostc^{storage} = k_F c \sum_g \left[ FCC^{storage} yCO_{2g}^{storage} + VCC^{storage} (VC_g^{storage\_cap})^{\beta c^{storage}} \right] \quad (3.58)$$

Vale la pena mencionar que los términos  $[\beta w^{treat}, \beta w^{storage}, \beta w^{waste}, \beta c^{treat}$  y  $\beta c^{storage}$  representan los únicos términos no lineales incluidos en todo el modelo matemático propuesto.

### **Costo total de capital**

El costo de capital total (TCC) está compuesto por todos los costos de capital mencionados anteriormente (unidades de tratamiento, unidades de adsorción, unidades de almacenamiento y disposición).

$$TCC = CapCostw^{treatment} + CapCostc^{treatment} + CapCostw^{storage} + CapCostw^{waste} + CapCostc^{storage} \quad (3.59)$$

### **Costo total anual**

Finalmente, el costo total anual (TAC) está constituido por la suma del costo total de operación y el costo total de capital:

$$TAC = TOC + TCC \quad (3.60)$$

### **3.3. Resultados y Discusiones**

El modelo matemático propuesto corresponde a un programa de programación no lineal de enteros mixtos (MINLP), el cual fue resuelto a través del software General Algebraic Modeling System (GAMS). El modelo consta de 16 variables binarias, 15.291 variables continuas y 7.684 restricciones. Además, se implementaron solucionadores DICOPT, CONOPT y CPLEX dentro de GAMS [61].

#### **Ejemplo 1. Gas Shale en la zona Noroeste de México y sus generalidades**

Hoy en día la producción de gas de shale ha crecido significativamente en todo el mundo, por ejemplo, Estados Unidos es el productor de gas natural número uno en el mundo con Marcellus (ubicado principalmente en Pensilvania) y Barnett (ubicado en Texas) como las mayores reservas de gas de shale. De esta forma, la mayor parte de la información utilizada para implementar el modelo propuesto en este trabajo se tomó de informes técnicos con datos actualizados para las regiones de Marcellus y Barnett. El recurso estimado de gas shale técnicamente recuperable de México (545 Tcf) es el sexto más grande del mundo. Además, gran parte del recurso de gas shale de México se encuentra en la cuenca de Burgos [62], la cual se encuentra junto a la cuenca de Eagle Ford Shale ubicado en el sur de Texas, que es un yacimiento maduro de gas y petróleo de esquisto en los Estados Unidos [63]. Sin embargo, es importante mencionar que la ubicación geográfica elegida para este trabajo fue la región noroeste de México. En lo que respecta a este trabajo, uno de los principales objetivos es la gestión del agua, donde se optimiza en periodos de una semana con un horizonte temporal de 52 semanas (un año) y la terminación de cada pozo demora 5 semanas. La primera ciudad propuesta en esta propuesta corresponde a Reynosa, Tamaulipas, la cual es una ciudad fronteriza en la parte norte del estado de Tamaulipas y está ubicada en el margen sur del Río Grande teniendo uno de los acuíferos más grandes ubicados en

esta región. El acuífero se encuentra dentro de la Región Hidrológica N° 24 Río Bravo. Comprende la parte norte del Estado de Tamaulipas y una pequeña parte del Estado de Nuevo León cubriendo un área aproximada de 17,500 km<sup>2</sup>. El otro caso para analizar es Ojinaga, Chihuahua es una ciudad fronteriza rural en el noroeste estado mexicano de Chihuahua. Ojinaga está situada donde el Río Conchos desemboca en el Río Grande (conocido como Río Bravo en México), un área llamada La Junta de los Ríos. Además, el acuífero Álamo Chapo se ubica en la porción nororiental del estado de Chihuahua y cubre un área de 4,883.5 km<sup>2</sup>. En esta región el clima es mayoritariamente muy seco semicálido, el clima seco tiene importancia por su influencia y extensión, con una precipitación media anual de 316 mm. En este contexto, la Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) indica que para el acuífero de Álamo Chapo existe una disponibilidad media anual de agua subterránea que se calcula en millones de m<sup>3</sup> por año para otorgar nuevas concesiones, sin embargo, el uso de esta agua podría interferir con actividades esenciales para la sociedad y también podría afectar el ecosistema [64, 65]. Sin embargo, esta agua está disponible solo si se extrae del subsuelo, la disponibilidad de agua fresca superficial puede verse limitada debido a las sequías estacionales de las ubicaciones geográficas designadas. El Servicio Meteorológico Nacional (SMN) es el organismo oficial del gobierno mexicano encargado de brindar información meteorológica (tiempo) y climatológica. Uno de los fenómenos climáticos que más afecta las actividades económicas del país es la sequía, el SMN se encarga de detectar el estado actual y evolución de este fenómeno, su metodología se basa en la obtención e interpretación de diversos índices o indicadores de sequía como el Índice de Precipitación Estandarizada (SPI por sus siglas en inglés) que cuantifica las condiciones de déficit o exceso de precipitación (30, 90, 180, 365 días), anomalía de lluvia en por ciento de lo normal (30, 90, 180, 365 días), Índice Satelital de Salud de la Vegetación (VHI) que mide el grado de estrés de la vegetación a través de la radiación observada, el modelo de humedad del suelo del cubo con fugas de CPC-NOAA que estima la humedad del suelo utilizando un modelo hidrológico de una capa, el índice de diferencia de vegetación normalizada (NDVI), la anomalía de temperatura promedio, el porcentaje de disponibilidad de agua en las represas del país y el aporte de expertos locales. Estos índices se muestran en capas a través de un Sistema de Información Geográfica (SIG) y por consenso se determinan las regiones afectadas por la sequía, según la escala de intensidad que es común en los tres países, que van desde anormalmente seco (D0), sequía moderada (D1), sequía severa (D2), sequía extrema (D3) a sequía excepcional (D4). Como resultado del consenso, se dibujan

polígonos para cada intensidad de sequía, generando archivos shapefile. Cuando los polígonos corresponden al análisis de mitad de mes (emitido el día 15 de cada mes) se utilizan para cuantificar la sequía sobre el territorio nacional y cuando corresponden a la evaluación final de algún mes, también complementan el mapa regional o continental. del NADM. La Tabla 1 muestra las sequías estacionales en las localidades de Reynosa, Tamaulipas y Ojinaga, Chihuahua [66].

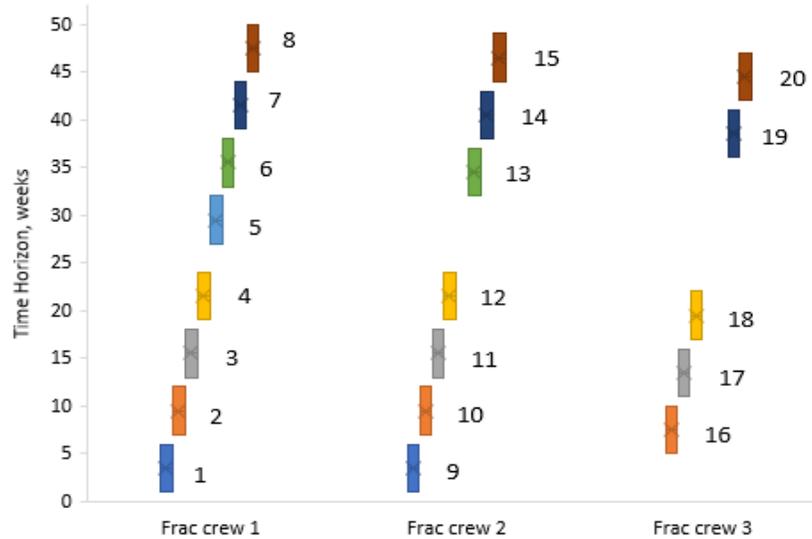
**Tabla 3.1** Resultados del monitor de sequía a nivel municipal para Reynosa, TAM y Ojinaga, CHH.

Ciudad	Edo.	Cuen.	2020												2021													
			Ene		Feb		Mar		Abr		May		Jun		Jul		Ago		Sep		Oct		Nov		Dec		Ene	
			15	31	15	28	15	31	15	30	15	31	15	30	15	31	15	31	15	30	15	31	15	30	15	31	15	31
Reynosa	TAM	Rio	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D	D
		Bravo	0	1	2	2	2	3	2	2	2												D1	D1	D	D	D	D
Ojinaga	CHH	Rio		D		D																						
		Bravo		0		0																						
D0: Anormalmente seco			D1: Sequia moderada				D2: Sequia severa				D3: Sequia extrema				D4: Sequia excepcional													

Por otro lado, Hayes [67] reportó que la cantidad de agua requerida para realizar la fractura hidráulica está en un rango de 11,335-15,114 m<sup>3</sup>. Slutz et al. [68] consideró un rango de 12.700 a 19.000 m<sup>3</sup>, mientras que Shaffer [69] estimó entre 8.000 y 27.000 m<sup>3</sup> para cada pozo en la región de esquisto de Marcellus. Como se mencionó anteriormente, este trabajo da cuenta de la inyección de CO<sub>2</sub> como una alternativa al fluido de fractura. En 2014, Middleton y col. [54] presentó un estudio utilizando CO<sub>2</sub> supercrítico como fluido de trabajo de reemplazo, donde el CO<sub>2</sub> supercrítico tiene muchos beneficios e inconvenientes potenciales en comparación con el agua como fluido de fractura. En este contexto, el valor promedio utilizado en este trabajo para el fluido de fractura (CO<sub>2</sub> -agua) requerido en la terminación de cada pozo es de 15.000 m<sup>3</sup>. Hayes [67] también informó que aproximadamente el 25 % del agua inyectada durante la fracturación hidráulica se recolecta durante varios días después de la fractura hidráulica. Por lo tanto, se estableció que el caudal del fluido de fractura en cada pozo es de 428,57 m<sup>3</sup>/d, pero todos los escenarios contabilizaron diferentes porcentajes para la alimentación. Por ejemplo, el primer porcentaje de alimentación fue 0-100% de CO<sub>2</sub> y agua, respectivamente y dicho porcentaje de este fue aumentando cada 10% para CO<sub>2</sub> mientras que para el agua disminuyó un 10% en cada caso hasta llegar a 0% agua y 100% CO<sub>2</sub>. El agua de reflujo recuperada después de cada fase tuvo un valor del 25% del agua inyectada al pozo; 80%, 35% y 10% solo durante las tres primeras semanas, respectivamente.

En este sentido, se considera que las semanas que no tienen sequía son las que tienen máxima disponibilidad de agua fresca (428,57 m<sup>3</sup>/d por cada pozo). Adicionalmente, las semanas que presentan una sequía anormal solo tienen el 80% de la disponibilidad máxima de agua fresca. De igual manera, las semanas con sequía moderada, sequía severa, sequía extrema y sequía excepcional tienen 60%, 40%, 20% y 0% de disponibilidad máxima de agua fresca, respectivamente.

Además, de acuerdo con la programación que se muestra en la **Figura 3.2**, tres equipos de fractura hidráulica deben completar tres conjuntos de pozos (20 pozos en total). Cabe señalar que el rendimiento de la programación no depende de la disponibilidad de agua fresca ya que si el agua fresca se escasea, el CO<sub>2</sub> y el agua generados por la planta de energía reemplazarán el agua fresca.



**Figura 3.2** Programación de la fase de terminación en cada pozo.

Además, este ejemplo emplea unidades de almacenamiento, unidades de eliminación y unidades de tratamiento/adsorción que se utilizan típicamente en campos de gas shale. La **Tabla 3.2** contiene algunos datos relacionados con las unidades de tratamiento y almacenamiento y disposición. Dado que las unidades de tratamiento y adsorción están diseñadas para asegurar una calidad requerida para la corriente de salida para su reutilización o eliminación, se utilizan pozos y tanques para almacenar agua y CO<sub>2</sub> respectivamente [70].

**Tabla 3.2** Información para unidades de almacenamiento, disposición y tratamiento/adsorción.

Concepto/Caso	Agua			CO <sub>2</sub>	
	Tratamiento	almacenamiento	Disposición	Tratamiento	almacenamiento
Costo fijo, \$	95,000	10,000	52,000	0	10,000
Costo variable, \$/m <sup>3</sup>	4.1	6.3	13.5	0	6.3
Capacidad máxima, m <sup>3</sup> /d o m <sup>3</sup>	3,200	12,000	20,000	3,200	12,000
Exponentes para economías de escala	0.65	0.72	0.9	0.65	0.72

Como se muestra en la **Figura 3.2**, el primer subconjunto de pozos *n1* corresponde a los pozos 1-8 (operados por la cuadrilla de fracturación hidráulica 1); mientras que los subconjuntos *n2* y *n3* son los pozos 9-15 (relacionados con la cuadrilla 2) y 16-20 (asociados a la cuadrilla 3), respectivamente. Así, el costo por unidad de agua fresca es de 3.23 \$/m<sup>3</sup> y 4.65 \$/m<sup>3</sup> para Reynosa

y Ojinaga respectivamente [71, 72]. En este contexto, los costos unitarios de transporte están asociados al suministro de agua fresca a los pozos. Además, existen otros costos de transporte contabilizados en este modelo, por ejemplo, costos de transporte desde los pozos ( $n1$ ,  $n2$  y  $n3$ ) hasta la red de intercepción, costo de los segmentos desde las unidades de tratamiento/adsorción y, finalmente, costos unitarios de transporte desde el almacenamiento hacia los pozos. Estos costos mencionados se muestran en la **Tabla 3.3**. Cabe mencionar que los costos relacionados con el CO<sub>2</sub> en cuanto al transporte desde el almacenamiento hasta los pozos son los mismos que los del agua debido a que el CO<sub>2</sub> supercrítico se comporta como un fluido de baja viscosidad con una densidad similar al agua [22].

**Tabla 3.3** Costos unitarios de transporte asociados con el agua y CO<sub>2</sub>.

Costo de transportación	Agua			CO <sub>2</sub>		
	$n1$	$n2$	$n3$	$n1$	$n2$	$n3$
Suministro de agua fresca/ gases de combustión para unidad adsorción $\$/m^3$	4	7	12	-	-	-
Almacenamiento a pozos $\$/m^3$	0.98	1.23	1.65	0.98	1.23	1.65
Pozos a red de intercepción, $\$/m^3$	0.39	0.72	0.94	-	-	-
tratamiento/unidad adsorción a almacenamiento, $\$/m^3$		1.41			1.41	
tratamiento/unidad adsorción a disposición $\$/m^3$		8.3			0	

El costo de transporte del agua generada por la central eléctrica se considera cero debido a que se prevé que las plantas de adsorción de CO<sub>2</sub> y de tratamiento de agua estén cerca de la central. Por otro lado, existen costos asociados a la tecnología de tratamiento de agua y captura de CO<sub>2</sub> (planta de adsorción). El costo operativo unitario para la tecnología de tratamiento de agua es de 12,50  $\$/m^3$  mientras que para la captura de CO<sub>2</sub> es en promedio de 61,92  $\$/m^3$ . Es de destacar que los costos fijos y variables son iguales a cero porque ambos están incluidos dentro del costo operativo total [73,74].

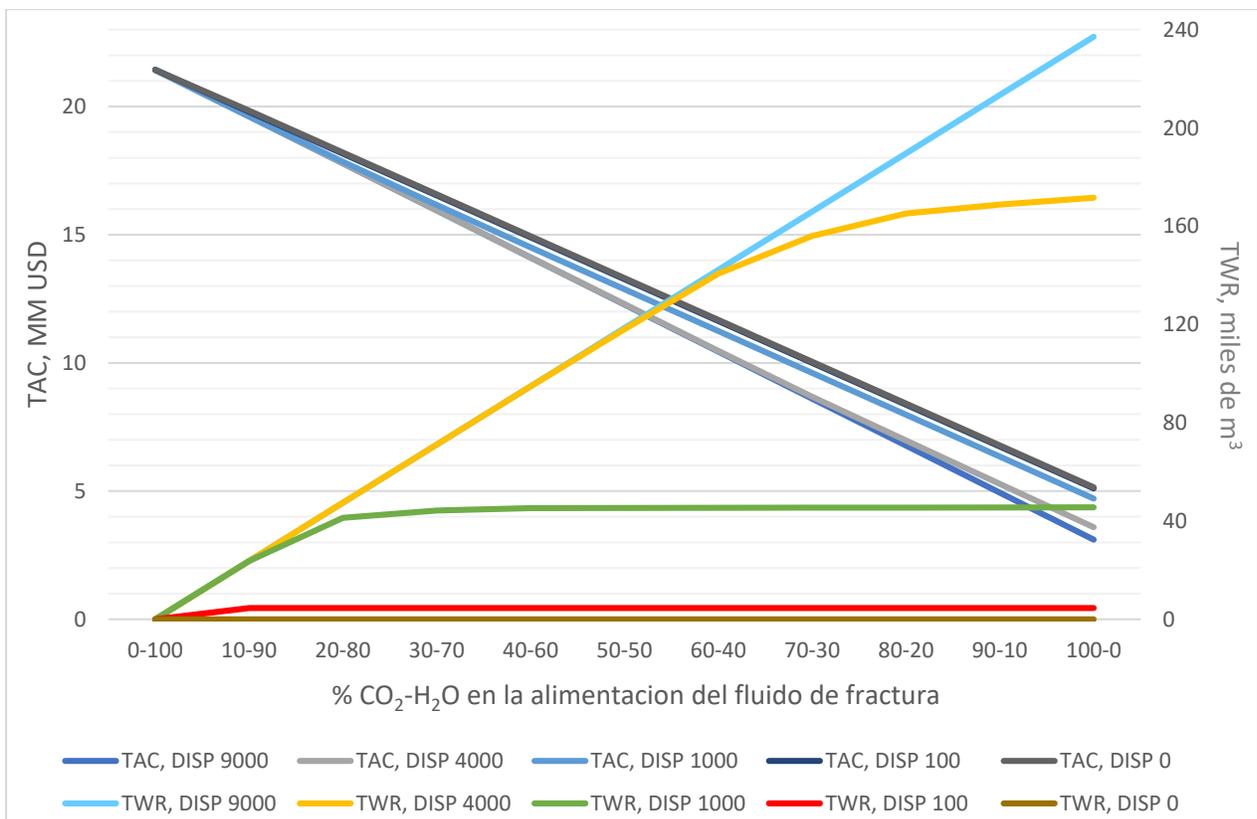
### ***Problema a emplear***

Este ejemplo considera diferentes casos con diferentes limitaciones para determinar cuál es la programación óptima al realizar la fractura hidráulica. Por lo tanto, se consideraron tres casos

con diferentes disponibilidades de agua fresca. Cabe mencionar que todos los parámetros reportados anteriormente fueron empleados para los Casos A, B y C.

### Caso A

El primer escenario propone la disponibilidad constante de agua fresca a lo largo de un horizonte temporal para la fase de terminación de un conjunto de pozos. Esto se debe a que el agua se extrae de los acuíferos. En este caso, se consideraron cinco cantidades diferentes de disponibilidad de agua fresca, los valores de TAC (millones de dólares) y TWR (miles de m<sup>3</sup> de agua) se muestran y comparan en la **Figura 3.3**.



**Figura 3.3** TAC Y TWR para las diferentes disponibilidades de agua fresca por semana

En la **Figura 3.3** se observan cinco distintas disponibilidades frescas donde 9,000 m<sup>3</sup>/semana es el agua mínima requerida para llevar la acabo la fractura hidráulica sin uso de CO<sub>2</sub>, mientras que las disponibilidades de 4,000, 1,000, 100 y 0 representan el 45%, 11%, 1.11% y 0% respectivamente. Es importante señalar que estos porcentajes se usaron solo para representar como afecta el uso de agua fresca sobre el TAC. Cabe mencionar que cuando la disponibilidad de agua

disminuye el TAC aumenta, pero llega a un punto en el que los TAC es muy similares entre sí. Esto se debe a que el uso de CO<sub>2</sub> es mayor que el del agua y el costo del agua utilizada es muy pequeño en comparación con el CO<sub>2</sub>. Para contrastar el impacto de la disponibilidad de agua dulce, es necesario tomar el valor más alto (9,000 m<sup>3</sup>/semana) contra el más bajo (0 m<sup>3</sup>/semana). De esta forma, el TAC se calcula para cada porcentaje contabilizado en el modelo.

Como se puede observar en la **Figura 3.3**, para la mayor disponibilidad (9.000 m<sup>3</sup>/semana), el TAC aumenta casi un 59% por ciento, cada vez que el porcentaje de CO<sub>2</sub> aumenta un 10%. Del mismo modo, para la menor disponibilidad, el TAC aumenta casi un 32%. Sin embargo, aunque el TAC para la disponibilidad más baja aumenta en menor proporción en comparación con la disponibilidad más alta, el TAC para la disponibilidad más alta siempre será menor que para la disponibilidad más baja, esto se debe a que hay más agua fresca disponible y es más barato el uso de agua fresca que el CO<sub>2</sub> o el agua tratada. La **Tabla 3.4** muestra los TACs para las disponibilidades de agua en m<sup>3</sup>/semana.

Adicionalmente, es importante mencionar que cuando no se dispone de agua fresca, el agua utilizada para fracturar el pozo proviene del agua tratada y almacenada. Similarmente, la **Tabla 3.5** presenta el total de agua dulce requerida para las disponibilidades contabilizadas en el modelo.

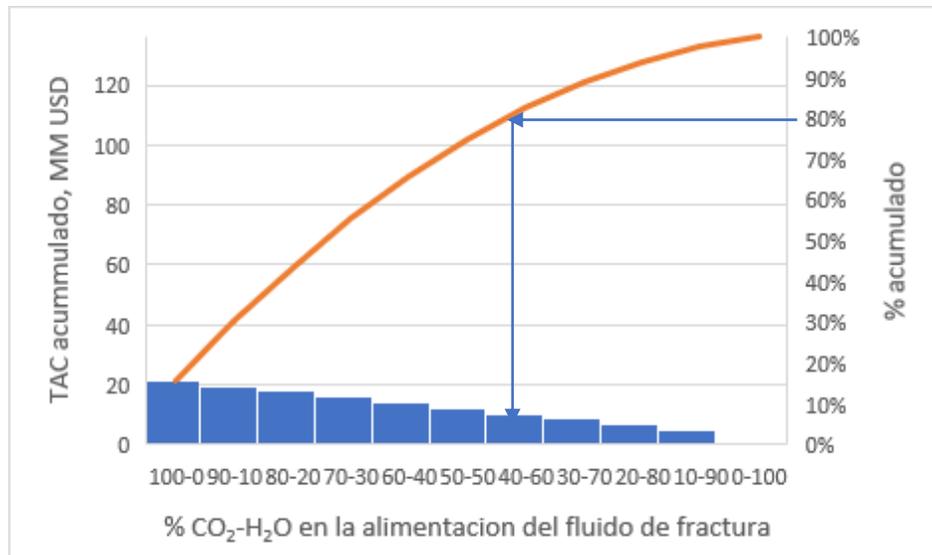
**Tabla 3.4** TACs y su incremento para las distintas disponibilidades de agua fresca a distintos porcentajes CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O

% CO <sub>2</sub> - H <sub>2</sub> O	TAC, MM USD	Incr. % TAC								
0-100	3.11		3.59		4.71		5.10		5.15	
10-90	4.94	59%	5.28	47%	6.34	35%	6.74	32%	6.78	32%
20-80	6.77	37%	6.97	32%	7.98	26%	8.37	24%	8.41	24%
30-70	8.61	27%	8.68	25%	9.61	20%	10.00	20%	10.00	19%
40-60	10.40	21%	10.50	21%	11.20	17%	11.60	16%	11.70	16%
50-50	12.30	18%	12.30	18%	12.90	15%	13.30	14%	13.30	14%
60-40	14.10	15%	14.10	15%	14.50	13%	14.90	12%	14.90	12%
70-30	15.90	13%	15.90	13%	16.20	11%	16.50	11%	16.60	11%
80-20	17.80	12%	17.80	12%	17.80	10%	18.20	10%	18.20	10%
90-10	19.60	10%	19.60	10%	19.60	10%	19.80	9%	19.80	9%
100-0	21.40	9%	21.40	9%	21.40	9%	21.40	8%	21.40	8%
	Disp 9000		Disp 4000		Disp 1000		Disp 100		Disp 0	

**Tabla 3.5.** Agua total fresca requerida a distinto porcentaje de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O para diferente disponibilidad semanal.

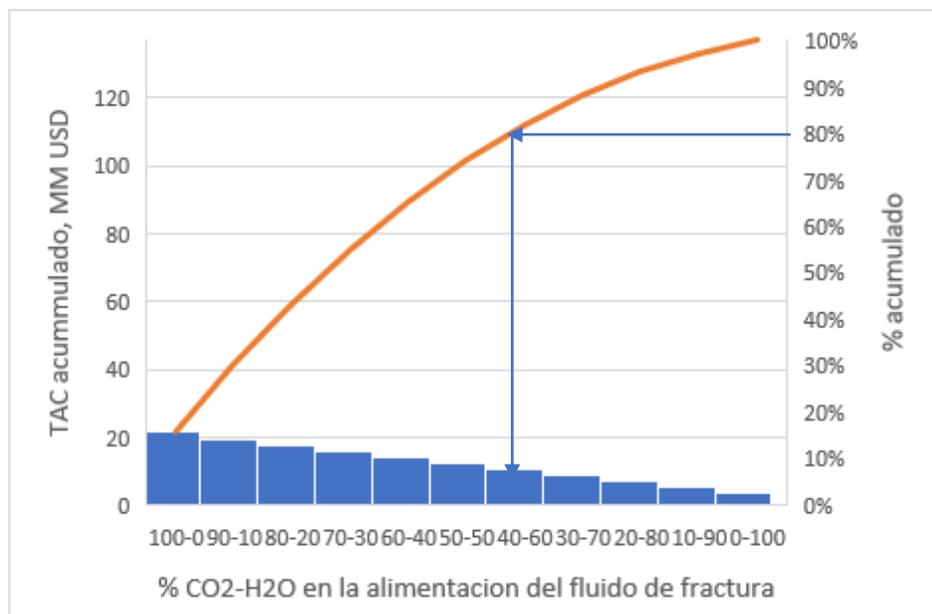
% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TWR, m <sup>3</sup>				
	9000	4000	1000	100	0
0-100	237090	171570	45569.998	4600	0
10-90	213380	168810	45512.994	4600	0
20-80	189670	165170	45456.004	4600	0
30-70	165960	156060	45399	4600	0
40-60	142250	140700	45341.996	4600	0
50-50	118540	118040	45284.999	4600	0
60-40	94836	94836.79	45228	4600	0
70-30	71126.21	71126.21	44270.908	4600	0
80-20	47415.629	47415.629	41292.635	4600	0
90-10	23710	23710.581	23710.581	4557.004	0
100-0	0	0	0	0	0
<b>Disponibilidad, m<sup>3</sup>/semana</b>	9000	4000	1000	100	0

Para poder decidir cuál es la mejor opción de alimentación, se generan cinco curvas de Pareto con los valores obtenidos del TAC, usualmente en el campo de la optimización, las curvas Pareto se usan para contrastar dos variables y como una afecta directamente a otra. Sin embargo, en esta ocasión la **Figura 3.3** no proporciona información clara sobre cuál es la mejor opción de alimentación, ya que la disponibilidad de agua influye directamente sobre el TAC, es decir, con cierta disponibilidad de agua a distintos porcentajes de alimentación se obtiene el mínimo costo total anual (óptimo). Por lo tanto, se podría decir que para decidir la mejor decisión dependerá del capital y disponibilidad de agua. Sin embargo, en la estadística, las curvas Pareto establecen que el 80% de los problemas los causan el 20% de las acciones, en este caso se podría definir que el 80% de los mayores costos anuales son causados por el 20% de las alimentaciones del fluido de fractura. La **Figura 3.4a** muestra la curva de Pareto para la disponibilidad de 9,000 m<sup>3</sup>/semana, en dicha figura se observa que los porcentajes de alimentación mayores a 40-60% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O son los que producen un costo total anual alto. En consecuencia, el porcentaje de alimentación óptimo estará en el intervalo de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O y la cantidad de agua fresca que se desee emplear, decidirá el porcentaje de alimentación óptimo.

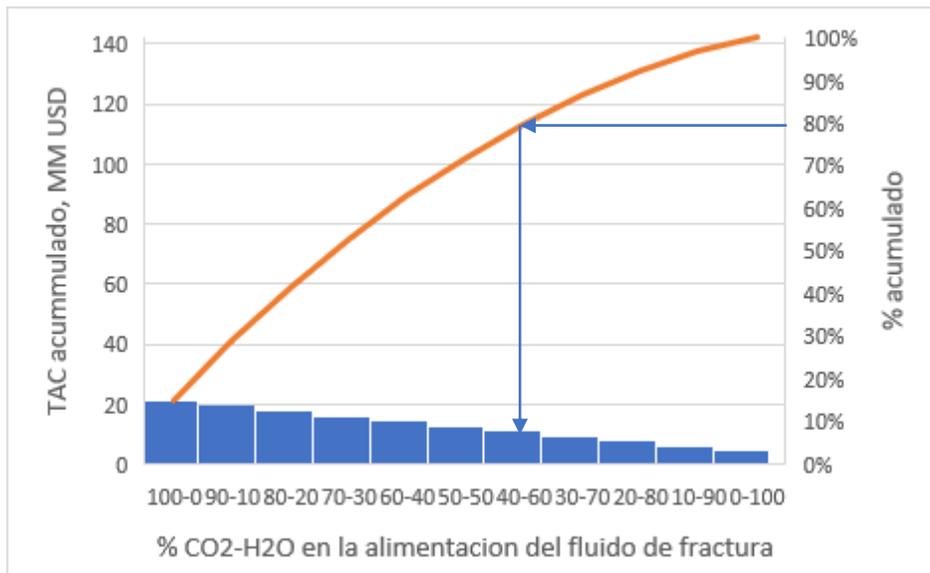


**Figura 3.4a** Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 9000 m<sup>3</sup>/semana

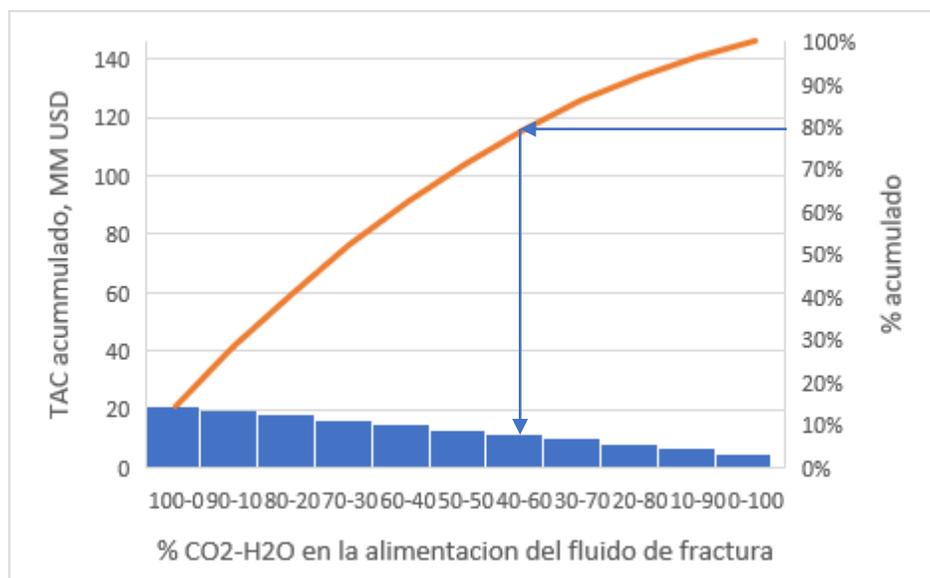
De igual manera, se aplica el mismo criterio para las otras disponibilidades; las **Figura 3.4b**, **Figura 3.4c**, **Figura 3.4d** y **Figura 3.4e** muestran las curvas Pareto para las disponibilidades de 4,000, 1000, 100 y 0 m<sup>3</sup>/semana respectivamente. Como se puede observar, para todas las disponibilidades mencionadas las curvas Pareto indican que en el intervalo de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O se encuentran la opción óptima y que la disponibilidad de agua fresca será el factor que decida cual porcentaje es el óptimo.



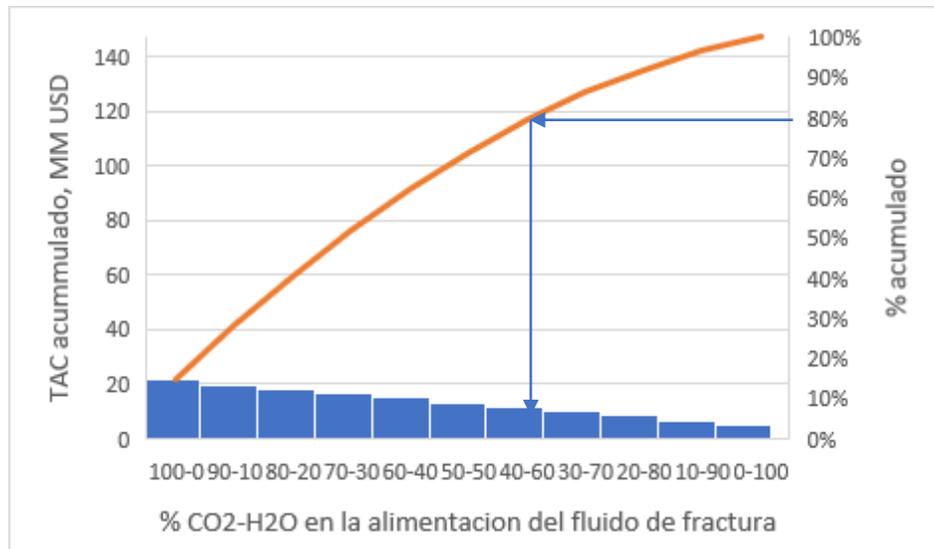
**Figura 3.4b** Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 4000 m<sup>3</sup>/semana



**Figura 3.4c** Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 1000 m<sup>3</sup>/semana



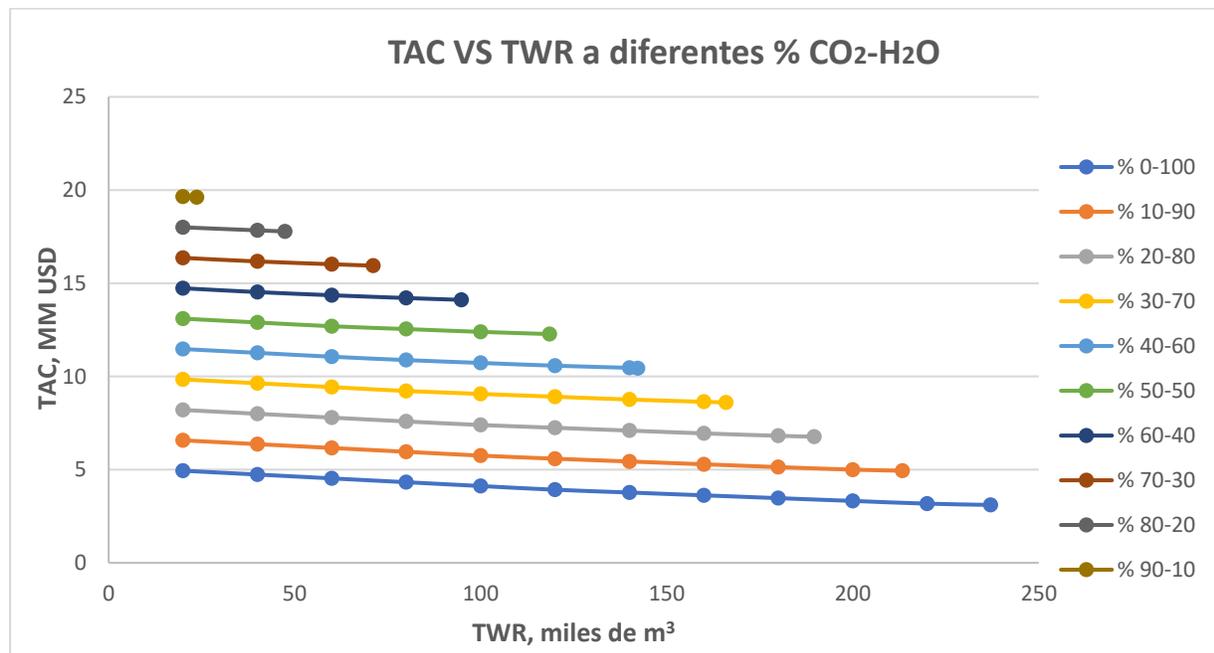
**Figura 3.4d** Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 100 m<sup>3</sup>/semana



**Figura 3.4e** Curva de Pareto para la disponibilidad de agua fresca de 0 m<sup>3</sup>/semana

### Caso B

El segundo escenario propone diferentes disponibilidades de agua dulce en un año, lo que significa que se entregará una cierta cantidad de agua anualmente. La **Figura 3.5** muestra los TAC con diferentes disponibilidades de agua fresca por año, teniendo en cuenta todos los porcentajes mencionados en el Caso A.



**Figura 3.5** TACs para las disponibilidades anuales de agua fresca

Además, la **Figura 3.5** demuestra que a mayor porcentaje de CO<sub>2</sub> el TAC aumenta, pero el agua total requerida es menor para realizar la fractura hidráulica. Cabe mencionar que a mayores porcentajes de CO<sub>2</sub> el agua total requerida será menor que el agua entregada cada año, llegando a un punto en que se mantiene constante. La **Tabla 3.6** muestra el agua total requerida por año a distintos porcentajes de diferentes porcentajes de % CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en la alimentación, mientras que la **Tabla 3.7** presenta el CO<sub>2</sub> total requerido para diferentes porcentajes de % CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O.

**Tabla 3.6.** Agua total usada a diferentes porcentajes de % CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O para diferentes disponibilidades de agua fresca anuales

TWR por año (m <sup>3</sup> )	TWR usada (m <sup>3</sup> )										
20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	20000	20000	20000
40,000	40,000	40,000	40,000	40000	40,000	40,000	40,000	40000	40000	23711	
60,000	60,000	60,000	60,000	60000	60,000	60,000	60,000	60000	47416	23711	
80,000	80,000	80,000	80,000	80000	80,000	80,000	80,000	71126	47416	23711	
100,000	100,000	100,000	100,000	100000	100,000	100,000	94,837	71126	47416	23711	
120,000	120,000	120,000	120,000	120000	120,000	118,540	94,837	71126	47416	23711	
140,000	140,000	140,000	140,000	140000	140,000	118,540	94,837	71126	47416	23711	
160,000	160,000	160,000	160,000	160000	142,250	118,540	94,837	71126	47416	23711	
180,000	180,000	180,000	180,000	165960	142,250	118,540	94,837	71126	47416	23711	
200,000	200,000	200,000	189,670	165960	142,250	118,540	94,837	71126	47416	23711	
220,000	220,000	213,380	189,670	165960	142,250	118,540	94,837	71126	47416	23711	
237,090	237,090	213,380	189,670	165960	142,250	118,540	94,837	71126	47416	23711	
<b>%</b>	% 0-100	% 10-90	% 20-80	% 30-70	% 40-60	% 50-50	% 60-40	% 70-30	% 80-20	% 90-10	
<b>CO<sub>2</sub>- H<sub>2</sub>O</b>											

**Tabla 3.7** CO<sub>2</sub> total requerido para diferentes porcentajes de % CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O para el Caso B

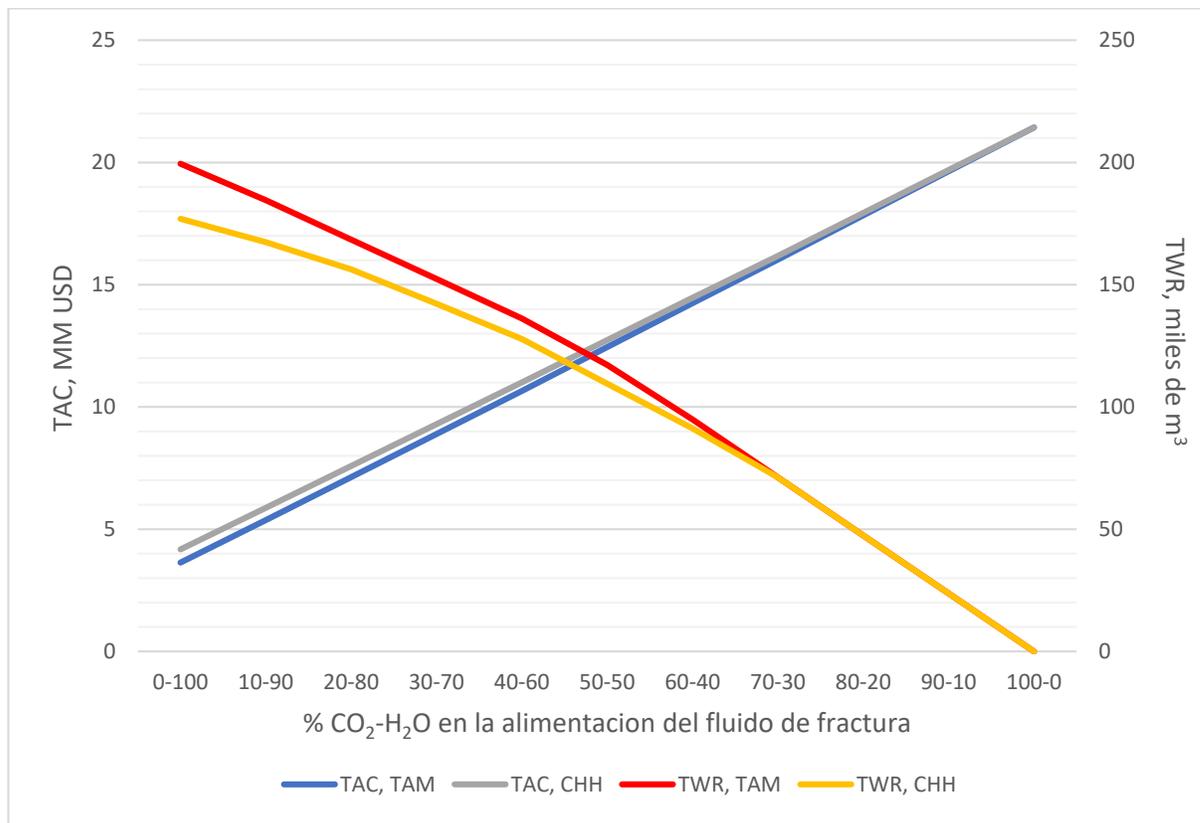
% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TCR, m <sup>3</sup>
0-100	0
10-90	11111.852
20-80	22221.11
30-70	33332.963
40-60	44444.815
50-50	55555.37
60-40	66665.926
70-30	77777.778
80-20	88889.63
90-10	99998.889

### Caso C

Finalmente, el tercer escenario propone restricciones para la disponibilidad de agua fresca con base en la ubicación geográfica y las limitaciones estacionales. La **Tabla 3.1** describe las sequías contabilizadas en este modelo para ambos lugares. Este caso se dividió en dos sub-escenarios: el primero considera que la disponibilidad máxima de agua (9.000 m<sup>3</sup>/semana) es la misma para ambas localidades. La segunda considera que la localidad de Ojinaga, Chihuahua tiene una disponibilidad máxima de agua de 4,000 m<sup>3</sup>/semana mientras que la disponibilidad máxima de agua para Reynosa Tamaulipas es igual a 9,000 m<sup>3</sup>/semana. Cabe señalar, que las disponibilidades de agua consideradas anteriormente se basaron en la disponibilidad promedio anual de agua subterránea para ambas localidades [64,65] y el informe publicado por Monitor de Sequía de México en 2021 [66]. La **Figura 3.6** ilustra y compara el TAC y TWR para el primer sub-escenario donde la disponibilidad máxima de agua es la misma para ambos lugares. Por su parte, la **Tabla 3.8** muestra la TWR para las ubicaciones geográficas de Ojinaga y Reynosa (9,000 m<sup>3</sup>).

**Tabla 3.8** TWR con la misma disponibilidad de agua fresca para las localizaciones de Ojinaga y Reynosa.

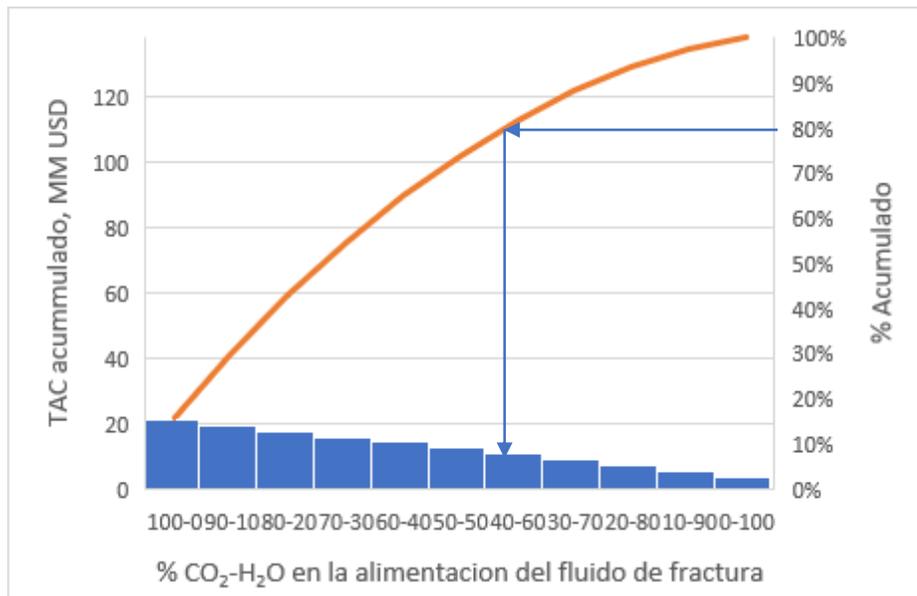
% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TWR para Tamaulipas, m <sup>3</sup>	TWR para Ojinaga, m <sup>3</sup>
0-100	199470	177000
10-90	184560	167400
20-80	168460	156300
30-70	152350	142200
40-60	136180	127800
50-50	117170	109500
60-40	94836	91200
70-30	71126	71126
80-20	47415	47415
90-10	23710	23710
100-0	0	0



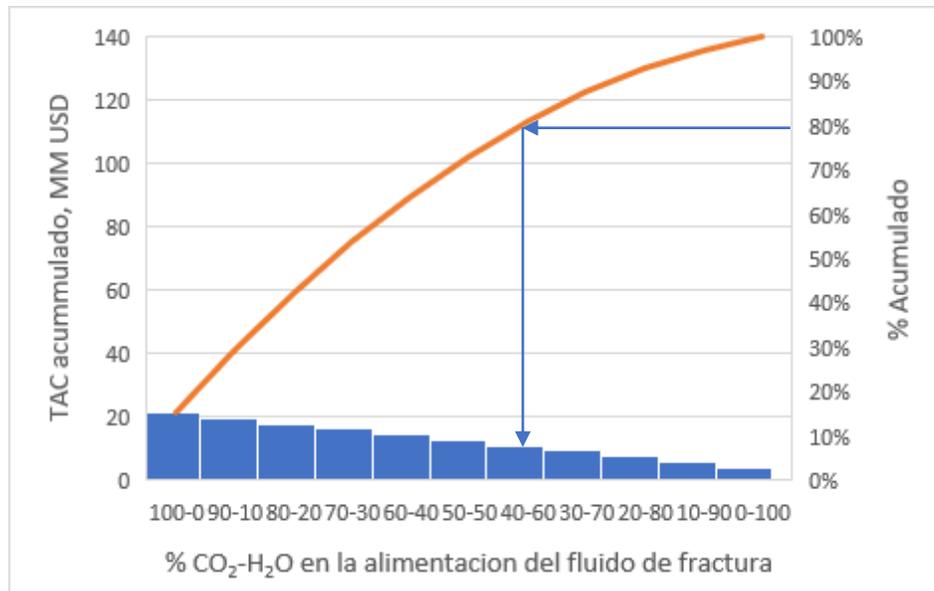
**Figura 3.6** TAC y TWR a diferentes porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O e igual disponibilidad de agua fresca para Ojinaga and Reynosa.

Se puede apreciar que en la **Figura 3.6** los TAC y TWR son muy similares y la razón por la que existe una variación en el TAC es por el costo del agua fresca, debido a la localización geográfica (disponibilidad promedio anual de agua subterránea).

Por otra parte, se usan diagramas de Pareto para conocer la mejor opción de alimentación para el primer sub-escenario. **La Figura 3.7** muestra la curva Pareto para la localización de Reynosa, en esta se aprecia que el rango óptimo de alimentación se encuentra entre el intervalo de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O y al igual que el caso B, el gasto de agua que se desee emplear será el factor que decida el porcentaje óptimo. De la misma manera, la **Figura 3.8** demuestra que el intervalo óptimo de alimentación es de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O para Ojinaga. Cabe mencionar que la disponibilidad de agua fresca es igual para ambas localizaciones



**Figura 3.7** Curva de Pareto del primer sub-escenario para Reynosa

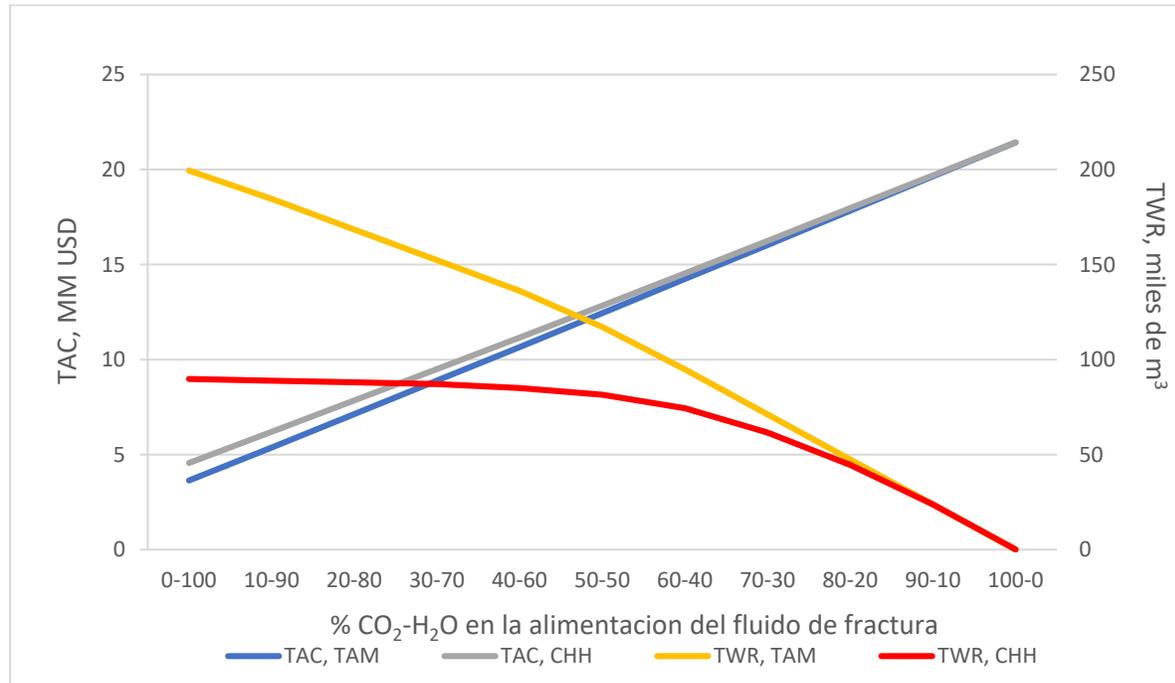


**Figura 3.8** Curva de Pareto del primer sub-escenario para Ojinaga

Por otro lado, para el segundo sub-escenario, la **Figura 3.9** indica y compara el TAC y TWR cuando las disponibilidades máximas de agua son de 9,000 y 4,000 m<sup>3</sup>/semana para Tamaulipas y Ojinaga respectivamente. Asimismo, la **Tabla 3.9** muestra la TWR para las máximas disponibilidades mencionadas anteriormente.

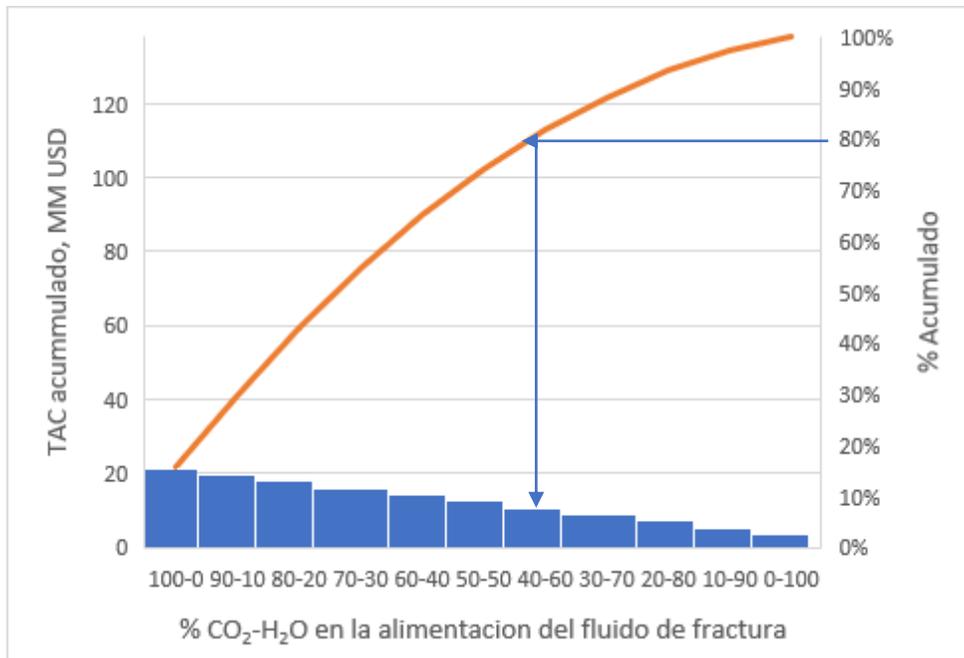
**Tabla 3.9** TWR para las localidades de Ojinaga y Reynosa con diferente disponibilidad de agua.

% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TWR para Tamaulipas, m <sup>3</sup>	TWR para Ojinaga, m <sup>3</sup>
0-100	199470	89799.97
10-90	184560	88899.91
20-80	168460	88000.06
30-70	152350	87100
40-60	136180	84999.82
50-50	117170	81499.915
60-40	94836	74400.32
70-30	71126	61599.52
80-20	47415	44598.17
90-10	23710	23710.581
100-0	0	0

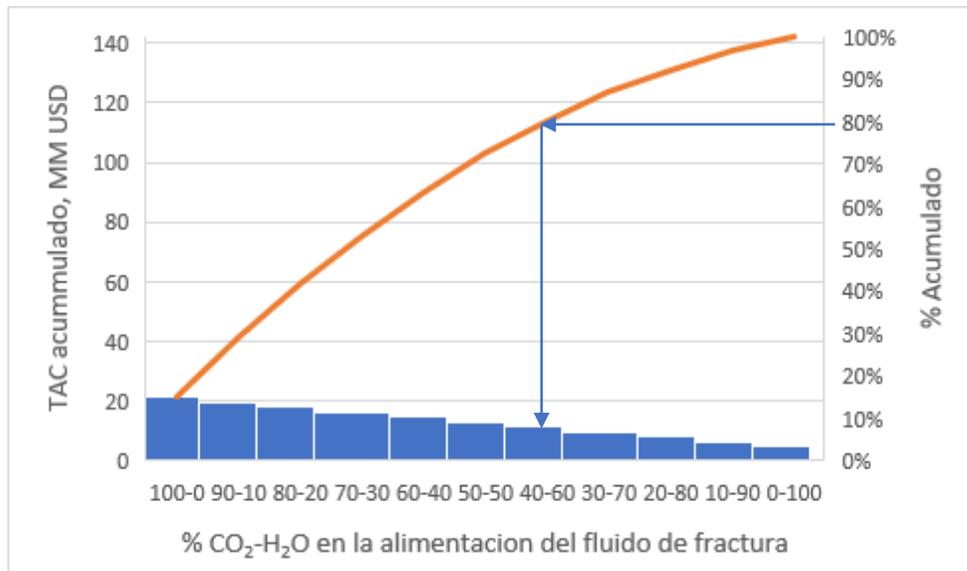


**Figura 3.9** TAC y TWR a diferentes porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O con diferente disponibilidad de agua dulce para las localidades de Ojinaga y Reynosa.

En la **Figura 3.9** se observa que los TAC son muy similares y solo hay una variación cuando se usa más agua en la alimentación del fluido de fractura. Además, debido a la disponibilidad de agua, si hay una diferencia considerable en el uso de agua fresca y se establece que en Ojinaga el TAC siempre será mayor al de Reynosa debido a que se tendría que emplear más agua tratada, la cual tiene mayor costo que el agua fresca. Similarmente al primer subescenario, dos curvas de Pareto se generan para conocer la alimentación óptima de ambas localizaciones. La **Figura 3.10** es la correspondiente para Reynosa con una disponibilidad de 9000 m<sup>3</sup>/semana, en esta misma se observa que al igual que los casos anteriores y de acuerdo con el estatuto de Pareto, la opción óptima se encuentra en el intervalo de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O. Asimismo, la **Figura 3.11** representa a Ojinaga con una disponibilidad de 4000 m<sup>3</sup>/semana e indica, al igual que la **Figura 3.10**, que la opción óptima de alimentación se encuentra en el intervalo 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O. es importante señalar nuevamente que el factor decisivo para encontrar el porcentaje óptimo de alimentación será el agua disponible y que se desee emplear.



**Figura 3.10** Curva de Pareto del segundo sub-escenario para Reynosa



**Figura 3.11** Curva de Pareto del segundo sub-escenario para Ojinaga

Finalmente, para el caso C, los incrementos del TAC de ambos sub-escenarios se promedian y se tabulan en la **Tabla 3.10** con el fin de comparar el incremento de los costos a medida que cambia el porcentaje de CO<sub>2</sub> en el fluido de fractura.

**Tabla 3.10** Incremento del TAC para las localidades de Reynosa y Ojinaga a distintos porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en la alimentacion del fluido de fractura.

% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TAC			
	TAC MM, USD	% de Incremento del TAC	TAC MM, USD	% Incremento del TAC
0-100	3.63		4.56	
10-90	5.37	48%	6.20	36%
20-80	7.13	33%	7.85	27%
30-70	8.89	25%	9.50	21%
40-60	10.66	20%	11.16	18%
50-50	12.45	17%	12.84	15%
60-40	14.25	14%	14.54	13%
70-30	16.03	13%	16.25	12%
80-20	17.84	11%	17.97	11%
90-10	19.64	10%	19.69	10%
100-0	21.43	9%	21.43	9%
	Tamaulipas		Ojinaga, CHH.	

## Capítulo 4. Formulación del Modelo Matemático con incertidumbre

### 4.1 Metodología

Este trabajo también propone un modelo matemático que involucre la incertidumbre asociada al fluido de Fractura (Agua fresca, agua tratada/almacenada y CO<sub>2</sub>). Por otra parte, el fluido de fractura afectará directamente a la cantidad de agua de retorno que se obtenga por lo que se establece que, al igual que el fluido de fractura, el agua de retorno también se verá afectada por la incertidumbre del proceso. Cabe mencionar, que los equipos de proceso, costos de transporte costos fijos y variables, capacidades de tratamiento, almacenamiento y de deshecho son iguales a los mencionados en el ejemplo del capítulo 3. A diferencia del capítulo tres y sus casos, en este análisis los flujos de alimentación serán parámetros iniciales para cada escenario  $s$  ( $s_1, s_2, s_3, \dots, s_n$ ), los cuales tendrán una incertidumbre de más/menos un 20%. Como se mencionó anteriormente, la demanda de fluido para la fractura hidráulica por cada pozo es alrededor del 15,000 m<sup>3</sup> o 3,000 m<sup>3</sup>/semana durante un tiempo horizonte de 5 semanas. Esto significa que la alimentación del fluido de fractura no será igual para cada escenario y el agua y CO<sub>2</sub> necesarios en el fluido de fractura dependerá del porcentaje que se desee emplear.

### 4.2 Formulación Matemática

#### *Alimentación del Fluido de Fractura y abastecimiento de agua y CO<sub>2</sub> al pozo*

El agua y CO<sub>2</sub> requeridos para completar la fractura hidráulica en los pozos  $n$  en el horizonte de tiempo  $t$ , estarán dados por la cantidad de fluido de fractura que se alimente al pozo en cada escenario  $s$  y el porcentaje de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en el fluido de fractura, los cuales se obtienen en Excel usando la función **DISTR.NORM.INV**, esta es una función estadística usada para devolver el inverso de la distribución acumulativa normal para la media especificada y la desviación estándar. Los requerimientos del agua para cada pozo  $n$  se en un tiempo  $t$  se define como la proporción de agua en el fluido de fractura ( $\Omega_{CO_2-H_2O}$ ) multiplicado por el fluido de fractura total alimentado a cada pozo  $n$  para cada escenario  $s$ :

$$F_{W_{n,t,s}}^{well\_in} = \Omega_{CO_2-H_2O} FT_{n,t,s}^{well\_in}, \quad \forall n, \forall t, \forall s \quad (4.1)$$

Similarmente, el CO<sub>2</sub> requerido está definido igual que el agua requerida solo que la proporción del CO<sub>2</sub> es  $1-\Omega_{CO_2-H_2O}$ :

$$F_{C_{n,t,s}}^{well\_in} = (1 - \Omega_{CO_2-H_2O}) F_{T_{n,t,s}}^{well\_in}, \quad \forall n, \forall t, \forall s \quad (4.2)$$

Por lo tanto, el fluido de fractura total es igual a la suma del agua requerida ( $F_{W_{n,t,s}}^{well\_in}$ ) más el CO<sub>2</sub> requerido ( $F_{C_{n,t,s}}^{well\_in}$ ) para completar la fractura hidráulica:

$$F_{T_{n,t,s}}^{well\_in} = F_{W_{n,t,s}}^{well\_in} + F_{C_{n,t,s}}^{well\_in}, \quad \forall n, \forall t, \forall s \quad (4.3)$$

### ***Limitaciones de disponibilidad de agua fresca y CO<sub>2</sub>***

El principal problema y limitación para la industria del gas de shale es la disponibilidad del agua fresca necesaria para completar cada pozo, especialmente en regiones con grandes problemas de escasez de agua. En este sentido, un aporte significativo de este trabajo es que contabiliza el agua y el CO<sub>2</sub> disponibles para ser empleados durante la fase de fracturación hidráulica de cada pozo para cada escenario  $s$ .

$$F_{W_{t,s}}^{fresh} \leq \left( \frac{AvailV_{W_t}^{fresh\_max}}{H^{time}} \right), \quad \forall t, \forall s \quad (4.4)$$

donde  $F_{W_{t,s}}^{fresh}$  representa el consumo de agua fresca durante un periodo de tiempo  $t$  en cada escenario  $s$ ,  $AvailV_{W_t}^{fresh\_max}$  es la disponibilidad del agua durante el periodo de tiempo  $t$  y  $H^{time}$  es un factor de conversión del tiempo. De manera similar, la disponibilidad de CO<sub>2</sub> se da de la siguiente manera:

$$F_{C_{t,s}}^{used} \leq \left( \frac{AvailV_{CO_2t}^{used\_max}}{H^{time}} \right) \quad \forall t, \forall s \quad (4.5)$$

### ***Disponibilidad para el Agua generada***

El agua que se genera en la planta potencia se envía a la planta de tratamiento, será diferente en cada escenario  $s$  ya que esta depende del fluido fractura y la proporción de agua que se alimente al pozo:

$$F_{W_{t,s}}^{generated} \leq (AvailV_{W_t}^{generated\_max}) \quad \forall t, \forall s \quad (4.6)$$

donde  $F_{W_{t,s}}^{generated}$  representa la generación de agua durante el período de tiempo  $t$  para los escenarios  $s$ ,  $AvailV_{W_t}^{generated\_max}$  es la disponibilidad de agua durante el período de tiempo  $t$ .

### **Segregación de agua fresca, agua generada y CO<sub>2</sub>**

El agua fresca es segregada y enviada a cada pozo  $n$  para los distintos escenarios mientras que el agua generada y el CO<sub>2</sub> son segregados y enviados a las plantas de tratamiento  $i$  y plantas de adsorción  $j$ , para el proceso de terminación de los escenarios  $s$ .

$$FW_{t,s}^{fresh} = \sum_n ffw_{n,t,s}^{fresh}, \quad \forall t, \forall s \quad (4.7)$$

$$FC_{t,s}^{used} = \sum_j ffc_{j,t,s}^{used}, \quad \forall t, \forall s \quad (4.8)$$

$$FW_{t,s}^{generated} = \sum_i ffw_{i,t,s}^{generated}, \quad \forall t, \forall s \quad (4.9)$$

### **Agua de Retorno.**

Una vez terminada la fase de finalización, se obtiene agua de retorno en cada pozo para cada escenario  $s$ . ( $FW_{n,t,s}^{well\_out}$ ), que se segrega y se envía a un conjunto de unidades de tratamiento ( $ffw_{n,i,t,s}^{well}$ )

$$FW_{n,t,s}^{well\_out} = \sum_i ffw_{n,i,t,s}^{well}, \quad \forall n, \forall t, \forall s \quad (4.10)$$

Cabe señalar que toda el agua de retorno es tratada, evitando el almacenamiento o desecho del fluido de fracturación hidráulica sin tratar.

### **Entrada de agua y CO<sub>2</sub> a unidades de tratamiento y adsorción.**

Una vez que se segrega el flujo de agua de retorno, el balance para el mezclador en la entrada de cada unidad de tratamiento establece que el flujo de entrada para la unidad  $i$  durante el período  $t$  para cada escenario ( $FW_{i,t,s}^{treat\_in}$ ) está dado por la suma del flujo de agua separado a la salida de los pozos al mismo tiempo y enviado a la unidad ( $ffw_{n,i,t,s}^{well}$ ) más el flujo de agua generada en la central ( $ffw_{i,t,s}^{generated}$ ).

$$FW_{i,t,s}^{treat\_in} = \sum_n ffw_{n,i,t,s}^{well} + \sum_i ffw_{i,t,s}^{generated}, \quad \forall i, \forall t, \forall s \quad (4.11)$$

Además, el balance de CO<sub>2</sub> para el mezclador en la entrada de cada unidad de adsorción establece que el flujo de entrada para la unidad  $j$  durante el período  $t$  para cada escenario  $s$

$(Fc_{j,t,s}^{treat\_in})$  se define como la suma de CO<sub>2</sub> en la corriente de gas de combustión producida por la central ( $ffc_{j,t,s}^{used}$ ).

$$Fc_{j,t,s}^{treat\_in} = \sum_j ffc_{j,t,s}^{used}, \quad \forall j, \forall t, \forall s \quad (4.12)$$

### ***Salida de agua y CO<sub>2</sub> de las unidades de tratamiento/adsorción***

De acuerdo con la superestructura propuesta, hay un divisor a la salida de cada unidad de tratamiento  $i$ , donde el flujo de salida ( $Fw_{i,t}^{treat\_out}$ ) puede enviarse a las unidades de almacenamiento ( $ffw_{i,h,t}^{treat\_sto}$ ) o disposición final ( $ffw_{i,d,t}^{treat\_dis}$ ) durante el período  $t$  para cada escenario  $s$ :

$$Fw_{i,t,s}^{treat\_out} = \sum_h ffw_{i,h,t,s}^{treat\_sto} + \sum_d ffw_{i,d,t,s}^{treat\_disp}, \quad \forall i, \forall t, \forall s \quad (4.13)$$

De manera similar, hay una salida de CO<sub>2</sub> en la unidad de adsorción  $j$ , donde el flujo de salida ( $Fc_{j,t}^{treat\_out}$ ) se envía a las unidades de almacenamiento ( $ffc_{j,g,t}^{treat\_sto}$ ) durante el período  $t$  para cada escenario  $s$ :

$$Fc_{j,t,s}^{treat\_out} = \sum_g ffc_{j,g,t,s}^{treat\_sto}, \quad \forall j, \forall t, \forall s \quad (4.14)$$

### ***Balance hídrico para la eliminación y descarga de desechos***

Las corrientes de aguas residuales generadas en un tiempo  $t$  para cada escenario  $s$  ( $Fw_{d,t,s}^{waste}$ ) provienen de la red de interceptación, donde la calidad del agua cumple con la normativa ambiental para los contaminantes:

$$Fw_{d,t,s}^{waste} = \sum_i ffw_{i,d,t,s}^{treat\_disp}, \quad \forall d, \forall t, \forall s \quad (4.15)$$

### ***Entrada de agua y CO<sub>2</sub> a unidades de almacenamiento.***

El caudal de agua de almacenamiento ( $Fw_{h,t,s}^{storage\_in}$ ) es alimentado al sistema de almacenamiento por las corrientes residuales tratadas en la red de interceptación, mientras que el caudal de almacenamiento de CO<sub>2</sub> ( $Fc_{g,t,s}^{storage\_in}$ ) es suministrado por el CO<sub>2</sub> adsorbido en la

unidad de adsorción en un tiempo  $t$  para cada escenario  $s$ , cumpliendo los requisitos de calidad para su reutilización:

$$FW_{h,t,s}^{storage\_in} = \sum_i ffw_{i,h,t,s}^{treat\_sto}, \quad \forall h, \forall t, \forall s \quad (4.16)$$

$$FC_{g,t,s}^{storage\_in} = \sum_j ffc_{j,g,t,s}^{treat\_sto}, \quad \forall g, \forall t, \forall s \quad (4.17)$$

### ***Salida de agua y CO<sub>2</sub> de las unidades de almacenamiento***

Una vez que se almacenan el agua y el CO<sub>2</sub>, los flujos de ( $ffw_{h,n,t}^{storage}$  y  $ffc_{g,n,t}^{storage}$ ) desde las unidades de almacenamiento  $h$  y  $g$ , para agua y CO<sub>2</sub> respectivamente, durante un período  $t$  de cada escenario  $s$ , están representados por:

$$FW_{h,t,s}^{storage\_out} = \sum_n ffw_{h,n,t,s}^{storage}, \quad \forall h, \forall t, \forall s \quad (4.18)$$

$$FC_{g,t,s}^{storage\_out} = \sum_n ffc_{g,n,t,s}^{storage}, \quad \forall g, \forall t, \forall s \quad (4.19)$$

### ***Balances en unidades de tratamiento y adsorción***

La mayoría de las unidades de tratamiento involucran pérdidas de agua durante su operación, mientras que las unidades de adsorción involucran la cantidad de CO<sub>2</sub> que se puede absorber. Ambos flujos serán distintas debido a la incertidumbre asociada a los escenarios (cantidades de agua y CO<sub>2</sub> tratadas), estos dos aspectos se pueden modelar de la siguiente manera:

$$FW_{i,t,s}^{treat\_out} = \alpha w_i^{treat} FW_{i,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall i, \forall t, \forall s \quad (4.20)$$

$$FC_{j,t,s}^{treat\_out} = \alpha c_j^{treat} FC_{j,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall j, \forall t, \forall s \quad (81)$$

donde  $\alpha w_i^{treat}$  y  $\alpha c_j^{treat}$  representan el factor de eficiencia en términos de flujo volumétrico para la unidad  $i$  y  $j$ , respectivamente.

### ***Balances de agua y CO<sub>2</sub> en unidades de almacenamiento.***

El desarrollo típico de una plataforma de pozo implica la fase de terminación donde se lleva a cabo el proceso de fractura hidráulica. Este paso requiere la inyección de grandes cantidades de agua y CO<sub>2</sub> en los pozos como fluido de fractura hidráulica, lo que suele demorar entre 1 y 3 meses.

Una vez finalizada esta etapa, una parte importante del total de agua inyectada se obtiene en los pozos como agua de retorno, mientras que el CO<sub>2</sub> se libera al medio ambiente. El agua de refluo se puede reutilizar en procesos de fractura hidráulica para reducir el consumo de agua fresca; sin embargo, este flujo debe ser tratado y almacenado. Entonces, considerando un cronograma de las fases de terminación de un conjunto de pozos realizadas por varios equipos de fractura hidráulica, la importancia del almacenamiento consiste en ahorrar el agua de refluo tratada y el CO<sub>2</sub> absorbido para ser utilizados durante los períodos en que se implemente el proceso de fractura; esta agua también representa un recurso de respaldo para períodos con baja disponibilidad de agua fresca.

En este contexto, el balance de acumulación para los pozos de almacenamiento en los momentos que el volumen en el pozo  $h$  en el tiempo  $t$  ( $VW_{h,t,s}^{storage}$ ) para cada escenario  $s$  es igual al del final del período de tiempo anterior ( $VW_{h,t-1,s}^{storage}$ ), más la diferencia de los flujos de entrada y salida multiplicado por el factor de conversión de tiempo:

$$VW_{h,t,s}^{storage} = VW_h^{storage\_initial} + H^{time} (FW_{h,t,s}^{storage\_in} - FW_{h,t,s}^{storage\_out}), \quad \forall h, \forall t = 1, \forall s \quad (4.22)$$

$$VW_{h,t,s}^{storage} = VW_{h,t-1,s}^{storage} + H^{time} (FW_{h,t,s}^{storage\_in} - FW_{h,t,s}^{storage\_out}) \quad \forall h, \forall t > 1, \forall s \quad (4.23)$$

Cabe señalar que para el primer periodo de tiempo se considera un valor conocido del volumen inicial de la fosa ( $V_h^{storage\_initial}$ ) independientemente del escenario que pueda existir. Adicionalmente, se requiere garantizar la continuidad de los ciclos, por esta razón el volumen inicial es igual al último volumen en el pozo o almacenamiento  $h$ :

$$VW_h^{storage\_initial} = VW_{h,t,s}^{storage}, \quad \forall h, \forall t = t^{final}, \forall s \quad (4.24)$$

De manera similar, para el CO<sub>2</sub>, el balance de acumulación de los tanques de almacenamiento establece que el volumen en el tanque  $g$  en el período  $t$  para cada escenario  $s$  ( $VC_{g,t,s}^{storage}$ ) es igual al volumen al final del período anterior ( $VC_{g,t-1,s}^{storage}$ ), más la diferencia de las entradas y salidas multiplicada por el factor de conversión de tiempo:

$$VC_{g,t,s}^{storage} = VC_g^{storage\_initial} + H^{time} (FC_{g,t,s}^{storage\_in} - FC_{g,t,s}^{storage\_out}), \quad \forall g, \forall t = 1, \forall s \quad (4.25)$$

$$VC_{g,t,s}^{storage} = VC_{g,t-1,s}^{storage} + H^{time} (FC_{g,t,s}^{storage\_in} - FC_{g,t,s}^{storage\_out}), \quad \forall g, \forall t > 1, \forall s \quad (4.26)$$

Garantizando la continuidad de los ciclos, el volumen inicial es igual al último volumen en el pozo  $g$ :

$$Vc_g^{storage\_initial} = Vc_{g,t,s}^{storage}, \quad \forall h, \forall t = t^{final}, \forall s \quad (4.27)$$

### **Capacidad y existencia de unidades de tratamiento y adsorción**

Algunos de los puntos clave que se tienen en cuenta en este modelo de optimización es determinar el número de unidades, tecnologías y disposiciones finales para el tratamiento de agua y adsorción de CO<sub>2</sub>, así como el tamaño de cada una. Adicionalmente, para las unidades de tratamiento y adsorción, las siguientes relaciones seleccionan si las unidades  $i$  y  $j$  son necesarias o no para cada escenario  $s$ , (la existencia de las unidades de tratamiento y adsorción se modela a través de las variables binarias:  $yw_{i,s}^{treat}$  and  $yc_{j,s}^{treat}$ ), por lo tanto, la capacidad operativa de cada unidad de tratamiento ( $Fw_i^{treat\_cap}$ ) y adsorción ( $Fc_j^{treat\_cap}$ ), se representa de la siguiente manera:

$$Fw_{i,s}^{treat\_cap} \geq Fw_{i,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall i, \forall t, \forall s \quad (4.28)$$

$$Fw_{i,s}^{treat\_cap} \leq Fw_i^{treat\_max} yw_{i,s}^{treat}, \quad \forall i, \forall s \quad (4.29)$$

$$Fc_{j,s}^{treat\_cap} \geq Fc_{j,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall j, \forall t, \forall s \quad (4.30)$$

$$Fc_{j,s}^{treat\_cap} \leq Fc_j^{treat\_max} yc_{j,s}^{treat}, \quad \forall j, \forall s \quad (4.31)$$

Donde  $Fw_i^{treat\_max}$  y  $Fc_j^{treat\_max}$  representan un límite superior para la capacidad operativa asociada con las unidades  $i$  y  $j$  independientemente del escenario.

### **Capacidad y existencia de unidades de almacenamiento**

De manera similar, para las unidades de almacenamiento/fosas, se necesitan las siguientes relaciones:

$$Vw_{h,s}^{storage\_cap} \geq Vw_{h,t,s}^{storage}, \quad \forall h, \forall t, \forall s \quad (4.32)$$

$$Vw_{h,s}^{storage\_cap} \leq Vw_h^{storage\_max} yw_{h,s}^{storage}, \quad \forall h, \forall s \quad (4.33)$$

$$Vc_{g,s}^{storage\_cap} \geq Vc_{g,t,s}^{storage}, \quad \forall g, \forall t, \forall s \quad (4.34)$$

$$VC_{g,s}^{storage\_cap} \leq VC_g^{storage\_max} y_{g,s}^{storage}, \quad \forall g, \forall s \quad (4.35)$$

Donde  $VW_h^{storage\_cap}$  y  $VC_g^{storage\_cap}$  denotan la capacidad óptima de las unidades de almacenamiento  $h$  and  $g$  para cada escenario  $s$ . Por otro lado,  $VW_h^{storage\_max}$  y  $VC_g^{storage\_max}$  representan las capacidades máximas de las unidades de almacenamiento/fosas  $h$  y  $g$ . Las variables binarias  $y_{g,s}^{storage}$  y  $y_{h,s}^{storage}$  son usadas para modelar la existencia de las unidades de almacenamiento/fosas para los distintos escenarios.

### **Capacidad y existencia de enajenaciones**

Finalmente, los deshechos finales acumulan todo el caudal vertido sobre ellas durante todo el horizonte temporal dado. De esta forma, la capacidad operativa para la disposición  $d$  para cada escenario  $s$  ( $VW_{d,s}^{waste\_cap}$ ) se determina de la siguiente manera:

$$VW_{d,s}^{waste\_cap} = H^{time} \sum_t Fw_{d,t,s}^{waste}, \quad \forall d, \forall s \quad (4.36)$$

$$VW_{d,s}^{waste\_cap} \leq VW_d^{waste\_max} y_{d,s}^{waste}, \quad \forall d, \forall s \quad (4.37)$$

Donde  $VW_{d,s}^{waste\_max}$  es la capacidad máxima para cada deshecho en cada escenario  $s$  y la existencia de cada disposición  $d$  para cada escenario  $s$  se modela a través de la variable binaria  $y_{d,s}^{waste}$ . De esta forma, se puede determinar el número de tecnologías de tratamiento, almacenamientos/fosas y eliminaciones de forma óptima, así como sus capacidades.

### **Agua total utilizada**

Aunque se pueden superar las limitaciones de agua, es importante cuantificar el agua total requerida para completar todos los pozos propuestos. Por lo tanto, la siguiente relación determina las necesidades totales de agua ( $TWR_s$ ) en el periodo de tiempo  $t$  para cada escenario  $s$ :

$$TWR_s = H^{time} \left( \sum_t Fw_{t,s}^{fresh} \right), \quad \forall s \quad (4.38)$$

### **Total de CO<sub>2</sub> usado**

Es importante cuantificar el CO<sub>2</sub> total requerido para completar todos los pozos propuestos. Por lo tanto, la siguiente relación determina los requisitos totales de CO<sub>2</sub> ( $TCR_s$ ) en el periodo de tiempo  $t$  para cada escenario  $s$ :

$$TCR_s = H^{time} \sum_t FC_{t,s}^{used}, \quad \forall s \quad (4.39)$$

### **Costos de operaci3**

Los costos operativos considerados en este proyecto corresponden al costo del agua fresca, los costos operativos de las unidades de tratamiento y los costos de transporte (incluyendo todas las trayectorias), los cuales se describen en detalle a continuaci3n.

### **Costo del agua fresca**

El costo del agua fresca ( $Costw^{fresh}_s$ ) para cada escenario  $s$  se obtiene multiplicando la suma del agua requerida durante todos los per3odos por el costo unitario del agua fresca ( $UCw^{fresh}$ ) y el factor de conversi3n de tiempo

$$Costw^{fresh}_s = H^{time} UCw^{fresh} \sum_t Fw_{t,s}^{fresh}, \quad \forall s \quad (4.40)$$

El costo del CO<sub>2</sub> se calcula de la misma manera que el agua fresca usando el costo unitario asociado con el CO<sub>2</sub> ( $UCc^{used}$ ):

$$Costc^{used}_s = H^{time} UCc^{used} \sum_t Fc_{t,s}^{used}, \quad \forall s \quad (4.41)$$

### **Costos operativos de las unidades de tratamiento y de adsorci3n**

Los costos operativos de tratamiento y adsorci3n para cada escenario  $s$  se determinan de la siguiente manera:

$$Costw^{op\_treat}_s = H^{time} \sum_i \sum_t UOCw_i^{treat} Fw_{i,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall s \quad (4.42)$$

$$Costc^{op\_treat}_s = H^{time} \sum_j \sum_t UOCc_j^{treat} Fc_{j,t,s}^{treat\_in}, \quad \forall s \quad (4.43)$$

Donde  $UOCw_i^{treat}$  es el costo operativo unitario para la unidad de tratamiento  $i$  y  $UOCc_j^{treat}$  es el costo operativo unitario para la unidad de adsorci3n  $j$ .

### **Costos de transporte del agua fresca y CO<sub>2</sub>**

El costo de transporte de agua fresca ( $Costw^{trans\_fresh}_s$ ) se puede calcular multiplicando las tasas de flujo de agua fresca enviada al pozo  $n$  en el período  $t$  para cada escenario  $s$  por el costo unitario de transporte ( $UTCW_n^{fresh}$ ):

$$Costw^{trans\_fresh}_s = H^{time} \sum_n \sum_t UTCW_n^{fresh} ffw_{n,t,s}^{fresh}, \quad \forall s \quad (4.44)$$

Por otro lado, el costo de transporte de CO<sub>2</sub> se calcula multiplicando los caudales de CO<sub>2</sub> enviados al pozo  $n$  desde el tanque de almacenamiento  $g$  en el período  $t$  para cada escenario  $s$  por el costo unitario de transporte:

$$Costc^{trans\_sto}_s = H^{time} \sum_g \sum_n \sum_t UTCc_n^{sto} ffc_{g,n,t,s}^{storage}, \quad \forall s \quad (4.45)$$

Cabe señalar que los costos unitarios son diferentes para cada pozo considerando la distancia geográfica entre agua fresca, CO<sub>2</sub> y cada pozo. Es importante mencionar que, para algunos campos de gas shale existentes, el recurso de agua fresca está disponible a distancias significativas de los pozos; por lo tanto, en casos como el de la región de gas shale de Marcellus, el costo del transporte de agua fresca es varias veces mayor que el costo del agua fresca [26].

### ***Costo de transporte del agua de retorno***

El agua de reflujó obtenida de los pozos  $n$  para cada escenario  $s$  es transportada a la red de interceptación y el costo asociado a esta operación de cada escenario se considera a través de la siguiente expresión:

$$Costw^{trans\_fb}_s = H^{time} \sum_n \sum_i \sum_t UTCW_{n,i}^{used} ffw_{n,i,t,s}^{well}, \quad \forall s \quad (4.46)$$

Donde  $UTCW_{n,i}^{used}$  es el costo unitario de transporte del agua de retorno en la ruta seleccionada para el pozo  $n$  y el tratamiento  $i$ . Aquí, el costo unitario puede cambiar para cada ruta.

### ***Costo de transporte del agua tratada a disposición final***

El caudal que sale del tratamiento, en cada escenario, puede ser enviado a disposición  $d$  y los costos de transporte que se generan para cada escenario  $s$  son los siguientes:

$$Costw^{trans\_treat\_disp}_s = H^{time} \sum_i \sum_d \sum_t UTCW_{i,d}^{treat\_disp} ffw_{i,d,t,s}^{treat\_disp}, \quad \forall s \quad (4.47)$$

Donde  $UTCW_{i,d}^{treat\_dis}$  es el costo unitario de transporte para el agua tratada proveniente del tratamiento  $i$  hacia la disposición o deshecho  $d$ .

### **Costo de transporte de agua tratada/CO<sub>2</sub> adsorbido al almacenamiento**

El agua tratada y CO<sub>2</sub> absorbido en cada escenario  $s$ , pueden ser enviados al sistema de almacenamiento con los siguientes costos para cada escenario:

$$Costw^{trans\_treat\_sto}_s = H^{time} \sum_i \sum_h \sum_t UTCW_{i,h}^{treat\_sto} ffw_{i,h,t,s}^{treat\_sto} \quad \forall s \quad (4.48)$$

$$Costc^{trans\_treat\_sto}_s = H^{time} \sum_j \sum_g \sum_t UTCC_{j,g}^{treat\_sto} ffc_{j,g,t,s}^{treat\_sto}, \quad \forall s \quad (4.49)$$

Donde  $UTCW_{i,h}^{treat\_sto}$  representa el costo unitario de transporte del agua tratada desde el tratamiento  $i$  hasta los pozos de almacenamiento  $h$ , mientras que  $UTCCO_{2,j,g}^{treat\_sto}$  representa el costo unitario de transporte del CO<sub>2</sub> adsorbido desde el tratamiento  $j$  hasta los tanques de almacenamiento  $g$ .

### **Costo de transporte del agua reutilizada a los pozos**

El agua almacenada en los tanques/almacenamiento, de cada escenario  $s$ , se transporta a los pozos  $n$  para su reutilización y el costo asociado para cada escenario se contabiliza en la siguiente relación:

$$Costw^{trans\_sto\_well}_s = H^{time} \sum_h \sum_n \sum_t UTCW_{h,n}^{sto\_well} ffw_{h,n,t,s}^{storage}, \quad \forall s \quad (4.50)$$

Donde  $UTCW_{h,n}^{sto\_well}$  es el costo unitario de transporte del agua reutilizada desde el área almacenamiento  $h$  hasta el pozo  $n$ .

### **Costo de transporte del agua generada a la unidad de tratamiento**

El caudal de agua que sale de la planta de energía, en cada escenario  $s$ , puede ser enviado a la unidad de tratamiento y los costos de transporte generados para cada escenario son los siguientes:

$$Costw^{trans\_pp\_treat}_s = H^{time} \sum_i \sum_t UTCW_i^{generated\_treat} ffw_{i,t,s}^{generated}, \quad \forall s \quad (4.51)$$

Donde  $UTCW_i^{generated\_treat}$  es el costo unitario de transporte del agua generada por la planta de energía que se envía a la unidad de tratamiento  $i$ .

### **Costo de transporte del CO2 usado a la unidad de adsorción**

Similarmente, el costo unitario de transporte de CO<sub>2</sub> para cada escenario  $s$  se calcula de la siguiente manera:

$$\text{Costc}^{trans\_pp\_treat}_s = H^{time} \sum_j \sum_t UTCC_j^{used\_treat} ffc_{j,t,s}^{used}, \quad \forall s \quad (4.52)$$

Donde  $UTCC_j^{used\_treat}$  es el costo unitario de transporte del CO<sub>2</sub> producido por la planta de energía que se envía a la unidad de tratamiento  $j$ .

### **Costo operativo total**

Finalmente, la suma de todos los costos operativos descritos anteriormente produce el costo operativo total (TOC<sub>s</sub>) del proyecto:

$$\begin{aligned} TOC_s = & \text{Costw}^{fresh}_s + \text{Costw}^{op\_treat}_s + \text{Costw}^{trans\_fresh}_s + \text{Costw}^{trans\_fb}_s + \text{Costw}^{trans\_treat\_disp}_s \\ & + \text{Costw}^{trans\_treat\_sto}_s + \text{Costw}^{trans\_sto\_well}_s + \text{Costw}^{trans\_pp\_treat}_s + \text{Costc}^{used}_s + \text{Costc}^{op\_treat}_s \\ & + \text{Costc}^{trans\_sto}_s + \text{Costc}^{trans\_treat\_sto}_s + \text{Costc}^{trans\_pp\_treat}_s \end{aligned} \quad (4.53)$$

### **Costos de capital**

La adquisición de unidades de tratamiento, unidades de adsorción, unidades de almacenamiento, así como la creación de disposición final genera costos de capital, los cuales se incluyen económicamente en la función objetivo.

### **Costo de capital para unidades de tratamiento de agua y unidades de adsorción de CO<sub>2</sub>**

El costo de capital para las unidades de tratamiento de agua para cada escenario involucra un cargo fijo ( $FCW^{treat}$ ) y un cargo variable ( $VCW^{treat}$ ) que depende del caudal tratado, el costo se define de la siguiente manera:

$$\text{CapCostw}^{treatment}_s = k_{Fw} \sum_i \left[ FCW^{treat} yW_{i,s}^{treat} + VCW^{treat} (FW_{i,s}^{treat\_cap})^{\beta_w^{treat}} \right], \quad \forall s \quad (4.54)$$

Donde  $k_{Fw}$  es un factor utilizado para anualizar la inversión, mientras que  $\beta_w^{treat}$  representa el exponente asociado a las economías de escala para las unidades de tratamiento.

Por otro lado, el costo de capital para el CO<sub>2</sub> se calcula de la misma manera que el agua:

$$CapCostc^{treatment}_s = k_F c \sum_j \left[ FCc^{treat} y_{j,s}^{treat} + VCc^{treat} (Fc_{j,s}^{treat\_cap})^{\beta c^{treat}} \right], \forall s \quad (4.55)$$

**Costo de capital para almacenamiento de agua, almacenamiento de CO<sub>2</sub> y unidades de eliminación**

De igual forma para las unidades de almacenamiento y deshechos los costos de capital, para cada escenario  $s$ , están definidos como:

$$CapCostw^{storage}_s = k_F w \sum_h \left[ FCw^{storage} y_{h,s}^{storage} + VCw^{storage} (Vw_{h,s}^{storage\_cap})^{\beta w^{storage}} \right], \forall s \quad (4.57)$$

$$CapCostw^{waste} = k_F w \sum_d \left[ FCw^{waste} y_{d,s}^{waste} + VCw^{waste} (Vw_{d,s}^{waste\_cap})^{\beta w^{waste}} \right], \forall s \quad (4.58)$$

$$CapCostc^{storage} = k_F c \sum_g \left[ FCc^{storage} y_{g,s}^{storage} + VCc^{storage} (Vc_{g,s}^{storage\_cap})^{\beta c^{storage}} \right], \forall s \quad (4.59)$$

Vale la pena mencionar que los términos  $[\beta w^{treat}, \beta w^{storage}, \beta w^{waste}, \beta c^{treat}$  y  $\beta c^{storage}$  representan los únicos términos no lineales incluidos en todo el modelo matemático propuesto.

### **Costo total de capital**

El costo de capital total ( $TCC_s$ ), para cada escenario, está compuesto por todos los costos de capital mencionados anteriormente (unidades de tratamiento, unidades de adsorción, unidades de almacenamiento y disposición).

$$TCC_s = CapCostw^{treatment}_s + CapCostc^{treatment}_s + CapCostw^{storage}_s + CapCostw^{waste}_s + CapCostc^{storage}_s \quad (4.60)$$

### **Costo total anual**

Finalmente, el costo total anual ( $TAC_s$ ) para cada escenario  $s$  está constituido por la suma del costo total de operación y el costo total de capital:

$$TAC_s = TOC_s + TCC_s \quad (4.61)$$

Debe mencionarse que la función objetivo consiste en minimizar el costo total anual (TAC), sin embargo, la ecuación (4.61) calcula el TAC de cada escenario, por esta razón se agrega una nueva variable que represente el valor promedio del costo total anual de todos los escenarios (ETAC). De la misma manera, una nueva variable es incluida para el valor promedio del agua requerida. Las variables están representadas por las ecuaciones (4.62) y (4.63).

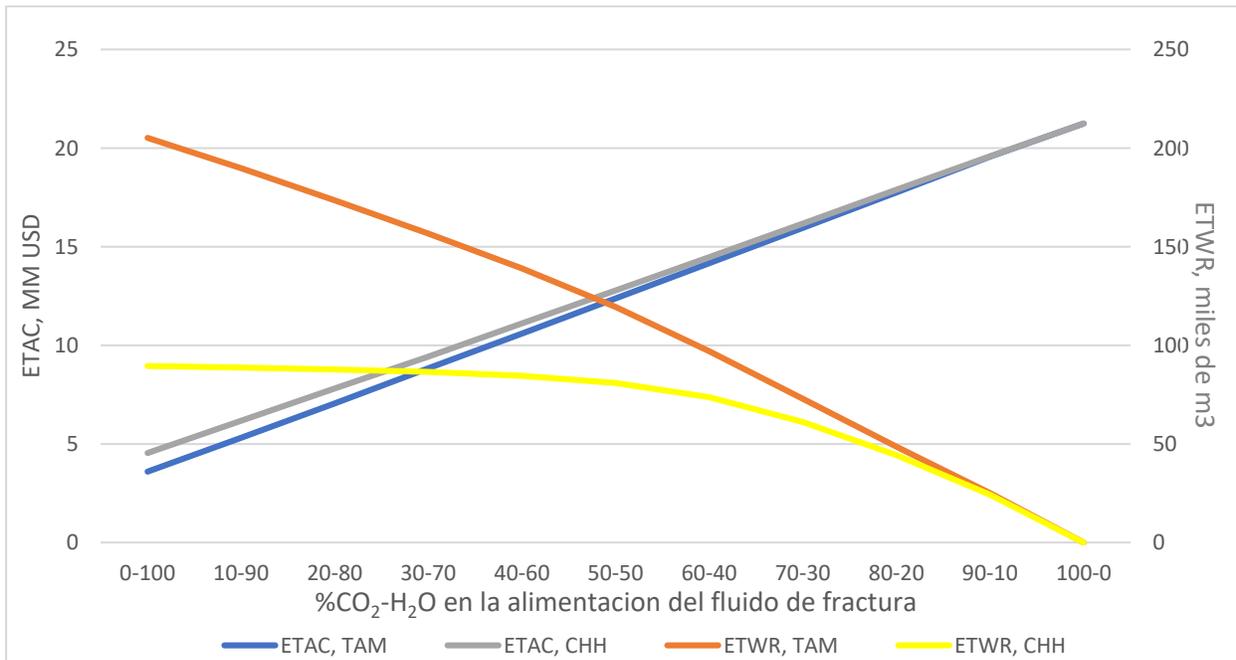
$$ETAC = \sum_s prob_s TAC_s \quad (4.62)$$

$$ETWR = \sum_s prob_s TWR_s \quad (4.63)$$

Donde  $prob_s$  representa la probabilidad del escenario  $s$ .

### Caso D

Una vez que se establece el modelo matemático que contabiliza la incertidumbre asociada a los distintos escenarios, se modela una vez en GAMS. Cabe mencionar que el caso D es igual al C, con lo que respecta a los costos y disponibilidades de agua fresca para las localizaciones de Ojinaga y Reynosa. La **Figura 4.1** muestra los costos totales anuales esperados y el agua total requerida promedio con respecto al porcentaje de CO<sub>2</sub> alimentado en el fluido de fractura. De igual manera, **Tabla 4.1** muestra el incremento del ETAC a distintos porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O para ambas localizaciones.



**Figura 4.1** ETAC y ETWR a distintos porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en la alimentación del fluido de fractura para Ojinaga y Reynosa

**Tabla 4.1.** Incremento del ETAC a distintos porcentajes de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O en la alimentación del fluido de fractura para las localidades de Reynosa y Ojinaga.

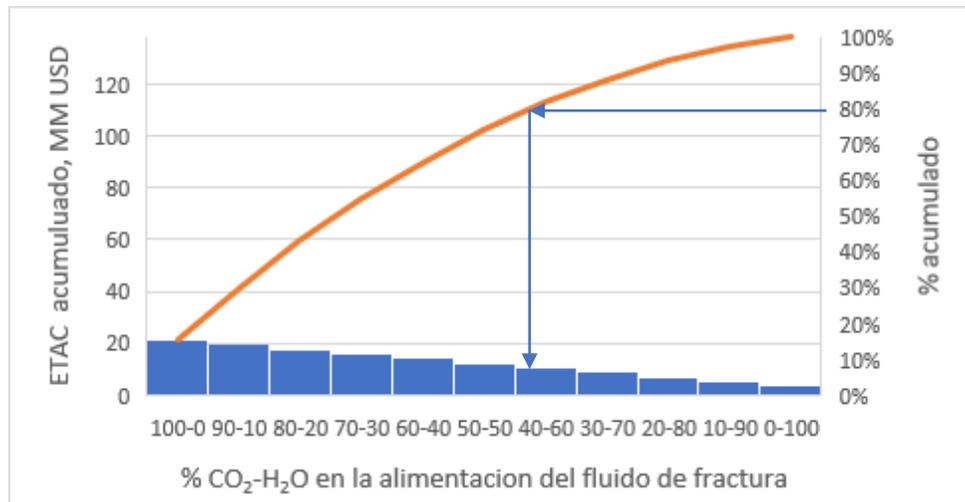
% CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	TAC, MM USD	% de Incremento del TAC	TAC MM, USD	% de Incremento del TAC
0-100	3.59		4.54	
10-90	5.31	47.80	6.18	35.96
20-80	7.05	32.83	7.82	26.53
30-70	8.83	25.27	9.43	20.63
40-60	10.60	19.94	11.12	17.88
50-50	12.38	16.77	12.79	15.03
60-40	14.17	14.43	14.47	13.20
70-30	15.95	12.61	16.18	11.77
80-20	17.75	11.28	17.89	10.61
90-10	19.57	10.25	19.59	9.47
100-0	21.25	8.56	21.25	8.47
	Tamaulipas		Ojina, CHH.	

Adicionalmente, La **Tabla 4.2** compara los TAC y TWR del caso C con los del caso D, Como se puede observar los valores de ETAC y ETWR para ambas localizaciones son casi iguales a los del caso C. Por lo tanto, se observa que la incertidumbre asociada a los flujos de agua de retorno y fluido de fractura, para cada escenario, no afectan de manera notable el consumo de agua fresca o el costo total anual comparado al del capítulo 3.

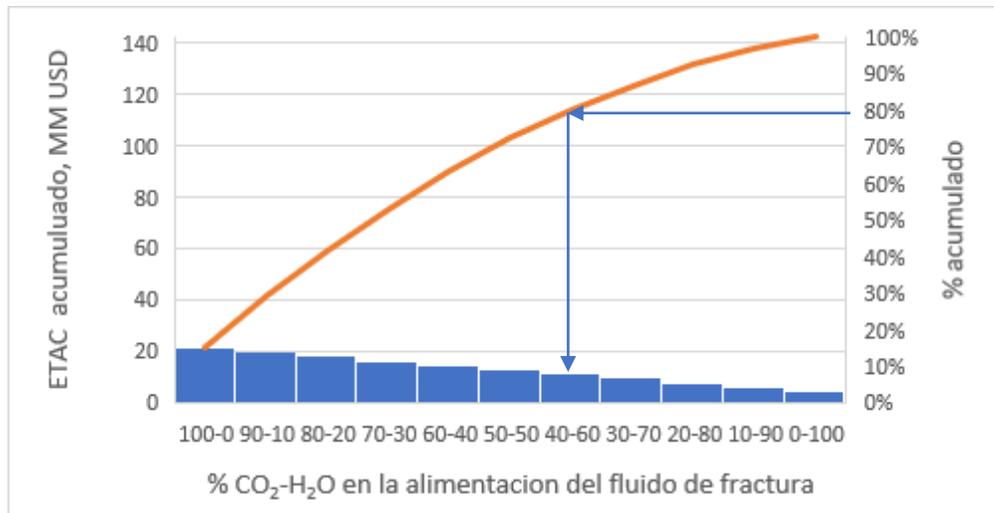
**Tabla 4.2** Comparación de los costos totales anuales y agua requerida de las localizaciones de Reynosa y Ojinaga para casos C y D.

%CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O	Sin incertidumbre		Con incertidumbre		Sin incertidumbre		Con incertidumbre	
	TAC, TAM	TAC, CHH	ETAC, TAM	ETAC, CHH	TWR, TAM	TWR, CHH	ETWR, TAM	ETWR, CHH
0-100	3.63	4.56	3.59	4.54	199.47	89.80	205.22	89.50
10-90	5.37	6.20	5.31	6.18	184.56	88.90	189.79	88.70
20-80	7.13	7.85	7.06	7.82	168.46	88.00	173.53	87.75
30-70	8.89	9.50	8.84	9.43	152.35	87.10	156.66	86.53
40-60	10.66	11.16	10.60	11.12	136.18	85.00	138.98	84.52
50-50	12.45	12.84	12.38	12.79	117.17	81.50	119.44	80.88
60-40	14.25	14.54	14.17	14.47	94.84	74.40	97.03	73.69
70-30	16.03	16.25	15.95	16.18	71.13	61.60	72.93	61.15
80-20	17.84	17.97	17.75	17.89	47.42	44.60	48.62	44.36
90-10	19.64	19.69	19.57	19.59	23.71	23.71	25.06	24.31
100-0	21.43	21.43	21.25	21.25	0.00	0.00	0.00	0.00

Finalmente, para el Caso D, se genera una curva de Pareto para cada localización, con el fin de encontrar la solución óptima de alimentación (ver las Figuras 4.2 y 4.3).



**Figura 4.2** Curva de Pareto para Reynosa, Caso D



**Figura 4.3** Curva de Pareto para Ojinaga, Caso D

Las **Figuras 4.2 y 4.3** indican nuevamente que el rango óptimo de alimentación del fluido de fractura es igual al de los casos anteriores. Como se mostró anteriormente, la incertidumbre tiene un leve impacto sobre la variación del ETAC y ETWR requeridos (comparando con el caso C son prácticamente iguales), por lo que aun con incertidumbre el porcentaje óptimo de alimentación estará en el rango de 30-60% a 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O y el factor decisivo será el agua fresca que se desee emplear.

## Conclusión

En este trabajo se ha propuesto un nuevo modelo de programación matemática para la gestión óptima del agua y el CO<sub>2</sub> como fluidos de fractura, en la producción de gas shale teniendo en cuenta aspectos económicos y ambientales. El objetivo económico consiste en la minimización del costo total anual (aspecto económico), que es igual a la suma de los costos totales de capital y operación. De manera similar, los aspectos ambientales involucraron la minimización del total de agua fresca requerida y la mitigación de CO<sub>2</sub> en el medio ambiente utilizando ambos como fluido de fractura para realizar la fractura hidráulica en lugar de solo agua fresca. Dado que el uso de CO<sub>2</sub> reduce el consumo de agua fresca, se necesitaban tecnologías modernas (tratamiento de agua, captura de CO<sub>2</sub> y redes de agua reciclada/reutilizada) para lograr este objetivo. Además de la correcta disposición de las corrientes residuales cumpliendo con las normas ambientales y gubernamentales. De esta forma, el modelo de programación matemática propuesto determina el número de pozos/tanques de almacenamiento, tecnologías de tratamiento de agua y adsorción de CO<sub>2</sub>, así como sus capacidades. Lo más importante es que el modelo toma en cuenta las limitaciones de agua fresca, la disponibilidad máxima de agua por semana, el agua fresca proporcionada cada año y el agua disponible durante una semana según la ubicación geográfica (regiones afectadas por sequías).

Se consideró un caso de estudio para dos importantes regiones con reservas de gas shale en México. Los resultados determinaron que la incorporación de CO<sub>2</sub> como fluido de fractura para el proceso de fractura hidráulica reduce en gran medida el uso de agua fresca. Sin embargo, el costo anual total aumenta considerablemente en relación con la cantidad de CO<sub>2</sub> presente en el fluido de fractura, porque el costo operativo total del CO<sub>2</sub> (adsorción de CO<sub>2</sub>) es mucho más alto que el costo operativo total del agua (tratamiento y suministro de agua). En el Caso A, se puede observar que el TAC aumenta en un rango de 59-32% cada vez que el porcentaje de CO<sub>2</sub> aumenta en un 10%, pero el agua dulce requerida (TWR) disminuye hasta en un 10%. De la misma forma, en el Caso B, el TAC aumenta un 33% pero la TWR disminuye en un rango de 10-50%. Por último, en el Caso C el TAC aumenta de 48% a 9% para Tamaulipas mientras que en Ojinaga el TAC aumenta de 36% a 9%. Cabe señalar que aun cuando el TAC aumenta en mayor proporción para Tamaulipas en comparación a Ojinaga, el TAC de Ojinaga siempre es mayor que el de Tamaulipas ya que el agua disponible para Ojinaga es menor que el de Tamaulipas. De igual manera, la TWR para Tamaulipas disminuye de 7.5% a un 50% mientras que para Ojinaga disminuye de 1% a un 47%.

Finalmente, mediante las curvas de Pareto se puede concluir que el rango de alimentación que va del 100-0% hasta el 60-40% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O respectivamente, son los que nos dan los costos totales anuales mayores. Por lo tanto, una solución factible se encuentra en el rango de 70-30% al 0-100% de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O, sin embargo, se debe considerar que para encontrar el mejor porcentaje de alimentación de CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O dependerá también del agua fresca que se quiera consumir.

## Referencias Bibliográficas

- [1] Bianco, V., Scarpa, F., Tagliafico, LA. Analysis and future outlook of natural gas consumption in the Italian residential sector. *Energy Convers Manage* 2014;87:754–64. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.07.081>
- [2] Rimos, A., Hoadley, AFA., Brennan, DJ. Determining the economic consequences of natural gas substitution. *Energy Convers Manage* 2014;85:709–17. doi:10.1016/j.enconman.2014.03.012
- [3] Melikoglu, M. Shale gas: analysis of its role in the global energy market. *Renew Sustain Energy Rev* 2014;37:460–8. doi:10.1016/j.rser.2014.05.002
- [4] Eaton, TT. Science-based decision-making on complex issues: Marcellus shale gas hydrofracking and New York City water supply. *Science Total Environment* 2013;461–462:158–69. doi: 10.1016/j.scitotenv.2013.04.093
- [5] Karavalakis, G., Durbin, TD., Villela, M., Miller, JW. Air pollutant emissions of lightduty vehicles operating on various natural gas compositions. *Journal Natural Gas Science Engineering* 2012;4:8–16. doi:10.1016/j.jngse.2011.08.005
- [6] de la Vega Navarro, A., Ramírez-Villegas, J. El Gas de Lutitas (Shale Gas) en México: Recursos, explotación, usos, impactos. *Economía UNAM*, 2015 12(34), 79-105. [http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1665952X2015000100006&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1665952X2015000100006&lng=es&tlng=es). [Accessed 18 April 2021].
- [7] Durand, B. Petroleum, natural gas and coal: nature, formation mechanisms, future prospects in the energy transition. *EDP Sciences* 17, avenue du Hoggar Parc d'activités de Courtaboeuf, BP 112 91944 Les Ulis Cedex A, France 2019:101–52.
- [8] Centre for Energy Economics Research and Policy. UK. BP Statistical review of world energy, 2019. <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html> [Accessed 19 April 2021].
- [9] Zou, C., Zhao, Q., Zhang, G., Xiong, B. Energy revolution: from a fossil energy era to a new energy era. *Natural Gas Industry B* 2016;3(1):1–11. <https://doi.org/10.1016/j.ngib.2016.02.001>

- [10] Bellani, J., Verma, H. K., Khatri, D., Makwana, D., Shah, M. Shale gas: a step toward sustainable energy future. *Journal of Petroleum Exploration and Production Technology*, 2021, 11(5), 2127–2141. doi:10.1007/s13202-021-01157-7
- [11] U.S. Energy Information Administration (EIA). U.S. 2012 Annual Energy Outlook with Projects to 2035. Washington, DC: US Department of Energy, 2012. [https://www.eia.gov/outlooks/aeo/er/pdf/0383er\(2012\).pdf](https://www.eia.gov/outlooks/aeo/er/pdf/0383er(2012).pdf) [Accessed May 2021].
- [12] IEA (International Energy Agency). Golden rules for a golden age of gas: world energy outlook special report on unconventional gas; 2012. [https://iea.blob.core.windows.net/assets/8422ef9a-9ae8-4637-ab1c-ddb160ab7c59/WEO\\_2012\\_Special\\_Report\\_Golden\\_Rules\\_for\\_a\\_Golden\\_Age\\_of\\_Gas.pdf](https://iea.blob.core.windows.net/assets/8422ef9a-9ae8-4637-ab1c-ddb160ab7c59/WEO_2012_Special_Report_Golden_Rules_for_a_Golden_Age_of_Gas.pdf) [Accessed 8 June 2019].
- [13] Villaflor, G., Morales, G., Velasco, J. Variables Significativas del Proceso de Combustión del Gas Natural. *Información Tecnológica*, 2018, Vol. 19(4), 57-62. doi:10.1612/inf.tecnol.3883it.07
- [14] Veselý, V., Miloslav, H., Trnka, o., Fetsch, D. Performance of an afterburner chamber with a natural gas burner, 1996, *Fuel*: 75(11), 1271-1273. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(96\)00109-3](https://doi.org/10.1016/0016-2361(96)00109-3)
- [15] Khoshnoodi, M., Lim, Y.S. Simulation of partial oxidation of natural gas to synthesis gas using ASPEN PLUS. *Fuel Processing Technology*, 1997, 50(2-3), 275-289. [https://doi.org/10.1016/S0378-3820\(96\)01079-X](https://doi.org/10.1016/S0378-3820(96)01079-X)
- [16] Weber, R., Orsino, S., Lallemand, N., Verlaan, A. Combustion of natural gas with high-temperature air and large quantities of flue gas, *Symposium (International) on Combustion*, 2000 28(1), 1315-1321. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(00\)80345-8](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(00)80345-8)
- [17] Sonibare, J.A., Akeredolu, F.A. A theoretical prediction of non-methane gaseous emissions from natural gas combustion. *Energy Policy*, 2004, 32(14), 1653-1665. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2004.02.008>

- [18] Westbrook, C. K., Mizobuchi, Y., Poinso, T. J., Smith, P. J., & Warnatz, J. Computational combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1), 125–157. doi:10.1016/j.proci.2004.08.275
- [19] Fuss, S., Szolgayova, J., Obersteiner, M., Gusti, M. Investment under market and climate policy uncertainty. *Appl. Energy*, 2008 85, 708–721. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2008.01.005>
- [20] Veil, J. A. Water management technologies used by Marcellus Shale gas producers, 2010, Argonne National Laboratory Argonne, IL. <http://www.evs.anl.gov/pub/doc/Water%20Mgmt%20in%20Marcellus-final-jul10.pdf>
- [21] Middleton, R., Viswanathan, H., Currier, R., Gupta, R. CO<sub>2</sub> as a fracturing fluid: Potential for commercial-scale shale gas production and CO<sub>2</sub> sequestration. *Energy Procedia*, 2014, 63, 7780–7784. DOI:10.1016/j.egypro.2014.11.812
- [22] Ishida, T., Aoyagi, K., Niwa, T., Chen, Y., Murata, S., Chen, Q., Nakayama, Y. Acoustic emission monitoring of hydraulic fracturing laboratory experiment with supercritical and liquid CO<sub>2</sub>. *Geophysical Research Letters*, 2014, 39(16), n/a–n/a. DOI:10.1029/2012gl052788
- [23] Luo, F., Xu, R.N., Jiang, P.X. Numerical investigation of the influence of vertical permeability heterogeneity in stratified formation and of injection/production well perforation placement on CO<sub>2</sub> geological storage with enhanced CH<sub>4</sub> recovery. *Appl. Energy*, 2012, 102, 1314–1323. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.07.008>
- [24] Almutlaq, A., Kazantzi, V., El-Halwagi, M. M. An algebraic approach to targeting waste discharge and impure-fresh usage via material recycle/reuse networks. *Clean Technol. Environ. Policy*, 2005, 7 (4), 294–305. <https://doi.org/10.1007/s10098-005-0005-8>
- [25] Qin, X., Gabriel, F., Harell, D., El-Halwagi, M. M. Algebraic techniques for property integration via componentless design. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2004, 43, 3792–3798. <https://doi.org/10.1021/ie034183k>

- [26] Gabriel, F., El-Halwagi, M. M. Simultaneous synthesis of waste interception and material reuse networks: Problem reformulation for global optimization. *Environ. Prog.* 2005, 24 (2), 171–180.
- [27] Yang, L., Grossmann, I. E. Water targeting models for simultaneous flowsheet optimization. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2013, 52 (9), 3209–3224. <https://doi.org/10.1021/ie301112r>
- [28] Yu, J. Q., Chen, Y., Shao, S., Zhang, Y., Liu, S. L., Zhang, S. S. A study on establishing an optimal water network in a dyeing and finishing industrial park. *Clean Technol. Environ. Policy* 2014, 16 (1), 45–57. <https://doi.org/10.1007/s10098-013-0592-8>
- [29] Ponce-Ortega, J. M., Hortua, A. C., El-Halwagi, M. M., Jimenez-Gutierrez, A. A property-based optimization of direct recycle networks and wastewater treatment processes. *AIChE J.* 2009, 55 (9), 2329–2344. <https://doi.org/10.1002/aic.11828>
- [30] Ponce-Ortega, J. M., El-Halwagi, M. M., Jimenez-Gutierrez, A. Global optimization of property-based recycle and reuse networks including environmental constraints. *Comput. Chem. Eng.* 2010, 34 (3), 318–330. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2009.10.005>
- [31] Napoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M., El-Halwagi, M. M., Jimenez-Gutierrez, A. Global optimization of mass and property integration networks with in-plant property interceptors. *Chem. Eng. Sci.* 2010, 65 (15), 4363–4377. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.03.051>
- [32] Lira-Barragan, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., El-Halwagi, M. M. An MINLP model for the optimal location of the new industrial plant with simultaneous consideration of economic and environmental criteria. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2011, 50 (2), 953–964. <https://doi.org/10.1021/ie101897z>
- [33] Lira-Barragan, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., El-Halwagi, M. M. Synthesis of water networks considering the sustainability of the surrounding watershed. *Comput. Chem. Eng.* 2011, 35, 2837–2852. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011.03.021>
- [34] Lira-Barragan, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Nápoles-Rivera, F., Serna-Gonzalez, M., El-Halwagi, M. M. Incorporating property-based water networks and surrounding watersheds in site selection of industrial facilities. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2012, 52 (1), 91–107. <https://doi.org/10.1021/ie3003792>

- [35] Cafaro, DC., Grossmann, I. E. Strategic planning, design, and development of the shale gas supply chain network. *AICHE J.* 2014;60(6): 2122–2142. <https://doi.org/10.1002/aic.14405>
- [36] Chen, Y., He, L., Li, J., Zhang, S. (2018). Multi-criteria design of shale-gas-water supply chains and production systems towards optimal life cycle economics and greenhouse gas emissions under uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 109, 216–235. doi:10.1016/j.compchemeng.2017.11.014
- [37] Wang M, Xu Q. Optimal design and operation for simultaneous shale gas NGL recovery and LNG re-gasification under uncertainties. *Chem Eng Sci.* 2014;112:130–142. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.03.021>
- [38] Knudsen, B. R., Grossmann, I. E, Foss, B., Conn, A. R. Lagrangian relaxation based decomposition for well scheduling in shale-gas systems. *Comp Chem Eng.* 2014;63:234–249. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.02.005>
- [39] Gao, J., You, F. Deciphering and handling uncertainty in shale gas supply chain design and optimization: Novel modeling framework and computationally efficient solution algorithm. *AICHE J.* 2015, 61 (11), 3739–3755. <https://doi.org/10.1002/aic.15032>
- [40] Napoles-Rivera, F., Rojas-Torres, M. G., Ponce-Ortega, J. M., Serna-Gonzalez, M., El-Halwagi, M. M. Optimal design of macroscopic water networks under parametric uncertainty. *J. Cleaner Prod.* 2015, 88, 172–184. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2014.05.002>
- [41] Broad, D. R., Dandy, G. C., Maier, H. R. A systematic approach to determining metamodel scope for risk-based optimization and its application to water distribution system design. *Environmental Modelling and Software* 2015, 69, 382–395. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2014.11.015>
- [42] Khor, C. S., Chachuat, B., Shah, N. Fixed-flowrate total water network synthesis under uncertainty with risk management. *J. Cleaner Prod.* 2014, 77, 79–93. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2014.01.023>
- [43] Ahn, J., Kang, D. Optimal planning of water supply system for long-term sustainability. *Journal of Hydro-Environment Research* 2014, 8 (4), 410–420. <https://doi.org/10.1016/j.jher.2014.08.001>

- [44] Islam, S. M., Sadiq, R., Rodriguez, M. J., Najjaran, H., Hoorfar, M. Reliability assessment for water supply systems under uncertainties. *Journal of Water Resources Planning and Management* 2014, 140 (4), 468–479. DOI:10.1061/(ASCE)WR.1943-5452.0000349
- [45] Yang, L., Salcedo-Diaz, R., Grossmann, I. E. Water network optimization with wastewater regeneration models. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2014, 53 (45), 17680–17695. <https://doi.org/10.1021/ie500978h>
- [46] Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., El-Halwagi, M. M. Optimal reuse of flowback wastewater in hydraulic fracturing including seasonal and environmental constraints. *AIChE Journal*, 2016, 62(5), 1634–1645. <https://doi.org/10.1002/aic.15167>
- [47] Kang, S.M., Fathi, E., Ambrose, R.J., Akkutlu, I.Y., Sigal, R.F. Carbon dioxide storage capacity of organic-rich shales. *SPE J*, 2011, 16, 842–855. <https://doi.org/10.2118/134583-PA>
- [48] Dahaghi, A.K. Numerical simulation and modeling of enhanced gas recovery and CO<sub>2</sub> sequestration in shale gas reservoirs: a feasibility study. In: *SPE International Conference on CO<sub>2</sub> Capture, Storage, and Utilization*. Society of Petroleum Engineers, 2010, New Orleans, Louisiana, USA. <https://doi.org/10.2118/139701-MS>
- [49] Schepers, K.C., Nuttall, B.C., Oudinot, A.Y., Gonzalez, R.J. Reservoir modeling and simulation of the devonian gas shale of Eastern Kentucky for enhanced gas recovery and CO<sub>2</sub> storage. In: *SPE International Conference on CO<sub>2</sub> Capture, Storage, and Utilization*, 2009. Society of Petroleum Engineers, San Diego, California, USA. <https://doi.org/10.2118/126620-MS>
- [50] Arnedo-Cárdenas, A. E., Yunes-Cañate, K. M. Extracción de gas y petróleo no convencional, y su impacto ambiental. Facultad de Ingeniería, Arquitectura, Artes y Diseño, 2016. Programa de Ingeniería Química. Universidad de San Buenaventura Cartagena, Colombia. [http://bibliotecadigital.usb.edu.co/bitstream/10819/2858/1/Fracking%20Extracci%c3%b3n%20gas\\_Arnedo\\_2015.pdf](http://bibliotecadigital.usb.edu.co/bitstream/10819/2858/1/Fracking%20Extracci%c3%b3n%20gas_Arnedo_2015.pdf) [Accessed November 2021]
- [51] Kenneth J. B., David W. H. Petroleum Resource Assessment of the National Petroleum Reserve in Alaska (NPRA). U.S. Geological Survey, 2012. U.S. Geological Survey, Information

Services Box 25286, Federal Center Denver, CO 80225. <https://pubs.usgs.gov/fs/2002/fs045-02/>  
[Accessed November 2021]

[52] Tailant, J. D., Valls, M., D'Angelo, M. E., Headen, C., Roeloffs, A. «Fracking Argentina,» Centro de Derechos Humanos y Ambiente & ECOJURE, Córdoba, Argentina, 2013.

[53] Revista Petroquímica. Fractura espumada con dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>). San Antonio International, Aguada del Cajón Neuquen, Argentina 2016.  
<https://www.revistapetroquimica.com/san-antonio-realizo-la-mayor-fractura-con-co%e2%82%82-a-nivel-regional>. (Accessed Dec 2021).

[54] Middleton, R., Viswanathan, H., Currier, R., Gupta, Rajan. CO<sub>2</sub> as a fracturing fluid: Potential for commercial-scale shale gas production and CO<sub>2</sub> sequestration. Energy Procedia, 2014, 63, 7780–7784. DOI:10.1016/j.egypro.2014.11.812

[55] Song, X., Guo, Y., Zhang, J., Sun, N., Shen, G., Chang, X., Yu, W., Tang, Z., Chen, W., Wei, W., Wang, L., Zhou, J., Li, X., Li, X., Zhou, J., Xue, Z. Fracturing with carbon dioxide: From microscopic mechanism to reservoir application. Joule, 2019, 3, 1913-1926. DOI:10.1016/j.joule.2019.05.004

[56] Ernest Scheyder. Fracking with CO<sub>2</sub> to replace water a distant goal, GE says. Reuters, 2014  
<http://www.reuters.com/article/generalelectric-fracking-carbon-idUSL1N0MT1HN20140407>  
[Accessed December 2021].

[57] Opedal, N. V. T., Torsæter, M., Vrålstad, T., Cerasi, P. Potential Leakage Paths along Cement-formation Interfaces in Wellbores; Implications for CO<sub>2</sub> Storage. Energy Procedia, 2014, 51, 56–64. DOI:10.1016/j.egypro.2014.07.007

[58] SINTEF Petroleum Research. ScienceDirect, 2013. Potential Leakage Paths along Cement-Formation Interfaces in Wellbores; Implications for CO<sub>2</sub> Storage. [http://ac.els-cdn.com/S1876610214008698/1-s2.0-S1876610214008698-main.pdf?\\_tid=7242ccb4-73e7-11e5-bafe-00000aacb360&acdnat=1444987539\\_d388314587f74e9678b5ac2b34ca16d9](http://ac.els-cdn.com/S1876610214008698/1-s2.0-S1876610214008698-main.pdf?_tid=7242ccb4-73e7-11e5-bafe-00000aacb360&acdnat=1444987539_d388314587f74e9678b5ac2b34ca16d9)  
[Accessed December 2021].

[59] Corsano, G., Montan, J., Aguirre, P. Design and planning optimization of multiplant complexes in the food industry, *Food and Bioproducts Processing*, 2007, 85, 381-388. <https://doi.org/10.1205/fbp07072>

[60] Acevedo, L. González, E. Diseño de plantas discontinuas para instalaciones de la industria química y fermentativas, Ed. Vías para el Desarrollo de Instalaciones de la Industria Química y Fermentativa en Condiciones de Incertidumbre, 1999, Ciudad de La Habana. [http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S222461852013000100002&lng=es&tlng=es](http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S222461852013000100002&lng=es&tlng=es). [Accessed December 2021].

[61] Brooke, A., Kendrick, D., Meeruas, A., Raman, R. GAMS: A Users Guide. GAMS Development Corporation, Washington, DC, 2015. [https://www.gams.com/35/docs/UG\\_MAIN.html](https://www.gams.com/35/docs/UG_MAIN.html). [Accessed December 2021].

[62] Eguiluz de Antuñano, S. Sinopsis geológica de la Cuenca de Burgos, noreste de México: producción y recursos petroleros. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, 2011, 63(2), 323-332. [http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S140533222011000200013&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S140533222011000200013&lng=es&tlng=es) [Accessed December 2021].

[63] Weijermars, R., Sorek, N., Sen, D., Ayers, W. B. Eagle Ford Shale play economics: U.S. versus Mexico. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2017, 38, 345–372. DOI:10.1016/j.jngse.2016.12.009

[64] CONAGUA, Subdirección general técnica gerencia de aguas subterráneas. Actualización de la disponibilidad media anual de agua en el acuífero bajo Río Bravo (2801). Estado de Tamaulipas, 2020. [https://sigagis.conagua.gob.mx/gas1/Edos\\_Acuiferos\\_18/tamaulipas/DR\\_2801.pdf](https://sigagis.conagua.gob.mx/gas1/Edos_Acuiferos_18/tamaulipas/DR_2801.pdf). [Accessed Dec 2021].

[65] CONAGUA, Subdirección general técnica gerencia de aguas subterráneas. Actualización de la disponibilidad media anual de agua en el acuífero Alamo Chapo (0842). Estado de Chihuahua, 2020. [https://sigagis.conagua.gob.mx/gas1/Edos\\_Acuiferos\\_18/chihuahua/DR\\_0842.pdf](https://sigagis.conagua.gob.mx/gas1/Edos_Acuiferos_18/chihuahua/DR_0842.pdf). [Accessed Dec 2021].

[66] CONAGUA. Monitor de Sequia de Mexico (MSM). Gobierno de Mexico, 2021. <https://smn.conagua.gob.mx/es/climatologia/monitor-de-sequia/monitor-de-sequia-en-mexico>. [Accessed Dec 2021].

[67] Hayes T. Sampling and analysis of water streams associated with the development of Marcellus shale gas. Marcellus Shale Initiative Publications Database, 2009. <http://energyindepth.org/wp-content/uploads/marcellus/2012/11/MSCCommission-Report.pdf>

(Accessed Dec 2021)

[68] Slutz, J., Anderson, J., Broderick, R., Horner, P. Key Shale Gas water management strategies: an economic assessment tool. SPE/APPEA International Conference on Health, Safety, and Environment in Oil and Gas Exploration and Production, Perth, Australia, 2012. DOI:10.2118/157532-MS

[69] Shaffer, D.L., Arias-Chavez, L.H., Ben-Sasson, M., Romero-Vargas, S., Yip, N.Y., Elimelech, M. Desalination and reuse of high-salinity shale gas produced water: drivers, technologies, and future directions. *Environmental Science and Technology*, 2013, 47(17), 9569-9583. DOI:10.1021/es401966e

[70] Gunter, W.D., Wong, S., Cheel, D.B., Sjoström, G. Large CO<sub>2</sub> sinks: their role in the mitigation of greenhouse gases from an international, national (Canadian) and provincial (Alberta) perspective. *Appl. Energy*, 1998, 61, 209–227. [https://doi.org/10.1016/S0306-2619\(98\)00042-7](https://doi.org/10.1016/S0306-2619(98)00042-7)

[71] Consejo de Administración de la Comisión Municipal de Agua Potable y Alcantarillado del Municipio de Reynosa, Tamaulipas. Actualización de las tarifas del servicio de agua para el ejercicio fiscal 2020. Periódico Oficial del Estado de Tamaulipas, 2020. <http://po.tamaulipas.gob.mx/wp-content/uploads/2020/02/cxlv-25-260220F.pdf> [Accessed Dec 2021].

[72] Junta Municipal de Agua y Saneamiento de Chihuahua. Tarifa para el cobro del servicio público para el año 2021 de la junta municipal de agua y saneamiento de Chihuahua. Periódico Oficial del Estado de Chihuahua, 2020. [http://www.puentelibre.mx/noticia/jmas\\_tarifas\\_actualizacion\\_2021\\_metros\\_cubicos\\_usuarios\\_diciembre\\_2020/](http://www.puentelibre.mx/noticia/jmas_tarifas_actualizacion_2021_metros_cubicos_usuarios_diciembre_2020/) [Accessed Dec 2021].

[73] Ali, H., Eldrup, N. H., Normann, F., Skagestad, R., Øi, L. E. Cost estimation of CO<sub>2</sub> absorption plants for CO<sub>2</sub> Mitigation – Method and assumptions. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 2019, 88, 10–23. DOI:10.1016/j.ijggc.2019.05.028

[74] Ho, M. T., Allinson, G. W., Wiley, D. E. Reducing the cost of CO<sub>2</sub> capture from flue gases using pressure swing adsorption. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2008, 47(14), 4883–4890. DOI:10.1021/ie070831e.