



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería

Modelo de distribución de equipos y síntesis de redes de intercambiadores de calor reduciendo costos operativos y riesgo de accidentes.

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de Maestro en Ciencias en Ingeniería en Matemáticas.

Presenta

Ing. Francisco Ortiz Tena

Dirigida por:

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Querétaro, Qro. a octubre 2021.



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Maestría en ciencias en ingeniería en matemáticas

Modelo de distribución de equipos y síntesis de redes de intercambiadores de calor reduciendo costos operativos y riesgo de accidentes.

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de Maestro en Ciencias en Ingeniería en Matemáticas.

Presenta

Ing. Francisco Ortiz Tena

Dirigida por:

Dr. Julio Armando de Lira Flores

Sinodales

Dr. Julio Armando de Lira Flores
Presidente.

Mtra. Luisa Ramírez Granados
Secretario.

Dra. Claudia Gutiérrez Antonio
Vocal.

Dr. Juan Carlos Antonio Jáuregui Correa
Suplente.

Dr. José María Ponce Ortega
Suplente.

Centro Universitario, Querétaro, Qro.
Octubre 2021.
México.

Con mucho cariño para mi Mamá

Quién durante mucho tiempo me insistió a continuar con mis estudios de posgrado, este esfuerzo te lo dedico a ti mamá, esperando lo puedas estar festejando desde dónde estés.

Te amo María Cristina.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

Agradecimientos

Primero que nada, quiero agradecer a mi esposa Karen Estefanía Vargas Ortuño, por todo el apoyo que recibí de tu parte durante esta etapa en la que estudié la maestría.

Agradecer también a la familia Vargas Ortuño, especialmente a Juana Ortuño Duarte por haberme recibido varios días en la ciudad de Querétaro.

Al Dr. Julio Armando de Lira Flores, que siempre estuvo al pie del cañón, apoyándome en los diferentes temas de los que trata este trabajo de tesis.

A la Dra. Claudia Gutiérrez Antonio, quien me enseñó que, a pesar de que son trabajos científicos, se deben contar como una historia.

A la Mtra. Luisa Ramírez Granados, quien me compartió su pasión por la optimización.

Al Dr. José María Ponce Ortega, por todo el apoyo en el tema de síntesis de redes de intercambiadores de calor.

Al Dr. Juan Carlos Antonio Jáuregui Correa, por todo el apoyo recibido durante el estudio de la maestría.

A mis compañeros de generación Iliana María Paternina Ortega y Diego Olvera, con quienes nos apoyamos en todo momento para sortear las diferentes asignaturas.

A todos los docentes de la Maestría en Ciencias en Ingeniería en Matemáticas, el Dr. José Enrique Crespo, el Dr. Adolfo Huet, el Dr. Samuel Estala, la Dra. Angélica Jiménez, el Dr. Alberto Pastrana, al Dr. Ricardo Pérez, al Dr. Jesús Jerónimo y en especial al Dr. Roberto Augusto Gómez Loenzo coordinador de la maestría.

Por último, agradecer a la Universidad Tecnológica de San Miguel de Allende.

Índice

1. Introducción.....	1
1.1. Introducción.....	2
1.2. Planteamiento del problema.....	6
1.3. Justificación.....	9
1.4. Estructura de la tesis.....	10
2. Antecedentes.....	11
2.1. Síntesis de redes de intercambiadores de calor.....	12
2.1.1. Historia de la síntesis de redes de intercambio de calor.....	12
2.1.2. Síntesis de redes de intercambio de calor con enfoque de programación matemática.....	13
2.1.3. Modelo de superestructuras.....	13
2.2. Diseño de distribución de planta.....	16
2.2.1. Historia del problema de distribución de planta.....	17
2.3. Evaluación del riesgo de efecto dominó.....	19
2.3.1. Historia de accidentes industriales.....	19
2.3.2. Reducción de riesgo de accidentes.....	20
3. Objetivos.....	24
3.1. Objetivo general.....	25
3.2. Objetivos específicos.....	25
4. Metodología.....	26
4.1. Modelo para resolver el problema de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio.....	27

4.1.1. Restricción de orientación de equipos.....	27
4.1.2. Restricción de no superposición.....	28
4.1.3. Restricción de distancia.....	29
4.1.4. Estimación de la probabilidad de daño debido a una sobrepresión.	30
4.1.5. Función objetivo para el modelo.....	34
4.2. Modelo para resolver el problema de la disposición de equipos incorporando el análisis de capas de protección independientes para la reducción del riesgo.....	36
4.2.1. Definición de capas de protección independientes.	36
4.2.2. Restricción de capas de protección independientes.	38
4.3. Modelo basado en programación matemática para resolver el problema de síntesis de red de intercambio de calor.	39
4.3.1. Balance de energía general para cada corriente.....	41
4.3.2. Balance de energía para cada etapa.....	42
4.3.3. Asignación de temperaturas de entrada en la superestructura. ...	43
4.3.4. Factibilidad de temperaturas.	43
4.3.5. Servicios de calentamiento y enfriamiento.	44
4.3.6. Balance de calor latente.	45
4.3.7. Restricciones de límite superior.	45
4.3.8. Diferencias de temperaturas.	46
4.3.9. Función objetivo para el modelo.....	47
4.4. Integración de los modelos obtenidos para la resolución conjunta de los problemas.....	48
4.4.1. Función objetivo de la integración de los modelos.	49

4.5. Evaluación de los modelos obtenidos en un proceso de interés.....	49
5. Caso de estudio.....	50
5.1. Descripción del caso de estudio.	51
6. Resultados y discusión.....	57
6.1. Resultados y discusión de un modelo de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio.....	58
6.2. Resultados y discusión de un modelo de distribución de equipos incorporando el análisis de capas de protección independientes para la reducción del riesgo.....	60
6.3. Resultados y discusión de un modelo basado en programación matemática para resolver el problema de redes de intercambio de calor.	63
6.4. Resultados y discusión de integración de modelos para la resolución conjunta de problemas	65
7. Conclusiones.....	71
7.1. Conclusiones	71
7.2. Trabajo futuro.....	72
8. Bibliografía	73
9. Anexos.	80
9.1. Descripción del funcionamiento de los algoritmos utilizados.	80

Índice de Cuadros.

Cuadro 1 Datos de calefacción y enfriamiento del proceso.....	52
Cuadro 2 Datos extendidos para modelo propuesto de Ponce-Ortega et al. (2008).	53
Cuadro 3 Especificaciones de los equipos de proceso.	54
Cuadro 4 Dispositivos de protección disponibles.	54
Cuadro 5 Combinación de dispositivos para equipos peligros.	55
Cuadro 6 Costos de la selección de dispositivos de protección (USD).	55
Cuadro 7 Probabilidad de fallo en demanda de dispositivos de protección...	56
Cuadro 8 Distribución de equipos considerando la probabilidad de efecto dominó.	59
Cuadro 9 Valores de probabilidad de daño.	59
Cuadro 10 Costos para la distribución incluyendo protecciones independientes.....	61
Cuadro 11 Valores de probabilidad de daño incorporando capas de protección independiente.	62
Cuadro 12 Distribución de equipos considerando las capas de protección independiente.	62
Cuadro 13 Información de los intercambiadores para el modelo de síntesis de redes de intercambiadores de calor.....	64
Cuadro 14 Aprovechamiento de corrientes en la red de intercambiadores. ...	65
Cuadro 15 Costos del modelo integrador.	66
Cuadro 16 Información de los intercambiadores para la integración de modelos.	67
Cuadro 17 Aprovechamiento de corrientes en la red de intercambiadores modelo de integración.....	67
Cuadro 18 Probabilidad de daño para el modelo integrador.	69
Cuadro 19 Distribución de equipos, modelo de integración.	69
Cuadro 20 Tiempos de procesamiento para los modelos.	70

Índice de Figuras

Figura 1 Variación del precio del kW-h (MXN) del 2007 al 2017. Fuente (CFE 2019).....	2
Figura 2 Precio del gas LP base, considerando en diciembre 2010=100%. Fuente (INEGI 2019).....	3
Figura 3 Representación gráfica del problema.....	7
Figura 4 Superestructura de síntesis de redes de intercambiador de calor de 2 etapas.....	15
Figura 5 Restricción de orientación de equipos.....	28
Figura 6 Restricción de no superposición.....	29
Figura 7 Restricción de distancia.....	31
Figura 8 Tipos de corrientes consideradas en el modelo.....	40
Figura 9 Diagrama del proceso ABCDE, adaptado de Papoulias y Grossmann (1983b).....	51
Figura 10 Distribución óptima del proceso ABCDE, considerando probabilidad de efecto dominó. La distancia se expresa en metros.....	60
Figura 11 Distribución óptima del proceso ABCDE considerando capas de protección independiente. La distancia se expresa en metros.....	63
Figura 12 Red de intercambiadores obtenida con el modelo propuesto.....	64
Figura 13 Red de intercambiadores obtenida para el modelo de integración.....	68
Figura 14 Distribución de equipos considerando integración de problemas. Distancia expresada en metros.....	70

Abreviaturas y siglas

a) Conjuntos

Símbolo	Descripción
$CPS1$	Conjunto de corrientes frías no isotérmicas
$CPS2$	Conjunto de corrientes frías isotérmicas
$HPS1$	Conjunto de corrientes calientes no isotérmicas
$HPS2$	Conjunto de corrientes calientes isotérmicas
I	Conjunto de equipos de proceso
k	Conjunto de etapas en la superestructura
ki	Conjunto de equipos de protección
P	Subconjunto de equipos I considerados como peligrosos

b) Parámetros

Símbolo	Descripción
α_i	Dimensión del equipo i
β_i	Dimensión del equipo i
C^A	Costo del terreno por m^2
C_{ki}^{Dev}	Costo del dispositivo de seguridad ki
C^{HEN}	Costo de coeficiente de área de intercambiador
C_i^P	Costo de equipo del i
C^T	Costo lineal de la tubería por m
CCU	Costo unitario del enfriamiento
CHU	Costo unitario del vapor
CI	Costo fijo por intercambiador
cf	Coefficiente de filme individual de transmisión
cf^{cu}	Coefficiente del filme individual para el servicio de enfriamiento
cf^{hu}	Coefficiente del filme individual para el servicio de calentamiento
ΔT^{max}	Límite superior para la diferencia de temperaturas

Símbolo	Descripción
ΔT_{MIN}	Diferencia mínima de temperatura entre corrientes
E	Energía de explosión del equipo
FCp	Tasa de flujo de capacidad de calor de la corriente no isotérmica
γ	Exponente para el área en la ecuación de costos
λ	Calor latente de condensación de la corriente isotérmica
M	Distancia mayor o igual a la distancia máxima permisible
NOK	Número de etapas en la superestructura
$PF_{D_{ki,i}}$	Probabilidad de falla en demanda del sistema de protección ki en el equipo i
Q^{max}	Menor contenido de calor de las corrientes involucradas en el emparejamiento
TIN	Temperatura de entrada de la corriente
$TOUT$	Temperatura de salida de la corriente

c) Variables

Símbolo	Definición
A	Área del terreno
A_{ij}	Distancia relativa en la coordenada y entre el equipo i y j , considerando que el equipo i está arriba de j
B_{ij}	Distancia relativa en la coordenada y entre el equipo i y j , considerando que el equipo i está debajo de j
C_i^D	Costo de instalación del dispositivo de seguridad en el equipo i .
C_i^E	Costo de daño asociado a la explosión del equipo i
d_i	Profundidad del equipo i
D_{ij}	Distancia Manhattan entre el equipo i y el equipo j
D_{eij}	Distancia Euclidiana entre el equipo i y el equipo j

Símbolo	Definición
dt_{hck}	Diferencia de temperaturas entre las corrientes (h, c) en la etapa k
$dtcu_h$	Diferencia de temperaturas entre la corriente caliente h y la utilidad de enfriamiento
$dthu_c$	Diferencia de temperaturas entre la corriente fría c y la utilidad de calentamiento
ΔP_{ij}	Sobrepresión generada por el equipo peligroso i sobre el equipo j
f_i^c	Frecuencia de la consecuencia para el equipo i
FO_{HEN}	Función objetivo del modelo de síntesis de redes de intercambio de calor
FO_{int}	Función objetivo de la integración de modelos
$FO_{L,E}$	Función objetivo de distribución de equipos y riesgo de accidentes
γ_{ij}	Función relajada alrededor de la distancia característica entre el equipo peligroso i y el equipo j
l_i	Longitud del equipo i
L_{ij}	Distancia relativa en la coordenada x entre el equipo i y j , considerando que el equipo i está a la izquierda de j
L_x	Longitud del terreno en la dirección x
L_y	Longitud del terreno en la dirección y
q_{hck}	Intercambio de calor entre la corriente caliente h y la corriente fría c en la etapa k
qcu_h	Intercambio de calor entre la utilidad fría y la corriente caliente h
qhu_c	Intercambio de calor entre la utilidad caliente y la corriente fría c
P_{Dij}	Probabilidad de daño causada por el equipo i sobre el equipo j
R_{ij}	Distancia relativa en la coordenada x entre el equipo i y j , considerando que el equipo i está a la derecha de j
R_{oij}	Distancia característica entre el equipo peligroso i y el equipo j

Símbolo	Definición
$t_{h,k}$	Temperatura de la corriente caliente h al final de la etapa k
$t_{c,k}$	Temperatura de la corriente fría c al final de la etapa k
x_i	Coordenada x del equipo i
y_i	Coordenada y del equipo i
Y_{ij}	Variable probit para estimar el daño en el equipo j , causado por el equipo i

d) Variables binarias

Símbolo	Definición
$B_{ki,i}$	Variable binaria de restricción de capas de protección
$E1_{ij}$	Variable binaria de no superposición
$E2_{ij}$	Variable binaria de no superposición
O_i	Variable binaria de orientación de equipos
W_{ij}^x	Variable binaria de restricción de distancia
W_{ij}^y	Variable binaria de restricción de distancia
z_{hck}	Indica emparejamiento entre la corriente caliente h y la corriente fría c en la etapa k
zcu_h	Indica emparejamiento de la corriente caliente h y el servicio de enfriamiento
zhu_c	Indica emparejamiento de la corriente fría c y el servicio de calentamiento

Resumen

En este trabajo se presenta un modelo para optimizar los costos de una planta, considerando la síntesis de redes de intercambiadores de calor, la distribución de equipos y aspectos de seguridad. Se sabe que la industria química requiere diseños de procesos eficientes, debido al incremento en los costos de los energéticos. Algunas estrategias incluyen utilizar la menor cantidad de recursos para disminuir los costos de operación. Entre estos costos son los costos de bombeo (incluyendo compresión) y los servicios de calentamiento y enfriamiento. Además, se debe tener la certeza de que la inversión inicial de capital será la menor, enfocado en reducir la disponibilidad de terreno, costos de tuberías, entre otros. Normalmente, se realizan estos estudios en los proyectos de nuevas instalaciones e implementaciones de nuevos equipos, o bien en adecuaciones a plantas existentes, con la finalidad de que las empresas sean eficientes y seguras. En la literatura, se encuentra mucha información sobre cómo resolver estos problemas de manera independiente, sin embargo, existen pocos trabajos de investigación enfocados al análisis simultáneo de los aspectos económicos y de seguridad de los procesos químicos, en particular las instalaciones con la probabilidad de generar accidentes que se propaguen por efecto dominó. El riesgo de un incidente con esta característica es mayor cuando los equipos del proceso se ubican muy cerca entre ellos; en este caso, los diseños se conocen como compactos y permiten reducir los costos de compra y operación. Por esta razón, en este trabajo, se desarrolla un modelo basado en programación matemática determinista, del tipo MINLP que se resuelve usando GAMS, que permita resolver simultáneamente el problema de síntesis de redes de intercambio de calor, utilizando el enfoque de superestructuras, el problema de distribución de equipos, con un método exacto con enfoque continuo, y el problema de reducción del riesgo de accidentes con efecto dominó, utilizando un modelo probit; asimismo, se incluye la instalación de capas de protección independientes, la función objetivo consiste en minimizar los costos de instalación y de operación. Los resultados obtenidos indican que la síntesis de redes de intercambiadores de calor está vinculada con la distribución de equipos, que a su vez se encuentra relacionada con la seguridad, a través de las distancias de separación entre los equipos. La integración de los tres problemas en un sólo modelo permite obtener diseños integrales, que tienen impacto positivo en la sustentabilidad y mayores beneficios que los que se pueden obtener al resolver los problemas por separado.

Palabras clave: Distribución equipos, HEN, Efecto dominó, Programación Matemática, MINLP.

Abstract

A model to reduce the plant cost is presented on this work, considering the heat exchange network synthesis, layout and safety conditions. It's well know that the chemical industry requires the design of efficient processes due to the increment of the energetic costs. Some of these designs include the use of less resources to decrease the operation costs. For instance, the pump costs (including the ones of compression) and the heat and cold services. Besides, it must be certain that the initial investment cost will be the lowest, focused on reducing the land availability, pipe costs, among others. Usually, these studies are carried out in the projects with new facilities and in the implementations of new equipment, as well as in modifications of existing plants, in order for companies to be efficient and safe. In the literature, a lot of information about how to resolve these problems independently are found, however, there are few investigations focused in the simultaneous analysis of the economics aspects and safety in the chemical processes, in particular the facilities with a probability of generating accidents spread by domino effect. The risk of this kind of incident with these characteristics is higher when the process equipments are located very close to each other, in this case, the designs are known as compacts and allows to reduce the installation and operation costs. These compact designs allow to reduce the purchase and operation costs. For this reason, in this work, a model based on mathematical programming is developed, as a mixed integer nonlinear programming (MINLP) problem that is resolved by using GAMS, to allow to solving a simultaneous heat exchange network problem, using the superstructure model; the layout problem, using an exact method under continuous approach; and the reduction risk of a domino effect accident problem, using a probit model, including the installation of independent protection layers, the objective function is to minimize the installation and operation costs. The results obtained suggest that the heat exchange network are linked with the layout problem, which in turn are related with the safety, through the separation distance between the equipment. Addressing these three problems in one just model allows obtaining integer designs, that has a positive impact in sustainability and greater benefits that can be obtained by solving the problems separately.

Key words: Layout, HEN, Domino effect, math programming, MINLP.

CAPÍTULO 1

1. Introducción.

En este capítulo se muestra la motivación de realizar este trabajo, se plantea el problema identificado, así como la justificación de este trabajo. Al final se muestra una descripción general del contenido en este trabajo.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

1.1. Introducción.

La motivación de este trabajo consiste en revisar que el precio de los energéticos se incrementa año con año, provocando también un aumento en los costos de operación en los procesos químicos. En la Figura 1 se evidencia un incremento del 78% en el costo de la energía eléctrica por kW-h (\$/kW-h) del año 2007 al 2017, de acuerdo con datos reportados por la Comisión Federal de Electricidad (CFE, 2019). Además, el costo del gas licuado a presión (gas LP) también aumentó; el gas licuado es utilizado como combustible para producir vapor. El costo por litro del gas LP reportado por el Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI, 2019) aumentó un 108.81% del 2007 al 2017, como se puede observar en la Figura 2.

Se sabe que el motor de la industria química son los energéticos, por lo que un incremento constante en sus precios hace que las operaciones se encarezcan y el margen de utilidad sea menor; una solución a este problema es analizar las redes de intercambio de calor (Heat exchanger network HEN, por sus siglas en inglés). Por medio de las HEN se pueden ahorrar grandes cantidades de energía, lo cual se traduce en ahorros en los costos operativos.

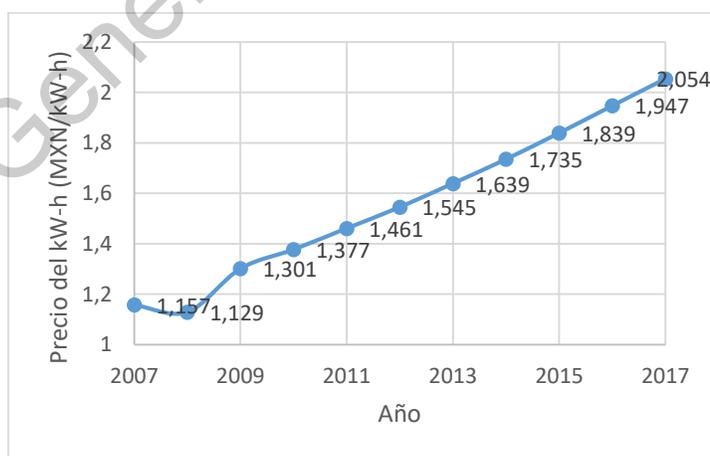


Figura 1 Variación del precio del kW-h (MXN) del 2007 al 2017. Fuente (CFE 2019).

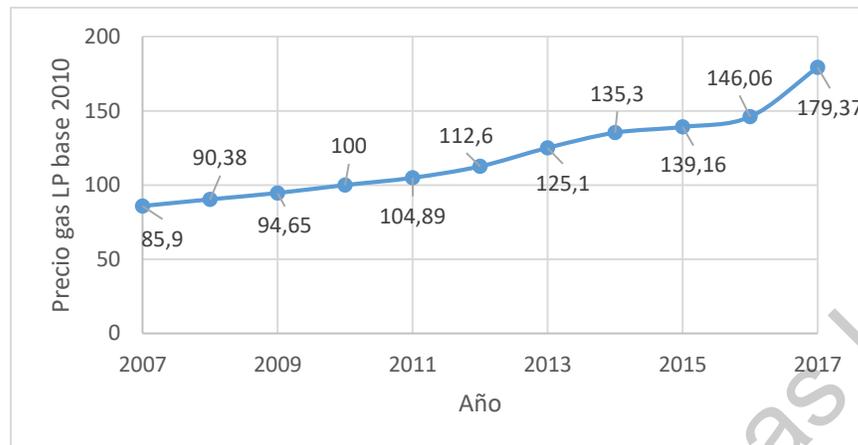


Figura 2 Precio del gas LP base, considerando en diciembre 2010=100%. Fuente (INEGI 2019).

Yee y Grossmann (1990) definen el problema de la síntesis HEN de la siguiente manera:

Dado un conjunto de corrientes de proceso calientes, *HP*, que deben ser enfriadas y un conjunto de corrientes de proceso frías, *CP*, que deben ser calentadas, especificando también los índices de flujo de la capacidad calorífica de cada corriente fría y caliente, así como las temperaturas inicial y objetivo expresadas como valores exactos o desigualdades. Dado también un conjunto de servicios de calentamiento, *HU*, y un conjunto de servicios de enfriamiento, *CU*, con sus correspondientes temperaturas. El objetivo es determinar la red de intercambio de calor que presenta el menor costo anual. La solución obtenida debe proporcionar los siguientes aspectos:

1. La cantidad de servicios de calentamiento o enfriamiento requeridos.
2. Emparejamientos de corrientes y el número de unidades.
3. Cargas de calor y temperaturas de funcionamiento de cada intercambiador.
4. Configuración de la red, con sus respectivos flujos.
5. Área de cada intercambiador.

La síntesis de HEN es un problema que se ha estudiado desde los años 70's de manera aislada, ver sección 2.1., y que ha demostrado ser un método eficiente para reducir costos operativos. Adicionalmente, se deben de considerar otros aspectos para aumentar la rentabilidad de una planta, por ejemplo, la distribución de equipos y seguridad en la planta.

El diseño de distribución de plantas es una actividad multidisciplinaria, que requiere la colaboración de diferentes especialistas; su objetivo es establecer el mejor acomodo de sus elementos, ya que es un factor crucial en los aspectos económicos y de seguridad de la planta (Mannan, 2012). En el resumen realizado por Hosseini-Nasab et al. (2018) definen que el problema de diseño de distribución de plantas es el acomodo de las instalaciones en un área física, acorde con objetivos económicos y sujeto a restricciones espaciales como lo son la forma, el tamaño, la orientación de las unidades a instalar. De igual manera, las instalaciones no se pueden superponer, con la finalidad de coadyuvar a incrementar el rendimiento, la productividad y la eficiencia de la planta. Entre los objetivos económicos se debe procurar minimizar la cantidad de terreno ocupado y de tubería usada para la operación de la planta, garantizando acceso individual a las unidades. Un diseño apropiado, además, debe considerar expansiones futuras, impactos medio ambientales, eficiencia, el área disponible, los gastos operativos, pero, sobre todo, seguridad en las operaciones de la planta (Mecklenburgh, 1985).

Lees (2012) establece que la distribución de planta es un factor crucial en la economía y la seguridad de la planta de proceso. Algunas de las formas en las que el diseño de planta contribuye a la seguridad y la prevención de pérdidas son:

1. Segregación de diferentes riesgos.
2. Minimización de tuberías vulnerables.
3. Contención de accidentes.
4. Limitación de exposición.
5. Construcción, operación y mantenimiento eficiente y seguro.
6. Diseño seguro de la sala de control.

7. Instalaciones de control de emergencia.
8. Instalaciones de extinción de incendios.
9. Acceso de servicios de emergencia.
10. Seguridad.

La seguridad de los equipos de las operaciones de la planta es un tema que no siempre es investigado y evaluado a profundidad, por lo menos en lo que concierne a México. Sin embargo, el potencial de incendios y explosiones es grande, especialmente en plantas químicas. Cuando ese potencial se materializa, conlleva un sinnúmero de consecuencias desde la interrupción de la producción, pérdidas financieras debido a los daños en los equipos, hasta el daño permanente en el ambiente o pérdida de vidas (Gupta et al., 2003). En el pasado, varios accidentes en la industria química se convirtieron en desastres que afectaron a la sociedad y al medio ambiente significativamente, ver sección 2.3.1. Los accidentes de mayor atención para la seguridad de procesos químicos son incendios, explosiones y emanaciones tóxicas. Los dos primeros se deben de atender de manera muy particular, ya que pueden generar un efecto dominó entre los equipos de la planta. El efecto dominó se refiere al fenómeno que ocurre cuando un evento primario se propaga a los equipos cercanos, provocando uno o más accidentes secundarios (Khan y Abbasi, 1998). Para que un evento dominó suceda se deben suscitar tres características:

- 1) El escenario de un accidente primario, que activará el efecto dominó.
- 2) Un efecto de propagación seguido del evento primario, debido al efecto de vectores de escalamiento ocasionado por el evento primario en objetivos secundarios.
- 3) Al menos un escenario secundario accidental, incluyendo la misma o diferentes unidades de la planta.

Para que se pueda considerar un accidente como efecto dominó, la severidad total del accidente será mayor o igual a la severidad del escenario del accidente

primario; puesto que es importante comprender que la secuencia de propagación es “relevante” si se desencadena una escalación del evento primario, activado por un vector de escalamiento (radiación, sobrepresión o impacto de fragmentos) originado por un evento primario.

La manera en la que se puede evitar que un evento de tipo dominó se presente es utilizar reglas simplificadas y conservativas para definir el riesgo como una función tanto de la frecuencia como de la gravedad de las consecuencias del incidente. Una manera de reducir la consecuencia es, por medio de una distribución de planta adecuada, buscar que los equipos no se afecten entre sí, en caso de que alguno de ellos presente una explosión (López-Molina et al., 2013); una forma para reducir la frecuencia y las consecuencias es utilizar capas de protección independientes (Blanco, 2014). Al final, se buscará que el resultado de la función se encuentre dentro de estándares aceptables de la empresa (Chemical Process Safety (CCPS), 2015).

Estos tres problemas antes mencionados, la síntesis de redes de intercambiadores de calor, la distribución y de equipos, y la reducción de riesgo de accidentes de tipo dominó, deben ser considerados en la implementación de procesos químicos industriales; en especial, en aquellos que requieran calentamiento y enfriamiento de corrientes de proceso, así como el manejo de sustancias explosivas, con la finalidad de poder garantizar rentabilidad y seguridad en las operaciones. En este trabajo se presenta el desarrollo de un modelo, basado en programación matemática, que permite resolver estos tres problemas de gran interés en la ingeniería de procesos de manera simultánea debido a que contienen variables en común. La solución de estos problemas permitirá obtener procesos sustentables.

1.2. Planteamiento del problema.

En este trabajo se plantea una solución al problema de diseño de la distribución de equipos de procesos químicos, así como los emparejamientos de las corrientes calientes con las corrientes frías para la síntesis de redes de

intercambiadores de calor, considerando la reducción del riesgo de accidentes con efecto dominó. La Figura 3 muestra un diagrama que representa estos problemas; estos últimos tienen en común reducir los costos en una planta química, tanto de inversión inicial, como de gastos operativos. Sin embargo, estos problemas suelen resolverse de manera independiente. Por ejemplo, la forma en la que se resuelve el problema de síntesis de la HEN no considera buscar la mejor ubicación espacial de los intercambiadores, o si entre ellos puede existir un riesgo de accidente de incendio, explosión o emisión tóxica.

Por otra parte, la solución del problema de diseño de la distribución de equipos se obtiene después de determinar la configuración de la red de intercambiadores de calor, con lo cual se reduce el número de diseños factibles, que, al resolverse en conjunto, puedan reducir el costo anual total.

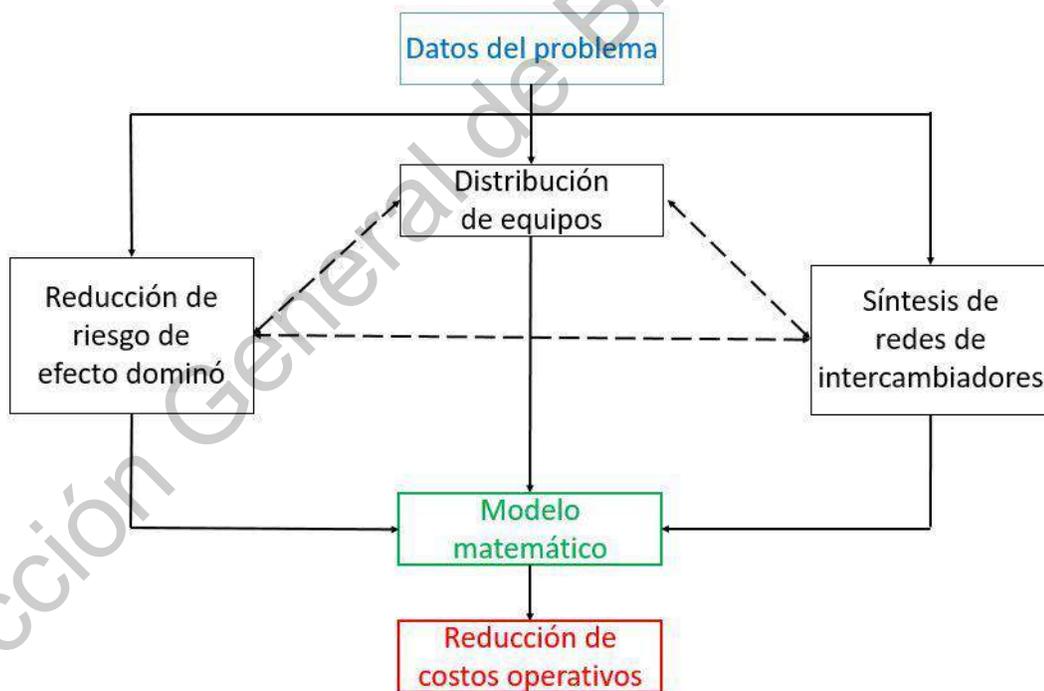


Figura 3 Representación gráfica del problema.

De esta manera, se requiere tener los siguientes elementos para encontrar la solución al problema:

- Un conjunto de corrientes frías no isotérmicas ($CPS1$) o isotérmicas ($CPS2$) que se deban calentar.
- Un conjunto de corrientes calientes no isotérmicas ($HPS1$) o isotérmicas ($HPS2$) que se deban enfriar.
- Un conjunto de equipos de proceso (I), que deban ser distribuidos en un terreno con área A establecida.
- Un subconjunto de equipos peligrosos P , que manejen sustancias que tienen potencial de desencadenar una explosión.
- Un conjunto de conexiones entre los equipos de proceso.
- Los costos asociados a bombeo, terreno, equipos, así como de los servicios de calentamiento y enfriamiento.
- Un conjunto de dispositivos ki a instalar para mitigar el riesgo de efecto dominó.

Para determinar:

- La ubicación de cada uno de los equipos de proceso (I).
- Los emparejamientos de las corrientes frías (CPS) con las corrientes calientes (HPS), incluyendo los emparejamientos con las corrientes de servicios.
- Los dispositivos (ki) de seguridad a instalar.

Con la finalidad de minimizar el costo de:

- Terreno y bombeo.
- Asociado al riesgo.
- Servicios de calentamiento y enfriamiento.
- De instalación de intercambiadores.

1.3. Justificación.

Se ha mencionado que los beneficios de obtener una distribución de planta óptima conllevan a reducir costos operativos. Peters y Timmerhaus (1968) indican que los costos de las tuberías pueden llegar a ser el 80 % del costo del equipo comprado, mientras que Tompkins et al. (1996) mencionan que la disposición de los materiales afecta entre el 15 % y 70 % del total del costo de operación.

Por su parte, el diseño y síntesis de redes de intercambiadores de calor permite utilizar de manera racional la energía, y mejora sustancialmente la rentabilidad económica y la eficiencia medioambiental de las plantas de producción. El principal objetivo de la síntesis de redes de intercambiadores de calor es maximizar el uso de la energía de las corrientes de proceso calientes, en calentar las corrientes de proceso frías, minimizando tanto el uso de servicios de calentamiento, como de enfriamiento en las corrientes de proceso y reduciendo la cantidad de intercambiadores de calor instalados.

Por último, la reducción del riesgo de accidentes catastróficos que disminuya la posibilidad de que se presente un evento de tipo dominó evitará que la industria incurra en gastos no necesarios para restablecer las operaciones. Además, se podrán prevenir, como consecuencias del accidente, costos por pérdida de producción, valor de compra de los equipos afectados, la pérdida de salud humana calculada en términos del costo de las muertes / lesiones empleando los costos del seguro, los costos de rehabilitación y las tasas de compensación laboral causadas directamente por un accidente en la instalación. Sin embargo, es importante aclarar que una vida humana es inconmensurable, y los asociados con la masa o volumen de suelo, agua y aire que fueron contaminados por el peligroso accidente y que requieren ser remediados.

Con base a lo anterior, se identifica la necesidad de desarrollar herramientas que permitan resolver estos problemas en conjunto, ya que se evidencia que los tres problemas convergen en un mismo objetivo, reducir los costos operativos. Considerando a su vez, que los intercambiadores de calor son equipos que pueden

provocar altas presiones debido a que, para bloquear el equipo, cuenta con diferentes válvulas. Por esta razón, el modelo propuesto permite obtener soluciones factibles para estos problemas, y coadyuvará en la toma de decisiones en las primeras etapas del diseño de la planta.

1.4. Estructura de la tesis.

La presentación del trabajo está organizada de esta forma. En el Capítulo 0 se muestra la motivación de realizar este trabajo de investigación, el planteamiento del problema y la justificación. En el Capítulo 2 se hace una revisión detallada de los diferentes trabajos para resolver los problemas de síntesis de redes de intercambiadores de calor, diseño de distribución de planta, y evaluación del riesgo de efecto dominó. El objetivo de la investigación se encuentra en el Capítulo 3. En el Capítulo 4 se propone la metodología a través de modelos matemáticos que han dado buen resultado para resolver los diferentes problemas. Primero, un modelo para resolver el problema de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio; posteriormente, un modelo para resolver el problema de la disposición de los equipos incorporando capas de protección independientes para la reducción del riesgo. También se considera un modelo para resolver el problema de redes de intercambio de calor; por último, se hacen converger los tres modelos, integrando la función objetivo. En el Capítulo 5 se presenta la solución de un caso de estudio. Los resultados y discusión de la aplicación del modelo se presentan en el Capítulo 6. Finalmente, las conclusiones y el trabajo futuro se presentan en el Capítulo 7.

CAPÍTULO 2

2. Antecedentes.

En este capítulo se presenta el estado del arte de cómo se han abordado los problemas de síntesis de redes de intercambiadores de calor y distribución de equipos de procesos para el diseño en instalaciones de plantas químicas; especialmente, en aquellos trabajos que incluyan información sobre accidentes, como el de tipo dominó.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

2.1. Síntesis de redes de intercambiadores de calor.

El diseño y la síntesis de las HEN son herramientas que ya llevan tiempo estudiadas. Algunos de los avances más significativos en este tema se mencionan en los siguientes párrafos.

2.1.1. Historia de la síntesis de redes de intercambio de calor.

El primer trabajo importante que busca mejorar las redes de intercambio de calor fue descrito por Masso y Rudd (1969), donde se examina el uso de estrategias de estructuración heurística en la síntesis de procesos, buscando obtener ponderaciones de selección ajustadas a experiencias de éxito o fracaso pasados. Hohmann (1972), por su parte, propone un método para diagnosticar la factibilidad en el intercambio de calor entre las corrientes, calculando la temperatura de aproximación y el suministro de los servicios adicionales. Posteriormente, Linnhoff y Hindmarsh (1983) mejoraron el método propuesto por Hohmann para establecer lo que ahora se conoce como el método de punto de pliegue.

Kang y Liu (2019) realizaron una revisión de los puntos más importantes y las tendencias emergentes en el desarrollo y la mejora de las síntesis de las HEN entre los años 1975-2018. Varios métodos flexibles de síntesis de las HEN han sido desarrollados para parámetros operativos fijos, principalmente en casos de estado estable. En general, estos métodos pueden ser divididos en cuatro categorías:

- Métodos basados en análisis de sensibilidad (McGilliard y Westerberg, 1972; Linnhoff y Hindmarsh, 1983; Ratnam y Patwardhan, 1991; Papastratos et al., 1993)
- Métodos basados en análisis de resiliencia (Marselle et al., 1982; Saboo y Morari, 1984; Cerda et al., 1990).
- Métodos basados en análisis de flexibilidad (Grossmann y Sargent, 1978a; Swaney y Grossmann, 1985; Floudas y Grossmann, 1987; Pistikopoulos y Mazzuchi, 1990; Tantimuratha et al., 2001; Zhang et al., 2011)

- Enfoques de síntesis de múltiples períodos (Floudas et al., 1986; Papalexandri y Pistikopoulos, 1993; Aaltola, 2002; Verheyen y Zhang, 2006; Jiang y Chang, 2013; Kang y Liu, 2014)

2.1.2. Síntesis de redes de intercambio de calor con enfoque de programación matemática.

Existen métodos para resolver el problema de síntesis de HEN desde un enfoque de programación matemática. Grossmann y Sargent (1978b) fue de los primeros en proponer un programa entero mixto no lineal (MINLP por sus siglas en inglés: mixed integer linear programming); en su trabajo proponen un algoritmo con la finalidad de encontrar una solución al problema de síntesis de las HEN utilizando variables enteras como la eficiencia de bombeo, factores de fricción así como el coeficiente de transferencia de calor.

El método de punto de pliegue y la programación matemática han sido desarrolladas por cincuenta años para la síntesis sistémica de las HEN. La solución del problema de síntesis de las HEN consiste en encontrar una red eficiente (teniendo un rango relativamente estrecho para las temperaturas objetivo de las distintas corrientes) que garantice el consumo mínimo de energía, el número mínimo de unidades de transferencia de calor, el área menor de transferencia de calor, el costo anual total más bajo y la máxima flexibilidad. Los métodos desarrollados se distinguen por sus estructuras físicas básicas como lo es el modelo de transbordo (transshipment) (Papoulias y Grossmann, 1983a; Floudas et al., 1986) o el modelo de superestructuras por etapas (Yee y Grossmann, 1990; Yee et al., 1990a, 1990b; Ciric y Floudas, 1991). Estos métodos son considerados como los básicos para la síntesis de las HEN debido al gran éxito en la implementación en plantas industriales (Klemeš y Kravanja, 2013).

2.1.3. Modelo de superestructuras.

El modelo de superestructuras por etapas, consiste en un conjunto de corrientes calientes, que se desean enfriar, y un conjunto de corrientes frías que se desean calentar, permitiendo posibilidades y secuencias de intercambios dentro de

ciertas etapas. El modelo se asemeja al concepto de diseño de espagueti hecho por Linnhoff y Flower (1978), en el cual las curvas compuestas se dividen en secciones o en una serie de etapas. Para cada sección de las curvas compuestas se busca hacer coincidir corrientes frías con corrientes calientes, a fin de obtener transferencia de calor vertical; su desventaja es que el resultado arroja un gran número de intercambiadores.

La ventaja en el modelo de superestructuras, es que, al establecer las etapas, las temperaturas correspondientes a cada etapa serán tratadas como variables a optimizar y no como intervalos de energía; lo anterior permite oportunidades para el intercambio de calor entrecruzado, cuando las corrientes tienen diferentes coeficientes de transferencia de calor. Para establecer el número de etapas requeridas para modelar la integración de calor se debe considerar el número de corrientes calientes N_H y el número de corrientes frías N_C ; el número mayor entre estos dos datos establece el número de etapas. Esto se debe a que un diseño óptimo por lo general no requiere muchos intercambiadores, lo que significa que una corriente particular no intercambia calor con muchas corrientes.

La superestructura propuesta en su modelo propuesta se deriva de la siguiente manera:

- 1.- Fijar el número de etapas, típicamente en $\max\{N_H, N_C\}$.

- 2.- Para cada etapa, la corriente correspondiente se divide y se dirige a un intercambiador para cada potencial emparejamiento entre corriente caliente y cada corriente fría. Las salidas de los intercambiadores se mezclan a continuación, definiendo la corriente para la siguiente etapa.

- 3.- Las temperaturas de salida de cada etapa son tratadas como variables.

En la Figura 4 se muestra un ejemplo de una superestructura, que implica dos corrientes calientes y dos corrientes frías. El número de etapas en la superestructura será de dos, lo que genera que se puedan tener ocho intercambiadores de proceso, con cuatro intercambiadores por etapa y temperaturas variables entre ellas. En la

misma Figura, se observa la integración de configuraciones alternativas en paralelo y en serie, así como una posible recombinación de corrientes. Por simplicidad, se supone que los servicios de calentamiento y enfriamiento se colocan en los extremos de la superestructura. Al agregar corrientes isotérmicas en la superestructura, la formulación del modelo se puede simplificar significativamente, al suponer que la temperatura de salida de una corriente isotérmica será la misma en cada intercambiador de una etapa. Al establecer estas igualdades, el balance de calor no lineal alrededor de cada intercambiador y las ecuaciones del calor mezclado pueden ser eliminados.

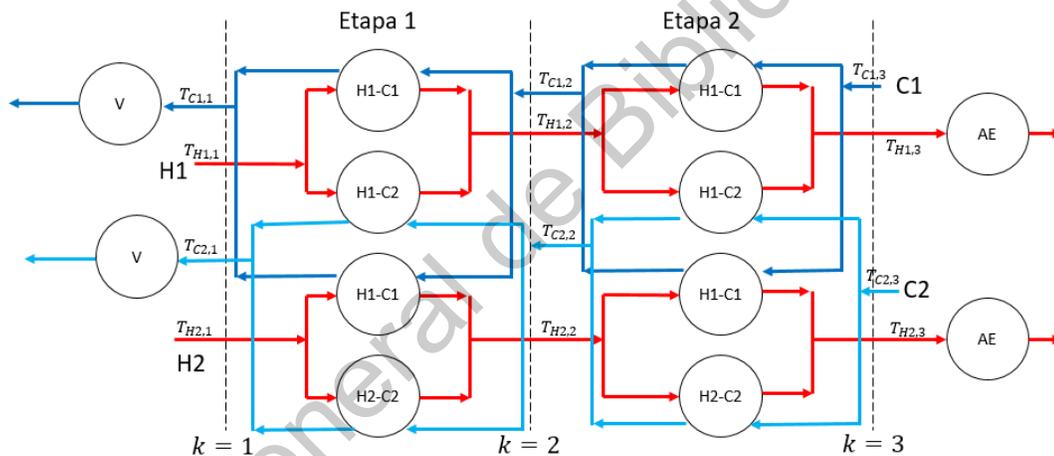


Figura 4 Superestructura de síntesis de redes de intercambiador de calor de 2 etapas.

En cada corriente se debe realizar únicamente un balance de calor en general dentro de cada etapa, simplificando, al fijar el flujo calorífico de entrada de las corrientes, y descartando las variables de flujo para este modelo; lo anterior con la finalidad de reducir la dimensionalidad del problema, y que el espacio factible del mismo pueda ser definido por un conjunto de restricciones lineales. Entre las restricciones no lineales del modelo que se aíslan de la función objetivo se encuentran aquellas que implican el cálculo de áreas usando las temperaturas de

la etapa. Por lo tanto, el modelo matemático es muy robusto y puede ser resuelto con relativa facilidad. En la sección 4.3 se describe con más detalle cada una de las ecuaciones derivadas del modelo matemático de síntesis de HEN con base en el concepto de superestructura (para más información de modelo de superestructuras revisar Roetzel (2004)).

Una vez resuelto el problema de optimización de redes de intercambiadores de calor con la finalidad de ahorrar energéticos, se debe establecer en qué lugar físico deberán ser instalados los diferentes equipos de proceso; a su vez, teniendo en cuenta la reducción del riesgo de accidentes de tipo dominó. Para eso se revisarán los antecedentes asociados a distribución de equipos y los diferentes modelos propuestos.

2.2. Diseño de distribución de planta.

Los problemas de distribución de planta surgen tanto de la construcción de una nueva planta, como de realizar adecuaciones a las ya existentes; en este rubro se mencionan el cambio de la demanda, el diseño de nuevos productos, cambios en la localización de los mercados, nuevas tecnologías que cambian la forma de producción, legislaciones ambientales y de seguridad, nuevas técnicas de mantenimiento para los equipos, y su reemplazo cuando han dejado de ser útiles. Moore (1962) establece que existen cuatro tipos básicos de problemas de distribución de planta:

- Proyecto de una planta completamente nueva.
- Expansión y/o traslado de una planta ya existente.
- Reordenación de una planta ya existente.
- Ajustes menores en distribuciones ya existentes.

En los siguientes párrafos se revisan los avances que se han realizado en referencia al tema de distribución de planta.

2.2.1. Historia del problema de distribución de planta.

Koopmans y Beckmann (1957), ingenieros industriales, son los primeros en realizar un planteamiento para dar solución al problema de distribución de planta de forma simple, con el llamado problema de asignación cuadrática (QAP, por sus siglas en inglés). Se asigna el nombre debido a que la función objetivo es de segundo grado respecto a las variables y las restricciones son funciones lineales. El planteamiento consiste en asignar n instalaciones a una cantidad k de sitios disponibles considerando un costo asociado a cada una de las asignaciones, el costo dependerá de las distancias y flujo de material entre las instalaciones; de manera adicional, un costo por instalar cierta unidad en cierta posición es considerado. Así, se busca que las interconexiones con mayor costo operativo estén lo más cerca posible y se minimice los costos operativos de traslado. Sin embargo, los problemas planteados de forma QAP son problemas NP-completo, que al incrementar las n instalaciones se vuelven problemas difíciles de resolver en un plazo razonable de tiempo.

Posteriormente, Seppänen y Moore (1970) utilizaron la teoría de grafos como planteamiento para dar solución al problema de distribución de planta; en una revisión realizada por Hassan y Hogg (1987) describen los fundamentos del procedimiento. En la teoría de grafos, cada elemento (instalación o equipo) se define como un nodo dentro de una red gráfica, sin tomar en cuenta el área y la forma de los elementos en un principio. La finalidad es encontrar un grafo que represente las relaciones entre las diferentes actividades, no tanto las geometrías de las mismas (Caccetta y Kusumah, 2001). Sin embargo, al igual que las propuestas QAP, los problemas de desigualdad de área, incluso para problemas de pequeño tamaño, no se pueden resolver de forma óptima. Otra desventaja que presenta esta propuesta es que no logra asegurar que los elementos con relaciones más intensas permanezcan adyacentes, y que las formas obtenidas suelen ser irregulares y de baja calidad geométrica.

Otro enfoque utilizado para resolver el problema de distribución de planta es por medio de la programación matemática. Montreuil (1991) formuló el problema con programación mixta entera lineal, encontrando que, en ese entonces, la optimización del modelo puede ser garantizada cuando se tienen menos de cinco elementos. Por su parte, Meller et al. (1998) establecieron otra formulación con mayores restricciones, mejorando la exactitud del modelo y reduciendo el tiempo de cómputo; sin embargo, los problemas de más de 10 elementos no se pueden resolver de forma óptima por ramificación y acotamiento, por lo que el planteamiento sólo fue capaz de resolver los casos de diseño con un máximo de siete elementos. En ese mismo año, Papageorgiou y Rotstein (1998) presentan un modelo de dominio continuo MILP, considerando restricciones de espacio y organizando las secciones de producción, el cual se desarrolló para determinar los diseños de proceso óptimos de la planta. Este modelo destaca que únicamente se necesitan de dos variables binarias para cada par de elementos, mientras que modelos anteriores requieren de tres variables binarias. Xu y Papageorgiou (2009) propusieron un enfoque de solución a través de un procedimiento de mejora iterativa de una solución entera factible. Los elementos son representados como formas rectangulares con dimensiones fijas que se colocan en un solo nivel. Las distancias son rectilíneas entre los centros de las unidades. El diseño óptimo se obtiene considerando el no traslape de los elementos y con el costo mínimo de interconexión.

El tema de diseño de distribución de planta es muy extenso y contiene muchas ramificaciones dependiendo de la finalidad que se busque; se han publicado varios resúmenes con diferentes enfoques, métodos de solución y formulaciones que buscan encontrar la solución óptima al problema de distribución de planta (Singh y Sharma, 2006; Drira et al., 2007; Anjos y Vieira, 2017; Hosseini-Nasab et al., 2018; Maganha et al., 2019; Pérez-Gosende et al., 2021).

Como este trabajo busca reducir el riesgo de efecto dominó, a continuación, se presenta el estado del arte de aquellos trabajos que abordan en conjunto la distribución de equipos con la reducción de riesgos.

2.3. Evaluación del riesgo de efecto dominó.

La mayoría de las empresas químicas manejan grandes cantidades de materiales peligrosos, que en caso de alguna fuga puede afectar la salud de las personas, la estructura y el ambiente. En una primera instancia se revisarán los antecedentes de accidentes industriales, para posteriormente los enfoques que se han realizado en referencia al tema de distribución de planta considerando reducción de riesgo de accidentes.

2.3.1. Historia de accidentes industriales.

Un ejemplo de accidente con efecto dominó en plantas químicas es el que sucedió en noviembre de 1984 en las instalaciones de Petróleos Mexicanos (PEMEX); dichas instalaciones estaban dedicadas al almacenamiento y distribución de gas LP en el poblado de San Juan Ixhuatepec. Las consecuencias incluyeron un área de 100,000 m² severamente devastada, incluyendo 270 casas. Además, 550 personas murieron, de las cuales 300 fueron en el lugar del desastre y el resto en los hospitales, 50 personas se reportaron como desaparecidas. En la planta, 5 trabajadores murieron y 2 sufrieron quemaduras graves; 7,000 personas necesitaron alguna atención médica, de los cuales 2,000 tuvieron que ser trasladados a hospitales. Asimismo, se evacuaron 60,000 de los cuales 23,000 requirieron atención por lesiones menores (Arturson, 1987).

Otro evento relevante que tiene que ver con dispersión de gases fue el ocurrido en diciembre 1984 en la ciudad de Bhopal, India. Se estima que 5,000 personas murieron a los dos días del accidente, incrementándose a un total de 20,000 en los siguientes días. De 800,000 habitantes que tenía en 1984 la ciudad, se estima que una cuarta parte (200,000) estuvieron en contacto directo con el gas, y que aproximadamente 60,000 requirieron de tratamiento de largo plazo (Varma y Varma, 2005).

Otro evento similar ocurrió en 1989 en la industria Philips 66 en Estados Unidos. Una nube grande de vapor explotó provocando una serie de explosiones subsecuentes que originaron la muerte de 23 empleados (Mannan, 2012). En este evento, los edificios no se habían construido a una distancia segura, ni tenían protecciones para contener la explosión. Se infiere que no se analizaron técnicas cuantitativas de riesgo durante la fase de diseño de planta. Otro accidente ocurrió en marzo del 2004 en Argelia, donde una falla en una caldera de vapor provocó una serie de explosiones e incendios llevándose la vida de 27 trabajadores y lastimando alrededor de 80 trabajadores (Dweck et al., 2004). La mayoría de las fatalidades se originaron por la distancia insegura entre los edificios ocupados y los equipos peligrosos (Wellman et al., 2004). Posteriormente, en marzo del 2005 en la refinería de Texas Estados Unidos ocurrió una explosión; en este incidente un sobre flujo en una purga creó una nube de vapor que derivó en una explosión, todos los tracto-camiones que se encontraban cerca fueron destruidos llevándose con ello la vida de 15 trabajadores (Khan y Amyotte, 2007). Las fatalidades se atribuyeron a una mala distribución entre la zona de explosión y la zona de tracto camiones. Un accidente peculiar, suscitado en junio del 2008, en la empresa de neumáticos y caucho de Goodyear, en el cual falleció un trabajador y hubo seis lesionados, se debió a un bloqueo de una válvula de un intercambiador de calor durante la operación. La sobrepresión resultante provocó la ruptura del recipiente, arrojando escombros y amoníaco a través de las unidades de proceso (Carranza; 2015).

Al mencionar estos incidentes se evidencia la importancia de incluir aspectos de seguridad en el diseño de planta. Por tanto, determinar la ubicación y distribución de los equipos requiere un análisis sistemático, que abarca criterios tanto económicos como de seguridad (Lees, 2012). A continuación, se detallan los avances realizados con la finalidad de reducir el riesgo de accidentes.

2.3.2. Reducción de riesgo de accidentes.

A través de los años, varios investigadores y organizaciones han incorporado criterios de seguridad de procesos en el problema de diseño de planta, con la

finalidad de reducir el impacto de accidentes industriales como fuego, explosiones y liberaciones tóxicas (Jung, 2016). Como resultado, al incluir el problema de riesgo en el diseño de distribución de planta, se han desarrollado varias técnicas de resolución, como:

- Métodos heurísticos: Son métodos basados en la experiencia, en los que generalmente la solución obtenida no se puede considerar como la óptima (Fuchino et al., 1997; Azadeh et al., 2013; Yuan et al., 2013; Caputo et al., 2015; Alves et al., 2016; Wu et al., 2016; Nabavi et al., 2016; Latifi et al., 2017; Wu y Wang, 2017).
- Métodos exactos con enfoque discreto: Aquellos problemas que dividen en áreas y dimensiones iguales el espacio de la planta, llamados bloques, para que los equipos sean asignados en ellos (Jung et al., 2010; Martínez-Gómez et al., 2014; Martínez-Gómez et al., 2015; Vázquez-Román et al., 2015; Inchaurregui-Méndez et al., 2016; Syeda et al., 2017).
- Métodos exactos con enfoque continuo: Son aquellos problemas en el que los equipos pueden ser ubicados en cualquier lugar del espacio continuo (Penteado y Ciric, 1996; Patsiatzis et al., 2004; Vázquez-Román et al., 2010; Díaz-Ovalle et al., 2010; Han et al., 2013; López-Molina et al., 2013; de Lira-Flores et al., 2014; Vázquez-Román et al., 2019).

En todos los casos, estos métodos son valiosos si la solución es una reducción notable del riesgo.

En los últimos diez años, la metodología del análisis cuantitativo de riesgo (Quantitative Risk Assessment o QRA, por sus siglas en inglés) se ha incluido en el problema de distribución de equipos considerando las pérdidas potenciales debido a probables escenarios identificados como peligrosos (Díaz-Ovalle et al., 2010; Jung et al., 2010; Medina-Herrera et al., 2014). Además de la metodología QRA, algunos enfoques han apuntado a minimizar el riesgo atribuido a eventos de

escalamiento (efecto dominó), durante la solución del problema de distribución de equipos (López-Molina et al., 2013; Alileche et al., 2015).

Adicionalmente, varias normas técnicas sugieren la implementación de barreras de seguridad para reducir la probabilidad de escalación; para ello recomiendan el uso de capas de protección independiente destinadas a reducir el riesgo de accidentes dominó (CCPS, 2001a). Según CCPS (2001b) propone la siguiente clasificación de capas de protección independientes:

- 1.- Diseño inherentemente más seguro.
- 2.- Sistemas de protección pasivos.
- 3.- Sistemas de protección activos.
- 4.- Salvaguardias de procedimiento y de emergencia.

El diseño inherentemente más seguro se enfoca en eliminar la propagación del efecto dominó, al implementar distancias seguras entre las unidades de proceso peligrosas. Su aplicación se considera extremadamente efectiva (Cozzani et al., 2007), con la desventaja que únicamente se puede emplear en los diseños tempranos de la planta (Hendershot, 1997). Cuando el peligro de efecto dominó no se puede eliminar por completo, las prácticas de seguridad se basan en barreras diseñadas, por ejemplo, sistemas activos y pasivos (Tugnoli et al., 2013). Los sistemas pasivos son más robustos que los sistemas activos, ya que no requieren de una activación externa para realizar la acción preventiva. Un ejemplo de sistema pasivo es la aplicación de un revestimiento resistente al calor en equipos de proceso, con la finalidad de evitar una falla catastrófica debido a una exposición al fuego (Townsend et al., 1974; Schoen, 1988; Birk et al., 2006; Droste y Landucci et al., 2009; Di Padova et al., 2011; Tugnoli et al., 2012). Pero como se comentó, las protecciones pasivas pueden presentar altos costos y necesitan de un constante mantenimiento, con la finalidad de evitar su deterioro a través del tiempo. A pesar de una menor robustez en los sistemas activos (como apagados de emergencia, despresurizaciones de emergencia, sistemas de diluvio de agua, rociadores que

suministran agentes de extinción de incendios, entre otros), pueden ser eficaces y con frecuencia obligatorios en las normas técnicas (Roberts et al., 2000; Nolan, 2014). Por último, las salvaguardias de procedimiento y de emergencia pueden apoyar la gestión y el control de escenarios de escalada, mediante su integración con medidas de sistemas pasivos y/o activos.

A pesar de que se ha tratado de dar solución a estos tres problemas, no se reporta algún trabajo en el cual se integren y se trate de dar solución de manera conjunta.

Dirección General de Bibliotecas UAG

CAPÍTULO 3

3. Objetivos

En este capítulo se establecen los objetivos tanto general como específicos del proyecto.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

3.1. Objetivo general.

Desarrollar un modelo basado en programación matemática que reduzca el riesgo de accidentes y los costos de operación en instalaciones de procesos químicos, mediante la distribución de equipos y la síntesis de redes de intercambiadores de calor.

3.2. Objetivos específicos.

- Desarrollar un modelo basado en optimización matemática para resolver el problema de distribución de equipos de proceso con el objetivo de reducir el costo de operación y efecto dominó por una explosión o incendio, sin incluir barreras de protección, basado en el análisis cuantitativo del riesgo (QRA “Quantitative Risk Assessment”).
- Desarrollar un modelo basado en optimización matemática para resolver el problema anterior, incorporando el análisis de capas de protección independientes (LOPA “Layer of Protection Analysis”) para la reducción del riesgo.
- Desarrollar un modelo basado en optimización matemática para resolver el problema de redes de intercambio de calor.
- Obtener un modelo que integre los modelos anteriores.
- Evaluar los modelos mediante su aplicación a un proceso de interés, con condiciones de operación, como equipos que deban ser ubicados en un lugar físico, que manejen sustancias peligrosas y un conjunto de corrientes que se deban calentar y enfriar.

CAPÍTULO 4

4. Metodología

Este capítulo hace referencia a los diferentes modelos basados en programación matemática para resolver el problema de distribución de equipos, reducir el riesgo de accidente de tipo dominó, síntesis de redes de intercambiadores de calor, así como la integración de los tres modelos. La finalidad es aplicar estos modelos en un problema de interés que presente equipos de proceso que deban ser ubicados en un espacio físico, que se manejen sustancias peligrosas que puedan provocar una explosión o incendio, y que exista un problema de redes de intercambio de calor.

4.1. Modelo para resolver el problema de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio.

La formulación del modelo para la resolución del problema de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio, se basó en un enfoque de programación mixta entera no lineal (mixed interger nonlinear programming, MINLP por sus siglas en inglés). La función objetivo consistió en minimizar los costos de instalación de un conjunto de equipos I , costos de área, así como de riesgo de accidentes, sujetas a restricciones de orientación de equipos, de no superposición, de distribución y de probabilidad de daño debido a una sobrepresión. El modelo matemático, incluyendo las restricciones y la función objetivo, se muestra a continuación.

4.1.1. Restricción de orientación de equipos.

La longitud l_i y profundidad d_i del i -ésimo equipo, se determinó por las restricciones de orientación, Ecs. (1) y (2), propuesta por 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 decide que orientación tendrá el equipo; α_i y β_i son las dimensiones del i -ésimo equipo. En la Figura 5 se observa un equipo i con una longitud α_i y una profundidad β_i , que puede quedar asignado de manera horizontal o vertical.

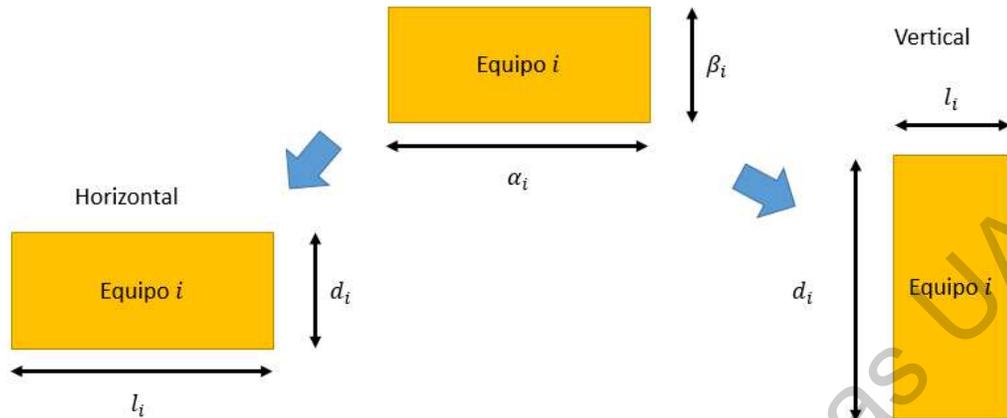


Figura 5 Restricción de orientación de equipos.

4.1.2. Restricción de no superposición.

Las restricciones establecidas en las Ecs. (3), (4), (5) y (6) son las restricciones de no superposición, propuestas también por Patsiatzis et al. (2004). La finalidad es prevenir que dos equipos, como el equipo i y el equipo j , sean colocados en la misma posición física, asignando al i -ésimo equipo en la coordenada (x_i, y_i) :

$$x_i - x_j + M \cdot (E1_{ij} + E2_{ij}) \geq \frac{l_i + l_j}{2} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (3)$$

$$x_j - x_i + M \cdot (1 - E1_{ij} + E2_{ij}) \geq \frac{l_i + l_j}{2} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (4)$$

$$y_i - y_j + M \cdot (2 - E1_{ij} - E2_{ij}) \geq \frac{d_i + d_j}{2} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (5)$$

$$y_j - y_i + M \cdot (2 - E1_{ij} - E2_{ij}) \geq \frac{d_i + d_j}{2} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (6)$$

Donde M es una distancia mayor o igual a la distancia máxima permisible entre los equipos i y el equipo j ; $E1_{ij}$ y $E2_{ij}$ son variables binarias de no superposición. En la Figura 6 se observa la finalidad de la restricción de no superposición, si se tiene un equipo i y un equipo j , se busca evitar que dichos equipos se traslapen.

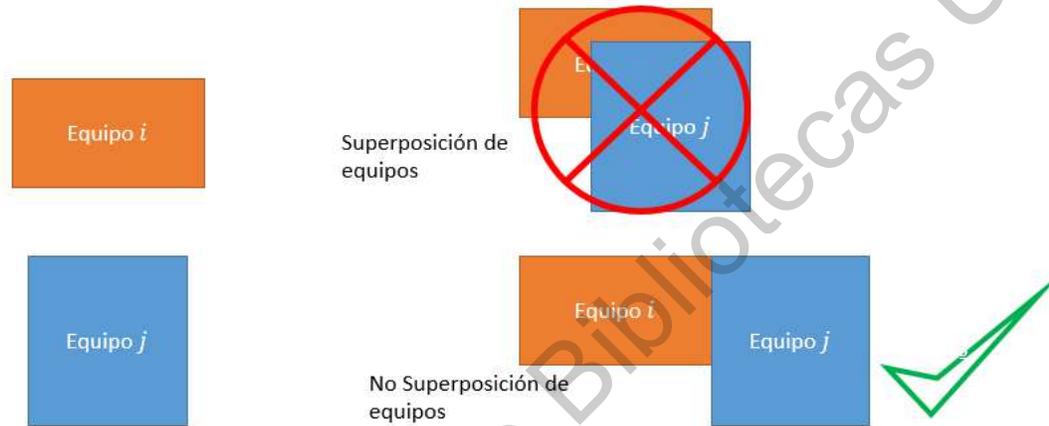


Figura 6 Restricción de no superposición.

4.1.3. Restricción de distancia.

Las Ecs. (7), (8), (9), (10), (11) y (12) permiten determinar la distancia rectilínea o Manhattan, la cual es útil para el cálculo de la longitud de la tubería requerida; las ecuaciones son propuestas por Patsiatzis et al. (2004):

$$R_{ij} - L_{ij} = x_i - x_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (7)$$

$$A_{ij} - B_{ij} = y_i - y_j \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (8)$$

$$R_{ij} \leq M \cdot W_{ij}^x \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (9)$$

$$L_{ij} \leq M(1 - W_{ij}^x) \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (10)$$

$$A_{ij} \leq M \cdot W_{ij}^y \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (11)$$

$$B_{ij} \leq M \cdot (1 - W_{ij}^y) \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (12)$$

Donde W_{ij}^x y W_{ij}^y son variables binarias que ayudan a determinar los valores de la distancia $|x_i - x_j|$ y $|y_i - y_j|$, al forzar a uno de entre R_{ij} y L_{ij} , y a uno de entre A_{ij} y B_{ij} a valer cero. Posteriormente la distancia Manhattan D_{ij} , entre los equipos i y j , está dada por la Ecs. (13) y (14):

$$D_{ij} = R_{ij} + L_{ij} + A_{ij} + B_{ij} \quad \forall i, j \in I \mid i < j \quad (13)$$

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

La Ec. (14) garantiza que la distancia Manhattan total entre los equipos i y los equipos j sea la misma que la distancia entre los equipos j a los equipos i . En la Figura 7 se muestran los posibles casos.

4.1.4. Estimación de la probabilidad de daño debido a una sobrepresión.

Se debe tener precaución al momento de realizar la distribución de equipos, especialmente en aquellos que manejan sustancias peligrosas, evitando que estos equipos se coloquen a corta distancia entre ellos; ya que los efectos de sobrepresión o radiación producidos por una explosión o incendio, respectivamente, iniciado en alguna de las unidades del proceso puede incidir sobre los equipos cercanos. Por esta razón, se deben identificar a los equipos i que presenten este peligro, los cuales se agrupan en el subconjunto de equipos P .

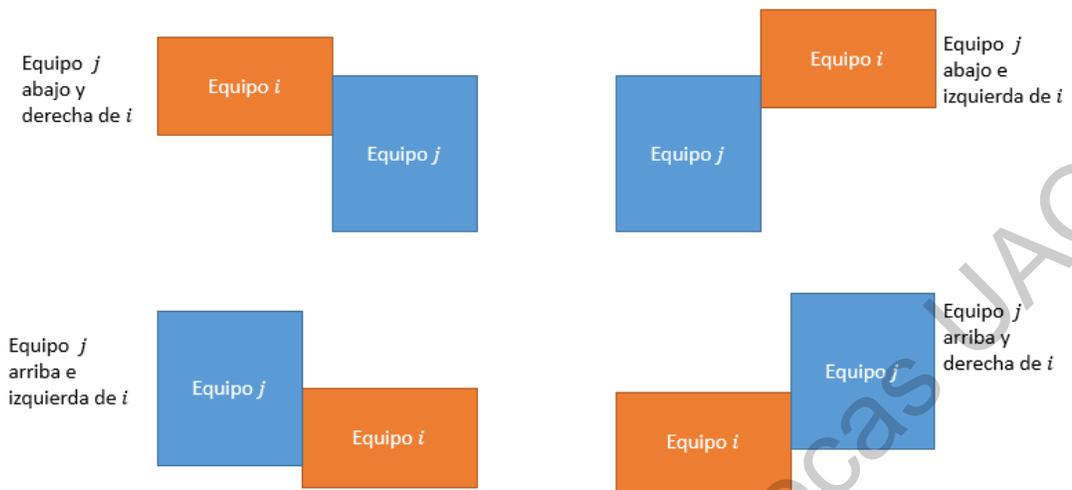


Figura 7 Restricción de distancia.

Los distintos escenarios peligrosos requieren cuantificar la probabilidad de generar un accidente con efecto dominó; para ello, se hace uso de modelos probit. La siguiente ecuación es una representación de estas funciones (Cozzani y Salzano, 2004).

$$Y_{ij} = a_h + b_h(\Delta P_{ij}) \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (15)$$

donde Y_{ij} es la variable probit para estimar el daño en la unidad de proceso j teniendo un tipo de recipiente h debido a la sobrepresión producida por la explosión de la unidad i ; ΔP_{ij} es el pico de sobrepresión estática (medida en pascales, Pa); a_h y b_h son constantes del modelo. Para este trabajo se considera que los equipos son grandes, y por lo tanto los valores de las constantes que se utilizan son $a_h = -12.22$ y $b_h = 1.65$ (Mingguang y Juncheng, 2008).

Con la finalidad de evitar un evento de escalamiento, el porcentaje de daño debe de ser pequeño. La probabilidad de daño utilizada en este trabajo está dada por la Ec. (16), propuesta por Mingguang y Juncheng (2008).

$$P_{Dij} = \frac{1.005}{1 + e^{-\left(\frac{Y_{ij}-5.004}{0.612}\right)}} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (16)$$

Para este trabajo, el cálculo de la sobrepresión se realizó por el método de multi-energía; para más información acerca del método revisar (Ahlert, 2000; Woodward, 2010). Por lo que se asume que la explosión es simétrica, considerando que la atmósfera es homogénea; sin ninguna obstrucción, como el viento, la estratificación de la atmósfera o de algunas obstrucciones en tierra. Es decir, se asume que la propagación es simétrica de las ondas de choque producidas en una explosión. A pesar de estas consideraciones, el método permite predecir los efectos de una explosión desde un punto de vista conservador, lo cual es benéfico desde el punto de vista de la seguridad.

El método de múltiple-energía ha sido adaptado por López-Molina et al. (2013) para estimar el pico de sobrepresión, (ΔP), como función de la distancia característica, R_o . La sobrepresión depende también del nivel de intensidad seleccionado, que se puede medir en una escala de diez, donde el diez representa la mayor intensidad, mientras que las primeras son las menos intensas. La adaptación matemática se muestran en las Ecs. (17) y (18).

$$0.2 \leq R_{oij} \leq 2 \quad (17)$$

$$\Delta P_{1ij} = 134.1196e^{-0.8967 \cdot R_o} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j$$

$$2 \leq R_{oij} \leq 100 \quad (18)$$

$$\Delta P_{2ij} = 32.946R_o^{-1.121} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j$$

donde

$$R_{oij} = \left(\frac{E}{P_a}\right)^{-\frac{1}{3}} D_{eij} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (19)$$

La Ec. (19) representa la distancia característica de separación entre equipos, D_{eij} ; la energía de explosión depende del tipo de material, E , y de la presión atmosférica, P_a .

Las disyunciones presentadas en las Ecs.(17) y (18) se unen y se propone utilizar la Ec. (20).

$$\Delta P_{ij} = \Delta P_{1ij} \cdot (1 - \gamma_{ij}) + \Delta P_{2ij} \cdot \gamma_{ij} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (20)$$

donde γ_{ij} es la función relajada alrededor de la distancia característica de $R_{oij} = 2$ y queda representada en la Ec. (21).

$$\gamma_{ij} = \frac{R_{oij} - 2}{2 \cdot \sqrt{1 + (R_{oij} - 2)^2}} + \frac{1}{2} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (21)$$

La distancia D_{eij} , presente en la Ec. (19), representa la distancia euclidiana y viene dada por la Ec. (22).

$$D_{eij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \quad \forall i, j \in I \mid i \neq j \quad (22)$$

Por último, la probabilidad de daño debe ser definida por los ingenieros de seguridad de la planta, y sus valores deben incorporarse como restricciones adicionales. Para este trabajo se usó un valor propuesto por López-Molina et al. (2013) de 30%; por lo tanto, la restricción queda en la Ec. (23).

$$P_{Dij} \leq 30 \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (23)$$

4.1.5. Función objetivo para el modelo.

La función objetivo consistió en minimizar el costo total, la cual considera tubería, costo de terreno y el costo asociado a la explosión, que a su vez se asocia con el efecto dominó. El costo de daño asociado a la explosión de la *i*-ésima unidad, C_i^E , afectando la *j*-ésima unidad cercana se estima con la Ec. (24).

$$C_i^E = C_i^P + \sum_{j \neq i} C_j^P \cdot P_{Dij} \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (24)$$

donde C_j^P es el costo de la compra del *j*-ésimo equipo.

El área del terreno se estimó al construir el menor rectángulo, que incluya a todos los equipos de proceso. Considerando que el inicio del terreno comienza en el origen de las coordenadas (0,0), entonces el valor para el área ocupada consiste en detectar al equipo más lejano en la dirección de las coordenadas *x* (Ec. (26)); así como el equipo más lejano en la dirección de las coordenadas *y* (Ec. (27)). Para calcular el área se utilizará la Ec. (25).

$$A = L_x L_y \quad (25)$$

donde

$$L_x \geq x_i + \frac{l_i}{2} \quad \forall i \in I \quad (26)$$

$$L_y \geq y_i + \frac{d_i}{2} \quad \forall i \in I \quad (27)$$

Por lo tanto, el costo total debido al terreno ocupado se obtuvo de multiplicar el área por un costo específico de tierra por metro cuadrado, C_{area} . Puesto que se buscó minimizar el costo de terreno ocupado, se debieron tener valores apropiados para L_x y L_y , los cuales dependen de la disponibilidad del terreno. El costo de tubería total se consideró de la distancia obtenida del i -ésimo equipo conectado con el j -ésimo equipo y será multiplicado por un valor de costo de tubería, $c_{p_{ij}}$. Este costo fue de cero si un equipo no se encuentra conectado con otro. Por lo tanto, la función objetivo para la distribución de equipos con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendios se define en la Ec. (28):

$$FO_{L,E} = \min \left(\sum_i \sum_{j \neq i} C_{p_{ij}} \cdot D_{ij} + \sum_i C_i^E + A \cdot C_{area} \right) \quad (28)$$

La función objetivo junto con sus restricciones corresponde a un tipo de problema de optimización mixto entero no lineal (MINLP).

4.2. Modelo para resolver el problema de la disposición de equipos incorporando el análisis de capas de protección independientes para la reducción del riesgo.

A partir del modelo obtenido en 4.1 se desarrolló un modelo más completo, agregando capas de protección independientes (LOPA “layer of protection analysis”). En dichas capas se incluyen controles básicos, alarmas de proceso, alarmas críticas, acciones automáticas, protecciones físicas (como válvulas de alivio o barreras de contención contra explosiones o incendios) al modelo previamente obtenido; lo anterior con la finalidad de reducir el riesgo asociado a accidentes donde se involucre el efecto dominó.

4.2.1. Definición de capas de protección independientes.

LOPA es una metodología de evaluación de riesgos simplificada que utiliza reglas simplificadas y conservativas para definir el riesgo como una función tanto de la frecuencia como de la gravedad de la consecuencia potencial (Willey, 2014), LOPA se define como una evaluación de riesgo simplificada de un par de una causa y una consecuencia (CCPS, 2015). Mannan (2012) propone 8 capas que se enlistan a continuación:

- Capa 1: Diseño del proceso (p. ej. diseños inherentemente más seguros).
- Capa 2: Controles básicos, alarmas de proceso y supervisión de operadores.
- Capa 3: Alarmas críticas, supervisión de operadores e intervención manual.
- Capa 4: Acción automática (p. ej. sistemas instrumentados de seguridad)
- Capa 5: Protecciones físicas (p. ej. válvulas de alivio).
- Capa 6: Protecciones físicas (p. ej. diques).
- Capa 7: Respuesta de emergencia de la planta
- Capa 8: Respuesta de emergencia de la comunidad

Para representar las capas de protección independientes matemáticamente, y establecer el riesgo de un escenario, se deben tomar en cuenta dos aspectos, la frecuencia de un evento iniciador y la probabilidad de fallo en demanda de cada capa de protección independiente.

a) Frecuencia de un evento iniciador (IEF): Se define como una falla que detona una secuencia de eventos que, si no se interrumpe de manera exitosa por una capa de protección, da como resultado una condición peligrosa. Algunos ejemplos de eventos iniciadores son fallas mecánicas, errores operacionales, y fallas en los circuitos de control.

La frecuencia de un evento iniciador se relaciona con la frecuencia con la que se espera que ocurra una falla o error, que pueda provocar una consecuencia de peligro si sucede. Por ejemplo, reacciones exotérmicas descontroladas debido a la pérdida de enfriamiento en un reactor por lotes. Para estimar esta frecuencia, se debe de consultar a operadores experimentados y revisar indicadores históricos de la empresa. En este caso, se ha encontrado que la frecuencia de fallo del sistema de enfriamiento es de 1/10 años. Entonces, el IEF de este evento es de 0.1/año.

b) Probabilidad de fallo bajo demanda (*PF_D*): se refiere a un sistema de seguridad que se debe de activar después de un evento iniciador y no se acciona. Para el caso del reactor por lotes, se cuenta con un sistema de agua de enfriamiento de emergencia conectado al reactor en caso de una fuga. Si la fuga sucede, el sistema de emergencia debe actuar, a esto se le considera demanda.

De igual manera, ya sea por pruebas de laboratorio o datos históricos de la planta se establece esta probabilidad. Por ejemplo, para el reactor por lotes, se establece que el sistema de emergencia actuará de manera exitosa, bajo demanda, 9 de cada 10 veces, esto implica que fallará una vez de 10. Por lo que se establece un $PF_D = 0.1$.

Por último, la frecuencia de una consecuencia peligrosa de un escenario iniciador es el valor que se determina en el análisis; este resulta del producto de la

frecuencia de un evento iniciador por la probabilidad de fallo bajo demanda de que cada capa de protección independiente no pueda realizar su función prevista (CCPS, 2015), la cual se muestra en la Ec. (32).

$$f_i^C = IEF_S \times PFD_{s1} \times PFD_{s2} \times \dots \times PFD_{ski} \quad (29)$$

Frecuencias de escenarios calculadas por LOPA se pueden representar de diferentes maneras, como la frecuencia de eventos de pérdida de contención por año o las muertes por año.

4.2.2. Restricción de capas de protección independientes.

LOPA se puede representar matemáticamente usando las ecuaciones presentes en esta sección (Patsiatzis et al., 2004). Las Ecs. (30) y (31) establecen la frecuencia de la consecuencia.

$$f_i^C = \sum_{ki} (PFD_{ki,i} \cdot B_{ki,i}) \quad \forall i \in P \quad (30)$$

$$C_i^D = \sum_{ki} (C_{ki}^{Dev} \cdot B_{ki,i}) \quad \forall i \in P \quad (31)$$

$$\sum_{ki} B_{ki,i} = 1 \quad \forall i \in P \quad (32)$$

donde f_i^C es la frecuencia de la consecuencia, $PFD_{ki,i}$ es la probabilidad de falla en demanda del sistema de protección ki en el equipo i , C_i^D es el costo de instalación del dispositivo de seguridad en el equipo i , C_{ki}^{Dev} es el costo del sistema de seguridad en el equipo i y $B_{ki,i}$ es una variable binaria que determina si se instala el conjunto

de dispositivos de protección o no. La Ec. (33) se requiere para que el modelo seleccione sólo un conjunto de capas de protección.

Por último, para incorporar en el modelo matemático f_i^C , en la Ec. (24) de la sección 4.1, se le debe multiplicar con la finalidad de reducirlo, quedando expresado en la Ec. (33) su resultado.

$$C_i^E = \left(C_i^P + \sum_{j \neq i} C_j^P \cdot P_{Dij} \right) f_i^C \quad \forall i \in P, \forall j \in I \mid i \neq j \quad (33)$$

Por tanto, el modelo obtenido para resolver el problema de la disposición de equipos con el análisis de capas de protección independientes, reduciendo el de riesgo de efecto dominó por explosiones, incluye las restricciones de orientación de equipos, de no superposición, de distancia, de estimación de la probabilidad de daño debido a una sobrepresión, con la variante de que para calcular el costo de daño asociado a la explosión de la i -ésima unidad se le multiplica la frecuencia de la consecuencia. El modelo presenta la misma función objetivo de la Ec. (28) sólo se le agregan los costos de los dispositivos de protección.

4.3. Modelo basado en programación matemática para resolver el problema de síntesis de red de intercambio de calor.

En este caso, el problema consideró corrientes de proceso que intercambian tanto calor sensible como calor latente; por lo que dos situaciones pueden ocurrir entre cualquier corriente caliente y fría en el proceso. En la Figura 8 se muestran los perfiles de temperatura para la transferencia de calor de ambas situaciones, ya sea para la corriente caliente o fría.

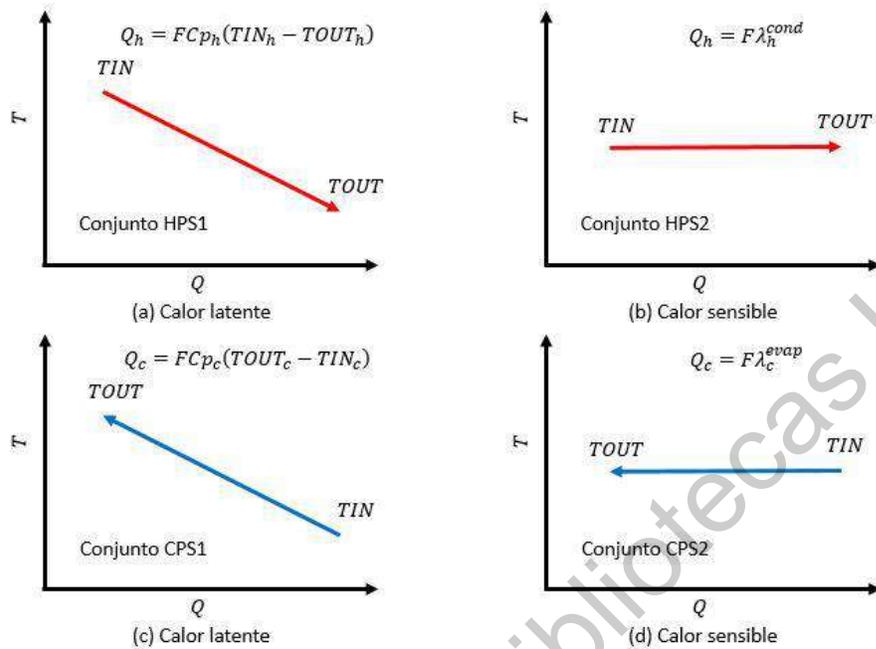


Figura 8 Tipos de corrientes consideradas en el modelo.

El modelo MINLP propuesto, que incluye corrientes isotérmicas y no isotérmicas, se basa en la formulación de la superestructura propuesta por Ponce-Ortega et al. (2008). La Figura 4 muestra una superestructura de dos corrientes calientes y dos corrientes frías. El número de etapas (k) en la superestructura (NOK) comúnmente se especifica como el $\max\{N_H, N_C\}$. Para cada etapa de la superestructura se permite la división de corrientes, para proveer la posibilidad de intercambio de calor entre corrientes frías y calientes.

En el modelo se asumió una mezcla isotérmica, en la que únicamente se consideran las temperaturas de entrada y de salida en cada etapa de la superestructura, sin considerar caudales variables. Estas temperaturas intermedias en la superestructura se tratan como variables de optimización y los intercambiadores de servicios, tanto de calentamiento como de enfriamiento, se colocan en los extremos de la superestructura.

Al tener diferentes tipos de corrientes, isotérmicas y no isotérmicas, se definieron los siguientes conjuntos. El conjunto HPS contiene el número total de corrientes calientes; de éstas, el conjunto $HPS1$ contiene las corrientes calientes que intercambian calor sensible en la red (Figura 8a). Por otra parte, $HPS2$ contiene las corrientes calientes isotérmicas, es decir, aquellas corrientes que únicamente intercambian calor latente y que sus temperaturas se mantienen constantes (Figura 8b). De manera similar, CPS es el conjunto para las corrientes frías, y $CPS1$, $CPS2$ son los subconjuntos de las corrientes frías que son no isotérmicas e isotérmicas, respectivamente.

Por lo tanto, el modelo MINLP para la síntesis de redes de intercambiadores se describe a continuación.

4.3.1. Balance de energía general para cada corriente.

La transferencia total de calor para las corrientes calientes h y las corrientes frías c viene dada en las Ecs. (34), (35), (36) y (37).

$$(TIN_h - TOUT_h)FCH_h = \sum_{k \in ST} \sum_{c \in CPS} q_{hck} + qcu_h \quad \forall h \in HPS1 \quad (34)$$

$$F\lambda_h^{cond} = \sum_{k \in ST} \sum_{c \in CPS} q_{hck} + qcu_h \quad \forall h \in HPS2 \quad (35)$$

$$(TOUT_c - TIN_c)FCC_c = \sum_{k \in ST} \sum_{h \in HPS} q_{hck} + qhu_c \quad \forall c \in CPS1 \quad (36)$$

$$F\lambda_c^{evap} = \sum_{k \in ST} \sum_{h \in HPS} q_{hck} + qhu_c \quad \forall c \in CPS2 \quad (37)$$

donde $F\lambda_h^{cond}$ y $F\lambda_c^{evap}$ son los calores latentes de condensación y vaporización para las corrientes h y c , respectivamente, FC es la tasa de flujo de capacidad de calor de la corriente no isotérmica, q_{hck} es el intercambio de calor entre la corriente caliente h y la corriente fría c en la etapa k , q_{hu} representa el intercambio de calor de la utilidad, TIN es la temperatura de entrada de la corriente a la superestructura, mientras que $TOUT$ es la de salida.

Las Ecs. (34) y (36) son las corrientes no isotérmicas, por lo que únicamente consideran el calor sensible; mientras que las Ecs. (35) y (37) consideran la transferencia total de calor para las corrientes isotérmicas, considerando únicamente el calor latente.

4.3.2. Balance de energía para cada etapa.

El balance de energía en cada etapa de la superestructura se establece para las corrientes no isotérmicas, proveyendo en el balance sus temperaturas intermedias. Para el caso de las corrientes isotérmicas, la temperatura será la misma en todas las etapas de la superestructura; por lo tanto, estas ecuaciones sólo se aplican a las corrientes no isotérmicas que transfieren calor sensible.

$$(t_{h,k} - t_{h,k+1})FCp_h = \sum_{c \in CPS} q_{hck} \quad \forall k \in ST; \forall h \in HPS1 \quad (38)$$

$$(t_{c,k} - t_{c,k+1})FCp_c = \sum_{h \in HPS} q_{hck} \quad \forall k \in ST; \forall c \in CPS1 \quad (39)$$

Las Ecs. (38) y (39) determinan el balance de energía para cada una de las etapas en la superestructura, $t_{h,k}$ representa la temperatura de la corriente caliente h al final de la etapa k , de manera similar es $t_{c,k}$.

4.3.3. Asignación de temperaturas de entrada en la superestructura.

Para efectos del modelo se considera que las corrientes calientes entran en la etapa 1 de la superestructura, mientras que las corrientes frías entran en la etapa $NOK + 1$ de la superestructura.

$$TIN_h = t_{h,1} \quad \forall h \in HPS \quad (40)$$

$$TIN_c = t_{c,NOK+1} \quad \forall c \in CPS \quad (41)$$

La Ec. (40) establece la temperatura inicial de las corrientes calientes en la superestructura en la etapa 1; mientras que la Ec. (41) establece la temperatura inicial de las corrientes frías en la etapa $NOK + 1$ de la superestructura.

4.3.4. Factibilidad de temperaturas.

Al considerar que las corrientes calientes se deben de enfriar, esto indica que la temperatura, en el caso de que sea no isotérmico, deberá de decrecer en su trayecto en la superestructura; mientras que las corrientes frías se deben calentar, indicando que su temperatura, en el caso de que sea no isotérmico, deberá incrementarse en el trayecto de la superestructura. Para las corrientes isotérmicas, tanto calientes como frías, su temperatura se debe mantener igual durante su trayecto en la superestructura.

$$t_{h,k} \geq t_{h,k+1} \quad \forall k \in ST; h \in HPS \quad (42)$$

$$t_{h,k} = TIN_h \quad \forall k \in ST; h \in HPS2 \quad (43)$$

$$t_{c,k} \geq t_{c,k+1} \quad \forall k \in ST; c \in CPS1 \quad (44)$$

$$t_{c,k} = TIN_c \quad \forall k \in ST; c \in CPS2 \quad (45)$$

$$TOUT_h \leq t_{h,NOK+1} \quad \forall h \in HPS1 \quad (46)$$

$$TOUT_c \geq t_{c,1} \quad \forall c \in CPS1 \quad (47)$$

Las Ecs. (42) y (44) son necesarias para garantizar un decremento monótono, para las corrientes no isotérmicas a través de la superestructura. Las Ecs. (43), (45), (46) y (47) establecen las temperaturas iniciales en la superestructura, tanto para corrientes isotérmicas como no isotérmicas.

4.3.5. Servicios de calentamiento y enfriamiento.

Al no garantizar que todo el calor y enfriamiento necesario se pueda obtener de la superestructura, se consideraron servicios de calentamiento, para las corrientes frías, y servicios de enfriamiento, para las corrientes calientes; éstos se utilizaron dependiendo de la temperatura de la primera o última etapa de la superestructura, respectivamente. Estas ecuaciones únicamente son válidas para las corrientes no isotérmicas.

$$(t_{h,NOK+1} - TOUT_h)FCp_h = qcu_h \quad \forall h \in HPS1 \quad (48)$$

$$(TOUT_c - t_{c,1})FCp_c = qhu_c \quad \forall c \in CPS1 \quad (49)$$

La Ec. (48) calcula la cantidad de enfriamiento que requirió cada corriente caliente, mientras que la Ec. (49) determina la cantidad de calor que requirió la corriente caliente.

4.3.6. Balance de calor latente.

Se estableció un balance de calor latente para aquellas corrientes que son isotérmicas.

$$F\lambda_h^{cond} = \sum_{k \in ST} q_{h,k}^{\Lambda} + q_h^{\Lambda cu} \quad \forall h \in HPS2 \quad (50)$$

$$F\lambda_c^{evap} = \sum_{k \in ST} q_{c,k}^{\Lambda} + q_c^{\Lambda hu} \quad \forall c \in CPS2 \quad (51)$$

donde $q_h^{\Lambda cu}$ y $q_c^{\Lambda hu}$ son el calor de condensación y evaporación utilizado con los servicios. $q_{h,k}^{\Lambda}$ y $q_{c,k}^{\Lambda}$ son el calor latente total de condensación y evaporación, que se intercambia en la etapa k para las corrientes calientes y frías, respectivamente. La Ecs. (50) y (51) establecen que el calor latente de las corrientes isotérmicas se puede intercambiar en cualquier etapa de la superestructura.

4.3.7. Restricciones de límite superior.

Las restricciones de límite superior son utilizadas para determinar la existencia de un intercambiador, lo que ocurrirá únicamente si la carga de calor es mayor que cero; si ésta es menor, entonces el intercambiador no existirá. La Ecs. (52), (53) y (54) muestran las restricciones de límite superior.

$$q_{hck} - Q_{h,c}^{max} z_{hck} \leq 0 \quad \forall h \in HPS; \forall c \in CPS; \forall k \in ST \quad (52)$$

$$q_{cu_h} - Q_h^{max} z_{cu_h} \leq 0 \quad \forall h \in HPS \quad (53)$$

$$q_{hu_c} - Q_c^{max} z_{hu_c} \leq 0 \quad \forall c \in CPS \quad (54)$$

donde z , zcu y zhu son variables binarias, que al valer uno indica que existe un intercambiador, y Q^{max} corresponde al límite superior de transferencia de calor. El valor $Q_{h,c}^{max}$ se establece como el menor contenido de calor de las dos corrientes involucradas en el emparejamiento.

4.3.8. Diferencias de temperaturas.

El cálculo del área de transferencia de calor para cada intercambiador requiere la estimación de las diferencias de temperatura siguientes en la superestructura.

$$dt_{hck} \leq t_{hk} - t_{ck} + \Delta T^{max}(1 - z_{hck}) \quad \begin{array}{l} \forall h \in HPS \\ \forall c \in CPS \\ \forall k \in ST \end{array} \quad (55)$$

$$dt_{h,c,k+1} \leq t_{h,k+1} - t_{c,k+1} + \Delta T^{max}(1 - z_{hck}) \quad \begin{array}{l} \forall h \in HPS \\ \forall c \in CPS \\ \forall k \in ST \end{array} \quad (56)$$

$$dtcu_h \leq t_{h,NOK+1} - TOUT_{cu} + \Delta T^{max}(1 - zcu_h) \quad \forall h \in HPS \quad (57)$$

$$dthu_c \leq TOUT_{hu} - t_{c,1} + \Delta T^{max}(1 - zhu_c) \quad \forall c \in CPS \quad (58)$$

donde ΔT^{max} es un límite superior para la diferencia de temperaturas.

Las Ecs. (55), (56), (57) y (58) contienen variables binarias, que ayudan a activar o desactivar las restricciones. Se escriben como desigualdades, con la finalidad de activarse cuando exista un intercambiador, ya que el costo del intercambiador decrece al incrementar el dt . Para estimar de manera adecuada el límite superior del diferencial de temperaturas, ΔT^{max} , se lleva a cabo a través de la siguiente condición:

Si

$$TIIN_h - TJIN_c < \Delta T_{MIN}; \quad (59)$$

Entonces

$$\Delta T_{h,c}^{max} = abs[TIIN_h - TJIN_c] + \Delta T_{MIN}$$

$$\forall h \in HPS; \forall c \in CPS$$

de lo contrario

$$\Delta T_{h,c}^{max} = max\{0, TIIN_h - TJIN_c, TJOUT_c - TIOUT_h\} \quad (60)$$

$$\forall h \in HPS; \forall c \in CPS$$

donde una temperatura mínima de aproximación es incluida, la cual es considerada como $\Delta T_{MIN} = 10^\circ\text{C}$, con la finalidad de evitar áreas infinitas o áreas extremadamente grandes.

4.3.9. Función objetivo para el modelo

La función objetivo se definió minimizando el costo anualizado total, incluyendo los costos de servicios, tanto de calentamiento como de enfriamiento, así como el costo de implementación de los intercambiadores. La función objetivo se muestra en la Ec. (61).

En resumen, el modelo propuesto es un modelo MINLP para la síntesis de redes de intercambiadores de calor, incluyendo corrientes isotérmicas y no isotérmicas, con la finalidad de minimizar la Ec. (61), sujeta a las restricciones dadas en las Ecs. (34)-(60). Se consideran que las variables $(t, q, dt, lmtd, h, q^\Delta)$ son continuas positivas, mientras que z es un conjunto de variables binarias.

$$\begin{aligned}
& FO_{HEN} \\
& = \min \sum_{h \in HPS} CCUqcu_h + \sum_{c \in CPS} CHUqhu_c + \sum_{h \in HPS} \sum_{c \in CPS} \sum_{k \in ST} CI_{h,c}Z_{h,c,k} \\
& + \sum_{h \in HPS} CI_{h,cu}zcu_h + \sum_{c \in CPS} CI_{cu,c}zhu_c \\
& + \sum_{h \in HPS} \sum_{c \in CPS} \sum_{k \in ST} C_{h,c}^{HEN} \left\{ \frac{q_{h,c,k} \left(\frac{1}{cf_{h,k}} + \frac{1}{cf_{c,k}} \right)}{lmtd_{h,c,k} + \delta} \right\}^\gamma \\
& + \sum_{h \in HPS} C_{h,cu}^{HEN} \left\{ \frac{qcu_h \left(\frac{1}{cf_{cu}^h} + \frac{1}{cf_{cu}} \right)}{\left[\frac{(dt_{h,cu})(TOUT_h - TIN_{cu})(dt_{h,cu} + TOUT_h - TIN_{cu})}{2} + \delta \right]^{\frac{1}{3}}} \right\}^\gamma \quad (61) \\
& + \sum_{c \in CPS} C_{hu,c}^{HEN} \left\{ \frac{qhu_c \left(\frac{1}{cf_{hu}^c} + \frac{1}{cf_c^{hu}} \right)}{\left[\frac{(dt_{hu,c})(TIN_{hu} - TOUT_c)(dt_{hu,c} + TIN_{hu} - TOUT_c)}{2} + \delta \right]^{\frac{1}{3}}} \right\}^\gamma
\end{aligned}$$

4.4. Integración de los modelos obtenidos para la resolución conjunta de los problemas.

Una vez realizado el modelo para síntesis de redes de intercambiadores de calor se obtuvo el modelo que combine los modelos anteriormente desarrollados, considerando las nuevas trayectorias establecidas debido a los emparejamientos entre las corrientes frías y calientes. La función objetivo será minimizar el riesgo de accidentes de tipo dominó, los costos de operación de las instalaciones, así como el costo de inversión inicial para la instalación de equipos. Para este caso, se supuso que el área del intercambiador propuesto se encuentra ya considerada en el equipo de proceso. Esta función objetivo estará sujeta a las restricciones correspondientes a estos problemas.

4.4.1. Función objetivo de la integración de los modelos.

La nueva función objetivo queda definida como el mínimo de la suma de la función objetivo establecida en 4.1, 4.2 y 4.3 en la Ec. (62).

$$\text{Min } FO_{int} = (FO_{L,E} + FO_{HEN}) \quad (62)$$

El resultado del problema provoca la creación de nuevas conexiones debido al emparejamiento de corrientes calientes con corrientes frías; para considerar este nuevo costo de tubería se realizaron iteraciones del problema, es decir se corría el modelo, se revisaba si había nuevas conexiones de los equipos y se realizaba el ajuste manual, hasta que la solución no hubiera generado nuevas conexiones.

4.5. Evaluación de los modelos obtenidos en un proceso de interés.

El problema de interés elegido se presenta en el Capítulo 5, donde se manejan sustancias peligrosas (tanto inflamables como explosivas), un número importante de corrientes frías, así como calientes, y en los cuales la seguridad del proceso es un elemento imperativo para garantizar la rentabilidad e imagen de las empresas.

CAPÍTULO 5

5. Caso de estudio.

En este capítulo se presenta un problema de interés que incluye equipos de proceso que deben ser ubicados en un espacio físico, se manejan sustancias peligrosas que pueden provocar una explosión o incendio; además, se tienen corrientes calientes que se deben enfriar, así como corrientes frías que deben ser calentadas.

Dirección General de Bibliotecas UAQ

5.1. Descripción del caso de estudio.

El caso de estudio se aplicará al proceso ABCDE creado por Papoulias y Grossmann (1983b). Como se puede observar en la Figura 9, una corriente de vapor que contiene los sustratos A, B y C se alimenta a un compresor de dos etapas. Esta corriente se combina con una corriente de reciclados y es enviada a un reactor exotérmico, en donde los productos D y E son creados de los sustratos A y B, con el sustrato C como inerte. Un recipiente de separación súbita (flash) se utiliza para concentrar A, B y C en forma de vapor, mientras que D y E como líquido. La fase líquida se combina con el líquido del recipiente flash, y es enviado a una torre de destilación, donde se recupera D de forma casi pura en los destilados. La parte baja de la torre pasa a una segunda torre de destilación, donde E se recupera de manera casi pura y en la parte baja se produce agua. En la parte superior de la segunda torre se produce una corriente de vapor que se recicla al compresor.

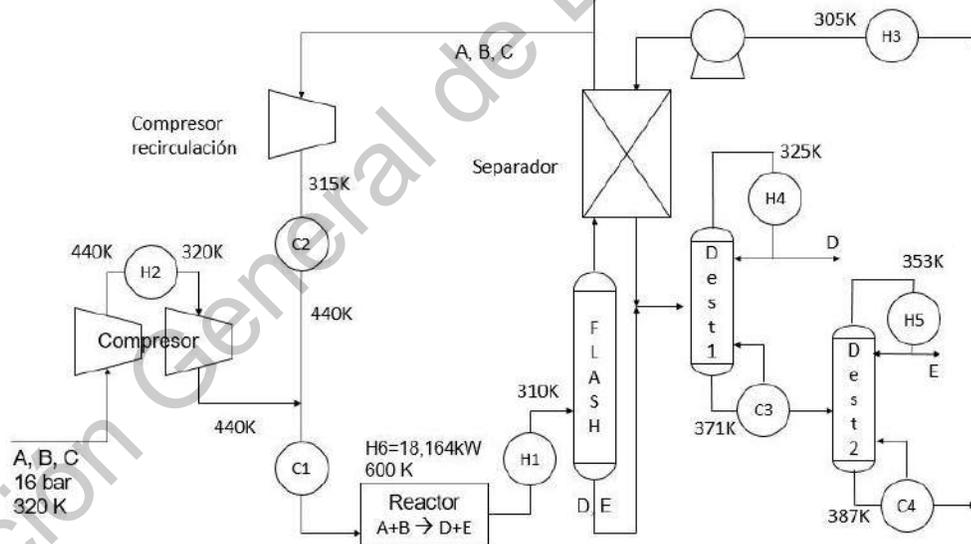


Figura 9 Diagrama del proceso ABCDE, adaptado de Papoulias y Grossmann (1983b).

El agua que sale de la segunda columna de destilación es recirculada al separador. El sustrato C inerte es removido en pequeñas cantidades en la corriente de purga a la salida del separador; lo demás es comprimido y recirculado. Las

condiciones establecidas para el proceso de calefacción y enfriamiento se muestran en el Cuadro 1. Considerar que no existen valores de capacidad calorífica C , para las corrientes que experimentan un cambio de fase isotérmica, al no transferir calor sensible; por lo que se escribe NA (no aplica) en su respectiva celda.

Cuadro 1 Datos de calefacción y enfriamiento del proceso.

Corriente	T_{in} (K)	T_{out} (K)	C_p (kW/K)	Q (kW)
H1	600	310	901,0	261,300
H2	440	320	49.36	5,900
H3	387	310	36.44	2,800
H4	325	325	NA	65,300
H5	353	353	NA	171,000
H6	600	600	NA	18,200
C1	440	600	889.6	142,300
C2	315	440	840.5	105,100
C3	371	371	NA	119,200
C4	387	387	NA	90,800

Se observa que la corriente H4 no puede realizar transferencia de calor con alguna de las corrientes C_i , ya que al momento de entrar en contacto con alguna de ellas se alcanzaría la restricción del ΔT_{min} . Se observa que H5 únicamente puede intercambiar calor con C2, con un total de 25,534 kW, energía necesaria para elevar la temperatura de C2 de 315 a 343; y con la finalidad de reducir el número de variables y cálculos se decide que su enfriamiento sea con servicio.

La información adicional necesaria para resolver el problema, por el método propuesto por Ponce-Ortega et al. (2008), se obtuvo de los trabajos de Colmenares y Seider (T. Colmenares y Seider, 1987; T. R. Colmenares y Seider, 1989); el Cuadro 2 muestra los datos.

Cuadro 2 Datos extendidos para modelo propuesto de Ponce-Ortega et al. (2008).

Corriente	T_{in} (K)	T_{out} (K)	F (kg/s)	C_p (kJ/kgK) λ (kJ/kg)	FC_p (kW/K) $F\lambda$ (kW)	T cambio de fase (K)
H1	600	310	813.31	1.108	901	-
H2	440	320	49.85	0.99	49.36	-
H3	387	310	32.94	1.106	36.44	-
H6	600	600	814.51	22.3	18164	600
C1	440	600	814.51	1.092	889.6	-
C2	315	440	764.08	1.1	840.5	-
C3	371	371	51.24	2326	119200	371
C4	387	387	39.03	2326	90800	387

El modelo de distribución de equipos de proceso requiere de datos referentes a las dimensiones de los equipos, longitud y profundidad; el modelo para considerar el efecto dominó por explosión requiere de los costos de los equipos, así como de la energía de explosión. Los costos de los equipos se obtuvieron al hacer una aproximación de los costos presentados en Matches (2014). Para la energía de explosión se realizó una estimación, la cual es una función de la cantidad de material liberado en caso de un accidente. El procedimiento para estimar la cantidad de material liberado, en función de escenarios, se puede revisar en Crawl y Louvar (2001), Defensie (2005) y Woodward (2010). Este trabajo consideró el peor escenario creíble, en el cual, el material dentro del equipo es liberado a través de un orificio de 10 cm durante un periodo de 5 minutos, las condiciones climáticas de viento se consideran en calma y se asume que la explosión ocurre en el centro de la unidad. Los datos del costo de los equipos, así como de su energía de explosión, se encuentran en el Cuadro 3.

Cuadro 3 Especificaciones de los equipos de proceso.

Equipo	Alias	Longitud (m)	Profundidad (m)	Costo (USD)	Energía de explosión (Pa)
Compresor de alimentación.	1	2.00	3.00	\$350,000	15.0
Reactor.	2	3.00	4.00	\$400,000	20.0
Flash.	3	3.00	3.00	\$100,00	20.0
Dest 1.	4	2.50	2.50	\$90,000	14.0
Dest 2.	5	2.00	2.00	\$80,000	0.00
Bomba.	6	1.50	2.00	\$8,000	0.00
Separador.	7	2.00	2.00	\$33,000	10.0
Compresor recirculación.	8	1.50	2.50	\$80,000	10.0

Para establecer los costos de los dispositivos de seguridad para la integración de capas de protección independientes, así como su probabilidad de fallo en demanda para cada dispositivo, se tomaron como ejemplo los establecidos por Patsiatzis et al. (2004); en el Cuadro 4 se establecen los dispositivos de protección disponibles. Se sugiere seleccionar un conjunto de estas protecciones, ya sea de manera individual o combinada con la finalidad de reducir el riesgo en cada uno de los equipos de proceso peligrosos; en el Cuadro 5 se muestran las combinaciones de los dispositivos de seguridad para cada uno de los equipos peligrosos.

Cuadro 4 Dispositivos de protección disponibles.

Dispositivo	Tipo
1	Sistema de agua de enfriamiento adicional.
2	Dispositivos de liberación de sobre presión adicionales.
3	Dispositivos de alivio de fuego adicionales.
4	Enchaquetamiento adicional.

Dispositivo	Tipo
5	Sistema de protección contra explosiones.
6	Sistema de control duplicado con flujo de enclavamiento.
7	Sistema de control duplicada de apagado.

Cuadro 5 Combinación de dispositivos para equipos peligrosos.

Equipo\Protección	k1	k2	k3	k4	k5	k6
Compresor de alimentación.	-	1	3	1, 3, 6	1, 3, 5, 6	1, 3, 4, 5, 6
Reactor.	-	1	3	1, 3	1, 3, 6	1, 3, 5, 6
Flash.	-	1	2	1, 2	1, 7	1, 2, 7
Dest 1.	-	1	2	1, 2	1, 2, 7	1, 2, 5, 7
Separador.	-	1	2	1, 2	1, 7	1, 2, 7
Compresor recirculación.	-	1	3	1, 3, 6	1, 3, 5, 6	1, 3, 4, 5, 6

Por último, en el Cuadro 6 y en el Cuadro 7 se establecen los costos y la probabilidad de fallo en demanda, respectivamente, de la selección de los dispositivos de protección

Cuadro 6 Costos de la selección de dispositivos de protección (USD).

Equipo\Protección	k1	k2	k3	k4	k5	k6
Compresor de alimentación.	0	\$5,000	\$20,000	\$50,000	\$70,000	\$120,000
Reactor.	0	\$5,000	\$20,000	\$25,000	\$35,000	\$60,000
Flash.	0	\$5,000	\$15,000	\$25,000	\$30,000	\$50,000
Dest 1.	0	\$5,000	\$15,000	\$20,000	\$70,000	\$100,000
Separador.	0	\$5,000	\$15,000	\$25,000	\$30,000	\$50,000
Compresor recirculación.	0	\$5,000	\$20,000	\$45,000	\$60,000	\$90,000

Cuadro 7 Probabilidad de fallo en demanda de dispositivos de protección.

Equipo\Protección	k1	k2	k3	k4	k5	k6
Compresor de alimentación.	1	0.1	0.1	0.001	0.0001	0.00001
Reactor.	1	0.1	0.1	0.01	0.001	0.0001
Flash.	1	0.1	0.1	0.01	0.001	0.0001
Dest 1.	1	0.1	0.1	0.01	0.0001	0.00001
Separador.	1	0.1	0.1	0.01	0.001	0.0001
Compresor recirculación.	1	0.1	0.1	0.001	0.0001	0.00001

Los costos estimados de operaciones son de 90 USD/m, mientras que el costo de terreno es de 50 USD/m².

La solución del caso de estudio consistirá en determinar la ubicación de los equipos del proceso en un terreno disponible; algunos de estos se clasifican en un conjunto *P*, los cuales pueden ocasionar un accidente con el riesgo de escalamiento. Por último se considera que se tiene que resolver un problema de redes de intercambiado de calor.

CAPÍTULO 6

6. Resultados y discusión.

Se utiliza la herramienta computacional GAMS (General Algebraic Modeling System, por sus siglas en inglés) como medio de solución de los casos establecidos en la metodología. GAMS es un software descrito por Brooke et al. (2005) enfocado a resolver problemas de programación matemática y optimización. Sus ventajas incluyen la capacidad de resolver sistemas de gran tamaño, ahorrando tiempo de cómputo al usuario.

En la presente sección se muestran los resultados del problema definido en el Capítulo 4 aplicando los modelos propuestos. El análisis de los resultados se divide en cuatro secciones que se denominarán casos. El caso 1 consiste en determinar la distribución de los equipos reduciendo el riesgo con distancias de seguridad. El caso 2 es una extensión del caso anterior considerando la instalación de sistemas de protección. El caso 3 consta de la síntesis de red de intercambiadores de calor. Finalmente, el caso 4 consiste en la solución integral del problema.

Todos los casos fueron resueltos mediante el paquete GAMS, y todos los cálculos se realizaron en un PC con procesador x64, AMD Ryzen 3 2200U con Radeon Vega Mobile Gfx 2.50Ghz. Además, se empleó la combinación de solucionadores Dicopt-Conopt-Cplex, ver sección 9.1.

6.1. Resultados y discusión de un modelo de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio.

Este primer problema contiene 1,058 ecuaciones, y 865 variables de las cuales 245 son binarias. La función objetivo para la distribución de equipos considerando la probabilidad de efecto dominó es de 1'483,679 USD, en el cual se considera un costo de tubería de 44,312 USD (2 %) y un costo de 210,427 USD (14 %) por concepto de terreno. Los 1,228,940 USD (84 %) restantes son costos asociados a la probabilidad de que se presente un accidente con efecto dominó. Los resultados numéricos de la ubicación y orientación de los equipos se indican en el Cuadro 8.

Los resultados obtenidos indican que, a pesar de que se ha realizado la distribución de equipos, utilizando la metodología tradicional, sigue latente un escenario dominó. Como puede observarse en el Cuadro 9, si se considera por ejemplo el equipo 2 (reactor), que afecta de manera directa al equipo 8 (compresor de recirculación) con un 26.8 % de probabilidad, al equipo 7 (separador) con un 18.0 % de provocar un efecto dominó; por lo que en caso de que se tenga alguna explosión en el reactor, puede provocar un evento de tipo dominó.

Por otra parte, se puede observar que a pesar de la alta probabilidad en el equipo 2 de que se dé un accidente con escalamiento, una distribución adecuada entre los equipos permite reducir algunos escenarios de escalamiento, reduciendo la probabilidad del evento. Por ejemplo, el equipo 8 (compresor de recirculación), en caso de presentar alguna fuga que ocasione un evento iniciador, sólo tiene una probabilidad de 1.80 % de que el evento escale hacia el equipo 2 (reactor). Por lo que se concluye que una distribución adecuada de equipos reduce tanto el costo de operación, como la probabilidad de que se presente un evento de tipo dominó por una explosión o incendio.

Por otra parte, se evidencia la necesidad de incorporar sistemas de control como alarmas de procesos, alarmas críticas, acciones automáticas, protecciones físicas, como válvulas de alivio o barreras de contención contra explosiones o

incendios, ya que es poco práctico que el operador en turno recorra distancias largas entre los equipos. Como se observa en la Figura 10, con la distribución obtenida, si se tiene una rutina entre el equipo 1 y el 3, el operador deberá de recorrer 105 metros para realizarla; por lo tanto, el siguiente modelo incorpora las protecciones independientes, con la finalidad de que las rutinas en campo sean prácticas.

Cuadro 8 Distribución de equipos considerando la probabilidad de efecto dominó.

Equipo	x_i	y_i	l_i (m)	d_i (m)
Compresor de alimentación	1.50	1.00	3.00	2.00
Reactor	39.085	49.985	3.00	4.00
Flash	39.085	98.50	3.00	3.00
Dest 1	1.25	88.337	2.50	2.50
Dest 2	1.00	33.914	2.00	2.00
Bomba	1.00	35.914	1.50	2.00
Separador	1.00	59.45	2.00	2.00
Compresor recirculación	41.335	14.615	1.50	2.50

Cuadro 9 Valores de probabilidad de daño.

Equipo	1	2	3	4	5	6	7	8
1		1.20%	0.30%	0.40%	11.00%	8.50%	1.40%	4.00%
2	2.80%		7.10%	4.60%	14.40%	15.60%	18.00%	26.80%
3	0.60%	7.10%		18.10%	1.50%	1.70%	4.40%	1.10%
4	0.30%	1.40%	4.00%		1.40%	1.60%	14.50%	0.40%
5	NA	NA	NA	NA		NA	NA	NA
6	NA	NA	NA	NA	NA		NA	NA
7	0.40%	1.30%	0.50%	3.60%	5.70%	8.10%		0.40%
8	1.10%	1.80%	0.10%	0.10%	0.90%	0.90%	0.40%	

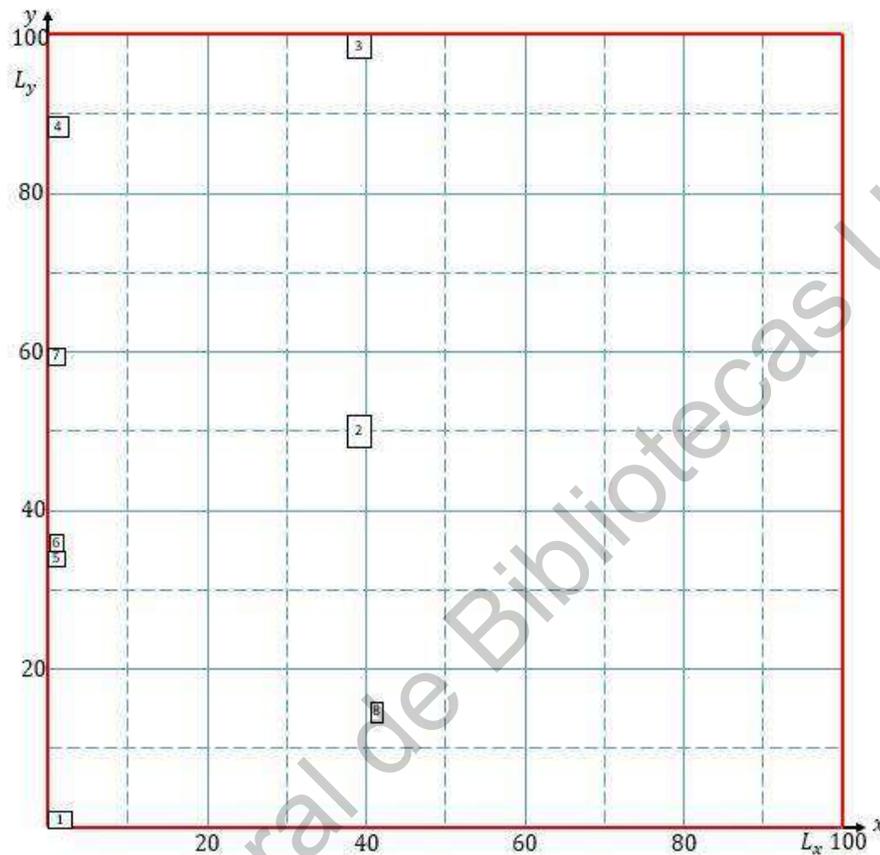


Figura 10 Distribución óptima del proceso ABCDE, considerando probabilidad de efecto dominó. La distancia se expresa en metros.

6.2. Resultados y discusión de un modelo de distribución de equipos incorporando el análisis de capas de protección independientes para la reducción del riesgo.

El modelo a resolver en el caso 2 contiene 1,076 ecuaciones, y 913 variables de las cuales 281 son binarias. El resultado arroja que los costos de inversión en los sistemas de protección representan el 56 % del costo total, como se puede observar en el Cuadro 10; debido a que, al estar más cerca los equipos (Figura 11), requieren de una mayor protección para reducir el riesgo. Pero se tiene la ventaja de un diseño más compacto, en el cual los costos de operación se reducen, al igual

que el terreno disponible. Sin embargo, a pesar de que los costos de sistemas de protección sean altos, el costo total del diseño obtenido representa apenas un 16 % del obtenido en la Sección 6.1. Realizando otra comparación, en el diseño que no incluye capas de protección se invirtieron en el terreno 210,427 USD, cifra muy superior a la invertida en este segundo diseño (195,048 USD).

Cuadro 10 Costos para la distribución incluyendo protecciones independientes.

Elemento	Valor (USD)	Porcentaje
Riesgo	45,263	18 %
Tubería	26,971	11 %
Terreno	33,077	13 %
Dispositivos de seguridad	135,000	58 %
Total	240,311	100 %

En cuanto a los costos asociados a la probabilidad de riesgo, incorporando las capas de protección independientes, se observa en el Cuadro 11 que las probabilidades de que se presente un evento de tipo dominó fueron reducidas. Dichas reducciones fueron 8 % en el caso del equipo 8 afectando al equipo 4, de 2 % en el caso del equipo 7 afectando al equipo 5, y de 1 % de los equipos 7 al 6; para todos los demás equipos las probabilidades se encuentran por debajo de 1 %.

Por lo tanto, se concluye que el incorporar capas de protección independientes, no sólo reduce la probabilidad de que se presente un evento de tipo dominó, sino que también los costos de inversión inicial son mucho menores; lo anterior incluye los costos operativos, los costos de terreno, y los costos finales, con la ventaja de que las operaciones en campo se vuelven más prácticas al tener los equipos más juntos, ver Cuadro 12 y Figura 11. Si bien no es ideal controlar los peligros, sino eliminarlos, se aprecia que la optimización de la selección de las capas de protección independientes es vitalmente importante.

Cuadro 11 Valores de probabilidad de daño incorporando capas de protección independiente.

	1	2	2	3	4	5	6	7
1		0.0917%	0.0962%	0.0134%	0.0942%	0.0940%	0.0351%	0.0154%
2	0.9420%		0.9670%	0.6460%	0.9090%	0.9280%	0.4420%	0.6440%
3	0.0970%	0.0967%		0.0524%	0.0933%	0.0940%	0.0509%	0.0557%
4	0.0990%	0.3070%	0.1790%		0.0610%	0.0790%	0.0150%	0.9090%
5	NA	NA	NA	NA		NA	NA	NA
6	NA	NA	NA	NA	NA		NA	NA
7	0.6800%	0.3200%	0.4000%	0.0600%	2.1400%	1.5600%		0.0500%
8	0.2900%	0.7500%	0.4900%	8.4200%	0.1900%	0.2200%	0.0500%	

Cuadro 12 Distribución de equipos considerando las capas de protección independiente.

Equipo	x_i	y_i	$l_i(m)$	$d_i(m)$
Compresor de alimentación	31.773	1.50	3.00	2.00
Reactor	24.802	5.00	3.00	4.00
Flash	27.804	1.50	3.00	3.00
Dest 1	1.25	8.75	2.50	2.50
Dest 2	36.273	5.00	2.00	2.00
Bomba	34.273	6.75	2.00	1.50
Separador	54.104	11.0	2.00	2.00
Compresor recirculación	1.25	0.75	2.50	1.50

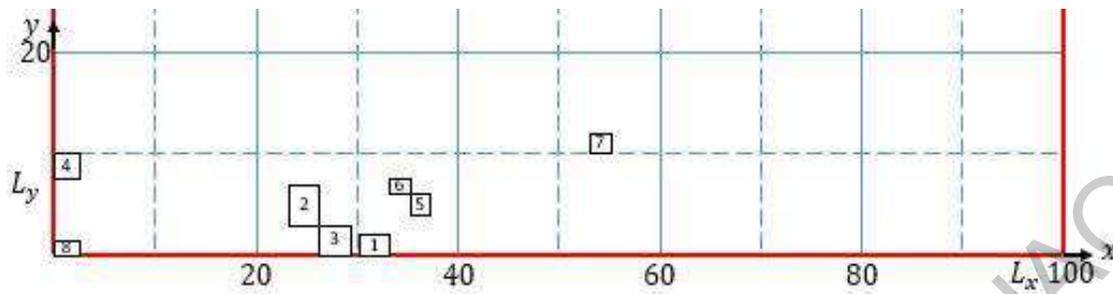


Figura 11 Distribución óptima del proceso ABCDE considerando capas de protección independiente. La distancia se expresa en metros.

6.3. Resultados y discusión de un modelo basado en programación matemática para resolver el problema de redes de intercambio de calor.

En el tercer modelo, el problema tiene 287 ecuaciones, y 273 variables de las cuales 72 son binarias. Para esta programación se propuso un costo unitario de servicios en calentamiento y enfriamiento de 100 USD/kW y 10 USD/kW, respectivamente, así como un valor de ΔT_{MIN} de 10 K. Para este modelo se utilizó el resolvidor Dicopt en el software GAMS (Brooke et al., 2006).

En la Figura 12 se muestra la red de intercambiadores obtenida con el modelo propuesto. La función objetivo para el problema de síntesis de redes de intercambiadores de calor es de 19'475,271 USD, con un costo anual de calentamiento de 19'171,660 USD, el cual representa el 98.4 % del costo total; y de 225,012 USD de enfriamiento anual, siendo el 1.1 % del costo total. Se requieren doce intercambiadores (Cuadro 13), de los cuales seis corresponden a unidades de proceso-proceso, con una inversión de 78,597 USD, que representan el 0.5 % del total del costo. Se denota remarcando el círculo final de la corriente caliente con un color azul, si dicha corriente requiere de un servicio de enfriamiento, y con un color rojo, si la corriente fría requiere de un servicio de calentamiento.

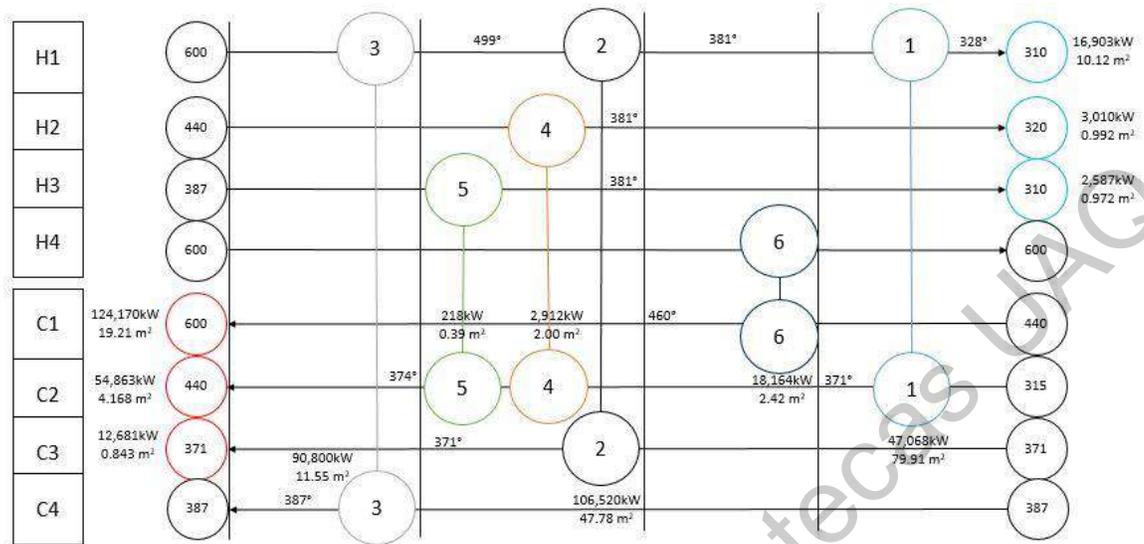


Figura 12 Red de intercambiadores obtenida con el modelo propuesto.

Cuadro 13 Información de los intercambiadores para el modelo de síntesis de redes de intercambiadores de calor.

Intercambiador	Q (kW)	A (m ²)
1 H1-C2 k=4	47,068	79,91
2 H1-C3 k=2	106,520	47.78
3 H1-C4 k=1	90,800	11.55
4 H2-C2 k=2	2,912	2.00
5 H3-C2 k=2	218	0.39
6 H4-C1 k=3	18,164	2.42
7 Enfriamiento H1	16,903	10,12
8 Enfriamiento H2	3,010	0.992
9 Enfriamiento H3	2,587	0.972
10 Calentamiento C1	124,170	19.21
11 Calentamiento C2	54,863	4.168
12 Calentamiento C3	12,681	0.843

Se observa en el Cuadro 14 que tanto la corriente caliente (H4) como la corriente fría (C4) no necesitaron de servicios de enfriamiento y calentamiento,

respectivamente, ya que todo el calor se utilizó en la red de intercambiadores. La corriente caliente (H1) tiene un aprovechamiento de 94 %, la corriente fría (C3) con un aprovechamiento de 89 %. Entre las corrientes que menos se aprovecharon son la corriente caliente (H3) con un 8 %, y la corriente fría (C1) con un 13 %; esto principalmente se puede deber a que la temperatura de la corriente C1 se encuentra por encima de la mitad de las corrientes calientes, por lo que únicamente se puede calentar con servicio. De manera global, la red de intercambiadores presenta un aprovechamiento de 71 %, intercambiando 532,364 kW de 745,600 kW disponibles, y el resto deberá de ser tratado con servicios. Por lo tanto, se concluye que el presente modelo resuelve el problema de redes de intercambio de calor.

Cuadro 14 Aprovechamiento de corrientes en la red de intercambiadores.

Corrientes	Q (kW) Proceso	Q (kW) Total	Aprovechamiento
H1	244,388	261,300	94%
H2	2,912	5,900	49%
H3	218	2,800	8%
H4	18,164	18,164	100%
C1	18,164	142,300	13%
C2	50,198	105,100	48%
C3	106,520	119,200	89%
C4	90,800	90,800	100%
Total	531,364	745,600	71%

6.4. Resultados y discusión de integración de modelos para la resolución conjunta de problemas

Para el último modelo, el problema tiene 1,308 ecuaciones, y 1,187 variables de las cuales 353 son binarias. La función objetivo para este modelo integrador es de 19'803,549 USD, como se observa en el Cuadro 15. De los elementos considerados en el modelo, se observa que el servicio de calentamiento es el que

representa un mayor costo con el 97.34 % del total, mientras que los demás elementos tienen un porcentaje muy pequeño en el costo total del modelo. En cuanto a la comparación de costos con los tres modelos anteriormente presentados, se observa que el costo total por servicios de calentamiento es muy similar al obtenido en el modelo 6.3; el costo asociado al riesgo y el de los dispositivos de seguridad para el modelo integrador son de 36,431 USD y 160,000 USD, respectivamente, mientras que en el modelo que incluye la incorporación de capas son de 45,263 USD y 135,000 USD, respectivamente. Se observa que se tiene un incremento de aproximadamente 16,000 USD, pero a pesar del incremento se ve beneficiada en la reducción de la probabilidad de que suceda un evento de tipo dominó; en cuanto a los costos de tubería y terreno, en este modelo integrador se obtuvieron costos más bajos, de 19,718 USD y 11,137 USD respectivamente, a los obtenidos en el modelo 6.2.

Cuadro 15 Costos del modelo integrador.

Elemento	Valor (_USD)	Porcentaje
Riesgo	36,431	0.18
Tubería	19,718	0.09
Terreno	11,137	0.05
Dispositivos de seguridad	160,000	0.80
Costo de servicio de enfriamiento	234,692	1.18
Costo de servicio de calentamiento	19'268,463	97.34
Inversión en intercambiadores	73,108	0.36
Total	19'803,549	100

La red de intercambiadores obtenida para el modelo de integración se muestra en la Figura 13; se requieren doce intercambiadores (Cuadro 16), de los cuales seis corresponden a unidades de proceso-proceso con una inversión de 73,108 USD. Se denota remarcando con un círculo al final de la corriente caliente con un color

azul, si dicha corriente requiere de un servicio de enfriamiento, y con un color rojo, si la corriente fría requiere de un servicio de calentamiento.

El aprovechamiento en la red de intercambiadores, que se muestra en el Cuadro 17, establecido en este modelo integrador es de 529,426 kW con un 71% de aprovechamiento, siendo muy similar al obtenido en el Cuadro 14, con 531,364 con un 71% de aprovechamiento; por lo que se concluye que este modelo integrador mantiene los objetivos del modelo de integración de redes de intercambio de calor.

Cuadro 16 Información de los intercambiadores para la integración de modelos.

Intercambiador	Q (kW)	A (m ²)
1 H1-C2 k=2	60,516	98.73
2 H1-C3 k=1	116,070	25.44
3 H1-C4 k=1	66,833	21.58
4 H2-C3 k=1	2,912	1.93
5 H3-C3 k=1	218	0.34
6 H4-C4 k=1	18,164	1.70
7 Enfriamiento H1	17,871	10.55
8 Enfriamiento H2	3,010	0.992
9 Enfriamiento H3	2,587	0.972
10 Calentamiento C1	142,340	20.868
11 Calentamiento C2	44,546	3.459
12 Calentamiento C4	5,802	0.407

Cuadro 17 Aprovechamiento de corrientes en la red de intercambiadores modelo de integración.

Corrientes	Q (kW) Proceso	Q (kW) Total	Aprovechamiento
H1	243,419	261,300	93%
H2	2,912	5,900	49%
H3	218	2,800	8%

Corrientes	Q (kW) Proceso	Q (kW) Total	Aprovechamiento
H4	18,164	18,164	100%
C1	0	142,300	0%
C2	60,516	105,100	58%
C3	119,200	119,200	100%
C4	84,997	90,800	20%
Total	529,426	745,600	71%

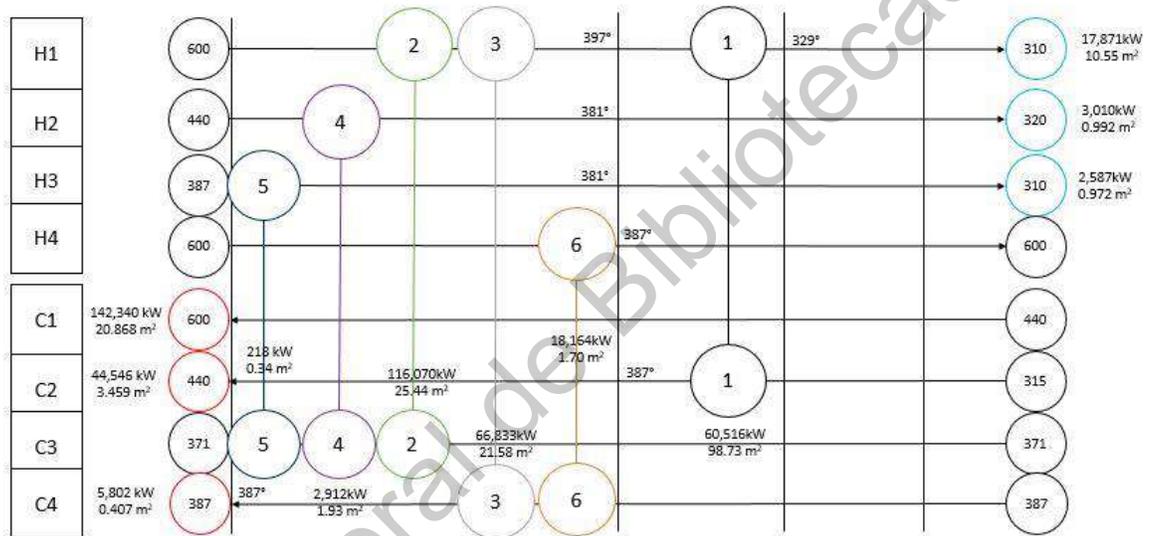


Figura 13 Red de intercambiadores obtenida para el modelo de integración.

En referencia a la probabilidad de que se presente un evento de tipo dominó, se observa en el Cuadro 18 que el modelo integrador ha reducido a menos de 1% la probabilidad de que se presente un evento de tipo dominó; considerando que en el modelo de 6.2, en el Cuadro 11, se alcanzó una probabilidad de 8.42%. Por lo que se concluye que este modelo integrador mantiene los objetivos de reducción de riesgo de accidente de tipo dominó.

Por último, la ubicación de los equipos es adecuada para las actividades diarias. Se puede observar en el Cuadro 19 y en la Figura 14 que la distribución de

los equipos de procesos se han ubicado en una porción de terreno de 6 m de largo por 37.124 m de alto.

Cuadro 18 Probabilidad de daño para el modelo integrador.

Equipo	1	2	3	4	5	6	7	8
1		0.0956%	0.0956%	0.0970%	0.0912%	0.0907%	0.0925%	0.0144%
2	0.9660%		0.9430%	0.9700%	0.9700%	0.9700%	0.9700%	0.5450%
3	0.0966%	0.0943%		0.0970%	0.0903%	0.0906%	0.0907%	0.0284%
4	0.9690%	0.9600%	0.9600%		0.9090%	0.9140%	0.9120%	0.1070%
5	NA	NA	NA	NA		NA	NA	NA
6	NA	NA	NA	NA	NA		NA	NA
7	0.0861%	0.0943%	0.0668%	0.0847%	0.0970%	0.0947%		0.0080%
8	0.2800%	0.4600%	0.1900%	0.2800%	0.9000%	0.8300%	0.8000%	

Cuadro 19 Distribución de equipos, modelo de integración.

Equipo	x_i	y_i	l_i (m)	d_i (m)
Compresor de alimentación	5.00	31.655	2.00	3.00
Reactor	2.50	27.687	3.00	4.00
Flash	2.50	35.624	3.00	3.00
Dest 1	2.00	31.655	2.50	2.50
Dest 2	2.50	23.687	2.00	2.00
Bomba	0.75	24.09	1.50	2.00
Separador	4.50	24.222	2.00	2.00
Compresor recirculación	2.50	0.75	2.50	1.50

Se concluye que la integración de los modelos haciendo uso de la programación matemática permite reducir el riesgo de accidentes, los costos de operación, mediante la distribución de equipos y la síntesis de redes de intercambio de calor.

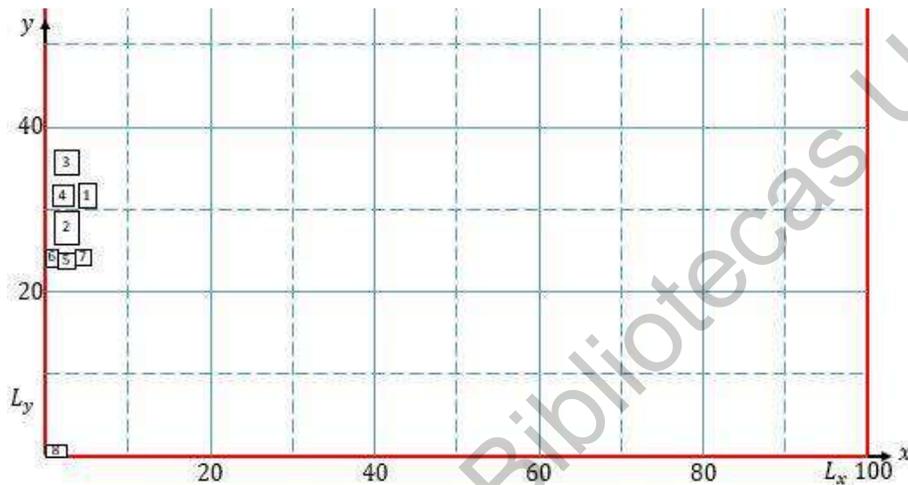


Figura 14 Distribución de equipos considerando integración de problemas.
Distancia expresada en metros

Finalmente, se reportan el tamaño de los problemas y el tiempo de cómputo necesario para obtener las soluciones óptimas. El Cuadro 20 muestra los tiempos de cómputo para los diferentes modelos.

Cuadro 20 Tiempos de procesamiento para los modelos.

Modelo	Número de variables binarias	Número de variables continuas	Número de restricciones	Tiempo de procesamiento (s)
1	245	865	1058	0.047
2	281	913	1076	0.062
3	273	72	287	0.047
4	353	1187	1308	0.078

CAPÍTULO 7

7. Conclusiones

7.1. Conclusiones

En este trabajo se identificaron herramientas útiles para modelar la distribución de equipos y la síntesis de redes de intercambiadores de calor reduciendo costos operativos y riesgo de accidentes, haciendo uso de la programación matemática. Con base en los resultados obtenidos se establecen las siguientes conclusiones:

1. El modelo de distribución de equipos de proceso, con la finalidad de reducir los costos de operación y efecto dominó por explosión o incendio, presenta una solución factible, pero poco práctica en la realidad; lo anterior debido a las distancias grandes que se tienen que recorrer para llegar de un equipo a otro. Además, el incremento en las líneas de tubería aumenta la frecuencia de fallas por fugas.

2. La incorporación de capas de protección independiente redujo tanto el costo final de la instalación de los equipos, así como la probabilidad de que un efecto dominó se presente; lo anterior permite que sea factible la operación rutinaria de los equipos, debido a que los equipos se pueden colocar de una manera más cercana.

3. El modelo para resolver el problema de redes de intercambio de calor permitió el emparejamiento de las corrientes de proceso, reduciendo el uso de servicios de vapor y agua de enfriamiento para calentar y enfriar, respectivamente, así como la cantidad de intercambiadores necesarios.

4. Con la integración de los tres modelos, se obtuvo un resultado más robusto, reduciendo tanto los costos de operación, como los riesgos de que se presente un evento de tipo dominó.

5. El caso de estudio propuesto sirvió para poder aplicar los cuatro modelos; sin embargo, el resultado que se obtenga del modelo dependerá de los datos de entrada.

7.2. Trabajo futuro

Existe aún mucho por hacer si se desea obtener una mejor solución al modelo de distribución de equipos y síntesis de red de intercambiadores de calor reduciendo costos operativos y riesgo de accidentes. Por ejemplo, considerar el diseño de las instalaciones de la planta, así como su ubicación. Este modelo puede aplicarse a otros problemas de interés, como es el caso de los biocombustibles. Adicionalmente, se puede considerar que el intercambiador generado en el modelo de síntesis de redes de intercambio de calor es un equipo nuevo, el cual también se debe de buscar un espacio para distribuirlo. En cuanto al modelo de síntesis de redes de intercambiadores de calor se puede analizar el impacto de variar la ΔT_{min} , se esperaría que al aumentarla el intercambio de calor dentro de la red sea menor. Asimismo, se puede incorporar un modelo riguroso para estimar caídas de presión en el sistema de bombeo. Por último, este trabajo no constituye un análisis de viabilidad financiera concluyente, se requieren incorporar análisis de ciclo de vida de costos de los elementos de la planta. Por esta razón, en posteriores investigaciones se incorporarán estudios y análisis económicos pertinentes, para determinar si la planta es rentable o no. El trabajo presentado en esta tesis podrá utilizarse como base de dichos estudios.

8. Bibliografía

- Aaltola, J. (2002). Simultaneous synthesis of flexible heat exchanger network. *Applied thermal engineering*, 22(8), 907-918.
- Ahlert, R. C. (2000). Guidelines for consequence analysis of chemical releases. Center for Chemical Process Safety, American Institute of Chemical Engineers (AIChE), New York, NY, (1999,) 320 Pages, [ISBN No.: 0-8169-0786-2], US. List Price: \$129.00. In: Wiley Online Library.
- Alileche, N., Cozzani, V., Reniers, G., y 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.
- Alves, D. T. S., de Medeiros, J. L., y Ofelia de Queiroz, F. A. (2016). Optimal determination of chemical plant layout via minimization of risk to general public using Monte Carlo and Simulated Annealing techniques. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 41, 202-214.
- Anjos, M. F., y Vieira, M. V. (2017). Mathematical optimization approaches for facility layout problems: The state-of-the-art and future research directions. *European Journal of Operational Research*, 261(1), 1-16.
- Arturson, G. (1987). The tragedy of San Juanico—the most severe LPG disaster in history. *Burns*, 13(2), 87-102.
- Azadeh, A., Haghghi, S. M., Asadzadeh, S., y Saedi, H. (2013). A new approach for layout optimization in maintenance workshops with safety factors: The case of a gas transmission unit. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 26(6), 1457-1465.
- Birk, A., Poirier, D., y Davison, C. (2006). On the thermal rupture of 1.9 m³ propane pressure vessels with defects in their thermal protection system. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 19(6), 582-597.
- Blanco, R. F. (2014). Understanding hazards, consequences, LOPA, SILs, PFD, and RRFs as related to risk and hazard assessment. *Process Safety Progress*, 33(3), 208-216.
- Brooke, A., Kendrick, D., Meeraus, A., y Raman, R. (2005). GAMS—A Users Guide; GAMS Development: Washington, DC, USA, 2005. *Google Scholar There is no corresponding record for this reference.*
- Brooke, A., Kendrick, D., Meeraus, A., y Raman, R. (2006). GAMS-Language guide; GAMS Development Corp. *Washington, DC.*
- Caccetta, L., y Kusumah, Y. S. (2001). Computational aspects of the facility layout design problem. *Nonlinear Analysis*, 47(8), 5599-5610.
- Caputo, A. C., Pelagagge, P. M., Palumbo, M., y Salini, P. (2015). Safety-based process plant layout using genetic algorithm. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 34, 139-150.
- Carranza, R. (2015). A review of process safety catastrophes on the Texas Gulf Coast. *WIT Transactions on The Built Environment*, 151, 145-156.
- CCPS. (2001a). *Guidelines for engineering design for process safety*. New York, NY.: Center of Chemical Process Safety.

- CCPS. (2001b). *Layer of protection analysis: simplified process risk assessment*. New York, NY: Center of Chemical Process Safety.
- CCPS. (2015). *Guidelines for initiating events and independent protection layers in layer of protection analysis* (A. I. o. C. E. C. f. C. P. Safety Ed.): John Wiley & Sons, Incorporated.
- Cerda, J., Galli, M., Camussi, N., y Isla, M. (1990). Synthesis of flexible heat exchanger networks—I. Convex networks. *Computers & Chemical Engineering*, 14(2), 197-211.
- Ciric, A., y Floudas, C. (1991). Heat exchanger network synthesis without decomposition. *Computers & Chemical Engineering*, 15(6), 385-396.
- Colmenares, T., y Seider, W. (1987). Heat and power integration of chemical processes. *AIChE Journal*, 33(6), 898-915.
- Colmenares, T. R., y Seider, W. D. (1989). Synthesis of utility systems integrated with chemical processes. *Industrial & engineering chemistry research*, 28(1), 84-93.
- Cozzani, V., y Salzano, E. (2004). The quantitative assessment of domino effects caused by overpressure: Part I. Probit models. *Journal of hazardous materials*, 107(3), 67-80.
- Cozzani, V., Tugnoli, A., y Salzano, E. (2007). Prevention of domino effect: From active and passive strategies to inherently safer design. *Journal of hazardous materials*, 139(2), 209-219.
- Crowl, D. A., y Louvar, J. F. (2001). *Chemical process safety: fundamentals with applications*: Pearson Education.
- de Lira-Flores, J., Vázquez-Román, R., López-Molina, A., y Mannan, M. S. (2014). A MINLP approach for layout designs based on the domino hazard index. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 30, 219-227.
- Defensie, T. K. v. L. T. (2005). Methods for the calculation of physical effects: Due to releases of hazardous materials (liquids and gases)(" Yellow Book").
- Di Padova, A., Tugnoli, A., Cozzani, V., Barbaresi, T., y Tallone, F. (2011). Identification of fireproofing zones in Oil&Gas facilities by a risk-based procedure. *Journal of hazardous materials*, 191(1-3), 83-93.
- Díaz-Ovalle, C., Vázquez-Román, R., y Mannan, M. S. (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.
- Drira, A., Pierreval, H., y Hajri-Gabouj, S. (2007). Facility layout problems: A survey. *Annual reviews in control*, 31(2), 255-267.
- Droste, B., y Schoen, W. (1988). Full scale fire tests with unprotected and thermal insulated LPG storage tanks. *Journal of hazardous materials*, 20, 41-53.
- Dweck, J., Boutillon, S., y Asbill, S. (2004). Deadly LNG incident holds key lessons for developers, regulators. *Pipeline and Gas Journal*, 39-42.
- Floudas, C. A., Ciric, A. R., y Grossmann, I. E. (1986). Automatic synthesis of optimum heat exchanger network configurations. *AIChE Journal*, 32(2), 276-290.

- Floudas, C. A., y Grossmann, I. E. (1987). Synthesis of flexible heat exchanger networks with uncertain flowrates and temperatures. *Computers & Chemical Engineering*, 11(4), 319-336.
- Fuchino, T., Itoh, T., y Muraki, M. (1997). Arrangement of process equipment modules with consideration of plant safety. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 30(5), 896-901.
- Grossmann, I. E., y Sargent, R. (1978a). Optimum design of chemical plants with uncertain parameters. *AIChE Journal*, 24(6), 1021-1028.
- Grossmann, I. E., y Sargent, R. (1978b). Optimum design of heat exchanger networks. *Computers & Chemical Engineering*, 2(1), 1-7.
- Grossmann, I. E., Viswanathan, J., Vecchiotti, A., Raman, R., y Kalvelagen, E. (2002). GAMS/DICOPT: A discrete continuous optimization package. GAMS Corporation Inc, 37, 55.
- Gupta, J., Hendershot, D., y Mannan, M. (2003). The real cost of process safety—a clear case for inherent safety. *Process Safety and Environmental Protection*, 81(6), 406-413.
- Han, K., Kim, Y. H., Jang, N., Kim, H., Shin, D., y Yoon, E. S. (2013). Risk index approach for the optimal layout of chemical processes minimizing risk to humans. *Industrial & engineering chemistry research*, 52(22), 7274-7281.
- Hassan, M. M., y Hogg, G. L. (1987). A review of graph theory application to the facilities layout problem. *Omega*, 15(4), 291-300.
- Hendershot, D. C. (1997). Inherently safer chemical process design. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 10(3), 151-157.
- Hohmann, E. C. J. (1972). Optimum networks for heat exchange.
- Hosseini-Nasab, H., Fereidouni, S., Ghomi, S. M. T. F., y Fakhrazad, M. B. (2018). Classification of facility layout problems: a review study. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 94(1), 957-977.
- Inchaurregui-méndez, A., Vazquez-Roman, R., Ponce-ortega, J., y Mannan, S. (2016). Optimal safe layouts with heat exchanger networks synthesis having isothermal process streams. *Chemical Engineering Transactions*, 48, 655-660.
- Jiang, D., y Chang, C.-T. (2013). A new approach to generate flexible multiperiod heat exchanger network designs with timesharing mechanisms. *Industrial & engineering chemistry research*, 52(10), 3794-3804.
- Jung, S. (2016). Facility siting and plant layout optimization for chemical process safety. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 33(1), 1-7.
- Jung, S., Ng, D., Laird, C. D., y Mannan, M. S. (2010). A new approach for facility siting using mapping risks on a plant grid area and optimization. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23(6), 824-830.
- Kang, L., y Liu, Y. (2014). Retrofit of heat exchanger networks for multiperiod operations by matching heat transfer areas in reverse order. *Industrial & engineering chemistry research*, 53(12), 4792-4804.
- Kang, L., y Liu, Y. (2019). Synthesis of flexible heat exchanger networks: A review. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 27(7), 1485-1497.

- Khan, F. I., y Abbasi, S. (1998). Models for domino effect analysis in chemical process industries. *Process Safety Progress*, 17(2), 107-123.
- Khan, F. I., y Amyotte, P. R. (2007). Modeling of BP Texas City refinery incident. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 20(4-6), 387-395.
- Klemeš, J. J., y Kravanja, Z. (2013). Forty years of heat integration: pinch analysis (PA) and mathematical programming (MP). *Current Opinion in Chemical Engineering*, 2(4), 461-474.
- Koopmans, T. C., y Beckmann, M. (1957). Assignment problems and the location of economic activities. *Econometrica: journal of the Econometric Society*, 53-76.
- Landucci, G., Molag, M., Reinders, J., y Cozzani, V. (2009). Experimental and analytical investigation of thermal coating effectiveness for 3 m³ LPG tanks engulfed by fire. *Journal of hazardous materials*, 161(2-3), 1182-1192.
- Latifi, S. E., Mohammadi, E., y Khakzad, N. (2017). Process plant layout optimization with uncertainty and considering risk. *Computers & Chemical Engineering*, 106, 224-242.
- Lees, F. (2012). *Lees' Loss prevention in the process industries: Hazard identification, assessment and control*: Butterworth-Heinemann.
- Linnhoff, B., y Flower, J. R. (1978). Synthesis of heat exchanger networks: I. Systematic generation of energy optimal networks. *AIChE Journal*, 24(4), 633-642.
- Linnhoff, B., y Hindmarsh, E. (1983). The pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science*, 38(5), 745-763.
- López-Molina, A., Vázquez-Román, R., Mannan, M. S., y 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.
- Maganha, I., Silva, C., y Ferreira, L. M. D. (2019). The layout design in reconfigurable manufacturing systems: a literature review. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 105(1), 683-700.
- Mannan, S. (2012). *Lees' Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification. Assessment and Control*, 1.
- Marselle, D. F., Morari, M., y Rudd, D. F. (1982). Design of resilient processing plants—II Design and control of energy management systems. *Chemical Engineering Science*, 37(2), 259-270.
- Martinez-Gomez, J., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M., y El-Halwagi, M. M. (2015). Optimization of facility location and reallocation in an industrial plant through a multi-annual framework accounting for economic and safety issues. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 33, 129-139. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.jlp.2014.11.021>
- Martinez-Gomez, J., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M. a., Serna-González, M., y El-Halwagi, M. M. (2014). Siting optimization of facility and unit relocation with the simultaneous consideration of economic and safety issues. *Industrial & engineering chemistry research*, 53(10), 3950-3958.
- Masso, A., y Rudd, D. (1969). The synthesis of system designs. II. Heuristic structuring. *AIChE Journal*, 15(1), 10-17.

- Matches. (2014). Matches Process Equipment Cost Estimates. Retrieved from matche.com/equipcost/Default.html
- McGalliard, R. L., y Westerberg, A. W. (1972). Structural sensitivity analysis in design synthesis. *The Chemical Engineering Journal*, 4(2), 127-138.
- Mecklenburgh, J. C. (1985). Process plant layout.
- Medina-Herrera, N., Jiménez-Gutiérrez, A., y Grossmann, I. E. (2014). A mathematical programming model for optimal layout considering quantitative risk analysis. *Computers & Chemical Engineering*, 68, 165-181. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.05.019>
- Meller, R. D., Narayanan, V., y Vance, P. H. (1998). Optimal facility layout design. *Operations Research Letters*, 23(3-5), 117-127.
- Mingguang, Z., y Juncheng, J. (2008). An improved probit method for assessment of domino effect to chemical process equipment caused by overpressure. *Journal of hazardous materials*, 158(2-3), 280-286.
- Montreuil, B. (1991). A modelling framework for integrating layout design and flow network design. In *Material handling'90* (pp. 95-115): Springer.
- Moore, J. M. (1962). *Plant layout and design*: Macmillan.
- Nabavi, S., Taghipour, A., y Gorji, A. M. (2016). Optimization of facility layout of tank farms using genetic algorithm and fireball scenario. *Chemical Product and Process Modeling*, 11(2), 149-157.
- Nolan, D. P. (2014). *Handbook of fire and explosion protection engineering principles: for oil, gas, chemical and related facilities*: William Andrew.
- Papageorgiou, L. G., y Rotstein, G. E. (1998). Continuous-domain mathematical models for optimal process plant layout. *Industrial & engineering chemistry research*, 37(9), 3631-3639.
- Papalexandri, K. P., y Pistikopoulos, E. N. (1993). A multiperiod MINLP model for improving the flexibility of heat exchanger networks. *Computers & Chemical Engineering*, 17, S111-S116.
- Papastratos, S., Isambert, A., y Depeyre, D. (1993). Computerized optimum design and dynamic simulation of heat exchanger networks. *Computers & Chemical Engineering*, 17, S329-S334.
- Papoulias, S. A., y Grossmann, I. E. (1983a). A structural optimization approach in process synthesis—II: Heat recovery networks. *Computers & Chemical Engineering*, 7(6), 707-721.
- Papoulias, S. A., y Grossmann, I. E. (1983b). A structural optimization approach in process synthesis—III: total processing systems. *Computers & Chemical Engineering*, 7(6), 723-734.
- Patsiatzis, D., Knight, G., y Papageorgiou, L. (2004). An MILP approach to safe process plant layout. *Chemical Engineering Research and Design*, 82(5), 579-586.
- Penteado, F. D., y Ciric, A. R. (1996). An MINLP approach for safe process plant layout. *Industrial & engineering chemistry research*, 35(4), 1354-1361.
- Pérez-Gosende, P., Mula, J., y Díaz-Madroño, M. (2021). Facility layout planning. An extended literature review. *International Journal of Production Research*, 1-40.

- Peters, M., y Timmerhaus, K. (1968). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, Mc Graw-H111 Book Co. Inc., New York.
- Pistikopoulos, E., y Mazzuchi, T. (1990). A novel flexibility analysis approach for processes with stochastic parameters. *Computers & Chemical Engineering*, 14(9), 991-1000.
- Ponce-Ortega, J. M., Jiménez-Gutiérrez, A., y Grossmann, I. E. (2008). Optimal synthesis of heat exchanger networks involving isothermal process streams. *Computers & Chemical Engineering*, 32(8), 1918-1942.
- Ratnam, R., y Patwardhan, V. (1991). Sensitivity analysis for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science*, 46(2), 451-458.
- Roberts, T., Medonos, S., y Shirvill, L. (2000). Review of the response of pressurised process vessels and equipment to fire attack.
- Roetzel, W. (2004). Design and operation of heat exchanger networks. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 46
- Saboo, A. K., y Morari, M. (1984). Design of resilient processing plants. IV. Some new results on heat exchange network synthesis. *Chem. Eng. Sci.:(United Kingdom)*, 39(3).
- Seppänen, J., y Moore, J. M. (1970). Facilities planning with graph theory. *Management Science*, 17(4), B-242-B-253.
- Singh, S. P., y Sharma, R. R. (2006). A review of different approaches to the facility layout problems. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 30(5-6), 425-433.
- Swaney, R. E., y Grossmann, I. E. (1985). An index for operational flexibility in chemical process design. Part I: Formulation and theory. *AIChE Journal*, 31(4), 621-630.
- Syeda, S. R., Maisha, N., y Ferdous, A. (2017). Risk map for facility siting of an ammonia-Urea Complex. *Journal of Chemical Engineering*, 29(1), 56-60.
- Tantimuratha, L., Asteris, G., Antonopoulos, D., y Kokossis, A. (2001). A conceptual programming approach for the design of flexible HENs. *Computers & Chemical Engineering*, 25(4-6), 887-892.
- Tompkins, J. A., White, J., Bozer, Y., Tanchoco, J., y Trevino, J. (1996). *Facilities Planning*. John Wiley and Sons. Inc. 2nd edition. USA, 36-47.
- Townsend, W., Anderson, C., Zook, J., y Cowgill, G. (1974). *Comparison of thermally coated and uninsulated rail tank cars filled with LPG subjected to a fire environment*. Retrieved from
- Tugnoli, A., Cozzani, V., Di Padova, A., Barbaresi, T., y Tallone, F. (2012). Mitigation of fire damage and escalation by fireproofing: A risk-based strategy. *Reliability Engineering & System Safety*, 105, 25-35.
- Tugnoli, A., Cozzani, V., Khan, F., y Amyotte, P. (2013). Managing domino effects from a design-based viewpoint. In *Domino Effects in the Process Industries* (pp. 246-271): Elsevier.
- Varma, R., y Varma, D. R. (2005). The Bhopal disaster of 1984. *Bulletin of Science, Technology & Society*, 25(1), 37-45.

- Vázquez-Román, R., Díaz-Ovalle, C. O., Jung, S., y Castillo-Borja, F. (2019). A reformulated nonlinear model to solve the facility layout problem. *Chemical Engineering Communications*, 206(4), 476-487.
- Vázquez-Román, R., Inchaurregui-Méndez, J. A., y Mannan, M. S. (2015). A grid-based facilities allocation approach with safety and optimal heat exchanger networks synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 80, 92-100.
- Vázquez-Román, R., Lee, J.-H., Jung, S., y Mannan, M. S. (2010). Optimal facility layout under toxic release in process facilities: A stochastic approach. *Computers & Chemical Engineering*, 34(1), 122-133.
- Verheyen, W., y Zhang, N. (2006). Design of flexible heat exchanger network for multi-period operation. *Chemical Engineering Science*, 61(23), 7730-7753.
- Wellman, G. W., Melof, B. M., Luketa-Hanlin, A. J., Hightower, M. M., Covan, J. M., Gritz, L. A., Irwin, M. J., Kaneshige, M. J., y Morrow, C. W. (2004). *Guidance on risk analysis and safety implications of a large liquefied natural gas (LNG) spill over water*. Retrieved from
- Willey, R. J. (2014). Layer of protection analysis. *Procedia Engineering*, 84, 12-22.
- Woodward, J. L. (2010). *Estimating the flammable mass of a vapor cloud* (Vol. 21): John Wiley & Sons.
- Wu, Y., y Wang, Y. (2017). A chemical industry area-wide layout design methodology for piping implementation. *Chemical Engineering Research and Design*, 118, 81-93.
- Wu, Y., Wang, Y., Feng, X., y Feng, S. (2016). A genetic algorithm based plant layout design methodology considering piping and safety. *Chemical Engineering Transactions*, 52, 25-30.
- Xu, G., y Papageorgiou, L. G. (2009). Process plant layout using an improvement-type algorithm. *Chemical Engineering Research and Design*, 87(6), 780-788.
- Yee, T. F., y Grossmann, I. E. (1990). Simultaneous optimization models for heat integration—II. Heat exchanger network synthesis. *Computers & Chemical Engineering*, 14(10), 1165-1184.
- Yee, T. F., Grossmann, I. E., y Kravanja, Z. (1990a). Simultaneous optimization models for heat integration—I. Area and energy targeting and modeling of multi-stream exchangers. *Computers & Chemical Engineering*, 14(10), 1151-1164.
- Yee, T. F., Grossmann, I. E., y Kravanja, Z. (1990b). Simultaneous optimization models for heat integration—III. Process and heat exchanger network optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 14(11), 1185-1200.
- Yuan, X., Zhenyu, W., y Qunxiong, Z. (2013). An improved hybrid genetic algorithm for chemical plant layout optimization with novel non-overlapping and toxic gas dispersion constraints. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 21(4), 412-419.
- Zhang, X. L., Yin, H. C., y Huo, Z. Y. (2011). *Flexible synthesis of heat exchanger network with particle swarm optimization Algorithm*. Paper presented at the Advanced Materials Research.

9. Anexos.

9.1. Descripción del funcionamiento de los algoritmos utilizados.

Con el uso de GAMS, el usuario se enfoca en la parte conceptual del modelo a desarrollar, y no tanto, en el método para optimizar, que sería el algoritmo. Para esto se deben establecer las variables, parámetros, ecuaciones, restricciones y la función objetiva involucradas en el modelo matemático. Se pueden establecer conjuntos y subconjuntos de los parámetros y variables, que, a su vez, se pueden declarar como escalares, vectores o matrices. Las variables tienen la particularidad que se pueden definir como números reales, enteros o binarios.

GAMS es un software de modelación matemática del cual nos apoyamos para reproducir la formulación de nuestros modelos. Con este software se puede codificar los problemas MINLP algebraicamente, especificando que será resuelto con el optimizador DICOPT, especificando que la parte no lineal (NLP) será resuelta por el optimizador CONOPT, mientras que la parte mixta entera (MIP) por el optimizador CPLEX.

DICOPT comienza resolviendo el problema de manera no lineal (NLP), con la condición de que las variables enteras 0-1 se encuentran relajadas. Si la solución a este problema contiene respuesta con variables enteras, la búsqueda termina. En caso contrario, continúa con una secuencia alternando los problemas no lineales (NLP), a los que se llaman subproblemas y los programas lineales enteros-mixtos (MIP), llamados problemas maestros. Los subproblemas son resueltos para variables fijas en valores 0-1 que son identificados por el problema maestro MIP en cada iteración. Un criterio de parada que suele funcionar muy bien en la práctica para problemas no convexos está basado en la regla heurística: detenerse tan pronto como los subproblemas NLP comiencen a empeorar. Esto es, por ejemplo, el actual subproblema NLP tiene un valor en la función objetivo óptimo que es peor que la del previo subproblema NLP. El uso de este resolvidor no garantiza la obtención del óptimo global.

CONOPT es un algoritmo de gradiente reducido generalizado (GRG) utilizado para resolver programas no lineales (NLP) a gran escala que incluyen restricciones no lineales. Los pasos principales en un algoritmo GRG son:

1.- Iniciar y encontrar una solución factible.

2.- Calcular el Jacobiano de las restricciones, J .

3.- Seleccionar un conjunto de variables básicas n , x_b , tal que B , la sub matriz de la columna básica de J , es no singular. Factoriza B . Las demás variables, x_n , se consideran no básicas.

4.- Resuelve $B^T u = \frac{df}{dx_b}$ para los multiplicadores u .

5.- Calcula el gradiente reducido, $r = \frac{df}{dx} - J^T u$. r será cero para las variables básicas, por definición.

6.- Si r proyectado en los límites es pequeño, el algoritmo se detiene. El punto actual es cercano a un óptimo.

7.- Seleccionar el conjunto de variables super básicas, x_s , como un subconjunto de variable no básicas que rentablemente se puedan cambiar, encontrando una dirección de búsqueda, d_s , para las variables super básicas basado en r_s y posiblemente en alguna información de segundo orden.

8.- Realizar una búsqueda en una línea en dirección d . Para cada paso, x_s cambia en la dirección d_s y x_b es ajustado subsecuentemente para satisfacer $g(x_b, x_s) = b$ en un proceso pseudo-Newton utilizando el factor B del paso 3.

9.- Ir al paso 2.

El criterio de paro dependerá del cálculo del gradiente.

CPLEX es un algoritmo para resolver problemas mixtos enteros (MIP), utilizando un algoritmo de ramificación y corte resolviendo un conjunto de subproblemas del tipo linear LP.