

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUERÉTARO

FACULTAD DE QUÍMICA

**DISEÑO DE LA DISTRIBUCIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO
PARA SU OPERACIÓN SOSTENIBLE**

TESIS DE POSGRADO

**QUE COMO PARTE DE LOS REQUISITOS PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS DE LA ENERGÍA**

Presenta

Alan Alberto Vázquez Arvizu

255202

Dirigido por

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Querétaro, Qro. a 03 de diciembre de 2025

La presente obra está bajo la licencia:
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>



CC BY-NC-ND 4.0 DEED

Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional

Usted es libre de:

Compartir — copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato

La licenciante no puede revocar estas libertades en tanto usted siga los términos de la licencia

Bajo los siguientes términos:



Atribución — Usted debe dar [crédito de manera adecuada](#), brindar un enlace a la licencia, e [indicar si se han realizado cambios](#). Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que usted o su uso tienen el apoyo de la licenciante.



NoComercial — Usted no puede hacer uso del material con [propósitos comerciales](#).



SinDerivadas — Si [remezcla, transforma o crea a partir](#) del material, no podrá distribuir el material modificado.

No hay restricciones adicionales — No puede aplicar términos legales ni [medidas tecnológicas](#) que restrinjan legalmente a otras a hacer cualquier uso permitido por la licencia.

Avisos:

No tiene que cumplir con la licencia para elementos del material en el dominio público o cuando su uso esté permitido por una [excepción o limitación](#) aplicable.

No se dan garantías. La licencia podría no darle todos los permisos que necesita para el uso que tenga previsto. Por ejemplo, otros derechos como [publicidad, privacidad, o derechos morales](#) pueden limitar la forma en que utilice el material.



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Química
Maestría en Ciencias de la Energía

DISEÑO DE LA DISTRIBUCIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO VERDE PARA SU OPERACIÓN SOSTENIBLE

Tesis de posgrado

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de

Maestro en Ciencias de la Energía

Presenta

Ing. Alan Alberto Vázquez Arvizu.

Dirigido por:

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Dr. Luis Fabián Fuentes Cortés

Secretario

Dra. Elizabeth Mas Hernández

Vocal

Dr. Jorge Noel Gracida Rodríguez

Suplente

Dr. Gonzalo Macías Bobadilla

Suplente

Centro Universitario, Querétaro, Qro.

Fecha de aprobación por el Consejo Universitario diciembre 2025

México



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Química
Maestría en Ciencias de la Energía



DISEÑO DE LA DISTRIBUCIÓN DE UNA PLANTA DE PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO VERDE PARA SU OPERACIÓN SOSTENIBLE

Tesis de posgrado

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de

Maestro en Ciencias de la Energía

Presenta

Ing. Alan Alberto Vázquez Arvizu.

Dirigido por:

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Director

Dr. Luis Fabián Fuentes Cortés

Secretario

Dra. Elizabeth Mas Hernández

Vocal

Dr. Jorge Noel Gracida Rodríguez

Suplente

Dr. Gonzalo Macías Bobadilla

Suplente

Flores, cuya guía y paciencia fueron un enorme motor para lograr las metas propuestas a lo largo de mi estancia en el programa de posgrado de la Facultad de Química.

Declaro que los datos y resultados de esta investigación se obtuvieron éticamente, y son producto del trabajo realizado para esta tesis. He procurado ofrecer la información detallada suficiente para que los hallazgos aquí reportados puedan ser replicados en trabajos futuros. Además, confirmo que este documento es completamente original y que cualquier material, idea o texto proveniente de terceros ha recibido el crédito y reconocimiento apropiado.



A handwritten signature in blue ink, consisting of stylized, overlapping loops and strokes, positioned above a horizontal line.

Ing. Alan Alberto Vázquez Arvizu

Tabla de contenido

RESUMEN.....	10
1 INTRODUCCIÓN.....	11
1.1 Contexto general	11
1.2 Planteamiento del problema	11
1.3 Justificación.....	12
2 ANTECEDENTES.....	12
2.1 Riesgos en las plantas de hidrógeno.....	12
2.2 Importancia de la optimización del diseño de la distribución de plantas de proceso.....	13
2.3 Accidentes en plantas de hidrógeno.....	14
2.4 El problema de distribución de las instalaciones de una planta (FLP).....	16
2.5 Modelos de optimización para el diseño de distribución de instalaciones de procesos químicos.....	16
2.6 Panorama actual de la industria energética del hidrógeno.....	19
2.7 Evaluación de riesgos.....	19
2.8 Análisis Cuantitativo de Riesgos (QRA).....	20
3 HIPÓTESIS.....	21
4 OBJETIVOS.....	22
4.1 Objetivo General.....	22
4.2 Objetivos Específicos.....	22
5. METODOLOGÍA	23
5.1 Caso de estudio (planta de hidrógeno de 1500 kg/día).....	23
5.2 Agrupación de equipos en clústeres para el modelado de optimización	36
5.3 Modelado del diseño de la distribución de equipos.....	37
5.3.1 Restricción de orientación de equipos	37
5.3.2 Restricción de no superposición.....	38
5.3.3 Restricción de distancia entre equipos.....	39
5.4 Análisis económico	40
5.4.1 Gastos de capital (CAPEX).....	41
5.4.2 Gastos Operativos (OPEX).....	43
5.4.3 Función objetivo con consideraciones económicas	50

5.5	Análisis de identificación de peligros: Análisis Funcional de Operatividad (HAZOP).....	50
5.6	Integración con HyRAM+.....	52
5.7	Cuantificación de frecuencias de fallos y escenarios peligrosos	54
5.7.1	Modelado de frecuencias de fugas.....	54
5.7.2	Frecuencia de fallos de HYRAM+.....	55
5.7.3	Evolución de escenarios	57
5.8	Modelado físico y evaluación de consecuencias	59
5.8.1	Modelado de flujo y dispersión	59
5.8.2	Modelado de efectos físicos	59
5.8.3	Método Baker-Strehlow-Tang (BST) para sobrepresión.....	62
5.8.4	Modelos Probit para cuantificación de daños.....	63
5.8.5	Mecanismos y cuantificación de propagación de accidentes (efecto dominó).....	65
5.8.6	Factor de Tolerancia al Riesgo (FTR).....	67
5.8.7	Restricciones de seguridad basadas en umbrales OGP	67
5.8.8	Distancias mínimas de seguridad	68
5.9	Función Objetivo.....	69
5.10	Aceptabilidad del riesgo	70
5.10.1	Criterios finales de evaluación de aceptabilidad post-optimización	71
5.10.2	Limitaciones y consideraciones	72
6.	RESULTADOS Y ANÁLISIS	74
6.1	Análisis preliminar de identificación de peligros (HAZOP)	74
6.1.1	Alcance y metodología del análisis.....	74
6.1.2	Definición de nodos	74
6.1.3	Estructura del análisis de desviaciones	78
6.1.4	Resultados del análisis por nodo	78
6.1.5	Síntesis de hallazgos críticos.....	87
6.1.6	Conexión de hallazgos críticos con la cuantificación de riesgos.....	87
6.2	Resultados de la optimización espacial	88
6.2.1	Arreglo óptimo resultante	88
6.2.2	Matriz de distancias entre clústeres.....	89
6.2.3	Verificación de restricciones espaciales	91
6.3	Análisis económico del arreglo optimizado	93

6.3.1 Inversión inicial de capital (CAPEX).....	93
6.3.2 Costos operativos anuales (OPEX).....	96
6.4 Evaluación cuantitativa de Riesgos (QRA)	98
6.4.1 Frecuencias de fuga por clúster.....	98
6.4.2 Distribución de escenarios según secuencia de eventos.....	100
6.4.3 Análisis de efectos físicos	101
6.4.4 Cuantificación del riesgo de efecto dominó	110
7. CONCLUSIONES	113
REFERENCIAS	116

Índice de Tablas

Tabla 1. Información de los flujos del diagrama.	33
Tabla 2. Clústeres de la planta definidos en el modelo matemático.	36
Tabla 3. Costos de adquisición e instalación de los equipos de la planta del caso de estudio (Harvego et al., 2012), los cuales corresponden al año 2010.	41
Tabla 4. Costos indirectos de capital depreciable.	43
Tabla 5. Parámetros de energía para las bombas del proceso.	44
Tabla 6. Insumos materiales para la planta.	45
Tabla 7. Densidades parametrizadas para los flujos del proceso.	48
Tabla 8. Palabras guía método HAZOP (<i>Protección Civil, 1994</i>).	52
Tabla 9. Parámetros para frecuencias de fugas de componentes individuales.	55
Tabla 10. Probabilidades de ignición según el caudal de fuga de hidrógeno.	58
Tabla 11. Modelos Probit para diferentes equipos y escenarios.	64
Tabla 12. Umbrales OGP por categoría de equipo.	68
Tabla 13. Parámetro: Temperatura, Nodo 2.	80
Tabla 14. Parámetro: Presión, Nodo 2.	81
Tabla 15. Parámetro: Integridad del sistema, nodo 2.	81
Tabla 16. Parámetro: Eficiencia de separación, Nodo 3.	82
Tabla 17. Parámetro: Contención del hidrógeno, Nodo 3.	83
Tabla 18. Parámetro: Integridad del intercambiador, Nodo 4.	84
Tabla 19. Parámetro: Control de la combustión, Nodo 5.	85
Tabla 20. Parámetro: Separación del oxígeno, Nodo 6.	86
Tabla 21. Ubicación y dimensiones de los clústeres en el arreglo optimizado.	88
Tabla 22. Matriz de distancias rectilíneas entre pares de clústeres.	91
Tabla 23. Verificación de cumplimiento de restricciones espaciales.	92
Tabla 24. Costos de equipamiento por clúster.	93
Tabla 25. Costos y detalles de las interconexiones.	94
Tabla 26. Resumen de costos de capital (fijos).	95
Tabla 27. Costos operativos anuales.	96
Tabla 28. Gasto energético detallado de la Bomba 1.	97
Tabla 29. Gasto energético detallado de la Bomba 2.	97
Tabla 30. Frecuencias de fuga por clúster y tamaño de fuga (eventos/año).	99
Tabla 31. Distribución de escenarios peligrosos por clúster (eventos/año).	100
Tabla 32. Parámetros de liberación y geometría de chorros por tamaño de fuga.	102
Tabla 33. Parámetros de llamas para escenarios críticos (clúster 1).	105
Tabla 34. Distancias de alcance para umbrales de radiación térmica OGP.	105

Índice de Figuras.

Figura 1. Diagrama de proceso de la planta de producción de hidrógeno por HTE de referencia (Harvego et al., 2012).	24
Figura 2. Esquema simple del mecanismo del SOE.....	25
Figura 3. Diagrama del módulo 1.....	26
Figura 4. Diagrama del módulo 2.....	27
Figura 5. Diagrama del módulo 3.....	28
Figura 6. Diagrama del módulo 4.....	28
Figura 7. Diagrama del módulo 5.....	29
Figura 8. Diagrama del módulo 6.....	30
Figura 9. Diagrama del módulo 7.....	31
Figura 10. Restricción de orientación de equipos.....	38
Figura 11. Restricción de no superposición.	39
Figura 12. Restricción de distancia entre equipos.	41
Figura 13. Diagrama de flujo de la metodología para Evaluación y aceptabilidad de riesgos (Freeman, 1990).	51
Figura 14. Diagrama de secuencia de eventos usada por HyRAM+ para fugas de hidrógeno.	58
Figura 15. Frecuencia vs magnitud de la consecuencia del riesgo (Daniel A. Crowl & Joseph F. Louvar, 2002).	71
Figura 16. Nodo 1: sistema de suministro de agua.....	75
Figura 17. Nodo 2: Módulo SOE.....	75
Figura 18. Nodo 3: Sistema de separación y recuperación de hidrógeno.	76
Figura 19. Nodo 4: Sistema de recuperación de calor.	76
Figura 20. Nodo 5: Sistema de generación de calor.	77
Figura 21. Nodo 6: Sistema de barrido de oxígeno.....	77
Figura 22. Arreglo optimizado de la planta organizada en Clústeres.	90
Figura 23. Escenario peligroso para fuga al 10% con ignición inmediata (clúster 1).	103
Figura 24. Escenario peligroso para fuga al 100% con ignición inmediata (clúster 1).	104

RESUMEN

La preocupación por la contaminación del aire ha motivado la búsqueda de fuentes de energía alternas menos contaminantes, comparadas con el uso de combustibles fósiles; una de estas alternativas es el hidrógeno. Sin embargo, la seguridad de las instalaciones es un factor crucial en la rentabilidad de los procesos de producción de hidrógeno. Por esta razón, en este trabajo se identificaron los peligros en el proceso de producción de hidrógeno verde, con el propósito de reducir el riesgo de accidentes mediante la optimización del diseño de planta. El procedimiento incluye formular el problema de determinar la disposición física de los equipos e instalaciones como un problema de optimización. La solución permite reducir costos y mejorar la seguridad. Además de identificar los peligros, se generaron escenarios de pérdida de contención de hidrógeno, mediante el uso de modelos de fuente, dispersión y efectos, conocido como análisis de consecuencia, asimismo se aplicó un procedimiento para obtener la frecuencia de estos escenarios peligrosos. Con esta información, se utilizó el análisis cuantitativo del riesgo y la programación matemática para encontrar un arreglo sostenible de este tipo de instalaciones.

Palabras clave: Hidrógeno, energía renovable, análisis de riesgos, optimización, programación matemática.

ABSTRACT

The growing concern over air pollution has driven the search for cleaner alternative energy sources to replace fossil fuels; among these alternatives is hydrogen. However, the safety of hydrogen production facilities is a crucial factor in ensuring the profitability of such processes. For this reason, this work identifies the hazards present in hydrogen production with the aim of reducing accident risk through optimized plant design. The procedure involves formulating the problem of determining the physical layout of equipment and installations as an optimization problem. The resulting solution enables cost reduction and enhanced safety. In addition to identifying hazards, hydrogen loss-of-containment scenarios were developed using source, dispersion, and effects models—collectively known as consequence analysis—and a procedure was applied to estimate the frequency of these hazardous scenarios. Based on this information, quantitative risk analysis and mathematical programming were employed to determine a sustainable arrangement for these facilities.

Key words: hydrogen, renewable energy, risk analysis, optimization, math programming.

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Contexto general

El crecimiento industrial ha contribuido al calentamiento global en las últimas décadas (Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, 2022). Una forma de mitigar este problema es reduciendo las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI), en especial el CO_2 , lo cual ha generado varias iniciativas (MacDowell et al., 2010). Por ejemplo, existen industrias que utilizan el CO_2 para producir biocombustibles (Zang et al., 2021). En estos procesos es indispensable el uso de hidrógeno como materia prima, debido a su alta capacidad energética, baja contaminación y renovabilidad (Rigas y Sklaounos, 2005).

El hidrógeno es utilizado en grandes sectores industriales, dentro de las cuales destacan las empresas alimentarias, cementeras, fertilizantes (Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático, 2022), energéticas y petroleras (Secretaría de Energía, 2016); como ejemplo destacado, la Comisión Federal de Electricidad (CFE), la cual suministra energía eléctrica al 99% de la población mexicana, hace uso de este elemento en su forma gaseosa para generar ambientes inertes en distintos procesos, entre otros (Mexico Energy Partners LLC, 2022).

A pesar de ser un elemento bastante utilizado y estudiado, los procesos que requieren o producen hidrógeno presentan retos de seguridad. Estos desafíos de seguridad se ven amplificados por las propiedades físicas del hidrógeno como su alta inflamabilidad, baja energía de ignición y tendencia a la fuga, que hacen que la distribución espacial de los equipos sea un factor crítico para la prevención y la mitigación de accidentes con el potencial de escalamiento. Una alternativa conveniente para reducir sistemáticamente este riesgo es resolver el problema de diseño de la distribución de los equipos en plantas de procesos.

1.2 Planteamiento del problema

Un diseño de la distribución de los equipos de proceso de producción de hidrógeno adecuado reduce los costos de interconexiones (tubería) y operación (principalmente bombeo) entre los equipos; pero a su vez brinda seguridad a los trabajadores y otros activos de la planta, por ejemplo, al prevenir efectos de escalamiento de accidentes. Por esta razón, Tugnoli et al. (2008) propone considerar los costos de interconexiones entre equipos, transporte de materia prima de un equipo a otro, área (m^2), equipos (adquisición), instalación de cada equipo (incluyendo material eléctrico auxiliar) y también aquellos costos asociados con pérdida de activos, pérdida de salud humana y remediación ambiental.

Mediante la optimización de la distribución de los equipos y con el uso de la información anterior se pueden mejorar aspectos como el aislamiento de factores de riesgo (para prevenir que algún accidente escale), reducir del uso de material con alta propensión a propagar accidentes, aumentar la eficiencia de la operación de la planta, mejorar las posibilidades de no sufrir daño de los operadores en caso de algún accidente y economizar en la cantidad de material para reinstalar los equipos dañados (Lees Frank, 2012).

El modelado de este problema podrá ayudar a minimizar los costos de operación y adquisición de materiales requeridos para la instalación de los componentes de la planta, brindando un nivel de seguridad inherente a las distintas áreas de la planta (Tugnoli et al., 2008). De este modo se estaría encontrando el arreglo óptimo (considerando la seguridad y eficiencia económica) de una planta de producción de hidrógeno.

1.3 Justificación

El hidrógeno es una fuente de energía que posee una densidad energética volumétrica menor a la de los combustibles fósiles convencionales que son más contaminantes (U. S. Department of Energy, 2022). En consecuencia, la tecnología y materiales usados en los recipientes empleados en procesos de producción, transporte y almacenamiento de hidrógeno, en todas las escalas, tienen una cierta susceptibilidad a presentar fallas como fugas, conexiones rotas, aberturas, orificios, entre otras. Lo cual puede derivar en liberaciones no deseadas de hidrógeno al medio ambiente y provocar accidentes graves debido a la baja energía de ignición que este elemento requiere (Kessler et al., 2014). Por este motivo se debe trabajar en la mejora de las plantas de producción de hidrógeno, para mejorar la seguridad de los trabajadores de estas plantas y prevenir pérdidas económicas que podrían evitarse.

La Unión Europea ha dado los primeros pasos en apuntar hacia un uso mayor de esta innovadora alternativa energética, anunciando que la utilización del hidrógeno verde en la industria debe alcanzar el 42% para 2030 y se espera que México siga estos pasos (Forbes Staff, 2023). Contar con procesos de producción de hidrógeno seguros y sostenibles, traería algunos beneficios: reducción de GEI (mejorando la calidad del aire), seguridad energética, empleos, cumplimiento de acuerdos internacionales y desarrollo e innovación tecnológica, lo cual posicionará a México como un país en busca de su soberanía energética.

2 ANTECEDENTES

2.1 Riesgos en las plantas de hidrógeno.

Uno de los principales desafíos con el hidrógeno es contar con instalaciones de producción, almacenamiento y transporte seguros; por ejemplo, para emplearse como combustible de vehículos (Dincer, 2002; Schulte, 2004). Por esta razón, desde hace años en Europa, el hidrógeno se incluye en la Directiva SEVESO II (96/82/CE) para el control de los riesgos de accidentes graves con sustancias peligrosas, con una implementación más estricta que cualquier otro combustible de uso común (European Union Council, 1996; Kirchsteiger, 2000).

Rigas y Sklaounos (2005) llevaron a cabo cálculos de dispersión para un escenario hipotético de fuga de hidrógeno. Estos resultados mostraron que el comportamiento de dispersión de las nubes difiere

completamente dependiendo de la fuente del derrame, es decir, el hidrógeno se dispersa como un gas más pesado que el aire cuando escapa a la atmósfera desde el estado líquido y se caracteriza por un movimiento horizontal y tiempos de dilución relativamente largos; mientras que la nube proveniente del estado gaseoso presenta una elevación vertical más rápida y tiempos cortos de dilución; el primer comportamiento lo hace especialmente peligroso en las instalaciones donde se pueda presentar un incendio por la presencia de altas temperaturas o fuentes de ignición. También se han hecho observaciones experimentales que refuerzan estos resultados (Statharas et al., 2000; Verfondern, 1997; Witcofski y Chirivella, 1984). En condiciones atmosféricas, el hidrógeno es un gas incoloro e inodoro mucho más ligero que el aire. Debido a su baja densidad y pequeño tamaño molecular, puede permearse a través de ciertos metales y aleaciones como el hierro fundido y el acero con alto contenido de carbono, pudiendo contribuir a la propagación de grietas y disminución de la resistencia del material (Rigas y Sklaounos, 2005).

El hidrógeno se almacena en estado gaseoso a alta presión y temperatura normal, o en estado líquido a baja temperatura y presión moderada. En cualquier caso, existe un riesgo significativo de explosión mecánica de los recipientes cuando hay un sobrecalentamiento provocado por algún incendio vecino. El recipiente que contiene al hidrógeno eventualmente estalla y el contenido se torna en un dardo o bola de fuego. También existe la posibilidad de que una fuga de hidrógeno en contacto con una fuente de ignición, como chispas electrostáticas de algún otro evento, produzca una cadena de incidentes o efecto dominó (Rigas y Sklaounos, 2005).

El efecto dominó ha magnificado la gravedad de diversos incidentes industriales. Por definición, el efecto dominó es “un incidente que inicia en algún componente de un sistema y afecta a componentes vecinos por impacto térmico, explosión o fragmentación, causando que la gravedad de las consecuencias o la frecuencia de las fallas aumenten” (American Institute of Chemical Engineers, 1995). Un enfoque simple para evitar este efecto es determinar “distancias inherentemente seguras”, que son las mínimas de separación entre equipos necesarias para evitar el efecto dominó (Cozzani et al., 2006).

Hay tres vectores principales para el escalamiento de accidentes: radiación de calor o incidencia de llamas, sobrepresión y proyección de fragmentos (Cozzani et al., 2006), estos vectores tienen gran posibilidad de materializarse en una planta de hidrógeno en caso de ocurrir un accidente grave, específicamente en los equipos de proceso y/o tanques de almacenamiento.

2.2 Importancia de la optimización del diseño de la distribución de plantas de proceso

El diseño de la distribución de las instalaciones en las plantas de producción debe proporcionar la mejor disposición de los equipos de proceso dentro del terreno disponible

(Penteado y Ciric, 1996). Es aquí donde entra el concepto de *optimización del diseño de una planta*, la cual sirve para determinar las posiciones estratégicas de los equipos considerando factores económicos, de operatividad y flexibilidad; así como disponibilidad para futuras expansiones, seguridad y confiabilidad y/o respeto al medio ambiente (Vázquez-Román et al., 2010). Determinar la ubicación de las instalaciones y su configuración final es una tarea multidisciplinaria que requiere un análisis sistemático desde distintos enfoques profesionales, que cubre no sólo la optimización de la economía de la operación sino también la mejora de los aspectos de seguridad (Brunoro Ahumada et al., 2018). En muchos casos, se le da mayor importancia a los costos de operación, pero el aspecto de seguridad es igual de relevante para la sostenibilidad del proceso a largo plazo (Han et al., 2013). Por esta razón, se han desarrollado modelos basados en la programación matemática, lo que permite maximizar o minimizar una variable o *función objetivo* (H. Paul Williams, 2013).

2.3 Accidentes en plantas de hidrógeno.

El hidrógeno puede causar accidentes como dardos de fuego (*jet-fire*), incendio repentino (*flash-fire*), detonación, bola de fuego (*fire-ball*) o explosión de una nube de vapor confinado (CVCE, por sus siglas en inglés: *Confined vapour cloud explosion*), dependiendo del momento de la ignición y del confinamiento espacial. Un arreglo adecuado de instalaciones podría prevenir una cadena de accidentes provocada por ignición retardada (explosiones). El hidrógeno gaseoso forma mezclas combustibles o explosivas con el oxígeno atmosférico. No es tóxico, pero en concentraciones suficientemente altas actúa como asfixiante al agotar el oxígeno disponible (Rigas y Sklaounos, 2005).

Se han hecho varios estudios de accidentes con hidrógeno que involucran incendios y explosiones (Kessler et al., 2014; Kikukawa, 2008; Shirvill et al., 2012; Takeno et al., 2007; Tanaka et al., 2007). Las causas más comunes son errores de diseño, fatiga de elementos importantes, sellos inadecuados, manufactura malograda, errores humanos, desastres naturales; así como el mal mantenimiento de los equipos (Sakamoto et al., 2016). Incluso se ha reportado que en pequeñas fugas en válvulas de alivio se pueden liberar hasta 30 kg de H₂ en menos de un minuto (Aaron P. et al., 2012). En las últimas décadas, se han registrado varios accidentes que involucran el hidrógeno, en uso industrial y otras aplicaciones (Rigas y Sklaounos, 2005). A continuación, se mencionarán algunos de los más relevantes:

- *Accidente del dirigible Hindenburg*, Lakehurst, New Jersey (USA), 6 de mayo de 1937. Es el accidente más famoso de todos, el evento detonante de este accidente fue la ignición del hidrógeno utilizado para mantener a flote la aeronave, el resultado fueron 36 víctimas mortales y la destrucción total del dirigible (Rigas y Sklaounos, 2005).

- *Fuga de hidrógeno en trabajos de mantenimiento*, Pasadena, Houston (USA), 23 de octubre de 1989. Una masiva explosión de una nube de hidrógeno ocurrió en una planta de polietileno, causando 22 muertos y 100 heridos, la explosión tuvo la equivalencia de 2.4 toneladas de trinitrotolueno (TNT). Fue el resultado de una fuga de hidrógeno durante el mantenimiento de una línea de circuito de reacción. Las inadecuadas distancias de seguridad entre la sala de control y el reactor no permitieron acciones de paro por emergencia y evacuación segura del personal durante la liberación inicial de vapores (IChemE, 1997).
- *Rotura de un tanque de hidrógeno presurizado*, Hanau, Frankfurt (Alemania), 1991. Un tanque de 100 m² de hidrógeno presurizado a 45 bares explotó sin razón aparente, los proyectiles resultantes de dicha explosión terminaron dañando varias instalaciones vecinas, se llegó a la conclusión de que las soldaduras internas formaron grietas durante el tiempo que este tanque estuvo en funcionamiento, y el hidrógeno ayudó a agrandar estos daños mecánicos rápidamente (Federal Institute for Materials Research and Testing, 2002).
- *Ignición de hidrógeno en una unidad de desulfuración*, Japón, 1994, dos personas lesionadas (Trevor Kletz y Paul Amyotte, 1994).
- *Explosión de nube de hidrógeno en trabajo de mantenimiento*, Rusia, 1993, cuatro personas lesionadas (Trevor Kletz y Paul Amyotte, 1994).
- *Explosión y subsecuente ignición dentro de una refinería en la unidad de hidrogenación*, Japón, 1992, nueve personas fallecidas y ocho lesionadas (Trevor Kletz and Paul Amyotte, 1994).
- *Explosión de hidrógeno en planta generadora de energía*, Hong Kong, 1992, dos personas fallecidas y 19 lesionadas (Trevor Kletz y Paul Amyotte, 1994).
- *Falla en tubería de hidrógeno presurizada, seguido de ignición por chispa*, USA, 1989, siete personas fallecidas y ocho lesionadas (Trevor Kletz y Paul Amyotte, 1994).
- *Fuga de sulfuro de hidrógeno*, Pennington, Alabama, 2002, dos personas fallecidas y 8 lesionadas (Comisión de seguridad e investigación de peligros químicos de los Estados Unidos, 2002)
- *Explosión en una estación de repostaje de hidrógeno*, Sandvika, Noruega, 2019, el incidente fue provocado por una fuga con una duración de aproximadamente 150 minutos, por fortuna no hubo fallecidos ni heridos de gravedad, sin embargo el impacto de la onda expansiva fue tal que activó las bolsas de aire de los autos cercanos (Melideo, 2019).

Adicional a esto, se han realizado estudios donde se registran y clasifican accidentes ocurridos en estaciones de servicio de hidrógeno para autotransporte en USA y Japón (Sakamoto et al., 2016). También hay trabajos en donde se evalúa la geometría, alcance y dirección de la propagación de la combustión del H₂, y se determina la velocidad con la

cual la flama se expande (con un promedio de 20 m/s) (Kessler *et al.*, 2014). Estas son razones suficientes para la optimización del diseño de una planta que, ante algún siniestro, tenga el mínimo de probabilidades de que algún accidente dentro de ella escale a consecuencias mayores (efecto dominó).

2.4 El problema de distribución de las instalaciones de una planta (FLP).

Como se mencionó anteriormente, el diseño de la distribución de las instalaciones de procesos busca minimizar los costos operativos y maximizar la eficiencia operativa. Se han hecho avances tanto desde un enfoque económico, como de seguridad de las plantas. Algunos elementos a considerar son: el arreglo no debe presentar superposiciones entre sus módulos, los cuales a su vez, tienen las propiedades de ser indivisibles y de áreas desiguales (Meller y Gau, 1996). Mediante la optimización, es posible obtener una reducción significativa del manejo de materiales dentro de una planta y otros costos de logística (Meller *et al.*, 2007). Una buena distribución no sólo reducirá los costes de inversión sino que también evitará o minimizará problemas de seguridad y mantenimiento (Penteado y Ciric, 1996).

2.5 Modelos de optimización para el diseño de distribución de instalaciones de procesos químicos.

En los trabajos de optimización de plantas con enfoque a seguridad, se busca minimizar el costo total de capital asociado con el riesgo de daño estructural, riesgo de fatalidad, interconexión de tuberías y dispositivos de protección (Brunoro Ahumada *et al.*, 2018).

Uno de los primeros y más relevantes trabajos es el de Kusiak y Heragu (1987), donde se comparan 12 algoritmos heurísticos, sentando las bases para abordar estos modelos. Sin embargo, estos acercamientos no serían suficientes para garantizar una diseño optimó; entonces, Jayakumar *et al.* (1994) proponen una formulación para organizar los equipos de las instalaciones en secciones y presentarlos como un problema de partición de gráficos.

Más tarde, Suzuki *et al.* (1991) mediante programación entera consideraron diseñar una planta con varios pisos y en cada uno de ellos asignar distintos procesos con diferentes instalaciones y equipos. Georgiadis *et al.* (1997) mejoran esta formulación con el uso de programación lineal entera mixta (MILP) y detallando el arreglo de las instalaciones en cada piso, con cada uno de los equipos ocupando sólo un lugar en este arreglo mediante la discretización del espacio. Luego, minimizando el tamaño de los bloques que conforman el arreglo espacial (Georgiadis *et al.*, 1999). El modelo se acerca a la representación de un modelo continuo.

Papageorgiou y Rotstein (1998) utilizaron un modelo MILP para representar un espacio dimensional continuo que toma en cuenta dividir en secciones la planta, según el propósito de cada una de ellas, evitando el traslape de equipos dentro del arreglo. En esto, el objetivo de la optimización es determinar la ubicación tanto de las secciones como

de los equipos dentro de cada sección para minimizar el costo total del diseño. Asimismo, los autores propusieron obtener modelos que ayuden a la obtención de restricciones espaciales y/o consideraciones concernientes a la seguridad.

Se han implementado otros algoritmos para mejorar los resultados de este problema de diseño, uno de ellos es la aplicación del concepto secuencia par por Meller et al. (2007), el cual es tomado de un problema de la instalación de cientos de componentes electrónicos (Murata et al., 1996), a este modelo se le conoce como Integración a muy gran escala (VLSI, por sus siglas en inglés: *Very Large Scaled Integration*) en el campo de circuitería electrónica, con el fin de obtener una nueva formulación de diseño, específicamente con respecto a las ubicaciones relativas viables de los equipos y evitar superposiciones. Básicamente, este modelo permite reescribir el algoritmo de tal forma que, requiera menos recursos computacionales obtener soluciones viables y tomar en cuenta la mayor cantidad de restricciones espaciales posibles.

Por otra parte, en cuanto a la seguridad, Penteado y Ciric (1996) introdujeron variables de seguridad de procesos en una programación no lineal entera mixta (MINLP, por sus siglas en inglés: *Mixed integer non-linear programming*) para minimizar la *función objetivo* compuesta de cuatro factores: costos de tuberías, de terreno, de dispositivos de protección y los riesgos financieros asociados, estos parámetros prestan especial atención al factor seguridad del problema de diseño. Un problema de programación no lineal entera mixta es aquel que contiene variables discretas y continuas, además de tener restricciones con términos no lineales dentro de su *función objetivo*. Cabe mencionar que el estudio evaluó una planta de óxido de etileno, encontrando que, aunque las distancias seguras entre módulos generan un mayor gasto de terreno y tuberías, vale la pena no escatimar, pues en caso de un accidente mayor cada módulo puede generar un gasto de hasta 800% de su costo inicial, puesto que se tiene que volver a comprar el equipo, conexiones, instrumentación auxiliar, cableado, instalación y la materia prima perdida; todo esto además de un posible efecto dominó. El riesgo financiero (el riesgo de plantas inseguras que expresa las pérdidas esperadas si ocurre un gran accidente) puede ser el costo dominante del proceso de diseño final.

Más tarde, Patsiatzis et al. (2004) proponen un modelo basado en MILP que determina a detalle el diseño de una planta (coordenadas y orientación de cada equipo), el número y tipo de aditamentos protectores para reducir el riesgo de posibles accidentes y riesgo financiero. Se consideran áreas de exposición y daños máximos probables a la propiedad para una mayor precisión en los resultados. Adicionalmente, utiliza el índice Dow para fuegos y explosiones, que es una herramienta para identificar equipos con una gran probabilidad de sufrir siniestros, la escalabilidad de un posible accidente y cuantificar el posible daño a una planta debido a un accidente en alguno de sus módulos.

Han et al. (2013) evaluaron los riesgos directos para los operadores, provenientes de equipos potencialmente peligrosos, de manera cuantitativa como riesgos individuales y se tradujeron a distancias de seguridad para cada equipo de proceso, con base en esta

información y el espacio mínimo requerido para la operación y el mantenimiento de cada equipo, se formuló un problema de optimización MILP con las restricciones de no superposición de estas zonas.

Rahman et al. (2014) utilizaron MILP para la optimización de una planta de amoníaco. Clasifican unidades de proceso críticas, es decir, aquellas cuya probabilidad de sufrir un incidente es mayor, y también unidades aledañas cuyo riesgo es bajo para determinar el posible daño que las unidades críticas pudieran causarles. Tanto el daño estructural (explosión y liberación de sustancias peligrosas) como pérdidas/lesiones humanas se representan en términos económicos, utilizando funciones de probabilidad, frecuencia y parámetros de costo adecuados. Luego, estos parámetros de costos se comparan con los costos de tuberías y cableado para encontrar la ubicación óptima para las diferentes instalaciones.

Brunoro Ahumada et al. (2018) desarrollaron un modelo MILP que integran la formulación del diseño con la implementación de métodos de *evaluación de riesgos cuantitativos* (métodos que se definirán más adelante) e introducen la variable incertidumbre a través de un enfoque estocástico para respaldar las decisiones basadas en posibles riesgos (de desastres o accidentes dentro de la planta) durante el diseño de la instalación, tomando en cuenta mapas de riesgo y la determinación de distancias seguras entre los módulos de la planta. Complementando con un análisis de sensibilidad que se realiza variando los valores de riesgo, las distancias seguras y los criterios de aceptación de riesgos. Si bien se generan diferentes opciones de distribución para los equipos, se observa una tendencia a ubicarlos por su tipo.

Jung y Lee (2019) consideraron procedimientos de ingeniería. El primer paso fue encontrar el diseño óptimo de la planta basado en un modelo MINLP en el que la función objetivo es la suma del costo de instalación total de tuberías, pérdidas por transferencia de calor y caídas de presión. El segundo paso es determinar las mejores posiciones de los muros de explosión para maximizar la mitigación de explosiones potenciales.

Más recientemente, Kubalík et al. (2019) utilizaron algoritmos evolucionarios para resolver el problema, tanto en variante de objetivo único como de multiobjetivo; el método se evaluó experimentalmente con un conjunto de puntos de referencia de planificación de plantas basadas en VLSI estándar; más tarde, en Kubalík et al. (2023) implementaron la propuesta de elegir entre distintas variantes de cada instalación usando algoritmos evolutivos. También, el problema de diseño de instalaciones de áreas desiguales (UA-FLP, por sus siglas en inglés: *Unequal Areas-Facility Layout Problem*) ha llamado la atención debido a que se acerca más a escenarios industriales reales. Guo et al. (2023) desarrollaron un algoritmo genético (NSGA-II) para identificar el diseño óptimo considerando el costo de manejo de materiales (MHC) y la puntuación de clasificación de cercanía.

2.6 Panorama actual de la industria energética del hidrógeno.

Actualmente se está trabajando en tecnologías productoras de hidrógeno verde a partir de energía eléctrica proveniente de fuentes renovables. Estas tecnologías se han desarrollado ampliamente y están al borde de una implementación masiva (Jung y Lee, 2019; Kubalík et al., 2019).

También se continúa trabajando en la mejora de estaciones de servicio para vehículos de pila de combustible de hidrógeno (Kessler et al., 2014; Kubalík et al., 2019), tanto para mejorar la eficiencia de este innovador sistema de biocombustible como para mejorar la seguridad que ofrecen estas estaciones. A la par, se realizan análisis de modelos de diseño de redes de la cadena de suministro de hidrógeno (Li et al., 2019). Sin dejar de lado la producción de metano sintético utilizando hidrógeno verde en el proceso, así como el almacenamiento de productos químicos y los gases involucrados en estos procesos (Chirone et al., 2022). En esta línea de investigación toma lugar la mejora de infraestructura física de transmisión, distribución, integración con otros sistemas de energía y los procesos de producción de hidrógeno (Riera et al., 2023).

En China, se proyecta que la mayor parte de la electricidad producida provendrá de fuentes renovables como lo son la eólica, la fotovoltaica y el hidrógeno; es decir, electricidad verde, la cual trae importantes beneficios ambientales (Zhou *et al.*, 2024). Asimismo, hay un registro de intenciones por implementar sistemas de generación de energía con pilas de combustible de óxido sólido (SOFC, por sus siglas en inglés: Solid Oxide Fuel Cell) alimentados con hidrógeno verde (Mei *et al.*, 2023) y la optimización de éstos.

2.7 Evaluación de riesgos.

En lo que a diseño de las plantas químicas respecta, se han utilizado métodos de evaluación de riesgos, para abordar pérdidas potenciales debidas a eventos peligrosos luego de la identificación de peligros (Díaz-Ovalle et al., 2010). Distintos enfoques han apuntado a minimizar los riesgos atribuidos a eventos de escalada durante la optimización del diseño (López-Molina et al., 2013).

La seguridad y fiabilidad de la infraestructura requerida son incondicionales para el futuro de la economía del hidrógeno. El diseño de estos sistemas debe demostrar que puede tener niveles de seguridad equivalentes, o incluso superiores a los sistemas actuales. Se debe procurar que no haya lugar para accidentes pequeños, como en estaciones de servicio de hidrógeno o en los tanques de almacenamiento, podría significar retraso en el desarrollo y aceptación pública de estas tecnologías (Moradi y Groth, 2019). Por esto, resulta indispensable la aplicación de una metodología que permita analizar la probabilidad de ocurrencia y posibles consecuencias de daño o del escenario que surge de la exposición a ciertos riesgos, a este proceso se le conoce como *Evaluación de Riesgos* (Pan American Health Organization, n.d.).

2.8 Análisis Cuantitativo de Riesgos (QRA).

El análisis cuantitativo de riesgos (QRA, por sus siglas en inglés: *Quantitative Risk Analysis*) es un método formal y sistemático que utiliza datos medibles para evaluarlos en procesos de producción de hidrógeno (Jafari et al., 2012). El QRA es bastante utilizado en las industrias petroquímicas y energéticas para evaluar la seguridad de las actividades, procesos y sistemas, así como de producción, tuberías y almacenamiento. Se puede utilizar para mapear riesgos y garantizar operaciones seguras y eficientes a medida que las barreras de seguridad iniciales se degradan con el tiempo, se realizan modificaciones a un activo y el panorama de riesgos cambia (Molazemi Koheila, n.d.). Los pasos principales del QRA son los siguientes (Daniel A. Crowl y Joseph F. Louvar, 2002):

- Definición de secuencias de eventos potenciales, así como de potenciales incidentes.
- Evaluación de las consecuencias de posibles accidentes (los modelados de dispersión y de fuegos y explosiones son las herramientas típicas para este paso).
- Estimación de las frecuencias de incidentes potenciales usando árboles de falla o árboles de eventos.
- Estimación de los impactos de estos incidentes en personas, medio ambiente e inmuebles.
- Estimación del riesgo mediante la combinación de impactos y frecuencias.

El QRA se ha utilizado en la operación de una unidad generadora de hidrógeno a partir de gas natural. Se identificaron los peligros para las instalaciones vecinas de la planta, mediante el QRA, se evaluaron escenarios de accidentes, determinando su frecuencia y modelando las consecuencias para estimación de riesgos (Jafari et al., 2012). Kikukawa et al. (2009) consideraron una estación de servicio de hidrógeno líquido para realizar la evaluación de riesgos; identificar peligros y escenarios, elaborar una matriz de riesgos y luego aplicar medidas de seguridad al modelo para reducir los niveles de probabilidad de consecuencias

Recientemente, Huser (2021) realizó un análisis de riesgos para una estación de servicio para autobuses que funcionan con hidrógeno, mediante el establecimiento de los riesgos totales de los equipos, se determina el nivel adecuado de seguridad, así como muros a prueba de explosiones y el diseño del arreglo de la instalación; tomando en cuenta el cambio de las variables que puede conllevar el incremento de las dimensiones de las instalaciones; el QRA usado cuenta con herramientas adaptadas para riesgos por el uso de hidrógeno.

Por tanto, en este trabajo se presenta el desarrollo de un modelo de programación matemática para el diseño de la distribución de una planta de producción de hidrógeno, considerando aspectos de seguridad para reducir el riesgo de escalamiento de accidentes y distancias de seguridad. Se utilizará la metodología de análisis cuantitativo de riesgos (QRA) y los módulos de HyRAM+ (software que se abordará con detalle más adelante en la sección de Metodología) para la determinación de la frecuencia y consecuencia de accidentes que involucran la liberación de hidrógeno. Además, se minimizó el costo anual de la planta, al evaluar los costos de instalación, puesta en marcha, operación y mantenimiento de los equipos durante el primer año de trabajo.

3 HIPÓTESIS

La optimización de la distribución espacial de los equipos en una planta de hidrógeno, mediante el uso de programación matemática (MINLP) y un análisis cuantitativo de riesgos (QRA), puede reducir significativamente el potencial de propagación de incidentes y minimizar los daños en caso de un siniestro, a la vez que optimiza los costos de inversión, operatividad y mantenimiento de la planta.

4 OBJETIVOS

4.1 Objetivo General.

Generar un modelo basado en programación matemática para la distribución de una planta de producción de hidrógeno, considerando los costos de operación, adquisición, instalación, mantenimiento y seguridad; este último, mediante un análisis cuantitativo de riesgos.

4.2 Objetivos Específicos.

- 1 Identificar los peligros inherentes a la planta del caso de estudio de los procesos de producción y almacenamiento de hidrógeno, mediante un análisis cualitativo de riesgos (HAZOP).
- 2 Cuantificar la frecuencia de fallos de los equipos y/o procedimientos implementados en la producción de hidrógeno que puedan generar incendios y explosiones (escenarios peligrosos).
- 3 Modelar el comportamiento de las liberaciones accidentales de hidrógeno, producto de los fallos de los equipos con el fin de generar datos que sirvan como base para modelar los escenarios peligrosos.
- 4 Realizar un análisis de consecuencia de los escenarios peligrosos y conocer sus efectos en la planta, y determinar la probabilidad de efecto dominó.

5. METODOLOGÍA

Dado que los accidentes tienen un nivel de riesgo de ocurrir, en esta sección se presenta el procedimiento propuesto para encontrar el arreglo de los elementos de esta planta, que permita reducir los costos de operación y aumentar la seguridad de las instalaciones, teniendo como consecuencia un proceso rentable que pueda contribuir al uso del hidrógeno como un vector energético.

Se tomó el caso de estudio de una planta de producción de hidrógeno, del cual se extraen varios parámetros de interés y estos se usan para evaluar riesgos que pudieran representar un escenario peligroso inherente a la misma planta; dichos escenarios son representados de forma estadística en conjunto con la base de datos experimentales del software HyRAM+, así como los modelos de consecuencia y daños físicos usados en el análisis multiobjetivo.

5.1 Caso de estudio (planta de hidrógeno de 1500 kg/día)

Este trabajo se basa en el diseño proporcionado por Harvego et al. (2012), el cual fue estructurado tras el análisis de varias plantas de producción de hidrógeno reales, ver Figura 1. Los diagramas de flujo de procesos incluyen representaciones apegadas a la realidad de las condiciones de operación y la eficiencia de los equipos. De la misma forma, los parámetros operativos están configurados con base en los métodos de producción de hidrógeno por electrólisis a altas temperaturas (HTE por sus siglas en inglés, *High Temperature Electrolysis*), estas especificaciones fueron de utilidad para este trabajo de investigación. El proceso comienza con la introducción de vapor de barrido entrante a la unidad HTE, donde se disocia el H_2O en H_2 y O_2 ; el H_2 producido es enfriado y condensado para separar el H_2O remanente en el tanque condensador 39, para finalmente reciclar parte de este hidrógeno al mezclador 2 a través del regenerador 1. Por otro lado, la corriente que contiene el O_2 pasa a través del tanque separador 43 y el tanque condensador 28 para la purificación y separación del vapor, mientras que el calor necesario para el proceso se suministra mediante la combustión de gas natural en el quemador de gas natural, cuyos gases calientes intercambian energía con las corrientes del proceso en los intercambiadores de calor (HX-1 y HX-2) y los regeneradores (1, 2 y 3), garantizando la alta temperatura de operación de la unidad HTE.

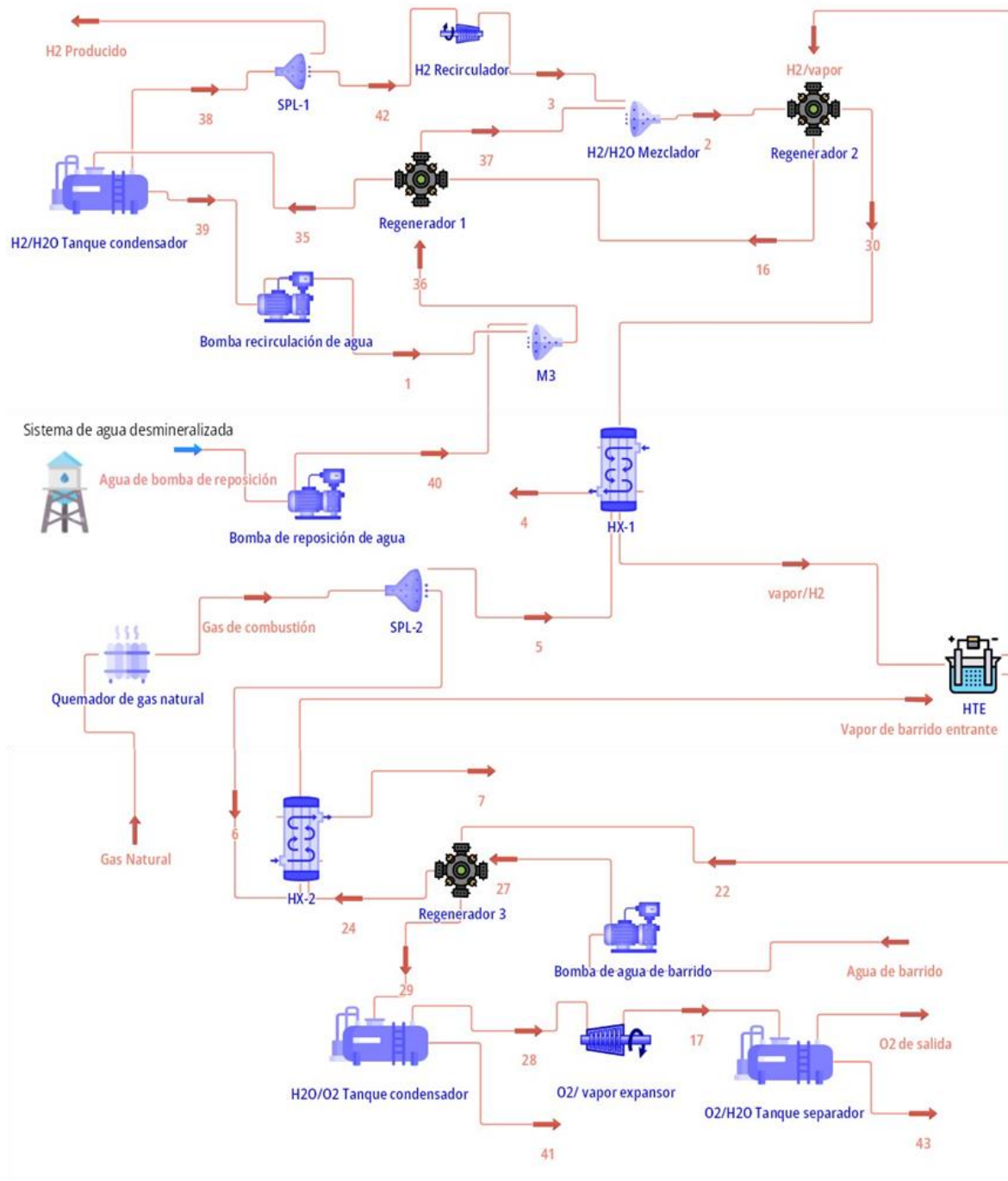


Figura 1. Diagrama de proceso de la planta de producción de hidrógeno por HTE de referencia (Harvego et al., 2012).

La HTE es un método de producción de hidrógeno que trabaja con agua a muy altas temperaturas, donde el módulo electrolizador está compuesto por celdas de óxido sólido (SOE por sus siglas en inglés,

Solid Oxid Electrolizer). En el SOE, como se muestra en la Figura 2, se emplea un electrolito cerámico sólido que facilita la conducción de iones de oxígeno (O_2^-) a elevadas temperaturas, lo que resulta en la producción de hidrógeno mediante un mecanismo distintivo.

Por lo general, este proceso se desarrolla a temperaturas entre 700 y 800°C, donde el vapor de agua en el cátodo interactúa con los electrones provenientes del circuito externo, generando hidrógeno gaseoso y iones de oxígeno con carga negativa. Estos iones de oxígeno migran a través de la membrana cerámica sólida y, al alcanzar el ánodo, participan en una reacción que libera oxígeno gaseoso y electrones, los cuales son reincorporados al circuito externo. Esta tecnología se distingue por su capacidad para combinar una alta eficiencia térmica y energética, junto con una producción de emisiones reducida a un coste operativo comparativamente bajo (Georgia Pratt, 2022).

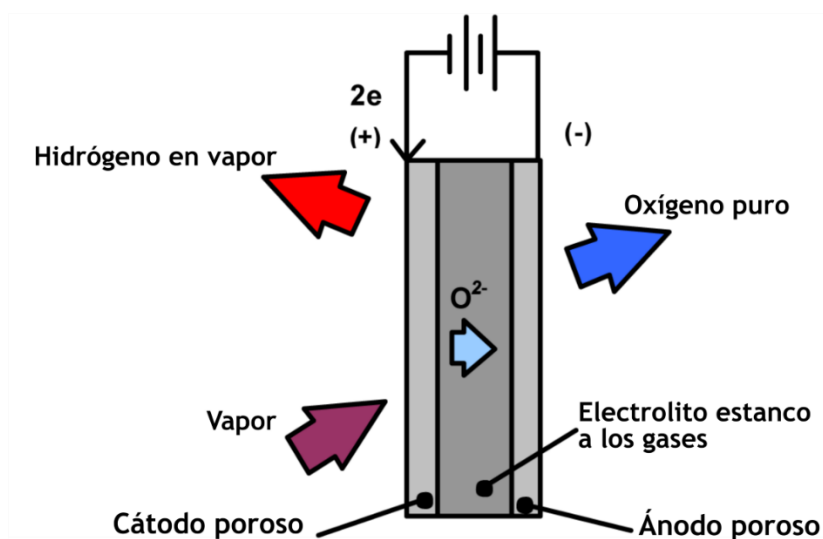


Figura 2. Esquema simple del mecanismo del SOE.

Para explicar el funcionamiento del modelo original (Figura 1) se ha optado dividir el proceso en módulos, cada uno de ellos estará compuesto por uno o varios equipos involucrados en el proceso, los equipos que conforman cada sección cumplen con una función similar entre sí, trabajan con flujos parecidos o son parte de un mismo subproceso más complejo que aporta un trabajo imprescindible al objetivo final de obtención de hidrógeno, esta idea se ejemplificará más adelante en la definición de cada módulo.

5.1.1 Módulo 1

La Figura 3 muestra el Módulo 1, es donde ingresa al proceso el agua necesaria para alimentar al electrolizador, se compone de los siguientes equipos principales:

- Bomba de reposición de agua, es la encargada de compensar las pérdidas de agua debidas a otros subprocesos, cabe aclarar que el proceso completo debe trabajar con una cantidad mínima de agua.
- Mezclador M3, aquí se vierte el agua que viene de la bomba de reposición de agua junto con la que sale del tanque condensador H_2 /Vapor (Módulo 2) para su recirculación dentro del proceso y esta mezcla se manda hacia el Regenerador 1 del Módulo 4.
- Sistema de suministro de agua desmineralizada, este alimenta a la bomba de reposición.

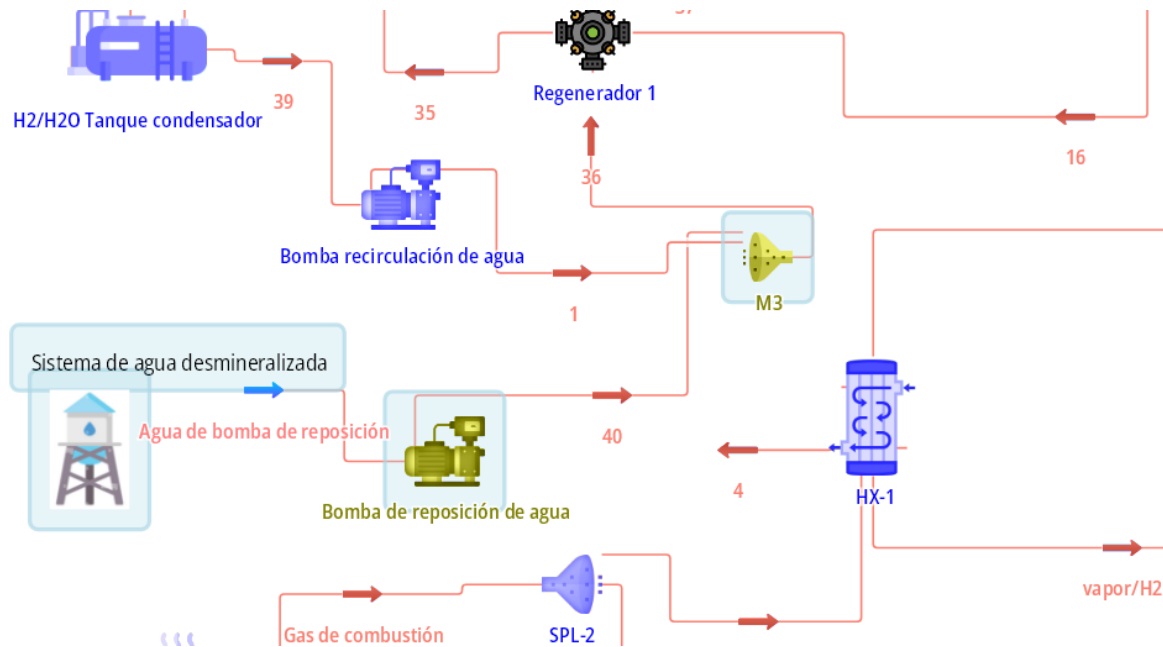


Figura 3. Diagrama del módulo 1.

5.1.2 Módulo 2

Este segundo módulo (Figura 4) es el encargado de remover la humedad del hidrógeno proveniente del Módulo SOE para obtener el hidrógeno final que es el producto primario de la planta, se compone de los siguientes equipos:

- H_2/H_2O Tanque condensador (conocido en inglés como *H₂/H₂O Knockout Tank*), es aquí donde el agua que acompaña al hidrógeno proveniente del Módulo SOE se condensa, para mandar esa agua de regreso al ciclo.
- Bomba de recirculación de agua, es el equipo que conecta al Módulo 2 con el Módulo 1, enviando el agua sobrante hacia el mezclador M3 para que se reintegre al ciclo.
- Separador SPL-1, aquí se divide el hidrógeno proveniente del Tanque separador de este módulo, una parte es el hidrógeno final y otra parte se reintegra al sistema a través del

Recirculador de hidrógeno para mantener la cantidad mínima necesaria de hidrógeno en el Regenerador 2 del Módulo 4.

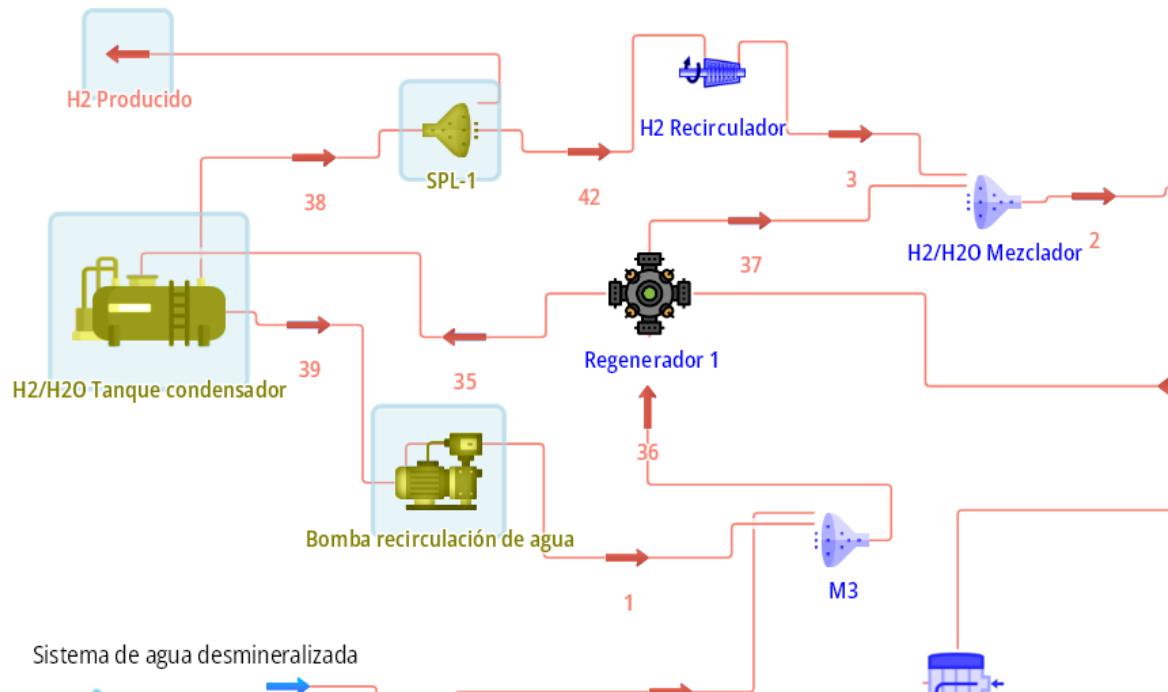


Figura 4. Diagrama del módulo 2.

5.1.3 Módulo 3

Este módulo (Figura 5) es el encargado de conectar el flujo de hidrógeno recirculante del Módulo 2 con los regeneradores del Módulo 4, se compone de los siguientes equipos:

- Recirculador de H_2 , aquí el hidrógeno proveniente del separador SPL-1 es presurizado para que pueda entrar en el Mezclador H_2/H_2O .
- Mezclador H_2/H_2O , este equipo combina la mezcla caliente de agua/hidrógeno que sale del Regenerador 1 con el hidrógeno frío recirculante del Módulo 2 para posteriormente enviar esta nueva mezcla al Regenerador 2 del Módulo 4.

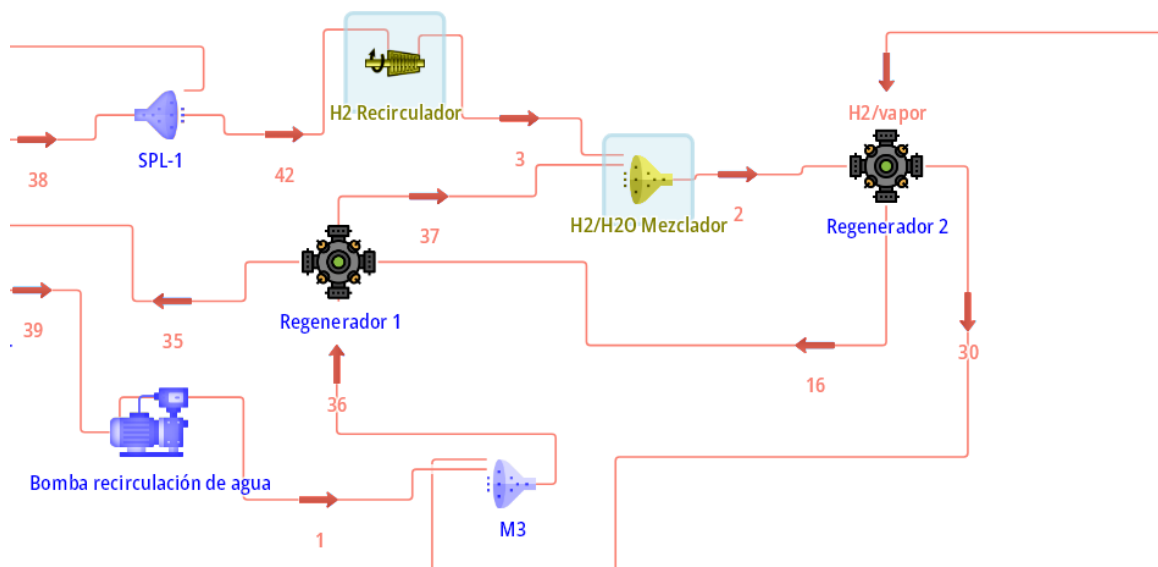


Figura 5. Diagrama del módulo 3.

5.1.4 Módulo 4

La función principal de este módulo (ver Figura 6) es mezclar los flujos provenientes de otros equipos para elevar su temperatura. Se compone de:

- Regenerador 1, mezcla los flujos que salen del Regenerador 2 y del Mezclador M3 para enviar una parte de esta mezcla agua/hidrógeno al Tanque Separador H_2/H_2O .
- Regenerador 2, combina el flujo de agua/hidrógeno saliente del Módulo SOE con el flujo del Mezclador H_2/H_2O para alimentar al Regenerador 1 y al Intercambiador de Calor 1 (HX-1).

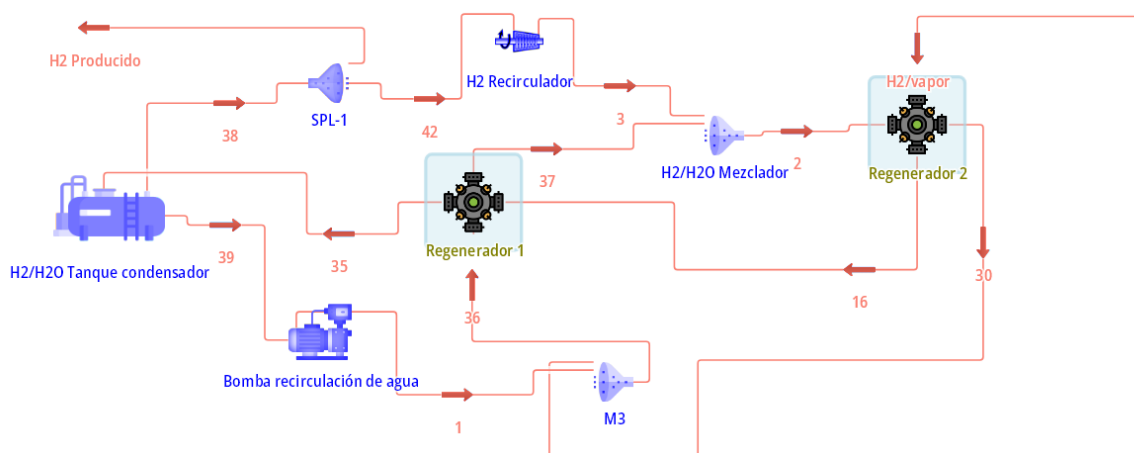


Figura 6. Diagrama del módulo 4.

5.1.5 Módulo 5

El propósito de este módulo es suministrar el vapor de arrastre necesario para eliminar el O_2 del Módulo SOE (ver Figura 7) sus componentes funcionan de la siguiente manera:

- Bomba de agua de barrido, suministra el agua para el proceso de arrastre de vapor hacia el Regenerador 3.
- Regenerador 3, aquí se precalienta el agua de barrido para salir en forma de vapor a una temperatura aproximada de 465 °C para entrar al Intercambiador de Calor 2 (HX-2).

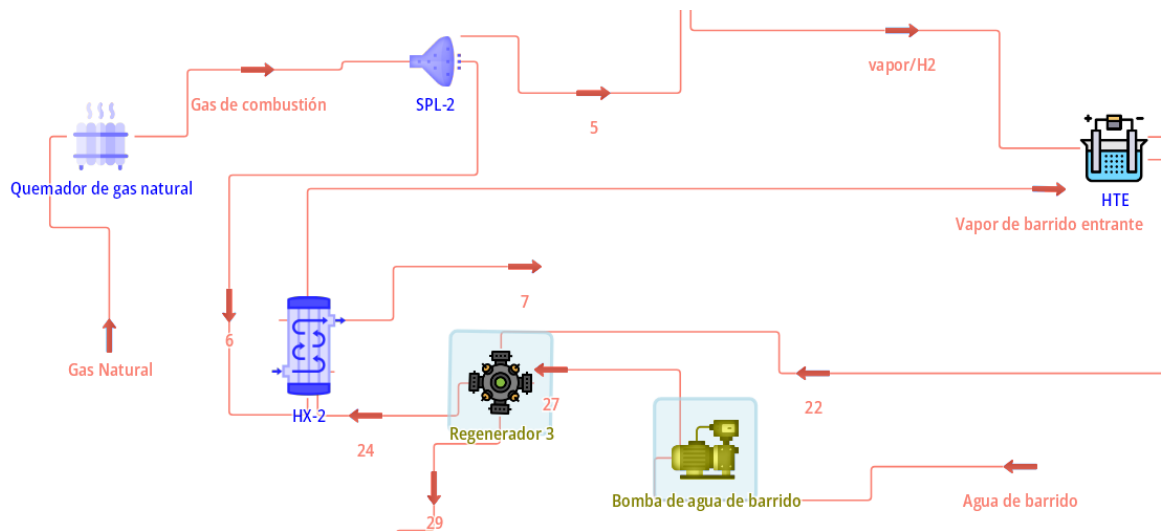


Figura 7. Diagrama del módulo 5.

5.1.3 Módulo 6

Este módulo brinda la mayor parte de la energía en forma de calor para lograr la temperatura necesaria para la HTE (ver Figura 8), sus equipos son los siguientes:

- Quemador de gas natural. Se utiliza para la combustión de gas metano, el cual sale a una temperatura de aprox. 1204 °C hacia el separador SPL-2.
- Separador SPL-2, se encarga de dividir el flujo del gas natural caliente para aprovechar su energía dentro de los intercambiadores de calor (HX-1 y HX-2).
- HX-1. La mezcla de agua/hidrógeno proveniente del Regenerador 2 ingresa al intercambiar calor con el metano y alcanza una temperatura de aprox. 800 °C, la cual es ideal para llevar a cabo la electrólisis del Módulo SOE.
- HX-2, de forma similar al HX-1, se aprovecha la energía del metano para calentar el vapor de arrastre hasta una temperatura de aprox. 800 °C, para posteriormente enviarlo al Módulo SOE y con este vapor eliminar el exceso de oxígeno subproducto de la electrólisis.

- Módulo SOE (HTE en el diagrama), aquí es donde ocurre la obtención de hidrógeno por HTE, proceso que ya se explicó al comienzo de este capítulo. Una mezcla de hidrógeno/vapor (70/30%, respectivamente) se envía al Regenerador 2 para comenzar el ciclo explicado en el Módulo 4. Mientras que una mezcla de O_2 /vapor (50/50%) se envía al Regenerador 3, en donde una parte se utiliza para recomenzar el ciclo explicado en esta sección y otra parte se envía al Tanque separador de H_2O/O_2 de la séptima y última sección.

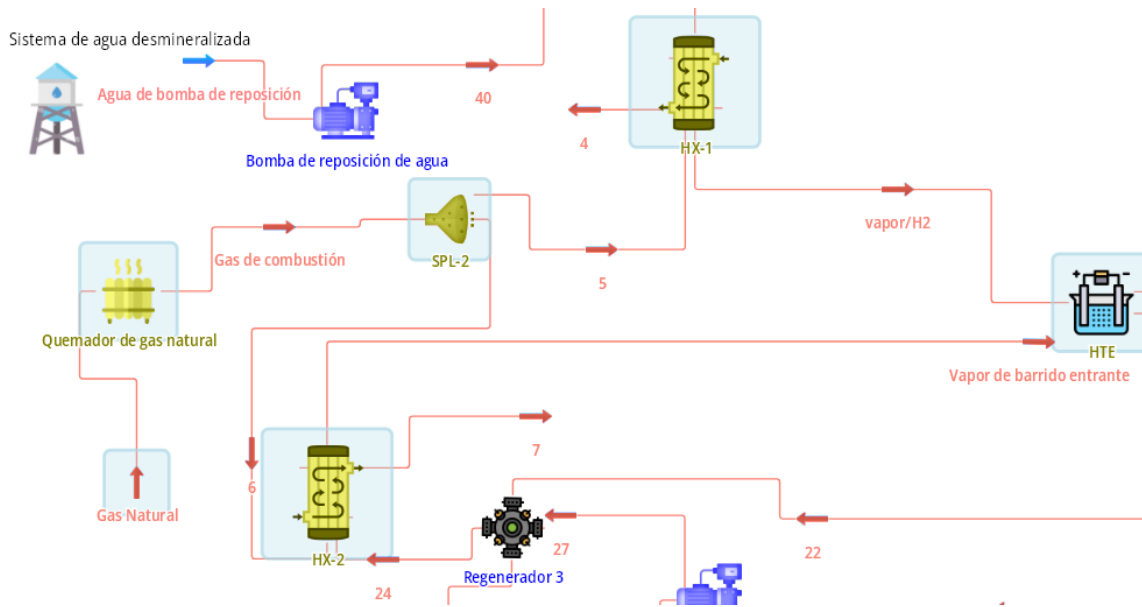


Figura 8. Diagrama del módulo 6.

5.1.7 Módulo 7

En esta última sección (ver Figura 9) se explica la separación del oxígeno barrido del Módulo SOE, cada equipo realiza lo siguiente:

- Tanque condensador H_2O/O_2 , una parte del fluido (50% agua y 50% oxígeno) saliente del Regenerador 3 llega a este tanque, en donde el agua se condensa y sale por un lado del tanque, mientras que el oxígeno en forma gaseosa se dirige a una turbina expansora (O_2 expansor de vapor) aún con una buena cantidad de vapor de agua.
- O_2 expansor de vapor, aquí entra la mezcla O_2 /vapor (61/39% respectivamente aprox.) a una temperatura de unos 205 °C y sale hacia el Tanque separador O_2/ H_2O a una temperatura aprox. De 68 °C, la energía extraída de este flujo es reutilizada para alimentar el Módulo SOE.
- Tanque separador O_2/ H_2O , aquí ocurre una última separación de oxígeno y agua, para por un lado obtener el oxígeno como subproducto de la electrólisis mientras que por el otro lado se obtiene agua que puede ser reutilizada en el proceso.

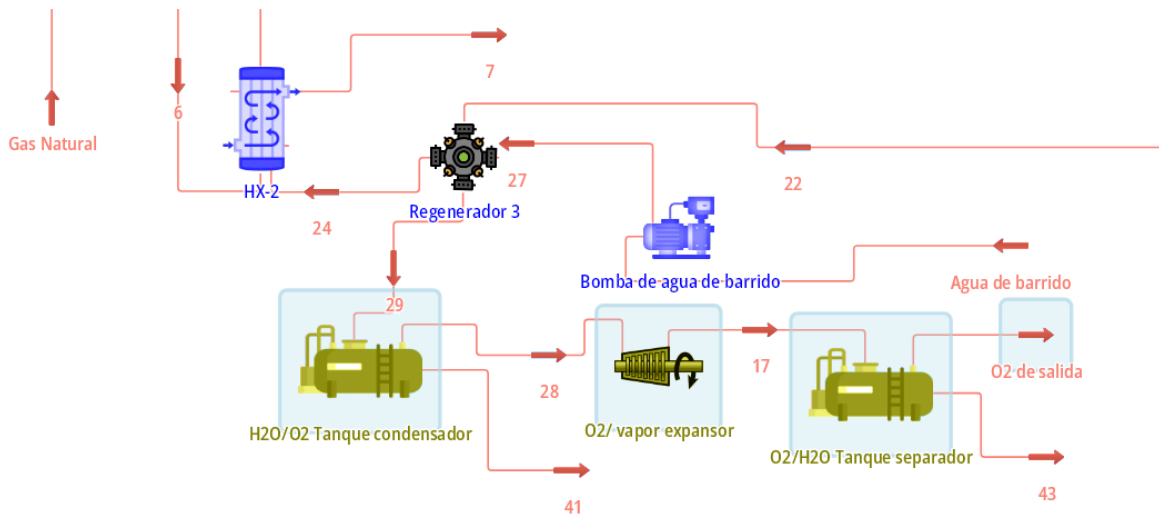


Figura 9. Diagrama del módulo 7.

A manera de resumen, en este proceso HTE de (Harvego et al., 2012), el vapor suministrado entra con una temperatura de 800 °C y 5 MPa del lado del cátodo, donde es reducido electrolíticamente, produciendo hidrógeno como producto primario y oxígeno como subproducto (Figura 2). El oxígeno generado en la región anódica del electrolizador es evacuado mediante un sistema de purga de vapor de arrastre. Subsecuentemente, el vapor remanente es eliminado de los flujos de hidrógeno y oxígeno que emanan del electrolizador a través de un proceso de condensación. Este procedimiento resulta en la obtención de un producto de hidrógeno anhidro y en la separación de oxígeno como gas secundario, ambos libres de humedad residual.

La instalación emplea calentadores industriales que funcionan con gas natural para proporcionarle el calor necesario al proceso. Además, utiliza la red eléctrica para alimentar tanto los módulos del electrolizador como otros componentes del sistema. El costo total estimado para el hidrógeno, en este caso modelo de producción de 1500 kg diarios, se estima en 3.12 dólares por kilogramo (Harvego et al., 2012).

La electrólisis a alta temperatura presenta una ventaja significativa sobre la electrólisis tradicional, a pesar de que esta última es una técnica ya consolidada. Ésta radica en la posibilidad de alcanzar niveles de eficiencia global notablemente superiores. Desde el punto de vista de la termodinámica, al incrementar la temperatura del proceso, se reduce la cantidad de energía eléctrica necesaria para llevar a cabo la electrólisis del agua o vapor, mientras que aumenta la demanda de energía térmica. Como resultado, cuando se opera a temperaturas elevadas, es posible suministrar una mayor proporción de la energía presente en forma de calor, lo que mejora la eficiencia general del proceso (Harvego et al., 2012).

Como información complementaria del modelo, la Tabla 1 muestra los parámetros termodinámicos de los flujos a través de las numeraciones apreciables en el diagrama de la Figura 1, siendo P la presión del flujo, T la temperatura, FM el flujo másico y V/F la fracción de vapor; así como también las

composiciones molares de cada flujo, por último, se especifica desde qué equipo sale y a qué equipo entra cada uno de estos flujos.

Tabla 1. Información de los flujos del diagrama.

Flujo	P [kPa]	T [°C]	FM [kg/h]	V / F	Composición (*100%)							Sale de	Entra a
					Agua	H2	O2	N2	CO2	NO	Metano		
1	5000	32.2312	275.477	0	1	-	-	-	-	-	-	Bomba de Recirc. De agua	Mezclador M3
2	4980	153.093	838.956	0.111451	0.901	0.099	-	-	-	-	-	Mezclador H2/H2O	Regenerador 2
3	4980	34.1635	10.3213	1	0.001	0.999	-	-	-	-	-	H2 Recirc.	Mezclador H2/H2O
4	81.353	257.483	2065.67	1	0.1	-	0.099	0.741	0.05	0.001	-	HX-1	Ext. Del proceso
5	101.353	1204.43	2065.67	1	0.1	-	0.099	0.741	0.05	0.001	-	SPL-2	HX-1
6	101.353	1204.43	259.633	1	0.1	-	0.099	0.741	0.05	0.001	-	SPL-2	HX-2
7	81.353	448.562	259.633	1	0.1	-	0.099	0.741	0.05	0.001	-	HX-2	Ext. Del proceso
17	101.325	68.6428	662.237	0.868967	0.384	-	0.616	-	-	-	-	O2/vapor expansor	O2/H2O Tanque separador
24	4960	423.567	276.232	1	1.000	-	-	-	-	-	-	Regenerador 3	HX-2
27	4966.89	21.5263	276.232	0	1.000	-	-	-	-	-	-	Bomba de agua de barrido	Regenerador 3
28	4933.11	204.199	662.237	1	0.384	-	0.616	-	-	-	-	H2O/O2 Tanque condensador	O2/vapor expansor
29	4933.11	204.199	766.9	0.810805	0.500	-	0.500	-	-	-	-	Regenerador 3	H2O/O2 Tanque condensador

Flujo	P [kPa]	T [°C]	FM [kg/h]	V / F	Composición (*100%)							Sale de	Entra a
					Agua	H2	O2	N2	CO2	NO	Metano		
30	4960	232.492	838.956	0.261569	0.901	0.099	-	-	-	-	-	Regenerador 2	HX-1
16	4920	460.933	348.288	1	0.300	0.700	-	-	-	-	-	Regenerador 2	Regenerador 1
35	4900	188.319	348.288	0.959356	0.300	0.700	-	-	-	-	-	Regenerador 1	H2/H2O Tanque condensador
36	5000	21.3686	828.634	0	1	-	-	-	-	-	-	Mezclador M3	Regenerador 1
37	4980	164.3	828.634	0	1	-	-	-	-	-	-	Regenerador 1	H2/H2O Mezclador
38	4900	32.2222	72.8112	1	0.001	0.999	-	-	-	-	-	H2/H2O Tanque condensador	SPL-1
39	4900	32.2222	275.477	0	1	-	-	-	-	-	-	H2/H2O Tanque condensador	Bomba de Recirc. De agua
40	5000	15.9608	553.158	0	1	-	-	-	-	-	-	Bomba de reposición de agua	Mezclador M3
41	4933.11	204.199	104.662	0	0.998	-	0.002	-	-	-	-	H2O/O2 Tanque condensador	Ext. Del proceso
42	4900	32.2222	10.3028	1	0.001	0.999	-	-	-	-	-	SPL-1	H2 Recirc.
43	101.325	21.1111	164.975	0	1	-	-	-	-	-	-	O2/H2O Tanque separador	Ext. Del proceso
Aire	101.353	21.1111	2259.45	1	-	-	0.210	0.780	-	-	-	Ext. Del proceso	Quemador de gas natural

Flujo	P [kPa]	T [°C]	FM [kg/h]	V / F	Composición (*100%)							Sale de	Entra a
					Agua	H2	O2	N2	CO2	NO	Metano		
Gas de Combustión	101.353	1204.43	2325.3	1	0.100	-	0.099	0.741	0.050	0.001	-	Quemador de gas natural	SPL-2
H2/Vapor	4940	799.111	348.288	1	0.300	0.700	-	-	-	-	-	Módulo SOE	Regenerador 2
H2 producido	4900	32.2222	62.5084	1	0.001	0.999	-	-	-	-	-	SPL-1	Ext. Del proceso
Agua bomb. reposición	101.325	15.5556	553.158	0	1	-	-	-	-	-	-	Sist. Agua desmineral.	Bomba de reposición de agua
Gas Natural	101.353	21.1111	65.8571	1	-	-	-	-	-	-	1	Ext. Del proceso	Quemador de gas natural
Flujo normalizado	101.325	0	65.8571	1	-	-	-	-	-	-	1		
Flujo nulo	101.353	1204.43	0	0	0.100	-	0.099	0.741	0.050	0.001			
O2 de salida	101.325	21.1111	497.263	1	0.024	-	0.976	-	-	-	-	O2/H2O Tanque separador	Ext. Del proceso
Vapor/H2	4940	800	838.956	1	0.901	0.099	-	-	-	-	-	HX-1	Módulo SOE
Vap. Arr. Entrante	4940	800	276.23	1	1	-	-	-	-	-	-	HX-2	Módulo SOE
Vap. Arr. Saliente (22)	4940	799.11	766.9	1	0.500	-	0.500	-	-	-	-	Módulo SOE	Regenerador 3
Agua de arrastre	101.32	21.11	276.23	0	1	-	-	-	-	-	-	Sist. Agua de barrido	Bomba de agua de barrido

5.2 Agrupación de equipos en clústeres para el modelado de optimización

Aunque el caso de estudio original (Harvego et al., 2012) describe la planta de producción de hidrógeno organizada en siete módulos funcionales (secciones 5.1.1 - 5.1.7), para el proceso de optimización se ha decidido reorganizar los equipos en nueve clústeres. Esta reorganización responde a necesidades específicas del problema, facilitando la distribución espacial de los equipos y favorece la reducción del costo de bombeo. Cada clúster agrupa equipos que, por su función o disposición física, es conveniente ubicar próximos entre sí. La distribución en clústeres permite una mejor representación de las interconexiones entre equipos. A continuación, se detalla la composición de cada clúster en la Tabla 2, así como su número de identificación dentro del modelo y el número equipos que contiene.

Tabla 2. Clústeres de la planta definidos en el modelo matemático.

Número de clúster (cantidad de equipos)	Equipos dentro de cada clúster
1 (2)	H ₂ /H ₂ O Tanque condensador, Bomba de recirculación de agua
2 (2)	Separador SPL-1, Recirculador de H ₂
3 (2)	Quemador de gas natural, Separador SPL-2
4 (2)	Mezclador H ₂ /H ₂ O, Regenerador 2
5 (4)	Regenerador 1, Sistema de agua desmineralizada, Bomba de reposición, Mezclador M3
6 (1)	Intercambiador de calor HX-2
7 (1)	Intercambiador de calor HX-1
8 (1)	Módulo electrolizador SOE
9 (6)	Sistema de agua de barrido, Bomba de agua de barrido, Tanque condensador H ₂ O/O ₂ , Turbina expansora O ₂ , Tanque separador O ₂ /H ₂ O, Regenerador 3

Es importante destacar que los sistemas de suministro de agua se han modelado como equipos adicionales para establecer claramente la fuente del fluido que alimenta a las bombas principales, aunque no figuraban explícitamente como equipos separados en el caso de estudio original. Esta reorganización permite estimar las distancias entre equipos interconectados y de las pérdidas energéticas asociadas, lo que resulta fundamental para la optimización económica que se

abordará en las secciones siguientes. El arreglo resultante de la optimización estará organizado según estos clústeres, y no según los módulos descritos en el caso de estudio original.

5.3 Modelado del diseño de la distribución de equipos

La programación no lineal entera mixta (MINLP) se ha utilizado, generalmente, para modelar el problema de diseño de la distribución de equipos de proceso (Castillo y Westerlund, 2005; Meller et al., 1998; Montreuil, 1991; Sherali et al., 2003). Un modelo MINLP es aquel que contiene variables discretas y continuas, además de tener restricciones con términos no lineales dentro de su función objetivo (Penteado y Ciric, 1996). La formulación algebraica general del MINLP podría expresarse de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x, y) \\ \text{Sujeta a} & g(x, y) \leq 0 \\ & h(x, y) = 0 \end{array} \quad \begin{array}{l} x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \\ y \in Y \subseteq \mathbb{Z} \end{array}$$

Donde $f(x, y)$ es la función objetivo (que puede contener costos, ganancias, entre otros), x representa un vector de n variables continuas (puede ser flujo, presión, temperatura, composición de una mezcla, tamaño de unidad, y más), y es un vector de variables enteras ($\mathbb{Z}$) que puede tomar sólo valores de 0 y 1. $g(x, y) \leq 0$ denota las restricciones de desigualdad; $h(x, y) = 0$ denota las restricciones de igualdad (por ejemplo: balances de masa y energía, y relaciones de equilibrio) (Floudas, 2008).

La formulación del problema que se tratará en este estudio tiene como objetivo reducir los costos de operación e instalación de la planta, además de ayudar a prevenir el escalamiento de incidentes peligrosos. Los costos de instalación de los equipos (conjunto I), el área que ocupen estos equipos, el riesgo de sufrir accidentes, junto con sus respectivas restricciones de orientación, de posición, de no superposición, de distribución, así como el posible daño debido a una sobrepresión; serán reducidos con el planteamiento de una función objetivo. El modelo matemático se muestra a continuación.

5.3.1 Restricción de orientación de equipos

Las dimensiones l_i y d_i del equipo (i), se obtienen por las restricciones (1) y (2) de orientación (Patsiatzis et al., 2004):

$$l_i = \alpha_i O_i + \beta_i (1 - O_i) \quad \forall i \in I \quad (1)$$

$$d_i = \alpha_i + \beta_i - l_i \quad \forall i \in I \quad (2)$$

Donde: O_i es una variable binaria que dicta la orientación que del equipo, α_i y β_i representan las medidas del equipo i . En la Figura 10 se puede ver un equipo i de longitud α_i y profundidad β_i , que

define su posición según la restricción lo dicte. Cuando $O_i = 0 \rightarrow l_i = \beta_i$ el equipo toma una posición vertical, cuando $O_i = 1 \rightarrow l_i = \alpha_i$ y el equipo toma una posición horizontal.

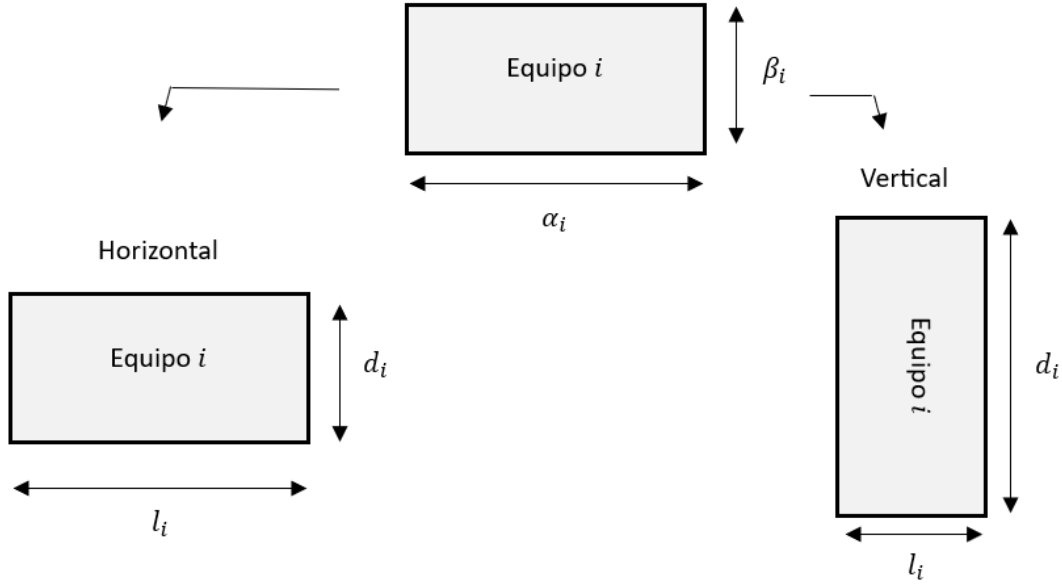


Figura 10. Restricción de orientación de equipos.

5.3.2 Restricción de no superposición

Las siguientes restricciones (ecs. 3-6), definen la restricción de no superposición, las cuales son una versión ligeramente modificada de Patsiatzis et al. (2004), ver Figura 11. Esta restricción ayuda a que dos equipos i y j forzosamente tengan distinta locación, asignando al equipo i coordenadas de posición (x_i, y_i) :

$$x_i - x_j + X_{max} \cdot (1 - W_{i,j}^x) \geq \frac{l_i + l_j}{2} + ES_i + ES_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (3)$$

$$x_j - x_i + X_{max} \cdot (1 - W_{j,i}^x) \geq \frac{l_i + l_j}{2} + ES_i + ES_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (4)$$

$$y_i - y_j + Y_{max} \cdot (1 - W_{i,j}^y) \geq \frac{d_i + d_j}{2} + ES_i + ES_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (5)$$

$$y_j - y_i + Y_{max} \cdot (1 - W_{j,i}^y) \geq \frac{d_i + d_j}{2} + ES_i + ES_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (6)$$

Donde:

- $W_{i,j}^x, W_{j,i}^x, W_{i,j}^y$ y $W_{j,i}^y$ son variables binarias de no superposición.

- X_{max} e Y_{max} dimensiones máximas de posicionamiento, es decir, los valores máximos permitidos para el largo y ancho de toda la planta.
- ES_i y ES_j son los espacios de mantenimiento conservados para que los operadores puedan manejar los equipos.

5.3.3 Restricción de distancia entre equipos

La distancia rectilínea (o Manhattan) entre equipos se utiliza para calcular la tubería requerida. Esta originalmente se expresa como:

$$D_{i,j}^R = |x_i - x_j| + |y_i - y_j| \quad \forall i, j \in N, i \neq j; (i, j) \in Inter \quad (7)$$

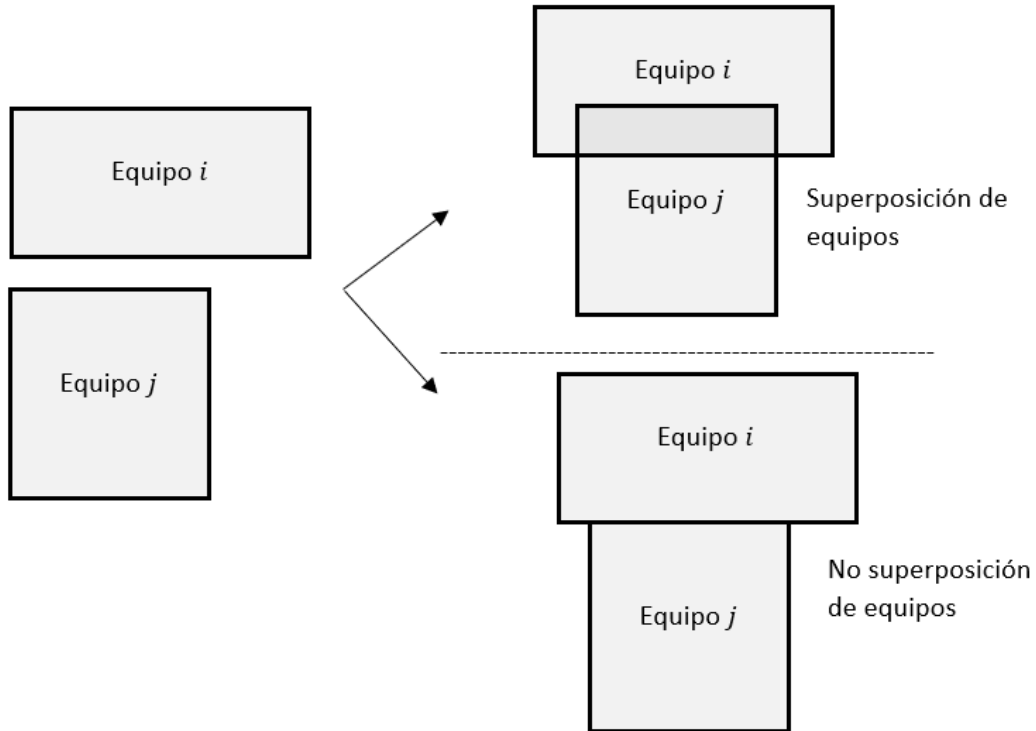


Figura 11. Restricción de no superposición.

Donde (x_i, y_i) son las coordenadas centrales del equipo i , (x_j, y_j) son las coordenadas centrales del equipo j ; $D_{i,j}^R$ es la distancia rectilínea en los equipos i y j ; (i, j) toman valores de números naturales correspondientes al número de equipos de procesos e $Inter$ es la serie de dos equipos interconectados entre sí. Sin embargo, esta ecuación suele remplazarse por una formulación equivalente para eliminar los valores absolutos,

debido a que la mayoría de los algoritmos de solución no son capaces de manejarlos. Por tanto, la ec. (7) es reemplazada por las siguientes expresiones matemáticas.

$$R_{i,j} - L_{i,j} = x_i - x_j \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (8)$$

$$A_{i,j} - B_{i,j} = y_i - y_j \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (9)$$

$$R_{i,j} \leq X_{max} \times W_{i,j}^x \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (10)$$

$$L_{i,j} \leq X_{max} \times (1 - W_{i,j}^x) \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (11)$$

- Para las restricciones de límites verticales:

$$A_{i,j} \leq Y_{max} \times W_{i,j}^y \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (12)$$

$$B_{i,j} \leq Y_{max} \times (1 - W_{i,j}^y) \quad \forall i \neq j; (i,j) \in I \quad (13)$$

$$D_{ij} = D_{ji} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (14)$$

Donde:

- $R_{i,j}$ y $L_{i,j}$ son las variables de distancia horizontal (derecha e izquierda respectivamente).
- $A_{i,j}$ y $B_{i,j}$ son las variables de distancia vertical (arriba y abajo respectivamente).
- $W_{i,j}^x$ y $W_{i,j}^y$ son variables binarias de posicionamiento cuyo valor determina si un equipo i va a estar colocado a la izquierda o a la derecha de un equipo j ; ambos pertenecientes al conjunto de equipos I .
- La Ec. (14) asegura que la distancia rectilínea total de los equipos i a j sea la misma que la distancia de los equipos j a i .

En la Figura 12 se muestran los posibles casos que pueden presentarse según los valores de las variables binarias.

5.4 Análisis económico

Por lo general, los objetivos principales del diseño del arreglo de los equipos dentro de una instalación son: mejorar el desempeño de los procesos de producción, minimizar las distancias que recorren los flujos de material y los trabajadores dentro de la planta, y minimizar el costo de manejo de materiales y los tiempos de proceso (Kovács, 2019). Los cuales son factores que afectan directamente la economía de una planta de producción de hidrógeno.

Estos costos se dividen en dos grupos: costos de capital e inversión inicial (CAPEX, por sus siglas en inglés: Capital Expenditures) y costos de operación y mantenimiento (OPEX, por sus siglas en inglés:

Operational Expenditures); básicamente, los costos CAPEX son aquellos que se hacen para la puesta en marcha de la planta y los costos OPEX son aquellos que se hacen a lo largo del ciclo de vida de esta para su correcto funcionamiento.

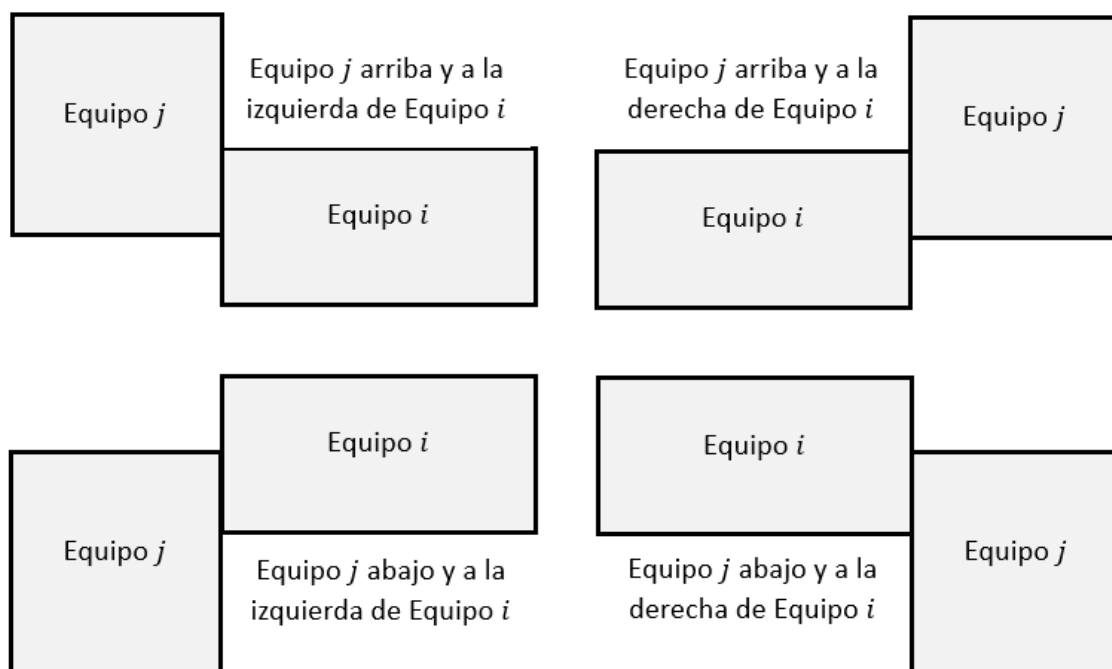


Figura 12. Restricción de distancia entre equipos.

5.4.1 Gastos de capital (CAPEX)

En esta sección se describen los gastos de capital considerados en este trabajo.

5.4.1.1 Costos de equipamiento inicial

En la Tabla 3 se muestran datos correspondientes a los equipos de la planta de producción de 15,000 kg/día hidrógeno. Debido al gran tamaño de la planta y su respectiva economía de escala, el costo de producción de hidrógeno es de \$2.68/kg (Harvego et al., 2012).

Tabla 3. Costos de adquisición e instalación de los equipos de la planta del caso de estudio (Harvego et al., 2012), los cuales corresponden al año 2010.

Equipo/componente	Costo base (de adquisición) en USD	Factor de costo de instalación	Costo total (con instalación) en USD
Sistema de suministro de agua	\$30,368	1.2	\$36,442
Bomba de agua	\$46,100	4.1	\$189,471

Tanque se separación agua/H ₂	\$11,520	4.1	\$47,347
Bomba recicladora de agua	\$6,400	4.1	\$26,304
Regenerador 1	\$23,500	4.1	\$96,585
Regenerador 2	\$18,200	4.1	\$74,802
Regenerador 3	\$45,800	4.1	\$188,238
H ₂ O/O ₂ Knockout Tank	\$11,520	4.1	\$47,347
Tanque se separación agua/O ₂	\$9,600	4.1	\$39,456
Expansor O ₂ /vapor	\$104,638	1.8	\$192,534
Bomba de agua de barrido	\$41,700	4.1	\$171,387
Recirculador de H ₂	\$1,500	4.1	\$6,165
Calentador de gas natural 1	\$59,289	4.1	\$243,678
Calentador de gas natural 2	\$32,016	4.1	\$131,586
Conexiones, equipo eléctrico auxiliar (incluyendo el conversor AC/DC)	\$121,172	1.2	\$145,406
Electrolizador de óxido sólido	\$105,700	1.8	\$190,260
TOTAL	\$669,023		\$1,827,008

Los costos mostrados corresponden al año 2010 en dólares estadounidenses, los costos especificados para “Conexiones, equipo eléctrico auxiliar (incluyendo el conversor AC/DC)” no se tomarán en cuenta del estudio original, ya que las distancias entre equipos estarán variando, apegándose a las restricciones de la sección anterior, por lo que se incluirán en el cálculo de los costos de interconexión durante la optimización de las ubicaciones de los clústeres. La columna costo base muestra el precio de adquisición de los equipos, la columna costo total es la suma del costo base más los gastos de instalación de cada equipo incluyendo mano de obra y componentes auxiliares, para saber cómo se llegó a la cantidades mostradas basta con observar la columna factor de costo de instalación (Harvego et al., 2012). El factor de costo de instalación depende de otros factores como: el material requerido para las tuberías de sus conexiones, la complejidad y tipo de componente, condiciones de operación y trabajo especializado requerido.

5.4.1.2 Costos de terreno e instalación física

El área total (m^2) que se requerirá para la planta de producción queda determinada por:

$$A = L_x \cdot L_y \quad (15)$$

Donde L_x y L_y (m) son las coordenadas máximas en x y y alcanzadas por lo equipos (i) bajo las restricciones espaciales de la sección anterior, considerando áreas de mantenimiento y parámetros de seguridad que se definirán más adelante. El costo del terreno (\$) es, por lo tanto:

$$C_{\text{área}} = A \cdot C_t \quad (16)$$

Donde C_t es el costo por metro cuadrado ($\$/m^2$) parametrizado. En cuanto al costo de la tubería requerida para las interconexiones, se define:

$$C_{ij} = 1.2 \cdot C_{mt} \cdot D_{ij} \quad (17)$$

Donde:

- 1.2 por el factor de instalación de la Tabla 3.
- C_{ij} es el costo (\$) de la tubería requerida para interconectar dos equipos específicos.
- C_{mt} es el costo de adquisición por metro de tubería ($\$/m$).
- D_{ij} es la distancia entre dos equipos específicos.

5.4.1.3 Costos indirectos de capital depreciable

En la Tabla 4 se muestran estos costos, que son aquellos necesarios para implementar el proyecto de producción de hidrógeno que no están directamente relacionados con la compra e instalación de los equipos físicos, pero que son esenciales para que la planta pueda ser construida y operar legalmente (Harvego et al., 2012).

Tabla 4. Costos indirectos de capital depreciable

Concepto	Costo (\$)
Preparación y acondicionamiento del sitio	74,344
Ingeniería y diseño	30,000
Contingencia de proyecto	91,350
Costos iniciales de permisos	30,000
TOTAL	225,694

5.4.2 Gastos Operativos (OPEX)

En esta sección se detallan los costos de operación o OPEX.

5.4.2.1 Costo de energía

Según lo reportado por Harvego et al. (2012), los consumos de energía eléctrica para las bombas son:

Tabla 5. Parámetros de energía para las bombas del proceso

Bomba	Eficiencia adiabática (%)	Potencia (<i>kW</i>)
De recirculador de H ₂	75	0.0786365
De agua de barrido	75	0.492736
De reposición de agua	75	0.989366
De recirculación de agua	75	0.0101698

Para el módulo electrolizador se reporta un consumo de 2114 *kW* que es por lejos el equipo de mayor consumo; sin embargo, esta no es toda la energía requerida para este módulo, el cual opera mediante un balance energético que optimiza la eficiencia global del proceso, que se divide en dos componentes energéticos fundamentales:

1. Precalentamiento térmico de los gases de alimentación: cuyo requerimiento de energía se obtiene de los intercambiadores de calor conectados al módulo electrolizador (observar los flujos Vapor/H₂ y Vapor de arrastre entrante de la Tabla 1), aprox. 730 *kW*. Este precalentamiento es esencial para que los flujos de entrada al electrolizador alcancen la temperatura de operación óptima de 800 °C. Sin este acondicionamiento térmico previo, la energía eléctrica requerida por el electrolizador sería sustancialmente mayor, lo que reduciría drásticamente la eficiencia global del sistema.
2. Energía eléctrica para el proceso de electrólisis: una vez que los gases han sido precalentados, el electrolizador requiere 2114 *kW* para realizar la separación electroquímica del agua en hidrógeno y oxígeno, esta energía es obtenida directamente de la red eléctrica.

Esta configuración aprovecha la recuperación de calor y minimiza el requerimiento neto de energía, logrando una eficiencia de producción de hidrógeno del 97.6% en el electrolizador.

El costo de la energía eléctrica obtenida de la red se incluye en la Tabla 6 y el término empleado que engloba los costos para la energía eléctrica por año (\$/año) que se implementará en la función objetivo queda como:

$$C_E = \sum_i P_i \cdot E \cdot H \quad (18)$$

Donde P_i es la energía consumida (*kW*) por cada equipo i , E es el costo de esa energía (\$/*kWh*) y H es el tiempo trabajado por año (*h/año*).

5.4.2.1 Costos fijos de operación y mantenimiento

Estos son gastos recurrentes que la planta debe pagar cada año independientemente de su nivel de producción, según lo reportado por Harvego et al. (2012), se incluyen:

- Licencias, permisos y tarifas anuales (\$1,000).

- Impuestos a la propiedad y seguros (2% de la inversión total de capital).
- Alquiler del terreno (\$4,186), el cual será sustituido por el costo de la compra.
- Costos de materiales para mantenimiento y reparaciones (\$91,350).

5.4.2.2 Costos variables de operación y mantenimiento

Para el módulo electrolizador se sugiere destinar un 5% del capital depreciable (Tabla 3 y Tabla 4), mientras que para el resto de equipos (contenedores, válvulas, bombas, etc.) se sugiere destinar un 2% adicional de este mismo capital depreciable para reemplazos no planificados (Harvego *et al.*, 2012).

5.4.2.3 Costos de insumos operativos

Los principales insumos para la planta son gas natural, electricidad y agua desmineralizada. Para la electricidad se hará un ajuste más adelante, en cuanto al gas natural y agua desmineralizada se registran los parámetros base de la Tabla 6, para el gas natural se consideran condiciones normalizadas (a una temperatura de 0°C):

Tabla 6. Insumos materiales para la planta.

Parámetro	Gas natural	Agua desmineralizada	Electricidad
Costo base	0.2101 (\$/m ³)	0.0049 (\$/gal)	0.055420854 (\$/kWh)
Consumo	1.4676 (m ³ /kgH ₂)	2.3662 (gal/kgH ₂)	32.8267 (kWh/kgH ₂)
Costo base anual	143,858 (\$/año)	5,476 (\$/año)	848,641 (\$/año)

5.4.2.4 Costos debidos a la pérdida de eficiencia en interconexiones

El transporte de materia a través de tuberías da como resultado ciertas pérdidas energéticas debidas a diversos factores físicos. Para calcular estas pérdidas se adoptó el modelo propuesto por Wang y colaboradores (2018) con modificaciones para no considerar pérdidas por cambios de altura. Las pérdidas se expresan con la siguiente serie de ecuaciones, comenzando por el costo de bombeo por año:

$$POC = E \cdot H \sum_{m=1}^2 P_m \quad (19)$$

Donde:

- POC es el costo de bombeo por año (\$/año) que implican las 2 bombas principales encargadas de suministrar el agua necesaria al proceso (bomba de reposición de agua y bomba de agua de barrido).
- E es el precio de la energía eléctrica (\$/kWh).

- H es el tiempo trabajado por año, definido como 8,000 (h/año), considerando que el resto del tiempo es destinado a mantenimiento de la planta.
- P_m es la potencia necesaria para hacer funcionar las bombas (kW).

La potencia para cada bomba podrá variar en función de las pérdidas de energía que experimentan los fluidos:

$$P_m = \frac{Q}{\eta} \left(\frac{\Delta P}{\rho} + h_m \right) \quad (20)$$

Donde:

- Q es el flujo másico que pasa a través de la tubería (kg/s).
- η es la eficiencia de la bomba, establecida como 75% para todas las bombas según la Tabla 5.
- ΔP es el diferencial de presión que debe generar la bomba (kPa).
- ρ es la densidad del fluido (kg/m³).
- h_m es la pérdida energética de la bomba m debido a la fricción y accesorios (J/kg).

Las pérdidas energéticas se dividen en mayores (tubería) y menores (accesorios). Las pérdidas por fricción en las tuberías se estiman usando la expresión:

$$h_{f,m} = \frac{\lambda D_{ij} u_m^2}{2 D_{in}} \quad (21)$$

Donde:

- λ es el factor de fricción, el valor típico para acero inoxidable/agua desmineralizada es 0.002.
- D_{ij} es la longitud de la tubería que transporta el fluido, es decir, la distancia entre el equipo de origen y el equipo al que debe llegar el fluido (m). Esta distancia es variable y dependerá de las restricciones espaciales del modelo, excepto para aquellos flujos cuyo equipo de salida y entrada se encuentran dentro de un mismo módulo de equipos, para los cuales se considera una distancia constante predefinida; más adelante se explica esta idea a detalle.
- u_m^2 es el cuadrado de la velocidad del fluido (m²/s²).
- D_{in} es el diámetro interno de la tubería, se mantiene un diámetro constante para todas las tuberías del sistema de 2 pulgadas (0.0508 m).

Por otra parte, las pérdidas energéticas en los accesorios se determinan usando:

$$h_{a,m} = h_{f,m} \cdot \frac{f_{accesorios}}{f_{fricción}} \quad (22)$$

Donde:

- $f_{\text{accesorios}}$ es la fracción de las pérdidas totales atribuibles a accesorios (20%).
- $f_{\text{fricción}}$ es la fracción de las pérdidas totales atribuibles a fricción (80%).

Sin embargo, aunque Harvego et al. (2012) reportan las potencias requeridas para el funcionamiento de las bombas, las cuales se muestran en la Tabla 5, estas potencias sólo servirán para transportar el fluido hasta una distancia máxima D cumpliendo con los parámetros termodinámicos especificados en la Tabla 1; además no se reportan pérdidas energéticas debidas al recorrido de los fluidos a través de las tuberías, si se consideran estas pérdidas la potencia requerida para cada bomba será mayor a la reportada.

En sistemas de tuberías típicos, las pérdidas por fricción (mayores) suelen dominar, constituyendo aproximadamente el 85-90% de las pérdidas totales, mientras que las pérdidas menores, debidas a cambios en la geometría de la tubería o accesorios, representan el 10-15% restante (Gerhart et al., 2016). Para este trabajo se definen las pérdidas por fricción como el 80% de las pérdidas energéticas totales, mientras que el 20% restante serán pérdidas debidas a accesorios y equipos, puesto que dentro de algunos equipos pueden ocurrir intercambios de calor y pequeños cambios de dirección de los flujos. Por estas razones se opta por definir potencias variables para las dos bombas principales en función de las distancias que tengan que recorrer los flujos y las pérdidas de energía que sufrirán dichos flujos a lo largo de estos recorridos.

Como consideraciones complementarias, cada bomba cuenta con su propio sistema de suministro de agua, pero estos sistemas no figuran en los costos de adquisición de equipos. A su vez, se definen conjuntos de flujos cuyas sumas de pérdidas energéticas deben ser compensadas con el trabajo de cada bomba, los detalles de cada flujo se pueden consultar en la Tabla 1 y Figura 1.

La bomba de reposición de agua recibe agua del sistema de agua desmineralizada a presión ambiente (101.325 kPa) y debe elevarla hasta aproximadamente 5,000 kPa (como se reporta en el flujo 'agua de bomba de reposición' de la Tabla 1), pero se debe compensar según los resultados de las distancias recorridas (pérdidas energéticas). Esta bomba alimenta la siguiente serie de flujos identificados en la Tabla 1 en el mismo orden aquí descrito: Agua de bomba de reposición, Flujo 40, Flujo 36, Flujo 37, Flujo 2, Flujo 30, Vapor/ H_2 , H_2 /vapor, Flujo 16, Flujo 35, Flujo 38, Flujo 39 y Flujo 42.

Por su parte, la bomba de agua de barrido recibe agua a presión ambiente (101.325 kPa) y debe elevarla hasta aproximadamente 4,970 kPa . Esta bomba alimenta otra serie de flujos identificados en la Tabla 1, que incluyen: Agua de arrastre, Flujo 27, Flujo 24, Flujo 29, Flujo 28, Flujo 17, Vapor de arrastre entrante y Vapor de arrastre saliente (Flujo 22 en la Figura 1).

La densidad de los fluidos se calcula mediante un método simplificado que considera las propiedades físicas del fluido en diferentes condiciones para asignar valores típicos, estas aproximaciones permiten estimar propiedades coherentes sin necesidad de recurrir a ecuaciones de estado complejas. Este método clasifica los fluidos según su estado y composición como se muestra en la Tabla 7, el tipo de fluido depende de las condiciones (F/V y F/H) reportadas de la Tabla 1, siendo:

- F/V la fracción de vapor del flujo.
- F/H la fracción de vapor.
- Los intervalos de presión y temperatura son los mismos que se reportaron en el caso de estudio para cada flujo.
- Los valores de ρ_{vap} , ρ_{H_2} y ρ_{liq} se calculan según los rangos de la misma tabla.

La velocidad del fluido se determina a partir del flujo másico, la densidad calculada y el área de la tubería:

$$u = \frac{Q}{\rho \cdot A} \quad (23)$$

Donde A es el área de la sección transversal de la tubería (m^2) y el resto de variables son los mismos que se definen en ecuaciones anteriores de esta misma sección.

Para cada bomba, la potencia total requerida debe ser suficiente para elevar la presión del fluido desde la entrada (P_{amb}) hasta la presión requerida por el sistema.

$$\Delta P = P_{requerida} - P_{amb} \quad (24)$$

$$W_{hid} = \frac{Q \cdot \Delta P}{\rho} \quad (25)$$

$$P_{elevación} = \frac{W_{hid}}{\eta} \quad (26)$$

Donde:

- ΔP , Q , ρ y η son las mismas variables de las ecs. (19) y (20).
- $P_{requerida}$ es la presión a la que se requiere elevar el agua que sale de las bombas principales (kPa).
- W_{hid} es la potencia necesaria para alcanzar dicha presión (kW).
- $P_{elevación}$ es la potencia (kW) que necesita la bomba para elevar la presión del fluido de P_{amb} a $P_{requerida}$.

Tabla 7. Densidades parametrizadas para los flujos del proceso.

Tipo de fluido	Condiciones	Intervalo	Densidad (kg/m^3)
Agua líquida	$F/V < 0.05$	$T \leq 50^\circ C$	1000
		$50 < T \leq 100^\circ C$	980
		$100 < T \leq 200^\circ C$	900
		$200 < T \leq 300^\circ C$	800
		$300^\circ C < T$	700
Vapor de agua	$F/V > 0.95$ $F/H < 0.05$	$P \leq 200 kPa$	0.6

Tipo de fluido	Condiciones	Intervalo	Densidad (kg/m^3)
		$200 < P \leq 1000kPa$	2.0
		$1000 < P \leq 3000kPa$	5.0
		$3000 < P \leq 5000kPa$	8.0
H₂ gaseoso	$F/V > 0.95$ $F/H > 0.95$	$P \leq 1000kPa$	0.08
		$1000 < P \leq 3000kPa$	0.24
		$3000 < P \leq 5000kPa$	0.4
Mezclas simples	$0.05 \leq F/V \leq 0.95$ $F/H < 0.5$	Para cualquier P y T	ρ $= (F/V \cdot \rho_{vap})$ $+ (\rho_{liq}(1 - F/V))$
Mezclas con alto H₂	$0.05 \leq F/V \leq 0.95$ $F/H \geq 0.5$	Para cualquier P y T	ρ $= (\rho_{H_2} \cdot F/H)$ $+ (\rho_{vap}(1 - F/H))$

Además, como se mencionó anteriormente, se deben compensar todas las pérdidas energéticas acumuladas a lo largo del recorrido de los diferentes flujos, asegurando que el último tramo del circuito mantenga la presión necesaria para su correcto funcionamiento:

$$W_{p\acute{e}rdidas} = \frac{Q \cdot (h_{a,m} + h_{f,m})}{\eta} \quad (27)$$

Por lo tanto, la ec. (20) que expresa la potencia necesaria para cada una de las bombas principales queda como:

$$P_m = P_{elevaci\acute{o}n} + W_{p\acute{e}rdidas} \quad (28)$$

Para la bomba de reposición de agua, se debe asegurar que el fluido llegue hasta el flujo 42 (H₂ Recirculador) con una presión de 4,900 kPa después de haber pasado por los flujos asociados y haber experimentado las correspondientes pérdidas energéticas. Mientras que la bomba de agua de barrido debe proporcionar la presión necesaria para que el flujo final asociado a ella (Flujo 22) llegue a su destino con su correspondiente presión descrita en la Tabla 1.

De esta manera, la distribución óptima de equipos minimizará las distancias entre componentes interconectados, reduciendo las pérdidas por fricción y, consecuentemente, disminuyendo los costos de bombeo durante la vida útil de la planta.

5.4.3 Función objetivo con consideraciones económicas

Implementando las restricciones espaciales y consideraciones económicas del caso de estudio, la función objetivo toma la forma:

$$Z_{min} = \sum_{(i,j) \in I} C_{ij} + C_{\text{área}} + \sum_{i \in I} CE_i + \sum_{i \in I} C_E + COM_{fi} + \sum_{i \in I} COM_i + \sum_{(i,j) \in I} POC \quad (29)$$

Donde:

- Z_{min} es el costo total a minimizar
- C_{ij} es el costo de interconexión entre equipos (ec. 17)
- $C_{\text{área}}$ es el costo del área requerida (ec. 16)
- CE_i es el costo de los componentes del equipo i
- C_E es el costo de la energía eléctrica consumida por los equipos que requieran de su consumo, excepto las dos bombas principales
- COM_{fi} representa los costos fijos de O&M (sección 5.3.2.2)
- COM_i representa los costos variables de O&M para el reemplazo de equipos (7% del capital depreciable anual según la sección 5.3.2.3)
- POC es el costo de bombeo (ec. 19)

Por tanto, los costos mencionados se consideran al primer año de operación. En trabajos futuros se considerará el Costo Nivelado del Hidrógeno (o LCOH, por sus siglas en inglés: Levelized Cost of Hydrogen).

5.5 Análisis de identificación de peligros: Análisis Funcional de Operatividad (HAZOP)

En la Figura 13 se muestra el esquema para realizar un análisis cuantitativo de riesgo o QRA . El procedimiento incluye una recopilación de datos del proceso, elaborar un análisis de identificación de peligros, determinar la frecuencia de escenarios de liberación de hidrógeno (pérdida de contención), analizar la consecuencia de estos accidentes, con lo cual es posible evaluar el riesgo (que es el producto de la frecuencia por consecuencia). Una vez evaluado el riesgo se establece si es un valor aceptado o si se requiere reducir más. En este último caso, se pueden implementar metodologías semicuantitativas como el análisis de capas de protección independientes (LOPA, por siglas en inglés, *Layer Of Protection Analysis*). A continuación, se detallan estos elementos necesarios para cuantificar y reducir el riesgo.

El Análisis Funcional de Operatividad (AFO o HAZOP por sus siglas en inglés, *Hazard and Operability Study*), es una técnica que permite la identificación de riesgos que toma en cuenta el hecho de que los accidentes son producto de una desviación no deseada de las variables de proceso con respecto de los parámetros normales de operación

(Protección Civil, 1994); las causas y consecuencias de estas desviaciones se dividen en los siguientes pasos:

5.5.1 Definición del área de estudio.

Primero, hay que delimitar las áreas sobre las cuales se aplica el estudio. Es decir, dentro de una planta química, la instalación de proceso se puede dividir en subsistemas o entidades funcionales, por ejemplo: preparación de materias primas, reacción, separación de disolventes, entre otros.

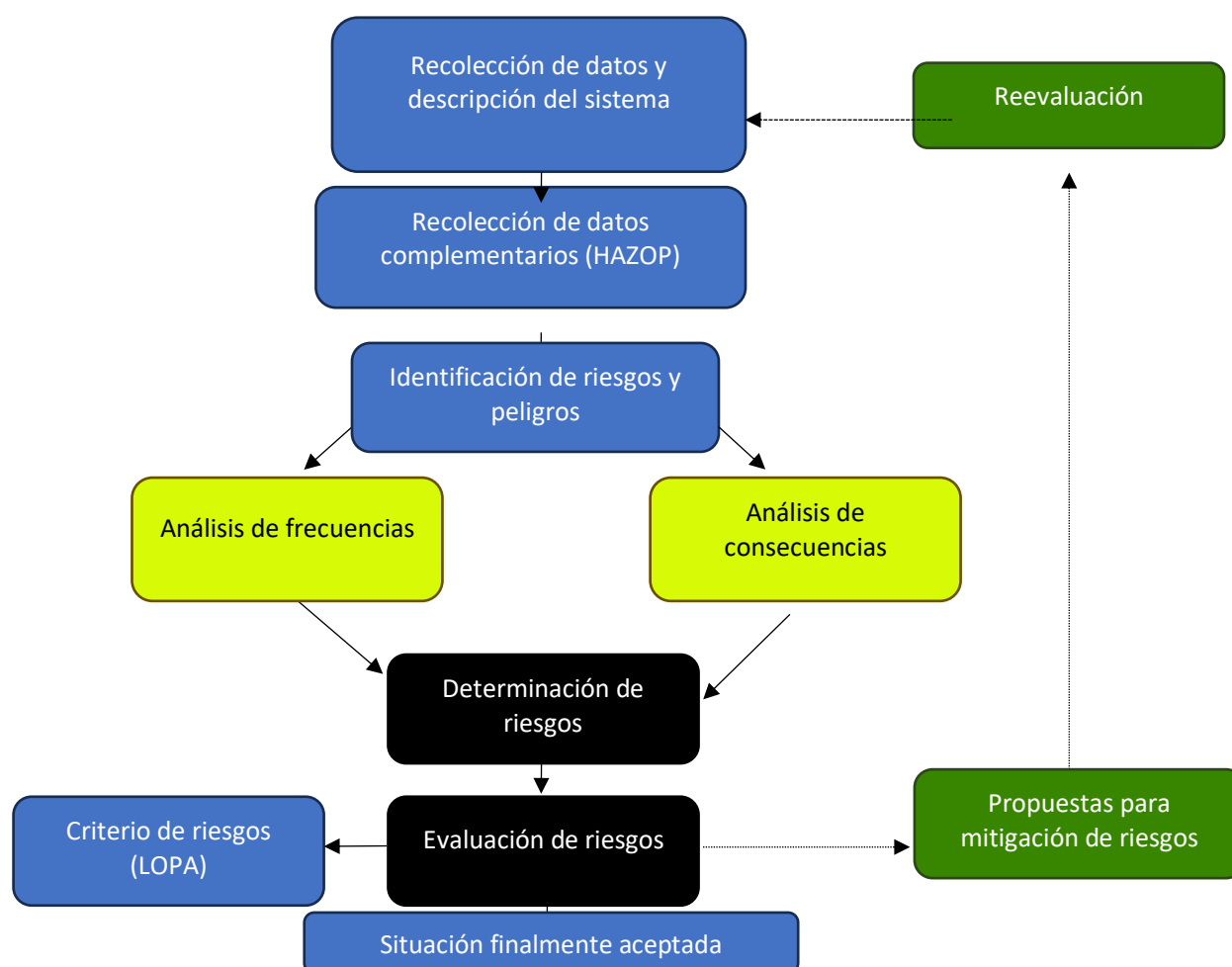


Figura 13. Diagrama de flujo de la metodología para Evaluación y aceptabilidad de riesgos (Freeman, 1990).

5.5.2 Definición de los nodos para el análisis HAZOP.

La guía de métodos cualitativos para el análisis de riesgos sigue la metodología siguiente (Protección Civil, 1994); en cada subsistema se identifica una serie de nodos o puntos

bien definidos dentro del proceso como pueden ser tuberías, un reactor, una bomba, un depósito, etc. Cada nodo es numerado en el mismo orden en que ocurren los eventos dentro del proceso. Se aplica la metodología pertinente a cada punto. Cada nodo definirá su valor según la variable de proceso acorde (presión, temperatura, caudal, nivel, composición, viscosidad, estado, entre otros).

Los nodos se seleccionarán dependiendo de la magnitud de la variación de las variables de interés del proceso. Se recomienda utilizar esquemas (como pueden ser los diagramas de tuberías e instrumentación de la instalación) que permitan identificar la posición de los nodos para asegurar una buena reproducibilidad.

Es de notar que por su amplio uso la técnica tiene variantes en cuanto a su utilización que se consideran igualmente válidas, por ejemplo, la nomenclatura puede variar según el autor o el país en que se aplique la metodología (Protección Civil, 1994).

5.5.3 Desviaciones a estudiar.

Cada nodo se sistematiza dentro de las desviaciones de las variables de interés asignando palabras guía para la identificación de dichos nodos. La Tabla 8 muestra algunos ejemplos de estas palabras guía, lo que significa cuando cada una de estas palabras aparece en el análisis, las variables tangibles sobre las que pueden ser aplicadas y algunas observaciones de casos que pueden presentarse.

El HAZOP puede consistir en una aplicación exhaustiva de todas las combinaciones posibles entre palabra guía y variable de proceso, descartándose durante la sesión las desviaciones que no tengan sentido para un nodo determinado (Protección Civil, 1994).

5.6 Integración con HyRAM+.

HyRAM+ (por sus siglas en inglés, *Hydrogen Risk Assessment Models*) es un software que integra datos y métodos para evaluar la seguridad en infraestructuras de uso, entrega y almacenamiento de hidrógeno. Proporciona una plataforma que incorpora modelos científicos e ingenieriles validados, relevantes para la seguridad del trabajo con hidrógeno. Este software está compuesto principalmente por dos módulos: QRA y PHYSICS.

Tabla 8. Palabras guía método HAZOP (Protección Civil, 1994).

Palabra guía	Significado	Aplicación	Observaciones
--------------	-------------	------------	---------------

No	Se plantea para estudiar la ausencia de la variable a la cual se estudia.	Caudal. Nivel (vaciado de un equipo).	
Inverso	Analiza la inversión en el sentido de la variable.	Caudal.	Esta variable en algunos casos se omite y su efecto se contempla en la anterior.
Más	Se plantea para estudiar un aumento cuantitativo de la variable.	Temperatura. Presión. Caudal (composición constante). Nivel.	
Menos	Se plantea para estudiar una disminución cuantitativa de la variable.	Ídem.	
Más cualitativo	Estudia el aumento o presencia de un componente en una mezcla.	Caudal (mayor cantidad de un producto en una mezcla, presencia de impurezas).	
Menos cualitativo	Estudia la reducción de un componente en una mezcla.	Caudal (menor cantidad de un producto en una mezcla, alta de un componente).	Ambos términos corresponden a los originales. <i>Part of</i> : cambio de composición. <i>More than</i> : Más componentes presentes en el sistema (vapor, sólidos, impurezas).
Otro	Estudia el cambio completo en la variable.	Caudal (cambio completo de producto). Estado.	El término original (<i>other than</i>) se aplica a cambios respecto de la operación normal (mantenimiento, cambio, catalizador...).

El módulo QRA (por sus siglas en inglés, *Quantitative Risk Assessment*) incorpora:

- Probabilidades genéricas de fallas de equipos para nueve tipos de componentes.
- Modelos probabilísticos del efecto del flujo de calor y sobrepresión en humanos y estructuras.
- Cálculo de métricas de riesgo:

- FAR (*Fatal Accident Rate*) - número esperado de fatalidades en 100 millones de horas de exposición.
- AIR (*Average Individual Risk*) - número esperado de fatalidades por individuo expuesto.
- PLL (*Potential Loss of Life*) - número esperado de fatalidades por año del sistema.
- Número esperado de fugas por año (casos con y sin ignición).
- Número esperado de plumas de fuego por año (casos de ignición inmediata).
- Número esperado de explosiones o detonaciones rápidas por año (ignición retardada).

Por su parte, el módulo *PHYSICS* incorpora los siguientes modelos, validados experimentalmente para el cálculo de efectos físicos, asociados con la liberación accidental de hidrógeno:

- Concentración de hidrógeno en plumas no encendidas.
- Temperatura y trayectoria de plumas de fuego.
- Flujo de calor radiante (kW/m^2) en las posiciones que ocupan los equipos en el área de la planta.
- Contornos de distancia para niveles de flujo de calor específicos.
- Historiales de concentración, masa inflamable y sobrepresión debido a acumulación e ignición retardada.

La integración de estos módulos con el modelo de optimización permite generar un diseño que no solo minimiza costos operativos y de instalación, sino que también incorpora criterios cuantitativos de seguridad desde la etapa de diseño. Es importante aclarar que no se hace uso directo del software, sino que se utilizan los códigos brutos de Python obtenidos del repositorio de *GitHub* para los cuales no se requiere de una licencia especial.

5.7 Cuantificación de frecuencias de fallos y escenarios peligrosos

En la industria, es común querer calcular los daños totales que un accidente pueda ocasionar en caso de ocurrir varias veces, todo evento está sujeto a la probabilidad de ocurrir en más de una ocasión. Para ello, se cuenta con una serie de métodos que ayudan al cálculo de estos escenarios. Al evaluar el riesgo, primero se deben emplear métodos semicuantitativos. Si el peligro particular no es susceptible de métodos semicuantitativos, se pueden considerar métodos cualitativos (como HAZOP). A continuación, se aborda la metodología semicuantitativa que se usó.

5.7.1 Modelado de frecuencias de fugas

Los datos de frecuencia de fallos utilizados por HyRAM+ provienen de un registro histórico de incidentes en la industria del hidrógeno, los cuales han sido compilados y validados por *Sandia National Laboratories*. Estos datos se encuentran integrados en el módulo QRA como parámetros de distribuciones probabilísticas, permitiendo un enfoque estadístico para la estimación de frecuencias de fuga.

5.7.2 Frecuencia de fallos de HYRAM+

La Tabla 9 para equipos comunes que trabajan con hidrógeno de (LaChance et al., 2009) muestra los parámetros estadísticos para frecuencia de fugas de distintos tamaños, los cuales caracterizan el comportamiento probabilístico de las fugas mediante distribuciones lognormales:

μ (μ) es el parámetro de ubicación que determina la mediana de la distribución en escala logarítmica, mientras más pequeño el valor, menor será la frecuencia de fuga. σ (sigma) determina la dispersión o variabilidad de los datos, es directamente proporcional a la incertidumbre de las frecuencias asociadas. Media es el promedio aritmético de las frecuencias de fuga.

Los percentiles:

- 5^{to}. Valor por debajo del cual se encuentra el 5% de las frecuencias.
- 50^{mo}. Valor central de la distribución (mediana).
- 95^{to}. Valor por debajo del cual se encuentra el 95% de las frecuencias.

Tabla 9. Parámetros para frecuencias de fugas de componentes individuales.

Componente	Tamaño de fuga	μ	σ	Media	5 ^{to} Percentil	50 ^{mo} Percentil	95 ^{to} Percentil
Compresores	0.01%	-1.73	0.22	1.8×10^{-1}	1.2×10^{-1}	1.8×10^{-1}	2.6×10^{-1}
	0.10%	-3.95	0.50	2.2×10^{-2}	8.5×10^{-3}	1.9×10^{-2}	4.4×10^{-2}
	1%	-5.16	0.80	7.9×10^{-3}	1.5×10^{-3}	5.8×10^{-3}	2.2×10^{-2}
	10%	-8.84	0.84	2.1×10^{-4}	3.6×10^{-5}	1.4×10^{-4}	5.7×10^{-4}
	100%	-11.34	1.37	3.0×10^{-5}	1.3×10^{-6}	1.2×10^{-5}	1.1×10^{-4}
Cilindros	0.01%	-13.92	0.67	1.1×10^{-6}	3.0×10^{-7}	9.0×10^{-7}	2.7×10^{-6}
	0.10%	-14.06	0.65	9.6×10^{-7}	2.7×10^{-7}	7.8×10^{-7}	2.3×10^{-6}
	1%	-14.44	0.65	6.6×10^{-7}	1.8×10^{-7}	5.4×10^{-7}	1.6×10^{-6}
	10%	-14.99	0.65	3.8×10^{-7}	1.1×10^{-7}	3.1×10^{-7}	9.0×10^{-7}
	100%	-15.62	0.68	2.1×10^{-7}	5.3×10^{-8}	1.6×10^{-7}	5.0×10^{-7}
Filtros	0.01%	-5.25	1.99	3.8×10^{-2}	2.0×10^{-4}	5.3×10^{-3}	1.4×10^{-1}
	0.10%	-5.29	1.52	1.6×10^{-2}	4.2×10^{-4}	5.0×10^{-3}	6.1×10^{-2}
	1%	-5.34	1.48	1.4×10^{-2}	4.2×10^{-4}	4.8×10^{-3}	5.5×10^{-2}
	10%	-5.38	0.89	6.9×10^{-3}	1.1×10^{-3}	4.6×10^{-3}	2.0×10^{-2}
	100%	-5.43	0.95	6.9×10^{-3}	9.1×10^{-4}	4.4×10^{-3}	2.1×10^{-2}
	0.01%	-3.92	1.66	7.9×10^{-2}	1.3×10^{-3}	2.0×10^{-2}	3.0×10^{-1}
	0.10%	-6.12	1.25	4.8×10^{-3}	2.8×10^{-4}	2.2×10^{-3}	1.7×10^{-2}

Componente	Tamaño de fuga	μ	σ	Media	5 ^{to} Percentil	50 ^{mo} Percentil	95 ^{to} Percentil
Bridas	1%	-8.33	2.20	2.7×10^{-3}	6.4×10^{-6}	2.4×10^{-4}	9.0×10^{-3}
	10%	-10.54	0.83	3.7×10^{-5}	6.7×10^{-6}	2.6×10^{-5}	1.0×10^{-4}
	100%	-12.75	1.83	1.5×10^{-5}	1.4×10^{-7}	2.9×10^{-6}	5.9×10^{-5}
Empaques	0.01%	-6.83	0.28	1.1×10^{-3}	6.8×10^{-4}	1.1×10^{-3}	1.7×10^{-3}
	0.10%	-8.73	0.61	1.9×10^{-4}	5.9×10^{-5}	1.6×10^{-4}	4.4×10^{-4}
	1%	-8.85	0.59	1.7×10^{-4}	5.4×10^{-5}	1.4×10^{-4}	3.8×10^{-4}
	10%	-8.96	0.59	1.5×10^{-4}	4.9×10^{-5}	1.3×10^{-4}	3.4×10^{-4}
	100%	-9.91	0.88	7.3×10^{-5}	1.2×10^{-5}	5.0×10^{-5}	2.1×10^{-4}
Juntas	0.01%	-9.58	0.17	7.0×10^{-5}	5.2×10^{-5}	6.9×10^{-5}	9.1×10^{-5}
	0.10%	-12.92	0.81	3.4×10^{-6}	6.4×10^{-7}	2.4×10^{-6}	9.3×10^{-6}
	1%	-11.93	0.51	7.5×10^{-6}	2.8×10^{-6}	6.6×10^{-6}	1.5×10^{-5}
	10%	-12.09	0.58	6.7×10^{-6}	2.2×10^{-6}	5.6×10^{-6}	1.5×10^{-5}
	100%	-12.22	0.61	6.0×10^{-6}	1.8×10^{-6}	4.9×10^{-6}	1.3×10^{-5}
Pipas	0.01%	-11.91	0.69	8.5×10^{-6}	2.1×10^{-6}	6.7×10^{-6}	2.1×10^{-5}
	0.10%	-12.57	0.71	4.5×10^{-6}	1.1×10^{-6}	3.5×10^{-6}	1.1×10^{-5}
	1%	-13.88	1.14	1.8×10^{-6}	1.4×10^{-7}	9.3×10^{-7}	6.1×10^{-6}
	10%	-14.59	1.16	9.1×10^{-7}	6.8×10^{-8}	4.6×10^{-7}	3.1×10^{-6}
	100%	-15.73	1.72	6.4×10^{-7}	8.8×10^{-9}	1.5×10^{-7}	2.5×10^{-6}
Válvulas	0.01%	-5.19	0.18	5.7×10^{-3}	4.2×10^{-3}	5.6×10^{-3}	7.5×10^{-3}
	0.10%	-7.31	0.42	7.3×10^{-4}	3.4×10^{-4}	6.7×10^{-4}	1.3×10^{-3}
	1%	-9.71	0.98	9.8×10^{-5}	1.2×10^{-5}	6.0×10^{-5}	3.0×10^{-4}
	10%	-10.34	0.69	4.1×10^{-5}	1.0×10^{-5}	3.2×10^{-5}	1.0×10^{-4}
	100%	-12.00	1.33	1.5×10^{-5}	6.9×10^{-7}	6.1×10^{-6}	5.5×10^{-5}
Instrumentos	0.01%	-7.38	0.71	8.0×10^{-4}	1.9×10^{-4}	6.2×10^{-4}	2.0×10^{-3}
	0.10%	-8.54	0.82	2.7×10^{-4}	5.1×10^{-5}	2.0×10^{-4}	7.5×10^{-4}
	1%	-9.10	0.92	1.7×10^{-4}	2.4×10^{-5}	1.1×10^{-4}	5.1×10^{-4}
	10%	-9.21	1.09	1.8×10^{-4}	1.7×10^{-5}	1.0×10^{-4}	6.0×10^{-4}
	100%	-10.21	1.49	1.1×10^{-4}	3.2×10^{-6}	3.7×10^{-5}	4.3×10^{-4}

En este trabajo, cada clúster se modela como un conjunto de componentes. La frecuencia de fuga para cada clúster se calcula sumando las contribuciones de sus componentes internos. Se extraen los parámetros μ y σ correspondientes a cada tipo de componente y calcula la frecuencia de fuga esperada mediante una transformación de la distribución lognormal; la frecuencia total para un clúster se obtiene multiplicando esta frecuencia base por el número de componentes de cada tipo en el clúster y sumando todas las contribuciones:

$$f_{comp} = e^{\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right)} \quad (30)$$

$$f_{eq} = \sum [n \cdot comp_i \times f_{comp_i}] \quad (31)$$

Donde:

- f_{comp} es la frecuencia base anual de fugas por componente.
- f_{eq} es la suma de las frecuencias del número de componentes de un mismo tipo presentes en el clúster i .

5.7.3 Evolución de escenarios

Una vez determinadas las frecuencias de fuga para cada componente y tamaño, es necesario modelar cómo estos eventos evolucionan hacia diferentes escenarios de riesgo. HyRAM+ considera las siguientes consecuencias físicas para liberaciones continuas de hidrógeno:

- Liberaciones sin ignición (dispersión de gas)
- Plumas de fuego (efectos térmicos por ignición inmediata)
- Incendio súbito (deflagración de gas acumulado, efectos térmicos)
- Explosiones (deflagración o detonación, efectos de sobrepresión)

Estos escenarios se modelan usando el diagrama de secuencia de eventos (ESD) mostrado en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**, que se traduce en las ecuaciones (32-35) las cuales describen las frecuencias de diferentes escenarios tras una fuga de hidrógeno:

$$f_{\{aislamiento\}} = f_{\{FugaH2\}} \times P(\text{aislamiento}) \quad (32)$$

$$f_{\{No ignic\}} = f_{\{FugaH2\}} \times P(\text{aislamiento}) \times (1 - P(\text{ignic. inmediata}) - P(\text{ignic. retardada})) \quad (33)$$

$$f_{\{pluma\}} = f_{\{FugaH2\}} \times P(\text{aislamiento}) \times P(\text{ignic. inmediata}) \quad (34)$$

$$f_{\{explosión\}} = f_{\{FugaH2\}} \times P(\text{aislamiento}) \times P(\text{ignic. retardada}) \quad (35)$$

Donde:

- $f_{\{aislamiento\}}$ representa la frecuencia de casos donde la fuga es detectada y aislada exitosamente.
- $f_{\{FugaH2\}}$ es la frecuencia anual de fuga de hidrógeno.

- $P(\text{aislamiento})$ es la probabilidad de detección y aislamiento exitoso de la fuga.
- $f_{\{\text{No ignic}\}}$ es la frecuencia para los casos en que ocurre una fuga, pero no hay ignición.
- $P(\text{aislamiento})$ es la probabilidad de que no ocurra un aislamiento exitoso.
- $P(\text{ignic. inmediata})$ es la probabilidad de que ocurra una ignición inmediata a la fuga.
- $P(\text{ignic. retardada})$ es la probabilidad de que ocurra una ignición retardada de la fuga.
- $f_{\{\text{pluma}\}}$ es la frecuencia para los casos en que una ignición inmediata resulta en una pluma de fuego.
- $f_{\{\text{explosión}\}}$ es la frecuencia para los casos en que una ignición retardada resulta en una explosión.

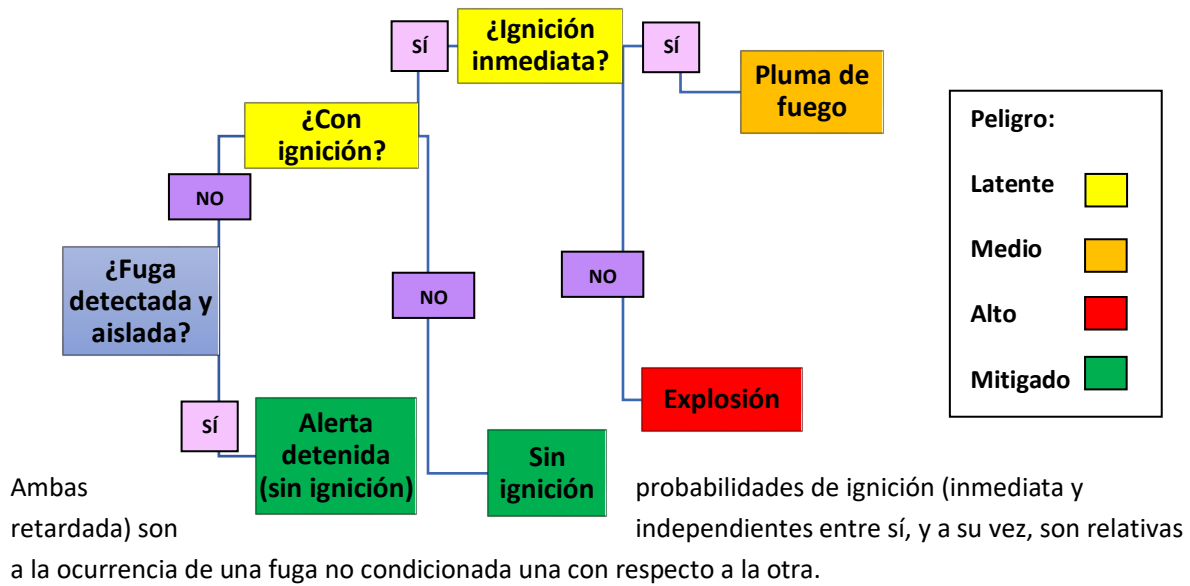


Figura 14. Diagrama de secuencia de eventos usada por HyRAM+ para fugas de hidrógeno.

También se utiliza el caudal másico para asignar valores de probabilidad de ignición inmediata y retardada según la Tabla 10, que son fundamentales para la evaluación de riesgos, ya que establecen las probabilidades (P) base de ignición para cada tasa de fuga. Estos datos son tomados directamente de Tchouvelev (2008) e implementados como parte de la configuración inicial del análisis de riesgo. Más adelante se detalla la obtención del flujo másico.

Tabla 10. Probabilidades de ignición según el caudal de fuga de hidrógeno.

Caudal másico (kg/s)	P (ignición inmediata)	P (ignición retardada)
$\dot{m} < 0.125$	0.008	0.004
$0.125 \leq \dot{m} \leq 6.25$	0.053	0.027
$\dot{m} > 6.25$	0.230	0.120

5.8 Modelado físico y evaluación de consecuencias

Una vez determinadas las frecuencias de los distintos escenarios de fuga e ignición, el siguiente paso es evaluar los efectos físicos y las consecuencias potenciales de estos eventos. Esta sección describe los modelos físicos utilizados para simular la liberación, dispersión, ignición y efectos peligrosos resultantes del hidrógeno, y cómo estos efectos se traducen en consecuencias cuantificables para la evaluación de riesgos.

5.8.1 Modelado de flujo y dispersión

Los primeros cálculos de esta sección son la determinación del caudal másico de hidrógeno a través de un orificio para los distintos tamaños de fuga y, el modelado gaussiano de dispersión de gas para estas fugas. Después se procede a determinar las zonas que podrían resultar afectadas por estas dispersiones.

La zona de peligro por posible ignición se define mediante el cálculo de la distancia a la que la concentración de hidrógeno iguala el Límite Inferior de Inflamabilidad (LFL, por sus siglas en inglés *Lower Flammability Limit*). Para el hidrógeno, la mezcla se considera inflamable cuando la concentración está entre los límites LFL y UFL (por sus siglas en inglés *Upper Flammability Limit*). Fuera de estos límites, la mezcla hidrógeno/aire presenta probabilidades mucho más bajas de arder. La masa inflamable dentro de la nube de hidrógeno se calcula considerando sólo el combustible que realmente puede explotar (dentro de los límites establecidos LFL y UFL), integrando la distribución espacial de la nube de gas formada por la pluma:

$$m_{flam} = \int \rho \times Y \times (X_{LFL} \leq X \leq X_{UFL}) dV \quad (36)$$

Donde:

- ρ es la densidad de la masa inflamable (kg).
- Y es la fracción másica de combustible.
- X representa la fracción molar de combustible.
- X_{LFL} límite inferior de inflamabilidad.
- X_{UFL} límite superior de inflamabilidad.
- dV el elemento diferencial del volumen, el cual es equivalente a una integración cilíndrica debido a la geometría axial de una pluma de gas $dV = 2\pi r dr dS$, r es la distancia radial desde el centro de la pluma y S el largo del eje de la pluma.

Este cálculo toma en cuenta la variación de densidad de la mezcla hidrógeno/aire en el espacio.

5.8.2 Modelado de efectos físicos

En esta sección se abordan los modelos utilizados para cuantificar los efectos asociados a la radiación y sobrepresión producidos por incendios y explosiones, respectivamente.

5.8.2.1 Cálculos de liberación de hidrógeno y análisis de chorros

Los cálculos de liberación son la base para determinar las tasas de flujo másico que posteriormente alimentan los modelos de efectos físicos.

Este caudal másico de fuga se obtiene a partir de la velocidad del fluido en el momento que se fuga a través de un orificio.

$$\dot{m} = \rho v A C_d \quad (37)$$

Donde:

- $\dot{m}$ es el caudal másico del hidrógeno que está siendo liberado al ambiente (kg/s).
- ρ la densidad de este fluido (kg/m^3).
- v la velocidad del fluido (m/s) en el momento en que sale del orificio.
- A el área del orificio (m^2).
- C_d el coeficiente de descarga (adimensional) igual a uno para representar una descarga perfecta.

Una vez establecido el flujo másico, se procede al análisis de chorros utilizando el módulo *API* del conjunto de cálculos para análisis físicos de HyRAM+ que permite determinar la masa inflamable y las características geométricas de la pluma. Este análisis considera los límites de inflamabilidad del hidrógeno (*LFL* y *UFL*) para establecer la región donde la mezcla combustible/aire puede participar en una explosión.

5.8.2.2 Modelado de llamas

Los límites de inflamabilidad son usados en caso de ignición inmediata, cuando se forma una pluma de fuego cuya geometría es fundamental para determinar los efectos térmicos de la llama, esta geometría se define por su longitud visible (L_{vis}) y ancho de llama (W_f). La longitud de llama visible se calcula usando correlaciones no dimensionales basadas en el número de Froude de la llama (Houf y Schefer, 2007):

$$Fr = \frac{u_j f_s^{3/2}}{\sqrt{g d_j (T_{ad} - T_{amb}) / T_{amb} \rho_j / \rho_{amb}}} \quad (38)$$

Donde:

- Fr es el número de Froude.
- u_j es la velocidad de la pluma en el orificio.
- f_s es la fracción de masa de hidrógeno en una mezcla estequiométrica de aire e hidrógeno.
- g es la constante gravitacional.
- d_j es el diámetro del orificio.

- T_{ad} y T_{amb} son la temperatura adiabática de la llama y la temperatura ambiente.
- ρ_j es la densidad del hidrógeno en el orificio.
- ρ_{amb} es la densidad del aire.

La longitud de llama adimensional se define:

$$L^* = \frac{13.5 Fr^{2/5}}{(1 + 0.07 Fr^2)^{1/5}} \quad (39)$$

La longitud visible de la llama:

$$L_{vis} = \frac{L^* \cdot d^*}{f_s} \quad (40)$$

Donde d^* es el diámetro efectivo del orificio escalado. Mientras que el ancho de la llama, se determina empíricamente como el 17% de la longitud visible de la misma (Molina et al., 2007):

$$W_f = 0.17 L_{vis} \quad (41)$$

5.8.2.3 Modelado de radiación térmica

La radiación térmica emitida por una llama se calcula utilizando el modelo integrado de HyRAM+, cuya radiación térmica de una llama se define como:

$$S_{rad} = X_{rad} \dot{m}_{combustible} \Delta H_c \quad (42)$$

Donde:

- $\dot{m}_{combustible}$ es la tasa de flujo másico de combustible, en este caso hidrógeno.
- ΔH_c es el calor de combustión, que es 120 MJ/kg para el hidrógeno (J. M. Hurley et al., 2016; Lees, 2005).
- X_{rad} es la fracción radiante, se calcula mediante la correlación específica que considera el tiempo de residencia de la llama y las propiedades de absorción:

$$X_{rad} = 9.45 \times 10^{-9} (\tau_f \alpha_{abs} T_{ad}^4)^{0.47} \quad (43)$$

Donde:

- α_{abs} es el coeficiente medio de absorción de Planck para una llama ópticamente delgada.
- τ_f es el tiempo de residencia de la llama, calculado como:

$$\tau_f = \frac{\pi}{12} \cdot \frac{\rho_f W_f^2 L_{vis} f_s}{1000 \dot{m}} \quad (44)$$

Donde:

- W_f es el peso molecular de los productos de la llama.
- ρ_f es la densidad de la llama.

El flujo de calor radiante en un punto específico se determina mediante el modelo de radiación para llama curva implementado en HyRAM+:

$$q = \tau \frac{S_{rad} V_F}{A_f} \quad (45)$$

Donde:

- q es el flujo de calor en el punto de interés.
- S_{rad} es la potencia radiactiva total.
- V_F el factor de vista, proporcional al flujo de calor transmitido al observador.
- A_f es el área superficial de la flama.
- τ es la transmisividad atmosférica, la cual puede reducir el flujo de calor radiado, es calculada tomando en cuenta la absorción de vapor de agua y CO_2 , se define como (David Wayne, 1991):

$$\tau = 1.006 - 0.01171(\log_{10}X_{H_2O}) - 0.02368(\log_{10}X_{H_2O})^2 - 0.03188(\log_{10}X_{CO_2}) + 0.001164(\log_{10}X_{CO_2})^2 \quad (46)$$

Donde:

- X_{H_2O} y X_{CO_2} son adimensionales y son proporcionales a la cantidad de vapor de agua y CO_2 en el camino de la llama.

El flujo de calor radiante calculado mediante la ecuación (44) representa la intensidad de radiación térmica utilizada posteriormente en los modelos Probit.

5.8.3 Método Baker-Strehlow-Tang (BST) para sobrepresión.

El método *Baker-Strehlow-Tang* (BST) es un enfoque semi empírico desarrollado específicamente para predecir los efectos de sobrepresión de explosiones de nubes de vapor en espacios abiertos o parcialmente confinados.

Este método es particularmente apropiado para aplicaciones de hidrógeno debido a su capacidad para considerar la alta velocidad de llama característica de este gas, así como los diferentes regímenes de combustión que pueden ocurrir dependiendo de las condiciones del escape.

A diferencia de métodos más simplificados como el de TNT equivalente, el método BST considera explícitamente:

1. La influencia del confinamiento y congestión en la aceleración de la llama.
2. Las propiedades reactivas específicas del combustible involucrado.
3. La transición potencial entre diferentes regímenes de combustión.

Estos aspectos son cruciales para modelar con precisión las explosiones de hidrógeno, su alta reactividad puede resultar en velocidades de llama significativamente mayores que las de otros gases, y consecuentemente, en sobrepresiones más severas a distancias comparables.

La energía de explosión constituye la variable fundamental del método:

$$E = \alpha_E \times m_{flam} \times \Delta H_c \quad (47)$$

Donde:

- α_E es el factor de eficiencia de explosión, para el caso estudiado $\alpha_E = 2$ debido a la reflexión que representa el terreno, es decir, el impulso reflejado por el piso.
- ΔH_c es el calor de combustión (J/kg), que para el hidrógeno es aproximadamente $120 MJ/kg$.
- m_{flam} es la masa de combustible (kg) calculada según lo descrito en la subsección anterior, integrando dentro de los límites de inflamabilidad $LFL = 4\%$ y $UFL = 75\%$.

Esta energía representa el potencial destructivo total de la explosión y sirve como base para los cálculos posteriores de escalamiento.

El método BST calcula la sobrepresión pico, P^s , en función de la distancia escalada ($\bar{R}$) y el régimen de combustión. Para cada par de equipos (i, j), tamaño de fuga (k) y categoría de equipo objetivo (l), la sobrepresión se obtiene mediante correlaciones BST:

$$P^s = f_{BST}(\bar{P}, \bar{R}) \quad (48)$$

Donde:

- $\bar{P}$ es la sobrepresión escalada (adimensional).
- $\bar{R}$ es la distancia escalada ($D_{ij}/E^{1/3}$).
- f_{BST} es la función de correlación del método BST que considera el régimen de combustión.

El valor resultante se expresa en Pa (Pascuales) y constituye la "Variable Causativa" en las ecuaciones Probit de sobrepresión de la Tabla 11.

5.8.4 Modelos Probit para cuantificación de daños

Los modelos Probit se utilizan para cuantificar la probabilidad de daño o lesión resultante de la exposición a peligros como radiación térmica (incendios) y sobrepresión (explosiones). Su aplicación permite traducir la intensidad de un peligro en una probabilidad específica de daño, con el fin de

aplicar estos resultados en el arreglo de los equipos mediante el análisis de las consecuencias de los escenarios peligrosos del arreglo resultante (post-optimización).

La variable fundamental Probit (Y) se calcula mediante la ecuación:

$$Y = k_1 + k_2 \cdot \ln(\text{Variable Causativa}) \quad (49)$$

Donde:

- Y = variable Probit
- k_1, k_2 = parámetros específicos del modelo
- *Variable Causativa* = intensidad del peligro (radiación térmica, sobrepresión)

Para convertir la variable Probit en una probabilidad de daño ($Prob$) se utiliza la aproximación de Mingguang y Juncheng (2008):

$$Prob = \frac{1.005}{1 + e^{\frac{Y - 5.004}{0.6120}}} \quad (50)$$

Esta ecuación proporciona una precisión del orden de 1.0×10^{-3} , lo cual es suficientemente preciso para la mayoría de las aplicaciones prácticas en análisis de riesgo.

La Tabla 11 presenta los modelos Probit aplicados para diferentes objetivos y vectores de escalamiento. Q^h es la intensidad de radiación (kW/m^2). P^s es la sobrepresión pico (N/m^2), t es la duración del incendio en segundos y V es el volumen del recipiente. Los subíndices i , y j , representen los clústeres fuente del peligro y los que son objetivo vulnerable, respectivamente. k es conjunto de tamaños de fuga (0.01, 0.1, 1, 10 o 100% del área de flujo), y l es el conjunto de categorías del equipo objetivo según vulnerabilidad (tanque atmosférico, presurizado, contenedor, instalación de proceso).

Tabla 11. Modelos Probit para diferentes equipos y escenarios.

Objetivo	Vector de escalamiento y escenario primario	Tipo de daño	Modelo Probit	Referencia
Tanque atmosférico ($l \in A$)	Radiación	-	$Y_{ijkl}^h = 12.54 - 1.847(-1.128\ln(Q_{ijkl}^h) - 2.67 \times 10^{-5}V_l + 9.877)$	Cozzani et al. (2005)
	Sobrepresión	-	$Y_{ijkl}^s = -9.36 + 1.43\ln(P_{ijkl}^s)$	Mingguang et al. (2008)

Objetivo	Vector de escalamiento y escenario primario	Tipo de daño	Modelo Probit	Referencia
Recipiente presurizado ($l \in P$)	Radiación	-	$Y_{ikf}^h = 12.54 - 1.847(-0.947 \ln(Q_{ijkl}^h) + 8.835V_l^{0.032})$	Cozzani et al. (2005)
	Sobrepresión	-	$Y_{ijkl}^s = -14.44 + 1.82 \ln(P_{ijkl}^s)$	Mingguang et al. (2008)
Instalación de proceso ($f \in F$)	Radiación	Efecto dominó	$Y_{ikf}^h = 12.54 - 1.847(-0.947 \ln(Q_{ikf}^h) + 8.835V_f^{0.032})$	Cozzani et al. (2005)
	Sobrepresión	Efecto dominó	$Y_{ikf}^s = -12.42 + 1.64 \ln(P_{ikf}^s)$	Mingguang et al. (2008)
Edificios ($b \in B$)	Sobrepresión	Daño estructural	$Y_{ikb}^s = -23.8 + 2.92 \ln(P_{ikb}^s)$	Eisenberg et al. (1975)
Personas ($b \in B$)	Radiación	Muertes por quemaduras	$Y_{ikb}^h = -14.9 + 2.56 \ln(t \cdot (Q_{ikb}^h)^{4/3} / 10^7)$	Eisenberg et al. (1975)
	Sobrepresión	Muertes por hemorragia pulmonar	$Y_{ikb}^s = -77.1 + 6.91 \ln(P_{ikb}^s)$	Eisenberg et al. (1975)

5.8.5 Mecanismos y cuantificación de propagación de accidentes (efecto dominó)

Los mecanismos principales de propagación de accidentes son:

1. Propagación por efectos térmicos: Ocurre cuando un equipo sufre una fuga que se incendia al poco tiempo de haber iniciado, formando una pluma de fuego (*jet fire*). La radiación térmica emitida puede afectar a equipos cercanos, potencialmente causando fallas que desencadenen liberaciones secundarias.
2. La intensidad del flujo térmico depende del caudal másico de la fuga, las dimensiones de la llama, la distancia entre el equipo fuente y el equipo objetivo, y la transmisividad atmosférica.

4.7.3.1 Propagación por sobrepresión: Se presenta cuando una nube de gas inflamable sufre ignición retardada, resultando en una explosión que genera una onda de presión. Esta onda puede dañar equipos cercanos, provocando liberaciones secundarias. La magnitud de la sobrepresión depende de, la masa de combustible en la nube explosiva, el

régimen de combustión (detonación, deflagración rápida o lenta) y la distancia entre el punto de explosión y el equipo objetivo.

La necesidad de cuantificar el efecto dominó de los equipos, surge de revisar los antecedentes peligrosos de los equipos que trabajan con hidrógeno; para ello, se hace uso de modelos Probit, los cuales cuantifican la probabilidad de propagación de accidentes para evitar eventos catastróficos.

5.8.5.1 Probabilidad del efecto dominó

La probabilidad del efecto dominó se calcula mediante:

$$P_{Domino} = P_{Prim} \times P_{Esc} \quad (51)$$

Donde:

- P_{Prim} es la probabilidad de ocurrencia del evento primario.
- P_{Esc} es la probabilidad de escalamiento.

La probabilidad de escalamiento se determina usando el máximo entre probabilidades de daño derivadas de los modelos Probit de la Tabla 11 aplicados a los efectos térmicos y de sobrepresión:

$$P_{Esc(i,j,k,l)} = \max[Prob(Q_{ijkl}^h), Prob(P_{ijkl}^s)] \quad (52)$$

Donde:

- $Prob(Q_{ijkl}^h)$ es la probabilidad de daño por efectos térmicos, calculada mediante la conversión de flujo térmico $Q^h (kW/m^2)$ a valor Probit con ayuda de la Tabla 11 y la aproximación de Mingguang y Juncheng citada anteriormente.
- $Prob(P_{ijkl}^s)$ es la probabilidad de daño por sobrepresión, calculada mediante la conversión de sobrepresión $P^s (Pa)$ a valores Probit.

5.8.5.2 Cálculo del riesgo monetario por efecto dominó

El riesgo monetario cuantifica las pérdidas económicas esperadas por efecto dominó en términos anuales (\$/año). Para cada par de equipos (i, j) , el riesgo se calcula integrando las contribuciones de todos los escenarios peligrosos y tamaños de fuga:

$$R_{mon(i,j)} = \sum_k \sum_s [F_{ik}^s \times P_{jks}^{daño} \times C_{pj}] \quad (53)$$

Donde:

- s es el escenario peligroso $\in \{\text{pluma de fuego, explosión}\}$.

- F_{ik}^s es la frecuencia anual del escenario s en el equipo i con tamaño de fuga k (*eventos/año*). La cual se obtiene del diagrama de secuencia de eventos (**¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**).
- $P_{jks}^{daño}$ es la probabilidad de daño al equipo j por escenario s y tamaño k de fuga (secciones 5.9.1 y 5.9.2).
- C_{pj} representa el costo total de daño del equipo objetivo:

$$C_{pj} = C_j^{AI} + C_j^{PP} + C_j^{Eco} \quad (54)$$

Donde:

- C_j^{AI} es el costo de adquisición e instalación del equipo.
- C_j^{PP} es el costo por pérdida de producción.
- C_j^{Eco} es el costo de remediación ambiental.

Para este modelo, se utiliza una simplificación conservadora:

$$C_{pj} \approx C_j^{AI} \times 1.5 \quad (55)$$

El factor **1.5** cubre aproximadamente los costos indirectos (pérdida de producción y remediación básica).

5.8.6 Factor de Tolerancia al Riesgo (FTR)

El parámetro FTR normaliza el riesgo monetario según la tolerancia organizacional:

- $FTR = 0.1$: Baja aversión al riesgo
- $FTR = 0.001$: Moderada aversión al riesgo (valor usado)
- $FTR = 0.0001$: Alta aversión al riesgo

El factor de normalización ($1/FTR$) escala apropiadamente el riesgo para influir en las decisiones de optimización sin necesidad de factores artificiales.

5.8.7 Restricciones de seguridad basadas en umbrales OGP

Un aspecto clave para obtener buenos resultados del modelo, es considerar distancias de seguridad, cuyo propósito es prevenir el efecto dominó. Estas distancias son definidas dependiendo de la tolerancia de riesgo y, una vez estimadas, determinan qué tan lejos deben estar los equipos de proceso entre sí (Brunoro Ahumada et al., 2018). Los efectos físicos de un accidente grave tienden a disminuir rápidamente con la distancia (Lees, 2005).

Se requiere agrandar las distancias entre equipos, especialmente todos aquellos que trabajan con materias peligrosas (inflamables o explosivas); pues la sobrepresión o

radiación provenientes de una explosión o incendio, con origen en alguno de los equipos de proceso puede afectar a equipos vecinos.

La integración de criterios de seguridad en la optimización del arreglo se realiza mediante restricciones de distancia mínima basadas en los umbrales de daño establecidos por la OGP (por sus siglas en inglés, *Oil and Gas Producers Association*) (Alileche et al., 2015) para modelado de consecuencias.

Cada equipo se clasifica según su vulnerabilidad estructural ante efectos térmicos y de sobrepresión como lo muestra la Tabla 12:

Tabla 12. Umbrales OGP por categoría de equipo.

Categoría de Equipo	Umbral Térmico (kW/m^2)	Umbral de Sobrepresión (kPa)
Tanque atmosférico	15	7
Recipiente presurizado	45	20
Instalación de proceso	25	14
Equipos elongados inflamables	25	14

Durante la optimización del arreglo de equipos, se evalúa para cada par de equipos (i, j) donde i contiene hidrógeno, la función de penalización:

$$OGP(i, j) = C_{factor} \times P_{ESC(i, j, k, l)} \times M_{cat} \quad (56)$$

Donde:

- C_{factor} es el factor de costo de penalización por violación de seguridad (\$/violación). Este parámetro permite ajustar la severidad económica de configuraciones peligrosas durante la optimización.
- M_{cat} es el multiplicador por categoría de equipo objetivo, que refleja la mayor vulnerabilidad de ciertos tipos de equipos:

$$M_{cat} = \begin{cases} 2 & \text{si } j \in \{\text{tanques atmosféricos, recipientes presurizados}\} \\ 1 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

- $P_{ESC(i, j, k, l)}$ es la probabilidad de daño al equipo objetivo j por efectos del equipo fuente i , calculada mediante modelos Probit como se explica en la Sección 5.9.3.2.

La penalización **OGP** se activa únicamente cuando la probabilidad de daño excede un umbral mínimo de seguridad $P_{ESC(i, j, k, l)} > 0.01$, luego se definen distancias mínimas de referencia basadas en los efectos físicos esperados en el peor escenario (fuga del 100% del área de flujo).

5.8.8 Distancias mínimas de seguridad

Para cada par de equipos, se calculan dos distancias mínimas: Distancia de seguridad térmica y Distancia de seguridad por sobrepresión. La primera se deriva de la ley del cuadrado inverso para

radiación puntual, despejando la distancia r para la cual la intensidad iguala el umbral de daño, esta ecuación consiste en:

$$D_{min(i,j)}^{ter} = \sqrt{\frac{S_{rad}}{4\pi \times I_j^{ter}}} \times 1.5 \quad (57)$$

Donde:

- S_{rad} es la potencia de radiación térmica de la llama del equipo i en el peor escenario (fuga del 100%), obtenida del análisis de llamas de HyRAM+ (Sección 5.8.2.2).
- I_j^{ter} es el umbral térmico del equipo j según su categoría (Tabla 12) se expresa en kW/m^2 .
- **1.5** es un factor de seguridad para cubrir incertidumbres del cálculo.

Por otra parte, la distancia de seguridad por sobrepresión refleja la relación empírica entre distancia, energía liberada y sobrepresión resultante derivada de datos experimentales de explosiones de nubes de vapor:

$$D_{min(i,j)}^{sob} = R_{factor} \times E^{1/3} \quad (58)$$

Donde:

- E es la energía de explosión (sección 5.8.3).
- R_{factor} es el factor de escalamiento según la categoría del objetivo j :
 - $R = 1.75$ para tanque atmosféricos.
 - $R = 2.10$ para recipientes presurizados.
 - $R = 1.50$ para instalaciones de proceso.

5.9 Función Objetivo

La función objetivo del modelo combina tres componentes fundamentales: costos económicos, riesgo de efecto dominó, y penalizaciones por violación de criterios de seguridad OGP. Esta integración permite que el optimizador encuentre arreglos de equipos que balanceen la eficiencia económica con la seguridad operacional.

El riesgo monetario se normaliza mediante el Factor de Tolerancia al Riesgo (**FTR**) para equiparar su magnitud con los costos económicos directos:

$$R_{Nor} = R_{mon} \times \left(\frac{1}{FTR} \right) \quad (59)$$

Donde R_{mon} es el riesgo monetario total por efecto dominó ($\$/año$). El término $(1/FTR)$ actúa como un multiplicador de aversión al riesgo.

La función objetivo integrada resulta:

$$Z_{min} = \sum_{i \in I} C + \sum_{(i,j) \in I} R_{Nor} \sum_{(i,j) \in I} OGP \quad (60)$$

Donde:

- $\sum_{i \in I} C$ es el costo total desglosado en el Análisis Económico (sección 5.4).
- $\sum_{(i,j) \in I} R_{Nor}$ es la suma del riesgo monetario por efecto dominó normalizado para todos los pares de clústeres (i, j) .
- $\sum_{(i,j) \in I} OGP$ es la suma de las penalizaciones por violación de umbrales de seguridad OGP .

5.10 Aceptabilidad del riesgo

La aceptabilidad del riesgo es reconocer que la posible pérdida debida a un riesgo no es lo bastante grande como para justificar el gasto tratando de evitar tal pérdida. Esta aceptabilidad plantea que vale la pena aceptar los riesgos pequeños y poco frecuentes con la condición de que cualquier problema derivado de estos riesgos se abordará en el momento en que surja (Kenton, 2022).

La aceptabilidad de los riesgos puede evaluarse comparando las estimaciones anuales promedio de los riesgos individuales con los riesgos asociados a algunas actividades y accidentes comúnmente entendidos.

Este mismo concepto se puede extrapolar a la aceptabilidad del riesgo que se estaría dispuesto a correr en una planta de hidrógeno. Para ello, el modelo desarrollado implementa un marco cuantitativo que permite determinar esta tolerancia con base en la frecuencia del riesgo y determinar hasta dónde sería aceptable tolerar cada riesgo. La Figura 15 muestra de manera gráfica esta relación entre frecuencia y magnitud de la consecuencia.

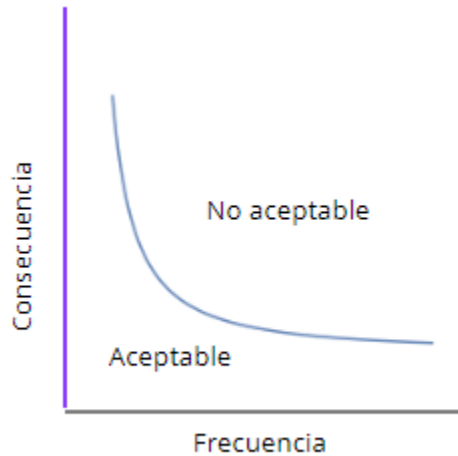


Figura 15. Frecuencia vs magnitud de la consecuencia del riesgo (Daniel A. Crowl & Joseph F. Louvar, 2002).

Se establece la aceptabilidad del riesgo mediante **cuatro mecanismos complementarios** que operan de manera simultánea y coordinada durante el proceso de optimización, los cuales ya fueron explicados con mayor detalle en secciones anteriores:

1. Filtrado de equipos por manejo de hidrógeno. Identifica las fuentes reales de peligro, es decir, aquellos equipos que manejen una cantidad mínima de hidrógeno dentro de sus flujos y estos equipos son los únicos que contribuyen a la generación de escenarios peligrosos.
2. Factor de Tolerancia al Riesgo (FTR). Normaliza el riesgo monetario según la tolerancia establecida.
3. Umbrales OGP y penalizaciones dinámicas. Establece criterios de separación mínima durante la optimización.
4. Riesgo monetario de efecto dominó. Cuantifica las consecuencias económicas esperadas.

Estos mecanismos trabajan en conjunto para garantizar que el arreglo óptimo resultante no solo minimice costos económicos, sino que también cumpla con criterios cuantitativos de seguridad establecidos desde la etapa de diseño.

5.10.1 Criterios finales de evaluación de aceptabilidad post-optimización

Una vez que el modelo converge a una solución óptima, la aceptabilidad del arreglo resultante se evalúa mediante criterios cuantitativos que permiten verificar que el diseño obtenido no solo es económicamente viable, sino que también satisface los estándares de seguridad establecidos.

El criterio fundamental consiste en verificar que el riesgo total del sistema sea significativamente menor que el **umbral de tolerancia** establecido:

$$\frac{R_{total}}{FTR} \ll 1 \quad (61)$$

Donde R_{total} es la suma de riesgos de efecto dominó para todos los pares de equipos evaluados. Un arreglo se considera aceptable cuando este cociente es al menos tres órdenes de magnitud menor que la unidad ($\leq 10^{-3}$). Este margen de seguridad de tres órdenes de magnitud es consistente con los criterios ALARP (Por sus siglas en inglés, *As Low As Reasonably Practicable*) utilizados en la industria de procesos químicos (Lees, 2005).

La evaluación de aceptabilidad requiere identificar los pares de equipos (i, j) con mayor contribución al riesgo total (**pares críticos**) y verificar que sus características sean consistentes con los estándares de la industria. Las frecuencias de escalamiento calculadas para estos pares críticos deben compararse con los datos históricos reportados en la literatura, según el análisis compilado por la Central de Seguridad para procesos Químicos (CCPS por sus siglas en inglés, 2000), las frecuencias típicas de efecto dominó en instalaciones químicas y petroquímicas varían entre 10^{-4} y 10^{-6} eventos por año para pares de equipos adyacentes que manejan sustancias inflamables. Lo ideal es que los pares críticos identificados en el arreglo óptimo deben situarse dentro de este rango o preferentemente por debajo del límite inferior.

Adicionalmente, es importante verificar que las probabilidades de daño calculadas mediante los modelos Probit (Sección 5.9) sean coherentes con las distancias físicas resultantes y que no exista un único par que domine excesivamente el riesgo total.

5.10.2 Limitaciones y consideraciones

El marco de aceptabilidad implementado se basa en varios supuestos que deben considerarse al interpretar los resultados.

Supuestos conservadores:

- Los tiempos de exposición para radiación térmica se fijan en 30 segundos para todos los escenarios que involucran ignición inmediata de las fugas.
- La eficiencia de detección y aislamiento se establece en 80%, asumiendo sistemas funcionales, pero no perfectos.
- Los costos de remediación ambiental son estimaciones uniformes (\$250,000) que pueden variar según la magnitud real del derrame y las regulaciones locales específicas en escenarios más realistas.

Exclusiones del modelo:

- El modelo no considera fenómenos naturales (sismos, inundaciones), actos deliberados (sabotaje, terrorismo) ni colisiones vehiculares.
- No se modelan pérdidas humanas o impacto en la confianza pública tras incidentes.
- Se asume que las frecuencias de fuga son constantes a lo largo de la vida útil de la planta, sin considerar deterioro acelerado de equipos por envejecimiento, corrosión o fatiga.
- El análisis se limita a escalamientos directos de primer orden (*equipo A falla* $\rightarrow$ *equipo B falla*), sin modelar cascadas de segundo orden ($A \rightarrow B \rightarrow C$).

Estas limitaciones no invalidan el marco de aceptabilidad, pero establecen el contexto dentro del cual los resultados deben interpretarse. Trabajos futuros pueden abordar estas consideraciones mediante análisis de sensibilidad extendidos, integración con modelos meteorológicos, o validación experimental con datos de plantas reales en operación.

6. RESULTADOS Y ANÁLISIS

6.1 Análisis preliminar de identificación de peligros (HAZOP)

6.1.1 Alcance y metodología del análisis

El presente análisis funcional de operatividad se realizó para identificar las desviaciones operacionales que podrían comprometer la seguridad y la eficiencia del proceso. El análisis se estructuró considerando los componentes de los flujos entre equipos, las características de los equipos y las propiedades del hidrógeno. La metodología HAZOP aplicada empleó palabras guía estándar (No/Ninguno, Más, Menos, Parte de) para explorar desviaciones en parámetros críticos como flujo, presión, temperatura e integridad de sistemas.

6.1.2 Definición de nodos

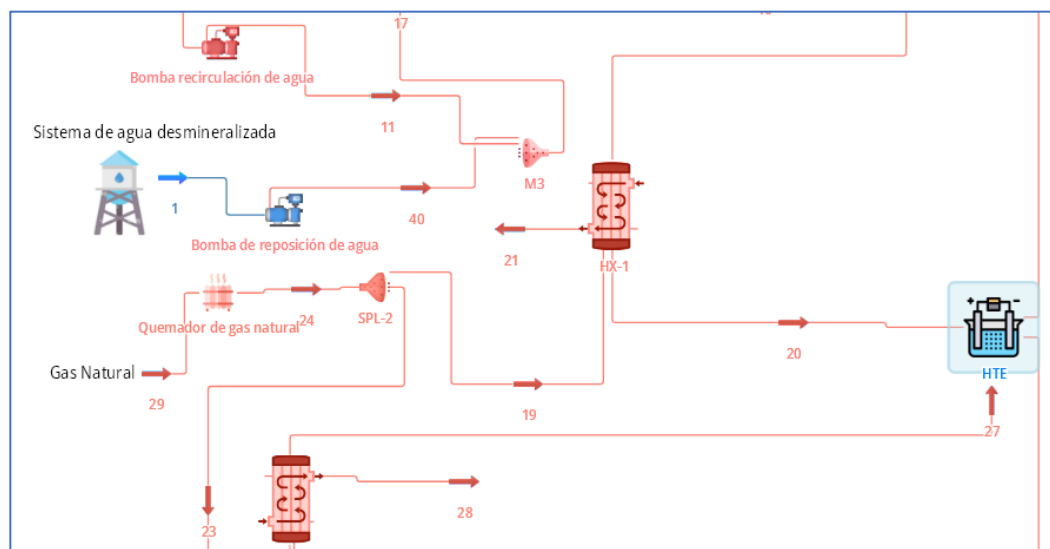
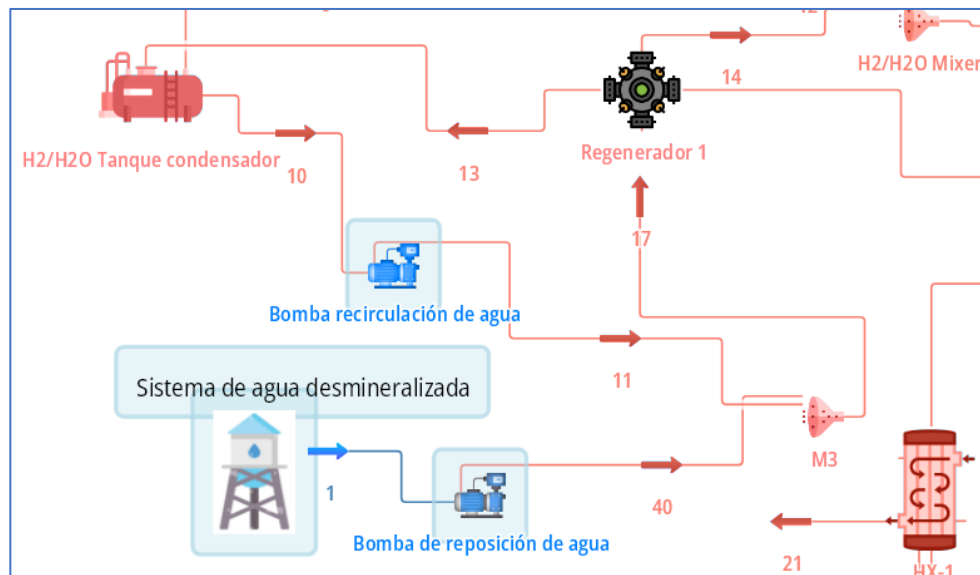
El proceso se dividió en 6 nodos funcionales para el análisis y enfocar los esfuerzos en los equipos más susceptibles a fallos en la operatividad. La segmentación se basó en tres criterios:

1. Susceptibilidad a fallas. Equipos con mayor probabilidad de presentar desviaciones operacionales.
2. Impacto en la seguridad. Componentes cuyo fallo podría derivar en escenarios peligrosos (fugas, igniciones, sobrepresiones).
3. Similitud funcional: Agrupación de equipos con funciones análogas y fluidos de proceso similares.

Cabe mencionar que esta segmentación difiere de los 7 clústeres definidos para el modelo de optimización (Sección 5. Metodología), ya que para el HAZOP se priorizó la similitud operacional entre equipos sobre consideraciones económicas y no la cercanía u orden que hay entre ellos.

Adicionalmente, se omitieron componentes cuya contribución al riesgo global es marginal (mezclador M3, separadores SPL-1 y SPL-2). Los nodos resultantes se presentan a continuación:

- Nodo 1. Bombas de reposición y recirculación de agua (Figura 16).
- Nodo 2: Módulo del electrolizador de óxido sólido (Figura 17).
- Nodo 3: Tanque de separación H_2/H_2O y el recirculador de H_2 (Figura 18).
- Nodo 4. Regeneradores 1, 2 y 3 (Figura 19).
- Nodo 5: Quemador de gas natural, HX-1 y HX-2 (Figura 20).
- Nodo 6: Bomba de agua de barrido, tanque condensador H_2/H_2O , tanque separador H_2/H_2O y expansor O_2 /Vapor (Figura 21).



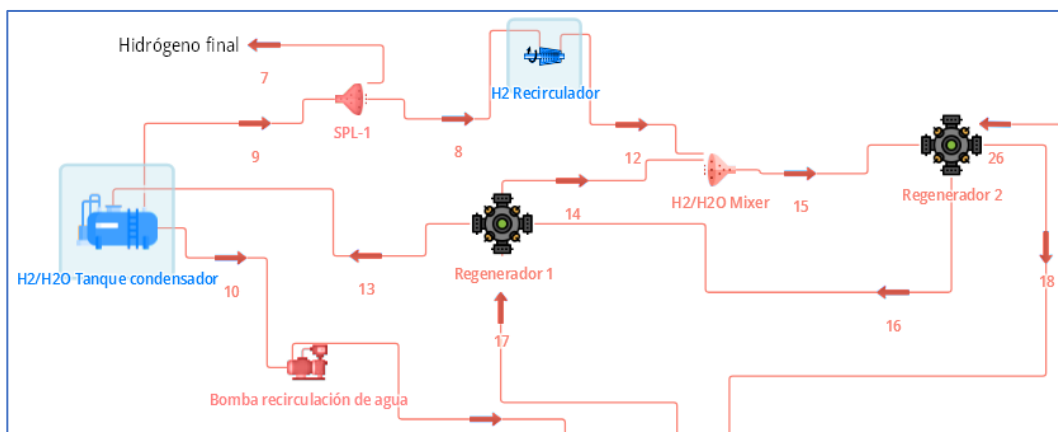


Figura 18. Nodo 3: Sistema de separación y recuperación de hidrógeno.

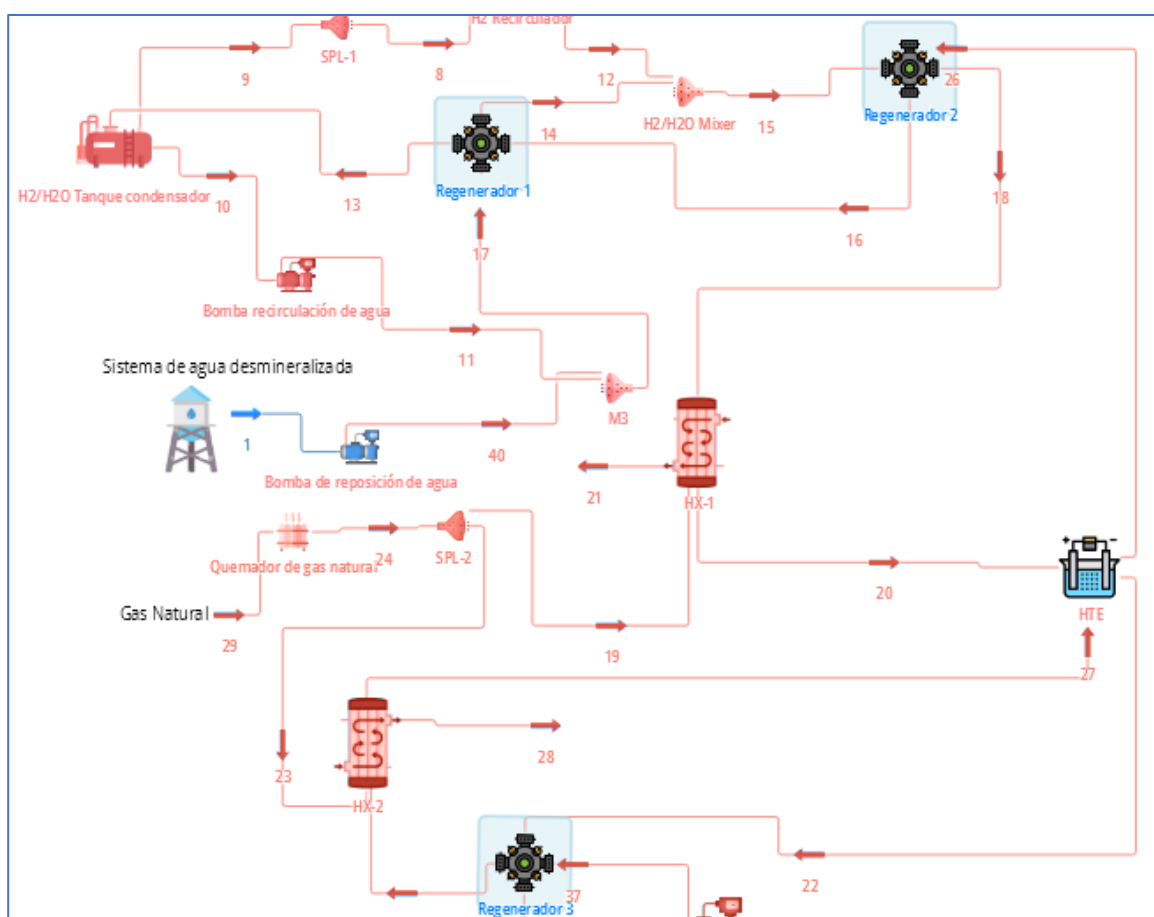


Figura 19. Nodo 4: Sistema de recuperación de calor.

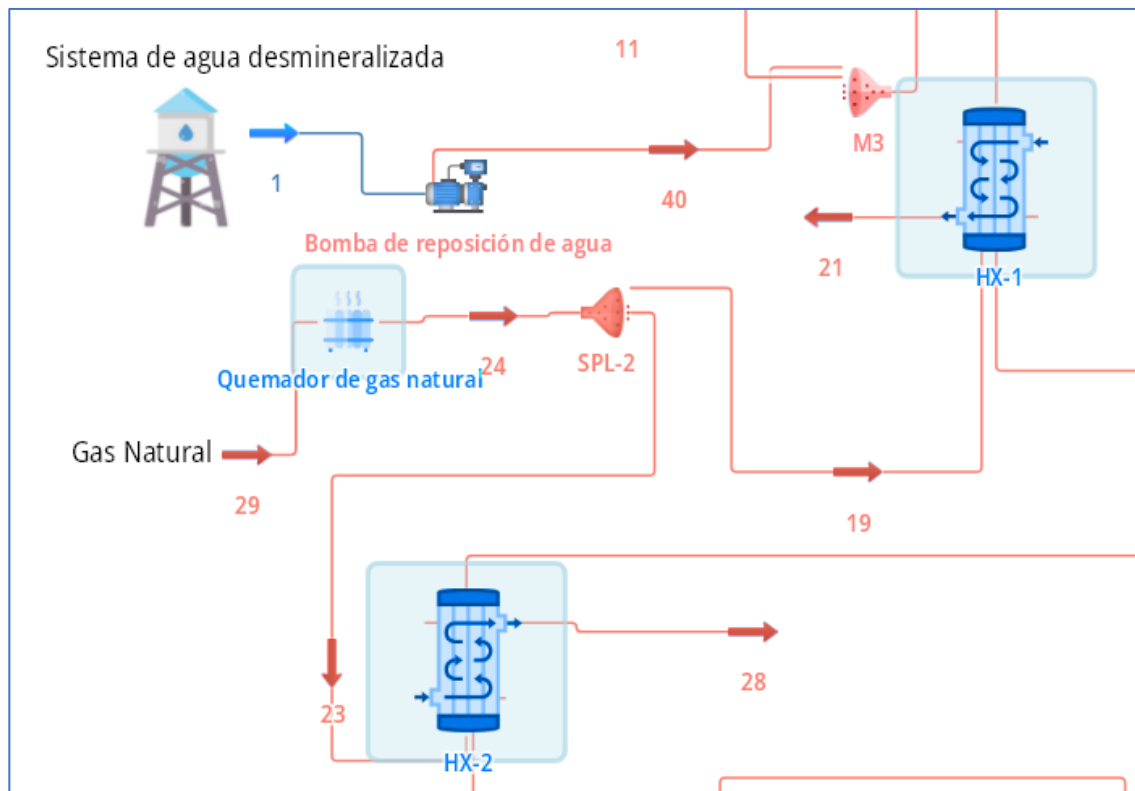


Figura 20. Nodo 5: Sistema de generación de calor.

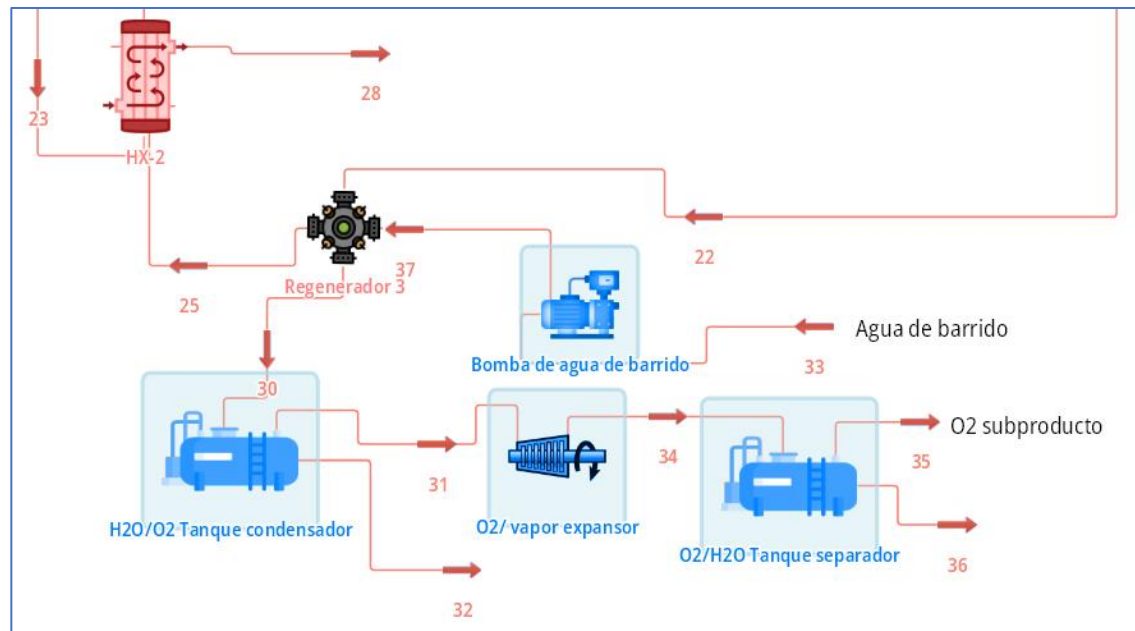


Figura 21. Nodo 6: Sistema de barrido de oxígeno.

6.1.3 Estructura del análisis de desviaciones

La estructura de análisis empleada consideró la identificación de desviaciones potenciales para cada nodo, mediante la aplicación sistemática de la siguiente estructura.

- Palabra Guía. Término que cuestiona el comportamiento esperado del sistema.
- Desviación. Aplicación específica de la palabra guía al parámetro estudiado.
- Causas Posibles. Eventos iniciadores que pueden provocar la desviación (fallos de equipo, errores humanos, variaciones de proceso).
- Consecuencias. Impactos potenciales, desde pérdida de eficiencia hasta escenarios peligrosos.
- Salvaguardas Existentes. Sistemas de protección, detección o mitigación comúnmente implementados.
- Acciones Recomendadas. Medidas adicionales para prevenir, detectar o mitigar la desviación.

6.1.4 Resultados del análisis por nodo

A continuación, se presenta el resumen de los resultados del análisis HAZOP. Las tablas detallan las desviaciones identificadas, sus causas, consecuencias y las medidas de seguridad asociadas. En esta sección sólo se incluyen los hallazgos de los posibles escenarios peligrosos.

Este análisis cualitativo sirvió como base para identificar los equipos con mayor potencial de peligro y establecer los escenarios de fuga de hidrógeno. Los resultados obtenidos se detallan en tablas para cada nodo:

- Nodo 2. Módulo del electrolizador de óxido sólido. El módulo SOE opera a temperaturas elevadas ($>700^{\circ}\text{C}$) y es el corazón del proceso. Las desviaciones en este nodo representan los escenarios de mayor riesgo debido al manejo simultáneo de hidrógeno y condiciones térmicas extremas. La Tabla 13 presenta las desviaciones debidas al aumento o disminución de la temperatura. La Tabla 14 muestra el análisis del cambio de presión, mientras la Tabla 15 muestran los resultados del análisis de la Integridad del sistema.
- Nodo 3: Sistema de separación y recuperación de hidrógeno. Este nodo maneja hidrógeno de alta pureza. Las fugas en este sistema representan el mayor potencial para formación de atmósferas explosivas, especialmente en el tanque de separación $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$. La Tabla 16 muestra la evaluación de la eficiencia que tiene la separación y su impacto en la seguridad del proceso. Además, la Tabla 17 muestra las desviaciones, consecuencias y recomendación debidas a la pérdida de contención del hidrógeno.
- Nodo 4: Sistema de recuperación de calor. Los regeneradores operan con flujos a alta temperatura que contienen hidrógeno. Las fugas por fatiga térmica o corrosión pueden provocar mezclas peligrosas entre corrientes (Tabla 18).
- Nodo 5: Sistema de generación de calor. La presencia de llama abierta en el quemador de gas natural constituye una fuente de ignición importante. Las desviaciones en este nodo pueden desencadenar escenarios de plumas de fuego si ocurren fugas de hidrógeno en equipos cercanos (Tabla 19).

- Nodo 6: Sistema de barrido de oxígeno. Aunque el oxígeno no es inflamable por sí mismo, su acumulación incrementa significativamente el riesgo de ignición en caso de fuga de hidrógeno (Tabla 20). Este nodo requiere especial atención para evitar formación de mezclas H_2-O_2 .

En la siguiente sección se analizan los hallazgos y se presenta la relación entre los nodos y los clústeres mediante el posible escenario peligroso según las desviaciones encontradas.

Tabla 13. Parámetro: Temperatura, Nodo 2.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
Menos	Baja temperatura en el electrolizador	- Sistema de calentamiento trabajando deficientemente - Alimentación excesiva	- Eficiencia del proceso afectada - Daño a las celdas del electrolizador debido a gradientes térmicos	- Alarma de bajada de temperatura - Control automático de temperatura	- Mantenimientos preventivos al sistema de control de temperatura - Tener listo un sistema de precalentamiento de respaldo
Más	Temperatura alta en el electrolizador	- Fallo en el control de temperatura - Reacción exotérmica fuera de control	- Daño a las celdas del electrolizador - Falla catastrófica del equipo	- Alarma de alta temperatura - Sistema de parada de emergencia	- Implementar sistema de enfriamiento de emergencia - Mejorar e inspeccionar periódicamente los sistemas de control y monitoreo de temperatura

Tabla 14. Parámetro: Presión, Nodo 2.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvuardas Existentes	Acciones Recomendadas
Menos	Presión baja en electrolizador	- Fuga en tuberías o equipo - Fallo en la entrada de gases	- Eficiencia del proceso afectada - Contaminación del electrolizador	- Alarma de bajada de presión	- Instalación de sistema de detección de fugas - Implementación de válvulas de retención en las líneas de alimentación
Más	Presión alta en electrolizador	- Bloqueo en la salida de fluidos - Falla en la válvula de control	- Estrés mecánico en el electrolizador - Riesgo de ruptura o explosión	- Válvula de alivio	- Instalación de un sistema extra de alivio de presión - Mejorar y monitorear frecuentemente el sistema de control de presión

Tabla 15. Parámetro: Integridad del sistema, nodo 2.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvuardas Existentes	Acciones Recomendadas
Parte de	Fuga en el sistema SOE	- Celdas del electrolizador agrietadas - Sellos dañados o desgastados	- Fuga de hidrógeno - Aumento en el riesgo de incendio o explosión del equipo - Déficit en la eficiencia	- Sensores de hidrógeno en el área aledaña al sistema y en el sistema mismo	- Programar de inspecciones periódicas de celdas y sellos - Instalar al menos un sistema de ventilación adicional - Ubicar el SOE lejos de posibles fuentes de combustión y áreas confinadas

Tabla 16. Parámetro: Eficiencia de separación, Nodo 3.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
Menos	Baja eficiencia de separación	- Degradación del sistema de separación - Flujo de entrada excesivo	- Menor producción de hidrógeno - Hidrógeno saliente contaminado con vapor	- Medidor de pureza del producto	- Programar mantenimiento periódico del separador - Mejorar y actualizar condiciones de operación
No	No hay separación	- Avería en el separador - Bloqueo del flujo entrante	- Sin producción de hidrógeno con la pureza deseable - Sobrepresión en el sistema	- Alarma presión excedida en el separador	- Tener listo un separador de reemplazo - Mejorar y monitorear de manera periódica el sistema de detección de fallos

Tabla 17. Parámetro: Contención del hidrógeno, Nodo 3.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
No	Dificultad por parte del tanque de separación para contener el hidrógeno	- Corrosión - Fatiga del material - Impacto externo	- Fugas grandes de hidrógeno - Aumento en el riesgo de explosión	- Válvulas de alivio - Sensores de hidrógeno	- Programar inspecciones y mantenimientos rigurosos de forma periódica - Colocar barreras físicas alrededor del tanque - Ubicar el tanque en un área abierta y con ventilación
Más	Sobrepresión en el sistema de recirculación	- Falla en el compresor - Bloqueo de la corriente del flujo	- Tuberías dañadas - Liberación de hidrógeno a presiones altas	- Válvulas de seguridad	- Implementar al menos un sistema de alivio de presión adicional - Establecer un sistema autónomo de corte de operaciones para situaciones de alto riesgo - Mejorar el arreglo de tuberías de tal forma que se minimicen los puntos de acumulación de presión

Tabla 18. Parámetro: Integridad del intercambiador, Nodo 4.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
Parte de	Fuga en los regeneradores	- Corrosión - Fatiga térmica	- Mezclas no deseadas de corrientes en el proceso - Aumento en el riesgo de fuga de hidrógeno	- Seguimiento constante de los elementos presentes en las corrientes de operación	- Programar inspecciones regulares con métodos no destructivos - Uso de materiales o aleaciones que presenten mayor resistencia a la corrosión y fatiga - Tomar en cuenta el facilitar el mantenimiento del equipo y la mitigación de fuga a la hora de decidir las ubicaciones de los regeneradores

Tabla 19. Parámetro: Control de la combustión, Nodo 5.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
No	Ignición deficiente de la cámara de combustión	- Caída en el suministro de combustible - Fallo en el sistema de ignición	- Confinamiento de gas en un espacio con posible exposición a una combustión - Riesgo de explosión al reiniciar	- Sistema de detección de fuego	- Alistar un sistema de purga automática - Instalar sistemas auxiliares para la prevención de ignición - Ubicar la cámara de combustión en un área que no tenga potencial acumulación de hidrógeno
Más	Altas temperaturas en la cámara de combustión	- Suministro excesivo de combustible - Relación aire/combustible fuera de control	- Alto impacto térmico a los equipos - Aumento en el riesgo de ruptura y fuga de hidrógeno en equipos cercanos	- Alarmas de temperaturas excesivas - Sistemas de paro del proceso debido a temperaturas elevadas	- Instalación de controles de apoyo avanzados para prevención y mitigación de combustión - Implementar barreras térmicas entre la cámara de combustión y equipos críticos

Tabla 20. Parámetro: Separación del oxígeno, Nodo 6.

Palabra Guía	Desviación	Causas Posibles	Consecuencias	Salvaguardas Existentes	Acciones Recomendadas
No	Separación de oxígeno deficiente	- Separador defectuoso - Bloqueo total o parcial en la corriente de salida	- Acumulación de oxígeno en el sistema - En caso de haber fuga de hidrógeno aumenta el riesgo de incendio	- Alarmas de alta presencia de O₂	- Tener un sistema de ventilación externo - Implementar sensores de oxígeno auxiliares - Ubicar el separador en un espacio abierto y sin riesgo de acumulación de hidrógeno en caso de fuga

6.1.5 Síntesis de hallazgos críticos

Del análisis HAZOP se identificaron los equipos y desviaciones de mayor criticidad para la seguridad del proceso. Los clústeres con presencia de hidrógeno identificados en el análisis cuantitativo, y su correspondencia con los nodos HAZOP críticos, son:

- Clúster 2. Corresponde al Nodo 3 (Sistema de separación y recuperación de hidrógeno) e incluye el separador SPL-1 y el recirculador de H_2 . Se identificó la desviación más crítica del sistema: "dificultad por parte del tanque de separación para contener el hidrógeno" (Tabla 16) causada por corrosión, fatiga del material o impacto externo, con consecuencia de "fugas grandes de hidrógeno" y "aumento en el riesgo de explosión".
- Clúster 4. Combina equipos del Nodo 3 (mezclador H_2/H_2O) y del Nodo 4 (Regenerador 2). Para el Regenerador 2, el HAZOP identificó "fuga en los regeneradores" (Tabla 18) por corrosión o fatiga térmica, con consecuencia de "mezclas no deseadas de corrientes en el proceso" y "aumento en el riesgo de fuga de hidrógeno".
- Clúster 5. Agrupa equipos del Nodo 4 (Regenerador 1) y del Nodo 1 (sistema de agua desmineralizada y bomba de reposición). Similar al Clúster 4, el Regenerador 1 presenta riesgo de "fuga en los regeneradores" por fatiga térmica.
- Clúster 7. Corresponde parcialmente al Nodo 5 (Sistema de generación de calor) e incluye el intercambiador HX-1. Aunque el HX-1 no fue objeto de análisis específico en las tablas HAZOP individuales, forma parte del sistema de calentamiento de proceso que maneja flujos provenientes del proceso de electrólisis con contenido de hidrógeno.
- Clúster 8. Corresponde al Nodo 2 (Módulo SOE). Se identificaron múltiples desviaciones críticas: "baja temperatura en el electrolizador" (Tabla 13) que puede causar daño a las celdas por gradientes térmicos, "temperatura alta en el electrolizador" (Tabla 13) con riesgo de falla catastrófica del equipo, "presión alta en electrolizador" (

- Tabla 14) con riesgo de ruptura o explosión, y crucialmente, "fuga en el sistema SOE" (Tabla 15) por celdas agrietadas o sellos desgastados, resultando en "fuga de hidrógeno" y "aumento en el riesgo de incendio o explosión del equipo".

6.1.6 Conexión de hallazgos críticos con la cuantificación de riesgos

Los hallazgos críticos revelaron que los escenarios más severos están asociados a:

1. Equipos con mayor presencia de hidrógeno bajo presión (tanque de separación en Clúster 2 y módulo SOE en Clúster 8).
2. Equipos sometidos a condiciones térmicas extremas superiores a 700°C (regeneradores en Clústeres 4 y 5, electrolizador en Clúster 8).
3. Sistemas de recirculación y compresión con mayor tasa histórica de fallos mecánicos (Clústeres 1, 2 y 5); (Ehrhart et al., 2021).

El HAZOP es un análisis cualitativo que identifica qué puede fallar y cuáles son las consecuencias esperadas, pero no cuantifica con qué frecuencia ni cuál es la magnitud física de los efectos, lo cual se complementó con la metodología HyRAM+. Esta permite asignar frecuencias numéricas de fallo a cada componente basadas en datos históricos industriales, modelar los efectos físicos cuantificables (flujos térmicos, sobrepresiones, longitudes de llama) para posteriormente evaluar el riesgo de efecto dominó donde un equipo fallado puede provocar el escalamiento a equipos vecinos.

De esta forma, los seis clústeres identificados con hidrógeno actúan como fuentes potenciales de escenarios peligrosos en el modelo de optimización espacial, cuyo objetivo es minimizar simultáneamente los costos económicos y el riesgo monetario derivado de estos escenarios.

6.2 Resultados de la optimización espacial

6.2.1 Arreglo óptimo resultante

El modelo de optimización MINLP converge a una solución óptima en aproximadamente 57 segundos, explorando 14,238 nodos del árbol de búsqueda mediante el *solver* SCIP del entorno Python-Pyomo. La configuración óptima resultante de los nueve clústeres se presenta en la Tabla 21, donde se especifican las coordenadas del centroide de cada clúster (x, y), sus dimensiones físicas (*largo* $\times$ *ancho*) y la orientación seleccionada.

Tabla 21. Ubicación y dimensiones de los clústeres en el arreglo optimizado.

Clúster	Posición X (m)	Posición Y (m)	Largo (m)	Ancho (m)	Orientación
Cluster1	25.00	45.50	8.00	8.00	Horizontal
Cluster2	8.00	45.50	6.50	7.00	Horizontal
Cluster3	44.50	45.50	10.00	8.00	Vertical
Cluster4	8.00	12.50	10.00	12.00	Horizontal
Cluster5	25.00	12.50	12.00	16.00	Horizontal
Cluster6	25.00	32.00	10.00	9.00	Horizontal
Cluster7	44.50	32.00	16.00	9.00	Horizontal
Cluster8	8.00	32.00	12.00	10.00	Horizontal
Cluster9	44.50	12.50	14.00	18.00	Horizontal

La distribución espacial resultante ocupa un área rectangular de 57.00 m de largo por 53.50 m de ancho, es decir, 3,049.50 m². Esta configuración (ver Figura 22) representa el balance óptimo entre minimización de costos económicos (interconexiones, área, bombeo, etc.) y cumplimiento de restricciones de seguridad (distancias mínimas, no superposición, espacios de mantenimiento, minimización del efecto dominó).

La Figura 22 ilustra la disposición física optimizada de los clústeres, donde se observa que los equipos con mayor contenido de hidrógeno (aquellos contenidos en los Clústeres 1, 2, 4, 5, 7 y 8) han sido distribuidos de manera uniforme en el área disponible, las líneas punteadas representan los clústeres que deben estar interconectados entre sí.

6.2.2 Matriz de distancias entre clústeres

Las distancias rectilíneas (Manhattan) entre pares de clústeres en el arreglo optimizado se presentan en la Tabla 22. Estas distancias determinan tanto los costos de interconexión mediante tuberías como para los cálculos del análisis de efectos físicos. Es importante destacar que estas distancias (m) corresponden a la separación entre centroides de los clústeres.

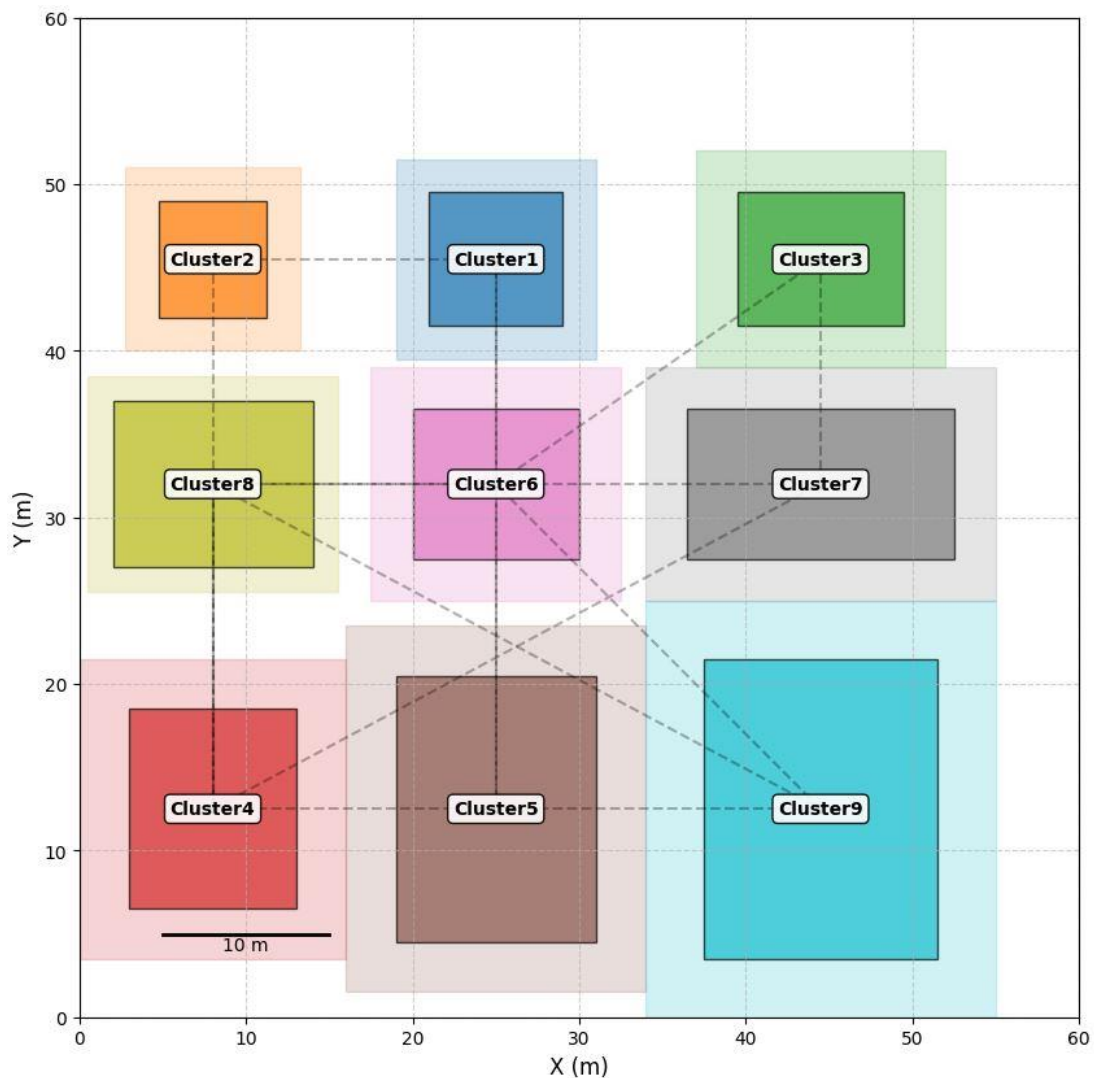


Figura 22. Arreglo optimizado de la planta organizada en Clústeres.

Del análisis de la matriz de distancias se identifican los siguientes pares críticos por proximidad:

- Clúster 2 $\leftrightarrow$ Clúster 8, 13.5 m; menor distancia entre clústeres con flujos de hidrógeno, correspondientes al separador SPL-1 (clúster 2, Nodo 3) y un clúster de equipos presurizados clúster 8).
- Clúster 1 $\leftrightarrow$ Clúster 2, 17.0 m; segunda menor distancia, correspondiente al tanque condensador H_2/H_2O (clúster 1, Nodo 1) y el separador SPL-1 (clúster 2, Nodo 3). Ambos equipos manejan flujos con alto contenido de hidrógeno.
- Clúster 4 $\leftrightarrow$ Clúster 5, 17.0 m; distancia entre el mezclador H_2/H_2O + Regenerador 2 (clúster 4, Nodos 3 y 4) y el Regenerador 1 + sistema de alimentación (clúster 5, Nodo 4). La operación a alta temperatura de ambos regeneradores incrementa el riesgo de escalamiento por fatiga térmica.

Tabla 22. Matriz de distancias rectilíneas entre pares de clústeres.

	Cluster1	Cluster2	Cluster3	Cluster4	Cluster5	Cluster6	Cluster7	Cluster8	Cluster9
Cluster1	-	17.00	19.50	50.00	33.00	13.50	33.00	30.50	46.50
Cluster2	17.00	-	36.50	33.00	50.00	30.50	50.00	13.50	69.50
Cluster3	19.50	36.50	-	69.50	52.50	33.00	13.50	50.00	33.00
Cluster4	50.00	33.00	69.50	-	17.00	19.50	56.00	19.50	36.50
Cluster5	33.00	50.00	52.50	17.00	-	19.50	39.00	36.50	19.50
Cluster6	13.50	30.50	33.00	19.50	19.50	-	33.00	17.00	33.00
Cluster7	33.00	50.00	13.50	56.00	39.00	33.00	-	36.50	19.50
Cluster8	30.50	13.50	50.00	19.50	36.50	17.00	36.50	-	50.00
Cluster9	46.50	69.50	33.00	36.50	19.50	33.00	19.50	50.00	-

Estos tres pares críticos presentan distancias inferiores a 20 m, umbral frecuentemente citado en la literatura como límite para considerar interacciones significativas en análisis de efecto dominó (Alileche et al., 2015; CCPS, 2000). En la tabla también se pueden observar otras distancias inferiores a 20 m, como es el caso Clúster 1 ↔ Clúster 6, pero estos no se consideran igual de peligrosos que los pares anteriormente mencionados ya que sólo uno de los clústeres involucrados maneja hidrógeno dentro de sus flujos, lo que hace que su contribución al efecto dominó no sea de mayor relevancia.

6.2.3 Verificación de restricciones espaciales

El arreglo optimizado satisface la totalidad de las restricciones espaciales impuestas en el modelo, según se detalla en la Tabla 23. La primera columna muestra las restricciones tomadas en cuenta para este análisis, seguido de una explicación de los criterios aplicados a estas restricciones y se ejemplifican en base a los resultados del modelo optimizado.

Tabla 23. Verificación de cumplimiento de restricciones espaciales.

Restricción	Criterio y Valor Requerido	Valor Obtenido	Estado
No superposición de equipos	La distancia entre centroides debe ser mayor a la suma de las mitades del espacio requerido (zonas de mantenimiento y dimensiones) por cada par de clústeres (i, j)	Ejemplo de valor mínimo: 13.50 m (clúster 2, clúster 8)	✓ Cumple
Espacios de mantenimiento	Margen libre, según lo requiera cada par de clústeres	Incorporado en las restricciones de largo y ancho de cada clúster	✓ Cumple
Contención en área disponible (Eje X)	La suma de la coordenada en x del centroide y la mitad del espacio requerido (zonas de mantenimiento y dimensiones) para cada clúster debe ser menor a 60.0 m	Valor máximo encontrado: 52.50 m (clúster 7)	✓ Cumple
Contención en sitio (Eje Y)	La suma de la coordenada en y del centroide y la mitad del espacio requerido (zonas de mantenimiento y dimensiones) para cada clúster debe ser menor a 60.0 m	Valor máximo encontrado: 50.00 m (clúster 1)	✓ Cumple
Área total del arreglo	Minimizar: $A = L_x + L_y$	3,049.50 m ² (57.00 × 53.50)	✓ Óptimo

6.3 Análisis económico del arreglo optimizado

El arreglo final obtenido del modelo de optimización representa una configuración que minimiza simultáneamente los costos económicos y los riesgos asociados a escenarios peligrosos. En esta sección se presenta el desglose económico completo del proyecto, incluyendo la inversión inicial de capital (CAPEX), los costos operativos anuales (OPEX) y el análisis de los principales componentes que determinan la viabilidad económica de la planta para el funcionamiento del primer año únicamente.

6.3.1 Inversión inicial de capital (CAPEX)

La inversión inicial para la implementación de la planta se desglosa en tres componentes principales: costos de equipamiento, costos de terreno y costos indirectos asociados a ingeniería, permisos y contingencias.

6.3.1.1 Costos de equipamiento por clúster

La Tabla 24 presenta el desglose de los costos de adquisición e instalación los clústeres. Se hicieron pequeños ajustes en el costo de algunos equipos, también se contempló el costo de las interconexiones y los factores de instalación (Harvego et al., 2012).

Tabla 24. Costos de equipamiento por clúster.

Clúster	Equipo	Costo Instalado (\$)
Subtotal Cluster1		73,472.00
Subtotal Cluster2		26,650.00
Subtotal Cluster3		249,084.90
Subtotal Cluster4		79,420.00
Subtotal Cluster5		334,101.60
Subtotal Cluster6		131,265.60
Subtotal Cluster7		243,084.90
Subtotal Cluster8		190,260.00
Subtotal Cluster9		481,910.40
Conexiones	Tuberías	52,800.00
COSTO TOTAL DE EQUIPAMIENTO		1,862,049.40

6.3.1.2 Análisis de distribución de costos

El clúster con mayor inversión es el clúster 9 (\$481,910.40), que alberga el sistema completo de barrido de oxígeno incluyendo el expansor O_2 /vapor (\$188,348.40), el tanque condensador H_2O/O_2 , el tanque separador O_2/H_2O y la bomba de agua de barrido. Este sistema es crítico para mantener la pureza del hidrógeno producido y prevenir la degradación de las celdas del electrolizador.

Le sigue el clúster 5 (\$334,101.60), que contiene el Regenerador 1, elemento clave del sistema de recuperación de calor. Este clúster también incluye la bomba de reposición de agua (\$189,010.00), el sistema de agua desmineralizada y el mezclador M3, todos componentes esenciales para el suministro continuo de agua al proceso de electrólisis.

Los clústeres 3 y 7 (\$249,084.90 cada uno) también representan inversiones significativas. El clúster 3 alberga el quemador de gas natural, fuente principal de energía térmica del proceso, mientras que el clúster 7 contiene el intercambiador HX-1. Ambos equipos requieren materiales especiales y diseños robustos para operar en las condiciones térmicas extremas del proceso HTE.

El costo total de equipamiento asciende a \$1,862,049.40, constituyendo aproximadamente el 77.3% de la inversión inicial de capital para el funcionamiento de la planta durante el primer año.

6.3.1.3 Costos de interconexiones

La Tabla 25 detalla las distancias rectilíneas (Euclidianas) entre clústeres interconectados y los costos asociados a las tuberías de proceso. Se consideró un costo unitario de 100 \$/m para las tuberías y un factor de instalación de 1.2 especificado en la metodología.

La distribución optimizada resultó en un costo total de interconexiones de \$52,800.00. Las conexiones más elevadas en precio corresponden a Cluster4 → Cluster7 y Cluster8 → Cluster9 (\$6,720.00 cada una) y Cluster9 → Cluster6 (\$4,680.00). Estas distancias mayores son necesarias para cumplir con las restricciones de seguridad que requieren separación física entre equipos que manejan hidrógeno y disminuir un potencial efecto dominó.

Tabla 25. Costos y detalles de las interconexiones

Conexión	D_x (m)	D_y (m)	$D_x + D_y$ (m)	Costo Total (\$)
Cluster1 -> Cluster5	0	33.0	33.0	3960
Cluster1 -> Cluster2	17.0	0	17.0	2040
Cluster2 -> Cluster4	0	33.0	33.0	3960
Cluster3 -> Cluster7	0	13.5	13.5	1620
Cluster3 -> Cluster6	19.5	13.5	33.0	3960
Cluster4 -> Cluster7	36.5	19.5	56.0	6720
Cluster4 -> Cluster8	0	19.5	19.5	2340
Cluster5 -> Cluster4	17.0	0	17.0	2040
Cluster6 -> Cluster8	17.0	0	17.0	2040
Cluster7 -> Cluster8	36.5	0	36.5	4380
Cluster8 -> Cluster9	36.5	19.5	56.0	6720
Cluster9 -> Cluster6	19.5	19.5	39.0	4680
Cluster4 -> Cluster5	17.0	0	17.0	2040
Cluster5 -> Cluster1	0	33.0	33.0	3960

Cluster8 -> Cluster4	0	19.5	19.5	2340
TOTAL	-	-	440.0	52,800

La distancia total de tuberías (440.00 m) representa un balance óptimo entre minimización de costos de instalación, reducción de pérdidas energéticas y cumplimiento de requisitos de seguridad.

6.3.1.4 Costo del terreno

La configuración optimizada ocupa un área rectangular de 54.50 m de largo por 53.50 m de ancho, resultando en una superficie total de 3,236.75 m². Considerando un costo unitario de terreno de 100 \$/m² establecido en el modelo, el costo total del terreno asciende a \$323,675.00, representando aproximadamente el 13.8% de la inversión inicial de capital.

Este costo incluye no sólo el terreno ocupado por los equipos, sino también los espacios de mantenimiento requeridos alrededor de cada clúster, las áreas de circulación entre equipos y las zonas de seguridad necesarias para operación y mantenimiento.

6.3.1.5 Resumen de CAPEX

La Tabla 26 consolida los tres componentes principales de la inversión inicial:

Tabla 26. Resumen de costos de capital (fijos).

Concepto	Costo (\$)	Porcentaje (%)
Adquisición e instalación de equipos	1,809,249.40	77.3
Interconexiones (tuberías)	52,800.00	2.3
Terreno	323,675.00	13.8
Subtotal costos directos	2,185,724.40	93.4
Costos indirectos Ingeniería y diseño	104,344.00	4.5
Permisos iniciales	30,000.00	1.3
Contingencia de proyecto	91,350.00	3.9
Subtotal costos indirectos	225,694.00	9.6
CAPEX TOTAL	2,339,893.40	100.0

Esta inversión inicial total de \$2,339,893.40 constituye los costos de puesta en marcha de la planta. La distribución de la inversión revela que el equipamiento representa más de tres cuartas partes del CAPEX (77.3%), seguido por el terreno (13.8%), los costos indirectos (9.6%) y las interconexiones (2.3%). La proporción relativamente baja de costos de interconexiones evidencia que el modelo de optimización logró minimizar efectivamente las distancias entre equipos interconectados, reduciendo tanto la inversión inicial en tuberías como las pérdidas energéticas durante la operación.

6.3.2 Costos operativos anuales (OPEX)

Los costos operativos representan los gastos recurrentes necesarios para mantener la planta en funcionamiento durante su operación continua. La Tabla 27 presenta el desglose de estos costos clasificados por concepto.

Tabla 27. Costos operativos anuales

Concepto	Valor (\$/año)	Porcentaje (%)
Consumo eléctrico del electrolizador	937,277.48	75.19
Consumo eléctrico bombas secundarias	39.37	0.00
Costo de bombeo principal	658.56	0.05
Subtotal electricidad	937,975.41	75.25
Gas Natural	168,847.67	13.54
Agua	6,472.55	0.52
Subtotal servicios	175,320.22	14.07
Mantenimiento variable	36,562.87	2.93
Mantenimiento fijo	96,536.00	7.75
Subtotal mantenimiento	133,098.87	10.68
TOTAL, OPEX ANUAL	1,246,394.50	100.00

El consumo eléctrico del módulo electrolizador SOE representa el mayor gasto operativo con \$937,277.48 anuales, correspondiente al 75.19% del OPEX total. Este costo elevado está directamente relacionado con el alto requerimiento energético del proceso de electrólisis a alta temperatura (HTE), a pesar de ser el componente más costoso energéticamente hablando y recibir la energía proveniente del quemador de gas natural para poder alcanzar las altas temperaturas requeridas de operación, este consumo energético es característico de los procesos de HTE.

Un hallazgo particularmente relevante es el bajo costo de bombeo (\$658.56 anuales, 0.05% del OPEX), que incluye tanto la bomba de reposición de agua como la bomba de agua de barrido y las pérdidas energéticas de cada una de ellas.

6.3.2.1 Potencia de bombeo requerida

El análisis energético del sistema de bombeo revela el desempeño de las dos bombas principales del proceso, cuyos requerimientos están directamente influenciados por las distancias entre equipos resultantes de la optimización espacial. Las Tabla 28 y Tabla 29 presentan el desglose detallado de cada

bomba, incluyendo las pérdidas por fricción y accesorios en cada segmento de tubería. La ubicación de los flujos puede consultarse en la Figura 1 de la metodología

Tabla 28. Gasto energético detallado de la Bomba 1

Flujo	D (m)	Frac. Vapor	V (m/s)	Densidad (kg/m³)	Pérdida Fricción (J/kg)	Pérdida Accesorios (J/kg)	Potencia (kW)
Agua de reposición	2.00	0.0000	0.08	1000.00	0.00	0.00	0.9835
40	2.00	0.0000	0.08	1000.00	0.00	0.00	0.0000
36	2.00	0.0000	0.11	1000.00	0.00	0.00	0.0000
37	17.00	0.0000	0.13	900.00	0.01	0.00	0.0000
2	2.00	0.1114	0.14	800.59	0.00	0.00	0.0000
30	56.00	0.2616	0.19	592.84	0.04	0.01	0.0000
Vapor/H ₂	36.50	0.9010	1.50	76.51	1.62	0.41	0.0006
H ₂ /Vapor	19.50	0.3008	0.10	490.24	0.00	0.00	0.0000
16	17.00	0.3008	0.10	490.24	0.00	0.00	0.0000
35	33.00	0.9594	1.22	39.15	0.97	0.24	0.0002
38	17.00	0.0010	0.01	1000.00	0.00	0.00	0.0000
39	2.00	0.0000	0.04	1000.00	0.00	0.00	0.0000
42	2.00	0.9990	3.58	0.40	0.50	0.13	0.0000

En resumen, la bomba 1 presenta:

- Presión de entrada: 101.33 kPa
- Presión de salida: 4,900.61 kPa
- Diferencial de presión: 4,799.28 kPa
- Potencia total: 0.9843 kW
- Costo anual: \$436.42

El sistema maneja 13 flujos diferentes con composiciones y propiedades variables, desde agua líquida pura hasta mezclas vapor-hidrógeno. Los flujos críticos son vapor/H₂ (36.50 m de recorrido con 90.1% de fracción de vapor) y el flujo 35 (33.00 m con 95.94% de vapor), que contribuyen con pérdidas de fricción de 1.62 y 0.97 J/kg respectivamente, representando las mayores contribuciones energéticas del sistema.

Tabla 29. Gasto energético detallado de la Bomba 2

Flujo	D (m)	Frac. Vapor	V (m/s)	Densidad (kg/m³)	Pérdida Fricción (J/kg)	Pérdida Accesorios (J/kg)	Potencia (kW)
Agua de barrido	2.00	0.0000	0.04	1000.00	0.00	0.00	0.4978
27	2.00	0.0000	0.04	1000.00	0.00	0.00	0.0000
24	39.00	1.0000	4.73	8.00	17.18	4.29	0.0022

29	2.00	0.5000	0.26	404.00	0.00	0.00	0.0000
28	2.00	0.8109	0.58	157.77	0.01	0.00	0.0000
17	2.00	0.8690	0.70	128.90	0.02	0.00	0.0000
Vapor entrante	17.00	1.0000	4.73	8.00	7.49	1.87	0.0010
22	56.00	0.5000	0.30	354.00	0.10	0.02	0.0000

En resumen, la bomba 2 presenta:

- Presión de entrada: 101.32 kPa
- Presión de salida: 4,969.29 kPa
- Diferencial de presión: 4,867.97 kPa
- Potencia total: 0.5010 kW
- Costo anual: \$222.14

Este sistema maneja 8 flujos con transiciones bifásicas significativas. El flujo crítico es el flujo 24 (39.00 m con vapor puro a 4.73 m/s), que genera las mayores pérdidas energéticas del sistema (17.18 J/kg por fricción y 4.29 J/kg por accesorios). El segundo flujo más demandante es de vapor entrante (17.00 m con vapor puro), contribuyendo con 7.49 J/kg de pérdidas por fricción.

La potencia total de 1.4853 kW resulta en un costo operativo anual de \$658.56, representando menos del 0.05% del OPEX total. Este resultado es realmente bajo comparado con otros requerimientos de energía como lo puede ser el módulo electrolizador.

Los costos operativos anuales de \$1,246,394.50 están fuertemente dominados por el consumo eléctrico del electrolizador (75.19%), seguido por el gas natural (13.54%) y el mantenimiento (10.68%). La proporción relativamente baja del costo de bombeo (0.05% del OPEX) constituye un indicador clave de la efectividad de la optimización espacial.

El costo de producción de hidrógeno resultante es de \$1.71/kg, considerando una producción de 1,500 kg/día y un factor de capacidad de 85.2%. Este valor incluye tanto la amortización de la inversión de capital como los costos operativos anuales.

Estos resultados económicos constituyen la línea base para la evaluación integrada del modelo, que en las siguientes secciones se complementará con el análisis QRA para evaluar el balance global entre viabilidad económica, eficiencia operativa y seguridad del proceso.

6.4 Evaluación cuantitativa de Riesgos (QRA)

El análisis cuantitativo de riesgos complementa los hallazgos cualitativos del HAZOP mediante la asignación de frecuencias numéricas a los escenarios de fuga identificados y la evaluación probabilística de sus consecuencias. Esta sección presenta las frecuencias de fallo calculadas para cada clúster con presencia de hidrógeno y la distribución resultante de escenarios peligrosos.

6.4.1 Frecuencias de fuga por clúster

Las frecuencias de fuga para cada clúster se calcularon mediante la ecuación (31), que suma las contribuciones de todos los componentes presentes multiplicados por sus respectivas frecuencias base extraídas de la Tabla 9 de la metodología. Solo se analizan los seis clústeres que contienen equipos con presencia de hidrógeno (Clústeres 1, 2, 4, 5, 7 y 8), ya que son los únicos que pueden generar escenarios peligrosos de fuga, ignición y explosión. Los **Clústeres 3, 6 y 9 manejan exclusivamente gas natural**, oxígeno o agua, por lo que quedan fuera del análisis QRA de hidrógeno.

La Tabla 30 presenta las frecuencias anuales de fuga desagregadas por tamaño para los seis clústeres analizados.

Tabla 30. Frecuencias de fuga por clúster y tamaño de fuga (eventos/año).

Clúster	Equipos críticos	0.01%	0.1%	1%	10%	100%	Total
1	Tanque H ₂ /H ₂ O, Bomba recirculación	0.1074	0.0201	0.0065	0.0002	0.0000	0.1340
2	Separador SPL-1, Recirculador H ₂	0.1047	0.0196	0.0063	0.0002	0.0000	0.1310
4	Mezclador H ₂ /H ₂ O, Regenerador 2	0.0741	0.0126	0.0054	0.0002	0.0000	0.0926
5	Regenerador 1, Bomba reposición, Sistema agua, Mezclador M3	0.1487	0.0278	0.0090	0.0003	0.0001	0.1860
7	Intercambiador HX-1	0.0351	0.0055	0.0023	0.0001	0.0000	0.0439
8	Electrolizador SOE	0.0351	0.0055	0.0023	0.0001	0.0000	0.0439
						TOTAL	0.6314

El Clúster 5 presenta la mayor frecuencia total de fuga (0.186 *eventos/año*), resultado esperado dado que contiene el mayor número de componentes individuales: Regenerador 1, bomba de reposición de agua, sistema de agua desmineralizada y mezclador M3. Cada componente aporta su propia probabilidad de fallo, y la ecuación (31) suma estas contribuciones para obtener la frecuencia agregada del clúster.

Le siguen los Clústeres 1 y 2 con frecuencias similares (0.134 y 0.131 *eventos/año* respectivamente). Aunque estos clústeres contienen solo dos equipos cada uno, sus componentes principales (tanque condensador, separador SPL-1 y sus respectivos sistemas de recirculación) presentan tasas de fallo relativamente altas según los datos históricos industriales compilados en la Tabla 9.

Resulta notable que el Clúster 8 (módulo SOE), a pesar de operar a la temperatura más alta del sistema (>800°C) y contener hidrógeno bajo condiciones extremas, presenta una de las frecuencias totales más bajas (0.0439 *eventos/año*), idéntica al Clúster 7 (intercambiador HX-1).

La distribución por tamaño de fuga muestra un patrón consistente en todos los clústeres: las fugas pequeñas (0.01%) dominan la frecuencia total, representando aproximadamente el 80% de todos los eventos, seguidas por fugas de 0.1% (~15%) y 1% (~5%). Las fugas catastróficas (100%) son eventos extremadamente raros, con frecuencias del orden de 10⁻⁵ eventos/año, pero sus consecuencias potenciales justifican su inclusión en el análisis de efectos dominó.

6.4.2 Distribución de escenarios según secuencia de eventos

Una vez establecidas las frecuencias base de fuga, el diagrama de secuencia de eventos (**¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** de la metodología) distribuye probabilísticamente estos eventos entre cuatro categorías: aislamiento exitoso, dispersión sin ignición, pluma de fuego por ignición inmediata y explosión por ignición retardada. Las ecuaciones (32-35) formalizan este cálculo considerando $P(\text{detección/aislamiento}) = 0.8$ y las probabilidades de ignición de la Tabla 10.

La Tabla 31 presenta esta distribución para los tres clústeres que representan la mayor contribución al riesgo de efecto dominó en el arreglo optimizado. Aunque el Clúster 5 tiene la mayor frecuencia base total, los Clústeres 1, 2 y 4 resultaron ser aquellos con mayor peligro real al final del análisis, esto se debe a una serie de razones: (1) están ubicados en zonas de mayor densidad de equipos con hidrógeno según el arreglo optimizado (Figura 1), aumentando su potencial de escalamiento en un escenario peligroso; (2) trabajan con un mayor número de flujos con hidrógeno presente (Tabla 1); y (3) en conjunto representan aproximadamente el 58% de la frecuencia total de fugas del sistema, constituyendo los contribuyentes primarios al riesgo monetario calculado en la función objetivo.

Por otra parte, la distribución porcentual promedio de los escenarios:

- Aislamiento exitoso 80.0%
- Sin ignición 19.8%
- Pluma de fuego 0.16%
- Explosión 0.08%

De las fugas no aisladas (0.0717 eventos/año), la distribución muestra que aproximadamente el 99% corresponde a dispersión sin ignición (0.0707 eventos/año), mientras que solo el 1% restante evoluciona hacia eventos con consecuencias térmicas o de sobrepresión.

Tabla 31. Distribución de escenarios peligrosos por clúster (eventos/año).

Clúster	Tamaño	Aislamiento exito. (80%)	Sin ignición	Pluma de fuego	Explosión	Total
Clúster 1	0.01%	0.0859	0.0212	0.000172	0.000086	0.1074
	0.1%	0.0161	0.0040	0.000032	0.000016	0.0201
	1%	0.0052	0.0013	0.000010	0.000005	0.0065
	10%	0.0002	0.0000	0.000000	0.000000	0.0002
	100%	0.0000	0.0000	0.000000	0.000000	0.0000
	Subtotal	0.1074	0.0265	0.000215	0.000108	0.1340
Clúster 2	0.01%	0.0838	0.0207	0.000168	0.000084	0.1047
	0.1%	0.0157	0.0039	0.000031	0.000016	0.0196
	1%	0.0051	0.0013	0.000010	0.000005	0.0063
	10%	0.0002	0.0000	0.000000	0.000000	0.0002
	100%	0.0000	0.0000	0.000000	0.000000	0.0000
	Subtotal	0.1048	0.0259	0.000210	0.000105	0.1310

Clúster 4	0.01%	0.0593	0.0146	0.000119	0.000059	0.0741
	0.1%	0.0101	0.0025	0.000020	0.000010	0.0126
	1%	0.0043	0.0011	0.000009	0.000004	0.0054
	10%	0.0001	0.0000	0.000000	0.000000	0.0002
	100%	0.0000	0.0000	0.000000	0.000000	0.0000
	Subtotal	0.0741	0.0183	0.000149	0.000075	0.0926
TOTAL (3 clústeres)		0.2863	0.0707	0.000574	0.000288	0.3576

Esta baja tasa de ignición (plumas de fuego + explosión ≈ 0.0009 eventos/año) resulta de las probabilidades de ignición de la Tabla 10, que para los rangos de caudal másico característicos del sistema establecen $P(\text{ignición inmediata})$ entre 0.008 – 0.053 y $P(\text{ignición retardada})$ entre 0.004 – 0.027.

La proporción aproximada de 2:1 entre plumas de fuego (0.000574) y explosiones (0.000288) es consistente con las probabilidades de ignición: $P(\text{inmediata})$ es sistemáticamente el doble de $P(\text{retardada})$ según la categorización de caudales de la Tabla 10. Las plumas de fuego, aunque menos frecuentes que las explosiones en términos absolutos, generan efectos térmicos que dominan el riesgo de escalamiento para equipos ubicados a distancias menores de 15 m, como se analizará en la siguiente sección.

6.4.3 Análisis de efectos físicos

Los efectos físicos asociados a los escenarios de ignición (plumas de fuego) e ignición retardada (explosiones) se calcularon utilizando las metodologías integradas de HyRAM+ descritas en las secciones 5.8.2 (efectos térmicos) y 5.8.3 (sobrepresión por método BST). Esta sección presenta las características de los efectos físicos por tamaño de fuga y su aplicación en la evaluación de distancias de seguridad según umbrales OGP.

6.4.3.1 Características de liberación y formación de chorros (aún sin ignición)

Las condiciones de liberación de hidrógeno para todos los tamaños de fuga analizados resultaron en flujo estacionario, es decir, el hidrógeno alcanza la velocidad máxima de salida dadas las condiciones termodinámicas. Este régimen se caracteriza por velocidades sónicas en el orificio de fuga (~ 880 m/s), maximizando el caudal másico para las condiciones de almacenamiento de cada equipo cuyos flujos contengan hidrógeno.

La Tabla 32 muestra las características de estas liberaciones:

Tabla 32. Parámetros de liberación y geometría de chorros por tamaño de fuga.

Tamaño fuga	Diámetro orificio (mm)	Flujo másico (kg/s)	Masa inflamable (kg)	Long. chorro (m)
0.01%	0.062	6.39×10^{-5}	3.01×10^{-7}	0.27
0.1%	0.196	6.39×10^{-4}	9.51×10^{-6}	0.84
1%	0.620	6.39×10^{-3}	3.01×10^{-4}	2.66
10%	1.961	6.39×10^{-2}	9.51×10^{-3}	8.41
100%	6.200	6.39×10^{-1}	3.01×10^{-1}	26.55

El análisis de chorros liberados, hecho mediante el módulo *PHYSICS* de HyRAM+ determina la masa inflamable considerando únicamente el combustible dentro de los límites de inflamabilidad ($LFL = 4\%$, $UFL = 75\%$ para H_2).

Esta masa es fundamental para calcular la energía de explosión en escenarios de ignición retardada mediante la ecuación (46), y estimar la longitud del chorro que define la región donde puede ocurrir ignición inmediata formando una pluma de fuego.

La Tabla 32 muestra que la longitud de chorro aumenta proporcionalmente con el caudal másico, pasando de 0.27 m para fugas del 0.01% hasta 26.55 m para la fuga catastrófica del 100%. Sin embargo, la masa inflamable absoluta permanece en el rango de miligramos para fugas $\leq 1\%$, limitando severamente las consecuencias potenciales de estos eventos que representan el 99.3% de todas las fugas del sistema.

6.4.3.2 Efectos térmicos por radiación de llamas

En escenarios de ignición inmediata, la formación de plumas de fuego genera radiación térmica cuya intensidad decae con la distancia según la ley del factor de vista (ecuación 44).

Esta sección analiza los efectos térmicos para los dos tamaños de fuga con consecuencias mayores a distancias relevantes del arreglo optimizado: fugas del 10% y 100% que, aunque representan solo el 0.07% de los eventos totales (Tabla 31), definen los escenarios de diseño para verificación de distancias de seguridad. Dichos escenarios se muestran de manera gráfica en los mapas de las Figura 23 y Figura 24.

La Figura 23 muestra la distribución espacial de la intensidad de radiación térmica generada por una pluma de fuego resultante de una fuga del 10% del área de flujo en el clúster 1 (identificado con recuadro rojo y etiqueta "FUENTE - FUGA 10%").

Los umbrales de daño se representan mediante círculos concéntricos en tonos rojos degradados, indicando niveles decrecientes de flujo de calor radiante desde la fuente:

- 45.0 kW/m^2 , umbral para equipos presurizados.
- 25.0 kW/m^2 , umbral para instalaciones de proceso y equipos inflamables elongados.
- 15.0 kW/m^2 , umbral para tanques atmosféricos.

- 7.0 kW/m^2 , umbral para falla de acero con aislamiento.

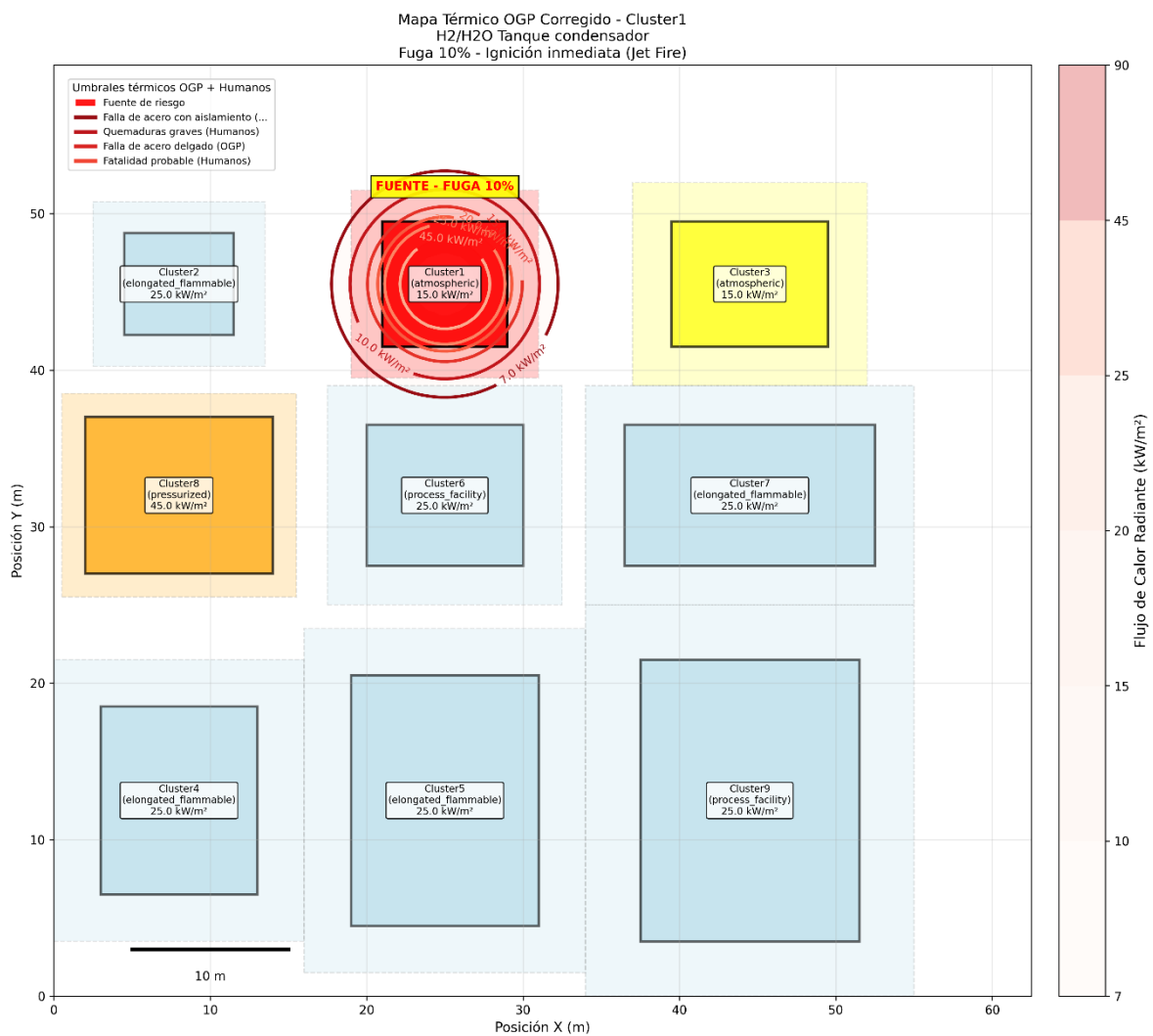


Figura 23. Escenario peligroso para fuga al 10% con ignición inmediata (clúster 1).

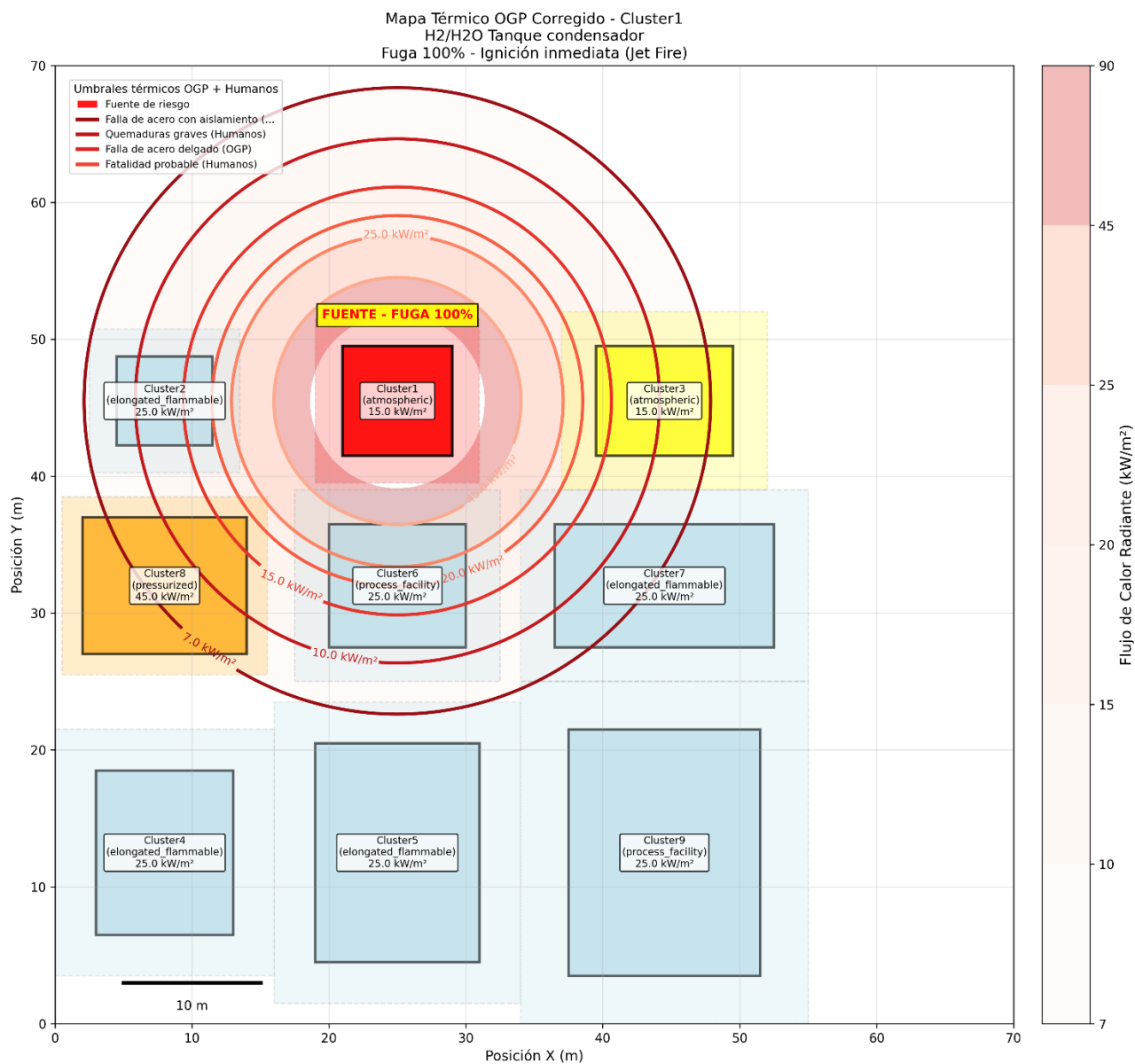


Figura 24. Escenario peligroso para fuga al 100% con ignición inmediata (clúster 1).

La Tabla 33 presenta los parámetros geométricos y radiantes de las llamas para estos escenarios críticos, utilizando el clúster 1 como caso representativo dado que es aquel con mayor contribución al riesgo, como se explicará más adelante.

Tabla 33. Parámetros de llamas para escenarios críticos (clúster 1).

Parámetro	Fuga 10%	Fuga 100%
Longitud de llama (m)	6.88	18.32
Ancho de llama (m)	1.17	3.11
Área superficial de llama (m ²)	12.64	89.61
Potencia radiante total (kW)	4,600	46,000
Fracción radiante	0.600	0.600
Frecuencia (eventos/año)	3.70×10^{-7}	4.79×10^{-7}

La longitud de llama aumenta 2.66 veces entre ambos escenarios, mientras que la potencia radiante se incrementa 10 veces. El área superficial de la llama aumenta 7.09 veces, reflejando la geometría tridimensional de la pluma. La fracción radiante se mantiene constante en 0.600 para ambos tamaños, indicando que el tiempo de residencia de la llama (ecuación 43) alcanzó el régimen donde la emisión de radiación térmica está limitada por propiedades del combustible y no por efectos externos.

El decaimiento de efectos térmicos con la distancia se incluye en la Tabla 34, se muestran las distancias a las cuales la intensidad de radiación térmica alcanza los cuatro umbrales OGP definidos en la Tabla 12.

Tabla 34. Distancias de alcance para umbrales de radiación térmica OGP.

Umbral térmico	Categoría de equipo afectado	Fuga 10% (m)	Fuga 100% (m)
15 kW/m ²	Tanque atmosférico	4.94	15.62
25 kW/m ²	Instalación de proceso	3.83	12.10
45 kW/m ²	Recipiente presurizado	2.86	9.02
90 kW/m ²	Daño estructural severo	2.03	6.38

El patrón de decaimiento revela tres características fundamentales:

- 1. Escalamiento proporcional entre escenarios:** El radio de alcance aumenta aproximadamente 3.16 veces entre la fuga del 10% y 100% para todos los umbrales analizados. Este factor es consistente con la relación teórica derivada de la ecuación (44): dado que la potencia radiante aumenta 10 veces mientras el área de la llama aumenta 7.09 veces, la intensidad radiante superficial aumenta 1.41 veces.
- 2. Confinamiento espacial para fuga del 10%:** Las distancias de alcance para la fuga del 10% son:
 - 4.94 m para el umbral más bajo (15 kW/m², tanques atmosféricos)

- 2.86 m para el umbral de recipientes presurizados ($45 \text{ kW}/\text{m}^2$)

Comparando con las distancias mínimas del arreglo optimizado (Tabla 22): Cluster2 ↔ Cluster8 = 13.5 m, Cluster1 ↔ Cluster2 = 17.0 m, estos alcances quedan confinados dentro de un radio 2.7-3.4 veces menor que las separaciones reales entre clústeres. Incluso considerando el clúster 1 como tanque atmosférico (categoría más vulnerable), ningún equipo vecino se encuentra dentro de la zona de 4.94 m donde se alcanzaría el umbral de $15 \text{ kW}/\text{m}^2$.

3. **Alcances significativos solo para fuga del 100%:** La distancia de 15.62 m para el umbral de $15 \text{ kW}/\text{m}^2$ es un tanto preocupante en cuanto a las distancias mínimas entre clústeres con hidrógeno Cluster1 ↔ Cluster2 (17.0 m) y Cluster2 ↔ Cluster8 (13.5 m), más adelante se argumenta el porqué no es una situación preocupante.

El cumplimiento de criterios de seguridad para efectos térmicos se sustenta en tres puntos convergentes:

1. **Frecuencias extremadamente bajas:** Las frecuencias anuales de plumas de fuego para los escenarios analizados son:

- Fuga 10%: $3.70 \times 10^{-7} \text{ eventos/año}$ (0.37 eventos por millón de años)
- Fuga 100%: $4.79 \times 10^{-7} \text{ eventos/año}$ (0.48 eventos por millón de años)

La contribución de ambos escenarios al riesgo anual esperado es, por tanto, despreciable en términos prácticos, aun cuando sus alcances geométricos pudieran sugerir proximidad a equipos vecinos.

2. **Clasificación diferenciada de vulnerabilidad:** Los clústeres del arreglo optimizado no son uniformemente vulnerables. El análisis de categorías OGP revela:

- Clúster 1 (umbral $15 \text{ kW}/\text{m}^2$), único clúster con máxima vulnerabilidad
- Clústeres 2, 4, 5 y 7 (umbral $25 \text{ kW}/\text{m}^2$), vulnerabilidad moderada
- Clúster 8 (umbral $45 \text{ kW}/\text{m}^2$), menor vulnerabilidad térmica

El único clúster con manejo de hidrógeno y vulnerabilidad máxima (clúster 1) está ubicado estratégicamente con separaciones mínimas de 17 m respecto a otros clústeres con hidrógeno.

3. **Efectos despreciables para fugas dominantes:** Las fugas del 0.01%-1%, que representan el 99.3% de los eventos según Tabla 30, generan llamas con longitudes de 0.22-2.18 m y potencias radiantes de $3.3 - 460 \text{ kW}$. Para estas fugas, las distancias de umbral de $15 \text{ kW}/\text{m}^2$ son inferiores a 0.5 m (estimadas por escalamiento proporcional), resultando en efectos térmicos completamente confinados al clúster fuente sin posibilidad física de alcanzar equipos vecinos separados por 13.5-17 m.

La integración de estos tres factores mediante modelos Probit (ecuación 48) produce probabilidades de daño térmico inferiores a 10^{-8} para todos los pares de clústeres analizados, varios órdenes de magnitud por debajo del umbral de aceptabilidad $P_{daño} < 0.01$ establecido en la metodología.

6.4.3.3 Efectos de sobrepresión por explosiones

Los escenarios de ignición retardada se analizaron mediante el método BST descrito en la sección 5.8.3. La Tabla 35 presenta las distancias de alcance para los tres umbrales OGP de sobrepresión, se muestran sólo aquellas concernientes a los clústeres con mayor frecuencia de fuga (1, 2 y 5).

Tabla 35. Distancias para los umbrales de sobrepresión OGP.

Clúster	Tamaño	Dist. 7 kPa (m)	Dist. 14 kPa (m)	Dist. 20 kPa (m)
Cluster1	10%	10.58	5.93	4.40
Cluster1	100%	13.34	7.47	5.51
Cluster2	10%	10.58	5.94	4.40
Cluster2	100%	13.34	7.48	5.56
Cluster5	10%	10.58	5.92	4.41
Cluster5	100%	13.34	7.49	5.56

Las Figuras 25 y 26 representan los alcances de estos escenarios de daño por sobrepresión para las fugas de 10 y 100% del clúster 2.

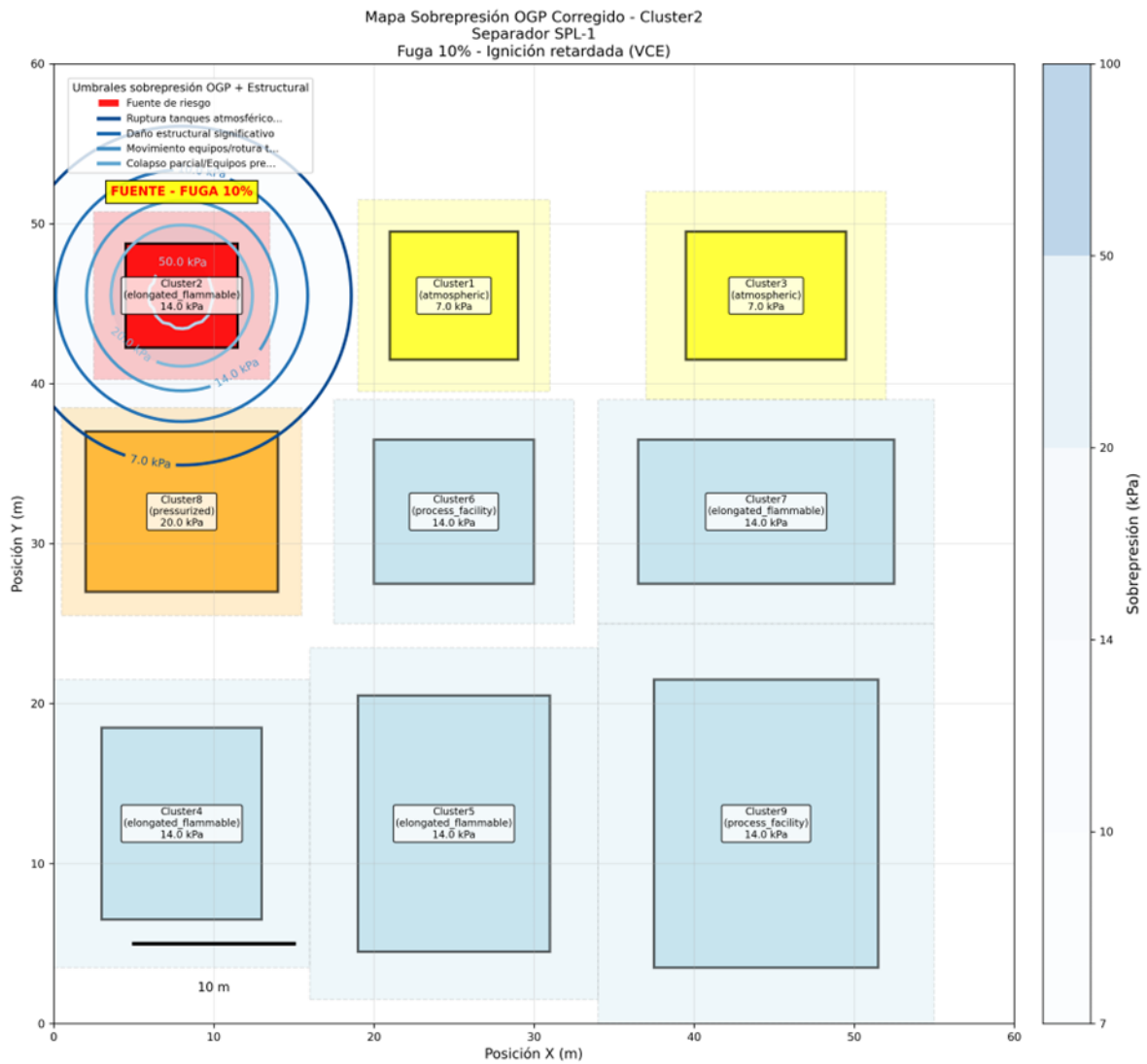


Figura 25. Escenario peligroso para fuga al 10% con ignición retardada (clúster 2).

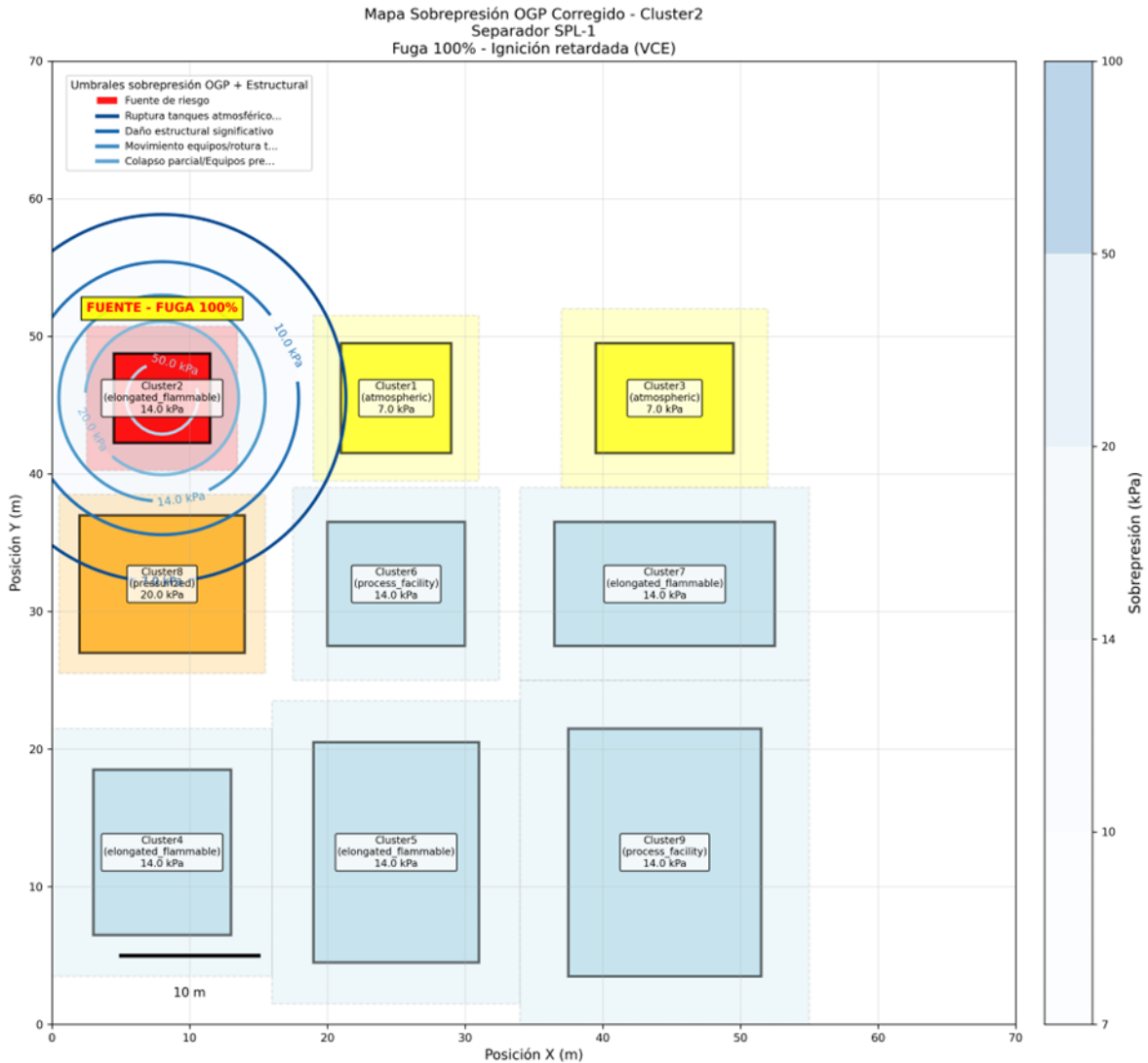


Figura 26. Escenario peligroso para fuga al 100% con ignición retardada (clúster 2).

Las distancias son prácticamente idénticas entre clústeres (variación <1%) porque la masa inflamable para este caso depende únicamente del caudal de descarga, no del inventario del clúster. También las condiciones de almacenamiento son idénticas, el mismo tamaño de fuga genera masas inflamables idénticas y, consecuentemente, energías de explosión idénticas según la ecuación (46).

El par más crítico es Cluster2 ↔ Cluster8 (13.5 m), el cual es tocado por la onda de umbral 7 kPa para la fuga del 10% y por las ondas de 7kPa y 14 kPa para el escenario de fuga del 100%. Sin embargo, dos factores mitigan este riesgo:

El clúster 8 (catalogado como recipiente presurizado) tiene umbral de 20 kPa y Las explosiones del 100% ocurren con frecuencia de 2.4×10^{-7} eventos/año (0.24 eventos por millón de años).

6.4.4 Cuantificación del riesgo de efecto dominó

Esta sección presenta la cuantificación del riesgo anual de escalamiento para todos los pares de clústeres del arreglo optimizado.

6.4.4.1 Riesgo total del sistema

El riesgo de efecto dominó se evaluó para 72 pares potenciales de equipos (9 clústeres $\times$ 8 posibles objetivos). De estos, 15 pares fueron procesados como escenarios válidos de escalamiento, correspondientes a clústeres fuente con presencia de hidrógeno (clústeres 1, 2, 4, 5, 7 y 8). Los 24 pares restantes donde el clúster fuente no contiene hidrógeno (clústeres 3, 6 y 9) fueron excluidos del análisis dado que no pueden generar escenarios peligrosos de fuga e ignición.

El riesgo total de efecto dominó calculado para el arreglo optimizado es $R_{Total} = 2.23 \times 10^{-12}$ eventos/año.

Esta frecuencia extremadamente baja indica que, en promedio, se esperaría un evento de escalamiento cada 448 mil millones de años de operación.

6.4.4.2 Pares críticos de mayor riesgo

Aunque el riesgo total es extremadamente bajo, el análisis identifica la contribución relativa de cada par de clústeres. La Tabla 36 presenta los cinco pares con mayor riesgo de escalamiento. Yendo del rango 1 al 5, del par de clústeres con mayor contribución al riesgo total al de menor contribución.

Los dos pares de mayor riesgo (Cluster1 $\rightarrow$ Cluster6 y Cluster2 $\rightarrow$ Cluster8) concentran el 82.94% del riesgo total del sistema. Ambos pares comparten la característica de presentar la distancia mínima del arreglo optimizado (13.5 m), maximizando la exposición a efectos físicos. Sin embargo, incluso estos pares "críticos" presentan riesgos individuales del orden de 10^{-13} eventos/año, frecuencias que no generan contribuciones significativas al riesgo anual esperado.

Tabla 36. Pares críticos de mayor riesgo de efecto dominó.

Rango	Par crítico	Distancia (m)	Riesgo (eventos/año)	% del total	Riesgo acumulado
1	Cluster1 $\rightarrow$ Cluster6	13.5	9.29×10^{-13}	41.60%	41.60%
2	Cluster2 $\rightarrow$ Cluster8	13.5	9.23×10^{-13}	41.34%	82.94%
3	Cluster5 $\rightarrow$ Cluster4	17.0	1.19×10^{-13}	5.32%	88.26%
4	Cluster1 $\rightarrow$ Cluster2	17.0	7.01×10^{-14}	3.14%	91.40%

5	Cluster2 → Cluster1	17.0	6.97×10^{-14}	3.12%	94.52%
---	---------------------	------	------------------------	-------	--------

La Figura 27 muestra las magnitudes de algunos de los pares más peligrosos del arreglo, el eje y representa el equipo que falla (fuente de peligro) y el eje x representa los equipos que reciben el daño (objetivo) confirmando que los pares más peligrosos son los ya mencionados anteriormente.

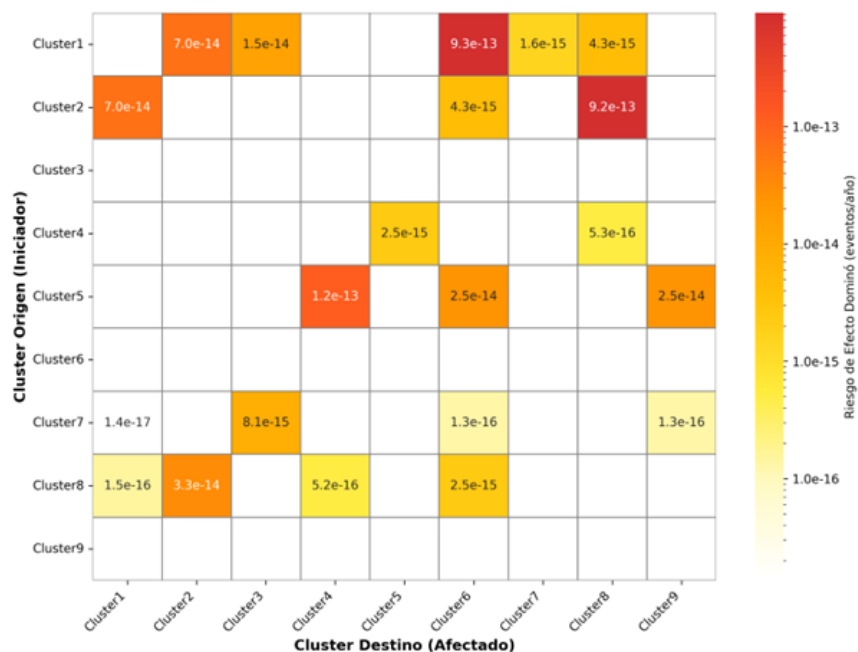


Figura 27. Matriz de magnitudes de eventos por año entre par de clústeres.

6.4.4.3 Clústeres como fuentes de riesgo

El análisis agregado por clúster fuente permite identificar los equipos que generan la mayor contribución al riesgo sistémico. La Tabla 37 presenta esta clasificación.

Tabla 37. Contribución al riesgo por clúster fuente.

Rango	Clúster fuente	Riesgo generado (eventos/año)	% del total
1	Cluster1	1.02×10^{-12}	45.67%
2	Cluster2	9.97×10^{-13}	44.66%
3	Cluster5	1.69×10^{-13}	7.56%
4	Cluster8	3.57×10^{-14}	1.60%
5	Cluster7	8.33×10^{-15}	0.37%
TOTAL		2.23×10^{-12}	100.00%

Los clústeres 1 y 2 generan conjuntamente el 90.33% del riesgo de efecto dominó del sistema, a pesar de representar solo el 42.4% de la frecuencia base total de fugas. Este resultado refleja la ubicación estratégica de ambos clústeres en el arreglo optimizado: presentan múltiples vecinos a distancias críticas (13.5-17.0 m) que, aunque suficientes para prevenir escalamiento en escenarios frecuentes ($fugas \leq 10\%$), maximizan la exposición en el evento del 100%.

Contrariamente, el clúster 5, que tiene la mayor frecuencia base de fugas del sistema (0.186 eventos/año, 29.5% del total), contribuye solo con el 7.56% del riesgo de escalamiento. Esta baja contribución se explica por su ubicación en el arreglo (coordenadas $x = 25$, $y = 12.5$ según Tabla 16), que lo posiciona a distancias mayores de equipos vulnerables. La distancia mínima desde clúster 5 hacia otros clústeres con hidrógeno es 17.0 m (hacia clúster 4), superior a las distancias críticas de 13.5 m de los clústeres 1 y 2.

El clúster 8 (SOE), a pesar de operar bajo las condiciones más extremas del sistema ($> 800^{\circ}\text{C}$, alto inventario de H_2), contribuye solo con el 1.60% del riesgo total. Este resultado es debido a dos factores: baja frecuencia base de fugas (0.0439 *eventos/año*), y clasificación como recipiente presurizado con alta resistencia a efectos térmicos (umbral 45 kW/m^2), reduciendo su vulnerabilidad como objetivo de escalamiento.

7. CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolló e implementó exitosamente un modelo basado en programación mixta entera no lineal (MINLP) para la planificación económica de una planta de producción de hidrógeno que incluye el análisis cuantitativo de riesgos (QRA), utilizando un conjunto de herramientas de software de código abierto para evaluar la seguridad de sistemas que usan hidrógeno (HyRAM+). A diferencia de enfoques tradicionales que tratan estos aspectos secuencialmente o independientemente. El modelo aplicado a un caso de estudio específico permitió la minimización de área y costos, así como la reducción efectiva de riesgos por efecto dominó. La función objetivo estuvo sujeta a restricciones espaciales que consideraron frecuencias de fallo, probabilidades de ignición, intensidad de efectos físicos y vulnerabilidad de equipos objetivo según modelos Probit. El arreglo obtenido minimiza el área ocupada de un poco más de tres mil metros cuadrados, con costos de interconexión entre equipos de 52.8 mil USD, mientras que el balance entre criterios económicos y de seguridad conduce a un riesgo total de efecto dominó de 2.23×10^{-12} eventos/año; es decir, varios órdenes de magnitud por debajo de umbrales de aceptabilidad industrial. Por tanto, la distribución espacial resultante tiene un uso eficiente del terreno, incorporando simultáneamente zonas de mantenimiento y áreas de circulación, evidenciando que la optimización reduce efectivamente las distancias entre equipos funcionalmente conectados sin comprometer los requisitos de separación por seguridad. A continuación, se presentan algunos de los hallazgos más destacados:

- El análisis HAZOP identificó sistemáticamente las desviaciones operacionales críticas que pueden generar escenarios peligrosos. Se reveló que los escenarios más severos están asociados a equipos con mayor presencia de hidrógeno bajo presión (tanque de separación en Clúster 2 y el módulo SOE en Clúster 8), equipos sometidos a condiciones térmicas superiores a 700°C (regeneradores en Clústeres 4 y 5, electrolizador en Clúster 8), y sistemas de recirculación y compresión con mayor tasa histórica de fallos mecánicos (clústeres 1, 2 y 5).
- Se determinaron las frecuencias anuales de fallo para los clústeres con presencia de hidrógeno, obteniéndose una frecuencia total de 0.6314 eventos/año, donde el Clúster 5 presentó la mayor frecuencia individual (0.186 eventos/año).
- Fue posible caracterizar completamente las liberaciones de hidrógeno para cinco tamaños de fuga (0.01% a 100%), determinando velocidades sónicas de salida (aprox. 880 m/s), caudales máscicos (6.39×10^{-5} - 6.39×10^{-1} kg/s) y longitudes de chorro (0.27 a 26.55 m).
- La aplicación de modelos para determinación de efectos físicos permitió evaluar: radiación térmica con intensidades de 15 a 90 kW/m² a distancias de 2 a 16 metros, respectivamente, y sobrepresión por explosiones con umbrales de 7 a 20 kPa a distancias de 4 a 13 metros.
- Se logró cuantificar la probabilidad de efecto dominó para 15 pares críticos de clústeres, identificando que los pares Clúster 1→Clúster 6 y Clúster 2→Clúster 8 concentran el 83% del riesgo total del sistema debido a su proximidad de 13.5 m. Sin embargo, ambos presentan frecuencias individuales del orden de 10^{-13} ; es decir, el riesgo de escalamiento es despreciable en términos de gestión de seguridad industrial.

- El modelo MINLP desarrollado en el entorno Python-Pyomo converge eficientemente a la solución óptima global en aproximadamente 57 segundos, con un GAP de aproximadamente 0.80%, explorando 14,238 nodos del árbol de búsqueda mediante el solver SCIP. Cabe destacar que, el sistema en el cual se ejecutó el modelo cuenta con un procesador *AMD Ryzen 5 2500U*, 4 núcleos, frecuencia base 2.0 GHz, 6 MB de caché, memoria RAM 8GB, *Windows 11*. En ordenadores con características similares, el tiempo de ejecución debe ser parecido.
- La configuración optimizada de los nueve clústeres satisface simultáneamente todos los criterios de diseño establecidos, donde las distancias mínimas entre clústeres con hidrógeno (13.5 m para Clúster 2↔Clúster 8, 17.0 m para Clúster 1↔Clúster2) exceden los alcances de daño calculados para el 99.3% de los escenarios (fugas $\leq 1\%$), garantizando confinamiento espacial de efectos.
- Solo las fugas catastróficas del 100%, con frecuencias de 4.79×10^{-7} eventos/año (0.48 eventos por millón de años), generan efectos térmicos que alcanzan equipos vecinos, pero con probabilidades de daño inferiores a 10^{-8} .
- El análisis económico revela una estructura de costos dominada por el consumo eléctrico del módulo electrolizador SOE (\$937,277.48 USD anuales, 75.19% del OPEX), característica inherente a los procesos de electrólisis a alta temperatura, mientras que un hallazgo particularmente relevante es el bajo costo de bombeo (\$658.56 USD anuales, 0.05% del OPEX), que incluye las dos bombas principales y sus pérdidas energéticas.
- El costo de producción de hidrógeno resultante es de \$1.71/kg, considerando producción de 1,500 kg/día y factor de capacidad de 85.2%, valor competitivo dentro del rango reportado internacionalmente para plantas HTE de escala similar (\$1.50-\$2.50/kg), sugiriendo viabilidad económica del diseño optimizado.

La metodología HyRAM+ integrada al modelo de optimización proporciona una evaluación probabilística rigurosa de riesgos. El diagrama de secuencia de eventos, parametrizado con una probabilidad de aislamiento/detección exitosa del 80% según especificaciones de HyRAM+, revela que del 20% de fugas no aisladas, el 99% dispersa sin ignición, y solo el 0.24% de los eventos totales evoluciona hacia plumas de fuego o explosiones, con frecuencias absolutas de 5.74×10^{-4} y 2.88×10^{-4} eventos/año, respectivamente.

Por otra parte, la implementación computacional en Python-Pyomo con integración de módulos HyRAM+ constituye una plataforma escalable y reproducible para análisis de plantas de hidrógeno, donde la metodología para el modelado de efectos físicos se extrajo mayormente de los códigos en bruto de los módulos de HyRAM+, mientras que la metodología QRA representa una combinación de HyRAM+ con literatura especializada en análisis de frecuencias y consecuencias.

Dicho modelo puede adaptarse a diferentes configuraciones de proceso, capacidades de producción y criterios de riesgo. La metodología desarrollada es extensible a otros tipos de plantas y fluidos peligrosos (gas natural, amoníaco, gases licuados) mediante ajuste de parámetros termodinámicos, propiedades de inflamabilidad y fallas históricas.

REFERENCIAS

- Aron P. Harris and Chris W. San Marchi. (2012). *Investigation of the Hydrogen Release Incident at the AC Transit Emeryville Facility (Revised)*.
- Alileche, N., Cozzani, V., Reniers, G., & Estel, L. (2015). Thresholds for domino effects and safety distances in the process industry: A review of approaches and regulations. *Reliability Engineering & System Safety*, 143, 74–84. <https://doi.org/10.1016/j.res.2015.04.007>
- American Institute of Chemical Engineers. (1995). *Guidelines for Consequence Analysis of Chemical Releases* (CCPS (Center for Chemical Process Safety (ed.); 1st ed., Vol. 1). CCPS (Center for Chemical Process Safety.
- Brunoro Ahumada, C., Quddus, N., & Mannan, M. S. (2018). A method for facility layout optimisation including stochastic risk assessment. *Process Safety and Environmental Protection*, 117, 616–628. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2018.06.004>
- Castillo, I., & Westerlund, T. (2005). An ϵ -accurate model for optimal unequal-area block layout design. *Computers & Operations Research*, 32(3), 429–447. [https://doi.org/10.1016/S0305-0548\(03\)00246-6](https://doi.org/10.1016/S0305-0548(03)00246-6)
- CCPS. (2000). *Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis* (American Institute of Chemical Engineers (AIChE) (ed.); 2nd ed.).
- Chirone, R., Paulillo, A., Coppola, A., & Scala, F. (2022). Carbon capture and utilization via calcium looping, sorption enhanced methanation and green hydrogen: A techno-economic analysis and life cycle assessment study. *Fuel*, 328, 125255. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.125255>
- Comisión de seguridad e investigación de peligros químicos de los Estados Unidos. (2002, January 16). *Fuga de Sulfuro de Hidrógeno en Georgia Pacific*.
- Cozzani, V., Gubinelli, G., & Salzano, E. (2006). Escalation thresholds in the assessment of domino accidental events. *Journal of Hazardous Materials*, 129(1–3), 1–21. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2005.08.012>
- Daniel A. Crowl & Joseph F. Louvar. (2002). *Chemical process safety, fundamentals with applications* (Amundson R. Neal (ed.); 2nd ed., Vol. 1). Prentice Hall PTR.
- David Wayne, F. (1991). An economical formula for calculating atmospheric infrared transmissivities. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 4(2), 86–92. [https://doi.org/10.1016/0950-4230\(91\)80012-J](https://doi.org/10.1016/0950-4230(91)80012-J)
- de Lira-Flores, J. A., López-Molina, A., Gutiérrez-Antonio, C., & Vázquez-Román, R. (2019). Optimal plant layout considering the safety instrumented system design for hazardous equipment. *Process Safety and Environmental Protection*, 124, 97–120. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2019.01.021>
- Díaz-Ovalle, C., Vázquez-Román, R., & Sam Mannan, M. (2010). An approach to solve the facility layout problem based on the worst-case scenario. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(3), 385–392. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2010.01.004>
- Dincer, I. (2002). Technical, environmental and exergetic aspects of hydrogen energy systems. *International Journal of Hydrogen Energy*, 27(3), 265–285. [https://doi.org/10.1016/S0360-3199\(01\)00119-7](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(01)00119-7)
- European Union Council. (1996). *Directive 96/82/EC: on the control of major-accident hazards involving dangerous substances*.

- Federal Institute for Materials Research and Testing. (2002). *Hydrogen Safety*.
- Floudas, C. A. . & P. P. M. (2008). Encyclopedia of optimization. In *Springer Science & Business Media* (2nd ed.). Springer.
- Forbes Staff. (2023, October 12). *La UE acelera uso de hidrógeno verde, México debe seguir sus pasos: AMH2*.
- Freeman, R. A. (1990). CCPS guidelines for chemical process quantitative risk analysis. *Plant/Operations Progress*, 9(4), 231–235. <https://doi.org/10.1002/prsb.720090409>
- Georgia Pratt. (2022, March 14). *Electrólisis de hidrógeno*. Blog.
- Georgiadis, M. C., Rotstein, G. E., & Macchietto, S. (1997). Optimal Layout Design in Multipurpose Batch Plants. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 36(11), 4852–4863. <https://doi.org/10.1021/ie9702845>
- Georgiadis, M. C., Schilling, G., Rotstein, G. E., & Macchietto, S. (1999). A general mathematical programming approach for process plant layout. *Computers & Chemical Engineering*, 23(7), 823–840. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(99\)00005-8](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(99)00005-8)
- Gerhart, P. M., Gerhart, A. L., & J.I. Hochstein. (2016). *Fundamentals of Fluid Mechanics* (L. Ratts (ed.); 8th ed., Vol. 1). Don Fowley.
- Guo, W., Jiang, P., & Yang, M. (2023). Unequal area facility layout problem-solving: a real case study on an air-conditioner production shop floor. *International Journal of Production Research*, 61(5), 1479–1496. <https://doi.org/10.1080/00207543.2022.2037778>
- H. Paul Williams. (2013). *Model Building in Mathematical Programming* (2013 John Wiley & Sons (ed.); 5th ed., Vol. 1). <https://doi.org/10.1057/jors.1979.36>
- Han, K., Cho, S., & Yoon, E. S. (2013). Optimal Layout of a Chemical Process Plant to Minimize the Risk to Humans. *Procedia Computer Science*, 22, 1146–1155. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2013.09.201>
- Harvego, E., O'Brien, J., & McKellar, M. (2012). *System Evaluations and Life-Cycle Cost Analyses for High-Temperature Electrolysis Hydrogen Production Facilities*.
- HOUF, W., & SCHEFER, R. (2007). Predicting radiative heat fluxes and flammability envelopes from unintended releases of hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(1), 136–151. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.04.009>
- Hurley, J. M., Gottuk, J. R. H. J., & Harada, K. (2016). *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering* (M. J. Hurley, D. Gottuk, J. R. Hall, K. Harada, E. Kuligowski, M. Puchovsky, J. Torero, J. M. Watts, & C. Wieczorek (eds.); 5th ed.). Springer New York. <https://doi.org/10.1007/978-1-4939-2565-0>
- Huser, A. . B. M. . Z. K. . S. M. M. and N. P. (2021). Quantitative risk analysis of scaled-up hydrogen facilities. *International Conference for Hydrogen Safety 2021*.
- ICChemE. (1997). *Accident database (CD form)*.
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. (2022). *Almacenamiento de energía con hidrógeno a escala de servicios como facilitador de la mitigación de CO2*. Mexico.
- Jafari, M. J., Zarei, E., & Badri, N. (2012). The quantitative risk assessment of a hydrogen generation unit. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(24), 19241–19249. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.09.082>

- Jayakumar, S., & Reklaitis, G. V. (1994). Chemical plant layout via graph partitioning-1. Single level. *Computers & Chemical Engineering*, 18(5), 441–458. [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(94\)88022-0](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)88022-0)
- Jung, B., & Lee, C. J. (2019). Plant layout and blast wall optimization with the consideration of operating conditions and potential explosions. *Process Safety and Environmental Protection*, 132, 285–293. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2019.10.010>
- Kenton, W. (2022, September 29). *Accepting Risk: Definition, How It Works, and Alternatives*.
- Kessler, A., Schreiber, A., Wassmer, C., Deimling, L., Knapp, S., Weiser, V., Sachsenheimer, K., Langer, G., & Eisenreich, N. (2014). Ignition of hydrogen jet fires from high pressure storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(35), 20554–20559. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.05.116>
- Kikukawa, S. (2008). Consequence analysis and safety verification of hydrogen fueling stations using CFD simulation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(4), 1425–1434. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.11.027>
- Kikukawa, S., Mitsuhashi, H., & Miyake, A. (2009). Risk assessment for liquid hydrogen fueling stations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(2), 1135–1141. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.10.093>
- Kirchsteiger, C. (2000). Availability of Community Level Information on Industrial Risks in the EU. *Process Safety and Environmental Protection*, 78(2), 81–90. <https://doi.org/10.1205/095758200530493>
- Kovács, G. (2019). Layout design for efficiency improvement and cost reduction. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences Technical Sciences*, 547–555. <https://doi.org/10.24425/bpasts.2019.129653>
- Kubalík, J., Kadera, P., Jirkovský, V., Kurilla, L., & Prokop, Š. (2019). *Plant Layout Optimization Using Evolutionary Algorithms* (pp. 173–188). https://doi.org/10.1007/978-3-030-27878-6_14
- Kubalík, J., Kurilla, L., & Kadera, P. (2023). Facility Layout Problem with Alternative Facility Variants. *Applied Sciences*, 13(8), 5032. <https://doi.org/10.3390/app13085032>
- Kusiak, A., & Heragu, S. S. (1987). The facility layout problem. *European Journal of Operational Research*, 29(3), 229–251. [https://doi.org/10.1016/0377-2217\(87\)90238-4](https://doi.org/10.1016/0377-2217(87)90238-4)
- LaChance, J., Houf, W., Fluor, L., & Middleton, B. (2009). *Analyses to support development of risk-informed separation distances for hydrogen codes and standards*. <https://doi.org/10.2172/983689>
- Lees, F. P. (2005). *Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Vol. Frank Lees* (Sam Mannan (ed.); 3rd ed.). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-7506-7555-0.X5081-6>
- Lees Frank. (2012). *Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment and Control* (Butterworth-Heinemann (ed.); 4th ed., Vol. 1).
- Li, L., Manier, H., & Manier, M.-A. (2019). Hydrogen supply chain network design: An optimization-oriented review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 103, 342–360. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.12.060>
- López-Molina, A., Vázquez-Román, R., Mannan, M. S., & Félix-Flores, M. G. (2013). An approach for domino effect reduction based on optimal layouts. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26(5), 887–894. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2012.11.001>
- MacDowell, N., Florin, N., Buchard, A., Hallett, J., Galindo, A., Jackson, G., Adjiman, C. S., Williams, C. K., Shah, N., & Fennell, P. (2010). An overview of CO₂ capture technologies. *Energy & Environmental Science*, 3(11), 1645. <https://doi.org/10.1039/c004106h>

- Mei, S., Jian, J., Zhang, X., Liu, Y., Zhu, Y., & Wang, S. (2023). Layout design and performance evaluation of hydrogen-fueled solid oxide fuel cell power generation system. *Energy Conversion and Management*, 293, 117495. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117495>
- Melideo, D. . M. P. . W. J. (2019). HIAD 2.0 – Hydrogen Incident and Accident Database. *International Conference on Hydrogen Safety*.
- Meller, R. D., Chen, W., & Sherali, H. D. (2007). Applying the sequence-pair representation to optimal facility layout designs. *Operations Research Letters*, 35(5), 651–659. <https://doi.org/10.1016/j.orl.2006.10.007>
- Meller, R. D., & Gau, K.-Y. (1996). The facility layout problem: Recent and emerging trends and perspectives. *Journal of Manufacturing Systems*, 15(5), 351–366. [https://doi.org/10.1016/0278-6125\(96\)84198-7](https://doi.org/10.1016/0278-6125(96)84198-7)
- Meller, R. D., Narayanan, V., & Vance, P. H. (1998). Optimal facility layout design. *Operations Research Letters*, 23(3–5), 117–127. [https://doi.org/10.1016/S0167-6377\(98\)00024-8](https://doi.org/10.1016/S0167-6377(98)00024-8)
- Mexico Energy Partners LLC. (2022). *Hidrógeno verde en México*. <https://Mexicoenergyllc.Com.Mx/Es/Blogs/Mexico-Energy-Insights/Green-Hydrogen-in-Mexico#:~:Text=El%20mercado%20de%20hidr%C3%B3geno%20de%20M%C3%A9xico&text=Actualmente%2C%20el%2098.6%25%20de%20la,Gris%2C%20derivado%20de%20combustibles%20f%C3%B3siles>
- Molazemi Koheila. (n.d.). *What is a QRA?* Dnv.Com/Oilgas/Qra.
- Molina, A., Schefer, R. W., & Houf, W. G. (2007). Radiative fraction and optical thickness in large-scale hydrogen-jet fires. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2), 2565–2572. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.08.060>
- Montreuil, B. (1991). *A Modelling Framework for Integrating Layout Design and flow Network Design* (pp. 95–115). https://doi.org/10.1007/978-3-642-84356-3_8
- Moradi, R., & Groth, K. M. (2019). Hydrogen storage and delivery: Review of the state of the art technologies and risk and reliability analysis. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(23), 12254–12269. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.041>
- Murata, H., Fujiyoshi, K., Nakatake, S., & Kajitani, Y. (1996). VLSI module placement based on rectangle-packing by the sequence-pair. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 15(12), 1518–1524. <https://doi.org/10.1109/43.552084>
- Pan American Health Organization. (n.d.). *Risk Assessment*. Home Detection, Verification and Risk Assessment (DVA) Risk Assessment.
- Papageorgiou, L. G., & Rotstein, G. E. (1998). Continuous-Domain Mathematical Models for Optimal Process Plant Layout. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 37(9), 3631–3639. <https://doi.org/10.1021/ie980146v>
- Patsiatzis, D. I., Knight, G., & Papageorgiou, L. G. (2004). An MILP Approach to Safe Process Plant Layout. *Chemical Engineering Research and Design*, 82(5), 579–586. <https://doi.org/10.1205/026387604323142612>
- Penteadó, F. D., & Ciric, A. R. (1996). An MINLP Approach for Safe Process Plant Layout. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 35(4), 1354–1361. <https://doi.org/10.1021/ie9502547>
- Protección Civil. (1994). *Guía técnica. Métodos cualitativos para el análisis de riesgos* (Dirección General de Protección Civil (ed.)). Ministerio de Justicia e Interior.

- Rahman, S. M. T., Salim, M. T., & Syeda, S. R. (2014). Facility Layout Optimization of an Ammonia Plant Based on Risk and Economic Analysis. *Procedia Engineering*, 90, 760–765. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.11.810>
- Riera, J. A., Lima, R. M., & Knio, O. M. (2023). A review of hydrogen production and supply chain modeling and optimization. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(37), 13731–13755. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.12.242>
- Rigas, F., & Sklaounos, S. (2005). Evaluation of hazards associated with hydrogen storage facilities. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(13–14), 1501–1510. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2005.06.004>
- Sakamoto, J., Sato, R., Nakayama, J., Kasai, N., Shibutani, T., & Miyake, A. (2016). Leakage-type-based analysis of accidents involving hydrogen fueling stations in Japan and USA. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(46), 21564–21570. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.08.060>
- Schulte, I. (2004). Issues affecting the acceptance of hydrogen fuel. *International Journal of Hydrogen Energy*, 29(7), 677–685. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2003.09.006>
- Secretaría de Energía. (2016). *Prospectiva de Energías Renovables 2016-2030*.
- Sherali, H. D., Fraticelli, B. M. P., & Meller, R. D. (2003). Enhanced Model Formulations for Optimal Facility Layout. *Operations Research*, 51(4), 629–644. <https://doi.org/10.1287/opre.51.4.629.16096>
- Shirvill, L. C., Roberts, T. A., Royle, M., Willoughby, D. B., & Gautier, T. (2012). Safety studies on high-pressure hydrogen vehicle refuelling stations: Releases into a simulated high-pressure dispensing area. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(8), 6949–6964. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.01.030>
- Statharas, J. C., Venetsanos, A. G., Bartzis, J. G., Würtz, J., & Schmidtchen, U. (2000). Analysis of data from spilling experiments performed with liquid hydrogen. *Journal of Hazardous Materials*, 77(1–3), 57–75. [https://doi.org/10.1016/S0304-3894\(00\)00252-1](https://doi.org/10.1016/S0304-3894(00)00252-1)
- Suzuki, A., Fuchino, T., Muraki, M., & Hayakawa, T. (1991). Equipment arrangement for batch plants in multi-floor buildings with integer programming. *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN*, 24(6), 737–742. <https://doi.org/10.1252/jcej.24.737>
- Takeno, K., Okabayashi, K., Kouchi, A., Nonaka, T., Hashiguchi, K., & Chitose, K. (2007). Dispersion and explosion field tests for 40MPa pressurized hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(13), 2144–2153. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.04.018>
- Tanaka, T., Azuma, T., Evans, J., Cronin, P., Johnson, D., & Cleaver, R. (2007). Experimental study on hydrogen explosions in a full-scale hydrogen filling station model. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(13), 2162–2170. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.04.019>
- Tchouvelev, A. V. (2008). *Knowledge gaps in hydrogen energy*.
- Trevor Kletz and Paul Amyotte. (1994). *What went wrong? Case histories of process plant disasters* (Sixth, Vol. 1). Elsevier.
- Tugnoli, A., Khan, F., Amyotte, P., & Cozzani, V. (2008). Safety assessment in plant layout design using indexing approach: Implementing inherent safety perspective. *Journal of Hazardous Materials*, 160(1), 100–109. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2008.02.089>
- U. S. Department of Energy. (2022). *Hydrogen Storage*. US DOE Office of Energy Efficiency & Renewable

Energy.

- Vázquez-Román, R., Lee, J.-H., Jung, S., & Mannan, M. S. (2010). Optimal facility layout under toxic release in process facilities: A stochastic approach. *Computers & Chemical Engineering*, 34(1), 122–133. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2009.08.001>
- Verfondern, K. (1997). Experimental and theoretical investigation of liquid hydrogen pool spreading and vaporization. *International Journal of Hydrogen Energy*, 22(7), 649–660. [https://doi.org/10.1016/S0360-3199\(96\)00204-2](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(96)00204-2)
- Wang, R., Zhao, H., Wu, Y., Wang, Y., Feng, X., & Liu, M. (2018). An industrial facility layout design method considering energy saving based on surplus rectangle fill algorithm. *Energy*, 158, 1038–1051. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.06.105>
- Witcofski, R., & Chirivella, J. (1984). Experimental and analytical analyses of the mechanisms governing the dispersion of flammable clouds formed by liquid hydrogen spills☆. *International Journal of Hydrogen Energy*, 9(5), 425–435. [https://doi.org/10.1016/0360-3199\(84\)90064-8](https://doi.org/10.1016/0360-3199(84)90064-8)
- Zang, G., Sun, P., Yoo, E., Elgowainy, A., Bafana, A., Lee, U., Wang, M., & Supekar, S. (2021). Synthetic Methanol/Fischer–Tropsch Fuel Production Capacity, Cost, and Carbon Intensity Utilizing CO₂ from Industrial and Power Plants in the United States. *Environmental Science & Technology*, 55(11), 7595–7604. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c08674>
- Zhou, J., Liu, D., Sha, R., Sun, J., Wang, Y., & Wu, Y. (2024). Geospatial simulation and decision optimization towards identifying the layout suitability and priority for wind-photovoltaic-hydrogen-ammonia project: An empirical study in China. *Energy*, 286, 129489. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129489>