



**Casa abierta al tiempo**

**Universidad Autónoma Metropolitana**

**Unidad Iztapalapa**

**División de Ciencias Básicas e Ingeniería**

---

**“Síntesis Óptima de Redes de Uso de Agua con  
Operaciones Multi-contaminantes”**

---

Tesis que presenta

**Hernán Teódulo Cortés Monroy**

**Matricula: 2173802038**

Para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)**

Director:

**Dr. Juan Manuel Zamora Mata**

Jurados:

**Dr. Arturo Jiménez Gutiérrez**

**Dr. Carlos Martínez Vera**

**Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez**

Iztapalapa, Ciudad de México, julio de 2020



# **Síntesis Óptima de Redes de Uso de Agua con Operaciones Multi-contaminantes**

Hernán Teódulo Cortés Monroy

Tesis de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química  
Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa  
División de Ciencias Básicas e Ingeniería



## **Agradecimientos**

Deseo expresar mi gratitud principalmente hacia mi familia, por mi crianza, sus palabras de amor, sus palabras sobre su sabiduría de la vida, su apoyo y sus valiosos consejos; de cada uno de ustedes eh aprendido algo realmente valioso en mi vida.

Al Dr. Juan Manuel Zamora Mata, por su paciencia, su gran dedicación, sus valiosos consejos, comentarios y sugerencias en el desarrollo de este proyecto y principalmente en la orientación y desarrollo de mi persona como profesional.

Al Dr. Arturo Jiménez Gutiérrez, al Dr. Carlos Martínez Vera y al Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez, por el tiempo dedicado, sus valiosas aportaciones y observaciones para mejorar este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT), por el apoyo económico otorgado durante la realización de este proyecto.

A la Universidad Autónoma Metropolitana por el excelente ambiente académico y el espacio otorgado para la realización de este proyecto.

Al laboratorio de Síntesis, Optimización y Simulación de Procesos (SOS), por el agradable espacio de trabajo y las comodidades otorgadas en la realización de este proyecto.



## Resumen

El acceso y la disponibilidad de agua superficial y subterránea han disminuido en las últimas décadas, mientras que el desarrollo de las industrias modernas ha incrementado la extracción y la demanda de agua dulce a nivel mundial. Esto ha motivado el uso de tecnologías y enfoques sistemáticos para orientar el diseño de sistemas industriales que reduzcan el consumo y aumenten la eficiencia en el uso de agua. Una de estas tecnologías consiste en el desarrollo y solución de modelos matemáticos de programación no lineal (PNL) para la síntesis de redes de operaciones usuarias de agua.

En este trabajo se desarrolla y resuelve un modelo de PNL para la síntesis óptima de redes de uso de agua con operaciones multi-contaminantes para determinar la conectividad entre las operaciones (estructura) y las condiciones óptimas de operación. El modelo se desarrolla con base en una superestructura general de red que considera múltiples fuentes de agua y todas las opciones de distribución, uso y reúso de agua entre las operaciones usuarias.

El modelo de PNL desarrollado considera la minimización de una función objetivo de costos de operación relacionados con el flujo total de agua que ingresa al sistema, sujeta a restricciones lineales y no lineales asociados a balances de masa de agua y de contaminantes, respectivamente, en cada elemento de la superestructura de red (mezcladores, divisores y operaciones usuarias de agua), así como restricciones de diseño asociadas a cada una de las operaciones y cotas inferiores y superiores para todas las variables de decisión. Las restricciones no lineales contienen términos bilineales que generan no convexidades en el modelo y que pueden dar lugar a la existencia de múltiples soluciones óptimas locales, en donde los resolvedores convencionales pueden quedar atrapados o difícilmente obtener una solución óptima global.

Para resolver el modelo se utilizó un enfoque determinista y un enfoque estocástico de solución. Los resultados muestran que el enfoque determinista resolvió a optimalidad global cuatro de ocho casos de estudio de la literatura. Para los casos de estudio restantes, se determinaron soluciones óptimas potencialmente globales dentro de un tiempo máximo de solución establecido. Por otra parte, el enfoque estocástico determinó las mismas soluciones obtenidas mediante el enfoque determinista, y además, permitió detectar para cada caso de estudio un conjunto de soluciones óptimas locales, en donde resultan diferentes diseños de red con el mismo consumo total de agua. La metodología utilizada mostró ser una herramienta efectiva para diseñar óptimamente redes usuarias de agua con múltiples contaminantes.



## Abstract

Access and availability of surface and groundwater have declined in recent decades, while the development of modern industries has increased the extraction and demand of freshwater worldwide. This has motivated the use of systematic technologies and approaches to guide the design of industrial systems that reduce consumption and increase water-use efficiency. One of these technologies consists in the development and solution of mathematical models of non-linear programming (NLP) for the synthesis of networks of water-using operations.

In this work, a NLP model is developed and solved for the optimal synthesis of water use networks with multi-contaminants operations to determine the connectivity among the operations (structure) and the optimal operating conditions. The model is developed based on a general network superstructure that considers multiple water sources and all water distribution, use and reuse options among operations.

The NLP model developed considers the minimization of an objective function of operating costs related to the total water flow entering the system, subject to linear and non-linear restrictions associated with water and contaminant mass balances, respectively, in each element of the network superstructure (mixers, splitters and water-using operations), as well as design restrictions associated with each of the operations and lower and upper bounds for all decision variables. Nonlinear constraints contain bilinear terms that generate non-convexities in the model and that can lead to the existence of multiple local optimal solutions, where conventional solvers can get trapped or hardly find a global optimal solution.

A deterministic and a stochastic solution approach were used to solve the model. The results show that the deterministic approach solved to global optimality four of the eight case studies from the literature. For the remaining case studies, potentially global optimal solutions were determined within a maximum established solution time. On the other hand, the stochastic approach determined the same solutions obtained through the deterministic approach and also allowed to detect for each case study a set of local optimal solutions, where different network designs result with the same total water consumption. The methodology used proved to be an effective tool to optimally design of water-using networks with multiple contaminants.



# Índice

<b>Agradecimientos .....</b>	<b>i</b>
<b>Resumen .....</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract .....</b>	<b>v</b>
<b>Índice .....</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de figuras .....</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de tablas .....</b>	<b>xv</b>
<b>Acrónimos .....</b>	<b>xvii</b>
<b>Capítulo 1. Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1. Uso del agua en la industria .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2. Redes de uso de agua en los procesos industriales.....</b>	<b>3</b>
1.2.1. Redes de uso de agua sin reúso .....	4
1.2.2. Redes de uso de agua con reúso .....	4
<b>1.3. Problema de síntesis y diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes.....</b>	<b>5</b>
1.3.1. Planteamiento formal del problema de síntesis de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes .....	6
<b>1.4. Metodologías para el diseño de redes usuarias de agua .....</b>	<b>7</b>
1.4.1. Métodos de diseño conceptuales o heurísticos .....	7
1.4.2. Métodos de diseño con programación matemática.....	9
<b>1.5. Estado del arte.....</b>	<b>11</b>
<b>1.6. Objetivos del proyecto .....</b>	<b>20</b>
1.6.1. Objetivos generales .....	20
1.6.2. Objetivos particulares.....	20
<b>1.7. Organización de la tesis.....</b>	<b>21</b>
<b>Capítulo 2. Operaciones usuarias de agua .....</b>	<b>23</b>
<b>2.1. Introducción .....</b>	<b>23</b>
<b>2.2. Operación usuaria de agua de carga másica fija .....</b>	<b>25</b>
<b>2.3. Superestructura general de red con operaciones usuarias de agua de carga     másica fija .....</b>	<b>28</b>

<b>Capítulo 3. Modelo de programación matemática para la síntesis de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes.....</b>	<b>31</b>
<b>3.1. Introducción .....</b>	<b>31</b>
<b>3.2. Descripción del modelo WUN-CD de PNL.....</b>	<b>32</b>
<b>3.3. Modelo WUN-CD de PNL.....</b>	<b>33</b>
<b>3.4. Enfoques de solución del modelo WUN-CD.....</b>	<b>38</b>
3.4.1. BARON.....	38
3.4.2. Metodología de multi-arranque estocástico en dos fases.....	39
<b>Capítulo 4. Resultados y discusión: casos de estudio .....</b>	<b>41</b>
<b>4.1. Introducción .....</b>	<b>41</b>
<b>4.2. Caso de Estudio 4.1.....</b>	<b>42</b>
4.2.1. Superestructura particular para el Caso de Estudio 4.1 .....	43
4.2.2. Modelo asociado a la superestructura particular de red del Caso de Estudio 4.1.....	44
4.2.3. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.1 .....	45
<b>4.3. Caso de Estudio 4.2.....</b>	<b>47</b>
4.3.1. Superestructura particular para el Caso de Estudio 4.2 .....	48
4.3.2. Modelo asociado a la superestructura particular del Caso de Estudio 4.2 .....	49
4.3.3. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.2 .....	51
<b>4.4. Caso de Estudio 4.3.....</b>	<b>52</b>
4.4.1. Superestructura particular para el Caso de Estudio 4.3 .....	54
4.4.2. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.3 .....	55
<b>4.5. Caso de Estudio 4.4.....</b>	<b>58</b>
4.5.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.4 .....	59
<b>4.6. Caso de Estudio 4.5.....</b>	<b>62</b>
4.6.1. Diseño óptimo de red para el caso de estudio 4.5 .....	63
<b>4.7. Caso de Estudio 4.6.....</b>	<b>66</b>
4.7.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.6 .....	67
<b>4.8. Caso de Estudio 4.7.....</b>	<b>70</b>
4.8.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.7 .....	71
<b>4.9. Caso de Estudio 4.8.....</b>	<b>73</b>
4.9.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8 .....	75
<b>4.10. Caso de Estudio 4.9.....</b>	<b>78</b>
4.10.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.9 .....	80

<b>4.11.Caso de Estudio 4.10.....</b>	<b>84</b>
4.11.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.10.....	86
<b>4.12.Comparación de resultados para los casos de estudio abordados.....</b>	<b>90</b>
<b>Capítulo 5. Conclusiones.....</b>	<b>95</b>
<b>5.1. Introducción .....</b>	<b>95</b>
<b>5.2. Contribuciones del proyecto de tesis.....</b>	<b>96</b>
<b>5.3. Conclusiones generales.....</b>	<b>97</b>
<b>5.4. Conclusiones particulares .....</b>	<b>98</b>
<b>5.5. Trabajo a futuro .....</b>	<b>99</b>
<b>Referencias .....</b>	<b>101</b>



## Lista de figuras

Fig. 1.1. Principales industrias con alto consumo de agua (Ranade y Bhandari, 2014). .....	2
Fig. 1.2. Cantidad aproximada de energía requerida para tratar 1m <sup>3</sup> de diversas fuentes de agua para consumo humano (WWAP, 2014).....	3
Fig. 1.3. Esquema de un sistema tradicional de uso de agua en la industria, en donde las operaciones son abastecidas únicamente con agua dulce y no hay reúso de agua entre las operaciones (Bagajewicz, 2000; Sieniutycz y Jezowski, 2018). .....	4
Fig. 1.4. Esquema de un sistema de uso de agua en plantas de proceso en donde las aguas residuales de una operación se reutilizan en otra para reducir el consumo total de agua dulce en el sistema (Bagajewicz, 2000). .....	5
Fig. 1.5. Esquema de la construcción de una curva compuesta en la metodología de Punto de Pliegue (“Water Pinch”). .....	8
Fig. 1.6. Determinación y ubicación del punto de pliegue (“Water Pinch”). .....	9
Fig. 2.1. Ejemplos de operaciones usuarias de agua de carga másica fija: a) lavado de un tanque y, b) columna de absorción (Manan y col. 2004; Klemes 2013). .....	24
Fig. 2.2. Ejemplos de operaciones usuarias de agua de flujo fijo: a) Reactor que produce AN y agua (Manan y col., 2004; Klemes, 2013) y b) torre de enfriamiento (Hill y col. 2013). .....	25
Fig. 2.3. Representación esquemática de una operación usuaria de agua de carga másica fija (Dhole y col., 1996; Mann y Liu, 1999; Sieniutycz y Jezowski, 2018). .....	27
Fig. 2.4. Representación esquemática de una operación usuaria de agua u de carga másica fija con las posibles conexiones entre las fuentes de agua y otras operaciones usuarias de agua (Mann y Liu, 1999). .....	28
Fig. 2.5. Superestructura particular de red que representa todas las conexiones posibles entre las dos fuentes de agua (w1 y w2) y las dos operaciones usuarias de agua (u1 y u2) (sub-sistema de uso de agua de la superestructura de red de Takama y col., (1980)). .....	29
Fig. 2.6. Superestructura general de red para el diseño de redes de agua con W fuentes de agua y U operaciones usuarias de agua de carga másica fija (esquema compacto) (sub-sistema de uso de agua de Ahmetovic y Grossmann, 2011; sub-sistema de uso de agua de Sieniutycz y Jezowski, 2018). .....	30
Fig. 3.1. Metodología de optimización de multi-arranque estocástico (MAE) en dos fases (Núñez-Serna y Zamora, 2016), para el problema de minimización. ....	40
Fig. 4.1. Esquema de solución utilizado para resolver el modelo WUN-CD en cada caso de estudio. ....	42
Fig. 4.2. Diseño reportado por Wang y Smith (1994) para el Caso de Estudio 4.1, con un consumo total de agua dulce de 104 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). .....	43
Fig. 4.3. Superestructura particular de red asociada al Caso de Estudio 4.1. ....	44
Fig. 4.4. Diseño óptimo global para el Caso de Estudio 4.1, con un flujo total mínimo de agua dulce de la fuente w1 de 100.571 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). .....	46
Fig. 4.5. Diseño de red obtenido por Doyle y Smith (1997) para el Caso de Estudio 4.2, con un flujo total de agua dulce reportado de 105.59 t/h y un flujo total verificado de 105.602 t/h, usando el modelo WUN-CD. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los	

contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).....	48
Fig. 4.6. Superestructura particular de red asociada al Caso de Estudio 4.2. ....	49
Fig. 4.7. Diseño de red asociado a una solución óptima global obtenida con BARON, para el Caso de Estudio 4.2, con un flujo total mínimo de agua dulce de 105.602 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	51
Fig. 4.8. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.3, reportado por Wang y col. (2012), con un flujo total de agua dulce de 140.93 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h))......	54
Fig. 4.9. Superestructura particular de red para el Caso de Estudio 4.3. ....	55
Fig. 4.10. Diseño óptimo de red asociado a la mejor solución obtenida y reportada por BARON para el Caso de Estudio 4.3, con un flujo total mínimo de agua dulce de 139.7 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	56
Fig. 4.11. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.3, asociado a la solución obtenida en la primera iteración de la metodología MAE, con un flujo total mínimo de agua fresca de 139.7 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	57
Fig. 4.12. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.4, reportado por Liu y col. (2009), con un flujo total de agua dulce de 174.952 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	59
Fig. 4.13. Diseño óptimo de red asociado a la solución obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.4, con un flujo total mínimo de agua dulce de 174.028 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	60
Fig. 4.14. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.4, obtenido en la iteración 648 de la metodología MAE, con un consumo total mínimo de agua dulce de 174.028 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	61
Fig. 4.15. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.5, reportado por Zhao y col. (2014), con un flujo total de agua dulce en la red de 51.433 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	63
Fig. 4.16. Diseño de red asociado a una solución óptima global determinada con el resolvidor BARON para el Caso de Estudio 4.5, con un flujo total mínimo de agua dulce de 50.442 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	64
Fig. 4.17. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.5, obtenido en la primera iteración de la metodología MAE, con un flujo total mínimo de agua dulce de 50.442 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). ....	65
Fig. 4.18. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.6, con un flujo total de agua de 111.8 t/h, reportado por Kuo y Smith (1998) y un flujo total de agua fresca verificado, utilizando el modelo WUN-CD, de 111.813 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h))......	67

Fig. 4.19. Diseño óptimo de red asociado a la mejor solución reportada por BARON para el Caso de Estudio 4.6, con un flujo total mínimo de agua de 111.813 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	68
Fig. 4.20. Diseños óptimos de red asociados a dos soluciones óptimas locales obtenidas con la metodología MAE. Ambos diseños de red utilizan el mismo flujo total mínimo de agua dulce de 111.813 t/h. a) Diseño de red que se obtuvo en la primera iteración. b) Diseño óptimo de red que se obtuvo en la iteración 408. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	69
Fig. 4.21. Diseño de red reportado por Calixto y col. (2015) para el Caso de Estudio 4.7, con un flujo total de 81.222 t/h de agua dulce. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	71
Fig. 4.22. Diseño de red asociado a una solución óptima global obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.7, con un flujo total mínimo de agua dulce de 81.222 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	71
Fig. 4.23. Diseño óptimo de red alternativo para el Caso de Estudio 4.7, obtenido en la segunda iteración de la metodología MAE en un tiempo de 0.118 segundos de CPU, con un flujo total mínimo de agua dulce de 81.222t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	72
Fig. 4.24. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, reportado por Leewongtanawit y Kim, 2008, con un costo total anual de operación de 2,013,980.68 \$/año, asociado un flujo másico total de agua de 611.998 t/h y un flujo másico total de agua verificado con el modelo WUN-CD de 612.004 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	75
Fig. 4.25. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, asociado a una solución óptima global determinada con el resolvidor BARON, con un costo anual de operación mínimo de 1,995,754.86 \$/año, asociado a un flujo másico total de agua de 590.805 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	76
Fig. 4.26. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, asociado a la solución óptima local que se obtuvo en la iteración número 45 de la metodología MAE, con un flujo másico total de las fuentes de agua de 590.805 t/h y un costo total anual de operación mínimo de 1,995,754.86 \$/año. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	78
Fig. 4.27. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.9, asociado a la solución reportada por BARON y a la solución obtenida en la tercera iteración de la metodología MAE. Este diseño tiene un flujo total de agua de 177.261 t/h, cuyo costo anual de operación asociado es de 871,047.9 \$/año. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	82
Fig. 4.28. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.9, asociado a la solución obtenida en la iteración 393 de la metodología MAE, con un consumo total de agua de 212.11 t/h, cuyo mínimo costo total anual de operación asociado es de 930,577.33 \$/año. Este diseño utiliza la menor cantidad de agua de la fuente w1, sin embargo, es el diseño que utiliza el mayor flujo total de agua de las fuentes de las soluciones obtenidas con la metodología MAE. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en	

	(t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). .....	83
Fig. 4.29.	Diseño óptimo de red asociado a una solución óptima global obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.10, con un costo total anual de operación mínimo de 3,068,764.64 \$/año, asociado a un flujo másico total de agua de 367.876 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)). .....	88
Fig. 4.30 .	Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.10, asociado a la solución óptima local obtenida en la iteración 420 de la metodología MAE. Este diseño tiene un costo total anual de operación mínimo de 3,068,764.64 \$/año, correspondiente a un flujo másico total de agua de 367.876 t/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (t/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).	89

## Lista de tablas

Tabla 1.1. Características de modelos de PNL de la literatura que se han desarrollado para el problema de diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes. ....	10
Tabla 4.1. Datos límite para el Caso de Estudio 4.1 [Wang y Smith (1994)]. ....	43
Tabla 4.2. Datos límite para el Caso de Estudio 4.2 [Doyle y Smith (1997)]. ....	47
Tabla 4.3. Datos límite para el Caso de Estudio 4.3 [Wang y col. (2003)]. ....	53
Tabla 4.4. Comparación de los flujos totales de agua asociados a los diseños de red reportados en la literatura para el Caso de Estudio 4.3. ....	57
Tabla 4.5. Datos límite para el Caso de Estudio 4.4. [Wang y col. (2003)]. ....	58
Tabla 4.6. Diferentes soluciones óptimas locales obtenidas con la metodología MAE, para el Caso de Estudio 4.4. ....	61
Tabla 4.7. Datos límite para el Caso de Estudio 4.5. [Zhao y col. (2014)]. ....	63
Tabla 4.8. Diferentes soluciones óptimas locales obtenidas con la metodología MAE, para el Caso de Estudio 4.5. ....	65
Tabla 4.9. Datos límite para el Caso de Estudio 4.6. [Kuo y Smith (1998)]. ....	66
Tabla 4.10. Datos límite para el Caso de Estudio 4.7. [Doyle y Smith, (1997)]. ....	70
Tabla 4.11. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.8. [Leewongtanawit y Kim, 2008]. ....	73
Tabla 4.12. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.8. [Leewongtanawit y Kim, 2008]. ....	74
Tabla 4.13. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.9. ....	79
Tabla 4.14. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.9. ....	80
Tabla 4.15. Soluciones óptimas obtenidas con la metodología MAE para el Caso de Estudio 4.9. ....	81
Tabla 4.16. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.10. ....	85
Tabla 4.17. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.10. ....	85
Tabla 4.18. Comparación de resultados reportados en la literatura y los resultados obtenidos en este trabajo. ....	91



## Acrónimos

BB	Ramificación y acotamiento (“ <i>Branch and Bound</i> ”)
CBC	Coin-or Branch and Cut
CPC	Conceptos de potencial de concentración (“ <i>Concentration Potential Concepts</i> ”)
CPD	Potencial de concentración de la demanda (“ <i>Concentration Potential of the Demand</i> ”)
CPS	Potencial de concentración de la fuente (“ <i>Concentration Potential of the Source</i> ”)
EA	Algoritmos evolutivos (“ <i>Evolution Algorithms</i> ”)
FF	Flujo fijo (“ <i>Fixed Flowrate</i> ”)
FL	Carga fija (“ <i>Fixed Load</i> ”)
GA	Algoritmos genéticos (“ <i>Genetic Algorithms</i> ”)
GAMS	General Algebraic Modeling System
GRG	Generalized Reduced Gradient
H	Procesos principales (“ <i>Head Processes</i> ”)
HENS	Síntesis de redes de intercambiadores de calor (“ <i>Heat-Exchangers Networks Synthesis</i> ”)
I	Procesos intermedios (“ <i>Intermediate Processes</i> ”)
MAE	Multi-Arranque Estocástico
MENS	Síntesis de redes de intercambiadores de masa (“ <i>Mass-Exchange Networks Synthesis</i> ”)
MSA	Agente de separación de masa (“ <i>Mass-Separating Agent</i> ”)
NNA	Nearest Neighbor Algorithm
OLB	Cota o límite inferior total (“ <i>Overall Lower Bound</i> ”)

OUB	Cota o límite superior total (“ <i>Overall Upper Bound</i> ”)
PL	Programación Lineal
PL-EM	Programación Lineal Entera-Mixta
PNL	Programación No Lineal
PNL-EM	Programación No Lineal Entera-Mixta
PSA	Algoritmos de enjambres de partículas (“ <i>Particle Swarm Algorithms</i> ”)
RKC	Componente o contaminante clave de reúso (“ <i>Reuse Key Component</i> ”)
SCIP	Solving Constraint Integer Problems
SQP	Successive Quadratic Programming
WAP	Problema de asignación de agua (“ <i>Water Allocation Problem</i> ”)
WSD	Diagrama de fuentes de agua (“ <i>Water Sources Diagram</i> ”)
WUN-CD	Water-Using Networks – Conceptual Design
WUNS	Síntesis de redes usuarias de agua (“ <i>Water-Using Networks Synthesis</i> ”)
WWAP	United Nations World Water Assesment Programme

# Capítulo 1. Introducción

## 1.1. Uso del agua en la industria

La extracción y la demanda de agua dulce se han incrementado en el sector industrial. Al mismo tiempo, la disponibilidad de agua dulce (aguas superficiales y subterráneas) y el acceso a la misma ha disminuido con el desarrollo industrial y el crecimiento de la población a nivel mundial. El sector industrial representa el 19% de las extracciones de agua dulce en todo el mundo (WWAP, 2019), en donde las industrias que destacan con los porcentajes más altos de extracción de agua dulce son la industria química, la industria metalúrgica, la industria papelera, la industria de bebidas y la industria alimenticia (WWAP, 2014; WWAP, 2015). Debido a ello, el costo del agua está aumentado a tal nivel que se puede comparar con el costo de cualquier otro insumo o materia prima utilizada en la industria.

En la industria de procesos, que incluye productos químicos, petroquímicos, refinación de petróleo, productos farmacéuticos, pulpa y papel, metales y minerales, generación de energía eléctrica a partir de vapor y productos alimenticios y de consumo (Mann y Liu, 1999), el agua es utilizada como materia prima, reactivo, agente de separación, medio de transporte de calor, en la generación de vapor, como agente de limpieza, disolvente inerte y medio de transporte de materiales (Huang y col., 1999; WWAP, 2014; Ranade y Bhandari, 2014). Por ejemplo, en la industria química y petroquímica, el agua se utiliza en procesos de extracción con vapor, extracción líquido-líquido y operaciones de lavado. En las refinerías, el agua se utiliza como vapor en el fraccionamiento de crudo, en la coquización, hidrocraqueo, craqueo catalítico fluidizado e hidrot ratamiento. En la industria alimenticia, el agua se utiliza en operaciones de lavado y en la generación de vapor (Bagajewicz, 2000).

Entre las industrias con mayor uso y consumo de agua se encuentra la industria del papel, fertilizantes químicos, refinación de petróleo y la industria azucarera. En la Fig. 1.1 se muestran los rangos de consumo de agua en litros por tonelada de producto para las industrias referidas. Cabe mencionar que, la generación de aguas residuales en el sector industrial es proporcional al consumo de agua dulce.

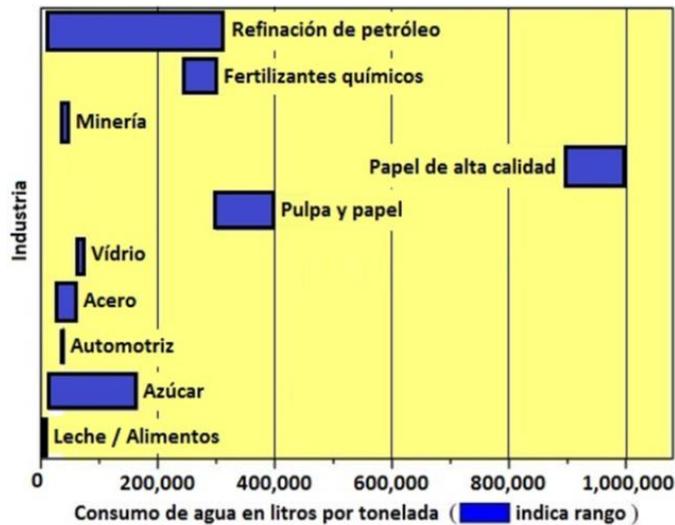


Fig. 1.1. Principales industrias con alto consumo de agua (Ranade y Bhandari, 2014).

La industria de procesos es uno de los mayores generadores de aguas residuales y se estima que se duplique la cantidad de aguas residuales para el año 2025 (WWAP, 2017). Las industrias que descargan efluentes en los sistemas municipales o en aguas superficiales deben cumplir con ciertas regulaciones de descarga en los niveles de contaminantes emitidos para evitar multas. Sin embargo, en la industria existen pocos incentivos y algunos obstáculos con respecto al cumplimiento de las regulaciones de las descargas de aguas residuales; los obstáculos pueden incluir su aplicación, costos que no superen los beneficios, periodos prolongados de recuperación, mantenimiento y aumento en el consumo de energía (WWAP, 2017). Por lo tanto, a las industrias les resulta más económico pagar multas que invertir en el tratamiento de las aguas residuales para cumplir con las regulaciones ambientales (WWAP, 2015).

Aunque los procesos industriales son capaces de utilizar agua de diferente calidad, algunos procesos requieren agua con algún tipo de tratamiento previo para poder utilizarla. Sin embargo, el tratamiento de aguas residuales requiere de una cierta cantidad de energía y las etapas de tratamiento necesario aumentan a medida que disminuye la calidad del agua (Fig. 1.2). De acuerdo con la Fig. 1.2, se requiere aproximadamente el doble de energía para tratar aguas residuales en comparación con la energía necesaria para tratar el agua de un río o lago. Esto implica que las opciones más económicas y, por ende, con un menor consumo de energía sean, la extracción de agua de una fuente externa sin tratar o tratar las aguas residuales hasta los estándares mínimos para su descarga, en lugar de tratarlas completamente para su reutilización como agua de proceso.

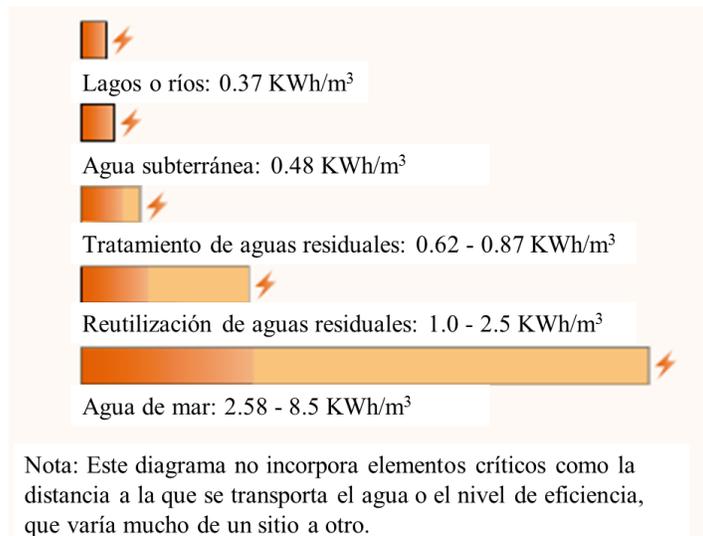


Fig. 1.2. Cantidad aproximada de energía requerida para tratar 1m<sup>3</sup> de diversas fuentes de agua para consumo humano (WWAP, 2014).

Se estima que para el 2030 el mundo enfrentará un déficit global de agua del 40%. Esto obliga a las industrias a buscar fuentes alternativas de suministro de agua. La seguridad sostenible del agua no se logrará a través de enfoques convencionales en la gestión de los recursos hídricos (WWAP, 2018). Por lo tanto, el empleo de tecnologías y enfoques sistemáticos de diseño de los sistemas que usan agua en las industrias de proceso para incrementar el uso eficiente del agua son importantes, no solo para reducir costos de extracción, suministro, distribución y uso de agua dulce asociada a las plantas de proceso, sino también, para reducir costos y emisiones ambientales asociadas con el uso y descarga de aguas residuales.

## 1.2. Redes de uso de agua en los procesos industriales

Las redes de uso de agua en las industrias se refieren a los sistemas en donde se distribuye agua dulce desde una o varias fuentes disponibles de agua, y ésta se usa en las operaciones o unidades que conforman el sistema. En las redes de agua también se contemplan los factores que disminuyen la calidad del agua en cada uno de los procesos en donde es utilizada, como son los múltiples contaminantes que se descargan o transfieren al agua en las operaciones. Estas redes se representan mediante un esquema topológico que incluye información acerca de las corrientes de agua, las concentraciones de los contaminantes presentes en las corrientes de agua que ingresan y salen en cada operación y la carga másica de los múltiples contaminantes que transfieren en cada operación.

### 1.2.1. Redes de uso de agua sin reúso

Las redes de uso de agua en donde no se aplica el reúso (Fig. 1.3), se refieren a los sistemas en donde las operaciones son abastecidas únicamente con agua dulce; esto implica una alta demanda de agua por parte de los procesos e inherentemente tiene como consecuencia la generación de grandes volúmenes de efluentes (Sieniutycz y Jezowski, 2018). El diseño de estos sistemas está determinado por el número de operaciones usuarias de agua, sus características de operación y el consumo de agua dulce en cada una de ellas.

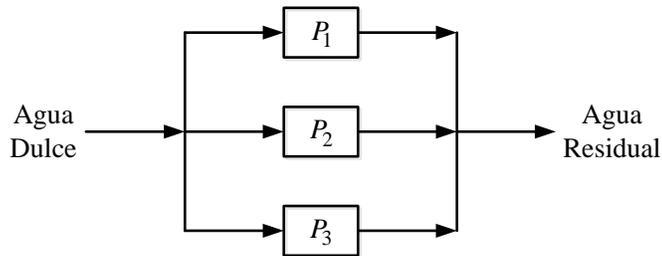


Fig. 1.3. Esquema de un sistema tradicional de uso de agua en la industria, en donde las operaciones son abastecidas únicamente con agua dulce y no hay reúso de agua entre las operaciones (Bagajewicz, 2000; Sieniutycz y Jezowski, 2018).

En la actualidad, aún existen industrias que operan bajo este sistema de uso de agua (Sieniutycz y Jezowski, 2018). La reducción en el consumo total de agua en la red se puede lograr mediante el uso planificado del agua de proceso dentro del sistema, es decir, reutilizar y reciclar la mayor cantidad posible de agua de proceso o mezclar parcialmente las corrientes de agua para diluir y obtener un nivel aceptable de las concentraciones de los contaminantes antes de utilizarse en otra operación, siempre y cuando la operación lo permita.

### 1.2.2. Redes de uso de agua con reúso

Los sistemas con reúso de agua (Fig. 1.4) buscan la oportunidad de reutilizar directamente las aguas residuales sin tratar que salen de una operación para satisfacer la demanda de otra, siempre y cuando, la calidad de las aguas residuales sea suficiente para el propósito previsto (WWAP, 2017) y no interfiera con las condiciones límite de la operación en donde el agua se reutilizará (Wang y Smith, 1994). También existe la posibilidad de reutilizar las aguas residuales en la misma operación en la que se generaron, a esto se le conoce como reciclado local.

En estos sistemas es posible reducir el consumo total de agua, considerando todas las posibilidades de integración, distribución, uso y reúso de agua entre las operaciones. Sin embargo, diseñar este tipo de sistemas no es una tarea sencilla, no solo basta contar con las concentraciones límites admisibles y las cargas másicas de los contaminantes en cada

operación, sino que es necesario especificar una topología que permita consumir la menor cantidad de agua en la red e integre a todos los procesos usuarios de agua.

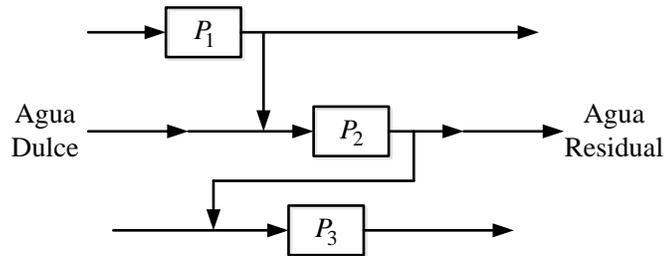


Fig. 1.4. Esquema de un sistema de uso de agua en plantas de proceso en donde las aguas residuales de una operación se reutilizan en otra para reducir el consumo total de agua dulce en el sistema (Bagajewicz, 2000).

La escasez y el aumento en el consumo de agua dulce en las industrias de proceso está impulsando el uso de metodologías sistemáticas para el diseño de las redes de agua (ver Bagajewicz (2000), Jezowski (2010) y Khor y col. (2014)). Estas metodologías sistemáticas buscan resolver el problema de integrar en una misma red a las operaciones que utilizan agua, considerando simultáneamente la interacción entre ellas, reduciendo el consumo total de agua dulce para eventualmente, reducir los costos de capital y operación asociados a la red. A este problema se le conoce como problema de asignación de agua (“*Water Allocation Problem*”, WAP) o síntesis de redes usuarias de agua (“*Water-Using Network Synthesis*”, WUNS). Un buen diseño de una red puede facilitar al mismo tiempo, la distribución óptima de los recursos hídricos (fuentes de agua dulce o parcialmente contaminada) para satisfacer las demandas de los procesos usuarios de agua, reducir la generación de aguas residuales y mejorar la eficiencia relacionada con el uso de agua en las operaciones y en toda la red.

Se pueden lograr efectos significativos de reducción y uso de agua en los procesos mediante la optimización de las redes de agua en las industrias de proceso, todo ello bajo el enfoque de reducir el consumo de agua en los procesos e identificando oportunidades de reutilización de agua.

### 1.3. Problema de síntesis y diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes

El problema de síntesis y diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes consiste en obtener un diseño o topología de red que integre y considere en su conjunto a las operaciones individuales que usan agua, de tal forma que, a cada operación se le asigne la cantidad y la calidad óptima de agua para maximizar la reutilización de agua entre las operaciones, minimizar el consumo total de agua en la red y minimizar la descarga de aguas residuales. El estudio de las operaciones usuarias de agua se realiza de forma conceptual,

esto permite una descripción simplificada (Dhole y col, 1996) para enfocarse únicamente en las corrientes de agua, en las cargas másicas de los contaminantes que se descargan o transfieren hacia las corrientes de agua a través de las operaciones y, en las restricciones de concentraciones límites de contaminantes en la entrada y salida en cada operación usuaria de agua.

En el diseño de la red deben de considerarse todas las posibilidades de uso de agua fresca en cada operación, de reúso de agua entre las operaciones y la posibilidad de mezclar las corrientes de agua con las corrientes de reúso de agua de otros procesos. El diseño de estos sistemas es un problema complejo, ya que pueden existir una variedad de diseños que cumplen con las características deseadas. Sin embargo, no se puede tener la certeza de que sean buenos diseños o de que el diseño reduzca lo más posible el consumo total de agua dulce.

### **1.3.1. Planteamiento formal del problema de síntesis de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes**

A continuación, se describe formalmente el problema de síntesis de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes que se aborda en éste trabajo.

Dada la siguiente información:

- Un conjunto de contaminantes.
- Un conjunto de operaciones usuarias de agua, que se especifican por:
  - la carga másica (kg/h) de cada contaminante que se transfiere a la corriente de agua en cada operación,
  - las concentraciones límites de los contaminantes (ppm) en la entrada y salida de cada operación
- Un conjunto de fuentes de agua, que se especifican por:
  - sus concentraciones de contaminantes (ppm),
  - el flujo máximo de agua que puede suministrar (t/h) cada fuente.

Con base en la información de los contaminantes, las operaciones usuarias de agua y las fuentes de agua, el problema de síntesis de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes consiste en:

Determinar una configuración o topología óptima de red, así como el valor de los flujos másicos de agua (t/h) y las concentraciones de los contaminantes (ppm) en puntos intermedios de la red, los cuales cumplen con las restricciones en cada operación y permiten reducir al mínimo el consumo total de agua dulce en la red.

Para abordar este problema se consideran las siguientes suposiciones de trabajo:

- No hay pérdidas de agua a través de las operaciones y en el sistema.
- Las cargas másicas de los contaminantes que se transfieren en las operaciones son constantes.
- La red opera en estado estacionario, isobárico e isotérmico.

Las suposiciones antes enlistadas se utilizan para reducir la complejidad del problema abordado. En la literatura generalmente se asume que no hay pérdidas de agua en las operaciones. Sin embargo, existen dos enfoques de modelado conceptual para una operación usuaria de agua: el primer enfoque se centra en las operaciones en donde se transfiere una carga másica fija de contaminantes desde una corriente de proceso ficticia hacia una corriente de agua; a estas operaciones se les denomina operaciones de carga másica fija (“*Fixed Load*”, FL) y el segundo enfoque se centra en las operaciones en donde se consideran las concentraciones de los contaminantes de salida fijas y no se considera explícitamente la transferencia de una carga másica, pero puede haber pérdida o ganancia de agua a través de la operación; a estas operaciones se les denomina operaciones de flujo fijo (“*Fixed Flowrate*”, FF). Los enfoques se aplican dependiendo de cuál describa mejor una operación o proceso. Por ejemplo, en una operación de desalado de crudo se considera que existe una transferencia de una carga másica fija de sales, mientras que una torre de enfriamiento se considera como una operación de flujo fijo porque directamente no hay una transferencia de una carga másica fija de contaminantes, hay pérdidas de agua por evaporación y la concentración de salida se puede fijar.

Algunos de los autores que consideran operaciones usuarias con pérdidas o ganancia de agua, por mencionar algunos: Wang y Smith, (1995); Huang y col., (1999); Ahmetović y Grossmann, (2011); Fan y col., (2012); y Sieniutycz y Jezowski, (2018).

## **1.4. Metodologías para el diseño de redes usuarias de agua**

Existen dos enfoques generales para abordar el problema de síntesis y diseño de redes usuarias de agua. Por una parte, están los métodos conceptuales o heurísticos, y por la otra los métodos de programación matemática.

### **1.4.1. Métodos de diseño conceptuales o heurísticos**

Los métodos de diseño conceptuales están basados en la jerarquización de los sistemas de proceso (Douglas, 1988). Se comienza por el diseño de los equipos críticos como el reactor o el sistema de reactores y se continua con el diseño del sistema de separación, después el diseño de la red de intercambiadores de calor, el diseño de los sistemas auxiliares y, por último, el diseño de la estructura o el sistema de control. El método

conceptual más representativo para el diseño de redes usuarias de agua es el método de punto de pliegue para agua o “*Water Pinch*”, presentado por Wang y Smith (1994).

En la metodología de punto de pliegue para el diseño de redes de uso de agua que involucran un solo contaminante se determina la meta del flujo total mínimo de agua requerido para el diseño de una red mediante un enfoque gráfico. Este enfoque gráfico consiste en jerarquizar de menor a mayor las operaciones con base en sus perfiles de concentración para un solo contaminante (Fig. 1.5a), para construir una curva compuesta de concentraciones (El-Halwagi y Manousiouthakis, 1989) que está en función de la carga másica que se transfiere en cada unidad usuaria (Fig. 1.5b) y una línea de suministro de agua dulce. El punto en donde se toca la curva compuesta con la línea de suministro se denomina punto de pliegue (Fig. 1.6). El punto de pliegue identifica el “cuello de botella” en donde las fuerzas motrices de transferencia de masa de estrechan en el sistema y permite calcular la pendiente de la línea de suministro de agua dulce que representa o determina el flujo mínimo de agua que se requiere para diseñar la red. Una vez que se determina el flujo mínimo de agua dulce requerida, la tarea siguiente consiste en realizar el diseño de la red para el flujo mínimo de agua calculado.

Wang y Smith (1994) propusieron dos métodos de diseño usando un diagrama de malla. El primer método consiste en maximizar la diferencia de concentraciones entre la curva compuesta y la línea de suministro de agua, en donde el diseño se realiza por intervalos verticales de carga másica; este método se conoce como método de máximas fuerzas motrices (“*maximum driving forces*”). El segundo método de diseño consiste en reducir el número de divisiones de una fuente de agua, es decir, sólo se divide una fuente de agua cuando lo requiera una operación usuaria para cubrir su demanda de agua, y el diseño se realiza por intervalos horizontales de concentración; este método se conoce como método del número mínimo de fuentes de agua (“*minimum number of water sources*”).

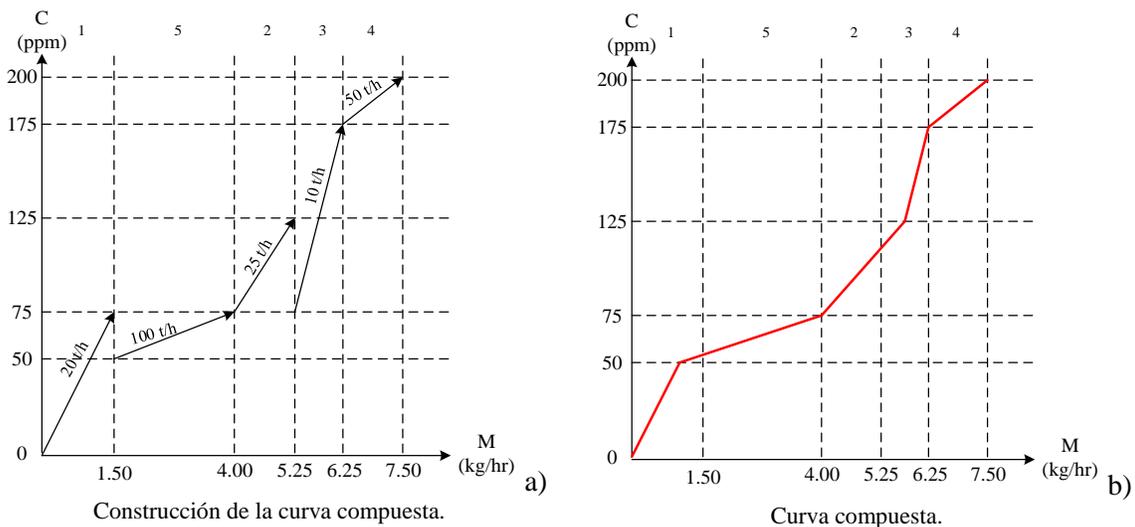


Fig. 1.5. Esquema de la construcción de una curva compuesta en la metodología de Punto de Pliegue para agua (“*Water Pinch*”).

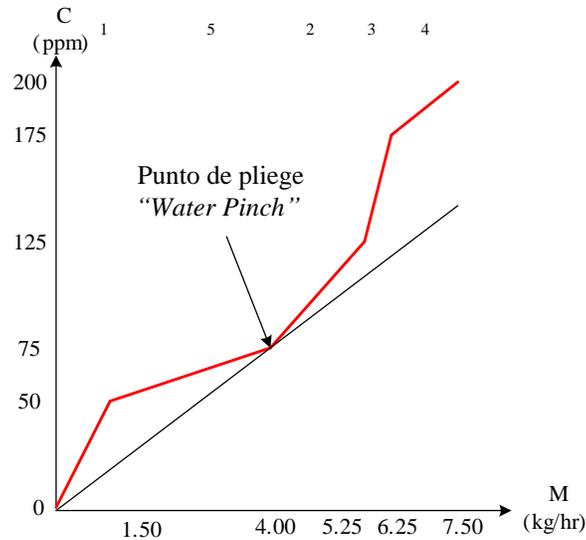


Fig. 1.6. Determinación y ubicación del punto de pliegue ("Water Pinch").

La metodología de Punto de Pliegue está bien definida para problemas que involucran un solo contaminante; sin embargo, la extensión de esta metodología para abordar el problema de múltiples contaminantes (Wang y Smith, 1994) no ha brindado resultados satisfactorios, especialmente porque su implementación resulta impráctica a medida que aumenta el número de contaminantes y operaciones (Doyle y Smith, 1997), además de que no garantiza obtener un diseño de red óptimo (Bagajewicz, 2000) de forma rigurosa.

#### 1.4.2. Métodos de diseño con programación matemática

Los métodos de diseño con programación matemática están basados en el uso de teoremas, algoritmos, métodos y técnicas propios del área de la optimización. Para el diseño de las redes usuarias de agua se utilizan modelos de optimización que permiten describir el problema de diseño con base en una función objetivo que mide el costo/beneficio de la decisión o en este caso, del diseño que se obtiene. En un modelo la función objetivo está sujeta a un conjunto de restricciones de igualdad y desigualdad que describen la naturaleza o las características de los elementos que forman o van a formar la red.

En la Tabla 1.1 se enlistan algunas de las características de los modelos matemáticos de programación no lineal (PNL) o programación no lineal entera-mixta (PNL-EM) que se han desarrollado para el diseño óptimo de redes de agua. Estos modelos permiten abordar problemas más complejos que la metodología de punto de pliegue no garantiza resolver óptimamente. Los modelos se desarrollan con base en una representación generalizada que contiene diferentes topologías o diseños de red, y a esta representación esquemática se le

conoce como superestructura de red. La solución del modelo permite determinar una topología óptima de entre todas las topologías o diseños contenidos en la superestructura. Además, los modelos matemáticos permiten incorporar restricciones adicionales de diseño, costos de capital y operación (Khor y col. 2014) que no se consideran en la metodología de Punto de Pliegue.

Tabla 1.1. Características de modelos de PNL de la literatura que se han desarrollado para el problema de diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes.

Autores y modelo	Superestructura	Variables del modelo	Ecuaciones en donde aparecen términos bilineales
Doyle y Smith, (1997). Modelo de PNL	Sub-sistema de uso de agua de la Superestructura de Takama y col., (1980)	Flujos de agua y concentraciones de contaminantes	Balances de materia en mezcladores y operaciones usuarias de agua
Teles y col., (2008). Modelo de PNL	Superestructura de Doyle y Smith, (1997), con múltiples fuentes de agua y operaciones de flujo fijo	Flujos de agua y concentraciones de contaminantes	Balances de materia en mezcladores, operaciones usuarias de agua y en los mezcladores de las operaciones de flujo fijo
Li y Chang, (2011). Modelo de PNL y PNL-EM	Superestructura con múltiples fuentes y múltiples sumideros de agua	Flujos de agua, concentraciones de contaminantes (PNL) y variables binarias asociadas a los flujos de agua (PNL-EM)	Balances de materia en mezcladores, operaciones usuarias de agua y en los mezcladores de los sumideros de agua

Un problema inherente a los métodos de programación matemática para el diseño de redes usuarias de agua es que, dan lugar a problemas de PNL no convexa que pueden conducir a múltiples soluciones óptimas locales. La no linealidad y la no convexidad se da por la presencia de términos bilineales que aparecen en los balances de materia para los contaminantes (Tabla 1.1). Debido a esta problemática se han propuesto diversas alternativas para enfrentar las dificultades en la determinación de una buena solución óptima local o global. Estas alternativas se pueden clasificar a grandes rasgos en (Jezowski, 2010): i) linealización directa, ii) generación de “buenos” puntos de arranque, iii) procedimientos de solución secuencial, iv) enfoques de optimización meta-heurística y v) optimización global determinista; en donde las últimas dos son las más representativas.

Existen dos vertientes dentro de la programación matemática para la solución de estos modelos. La primera se refiere a los algoritmos de optimización global determinista, que generalmente usan técnicas de ramificación y acotamiento (“*Branch and Bound*”, BB) para explorar el espacio de solución y determinar una solución óptima global. La segunda se refiere a los algoritmos de optimización estocástica o meta-heurística, en donde el procedimiento de búsqueda se realiza de forma local y global; algunas de las técnicas metaheurísticas de búsqueda se basan en el comportamiento de enjambres (“*Particle*

*Swarm Algorithms*”, PSA), en la selección natural (“*Genetic Algorithms*”, GA) o en los procesos de evolución (“*Evolution Algorithms*”, EA). Sin embargo, las metodologías metaheurísticas no aseguran determinar una solución óptima global.

## 1.5. Estado del arte

En esta sección se realiza una revisión del estado del arte en la síntesis y diseño de redes usuarias de agua, donde se describirán los principales aportes y las diferencias respecto a los enfoques de modelado y solución que se han utilizado en la literatura.

Takama y col. (1980) fueron los pioneros en abordar mediante un enfoque de optimización el problema de la asignación óptima de agua en una refinería de petróleo. Para este problema, ellos propusieron una superestructura de red que integra un sistema de operaciones usuarias de agua y un sistema de operaciones de tratamiento de aguas residuales. Con base en la superestructura, desarrollaron un modelo no convexo de PNL. Sin embargo, debido a la complejidad del problema, para su solución proponen descomponerlo en una serie de problemas sin restricciones e introducen una función de penalización para reducir la complejidad de la estructura del sistema mediante un proceso iterativo de solución utilizando el método “*Complex*”, desarrollado por Box (1965).

El-Halwagi y Manousiouthakis (1989) abordan conceptualmente el problema de síntesis de redes de intercambio de masa (“*Mass-Exchange Networks Synthesis*”, MENS), en donde en cada intercambiador de masa se transfiere, por contacto directo, una carga másica de contaminantes desde una corriente de proceso rica hacia una corriente de proceso pobre o hacia una agente de separación de masa (“*Mass-Separating Agent*”, MSA). Para abordar el diseño de las redes de intercambio de masa, se define una curva compuesta para la corriente de proceso rica y otra curva compuesta para la corriente de proceso pobre, ambas curvas representan el intercambio de masa de las especies en una operación. Estos autores adaptaron las curvas compuestas de la metodología de Punto de Pliegue para la síntesis de redes de intercambio de calor (“*Heat Exchanger Network Synthesis*”, HENS), desarrollada por Linnhoff y Hindmarsh, (1983).

Wang y Smith (1994) abordan el problema de la minimización de aguas residuales, que equivale a la minimización del uso de agua dulce en un sistema de operaciones usuarias de agua. Para reducir la generación de aguas residuales proponen 3 cambios esenciales en el sistema: i) la reutilización directa de las aguas residuales generadas (“*re-use*”), ii) la reutilización de aguas residuales que han sido tratadas parcialmente (“*regeneration re-use*”) y iii) el reciclaje de agua que se ha regenerado, es decir, el reúso de agua residual a la cual se le han removido parcialmente los contaminantes acumulados (“*regeneration recycling*”). Los autores desarrollan un enfoque heurístico para determinar el flujo mínimo de agua requerido para el diseño de una red, mediante la construcción de un diagrama de una curva

compuesta de concentraciones. Una vez que se determina el flujo mínimo de agua, se realiza el diseño de red, ya sea por un método de máximas fuerzas motrices o un método basado en la selección del menor número de fuentes de agua, usando un diagrama de malla. Este enfoque es efectivo para problemas que involucran un solo contaminante, sin embargo, su aplicación para problemas con múltiples contaminantes resulta impráctico. Este enfoque de diseño se conoce como “*Water Pinch*”. Más tarde, Wang y Smith (1995) extendieron la aplicación de esta metodología para abordar operaciones usuarias en donde se consideran pérdidas o ganancia de agua e introducen el concepto de reciclaje local, el cual puede ser usado para mantener los requerimientos de flujo o ajustar las concentraciones de los contaminantes en una operación.

Doyle y Smith (1997) presentan un enfoque secuencial para el diseño de una red usuaria de agua, basado en la solución de un modelo de PNL asociado a una superestructura que contempla el reúso y reciclaje de agua entre los procesos. El enfoque secuencial consiste en resolver un modelo de programación lineal (PL), que se obtiene de fijar en el modelo de PNL las variables de concentración de contaminantes en el límite admisible a la salida de las operaciones usuarias de agua. El modelo de PL se resuelve y la solución óptima se utiliza como punto de inicio para resolver el modelo de PNL original y obtener un diseño final de red.

Huang y col. (1999) desarrollaron un modelo de PNL con base en una superestructura que integra un sistema de operaciones usuarias de agua y un sistema de tratamiento de aguas residuales. La superestructura incorpora tres nuevas características: i) múltiples fuentes de agua, ii) múltiples sumideros de agua, y iii) consideran la pérdida de agua a través de las operaciones usuarias. En su modelo utilizan dos funciones objetivo, la primera considera el costo de operación en la red utilizando factores de peso para reflejar los costos relativos al uso de agua y al tratamiento de aguas residuales, respectivamente. La segunda función objetivo contempla, desde el punto de vista de la conservación de agua, el diseño de una red que utilice la menor cantidad de agua dulce. Para resolver su modelo de PNL propuesto, utilizan la metodología de Punto de Pliegue para agua, con la finalidad de generar una solución factible como punto de inicio; por lo tanto, si el diseño de red obtenido con la metodología de Punto de Pliegue no es un diseño competitivo, esta metodología no asegura obtener una buena solución óptima local.

Savelski y Bagajewicz (2000) establecieron condiciones analíticas para determinar que una solución asociada a un diseño de red es óptima, en particular para el problema que considera un solo contaminante y la reutilización de aguas residuales. Una de las condiciones analíticas consiste en que el contaminante alcanza su concentración límite de salida en todas las operaciones que únicamente utilizan agua dulce. Sin embargo, pueden existir soluciones óptimas no deseables, que se denominan soluciones degeneradas, en donde el flujo de agua a través de una operación es mayor, lo que le impide al contaminante alcanzar a su concentración límite de salida, esto se puede presentar en más de una

operación usuaria de agua en la red. A esta condición se le conoce como condición necesaria de concentraciones máximas de salida (“*necessary condition of maximum outlet concentration*”). Otra condición es que la concentración de salida en cada proceso usuario de agua no puede ser menor que la concentración de las aguas residuales mezcladas que provienen de todos los precursores (todas las operaciones que envían aguas residuales a un proceso en particular). A esta condición se le conoce como condición necesaria de monotonicidad de la concentración (“*necessary condition of concentration monotonicity*”). Posteriormente, Savelski y Bagajewicz (2003) extendieron las condiciones analíticas para determinar que una solución asociada a un diseño de red es óptima cuando en el problema se consideran múltiples contaminantes. Para aplicar estas condiciones se debe identificar el o los contaminantes clave en cada operación. Un contaminante clave se define como aquel que alcanza primero su concentración máxima de salida en los procesos que solo utilizan agua dulce. La condición necesaria de concentración máxima de salida y la condición necesaria de monotonicidad de la concentración se aplican solo al contaminante clave. Sin embargo, el contaminante clave puede variar de proceso a proceso y esto complica su identificación en los procesos que no utilizan agua dulce. En este contexto también pueden existir soluciones óptimas degeneradas, en donde un mayor flujo de agua a través de una operación impide alcanzar la concentración límite de salida del contaminante clave.

Feng y Seider (2001) propusieron una nueva estructura de red que contempla reservorios de agua internos (“*internal water mains*”) con la finalidad de simplificar la topología de los diseños de redes de agua. Los reservorios internos reciben aguas residuales de operaciones que están aguas arriba y proporcionan agua para las operaciones aguas abajo, aunque se puede reusar el agua aguas arriba cuando sea conveniente. Un reservorio de agua interno debe tener una concentración de contaminante menor o igual a la que necesitan las operaciones aguas abajo y al menos una operación usuaria de agua debe alimentarlo. La metodología de diseño propuesta tiene un enfoque heurístico que permite reducir el consumo agua a medida que se agregan estos reservorios. Sin embargo, agregar reservorios adicionales aumenta la complejidad de la red (no se recomienda usar más de 2 o 3) y el enfoque propuesto está limitado a un solo contaminante. Una característica importante de esta metodología es la determinación de la concentración del reservorio interno de agua que generalmente se ubica en o cerca del punto de pliegue, donde las fuerzas motrices de transferencia de masa se reducen y generalmente los flujos de agua se maximizan.

Wang y col. (2003) presentaron una metodología que es una extensión del método de diseño de Feng y Seider (2001) para el diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes. El método se basa en utilizar solo un reservorio de agua interno (“*single internal water main*”) e introducen el concepto de factor de ahorro de agua (“*water-saving factor*”). Este factor permite cuantificar la cantidad de agua que se ahorra por utilizar agua del reservorio de agua interno en un proceso, entre mayor sea el valor de este factor, mayor es el ahorro de agua. En el proceso de diseño es necesario determinar el consumo mínimo

de agua dulce en la red, y para calcular este valor es necesario auxiliarse, ya sea del método de Punto de Pliegue para agua o de un modelo de PNL asociado a una superestructura. Esta metodología de diseño no garantiza obtener una solución óptima.

Hernández-Suarez y col. (2004) propusieron un enfoque heurístico de optimización paramétrica basada en la descomposición de una superestructura de red para la síntesis de redes de tratamiento distribuido de aguas residuales, que no incluye corrientes de reciclaje o recirculación. Estos autores proponen la descomposición de una superestructura de red que genera un conjunto de superestructuras de red básicas, para posteriormente optimizarlas individualmente. Cada superestructura de red básica tiene asociado un modelo de PNL que se obtiene de fijar las variables de las corrientes de aguas residuales que permiten capturar cada superestructura de red básica en el modelo de PNL original asociado a la superestructura de red. A partir de cada modelo de PNL asociado a una superestructura de red básica, se genera un conjunto de modelos de PL que se obtienen de un proceso secuencial que consiste en fijar las variables clave de las fracciones de corriente que aparecen en las ecuaciones que contienen términos bilineales, resolver, e incrementar el valor de la fracción de corriente mediante la adición de un tamaño de paso preestablecido. Esta metodología presenta una alternativa para explorar de manera sistemática el espacio de solución, sin embargo, a medida que se explora, se excluyen algunas regiones del espacio de solución y tiene el inconveniente de que el número de problemas de PL y PNL a resolver incrementan con el número de unidades de tratamiento.

Prakash y Shenoy (2005) propusieron un método heurístico para determinar metas de diseño para redes usuarias de agua con un solo contaminante; este enfoque permite abordar operaciones de carga másica fija de contaminantes (FL) y operaciones de flujo fijo (FF). El método es completamente una analogía de las curvas compuestas usadas en la metodología de Punto de Pliegue para la integración de calor. Para la construcción de las curvas compuestas, consideran a las operaciones como operaciones que suministran agua y operaciones que demandan agua. A partir de ésta distinción, generan una tabla para contabilizar la carga másica acumulada del contaminante en función del flujo másico de agua; de esta forma construyen una curva compuesta de demanda y una curva compuesta de suministro de agua. Al desplazar una curva respecto de la otra de forma horizontal, el punto donde se tocan las curvas corresponde al punto de pliegue. La distancia horizontal entre las curvas de demanda y suministro representa la meta del flujo mínimo de agua dulce que se requiere para diseñar la red. Además, estos autores proponen un algoritmo para el diseño de redes de agua que llaman algoritmo de vecinos cercanos ("*Nearest Neighbors Algorithm*", NNA), cuyo principio básico es el siguiente: para satisfacer una demanda particular de agua, se seleccionan las corrientes de suministro de agua cuya concentración de contaminante esté más próxima a la concentración límite de contaminante en la entrada de la operación de agua que la demanda. Esta metodología no asegura obtener una solución óptima.

Teles y col. (2008) desarrollaron una estrategia de solución para un modelo de programación no lineal (PNL) para el diseño óptimo de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes. La estrategia de solución consiste en resolver una sucesión de modelos de programación lineal (PL), cuya finalidad es proporcionar múltiples puntos de inicio para resolver el modelo de PNL. Cada punto de inicio se genera de establecer una secuencia predefinida de las operaciones involucradas y fijando las variables de concentración en su valor límite de contaminantes o eliminando conexiones innecesarias con base en una secuencia predefinida entre las operaciones, con el objetivo de generar un modelo de PL. La secuencia predefinida de las operaciones se establece con base en las posibles permutaciones que pueden existir entre las operaciones involucradas y para cada permutación se genera un modelo de PL. Este esquema de inicialización múltiple permite obtener buenas soluciones óptimas locales y otras muy cercanas a la solución óptima global. Sin embargo, la principal limitación de esta metodología es que sólo puede ser aplicada en problemas con hasta seis o siete operaciones usuarias de agua, debido a que para un número mayor de operaciones se requiere un tiempo de CPU considerable.

Ahmetović y Grossmann (2011) propusieron una superestructura general de red que integra un sistema de operaciones usuarias de agua de carga másica fija, un sistema de operaciones usuarias de agua de flujo fijo y un sistema de operaciones de tratamiento de aguas residuales. El enfoque conceptual que utilizan los autores para modelar una operación de flujo fijo consiste en dividirla en una operación que demanda agua (sumidero) y en una operación que suministra agua (fuente), ambas operaciones no consideran la transferencia de una carga másica de contaminantes, de esta forma se integran directamente en la superestructura. Con base en la superestructura propuesta, estos autores desarrollaron un modelo de programación no lineal entero-mixto (PNL-EM), el cual permite determinar el diseño de una red integrada, así como de cada subsistema por separado, costos de inversión y operación en la red y manipular las conexiones entre los procesos para reducir la complejidad topológica de la red. Su estrategia de solución consiste en generar cotas ajustadas para todas las variables involucradas, que se obtienen por inspección física de la superestructura y el uso de especificaciones lógicas, así como el uso del resolvidor BARON, el cual utiliza una técnica de optimización global determinista basada en un algoritmo de ramificación y acotamiento (BB). Sin embargo, no garantizan obtener una solución óptima global en problemas de mayor complejidad, ya que en algunos de los problemas que presentaron, a medida que aumenta el tamaño del problema, también tiende a incrementar el tiempo de CPU para obtener una solución y demostrar optimalidad global.

Su y col. (2012) desarrollaron un método heurístico de diseño para redes usuarias de agua con múltiples contaminantes que incluyen un reservorio de agua interno. Para el diseño de una red se utilizan dos conceptos del método de potencial de concentración ("*Concentration Potential Concepts*", CPC) propuesto por Liu y col. (2009): el primer concepto permite medir la posibilidad o capacidad que tiene una operación de demanda de

reutilizar una corriente de agua residual proveniente de una operación de suministro, esto se conoce como potencial de concentración de la demanda (“*Concentration Potential of the Demands*”, CPD). Cuanto menor sea la magnitud del valor de CPD en una operación de demanda, menor es la posibilidad de reutilización de agua. El segundo concepto permite medir la capacidad de reutilizar una corriente de agua residual proveniente de una operación de suministro en una operación de demanda, esto se conoce como potencial de concentración del suministro (“*Concentration Potential of the Sources*”, CPS). Cuanto menor sea la magnitud del valor de CPS en una operación de suministro, mayor es la posibilidad de reutilización del agua, para más detalles ver Liu y col. (2009). Con base en estos conceptos, se obtiene un diseño de una red de agua convencional, es decir, sin reservorio de agua interno. Una vez que se obtiene el diseño de red convencional, se realiza un proceso iterativo que consiste en determinar cuáles serán las operaciones de suministro que alimentarán al reservorio de agua interno, con base en los valores de menor magnitud de CPS, y cuál será el flujo y las concentraciones de los contaminantes en el reservorio de agua interno en el diseño convencional de red. Posteriormente, se estima el flujo de agua que va a suministrar el reservorio a las operaciones de demanda y se verifica si este valor coincide con el calculado anteriormente; si no es el caso, este valor se ajusta hasta que la diferencia entre estos valores sea menor o igual a una tolerancia establecida. Cuando se cumple esta condición se obtiene el diseño de red final. Esta metodología permite obtener buenos diseños de redes, pero no asegura obtener soluciones óptimas, sino solo aproximadas a las reportadas en la literatura.

Wang y col. (2012) proponen un método híbrido (heurístico y programación matemática) para el diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes. En la parte heurística del diseño, los autores utilizan el método de potencial de concentración de Liu y col. (2009) para determinar la secuencia de las operaciones usuarias de agua, con base en el valor de CPD, de menor a mayor, en donde las operaciones con un valor bajo de CPD usualmente utilizan agua dulce y el flujo de salida de estas operaciones puede ser usado como fuentes de agua disponibles. Después, estos autores realizan un proceso iterativo con base en la secuencia establecida de las operaciones usuarias y calculan factores de ponderación para cada una de las fuentes de agua disponibles actualmente, este proceso se realiza utilizando los valores de CPS y se formula una función objetivo en donde se utilizan estos factores. Para una fuente u operación de suministro con menor concentración de contaminantes, el valor de ponderación será mayor. Esto da preferencia para utilizar las corrientes de agua disponibles con mayor concentración de contaminantes para reducir el consumo total de agua dulce en la red. Posteriormente se formula un modelo de PL y se resuelve para determinar los flujos de las fuentes de agua dulce u operaciones de suministro que serán asignados a la operación de demanda de agua actual. Este proceso se repite hasta terminar con la secuencia establecida de las operaciones usuarias de agua. El método desarrollado por estos autores no requiere de valores iniciales, pero el modelo de

PL solo puede obtener soluciones óptimas para la secuencia heurísticamente predefinida de operaciones usuarias de agua.

Fan y col. (2012) proponen un método heurístico de diseño para redes de uso de agua con múltiples contaminantes que considera operaciones usuarias de agua de carga másica fija (FL) y operaciones de flujo fijo (FF). En este método se redefinen los conceptos de CPD y CPS propuestos por Liu y col. (2009) introduciendo un parámetro que mide la cantidad máxima de cuasi-asignación ( $R_{i,j}$ ), el cual está en función de un contaminante clave de reúso (“*Reuse Key Component*”, RKC). Este parámetro se introduce para considerar el reciclado ( $i=j$ ) en las operaciones de tipo FF y también para determinar la cantidad máxima de agua que se puede reutilizar. Para considerar el reciclado de agua en una operación usuaria de tipo FF, por ejemplo, en la operación  $j$ , se toma en cuenta el valor de  $R_{i,j}$ , si  $R_{j,j}$  es el más grande de los  $R_{i,j}$ , entonces se utilizará el reciclado. Estos autores demuestran que considerar el reciclado de agua en una operación usuaria de tipo FL (cuando el problema considera un solo contaminante), no reduce el consumo total de las fuentes de agua externas en la red. Por otra parte, en el procedimiento de diseño se aborda primero a las operaciones de tipo FL, en donde el flujo de salida puede ser tratado como una fuente de agua interna. El orden de las operaciones usuarias de agua se determina con base en el valor de CPD en orden ascendente, considerando las fuentes de agua internas disponibles y procurando utilizar primero las que tienen un valor de CPD bajo; si hay otras opciones, se da prioridad a las operaciones con el valor más bajo de CPS, de esta manera se puede reducir el consumo total de agua en la red. Cuando una operación usuaria se ha satisfecho, su flujo de salida se considera como una fuente de agua interna disponible y se recalculan los valores de CPD; este proceso se repite hasta que todas las operaciones de tipo FL estén cubiertas. Un procedimiento similar se utiliza para las operaciones de tipo FF. Este método es capaz de obtener soluciones cercanas a las metodologías basadas en modelos de programación lineal entera mixta (PL-EM) o PL, pero no garantiza obtener soluciones óptimas.

Zhao y col. (2014) proponen un método heurístico de diseño para redes usuarias de agua con múltiples contaminantes, en donde el diseño final de red se construye con dos reservorios de agua internos (“*two internal water mains*”). Los reservorios de agua se introducen con la finalidad de reducir la complejidad topológica de las redes de agua convencionales. En el primer paso del método de diseño se desarrolla una red de agua convencional, utilizando el método de potencial de concentración de Liu y col. (2009). El diseño de red de agua convencional desarrollado se emplea para clasificar a los procesos en tres grupos por orden ascendente de su valor de CPS. El primer grupo se refiere a las operaciones que solo usan agua dulce. El tercer grupo comprende a las operaciones que no utilizan agua dulce en la red convencional y que tienen valores de CPS grandes. Los procesos que no pertenecen ni al primer ni tercer grupo conformarán el segundo grupo. Después, los autores calculan el flujo de agua y las concentraciones de los contaminantes

para el primer reservorio de agua, en función de los flujos de salida de las operaciones usuarias del grupo uno y de la cantidad de agua que requieren las operaciones del grupo dos. Este proceso se lleva a cabo hasta que la diferencia del flujo de agua del primer reservorio y el flujo total de agua que demandan las operaciones del grupo dos esté dentro de una tolerancia mínima establecida. Para determinar el flujo de agua y las concentraciones de los contaminantes en el segundo reservorio interno de agua, se realiza un procedimiento similar al del primer reservorio. Esta metodología no asegura obtener una solución óptima, pero proporciona una herramienta útil para reducir la complejidad topológica de las redes y puede obtener resultados similares a los reportados en la literatura.

Khor y col. (2014) realizaron una revisión del estado del arte en el área de síntesis y diseño de redes usuarias de agua, centrándose en las metodologías de programación matemática. Estos autores mencionan los retos y futuras direcciones en esta área. Los principales retos y desafíos en el modelado y la programación matemática, corresponden a: la no convexidad, no linealidad y la incertidumbre. Para abordar la no convexidad y no linealidad generada por la presencia de términos bilineales en las ecuaciones de los balances de contaminantes, se han empleado técnicas de optimización global para garantizar soluciones confiables; algunas técnicas de optimización global recientes que se ha desarrollado son las siguientes: a) relajaciones afines por segmentos (ver por ejemplo Karrupiah y Grossmann, 2006), que a grandes rasgos consiste en particionar los intervalos en donde se mueven los términos no convexos y en cada partición aplicar una relajación para resolver el modelo, con la finalidad de obtener en cada iteración una cota inferior (LB) y superior (UB) del problema, hasta que  $UB - LB \leq \text{tolerancia}$ , en donde la solución será igual a la UB; b) la aplicación de restricciones de reducción al modelo no convexo original, que consiste en restricciones lineales redundantes; y c) la propagación de restricciones, que se origina a partir del paradigma de programación restringida. Por otra parte, las futuras direcciones consisten en: a) hacer posible una solución numérica más rápida en la resolución de problemas no lineales no convexos de casos de estudio más realistas a nivel industrial; b) desarrollar formulaciones con un enfoque más detallado o significativo que permita describir de mejor manera los procesos o tecnologías utilizadas en las redes usuarias de agua y c) desarrollar métodos de optimización bajo incertidumbre, en donde la incertidumbre se refiere a la fluctuación en el valor y manejo de los datos y parámetros empleados en los problemas.

Calixto y col. (2015) proponen un método heurístico de descomposición por bloques para el diseño de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes. El número de bloques está relacionado con el número de operaciones usuarias que usan agua dulce, llamadas operaciones principales (H). En cada bloque se determina el contaminante clave o de referencia de acuerdo con Savelski y Bagajewicz (2003) y se aplica la metodología heurística de diseño del diagrama de fuentes de agua ("*Water Sources Diagram*", WSD) propuesta por Gomes y col., (2007). Esta metodología genera un conjunto de diagramas de

flujo, en cada diagrama de flujo se considera la posibilidad de realizar combinaciones entre todas las operaciones usuarias que no son H, llamadas operaciones intermedias (I), en donde el número de posibles combinaciones en cada bloque está definido por una combinación matemática en función del número total de operaciones y el número de bloques generados. Los diagramas de flujo generados en cada bloque usando la metodología WSD se organizan en términos de menor consumo de agua dulce, puesto que estos pueden ser candidatos a estar en el diseño final de la red de agua. Posteriormente, los autores analizan en conjunto los diagramas de flujo candidatos para definir estructuras de acuerdo con las especificaciones de las operaciones que presenten las mejores características para reducir el consumo total de agua dulce en la red. Esta estrategia permite obtener soluciones cercanas a las obtenidas con el uso de programación matemática, pero es necesario evaluar todas las posibles combinaciones para determinar los diagramas de flujo a considerar en el diseño final de red.

Silori y Khanam (2018) realizaron un estudio sobre el rendimiento de diferentes resolutores para modelos de programación lineal (PL) y modelos de programación lineal entera mixta (PL-EM) aplicados al problema de redes de agua. El trabajo de estos autores se divide en dos partes. En la primera parte resuelven un modelo de PL propuesto por Bagajewicz y Savelski (2001) utilizando los siguientes resolutores: CPLEX, CONOPT y MINOS. Cuando en el modelo de PL se incorporan costos de tubería se convierte en un modelo de PL-EM. Para resolver el modelo de PL-EM se utilizaron los siguientes resolutores: BDMLP, CBC (*“Coin-or Branch and Cut”*) y SCIP (*“Solving Constraint Integer Problems”*). Para medir el rendimiento de los resolutores consideran tres aspectos: i) número de flujos no deseados que sean  $< 2$  t/h (si es el caso, fijan el valor de la variable correspondiente en cero y resuelven nuevamente); ii) número total de iteraciones para obtener la solución final y, por último, iii) el valor de la función objetivo. Con base en sus resultados concluyen que el resolutor MINOS presenta un mejor desempeño que los otros solucionadores para los problemas de PL asociados al diseño de redes de agua, mientras que el resolutor CBC es el mejor de los otros solucionadores utilizados para los problemas de PL-EM asociados al diseño de redes de agua, incluyendo costos de tubería. Las soluciones obtenidas mediante el modelo de PL-EM muestran ser en la práctica, más confiables que los diseños obtenidos con el modelo de PL, ya que los modelos de PL-EM incluyen restricciones de costos.

Sieniutycz y Jezowski (2018) realizan una revisión de los principales enfoques para el diseño de redes de agua y presentan un modelo de PNL-EM asociado a una superestructura que integra un sistema de uso de agua con operaciones de carga másica fija de contaminantes que consideran la pérdida y ganancia de agua a través de las operaciones, también consideran múltiples fuentes de agua, sumideros internos de agua, así como operaciones usuarias en donde no hay transferencia de masa y un sistema de tratamiento, en donde las unidades de tratamiento se pueden modelar de dos formas. La primera consiste en

fijar la concentración de salida de alguno o de todos los contaminantes y la segunda consiste en incluir una tasa de remoción de contaminantes constante. El modelo desarrollado por estos autores también se puede utilizar para abordar el sistema integrado, así como los subsistemas separados. Este modelo incluye variables binarias para poder controlar la complejidad de la red, así como para considerar el costo de tuberías y bombeo en cada conexión habilitada. Para resolver su modelo, utilizan un método de solución propuesto por Poplewski y col. (2002). Este método consiste de un algoritmo de optimización estocástico de búsqueda aleatoria y también de utilizar restricciones lógicas para el manejo de las variables binarias para generar puntos factibles de inicio en el proceso de búsqueda de soluciones.

## **1.6. Objetivos del proyecto**

El propósito de este proyecto consiste en desarrollar una metodología sistemática para el problema de la síntesis óptima de redes de uso de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes bajo el enfoque de optimización de una superestructura de red. Se desea minimizar el consumo total de agua en este tipo de sistemas y, además, determinar diseños de red que cuenten con las características óptimas de operación (flujos másicos de agua y concentraciones de contaminantes) en puntos intermedios de la red. A continuación, se describen los objetivos generales y particulares de este proyecto.

### **1.6.1. Objetivos generales**

1. Desarrollar un modelo matemático de optimización para abordar el problema de síntesis óptima de redes de uso de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes. El modelo debe permitir la toma de decisiones de diseño que minimicen el consumo total de agua dulce, la generación de efluentes y el costo total anual de operación asociado al consumo total de agua en las redes.
2. Establecer una metodología sistemática de solución para el modelo matemático propuesto, con la finalidad de facilitar la búsqueda de soluciones óptimas locales para el problema.

### **1.6.2. Objetivos particulares**

1. Desarrollar un modelo matemático de PNL con base en el planteamiento o selección de una superestructura de red de la literatura, que represente adecuadamente el problema de síntesis y diseño de redes de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes.

2. Comparar un enfoque determinístico contra un enfoque estocástico en la solución del modelo matemático de PNL desarrollado.
3. Validar el modelo matemático de PNL abordando un conjunto de casos de estudio (“*benchmark problems*”) de la literatura y comparando los resultados obtenidos con lo ya disponibles.
4. Definir los alcances y limitaciones del modelo matemático y la metodología de solución desarrollada, con base en los resultados obtenidos.

### **1.7. Organización de la tesis**

En el Capítulo 2 se presentan ejemplos comunes de operaciones usuarias de agua en la industria y como se modelan en el contexto de síntesis de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes. Posteriormente, el estudio se centra en las operaciones usuarias de agua de carga másica fija y se muestran las ecuaciones que describen formalmente a este tipo de operaciones bajo ciertas suposiciones de trabajo, en donde el interés se centra en las corrientes de agua a través de las operaciones usuarias y las concentraciones de los contaminantes en la entrada y en la salida de cada operación. Finalmente, en el Capítulo 2, se muestra una representación esquemática de las posibles interacciones que puede tener una operación usuaria de agua con todas las demás y como se pueden representar todas las interacciones entre las operaciones usuarias en un esquema de una superestructura de red.

En el Capítulo 3 se presenta la notación utilizada en el desarrollo de un modelo matemático de programación no lineal (PNL) para la síntesis de redes de uso de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes. Se presenta formalmente el modelo de PNL desarrollado, conformado por una función objetivo y un conjunto de restricciones. La función objetivo está enfocada en la minimización del costo total de operación anual por concepto del consumo total de agua de las fuentes. Las restricciones del modelo, consisten en los balances de flujo másico de agua y los balances de los contaminantes en cada elemento que conforma la superestructura de red utilizada. También se muestran las cotas para todas las variables de decisión. Finalmente se describen de forma breve los enfoques de solución utilizados para resolver el modelo matemático de PNL propuesto.

En el Capítulo 4 se muestra la aplicación del modelo de PNL desarrollado y los resultados obtenidos de su aplicación y solución particular asociados a cada caso de estudio abordado. En cada caso de estudio se presenta la mejor solución reportada en la literatura, la solución obtenida mediante el enfoque de solución determinista y la mejor solución obtenida mediante el enfoque de solución estocástico. También se realizó una breve

discusión de los resultados particulares de cada caso de estudio. Al final de Capítulo 4 se discuten los resultados obtenidos con ambos enfoques de solución.

En el Capítulo 5 se presentan las contribuciones del proyecto de tesis y las conclusiones generales y particulares de los resultados obtenidos en este trabajo. Finalmente se presentan algunas sugerencias para trabajos futuros.

## Capítulo 2. Operaciones usuarias de agua

### 2.1. Introducción

Una operación usuaria de agua es una operación unitaria que requiere en la entrada una corriente de agua con un cierto grado de pureza, y en la salida de la operación se obtiene una corriente de agua con una pureza generalmente más baja (mayor contaminación) (Klemes, 2013), debido a la transferencia de manera simultánea de una carga másica de varios contaminantes.

Las operaciones usuarias de agua pueden clasificarse conceptualmente en operaciones con transferencia de masa y operaciones sin transferencia de masa (Dhole y col., 1996; Hallale, 2002; Prakash y Shenoy, 2005; Teles y col., 2008; Fan y col., 2012). Las operaciones usuarias de agua con transferencia de masa fija (“*Fixed Load*”, FL) (Doyle y Smith, 1997; Bagajewicz, 2000; Prakash y Shenoy, 2005; Fan y col., 2012) están enfocadas en remover o acarrear una carga másica de contaminantes constante de una corriente de proceso que entra en contacto directo con una corriente de agua. La corriente de agua actúa como agente de separación de masa (Huang y col., 1999; Manan y col., 2004; Klemes, 2013). En una operación usuaria de agua de carga másica fija se imponen restricciones de concentraciones límite de contaminantes en la entrada y en la salida de la operación, en donde la fuerza motriz de transferencia de masa depende de la concentración de los contaminantes en la corriente de agua. De acuerdo con Wang y Smith (1995), las concentraciones límite de los contaminantes en la entrada y en la salida, se pueden establecer considerando: la solubilidad máxima de los contaminantes en el agua, las limitaciones de corrosión, el ensuciamiento, etc. Cabe destacar que la corriente de agua en la entrada y en la salida en una operación usuaria de tipo FL, son iguales. La aplicación de este tipo de operación se considera en procesos de separación, tales como: extracción, absorción, destilación con vapor, lixiviación, remoción de sales y procesos u operaciones de lavado. (Huang y col., 1999; Sieniutycz y Jezowski, 2018). Por ejemplo, en el lavado de un tanque (Fig. 2.1.a), el agua acarrea los contaminantes solubles en ella. Otro ejemplo de una operación usuaria de agua de carga másica fija de contaminantes puede ser un proceso de absorción (Fig. 2.1.b). En el proceso de absorción el gas amargo se convierte en gas endulzado mediante la absorción de  $H_2S$  y  $SO_2$  en agua (Manan y col., 2004; Klemes, 2013). En estos procesos está involucrada la transferencia simultánea de uno o varios contaminantes que son solubles o que se absorben en el agua. Otro ejemplo de este tipo de operación se encuentra en la desalinizadora de una refinería de petróleo, en donde el petróleo crudo se mezcla con agua para reducir el contenido de sales; el agua y el aceite se dejan asentar con la ayuda de un campo eléctrico y se separan en dos fases (Wang y Smith, 1994).

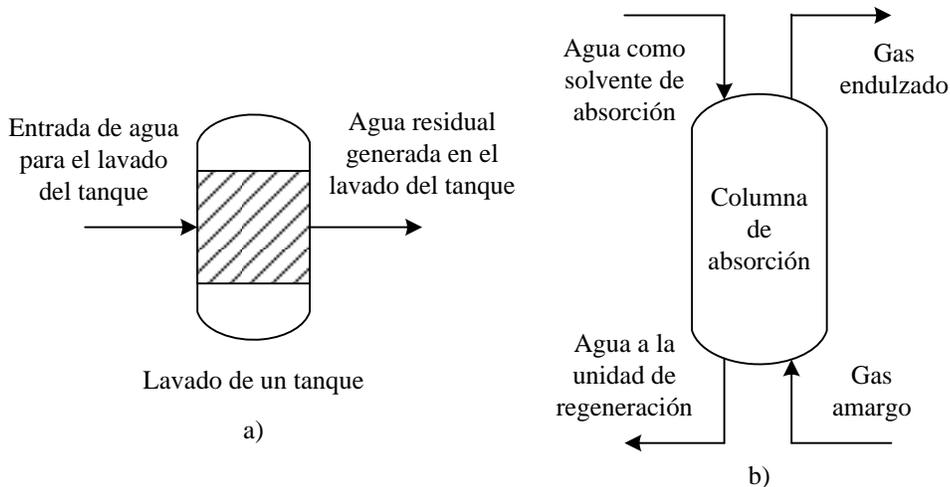


Fig. 2.1. Ejemplos de operaciones usuarias de agua de carga másica fija: a) lavado de un tanque y, b) columna de absorción (Manan y col. 2004; Klemes 2013).

Generalmente, estas operaciones se modelan como intercambiadores de masa a contracorriente (Dhole y col., 1996; Doyle y Smith, 1997; Teles y col., 2008; Ahmetović y Grossmann, 2011; Sieniutycz y Jezowski, 2018). Sin embargo, el análisis conceptual sólo se centra en la carga másica de contaminantes que se transfieren a la corriente de agua, las restricciones de concentraciones límite de contaminantes en la entrada y en la salida y, el flujo másico de agua que se utiliza en la operación.

Por otra parte, existen operaciones usuarias de agua en donde no se considera relevante la transferencia de masa de los contaminantes y se le da prioridad al flujo másico de agua que entra y que sale de la operación. A estas operaciones usuarias de agua se les clasifica como operaciones de flujo fijo (*“Fixed Flowrate”*, FF). En estas operaciones el flujo másico de agua puede ser suministrado como insumo o puede extraerse como producto o subproducto de una reacción química (Manan y col., 2004; Klemes, 2013). Por lo tanto, en este tipo de operaciones se puede considerar la pérdida o ganancia de agua a través de la operación. La función principal de este tipo de operaciones está centrada en satisfacer un flujo másico de entrada y un flujo másico de salida de agua, necesarios para el funcionamiento normal de la operación. Sólo en la entrada de la operación usuaria se imponen restricciones de concentraciones límite para los contaminantes, mientras que, en la salida de la operación se fijan las concentraciones de los contaminantes en sus valores límite. Esto implica que las concentraciones de salida de los contaminantes sean independientes de las concentraciones de entrada (Teles y col., 2008; Fan y col., 2012). Cabe destacar que los flujos másicos de agua de entrada y salida en una operación usuaria de agua del tipo FF, pueden ser diferentes. Entre las operaciones que caen dentro de esta clasificación se consideran los reactores en donde el agua se utiliza para reacciones en fase acuosa o como reactivo y parte del agua se integra a la corriente de proceso o en reactores en donde el agua se obtiene como un producto o subproducto de una reacción química (Fig. 2.2.a); en generadores de vapor o torres de enfriamiento, en donde existen pérdidas por

evaporación o pérdidas por purgas (Huang y col., 1999). Por ejemplo, en un reactor se lleva a cabo una reacción en donde se produce acrilonitrilo (AN) y agua a partir de la oxidación de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) y propileno ( $\text{C}_3\text{H}_6$ ) por medio de catalizadores sólidos (Fig. 2.2.a) (Manan y col., 2004; Klemes, 2013). Otro ejemplo de una operación de flujo fijo puede ser una torre de enfriamiento (Fig. 2.2.b). En la torre de enfriamiento una parte del flujo de agua se pierde por evaporación, pero los contaminantes en el agua permanecen en solución o suspensión y con el transcurso del tiempo aumenta la concentración de estos contaminantes. Esta acumulación se controla mediante una purga; el agua de reposición se introduce para compensar estas pérdidas manteniendo así la concentración total de todos los contaminantes bajo control (Hill y col. 2013).

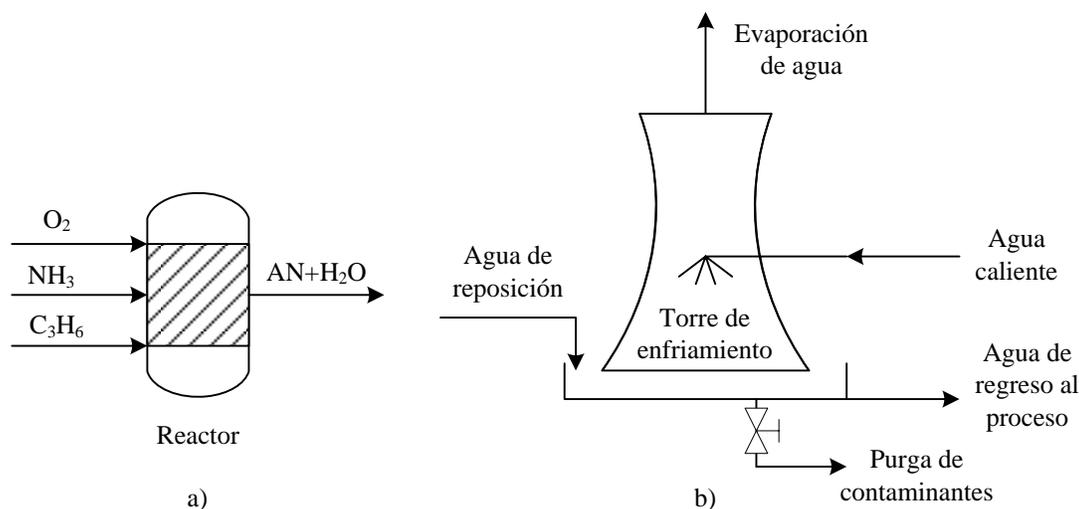


Fig. 2.2. Ejemplos de operaciones usuarias de agua de flujo fijo: a) Reactor que produce AN y agua (Manan y col., 2004; Klemes, 2013) y b) torre de enfriamiento (Hill y col. 2013).

Las operaciones de tipo FF generalmente son modeladas como fuentes o sumideros de agua (Sieniutycz y Jezowski, 2018). Dado que estas operaciones se consideran como operaciones sin transferencia de masa, no se consideran balances de materia para los contaminantes. Sin embargo, este enfoque no es consistente con el tipo de operaciones que representan. Un enfoque más general, que contempla ambas operaciones, FL y FF, se presenta en el trabajo de Sieniutycz y Jezowski, 2018.

## 2.2. Operación usuaria de agua de carga másica fija

El presente trabajo se centra en la síntesis óptima de redes de uso de agua, en donde sólo se consideran operaciones usuarias de agua de carga másica fija de múltiples contaminantes para efectos de comparación directa con los trabajos presentados en la literatura. Por lo

tanto, los alcances de este trabajo se limitan al análisis de estas operaciones. A continuación, se describe formalmente una operación usuaria de agua de carga másica fija.

Para modelar conceptualmente una operación usuaria de agua de carga másica fija se consideran las siguientes suposiciones de trabajo: i) la carga másica fija de los contaminantes se considera como constante y la transferencia de masa se da por contacto directo; ii) las concentraciones límite de entrada y salida para todos los contaminantes son conocidas; iii) el flujo másico de agua que entra y que sale en una operación son iguales; iv) se asume estado estacionario, isobárico e isotérmico; v) no existen cambios de fase en el agua ni en los contaminantes; vi) no hay pérdida o ganancia de agua a través de una operación; y vii) no se consideran reacciones químicas en la operación

Con base en estas suposiciones, una operación usuaria de agua de carga másica fija se puede modelar como un intercambiador de masa a contracorriente. En una operación usuaria entra una corriente de proceso que intercambia de manera simultánea una carga másica constante de uno o varios contaminantes, por contacto directo, con la corriente de agua que ingresa en la operación. Además, en una operación usuaria de agua se imponen restricciones de concentraciones límite para los contaminantes en la entrada y en la salida de la operación, las cuales no deben excederse.

### ***Definición de una operación usuaria de agua de carga másica fija***

En una operación usuaria de agua  $u \in U$  de carga másica fija, que se modela como un intercambiador de masa a contracorriente, se transfiere de manera simultánea una carga másica  $MU_{u,j}$  del o los contaminantes  $j \in J$  a la corriente de agua en la operación  $u$  ( $f_{u,u}$ ) desde una corriente de proceso ficticia. Durante el proceso de transferencia de masa por contacto directo entre la corriente de proceso y la corriente de agua; el agua remueve o acarrea una cierta cantidad de contaminantes (Fan y col. 2012). Se asume que la cantidad de contaminantes acarreados o removidos por la corriente de agua es constante. El flujo másico de agua necesario para transferir la carga másica de contaminantes, está relacionado con las concentraciones límite de contaminantes permitidas a la entrada y a la salida en la operación usuaria de agua  $u$  de carga másica fija. Por lo tanto, se requiere que el flujo másico de agua suministrada en la entrada de la operación usuaria tenga una concentración  $cu_{u,j}^{in}$  por debajo de un valor límite  $CU_{u,j}^{U,in}$  para cada contaminante (Wang y Smith, 1994). De la misma manera, a la salida de la operación usuaria de agua, la concentración de los contaminantes  $cu_{u,j}^{out}$  no debe exceder un cierto valor límite  $CU_{u,j}^{U,out}$  para cada contaminante.

En la Fig. 2.3 se muestra una representación esquemática de una operación usuaria de agua de carga másica fija, que se establece con base en las suposiciones de trabajo y la descripción de una operación usuaria de agua de carga másica fija.

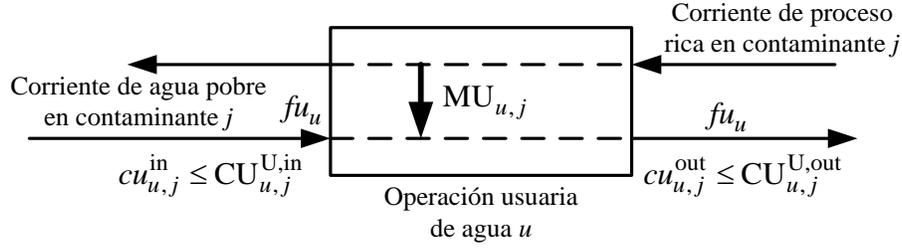


Fig. 2.3. Representación esquemática de una operación usuaria de agua de carga másica fija (Dhole y col., 1996; Mann y Liu, 1999; Sieniutycz y Jezowski, 2018).

### ***Ecuaciones que describen una operación usuaria de agua de carga másica fija***

En una operación usuaria de agua  $u \in U$ , el flujo másico de agua  $f_{u_u}$  a través de la operación no cambia, por lo tanto no se requiere de un balance de materia para el agua. Sin embargo, es necesario cuantificar los cambios en las concentraciones de los contaminantes en la corriente de agua, a la entrada y a la salida de una operación, entonces, el balance de materia para cada contaminante en una operación usuaria de agua de carga másica fija está dado por (2.1):

Balance de materia para cada contaminante  $j \in J$  en una operación usuaria de agua  $u \in U$  de carga másica fija:

$$f_{u_u} \cdot c_{u_u,j}^{in} + 10^3 \cdot MU_{u,j} = f_{u_u} \cdot c_{u_u,j}^{out} \quad j \in J, u \in U \quad (2.1)$$

En donde las unidades del flujo másico de agua  $f_{u_u}$  son (t/h), las unidades de las cargas másicas de los contaminantes  $MU_{u,j}$  están dadas en (kg/h) y las unidades de las concentraciones de entrada  $c_{u_u,j}^{in}$  y de salida  $c_{u_u,j}^{out}$  son (ppm).

Concentración límite para cada contaminante  $j \in J$  en la corriente de agua a la entrada de una operación usuaria de agua  $u \in U$ :

$$0 \leq c_{u_u,j}^{in} \leq C U_{u,j}^{U,in} \quad j \in J, u \in U \quad (2.2)$$

Concentración límite para cada contaminante  $j \in J$  en la corriente de agua a la salida de una operación usuaria de agua  $u \in U$ :

$$0 \leq cu_{u,j}^{\text{out}} \leq CU_{u,j}^{\text{U,out}} \quad j \in J, u \in U \quad (2.3)$$

### 2.3. Superestructura general de red con operaciones usuarias de agua de carga másica fija

El enfoque conceptual de las operaciones usuarias de agua bajo el cual éstas se modelan proporciona una comprensión fundamental del flujo másico de agua en una operación usuaria, dentro de un sistema o proceso de fabricación. La aplicación de este enfoque conceptual desde un punto de vista holístico puede permitir identificar oportunidades de reducción, distribución y reutilización de agua entre un conjunto de operaciones pertenecientes a un sistema o proceso de fabricación. Para ello es necesario visualizar como estas operaciones pueden interactuar con otras. En la Fig. 2.4 se muestra una representación esquemática de una operación usuaria de agua de carga másica fija, como se modela conceptualmente y cuáles son las posibles corrientes de agua que pueden entrar y salir de ella.

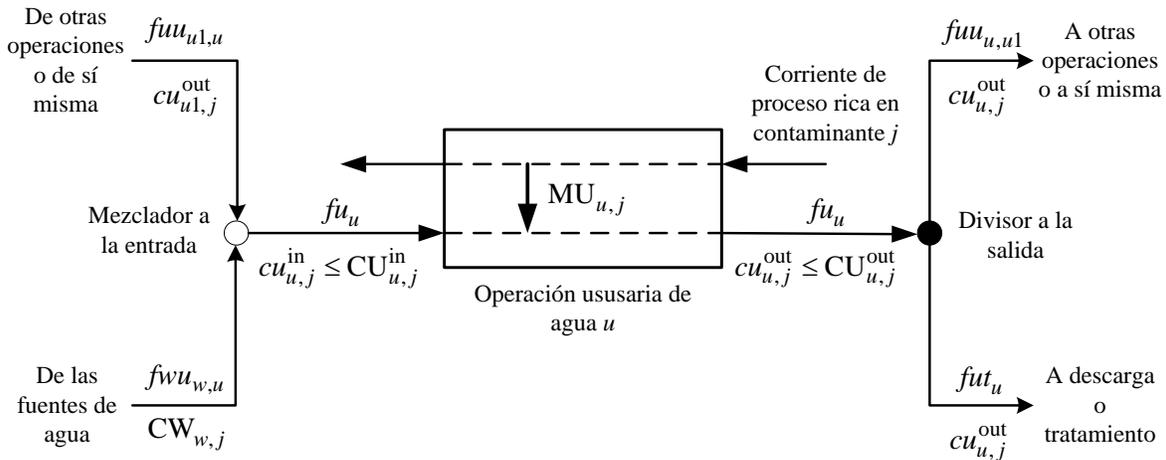


Fig. 2.4. Representación esquemática de una operación usuaria de agua  $u$  de carga másica fija con las posibles conexiones entre las fuentes de agua y otras operaciones usuarias de agua (Mann y Liu, 1999).

De acuerdo con la Fig. 2.4, el flujo másico  $fu_u$  de la corriente de agua que ingresa a la operación usuaria  $u$ , con  $u \in U$ , puede ser suministrado simultáneamente por el flujo másico  $fwu_{w,u}$  que proviene de una fuente de agua  $w$ , con  $w \in W$ , con una concentración de contaminantes  $CW_{w,j}$  conocida, con  $j \in J$  y por el flujo másico de agua de reúso  $fu_{u1,u}$

con una concentración  $cu_{u1,j}^{out}$  desconocida que proviene de la operación  $u1$ , con  $u1 \in U$ . Una vez que se ha transferido de manera simultánea la carga másica  $MU_{u,j}$  de los contaminantes en la operación usuaria de agua, el flujo másico de agua  $fu_u$  en la salida se puede dividir para ser reutilizado en otra operación  $u1$  o enviado a la descarga o tratamiento mediante el flujo másico de agua  $fut_u$ .

En la Fig. 2.5 se muestra una representación topológica particular de una red de uso de agua que muestra todas las posibilidades de interacciones o conexión entre dos fuentes de agua ( $w1$  y  $w2$ ) y dos operaciones usuarias de agua de carga másica fija ( $u1$  y  $u2$ ). A la representación topológica de más de una opción para el diseño de una red de operaciones usuarias de agua, se le conoce como superestructura de red (Klemes, 2013).

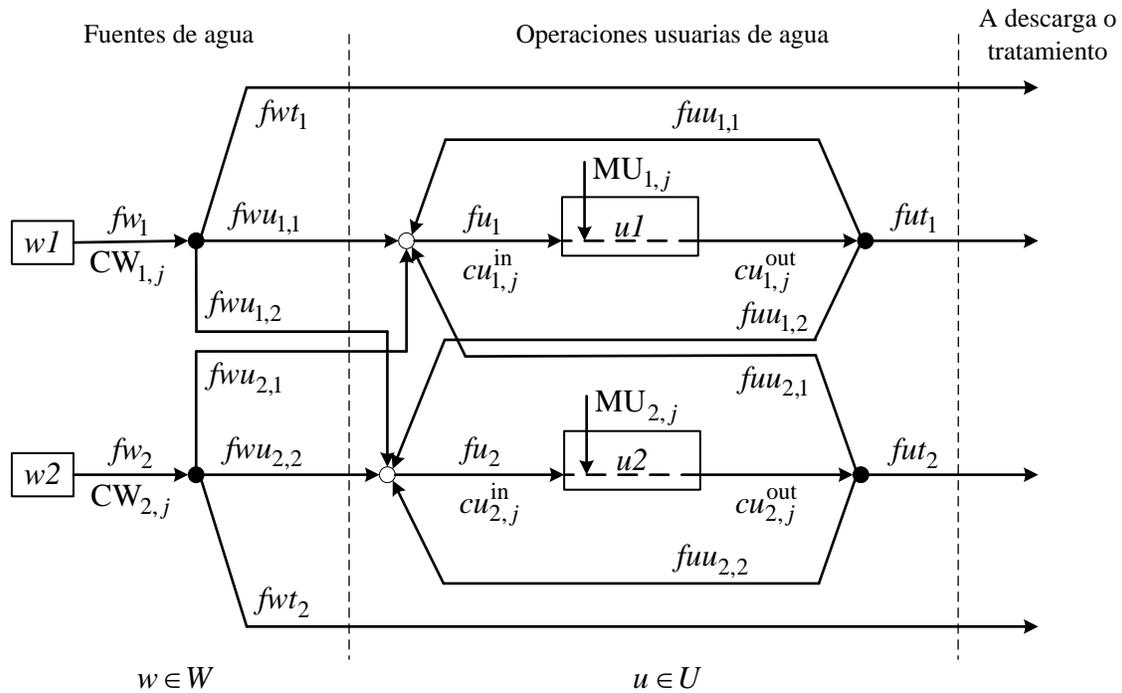


Fig. 2.5. Superestructura de red particular que representa todas las conexiones posibles entre dos fuentes de agua ( $w1$  y  $w2$ ) y dos operaciones usuarias de agua ( $u1$  y  $u2$ ) (sub-sistema de uso de agua de la superestructura de red de Takama y col., (1980).

A medida que se abordan problemas de diseño de redes con operaciones usuarias de agua de carga másica fija con más fuentes de agua y operaciones usuarias, la representación de estas redes se vuelve compleja y difícil de visualizar con claridad. Una forma compacta de representar la superestructura de la Fig. 2.5 se puede lograr mediante el uso de índices y conjuntos, lo que permite visualizar un problema complejo con una representación compacta, como se muestra en la Fig. 2.6.

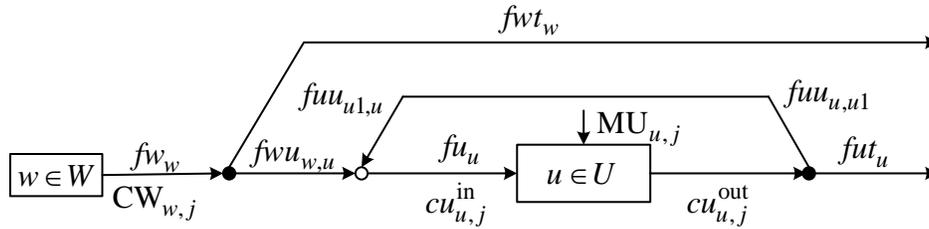


Fig. 2.6. Superestructura de red general para el diseño de redes de agua con  $W$  fuentes de agua y  $U$  operaciones usuarias de agua de carga másica fija (esquema compacto) (sub-sistema de uso de agua de Ahmetović y Grossmann, 2011; sub-sistema de uso de agua de Sienutycz y Jezowski, 2018).

En la Fig. 2.6 se presenta la superestructura de red general utilizada en este trabajo para abordar el problema de síntesis óptima de redes de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes. Para la síntesis de un diseño óptimo de red, la superestructura se traduce en un modelo matemático de optimización. El modelo de optimización se obtiene de establecer balances de materia para el agua y balances de materia para los contaminantes en cada componente de la superestructura de red general: divisores de las fuentes de agua, mezcladores en la entrada de las operaciones usuarias, en las operaciones usuarias de agua, en los divisores a la salida de las operaciones usuarias de agua y en toda la superestructura.

## **Capítulo 3. Modelo de programación matemática para la síntesis de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes**

### **3.1. Introducción**

El uso eficiente del agua es muy importante en las industrias de proceso, no sólo para reducir el costo asociado al suministro y distribución de agua dulce, sino también, para minimizar las emisiones ambientales asociadas al uso y descarga de aguas residuales (Klemes, 2013). Por lo tanto, el problema de síntesis de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes está enfocado, por una parte, en reducir el consumo total de agua dulce en estos sistemas y, por la otra, en sintetizar un diseño óptimo de red que permita alcanzar este objetivo, considerando restricciones de concentraciones límite de los contaminantes en la entrada y en la salida de cada una de las operaciones usuarias de agua. Sintetizar un diseño óptimo de red, que cumpla con las restricciones de concentraciones límite de los contaminantes y reduzca al mínimo el consumo total de agua dulce en la red, cuando se consideran múltiples fuentes de agua, operaciones usuarias y contaminantes, no es una tarea sencilla. Esto ha motivado el desarrollo de tecnologías y métodos sistemáticos que permitan la toma de decisiones en la síntesis y el diseño de estos sistemas.

Como se menciona en las Secciones 1.4 y 1.5, se han desarrollado diferentes metodologías sistemáticas para la síntesis de redes de agua con múltiples contaminantes. Algunas de estas metodologías están basadas en formulaciones de modelos de PNL que representan matemáticamente una superestructura de red, como la que se describe en la Sección 2.3. También se han propuesto modelos de programación no lineal entera mixta (PNL-EM), similares a los modelos de PNL, en donde se introducen variables binarias para tomar en cuenta los costos de operación y la inversión de capital requerida en la construcción de la red, por ejemplo, cuando se consideran tuberías y equipos de bombeo o cuando se desea imponer restricciones topológicas en el proceso de síntesis o diseño de una red. Los modelos de PNL-EM y PNL asociados a la síntesis o diseño de las redes usuarias de agua, respectivamente, son difíciles de resolver, particularmente cuando se está buscando una solución óptima global y se abordan casos o problemas de gran escala. Estos modelos matemáticos presentan términos bilineales que aparecen en los balances de materia en los mezcladores y en las operaciones usuarias de agua, generando modelos de optimización no convexos. Algunas de las propuestas para resolver adecuadamente los modelos asociados a la síntesis y diseño óptimo de redes usuarias de agua y obtener una buena solución (Jezowski, 2010): i) linealizar directamente los modelos propuestos, ii) generar “buenos” puntos de arranque, iii) utilizar procedimientos de solución secuencial, iv) utilizar enfoques de optimización meta-heurística y v) optimización global determinista.

En este trabajo se propone un modelo de programación no lineal (PNL), denominado modelo WUN-CD (“*Water-Using Networks - Conceptual Design*”), para la síntesis de redes de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes, asociado al problema planteado formalmente en la Sección 1.3 y a la superestructura general de red de la Fig. 2.6. El modelo WUN-CD es un modelo general que permite abordar problemas de diferente complejidad, por ejemplo, múltiples fuentes de agua con diferente calidad (diferentes niveles de concentración de contaminantes en el agua), múltiples operaciones usuarias de agua con sus respectivas cargas másicas y concentraciones límite a la entrada y salida para los múltiples contaminantes involucrados. El modelo contempla todas las posibilidades de distribución, uso, reúso y reciclaje de agua asociados a la superestructura de red general presentada en la Sección 2.3.

### **3.2. Descripción del modelo WUN-CD de PNL**

El modelo WUN-CD consiste de balances de materia para el agua y balances de materia para los contaminantes en cada una de las partes que conforman la superestructura de red general, presentada en la Sección 2.3. Las variables de decisión representan los flujos másicos de agua y las concentraciones de los contaminantes en todas las corrientes intermedias en la superestructura de red general. En el modelo, los parámetros de diseño se denotan con letras mayúsculas, para distinguirlos de las variables de decisión, que se denotan con letras minúsculas y cursivas.

En el modelo, la función objetivo expresa de forma lineal el costo total anual asociado al flujo másico de agua de las diferentes fuentes de agua que se utilizan en la red, cuando se dispone de los costos unitarios de cada fuente de agua. Los balances de materia para el agua en los divisores, mezcladores y el balance global de agua en la superestructura de red, se expresan de forma lineal, mientras que los balances de materia para los contaminantes en los mezcladores a la entrada de las operaciones usuarias de agua, entorno a las operaciones usuarias de agua y el balance global de contaminantes en la superestructura de red, se expresan como ecuaciones no lineales. Las ecuaciones no lineales del modelo WUN-CD incluyen términos bilineales, que aparecen debido a la multiplicación de las variables de flujo másico de agua por las variables de concentración de los contaminantes. Los términos bilineales en los balances de materia para los contaminantes generan no convexidades en el modelo. Por lo tanto, el modelo WUN-CD es un modelo de PNL no convexo. Las cotas para las variables de decisión se establecen de forma analítica, en función de los parámetros de diseño, como son las cargas másicas de los contaminantes que se transfieren de manera simultánea en las operaciones usuarias de agua, así como las concentraciones límite de los contaminantes en la entrada y en la salida en cada una de las operaciones usuarias de agua.

En el modelo WUN-CD también se pueden imponer restricciones de flujo, de concentraciones o de tipo topológico, mediante la fijación de los valores de las variables de decisión. Por ejemplo, una restricción en la topología de la red se puede imponer fijando el valor de una variable de flujo másico de agua con el valor de cero, para eliminar una conexión. Sin embargo, no es posible imponer una restricción que habilite una corriente de agua en particular sin especificar un valor mínimo.

### 3.3. Modelo WUN-CD de PNL

Con base en el planteamiento del problema de síntesis de redes con operaciones usuarias de agua (Sección 1.3), la definición de una operación usuaria de agua de carga másica fija (Sección 2.2) y la superestructura general de red utilizada (Sección 2.3), se desarrolla el modelo matemático WUN-CD (“*Water-Using Networks – Conceptual Design*”) de PNL no convexo para la síntesis de redes de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes, que se muestra a continuación.

#### Modelo WUN-CD

##### *Índices*

- $j$  = Contaminante
- $u$  = Operación usuaria de agua
- $w$  = Fuente de agua

##### *Superíndices*

- in = Entrada a una operación usuaria de agua
- L = Cota inferior de una variable
- out = Salida de una operación usuaria de agua
- U = Cota superior de una variable

##### *Conjuntos*

- $J$  =  $\{ j : j \text{ es un contaminante} \}$
- $U$  =  $\{ u : u \text{ es una operación usuaria de agua} \}$
- $W$  =  $\{ w : w \text{ es una fuente de agua} \}$

##### *Parámetros*

- $CSW_w$  = Costo unitario de la fuente de agua  $w$  en (\$/ton)

- $CU_{u,j}^{U,in}$  = Concentración límite del contaminante  $j$  a la entrada de la operación usuaria de agua  $u$  en (ppm)  
 $CU_{u,j}^{U,out}$  = Concentración límite del contaminante  $j$  en la salida de la operación usuaria de agua  $u$  en (ppm)  
 $CW_{w,j}$  = Concentración del contaminante  $j$  en la fuente de agua  $w$  en (ppm)  
 $H$  = Tiempo de operación anual de la red de agua en (h/año)  
 $MU_{u,j}$  = Carga másica fija del contaminante  $j$  que se transfiere en la operación usuaria de agua  $u$  en (kg/h)  
 $N_1$  = Parámetro de ajuste para la cota superior de la variable  $fu_u^U$

**Variables continuas no negativas**

- $cu_{u,j}^{in}$  = Concentración del contaminante  $j$  en la entrada de la operación usuaria de agua  $u$  en (ppm)  
 $cu_{u,j}^{out}$  = Concentración del contaminante  $j$  en la salida de la operación usuaria de agua  $u$  en (ppm)  
 $fu_u$  = Flujo másico de agua a través de la operación usuaria de agua  $u$  en (ton/h)  
 $fut_u$  = Flujo másico de agua que sale del divisor de la operación usuaria de agua  $u$  y es enviado a la descarga de efluentes o a tratamiento en (ton/h)  
 $fu_{u,u1}$  = Flujo másico de agua que sale del divisor de la operación usuaria de agua  $u$  y va hacia el mezclador de la operación usuaria de agua  $u1$  en (ton/h)  
 $fw_w$  = Flujo másico de agua que sale de la fuente de agua  $w$  en (ton/h)  
 $fw_t_w$  = Flujo másico de agua que sale del divisor de la fuente de agua  $w$  y es enviado a la descarga o a tratamiento en (ton/h)  
 $fw_{w,u}$  = Flujo másico de agua que sale del divisor de la fuente de agua  $w$  y va hacia el mezclador de la operación usuaria de agua  $u$  en (ton/h)  
 $z$  = Función objetivo de costo total anual de operación del modelo WUN-CD

**Función objetivo:**

$$\text{Minimizar } z = H \cdot \sum_{w \in W} CSW_w \cdot fw_w \quad (3.1)$$

**Restricciones del modelo:**

*Balances de agua.*

Balance de agua en el divisor de una fuente de agua  $w$ .

$$fw_w = \sum_{u \in U} fwu_{w,u} + fwt_w \quad w \in W \quad (3.2)$$

Balance de agua en el mezclador a la entrada de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$\sum_{w \in W} fwu_{w,u} + \sum_{u1 \in U} fuu_{u1,u} = fu_u \quad u \in U \quad (3.3)$$

Balance de agua en el divisor a la salida de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$fu_u = \sum_{u1 \in U} fuu_{u,u1} + fut_u \quad u \in U \quad (3.4)$$

Balance global de agua en la red.

$$\sum_{w \in W} fw_w = \sum_{w \in W} fwt_w + \sum_{u \in U} fut_u \quad (3.5)$$

*Balances de contaminantes.*

Balance del contaminante  $j$  en el mezclador a la entrada de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$\sum_{w \in W} fwu_{w,u} \cdot CW_{w,j} + \sum_{u1 \in U} fuu_{u1,u} \cdot cu_{u1,j}^{\text{out}} = fu_u \cdot cu_{u,j}^{\text{in}} \quad j \in J, u \in U \quad (3.6)$$

Balance del contaminante  $j$  en una operación usuaria de agua  $u$ .

$$fu_u \cdot cu_{u,j}^{\text{in}} + 10^3 \cdot MU_{u,j} = fu_u \cdot cu_{u,j}^{\text{out}} \quad j \in J, u \in U \quad (3.7)$$

Balance global del contaminante  $j$  en la red.

$$\begin{aligned} & \sum_{w \in W} fw_w \cdot CW_{w,j} + 10^3 \cdot \sum_{u \in U} MU_{u,j} \\ & = \sum_{w \in W} fwt_w \cdot CW_{w,j} + \sum_{u \in U} fut_u \cdot cu_{u,j}^{\text{out}} \end{aligned} \quad j \in J \quad (3.8)$$

**Cotas:**

Cotas para la concentración del contaminante  $j$  a la entrada de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$0 \leq CU_{u,j}^{L,in} \leq cu_{u,j}^{in} \leq CU_{u,j}^{U,in} \quad j \in J, u \in U \quad (3.9)$$

Cotas para la concentración del contaminante  $j$  en la salida de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$0 \leq CU_{u,j}^{L,out} \leq cu_{u,j}^{out} \leq CU_{u,j}^{U,out} \quad j \in J, u \in U \quad (3.10)$$

Cotas para el flujo másico de agua a través de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$fu_u^L \leq fu_u \leq fu_u^U \quad u \in U \quad (3.11)$$

Cotas para el flujo másico de agua que sale del divisor de una operación usuaria de agua  $u$  y va hacia el mezclador de una operación usuaria de agua  $u1$  (reúso o recicló).

$$0 \leq fuu_{u,u1}^L \leq fuu_{u,u1} \leq fuu_{u,u1}^U = \min(fu_u^U, fu_{u1}^U) \quad u, u1 \in U \quad (3.12)$$

Cotas para el flujo másico de agua que sale del divisor de una operación usuaria de agua  $u$  y es enviado a tratamiento o a la descarga de efluentes.

$$0 \leq fut_u^L \leq fut_u \leq fut_u^U = fu_u^U \quad u \in U \quad (3.13)$$

Cotas para el flujo másico de agua que sale del divisor de una fuente de agua  $w$  y va hacia el mezclador de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$0 \leq fwu_{w,u}^L \leq fwu_{w,u} \leq fwu_{w,u}^U = \min(fw_w^U, fu_u^U) \quad u \in U, w \in W \quad (3.14)$$

Cotas para el flujo másico de agua que es suministrado por una fuente de agua  $w$ .

$$0 \leq fw_w^L \leq fw_w \leq fw_w^U = FW_w \quad w \in W \quad (3.15)$$

Cotas para el flujo másico de agua que sale del divisor de una fuente de agua  $w$  y es enviado a tratamiento o a la descarga de efluentes.

$$0 \leq fwt_w^L \leq fwt_w \leq fwt_w^U = fw_w^U \quad w \in W \quad (3.16)$$

### ***Parámetros calculados***

Cota inferior y superior para el flujo másico de agua que pasa a través de una operación usuaria de agua  $u$ .

$$fu_u^L = \max_{j \in J} \left( \frac{10^3 \cdot MU_{u,j}}{CU_{u,j}^{U,out}} \right) \quad u \in U \quad (3.17)$$

$$fu_u^U = N_1 \cdot \max_{j \in J} \left( \frac{10^3 \cdot MU_{u,j}}{CU_{u,j}^{U,out} - CU_{u,j}^{U,in}} \right) \quad u \in U \quad (3.18)$$

*Notas:* Si no se especifica en los datos de los casos de estudio el flujo másico límite de agua permitido en cada una de las operaciones, se utiliza la expresión (3.18). La expresión (3.18) permite utilizar un flujo másico de agua que no necesariamente tiene que estar limitado por la carga másica fija de contaminante que se transfiere en una operación usuaria de agua o las concentraciones límites de los contaminantes en la entrada y en la salida de una operación usuaria de agua. Esta expresión permite explorar otras posibilidades de reúso o reciclaje local en cada una de las operaciones usuarias, que de otra forma estaría limitado.

La expresión 3.18 es muy importante, ya que la mayoría de las cotas superiores asociadas a las variables de los flujos másicos de agua están relacionadas con ella. Además, el valor del parámetro  $N_1$  permite, si el diseñador los desea, restringir ( $N_1 < 1$ ) o aumentar ( $N_1 > 1$ ) el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias. Esta característica puede ser útil cuando se considera el tamaño o las dimensiones de una operación usuaria de agua. El valor de  $N_1$  debe manejarse con mucho cuidado, un valor muy pequeño de  $N_1$ , por ejemplo,  $N_1 = 0.6$ , podría restringir demasiado el problema y volverlo infactible. Por otra parte, un valor grande de  $N_1$ , por ejemplo,  $N_1 = 10$  podría conducir a soluciones óptimas degeneradas (Savelski y Bagajewicz, 2000). En este trabajo se utilizó el valor de  $N_1 = 3$ , el cual fue suficiente para reproducir las soluciones reportadas en la literatura y obtener los diseños de red que se presentan en el Capítulo 4.

Por otra parte, las expresiones (3.6) – (3.8) en el modelo WUN-CD, corresponden a restricciones no lineales. Estas restricciones no lineales contienen términos bilineales debido al producto de dos variables continuas, flujos másicos de agua por concentraciones de contaminantes. Los términos bilineales le otorgan la característica no convexa al modelo WUN-CD. Un modelo no convexo puede presentar múltiples soluciones óptimas locales en donde los resolvedores de optimización local pueden quedar atrapados o difícilmente obtener una solución óptima global.

### 3.4. Enfoques de solución del modelo WUN-CD.

En esta sección se describen de forma breve la esencia o los principios fundamentales de los enfoques de solución utilizados para resolver el modelo WUN-CD de PNL. Se utilizan dos enfoques, el primero consiste en utilizar el resolvidor BARON que utiliza un algoritmo de optimización global determinista y, el segundo enfoque de solución consiste en utilizar una estrategia de inicialización estocástica.

#### 3.4.1. BARON

El resolvidor BARON (*“Branch And Reduce Optimization Navigator”*) implementa un algoritmo de optimización global determinista del tipo ramificación y acotamiento (*“Branch and Bound”*, BB). Cuando se resuelve un problema de optimización no convexo con un algoritmo de BB, el conjunto factible (D) se relaja y se descompone en sub-regiones; a este proceso se le conoce como ramificación (Horst y Tuy, 1990). Con el proceso de ramificación es posible descomponer el problema de optimización original en varios sub-problemas más sencillos de resolver (nodos). Estos sub-problemas se pueden resolver utilizando un algoritmo convencional de optimización local para problemas de PNL, por ejemplo, el método generalizado de gradiente reducido (*“Generalized Reduced Gradient”*, GRG).

En el Algoritmo de BB se mantiene un registro de los nodos que aún no se han resuelto. En cada nodo se resuelve un sub-problema diferente e independiente de los demás nodos para determinar cotas inferiores y, si es posible, cotas superiores de la función objetivo (acotamiento). Estas cotas juegan un papel muy importante en el algoritmo, ya que de ellas depende el proceso de ramificación y acotamiento.

El acotamiento consiste en ir actualizando la cota superior global (*“Overall Upper Bound”*, OUB) que, inicialmente, para el caso de minimización, se establece con el valor de infinito y, a medida que avanza el algoritmo, se irá comparando y actualizando con el valor de la función objetivo en cada nodo o sub-problema. Para que se actualice la OUB, la solución obtenida en un determinado nodo, debe de pertenecer a (D) y sólo se actualizará la OUB si la nueva OUB obtenida es menor que la anterior. Si es el caso, se actualiza la OUB y se eliminan (se podan) todos elementos del registro de los nodos abiertos que tengan como cota inferior local un valor mayor a la OUB nueva. En caso contrario se aplica una técnica de ramificación para generar nuevos sub-problemas a partir del nodo actual, en donde el menor valor de las soluciones de los sub-problemas, cuya solución no se encuentra en (D), se establece como la nueva cota inferior global (*“Overall Lower Bound”*, OLB) que, inicialmente, se establece con el valor de menos infinito. Este procedimiento se repite hasta que se cumplan los criterios de paro o convergencia para obtener una solución óptima global.

Existen dos criterios de paro para obtener una solución óptima global. El primero se refiere al criterio de convergencia absoluta, que se establece de la siguiente forma:  $|OUB - OLB| \leq \varepsilon_a$ , donde  $\varepsilon_a$  es el valor de la tolerancia absoluta. El segundo criterio se refiere a la convergencia relativa, que se establece de la siguiente forma  $(|OUB - OLB| / |OLB|) \leq \varepsilon_r$ , donde  $\varepsilon_r$  es el valor de la tolerancia relativa. Estos criterios de paro se cumplen hasta que se han resuelto todos los sub-problemas en los nodos del árbol de búsqueda. En algunos casos el algoritmo de BB puede obtener una solución global en pocas iteraciones. Sin embargo, para demostrar que la solución obtenida es una solución óptima global, se deben de analizar todos los nodos generados en el proceso de ramificación, lo que puede requerir de un tiempo de cómputo considerable. También pueden existir casos en donde es difícil estrechar la brecha entre la OUB y la OLB. Algunos de estos inconvenientes se presentan en el contexto de la síntesis y el diseño de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes, cuando se abordan casos de estudio de una complejidad considerable, como se muestra en los casos de estudio que se tratan en el Capítulo 4. Para una descripción más detallada de un algoritmo de ramificación y acotamiento vea Horst y Tuy (1990).

### **3.4.2. Metodología de multi-arranque estocástico en dos fases**

Cuando no se utilizan técnicas de optimización global determinista, y dada la naturaleza no lineal no convexa del Modelo WUN-CD para la síntesis de redes de agua con operaciones de carga másica fija de múltiples contaminantes, no basta con utilizar los métodos disponibles de optimización local que están basados, por ejemplo, en el método de programación cuadrática sucesiva (“*Successive Quadratic Programming*”, SQP) o el método GRG. La naturaleza no convexa de un modelo matemático debido a la presencia de términos bilineales dificulta en los algoritmos de optimización, la búsqueda de una solución, además de que, la no convexidad puede generar múltiples soluciones óptimas locales. Los métodos de optimización como SQP o GRG sólo resuelven el problema localmente. Por lo tanto, es conveniente poder explorar en la medida de lo posible el espacio de solución de un modelo y a medida que se explora, obtener soluciones óptimas locales. Por lo tanto, como segundo enfoque para la solución del Modelo WUN-CD se utiliza una metodología de multi-arranque estocástico (MAE) (“*Stochastic Multi-start Optimization*”, SMO) en dos fases (Fig. 3.1), propuesta por Núñez-Serna y Zamora (2016).

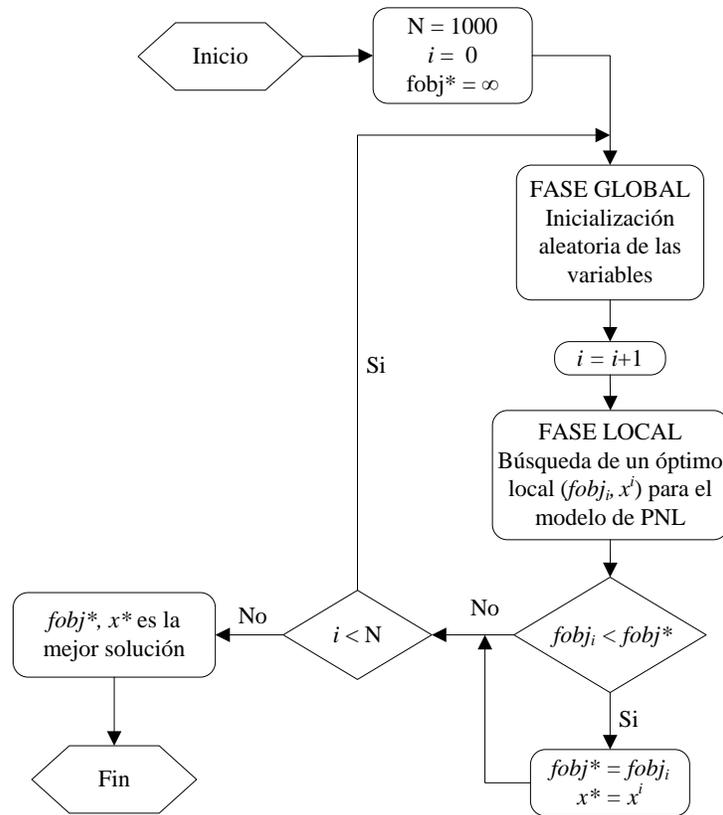


Fig. 3.1. Metodología de optimización de multi-arranque estocástico (MAE) en dos fases (Núñez-Serna y Zamora, 2016), para el problema de minimización.

En la primera fase (fase global) de la metodología de MAE, se realiza una inicialización estocástica de las variables del modelo en la región del espacio de solución, definido por las cotas de las variables de decisión. La generación aleatoria de los valores de inicio de las variables se realiza utilizando una distribución probabilística uniforme, definida entre las cotas inferiores y superiores de cada variable. En la segunda fase (fase local), se utiliza un método de optimización de PNL para obtener una solución óptima local, utilizando el punto generado en la primera fase como punto de arranque. Estas dos fases se incorporan en un proceso iterativo, mientras se mantiene un registro de la solución que se obtiene en cada iteración. En donde el número de iteraciones  $N$  se establece por el usuario (Fig. 3.1).

## Capítulo 4. Resultados y discusión: casos de estudio

### 4.1. Introducción

En este capítulo se pone a prueba el modelo WUN-CD para la síntesis y diseño óptimo de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes, que se presentó en la Sección 3.3. Se abordan y discuten ocho casos de estudio (“*benchmark problems*”) de la literatura, y se proponen dos casos de estudio nuevos que se resuelven en este trabajo. Los casos de estudio se resuelven con la finalidad de validar la capacidad del modelo desarrollado para reproducir las soluciones reportadas en la literatura, las cuales han sido determinadas con diferentes metodologías de diseño. También se explora la posibilidad de obtener mejores soluciones y diseños que no han sido reportados previamente en la literatura.

El modelo WUN-CD de PNL no convexo se implementa en el sistema de modelado algebraico general (“*General Algebraic Modeling System*”, GAMS 21.4), en una computadora de escritorio que cuenta con un procesador Intel CORE-i7 de 3.2 GHz y 12 GB de memoria RAM. Los problemas de PNL asociados a los casos de estudio se resuelven siguiendo el esquema de la Fig. 4.1, que consiste en, por una parte, utilizar el resolvidor BARON en su versión 7.2.3 para resolver el modelo propuesto y determinar soluciones óptimas globales de forma rigurosa (como se describió en la Sección 3.4.1) y, por otra parte, se utiliza una estrategia de solución basada en multi-arranque estocástico (MAE). Para garantizar optimalidad global con BARON, se establecen los siguientes valores mínimos permitidos para los criterios de convergencia. Para la tolerancia absoluta (“*absolute termination tolerance*”,  $\epsilon_{psa}$ ) se usa un valor de  $1 \times 10^{-12}$  y para la tolerancia relativa (“*relative termination tolerance*”,  $\epsilon_{psr}$ ) se le asigna el valor de  $1 \times 10^{-9}$ . Como criterio de paro adicional en BARON, se establece un tiempo límite máximo (“*maximum CPU time allowed*”,  $\maxtime$ ) de 10,800 segundos (3 horas) de CPU. Cuando BARON no cumpla con los criterios de convergencia y exceda el tiempo máximo de solución establecido, el proceso de solución con BARON se terminará y se tomará como solución final la mejor solución obtenida hasta ese momento. Posteriormente, de forma paralela, se utiliza el segundo método de solución que consiste en la metodología de optimización de multi-arranque estocástico (MAE) en dos fases, que se describió en la Sección 3.4.2. En la metodología MAE se utiliza el resolvidor CONOPT 3 para resolver el modelo WUN-CD y optimizar localmente en función del punto de inicio generado por el algoritmo en cada iteración. Con esta última metodología se implementan 1000 iteraciones ( $N = 1000$ ) para cada caso de estudio, con el propósito de explorar y obtener otras soluciones.

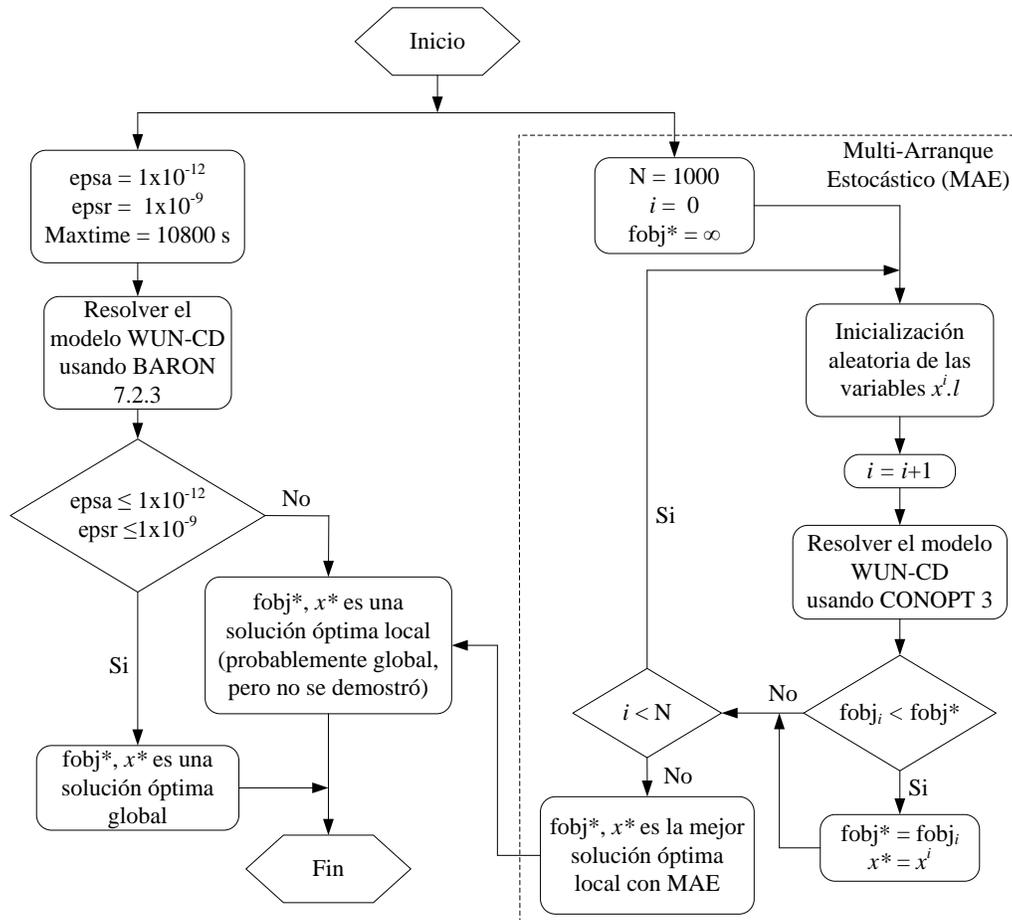


Fig. 4.1. Esquema de solución utilizado para resolver el modelo WUN-CD en cada caso de estudio.

## 4.2. Caso de Estudio 4.1

Este caso de estudio está conformado por una fuente de agua dulce ( $w1$ ), dos operaciones usuarias de agua ( $u1$  y  $u2$ ) y dos contaminantes (A y B). En la Tabla 4.1 se muestran los datos de las cargas máxicas de los contaminantes que se transfieren en las operaciones usuarias de agua y las concentraciones límite de cada contaminante a la entrada y a la salida de las operaciones usuarias. La fuente de agua ( $w1$ ) es una fuente de agua dulce, es decir, las concentraciones de los contaminantes A y B son iguales a cero.

El objetivo de este caso de estudio consiste en ilustrar la implementación del modelo WUN-CD y mostrar el modelo particular a resolver para determinar un diseño óptimo con un flujo mínimo agua fresca en la red. El diseño de red debe cumplir con las restricciones de concentraciones límite a la entrada y a la salida de las operaciones usuarias de agua.

Tabla 4.1. Datos límite para el Caso de Estudio 4.1 [Wang y Smith (1994)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	8	0	100
	B	4	20	70
$u2$	A	7.2	80	200
	B	2.1	30	120

Este caso de estudio fue propuesto por Wang y Smith (1994). Ellos utilizan la metodología de Punto de Pliegue (“*Water Pinch*”) para determinar el flujo mínimo requerido de agua dulce para diseñar una red usuaria de agua con múltiples contaminantes. El flujo mínimo de agua dulce que determinaron para la red fue de 104 ton/h. El diseño de red que se muestra en la Fig. 4.2, lo obtuvieron utilizando el método de diseño del número mínimo de fuentes de agua (“*minimum number of water sources*”), propuesto en la metodología de Punto de Pliegue y utilizando la meta del flujo mínimo de agua dulce determinado.

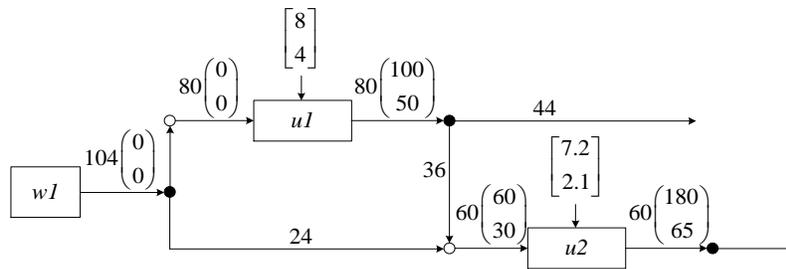


Fig. 4.2. Diseño reportado por Wang y Smith (1994) para el Caso de Estudio 4.1, con un consumo total de agua dulce de 104 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.2.1. Superestructura de red particular para el Caso de Estudio 4.1

A partir de la superestructura de red general presentada en la Sección 2.3, se obtiene la superestructura de red particular asociada al Caso de Estudio 4.1, que se muestra en la Fig. 4.3. La superestructura de red de la Fig. 4.3 se obtuvo de fijar el número de fuentes de agua y operaciones usuarias de agua involucradas. La superestructura particular de red representa todas las posibilidades de interconexión entre la fuente de agua fresca ( $wI$ ) y las dos operaciones usuarias de agua ( $u1$  y  $u2$ ) de carga másica fija.



Balance global de agua en la red:

$$fw_1 = fut_1 + fut_2 + fwt_1 \quad (4.7)$$

Balances de materia para los contaminantes en los mezcladores a la entrada de las operaciones usuarias de agua:

$$fu_1 \cdot cu_{1,A}^{in} = fwu_{1,1} \cdot CW_{1,A} + fuu_{1,1} \cdot cu_{1,A}^{out} + fuu_{2,1} \cdot cu_{2,A}^{out} \quad (4.8)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,B}^{in} = fwu_{1,1} \cdot CW_{1,B} + fuu_{1,1} \cdot cu_{1,B}^{out} + fuu_{2,1} \cdot cu_{2,B}^{out} \quad (4.9)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,A}^{in} = fwu_{1,2} \cdot CW_{1,A} + fuu_{1,2} \cdot cu_{1,A}^{out} + fuu_{2,2} \cdot cu_{2,A}^{out} \quad (4.10)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,B}^{in} = fwu_{1,2} \cdot CW_{1,B} + fuu_{1,2} \cdot cu_{1,B}^{out} + fuu_{2,2} \cdot cu_{2,B}^{out} \quad (4.11)$$

Balances de materia para los contaminantes en las operaciones usuarias de agua:

$$fu_1 \cdot cu_{1,A}^{in} + 10^3 \cdot MU_{1,A} = fu_1 \cdot cu_{1,A}^{out} \quad (4.12)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,B}^{in} + 10^3 \cdot MU_{1,B} = fu_1 \cdot cu_{1,B}^{out} \quad (4.13)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,A}^{in} + 10^3 \cdot MU_{2,A} = fu_2 \cdot cu_{2,A}^{out} \quad (4.14)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,B}^{in} + 10^3 \cdot MU_{2,B} = fu_2 \cdot cu_{2,B}^{out} \quad (4.15)$$

Balances globales de materia para los contaminantes en la red:

$$fw_1 \cdot CW_{1,A} + 10^3 \cdot (MU_{1,A} + MU_{2,A}) = fut_1 \cdot cu_{1,A}^{out} + fut_2 \cdot cu_{2,A}^{out} + fwt_1 \cdot CW_{1,A} \quad (4.16)$$

$$fw_1 \cdot CW_{1,B} + 10^3 \cdot (MU_{1,B} + MU_{2,B}) = fut_1 \cdot cu_{1,B}^{out} + fut_2 \cdot cu_{2,B}^{out} + fwt_1 \cdot CW_{1,B} \quad (4.17)$$

El modelo WUN-CD1 asociado a la superestructura de red particular de la Fig. 4.3 cuenta con 20 variables de decisión y 17 ecuaciones, de las cuales 10 de ellas son no lineales y no convexas (Ecs. (4.8) – (4.17)). Estas ecuaciones son no lineales y no convexas debido a los 24 términos bilineales que aparecen en las ecuaciones de balance de materia para los contaminantes. El modelo WUN-CD1 se resolvió con la finalidad de determinar un diseño óptimo de red que integre a las dos operaciones usuarias de agua ( $u1$  y  $u2$ ) y minimice el flujo total de agua dulce de la fuente  $w1$ .

#### 4.2.3. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.1

Al resolver el modelo WUN-CD1 con el resolvidor BARON, se obtuvo una solución óptima global en un tiempo de CPU total de 0.03 segundos. En la Fig. 4.4 se muestra el diseño de red asociado a la solución reportada por BARON, con un flujo total mínimo de

agua dulce de la fuente  $w1$  de 100.571 ton/h, que representa una reducción del 3.3% comparado con el flujo total de agua dulce de la fuente  $w1$  en el diseño de red de la Fig. 4.2, reportado por Wang y Smith (1994). Los diseños de las Figs. 4.2 y 4.4 presentan la misma topología de red; sin embargo, los valores de los flujos de agua en ambos diseños son diferentes, a excepción del flujo de agua a través de la operación  $u1$ , que en ambos diseños consume 80 ton/h de agua fresca.

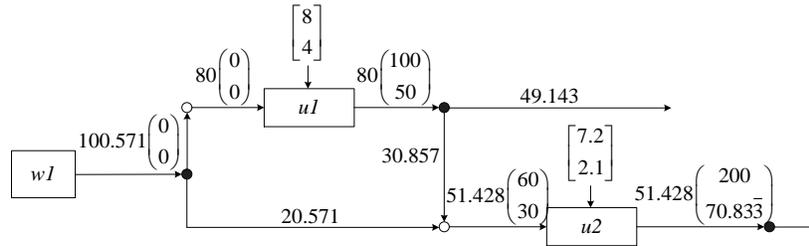


Fig. 4.4. Diseño óptimo global de red para el Caso de Estudio 4.1, con un flujo total mínimo de agua dulce de la fuente  $w1$  de 100.571 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Comparando los diseños de las Figs. 4.2 y 4.4, se observó que el flujo de agua a través de la operación  $u2$ , en la Fig. 4.2, impide a los contaminantes A y B alcanzar sus concentraciones límite de salida de 200 y 120 ppm, respectivamente. A pesar de que en ambos diseños las concentraciones de los contaminantes a la entrada de  $u2$  son iguales, en el diseño de red la Fig. 4.4, el flujo de agua a través de  $u2$  se reduce de 60 a 51.428 ton/h (14.28%) hasta alcanzar la concentración límite de salida del contaminante A de 200 ppm. La reducción del flujo de agua a través de  $u2$ , en la Fig. 4.4, permitió reducir los flujos que abastecen a  $u2$ . Por ejemplo, el flujo de agua que va de la operación  $u1$  a  $u2$  se redujo de 36 a 30.857 ton/h y el flujo que va de la fuente  $w1$  hacia la operación  $u2$ , se redujo de 24 a 20.571 ton/h.

Por otra parte, al resolver el modelo WUN-CD1 utilizando la metodología de solución MAE, se obtuvo la misma solución asociada al diseño óptimo global de red de la Fig. 4.4 en la primera iteración, en un tiempo de CPU de 0.016 segundos. Además, con esta metodología se identificó una solución óptima diferente, con un flujo total mínimo de agua de la fuente  $w1$  de 133.333 ton/h. Esta solución se obtuvo en un tiempo de CPU de 2.641 segundos en la iteración número 50. El tiempo de CPU total para las 1000 iteraciones de la metodología MAE corresponde a 47.882 segundos.

Como conclusión para este caso de estudio, la diferencia entre el flujo total de agua dulce en el diseño de la red reportada por Wang y Smith (1994) se debió a que ellos determinaron como meta de diseño que el flujo total mínimo de agua dulce debía ser de 104 ton/h. Por lo tanto, su diseño se limitó a este flujo mínimo de agua dulce pre-determinado.

Sin embargo, la optimización permitió obtener una solución no anticipada por la metodología de punto de pliegue, que ajustó el flujo de agua a través de  $u_2$ , hasta alcanzar la concentración límite de salida del contaminante A de 200 ppm, lo cual permitió reducir el flujo total de agua dulce de la fuente  $w_1$ .

### 4.3. Caso de Estudio 4.2

Este caso de estudio consiste en una fuente de agua dulce ( $w_1$ ), tres operaciones usuarias de agua ( $u_1$ ,  $u_2$  y  $u_3$ ) y tres contaminantes: un tipo de hidrocarburo (HC), sulfuro de hidrógeno ( $H_2S$ ) y un tipo de sal (S). Los datos de las cargas máxicas y las concentraciones límite de cada contaminante a la entrada y salida de las operaciones usuarias de agua se muestran en la Tabla 4.2. La fuente de agua ( $w_1$ ) no contiene contaminantes, por lo tanto, las concentraciones de los contaminantes HC,  $H_2S$  y S en la fuente de agua ( $w_1$ ) son iguales a cero. Este caso ilustra cómo se incrementa el número de variables, ecuaciones y restricciones cuando se considera una operación y un contaminante adicionales, comparado con el caso de estudio anterior. Se muestra el modelo particular, asociado a este caso de estudio, para determinar un diseño óptimo de red que reduzca al mínimo el flujo de agua dulce de la fuente  $w_1$ , integre a las operaciones y cumpla con las restricciones de concentraciones límite en la entrada y salida de las operaciones usuarias de agua.

Tabla 4.2. Datos límite para el Caso de Estudio 4.2 [Doyle y Smith (1997)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u_1$	HC	0.675	0	15
	$H_2S$	18	0	400
	S	1.575	0	35
$u_2$	HC	3.4	20	120
	$H_2S$	414.8	300	12500
	S	4.59	45	180
$u_3$	HC	5.6	120	220
	$H_2S$	1.4	20	45
	S	520.8	200	9500

Los primeros autores en abordar este caso de estudio fueron Doyle y Smith (1997). Estos autores propusieron un modelo de PNL para determinar un diseño óptimo de red. Para resolver su modelo utilizaron un método de solución secuencial. En el modelo de PNL fijaron las variables de las concentraciones de los contaminantes en sus valores límite de salida para obtener un modelo relajado de programación lineal (PL) y lo resolvieron. La solución óptima del modelo de PL la utilizaron como punto de inicialización para resolver el modelo de PNL original. El diseño de Doyle y Smith (1997) corresponde al mejor diseño de red reportado en la literatura para el Caso de Estudio 4.2 (Fig. 4.5), con un flujo total

mínimo de agua dulce reportado de 105.59 ton/h. Sin embargo, el flujo total mínimo de agua revisado con el modelo WUN-CD es de 105.602 ton/h.

Wang y col. (2003) emplearon una metodología heurística de diseño que consiste en incluir un reservorio interno de agua en el diseño de red, cuya función es recibir las corrientes de salida de los procesos con un nivel de contaminación bajo y, al mismo tiempo, proveer a los procesos que pueden utilizar agua con un nivel de contaminación mayor. El reservorio interno de agua se introduce con la finalidad de reducir la complejidad topológica del diseño de una red de operaciones usuarias de agua. Ellos obtuvieron un diseño de red con un reservorio interno de agua, cuyo flujo total de agua dulce reportado es de 106.7 ton/h.

Wang y col. (2012) desarrollaron una metodología híbrida, la cual combina de forma iterativa el método de conceptos del potencial de concentración (“*Concentration Potential Concepts*”, CPC), propuesto por Liu y col. (2009) con un modelo de PL. Estos autores utilizaron el método de CPC para determinar el orden de precedencia de las operaciones usuarias de agua y un modelo PL para determinar el orden de asignación de las corrientes de salida de las operaciones para proveer agua a las demás operaciones. Ellos presentaron el mismo diseño de red obtenido por Doyle y Smith (1997), con un flujo total de agua dulce reportado de 105.60 ton/h.

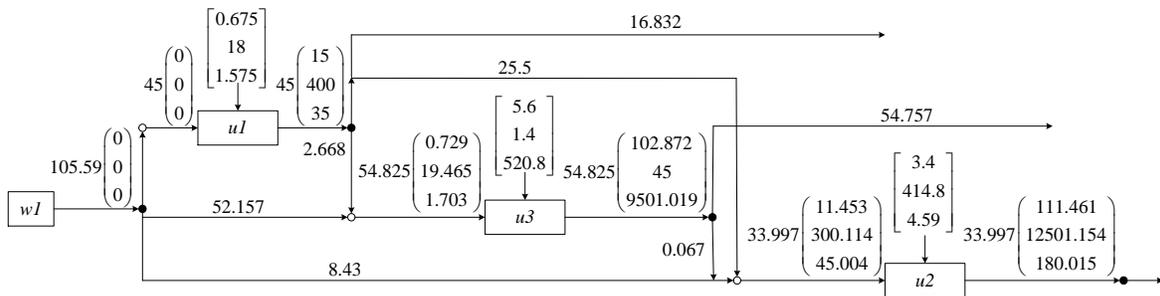


Fig. 4.5. Diseño de red obtenido por Doyle y Smith (1997) para el Caso de Estudio 4.2, con un flujo total de agua dulce reportado de 105.59 ton/h y un flujo total verificado de 105.602 ton/h, usando el modelo WUN-CD. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

### 4.3.1. Superestructura de red particular para el Caso de Estudio 4.2

La superestructura de red particular que se muestra en la Fig. 4.6, se obtuvo fijando el número de fuentes de agua dulce y el número de operaciones usuarias de agua correspondientes al Caso de Estudio 4.2. La superestructura particular de la Fig. 4.6, representa todas las interconexiones posibles entre la fuente de agua dulce ( $w1$ ) y las tres operaciones usuarias de agua ( $u1$ ,  $u2$  y  $u3$ ).

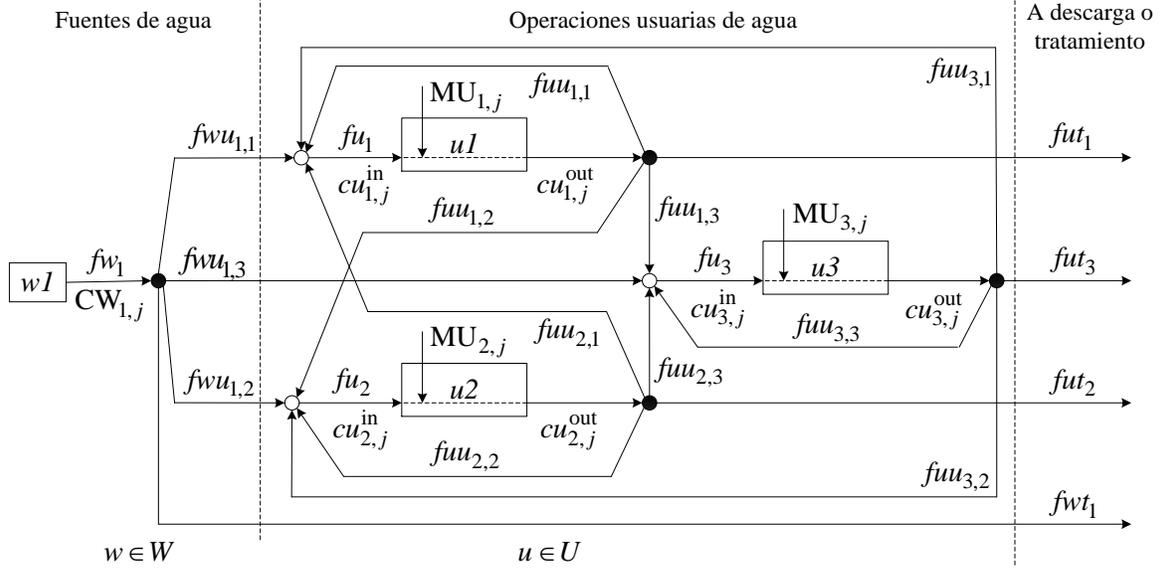


Fig. 4.6. Superestructura de red particular asociada al Caso de Estudio 4.2.

#### 4.3.2. Modelo asociado a la superestructura particular del Caso de Estudio 4.2

El modelo particular se obtuvo fijando en el modelo general (Sección 3.3), el número de fuentes de agua, el número de operaciones usuarias y el número de contaminantes asociados al Caso de Estudio 4.2, el cual no considera costos de operación asociados a la fuente de agua ( $wI$ ); por lo tanto, sólo se minimiza el flujo total de agua dulce en la red.

Modelo WUN-CD2

Función objetivo:

$$\text{Minimizar} \quad z = fw_1 \quad (4.18)$$

Sujeto a

Balance de agua en el divisor de la fuente de agua:

$$fw_1 = fwu_{1,1} + fwu_{1,2} + fwu_{1,3} + fwt_1 \quad (4.19)$$

Balances de agua en los mezcladores a la entrada de las operaciones usuarias de agua:

$$fwu_{1,1} + fuu_{1,1} + fuu_{2,1} + fuu_{3,1} = fu_1 \quad (4.20)$$

$$fwu_{1,2} + fuu_{1,2} + fuu_{2,2} + fuu_{3,2} = fu_2 \quad (4.21)$$

$$fwu_{1,3} + fuu_{1,3} + fuu_{2,3} + fuu_{3,3} = fu_3 \quad (4.22)$$

Balances de agua en los divisores a la salida de las operaciones usuarias de agua:

$$fu_1 = fut_1 + fuu_{1,1} + fuu_{1,2} + fuu_{1,3} \quad (4.23)$$

$$fu_2 = fut_2 + fuu_{2,1} + fuu_{2,2} + fuu_{2,3} \quad (4.24)$$

$$fu_3 = fut_3 + fuu_{3,1} + fuu_{3,2} + fuu_{3,3} \quad (4.25)$$

Balance global de agua en la red:

$$fw_1 = fut_1 + fut_2 + fut_3 + fwt_1 \quad (4.26)$$

Balances de materia para los contaminantes en los mezcladores a la entrada de las operaciones usuarias:

$$fu_1 \cdot cu_{1,A}^{in} = fwu_{1,1} \cdot CW_{1,A} + fuu_{1,1} \cdot cu_{1,A}^{out} + fuu_{2,1} \cdot cu_{2,A}^{out} + fuu_{3,1} \cdot cu_{3,A}^{out} \quad (4.27)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,B}^{in} = fwu_{1,1} \cdot CW_{1,B} + fuu_{1,1} \cdot cu_{1,B}^{out} + fuu_{2,1} \cdot cu_{2,B}^{out} + fuu_{3,1} \cdot cu_{3,B}^{out} \quad (4.28)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,C}^{in} = fwu_{1,1} \cdot CW_{1,C} + fuu_{1,1} \cdot cu_{1,C}^{out} + fuu_{2,1} \cdot cu_{2,C}^{out} + fuu_{3,1} \cdot cu_{3,C}^{out} \quad (4.29)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,A}^{in} = fwu_{1,2} \cdot CW_{1,A} + fuu_{1,2} \cdot cu_{1,A}^{out} + fuu_{2,2} \cdot cu_{2,A}^{out} + fuu_{3,2} \cdot cu_{3,A}^{out} \quad (4.30)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,B}^{in} = fwu_{1,2} \cdot CW_{1,B} + fuu_{1,2} \cdot cu_{1,B}^{out} + fuu_{2,2} \cdot cu_{2,B}^{out} + fuu_{3,2} \cdot cu_{3,B}^{out} \quad (4.31)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,C}^{in} = fwu_{1,2} \cdot CW_{1,C} + fuu_{1,2} \cdot cu_{1,C}^{out} + fuu_{2,2} \cdot cu_{2,C}^{out} + fuu_{3,2} \cdot cu_{3,C}^{out} \quad (4.32)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,A}^{in} = fwu_{1,3} \cdot CW_{1,A} + fuu_{1,3} \cdot cu_{1,A}^{out} + fuu_{2,3} \cdot cu_{2,A}^{out} + fuu_{3,3} \cdot cu_{3,A}^{out} \quad (4.33)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,B}^{in} = fwu_{1,3} \cdot CW_{1,B} + fuu_{1,3} \cdot cu_{1,B}^{out} + fuu_{2,3} \cdot cu_{2,B}^{out} + fuu_{3,3} \cdot cu_{3,B}^{out} \quad (4.34)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,C}^{in} = fwu_{1,3} \cdot CW_{1,C} + fuu_{1,3} \cdot cu_{1,C}^{out} + fuu_{2,3} \cdot cu_{2,C}^{out} + fuu_{3,3} \cdot cu_{3,C}^{out} \quad (4.35)$$

Balances de materia para los contaminantes en las operaciones usuarias de agua:

$$fu_1 \cdot cu_{1,A}^{in} + 10^3 \cdot MU_{1,A} = fu_1 \cdot cu_{1,A}^{out} \quad (4.36)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,B}^{in} + 10^3 \cdot MU_{1,B} = fu_1 \cdot cu_{1,B}^{out} \quad (4.37)$$

$$fu_1 \cdot cu_{1,C}^{in} + 10^3 \cdot MU_{1,C} = fu_1 \cdot cu_{1,C}^{out} \quad (4.38)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,A}^{in} + 10^3 \cdot MU_{2,A} = fu_2 \cdot cu_{2,A}^{out} \quad (4.39)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,B}^{in} + 10^3 \cdot MU_{2,B} = fu_2 \cdot cu_{2,B}^{out} \quad (4.40)$$

$$fu_2 \cdot cu_{2,C}^{in} + 10^3 \cdot MU_{2,C} = fu_2 \cdot cu_{2,C}^{out} \quad (4.41)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,A}^{in} + 10^3 \cdot MU_{3,A} = fu_3 \cdot cu_{3,A}^{out} \quad (4.42)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,B}^{in} + 10^3 \cdot MU_{3,B} = fu_3 \cdot cu_{3,B}^{out} \quad (4.43)$$

$$fu_3 \cdot cu_{3,C}^{in} + 10^3 \cdot MU_{3,C} = fu_3 \cdot cu_{3,C}^{out} \quad (4.44)$$

Balances globales de materia para los contaminantes en la red:

$$fw_1 \cdot CW_{1,A} + 10^3 \cdot (MU_{1,A} + MU_{2,A} + MU_{3,A}) = fut_1 \cdot cu_{1,A}^{out} + fut_2 \cdot cu_{2,A}^{out} + fut_3 \cdot cu_{3,A}^{out} + fwt_1 \cdot CW_{1,A} \quad (4.45)$$

$$fw_1 \cdot CW_{1,B} + 10^3 \cdot (MU_{1,B} + MU_{2,B} + MU_{3,B}) = fut_1 \cdot cu_{1,B}^{out} + fut_2 \cdot cu_{2,B}^{out} + fut_3 \cdot cu_{3,B}^{out} + fwt_1 \cdot CW_{1,B} \quad (4.46)$$

$$fw_1 \cdot CW_{1,C} + 10^3 \cdot (MU_{1,C} + MU_{2,C} + MU_{3,C}) = fut_1 \cdot cu_{1,C}^{out} + fut_2 \cdot cu_{2,C}^{out} + fut_3 \cdot cu_{3,C}^{out} + fwt_1 \cdot CW_{1,C} \quad (4.47)$$

El modelo WUN-CD2 asociado a la superestructura de red particular de la Fig. 4.6 consiste de 38 variables de decisión, 30 ecuaciones, de las cuales, 21 son no lineales y no convexas, debido a los 63 términos bilineales presentes en las Ecs. (4.27) – (4.47). El modelo WUN-CD2 se resolvió para determinar un diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.2, minimizando el flujo total de agua dulce en la red.

### 4.3.3. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.2

En la Fig. 4.7 se muestra el diseño de red asociada a una solución óptima global que se obtuvo al resolver el modelo WUN-CD2 con BARON. Esta solución se obtuvo en un tiempo de CPU total de 0.12 segundos. El flujo total mínimo de agua dulce en la red de la Fig. 4.7 es de 105.602 ton/h. La topología de las Figs. 4.5 y 4.7 son similares; sin embargo, el diseño de red de la Fig. 4.7 incluye un reciclo local de 1.169 ton/h en la operación usuaria de agua  $u3$ .

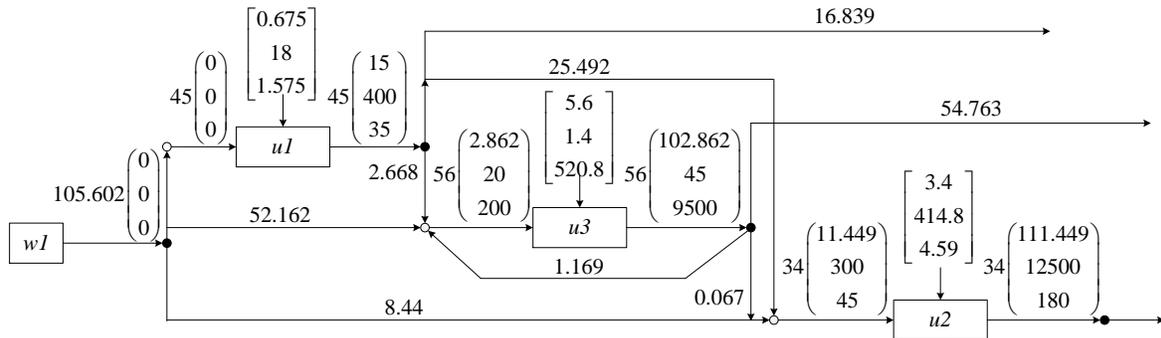


Fig. 4.7. Diseño de red asociado a una solución óptima global obtenida con BARON, para el Caso de Estudio 4.2, con un flujo total mínimo de agua dulce de 105.602 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Comparando los diseños de las Figs. 4.5 y 4.7, se observa que el flujo de agua a través de la operación usuaria  $u_3$ , en la Fig. 4.7, se incrementó de 54.825 a 56 ton/h (2.14%) debido al flujo de reciclo de agua en torno a  $u_3$ . Además, el reciclo de agua en  $u_3$  no presenta un efecto en la reducción del flujo total de agua dulce en la red. En la práctica, utilizar agua dulce o agua con un bajo contenido de contaminantes, permite reducir el flujo de agua a través de una operación usuaria y al mismo tiempo favorece las fuerzas motrices de transferencia de masa de los contaminantes. Estos dos aspectos son importantes al momento de considerar las dimensiones o el tamaño de una operación usuaria de agua, para reducir costos de inversión de capital y costos de operación asociados al tamaño de una operación. En la operación  $u_3$  de la Fig. 4.7, se observa el efecto contrario, no utiliza agua con un bajo contenido de contaminantes y las fuerzas motrices de transferencia de masa se reducen debido al nivel de contaminantes presentes en la entrada de la operación  $u_3$ , a consecuencia del reciclo local. Por lo tanto, la red de operaciones usuarias de agua que presenta mejores características de diseño, es el de la Fig. 4.5.

Por otra parte, con la metodología MAE se obtuvo la solución asociada al diseño de red de la Fig. 4.7 en la primera iteración, en un tiempo de CPU de 0.031 segundos. Un resultado interesante que se obtuvo con esta metodología, radica en la identificación de una topología base, es decir, se obtuvieron diseños de red con la misma topología y mismo flujo total mínimo de agua dulce de 105.602 ton/h, pero con una distribución de agua que cambia de un diseño a otro. La topología base comprende desde el diseño de red sin reciclo en la operación  $u_3$  (Fig. 4.5), hasta el diseño de red con un reciclo máximo de 1.169 ton/h en la operación  $u_3$  (Fig. 4.7). Por ejemplo, en las iteraciones 2, 3, 4 y 5 se obtuvo la misma topología y flujo total mínimo asociada a la Fig. 4.7, con los siguientes valores de flujo de reciclo de agua en la operación  $u_3$  (respectivamente): 0.582, 0.107, 0.381 y 0.559 ton/h y en la quinta iteración se obtuvo el diseño de la Fig. 4.5. Adicionalmente, en la iteración número 32 se identificó una solución óptima local diferente, en un tiempo de CPU de 1.589 segundos, con un flujo total mínimo de agua dulce en la red de 111.178 ton/h. Para esta solución también se identificó una topología base, que comprende desde el diseño de red sin reciclo, hasta el diseño de red con un reciclo máximo en la operación  $u_3$  de 1.169 ton/h. El tiempo de CPU total para las 1000 iteraciones de la metodología de multi-arranque estocástico fue de 60.336 segundos.

#### **4.4. Caso de Estudio 4.3**

Este caso de estudio exhibe una mayor complejidad con respecto a los dos casos de estudio anteriores. Este caso de estudio está conformado por una fuente de agua dulce, siete operaciones usuarias de agua y tres contaminantes. En este caso de estudio no se considera el costo unitario del agua y las concentraciones de los contaminantes en la fuente de agua son iguales a cero. En la Tabla 4.3 se muestran los datos del Caso de Estudio 4.3.

Tabla 4.3. Datos límite para el Caso de Estudio 4.3 [Wang y col. (2003)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	1.25	0	50
	B	2.5	0	100
	C	1.25	0	50
$u2$	A	7	0	100
	B	21	0	300
	C	42	0	600
$u3$	A	4.55	20	150
	B	12.25	50	400
	C	26.25	50	800
$u4$	A	22	50	600
	B	13.6	110	450
	C	20	200	700
$u5$	A	3.84	20	500
	B	4.4	100	650
	C	1.6	200	400
$u6$	A	30	500	1100
	B	160	300	3500
	C	95	600	2500
$u7$	A	22.5	150	900
	B	114	700	4500
	C	66	800	3000

Los autores que propusieron este caso de estudio fueron Wang y col. (2003). Ellos utilizaron una metodología heurística de diseño que incluye un reservorio interno de agua en la red y desarrollaron un diseño de red con un flujo total de agua dulce de 160.4 ton/h.

También fue abordado por Wang y col. (2012), quienes utilizaron una metodología híbrida de solución que combina el método heurístico de CPC (“*Concentration Potential Concepts*”), propuesto por Liu y col. (2009) y un modelo de PL. Con esta metodología híbrida obtuvieron un diseño de red con un flujo total de agua dulce de 140.93 ton/h. Este diseño de red (Fig. 4.8) corresponde a la mejor solución reportada en la literatura para este caso de estudio.

Su y col. (2012) presentaron un nuevo método de diseño que utiliza la metodología heurística de CPC para obtener un diseño de red convencional, sin un reservorio de agua interno, el cual cuenta con un flujo total de agua dulce de 140.93 ton/h. A partir del diseño de red convencional, ellos desarrollaron un diseño de red con un reservorio de agua interno con un flujo total de agua dulce de 156.76 ton/h.

Zhao y col. (2014) presentaron un nuevo método heurístico de diseño que incluye dos reservorios de agua internos en la red. Para el diseño final de red, ellos utilizaron el método de CPC para obtener un diseño de red convencional, con un flujo total de agua fresca de 140.93 ton/h. El diseño de red convencional lo dividieron en tres secciones. La primera sección se compone de las operaciones que solo utilizan agua dulce. Las operaciones que

utilizan agua dulce parcialmente se ubican en la segunda sección y la última sección se conforma de las operaciones que no utilizan agua dulce. El diseño de red final con dos reservorios de agua internos que obtuvieron, tiene un flujo total de agua dulce de 144.62 ton/h.

Para más detalles sobre las distintas metodologías de diseño que se han utilizado para este caso de estudio, puede consultar la Sección 1.5.

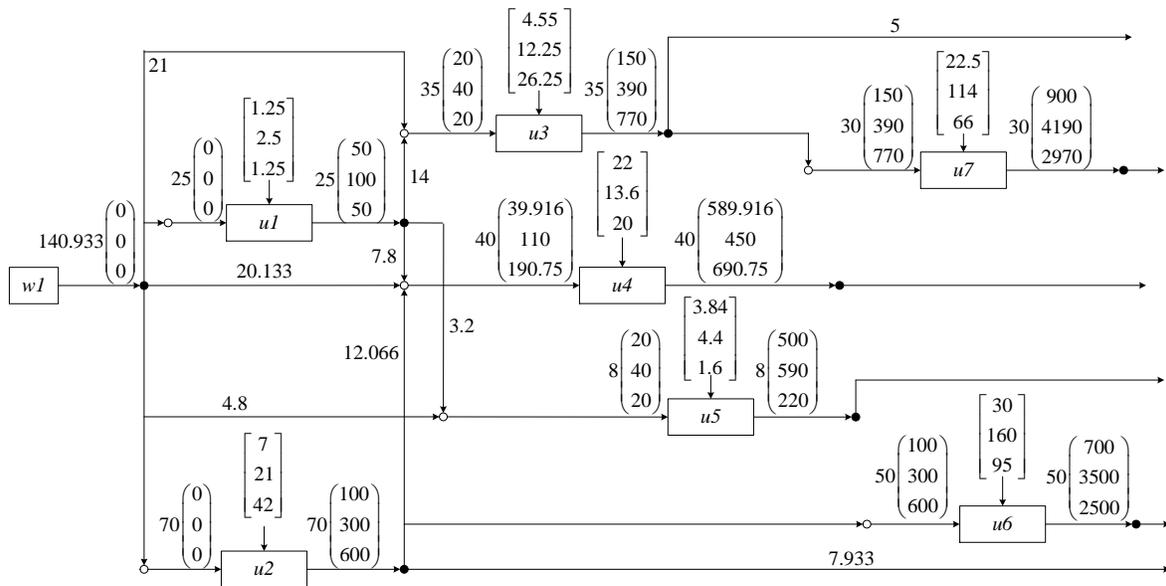


Fig. 4.8. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.3, reportado por Wang y col. (2012), con un flujo total de agua dulce de 140.93 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.4.1. Superestructura de red particular para el Caso de Estudio 4.3

La superestructura de red particular asociada al Caso de Estudio 4.3 que se presenta en la Fig. 4.9, muestra la complejidad asociada al problema de síntesis y diseño óptimo de una red de agua con siete operaciones usuarias de agua de carga másica fija de múltiples contaminantes y una fuente de agua dulce.

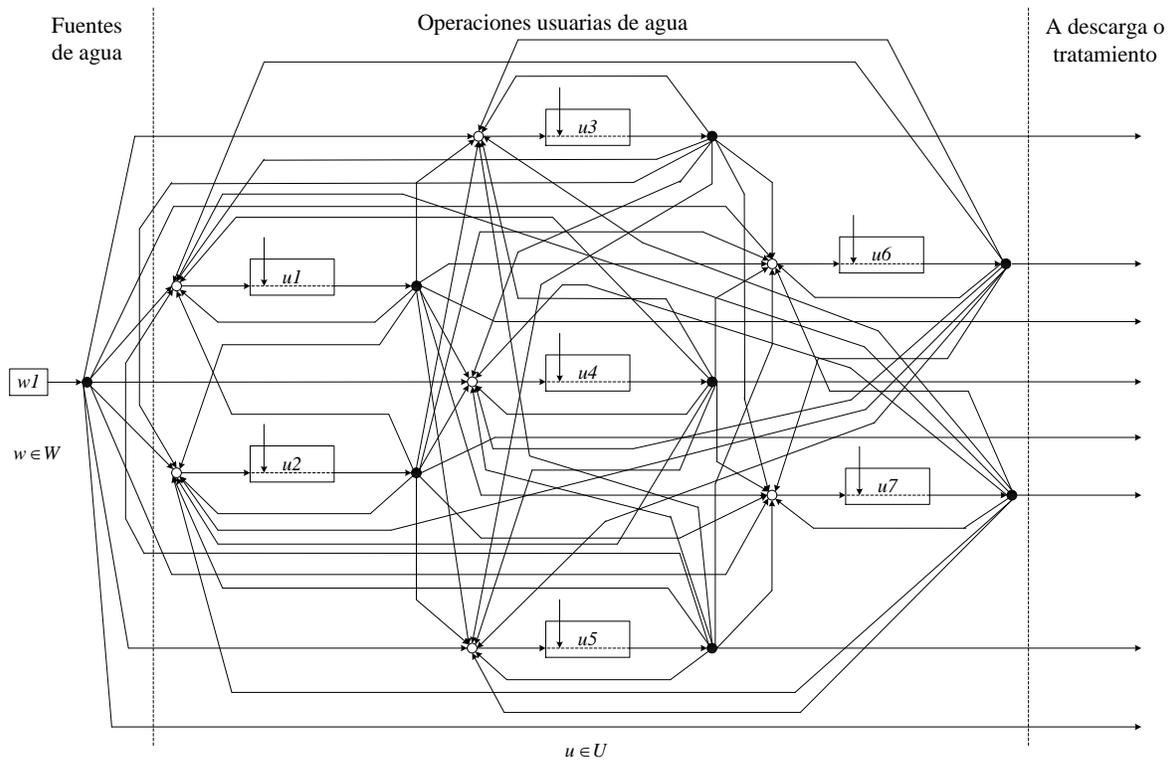


Fig. 4.9. Superestructura de red particular para el Caso de Estudio 4.3.

#### 4.4.2. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.3

Al resolver el modelo asociado a la superestructura de la Fig. 4.9 con el resolvidor BARON, éste no convergió a una solución óptima global en el tiempo máximo establecido (maxtime) de 10,800 segundos. Se detuvo el proceso de solución con un valor de la tolerancia absoluta (epsa) de  $4.815 \times 10^{-3}$  y un valor de la tolerancia relativa (epsr) de  $3 \times 10^{-5}$ . La mejor solución reportada por BARON se obtuvo en el nodo 28,307 y el proceso de solución se detuvo en la iteración 29,040, quedando 12,668 nodos abiertos.

En la Fig. 4.10 se presenta el diseño óptimo de red asociado a la mejor solución óptima obtenida y reportada por BARON, con un flujo total mínimo de agua dulce de 139.7 ton/h. El diseño de red de la Fig. 4.10 redujo el flujo total de agua en un 0.87% con respecto al mejor diseño reportado en la literatura, que corresponde al diseño de red de la Fig. 4.8.

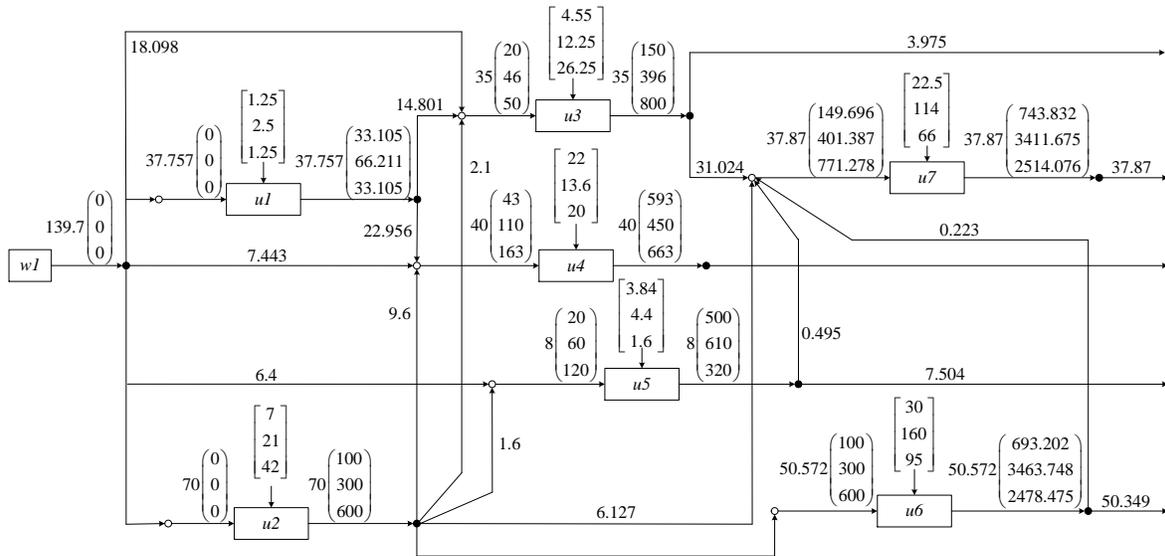


Fig. 4.10. Diseño óptimo de red asociado a la mejor solución obtenida y reportada por BARON para el Caso de Estudio 4.3, con un flujo total mínimo de agua dulce de 139.7 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Al comparar los diseños de red de las Figs. 4.8 y 4.10, se observa que los flujos másicos de agua a través de las operaciones  $u1$  y  $u7$ , en el diseño de la Fig. 4.10, se incrementan considerablemente con respecto al diseño de la Fig. 4.8. Por ejemplo, el flujo másico de agua a través de la operación  $u1$  se incrementa de 25 a 37.757 ton/h (51.02%) y en  $u7$  se incrementa de 30 a 37.87 ton/h (26.23%). Además, el diseño de la Fig. 4.10 utiliza tres conexiones adicionales de reúso de agua, en donde dos de los flujos son particularmente pequeños y económicamente no viables si se consideraran costos de tuberías y bombeo. Por ejemplo, el flujo másico de agua que va de la operación  $u5$  a  $u7$  de 0.495 ton/h y el flujo másico de agua que va de la operación  $u6$  a  $u7$  de 0.223 ton/h. Una característica interesante del diseño de red de la Fig. 4.10, consiste en que el flujo másico de agua en la salida de la operación  $u2$  se reutiliza en todas las operaciones, a excepción de sí misma y de la operación  $u1$ . Este resultado difiere del diseño de red de la Fig. 4.8.

Por otra parte, en la primera iteración de la metodología MAE, en un tiempo de CPU de 0.54 segundos, se obtuvo un diseño óptimo de red que se muestra en la Fig. 4.11. En este diseño se suministra un flujo total mínimo de agua fresca de 139.7 ton/h. Posteriormente, en la iteración número 24, con un tiempo de CPU de 2.363 segundos, se obtuvo una solución óptima diferente, con un flujo total mínimo de agua dulce de 147.699 ton/h. El tiempo de CPU total de las 1000 iteraciones de la metodología de optimización MAE fue de 94.07 segundos.

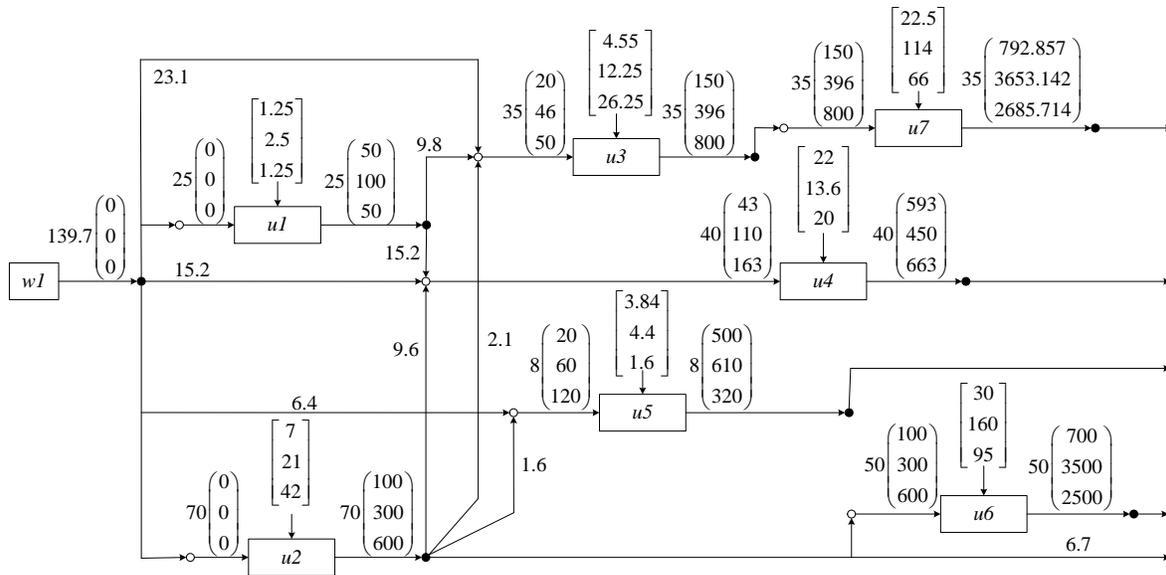


Fig. 4.11. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.3, asociado a la solución obtenida en la primera iteración de la metodología MAE, con un flujo total mínimo de agua fresca de 139.7 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Los diseños de red de las Figs. 4.10 y 4.11, muestran la existencia de múltiples soluciones óptimas asociadas a un mismo valor de la función objetivo, las cuales representan diseños diferentes. En este caso, para un flujo total mínimo de agua de 139.7 ton/h, se muestran dos topologías o diseños de red diferentes.

En la Tabla 4.4 se comparan los flujos totales de agua asociados a los diseños de red reportados en la literatura y los flujos totales mínimos de agua asociados a los diseños de red de las Figs. 4.10 y 4.11, para el Caso de Estudio 4.3.

Tabla 4.4. Comparación de los flujos totales de agua asociados a los diseños de red reportados en la literatura para el Caso de Estudio 4.3.

Autores y año	Metodología	Flujo total de agua dulce (ton/h)
Wang y col. (2003)	Diseño heurístico con un reservorio interno de agua	160.4
Wang y col. (2012)	Diseño heurístico con potencial de concentración y PL	140.93
Su y col. (2012)	Diseño heurístico con potencial de concentración <sup>a</sup>	140.93 / 156.76 <sup>a</sup>
Zhao y col. (2014)	Diseño heurístico con potencial de concentración <sup>b</sup>	140.93 / 144.62 <sup>b</sup>
Este trabajo	Diseño óptimo con un modelo de PNL resuelto con BARON / MAE	139.7

<sup>a</sup>Diseño de red con un reservorio de agua interno.

<sup>b</sup>Diseño de red con dos reservorios de agua internos.

#### 4.5. Caso de Estudio 4.4

Este caso de estudio consiste de una fuente de agua dulce, ocho operaciones usuarias de agua y tres contaminantes. En el caso de estudio no se consideran costos unitarios de la fuente de agua dulce, y la concentración de todos los contaminantes en la fuente de agua es igual a cero. Los datos de este caso de estudio para las ocho operaciones usuarias de agua corresponden a los mostrados en la Tabla 4.5. Este caso de estudio fue propuesto por Wang y col. (2003). Ellos utilizaron una metodología heurística de diseño que incorpora un reservorio de agua interno en la red y obtuvieron un diseño de red con un flujo total de agua dulce de 198.4 ton/h.

Tabla 4.5. Datos límite para el Caso de Estudio 4.4. [Wang y col. (2003)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	3	0	100
	B	2.7	0	90
	C	1.5	0	50
$u2$	A	0.8	0	50
	B	1.12	0	70
	C	1.12	0	70
$u3$	A	8.25	40	150
	B	1.5	60	80
	C	3.75	20	70
$u4$	A	2.73	30	160
	B	1.26	40	100
	C	0.42	70	90
$u5$	A	2.9	110	210
	B	1.885	135	200
	C	1.74	60	120
$u6$	A	6	200	350
	B	9.2	170	400
	C	2.4	150	210
$u7$	A	12.2	100	300
	B	13.115	75	290
	C	9.15	20	170
$u8$	A	6.84	90	210
	B	6.84	50	170
	C	3.762	34	100

Liu y col. (2009) abordaron este caso de estudio utilizando el método heurístico de diseño de “*Concentration Potential Concepts*” (CPC), con el cual obtuvieron un diseño de red con un flujo de agua dulce total de 174.952 ton/h. Este diseño de red corresponde a la mejor solución reportada en la literatura para este caso de estudio, el cual se muestra en la Fig. 4.12.

Su y col. (2012) diseñaron una red con un reservorio de agua interno, pero a diferencia de Wang y col. (2003), determinaron un diseño de red convencional con un flujo de agua dulce total de 175.05 ton/h, utilizando el método de CPC. Con base en este diseño de red,

introdujeron un reservorio de agua interno para obtener el diseño final de red. En el diseño final de red se suministra un flujo de agua dulce total de 183.33 ton/h.

Finalmente, Zhao y col. (2014) diseñaron una red de uso de agua con dos reservorios de agua internos. Para este diseño, utilizaron un enfoque similar al empleado por Su y col. (2012) y obtuvieron el mismo diseño de red convencional reportado por Liu y col. (2009). Sin embargo, al introducir los dos reservorios de agua internos, el diseño de red final emplea un flujo de agua dulce total de 178.66 ton/h.

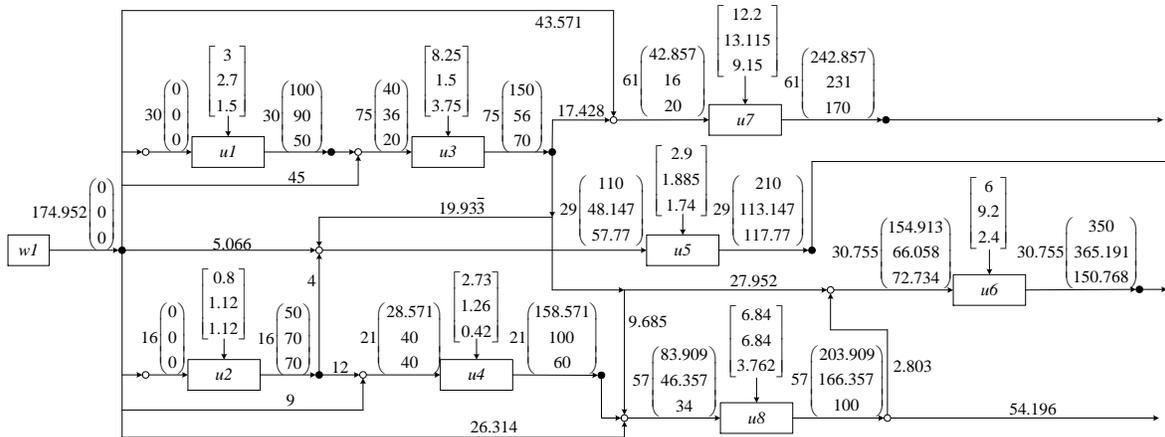


Fig. 4.12. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.4, reportado por Liu y col. (2009), con un flujo total de agua dulce de 174.952 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.5.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.4

En este caso de estudio se alcanzó el tiempo máximo de solución establecido para el resolvidor BARON y se terminó el proceso de solución. El valor de la tolerancia absoluta (epsa) terminó en 19.649 y el valor de la tolerancia relativa (epsr) en 0.127. El diseño óptimo de red que se muestra en la Fig. 4.13 corresponde a la mejor solución obtenida por el resolvidor BARON, la cual se obtuvo en el nodo 1297. El proceso de solución se detuvo en la iteración 4238, quedando 2511 nodos abiertos.

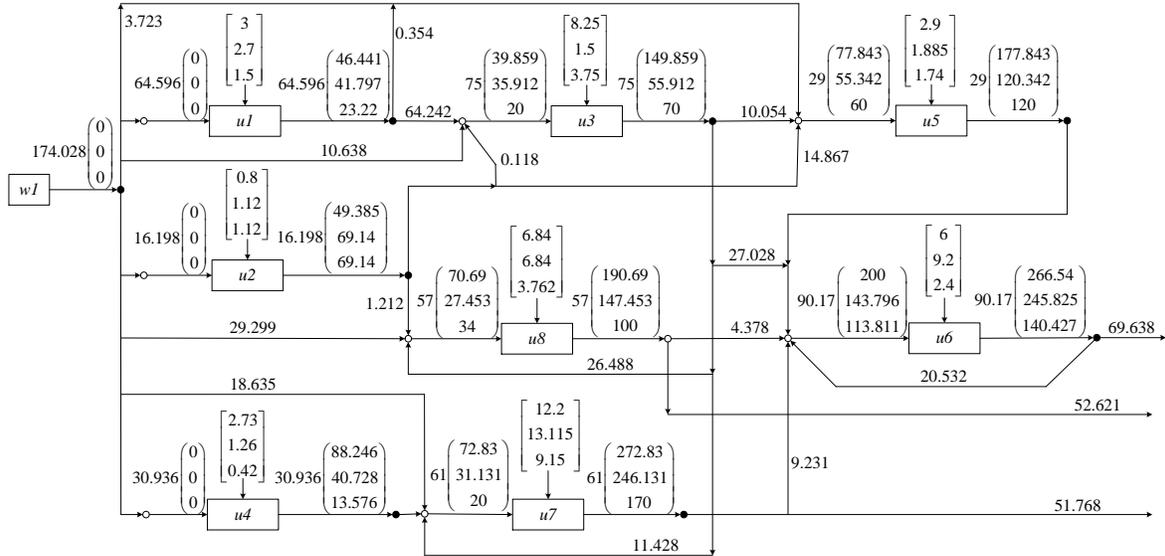


Fig. 4.13. Diseño óptimo de red asociado a la solución obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.4, con un flujo total mínimo de agua dulce de 174.028 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

El flujo total mínimo de agua del diseño óptimo de red de la Fig. 4.13 se redujo en un 0.99% en comparación con el flujo total de agua del diseño de la Fig. 4.12. En el diseño de red de la Fig. 4.13 se incrementó considerablemente el flujo másico de agua a través de las operaciones  $u1$  (115.23%),  $u4$  (47.31%) y  $u6$  (193.18%), comparado con los flujos másicos de agua de estas mismas operaciones en el diseño de red de la Fig. 4.12. El diseño de la Fig. 4.13 cuenta adicionalmente con cuatro conexiones de reúso de agua y una conexión de reciclaje local de agua en la operación usuaria  $u6$ . De las conexiones de reúso, los flujos másicos de agua de dos de ellas, de  $u2$  a  $u3$  y de  $u1$  a  $u5$ , son particularmente pequeños y pueden resultar imprácticos cuando se consideran costos de inversión de capital de tuberías y costos de operación de bombeo.

Por otra parte, con la metodología MAE se identificaron ocho soluciones óptimas con un flujo total mínimo de agua diferente (Tabla 4.6). En la Fig.4.14 se muestra un diseño óptimo de red asociado a la solución que se obtuvo en la iteración número 648 de la metodología MAE, en un tiempo de CPU de 76.527 segundos. De entre los diseños de red asociados a las soluciones óptimas con un flujo mínimo de 174.028 ton/h (Tabla 4.6), el diseño de la Fig. 4.14 es el que presenta el menor número de conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias. El tiempo de CPU total de las 1000 iteraciones de la metodología MAE fue de 115.07 segundos.

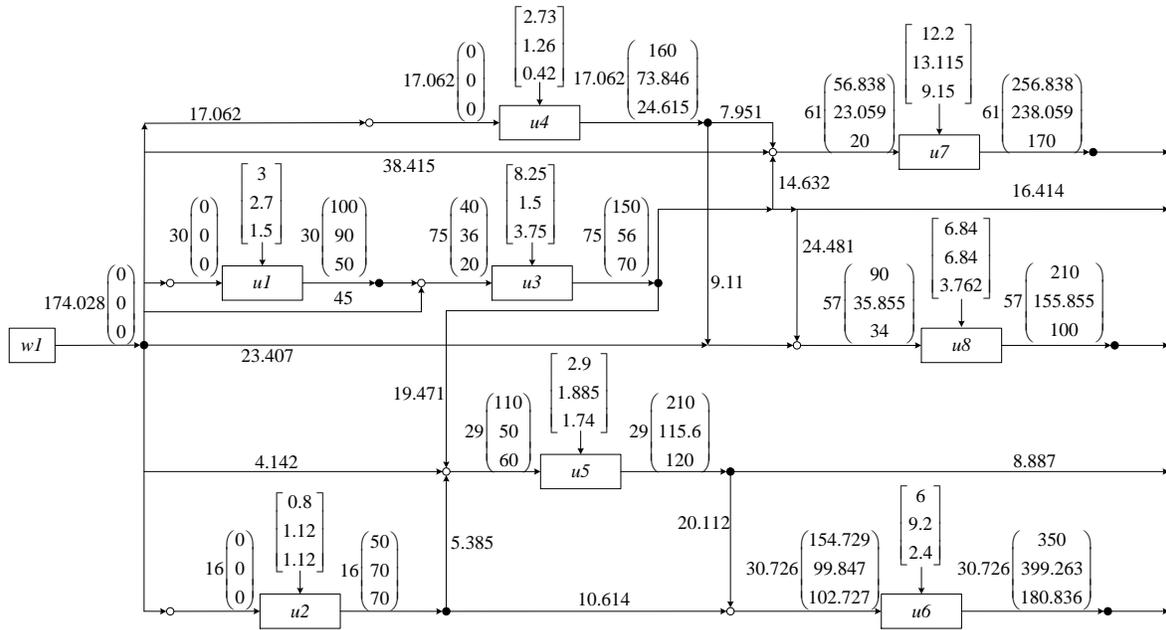


Fig. 4.14. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.4, obtenido en la iteración 648 de la metodología MAE, con un consumo total mínimo de agua dulce de 174.028 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

El diseño óptimo de la Fig. 4.14 tiene una complejidad topológica menor con respecto al diseño red de la Fig. 4.12, pues utiliza dos conexiones menos de reúso de agua. En el diseño de la Fig. 4.14, el flujo másico de agua a través de la operación  $u4$  se redujo de 21 a 17.062 ton/h (18.75%) con respecto al flujo másico de agua a través de esta misma operación en el diseño de red de la Fig. 4.12. El flujo másico de agua a través de la operación  $u6$ , se redujo ligeramente de 30.755 a 30.726 ton/h (0.09%) comparado con el flujo másico de agua de esta misma operación usuaria en el diseño de red de la Fig. 4.12.

Tabla 4.6. Soluciones óptimas locales diferentes obtenidas con la metodología MAE, para el Caso de Estudio 4.4.

Flujo total mínimo de agua dulce (ton/h)	Iteración <sup>a</sup>	Frecuencia	Tiempo de CPU (s)
174.028	1	907	0.047
194.742	36	64	3.883
195.033	2	12	0.172
195.440	41	8	4.352
201.366	200	2	21.234
204.033	886	2	90.453
208.314	766	1	78.867
214.459	502	2	52.539

<sup>a</sup>Iteración en la que apareció por primera vez la solución.

El flujo total de reúso de agua, que consiste en la suma de los valores de las variables de flujo másico de agua  $f_{uu,u1}$ , presenta una alternativa para comparar los diseños de red. Por ejemplo, en el diseño de red de la Fig. 4.13, el flujo total de reúso de agua es de 249.871 ton/h y en el diseño de red de la Fig. 4.14 es de 141.756 ton/h. Esto muestra que en el diseño de red de la Fig. 4.13 se reutiliza un 72.55% más agua y en el diseño de red de la Fig. 4.14 se reutiliza un 2.1% menos agua. Esta comparación es con respecto al flujo total de reúso de agua de 144.804 ton/h en el diseño de red de la Fig. 4.12. Por ejemplo, en el diseño de red de la Fig. 4.13, el incremento en el reúso total de agua provoca un aumento considerable de los flujos de agua a través de las operaciones usuarias de agua.

Con base en los diseños de red de las Figs. 4.12 a 4.14 se concluye, para este caso de estudio, que la reducción del flujo total de agua dulce en la red favorece el reúso de agua entre las operaciones, y en cierta medida complica el diseño de la misma, debido (en algunos diseños de red) al aumento en el número de conexiones o un aumento en el flujo de agua a través de las operaciones usuarias de agua. Los diseños de red de las Figs. 4.13 y 4.14 muestran la existencia de diferentes diseños óptimos de red asociados a un mismo flujo total mínimo de agua dulce para un mismo caso de estudio.

#### **4.6. Caso de Estudio 4.5**

Este caso de estudio está conformado por una fuente de agua dulce, seis operaciones usuarias de agua y tres contaminantes (Tabla 4.7). La fuente de agua no contiene contaminantes y no se dispone del costo unitario asociado a la fuente de agua. Por lo tanto, el caso de estudio consiste en obtener un diseño óptimo de red con un flujo mínimo de agua dulce.

Este caso de estudio fue propuesto por Zhao y col. (2014). Ellos utilizaron un método heurístico de diseño de redes de agua con dos reservorios de agua internos. Este método utiliza la metodología heurística de diseño de CPC ("*Concentration Potential Concepts*") para obtener un diseño de red convencional. La red convencional que se obtiene con el método de CPC se divide en tres secciones para incluir los dos reservorios de agua internos. El diseño final de red se obtiene de ajustar en un proceso iterativo los flujos másicos de agua y las concentraciones de los contaminantes de cada uno de los reservorios de agua internos. El diseño de red final y la red convencional reportadas por Zhao y col. (2014) para este caso de estudio cuentan con el mismo flujo total de agua fresca de 51.433 ton/h. En la Fig. 4.15 se muestra el diseño de red convencional obtenido por Zhao y col (2014), el cual está asociado a la mejor solución reportada en la literatura para este caso de estudio.

Tabla 4.7. Datos límite para el Caso de Estudio 4.5. [Zhao y col. (2014)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	3.2	300	500
	B	96	5000	11000
	C	24	1500	3000
$u2$	A	5.4	0	200
	B	13.5	0	500
	C	27	0	1000
$u3$	A	1.725	10	240
	B	11.25	0	1500
	C	7.5	0	1000
$u4$	A	2	100	400
	B	0.8	300	2000
	C	1	1000	3500
$u5$	A	3	100	350
	B	1.9	300	1800
	C	2.1	1000	3500
$u6$	A	3.8	150	350
	B	1.1	300	6500
	C	2	600	1000

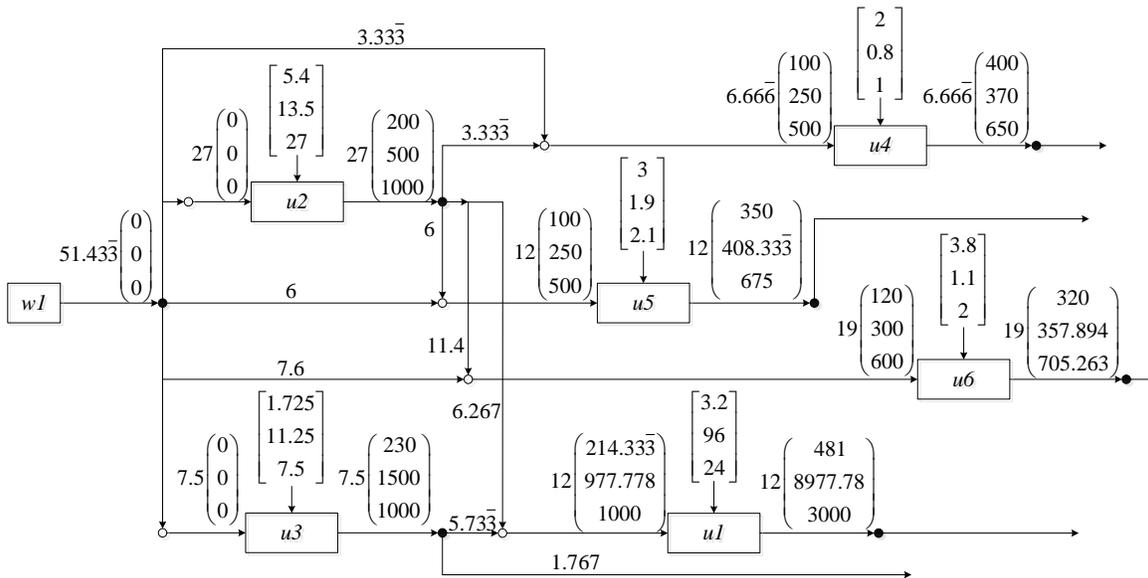


Fig. 4.15. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.5, reportado por Zhao y col. (2014), con un flujo total de agua dulce en la red de 51.433 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.6.1. Diseño óptimo de red para el caso de estudio 4.5

En la Fig. 4.16 se muestra el diseño de red asociado a una solución óptima global obtenida con el resolvidor BARON. El tiempo de CPU total para obtener esta solución fue

de 731.44 segundos. Este diseño de red tiene un flujo total de agua dulce de 50.442 ton/h, que representa una reducción en el flujo total de agua dulce de 1.92%, comparado con el diseño de red de la Fig. 4.15.

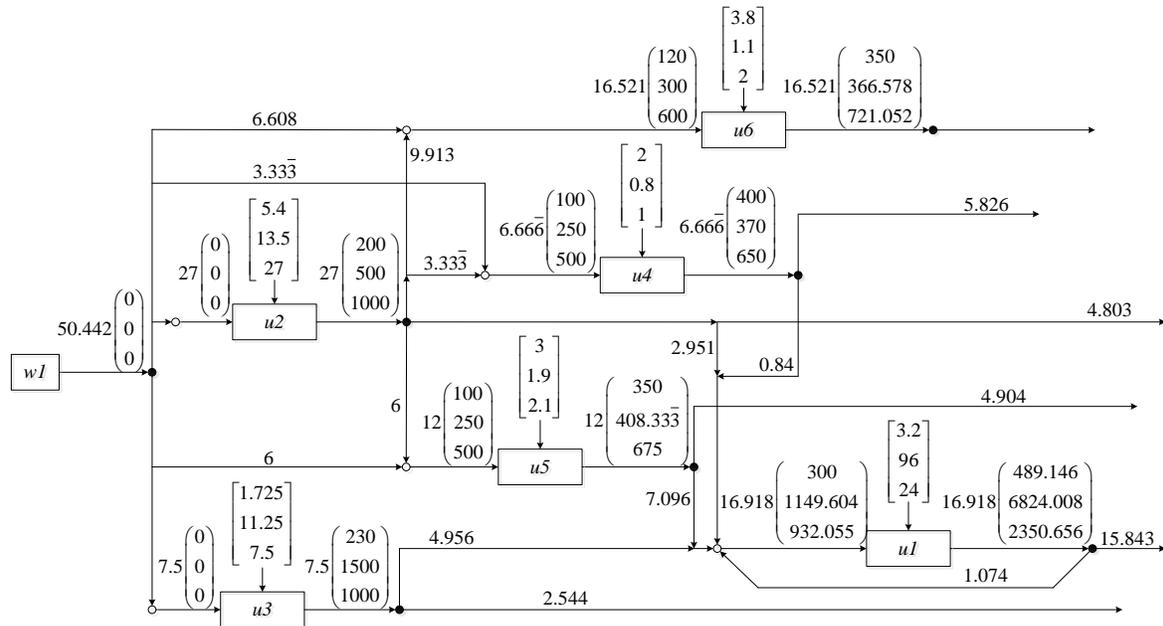


Fig. 4.16. Diseño de red asociado a una solución óptima global determinada con el resolvidor BARON para el Caso de Estudio 4.5, con un flujo total mínimo de agua dulce de 50.442 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

El diseño de red de la Fig. 4.16 cuenta con tres conexiones adicionales, dos de ellas son conexiones de reúso de agua y una es un reciclaje de agua, en comparación con el diseño de red de la Fig. 4.15. En la Fig. 4.16, el flujo másico de agua a través de la operación  $u6$  se redujo de 19 a 16.521 ton/h (13.04%) y el flujo másico de agua a través de la operación  $u1$  se incrementó de 12 a 16.918 ton/h (40.98%), comparados con el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias de agua  $u6$  y  $u1$ , respectivamente en el diseño de red de la Fig. 4.15. Sin embargo, el incremento en el flujo másico de agua a través de la operación  $u1$  en la Fig. 4.16 permitió reducir la concentración de salida de los contaminantes A y B de 8997.78 a 6824.008 ppm y de 3000 a 2350 ppm, respectivamente, comparados con las concentraciones de salida de estos contaminantes en la operación  $u1$  del diseño de red de la Fig. 4.15. El reúso total de agua en el diseño de red de la Fig. 4.16 es de 36.793 ton/h, un 12.4% más que en el diseño de red de la Fig. 4.15, que es de 32.733 ton/h.

Utilizando la metodología MAE, para este caso de estudio se identificaron tres soluciones óptimas con un flujo total mínimo de agua dulce diferente, que se muestran en la Tabla 4.8.

Tabla 4.8. Soluciones óptimas locales diferentes obtenidas con la metodología MAE, para el Caso de Estudio 4.5.

Flujo total mínimo de agua dulce (ton/h)	Iteración <sup>a</sup>	Frecuencia	Tiempo de CPU (s)
50.442	1	913	0.125
55.25	40	44	4.015
57.583	139	18	13.304

<sup>a</sup>Iteración en la que apareció por primera vez la solución

En la Fig. 4.17 se muestra el diseño de red asociado a la solución óptima que se obtuvo en la primera iteración de la metodología MAE. Este diseño presenta el mismo flujo total mínimo de agua dulce comparado con el diseño de red de la Fig. 4.16, que corresponde al flujo total mínimo de agua dulce de la solución óptima global reportada por BARON. El tiempo total de CPU requerido para las 1000 iteraciones de la metodología MAE, fue de 96.347 segundos, con un total de 975 soluciones óptimas.

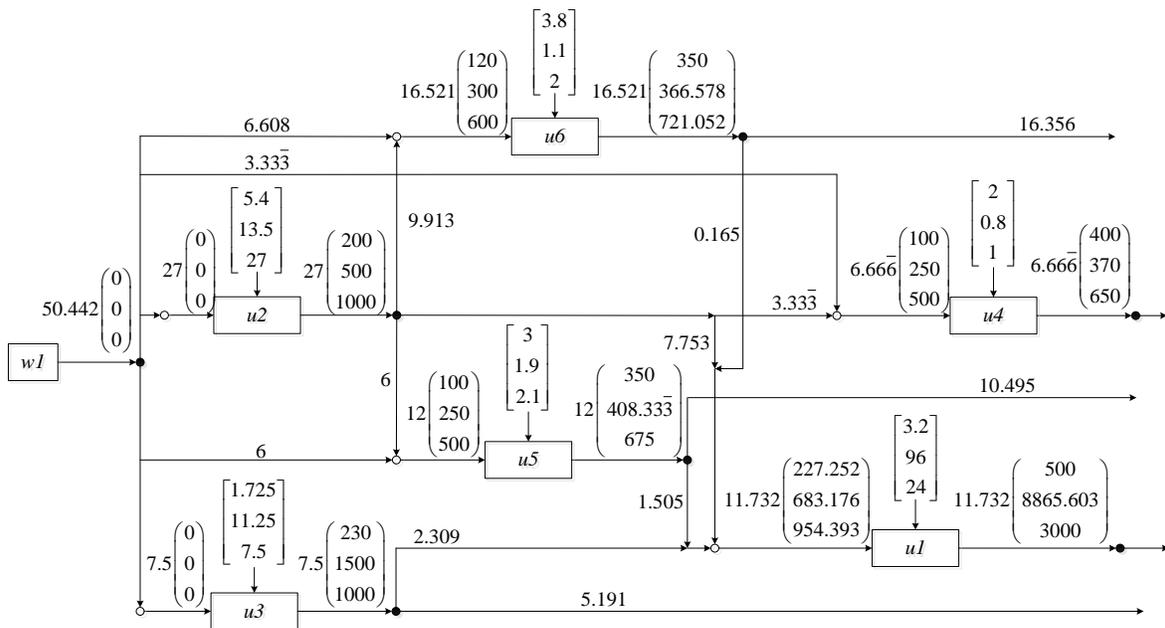


Fig. 4.17. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.5, obtenido en la primera iteración de la metodología MAE, con un flujo total mínimo de agua dulce de 50.442 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Comparando los diseños de red de las Figs. 4.15 y 4.17, el diseño de red de la Fig. 4.17 cuenta adicionalmente con dos conexiones de reúso de agua de las operaciones usuarias de agua  $u_5$  a  $u_1$  y de  $u_6$  a  $u_1$ , con flujos másicos de agua particularmente pequeños. En el diseño de red de la Fig. 4.17 se redujo el flujo total de agua dulce en un 1.92%, de 51.433 a

50.442 ton/h. También se redujo el flujo másico de agua a través de la operación usuaria  $u1$  en un 2.23%, de 12 a 11.732 ton/h y el flujo másico de agua a través de la operación  $u6$  en un 13.04%, de 19 a 16.521 ton/h. Además, en el diseño de red de la Fig. 4.17 se redujo el flujo total de reúso de agua en la red, de 32.733 a 30.979 ton/h, que representa una reducción del 5.35% comparado con el diseño de red de la Fig. 4.15.

En este caso de estudio, un aumento en el número de conexiones de reúso de agua, como se muestra en el diseño de red en la Fig. 4.17, puede ayudar a reducir el flujo total de agua dulce y a reducir, en algunos casos, el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias de agua.

#### 4.7. Caso de Estudio 4.6

Este caso de estudio consiste de una fuente de agua dulce, cinco operaciones usuarias de agua y tres contaminantes: hidrocarburos (HC), sulfuro de hidrógeno ( $H_2S$ ) y sólidos suspendidos (SS). En este caso de estudio no se considera el costo unitario de la fuente de agua dulce, la cual no contiene contaminantes. Los datos límite para las operaciones usuarias de agua de este caso de estudio se muestran en la Tabla 4.9.

Tabla 4.9. Datos límite para el Caso de Estudio 4.6. [Kuo y Smith (1998)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	HC	0.75	0	15
	$H_2S$	20	0	400
	SS	1.75	0	35
$u2$	HC	3.4	20	120
	$H_2S$	414.8	300	12500
	SS	4.59	45	180
$u3$	HC	5.6	120	220
	$H_2S$	1.4	20	45
	SS	520.8	200	9500
$u4$	HC	0.16	0	20
	$H_2S$	0.48	0	60
	SS	0.16	0	20
$u5$	HC	0.8	50	150
	$H_2S$	60.8	400	8000
	SS	0.48	60	120

Este caso de estudio fue propuesto por Kuo y Smith (1998). Ellos abordaron el problema de diseño de redes usuarias de agua con regeneración utilizando una metodología secuencial en dos etapas. En la primera etapa utilizaron la metodología de Punto de Pliegue para obtener la meta del flujo total de agua dulce y para diseñar una red de operaciones usuarias de agua. El flujo total de agua dulce para la meta y el diseño de red fue de 111.87 ton/h. En la Fig. 4.18 se muestra el diseño de red reportado por Kuo y Smith (1998) que

corresponde a la mejor solución de la literatura para este caso de estudio, con un consumo de agua dulce de 111.8 ton/h. Sin embargo, el flujo total de agua dulce verificado con el modelo WUN-CD corresponde a 111.813 ton/h.

Li y Guan (2016) abordaron el mismo problema que Kuo y Smith (1998). Ellos desarrollaron y resolvieron un modelo de PNL que excluye el reciclo y solo contempla el reúso de agua entre los procesos con la finalidad de obtener un diseño de red de uso de agua para utilizarlo como base para el desarrollo del diseño de red final de uso de agua con regeneración. El diseño de red usuaria de agua que obtuvieron consume 111.85 ton/h.

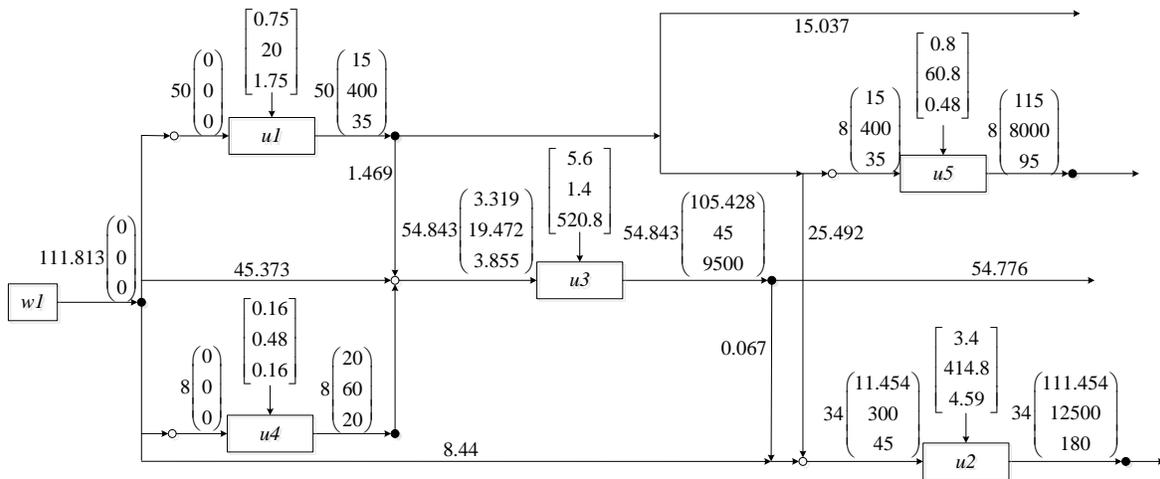


Fig. 4.18. Diseño de red para el Caso de Estudio 4.6, con un flujo total de agua de 111.8 ton/h, reportado por Kuo y Smith (1998) y un flujo total de agua dulce verificado, utilizando el modelo WUN-CD, de 111.813 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.7.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.6

Al resolver con BARON el modelo WUN-CD aplicado a este caso de estudio, se excedió el tiempo máximo de solución de 10,800 segundos, por lo tanto, el proceso de solución se detuvo. El valor de la tolerancia absoluta y relativa resultantes, son los siguientes:  $3.705 \times 10^{-4}$  y  $3.313 \times 10^{-6}$ , respectivamente. El proceso de solución se detuvo en la iteración 100,284, dejando 20,264 nodos abiertos. La solución determinada por BARON se obtuvo en el nodo 71,135. En la Fig. 4.19 se muestra el diseño de red asociado a la solución óptima reportada por BARON, con un flujo total mínimo de agua dulce de 111.813 ton/h. Este diseño presenta el mismo flujo total de agua dulce que el diseño de red de la Fig. 4.18.

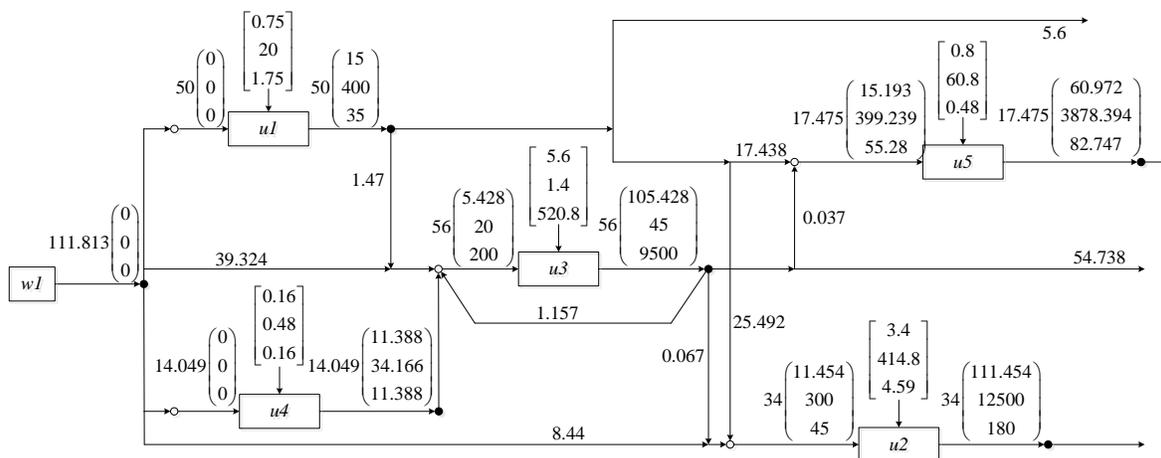


Fig. 4.19. Diseño óptimo de red asociado a la mejor solución reportada por BARON para el Caso de Estudio 4.6, con un flujo total mínimo de agua de 111.813 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Comparando los diseños de red de las Figs. 4.18 y 4.19, el diseño de red de la Fig. 4.19 cuenta con una conexión adicional de reúso de agua entre las operaciones usuarias de agua  $u3$  y  $u5$ , que presenta un flujo másico de agua particularmente pequeño y una conexión de reciclo de agua en la operación  $u3$  con un flujo másico de agua de 1.157 ton/h. El flujo de reciclo de agua provocó un aumento en el flujo másico de agua a través de la operación  $u3$  en un 2.1%, de 54.843 a 56 ton/h. El flujo másico de agua a través de la operación  $u4$  se incrementó en un 75.61%, de 8 a 14.049 ton/h y en la operación  $u5$  se incrementó en un 118.43%, de 8 a 17.475 ton/h. El aumento de los flujos másicos de agua a través de las operaciones usuarias de agua en el diseño de red de la Fig. 4.19, conllevó a un incremento en el flujo total de reúso de agua en la red de 43.028 a 59.71 ton/h (38.77%), comparado con el flujo total de reúso de agua en el diseño de red de la Fig. 4.18. El diseño de red de la Fig. 4.19 es una solución óptima degenerada, de acuerdo con Savelski y Bagajewicz (2000 y 2003), debido a que el flujo másico de agua a través de las operaciones  $u4$  y  $u5$ , impide alcanzar la concentración límite de al menos uno de los contaminantes en cada operación.

Por otra parte, en la primera iteración de la metodología MAE en un tiempo de CPU de 0.093 segundos, se obtuvo el diseño óptimo de red que se muestra en la Fig. 4.20a. Este diseño de red utiliza adicionalmente dos conexiones de reúso de agua, cuyos flujos másicos son pequeños en magnitud. Por ejemplo, el flujo másico de agua de la operación usuaria de agua  $u3$  a  $u2$  es de 0.067 ton/h y el flujo másico de agua de la operación  $u1$  hacia  $u3$  es de 1.469 ton/h, mientras que el flujo másico de agua de reciclo en la operación  $u3$  es de 0.694 ton/h. Además, este diseño de red comparado con el de la Fig. 4.19, redujo el número de conexiones de 15 a 14, así como el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias  $u3$ ,  $u4$  y  $u5$ . Este diseño presenta una mejora con respecto al diseño de la Fig. 4.19.

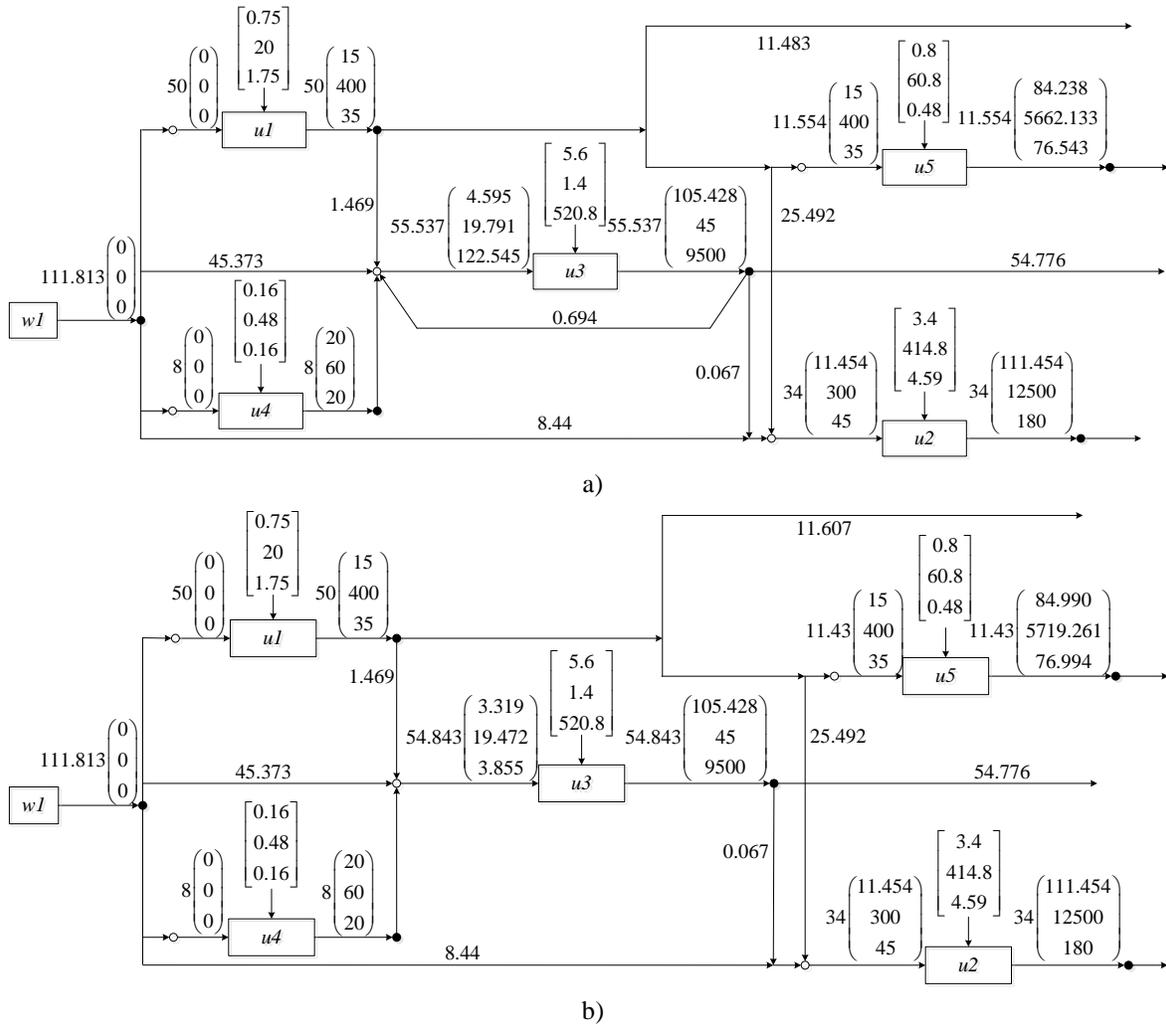


Fig. 4.20. Diseños óptimos de red asociados a dos soluciones óptimas locales obtenidas con la metodología MAE. Ambos diseños de red utilizan el mismo flujo total mínimo de agua dulce de 111.813 ton/h. a) Diseño de red que se obtuvo en la primera iteración. b) Diseño óptimo de red que se obtuvo en la iteración 408. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

El diseño de red de la Fig. 4.20b se obtuvo en la iteración número 408, en un tiempo de CPU de 33.945 segundos. En las iteraciones 272, 593, 723 y 846 se obtuvo la solución asociada al diseño de red de la Fig. 4.18, en un tiempo de CPU de 22.710, 49.550, 60.609 y 70.929 segundos, respectivamente.

Los diseños de red que se muestran en la Fig. 4.20 son ejemplos de soluciones óptimas degeneradas de acuerdo con Savelski y Bagajewicz, (2000 y 2003), en donde el diseño de red de la Fig. 4.20b exhibe la misma topología que el diseño de red de la Fig. 4.18.

Para este caso de estudio se obtuvieron 987 soluciones óptimas locales asociadas a un valor del flujo total mínimo de agua dulce de 111.813 ton/h. El tiempo total de CPU de las 1000 iteraciones de la metodología de optimización MAE fue de 83.847 segundos.

En este caso de estudio se ha probado y mostrado la existencia de al menos tres soluciones óptimas con topologías diferentes, las cuales están asociadas a un mismo valor del flujo total mínimo de agua dulce de 111.813 ton/h. Además, se ha mostrado la existencia de al menos dos soluciones diferentes asociadas a la misma topología de red.

#### 4.8. Caso de Estudio 4.7

Este caso de estudio consiste en diseñar una red de uso de agua que contempla una fuente de agua dulce ( $w1$ ) con una concentración de contaminantes igual a cero, cuatro operaciones usuarias de agua ( $u1$ ,  $u2$ ,  $u3$  y  $u4$ ) y tres contaminantes (A, B y C). Los datos límite asociados al Caso de Estudio 4.7 se muestran en la Tabla 4.10. En este caso de estudio no se considera el costo unitario de la fuente de agua ( $w1$ )

Tabla 4.10. Datos límite para el Caso de Estudio 4.7. [Doyle y Smith, (1997)].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	5.44	0	160
	B	15.3	0	450
	C	1.02	0	30
$u2$	A	7.5	200	300
	B	12.75	100	270
	C	18	500	740
$u3$	A	12.8	600	1240
	B	11	850	1400
	C	23.8	390	1580
$u4$	A	40	300	800
	B	37.6	460	930
	C	40	400	900

Este caso de estudio fue propuesto por Doyle y Smith (1997). Ellos utilizaron un método secuencial para determinar la meta de flujo total mínimo de agua para diseñar una red, la cual fue de 81.22 ton/h, pero no reportaron ningún diseño.

Calixto y col. (2015), propusieron un enfoque heurístico para predecir las violaciones en las concentraciones límites de los contaminantes en la entrada y en la salida de las operaciones usuarias de agua, definir el contaminante y la operación usuaria de referencia para aplicarlo en otros métodos heurísticos de diseño. Lo aplicaron, en particular, al método heurístico del diagrama de fuentes de agua, desarrollado por Gomes y col. (2013). Este último método lo aplicaron a este caso de estudio y desarrollaron el diseño de red que se muestra en la Fig. 4.21, el cual corresponde a la mejor solución reportada en la literatura.

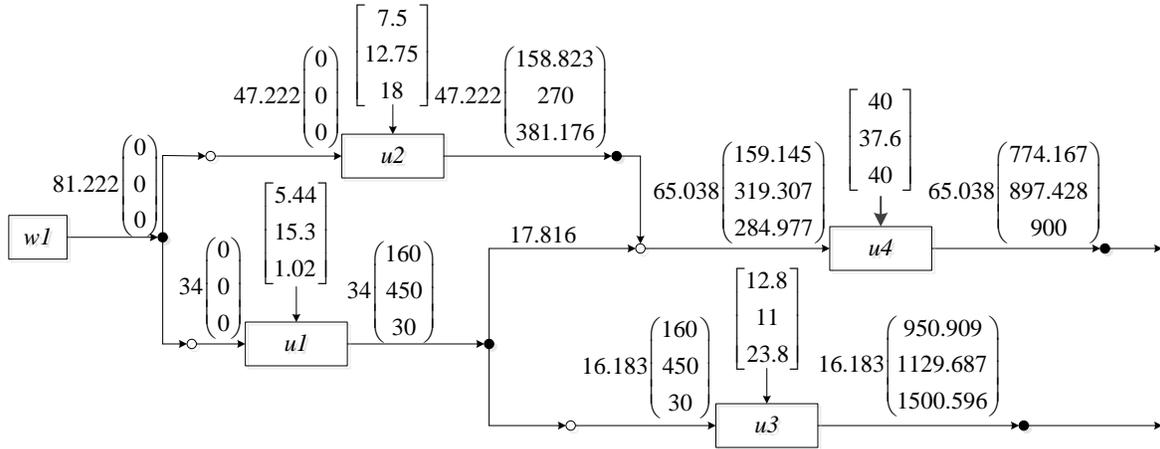


Fig. 4.21. Diseño de red reportado por Calixto y col. (2015) para el Caso de Estudio 4.7, con un flujo total de 81.222 ton/h de agua dulce. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.8.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.7

En la Fig. 4.22 se muestra el diseño de red asociado a una solución óptima global que se obtuvo con BARON al resolver el modelo WUN-CD aplicado a este caso de estudio, en un tiempo de CPU total de 0.62 segundos. El flujo total mínimo de agua dulce en la red es de 81.222 ton/h. Para obtener esta solución se impuso una restricción adicional en el modelo WUN-CD, que evita el reciclo local de agua en las operaciones usuarias. Esta restricción se impone con base en los resultados de los casos de estudio anteriores, en donde el reciclo local de agua no representa una mejora en la disminución del flujo total de agua dulce y además complica la topología de la red.

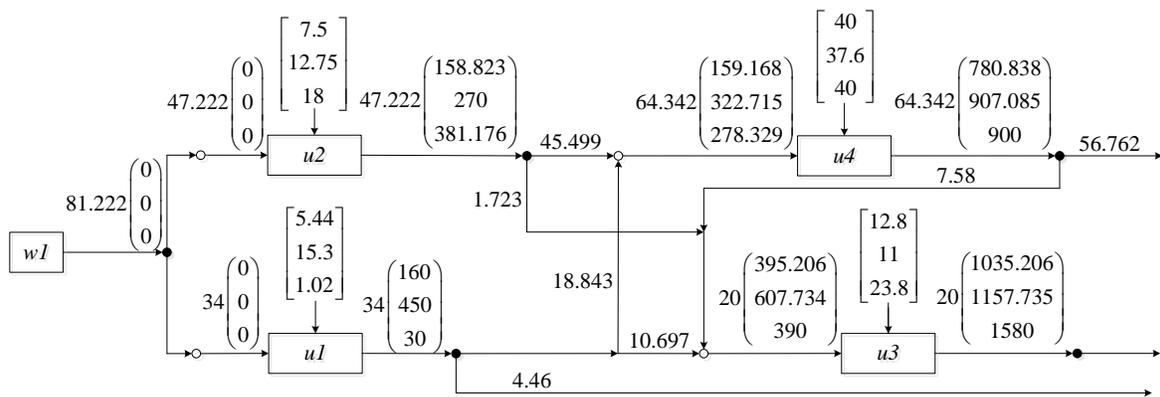


Fig. 4.22. Diseño de red asociado a una solución óptima global obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.7, con un flujo total mínimo de agua dulce de 81.222 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

El flujo total de agua dulce en los diseños de red de las Figs. 4.21 y 4.22 es el mismo. Sin embargo, la topología del diseño de red de la Fig. 4.22 cuenta con dos tuberías adicionales de reúso de agua, que corresponden a los flujos másicos de agua que van de la operación  $u2$  hacia  $u3$  y de la operación  $u4$  hacia  $u3$ . En el diseño de la Fig. 4.22, el flujo másico de agua a través de la operación usuaria  $u3$  se incrementó de 16.183 a 20 ton/h (23.58%), mientras que el flujo másico de agua a través de la operación usuaria de agua  $u4$  disminuyó de 65.038 a 64.342 ton/h (1.07%). El flujo total de reúso de agua en la red se incrementó de 81.222 a 84.342 ton/h (3.84%) en el diseño de la Fig. 4.22, comparado con el diseño de red de la Fig. 4.21.

Con la metodología de multi-arranque estocástico se obtuvo en la iteración número 39, en un tiempo de CPU de 24.375 segundos, el diseño de red de la Fig. 4.21. El diseño de red de la Fig. 4.22, se obtuvo en la iteración número 1000, con un tiempo de CPU de 62.148 segundos, que corresponde al tiempo de CPU total utilizado por la metodología MAE. Para este caso de estudio se obtuvieron 987 soluciones óptimas asociadas al flujo total mínimo de agua dulce de 81.222 ton/h. Algunas de estas soluciones presentan topologías diferentes y algunas soluciones tienen asociadas la misma topología de red, pero cuentan con diferentes valores asociados a los flujos másicos de agua y, por ende, diferentes valores en las concentraciones de los contaminantes en la entrada y en la salida de las operaciones usuarias de agua.

Un ejemplo de una solución óptima asociada a un diseño o topología de red diferente con un flujo total mínimo de agua dulce de 81.222 ton/h se muestra en la Fig. 4.23. Este diseño es una versión simplificada del diseño de red de la Fig. 4.22. En el diseño de red de la Fig. 4.23 se eliminó el flujo que va de la operación  $u2$  a  $u3$ . Por lo tanto, los valores de los flujos másicos de agua cambiaron para generar una solución diferente.

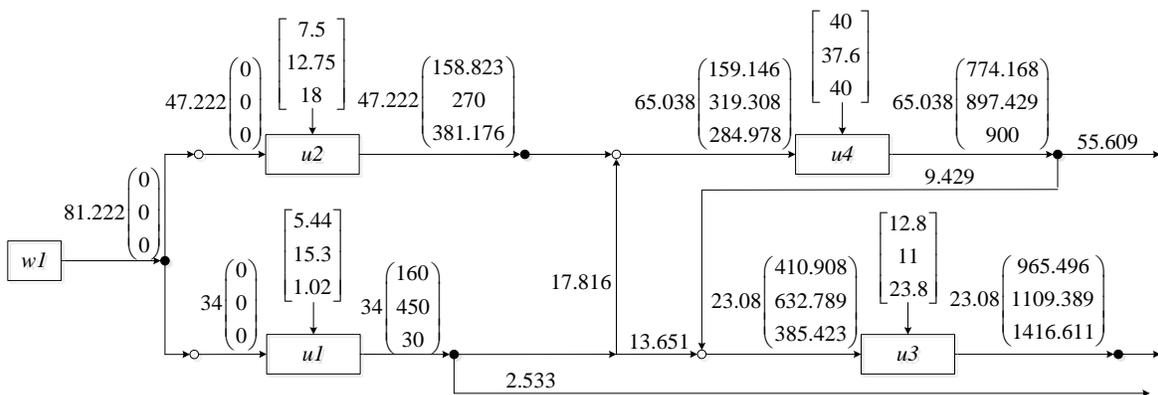


Fig. 4.23. Diseño óptimo de red alternativo para el Caso de Estudio 4.7, obtenido en la segunda iteración de la metodología MAE en un tiempo de CPU de 0.118 segundos, con un flujo total mínimo de agua dulce de 81.222ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.9. Caso de Estudio 4.8

En este caso de estudio se consideran dos fuentes de agua, diez operaciones usuarias de agua y cuatro contaminantes. Los datos límite de las diez operaciones usuarias se presentan en la Tabla 4.11.

Tabla 4.11. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.8. [Leewongtanawit y Kim, 2008].

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	616.78	200	25000
	B	484.97	500	20000
	C	706.31	100	28500
	D	5682.80	1500	230000
$u2$	A	313.50	350	8000
	B	245.88	3000	9000
	C	966.31	500	24080
	D	106.55	400	3000
$u3$	A	123.48	350	3500
	B	80.36	450	2500
	C	52.92	150	1500
	D	39.20	500	1500
$u4$	A	56.80	800	15000
	B	17.40	650	5000
	C	1.00	450	700
	D	4.80	300	1500
$u5$	A	2.74	1300	2000
	B	19.60	2000	7000
	C	27.44	2000	9000
	D	23.52	4000	10000
$u6$	A	1237.50	3000	12000
	B	1100.00	2000	10000
	C	1086.25	100	8000
	D	27.5	0	200
$u7$	A	450.99	450	2000
	B	872.88	0	3000
	C	218.22	250	1000
	D	3302.40	650	12000
$u8$	A	79.76	100	3450
	B	89.29	250	4000
	C	11.91	200	700
	D	153.57	550	7000
$u9$	A	55.62	150	1000
	B	35.99	450	1000
	C	65.44	3000	4000
	D	0	100	100
$u10$	A	0.40	0	100
	B	0.40	0	100
	C	0.40	0	100
	D	0.40	0	100

Para el problema de síntesis y diseño, se asume que el tiempo de operación de la red es de 8600 h/año. Hay dos fuentes de agua disponibles incluyendo una fuente de agua dulce y

una fuente de agua contaminada. En la Tabla 4.12 se muestran los costos unitarios asociados al consumo de agua de las fuentes y las concentraciones de los contaminantes asociados a las fuentes de agua.

Tabla 4.12. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.8. [Leewongtanawit y Kim, 2008].

Fuente de agua $w$	$CSW_w$ (\$/t)	Contaminante $j$	$CW_{w,j}$ (ppm)
$w1$	0.5	A	0
		B	0
		C	0
		D	0
$w2$	0.1	A	10
		B	10
		C	10
		D	10

Este caso de estudio fue abordado por Leewongtanawit y Kim (2008), quienes obtuvieron un diseño de red en el que consideraron costos de tubería y costos de operación. Para ello utilizaron un software llamado WATER, que es capaz de proveer un diseño automático de una red de uso de agua, el cual utilizaron como diseño base para abordar el problema de integración de calor en sistemas de uso de agua. El diseño de red que obtuvieron (Fig. 4.24) utiliza un flujo másico total de agua de las fuentes de 611.998 ton/h, 432.46 ton/h de la fuente de agua  $w1$  y 179.538 ton/h de la fuente  $w2$ . El costo total anual de operación asociado al flujo total de agua de las fuentes es de 2,013,980.68 \$/año. Este diseño de red corresponde a la mejor solución reportada en la literatura para este caso de estudio.

Calixto y col. (2015) también abordaron este caso de estudio; sin embargo, ellos no consideraron costos de tubería ni costos de operación, únicamente se centraron en reducir el flujo total de agua de las fuentes. Para determinar un diseño de red, ellos utilizaron una metodología heurística de diseño que está basada en una estrategia de descomposición por bloques. En cada bloque aplicaron la metodología del diagrama de fuentes de agua (“*Water Sources Diagram*”, WSD) para múltiples contaminantes, desarrollada por Gomes y col. (2013). Utilizando este enfoque, ellos obtuvieron un diseño de red que con un flujo másico total de agua de las fuentes de 614.18 ton/h, 450.98 ton/h de la fuente  $w1$  y 163.20 ton/h de la fuente  $w2$ . Resulta interesante comparar el costo total anual de operación asociado al diseño de red obtenido por Calixto y col. (2015), el cual corresponde a 2,079,566 \$/año. Este costo es 3.25% superior, comparado con el costo del diseño de red reportado por Leewongtanawit y Kim (2008).

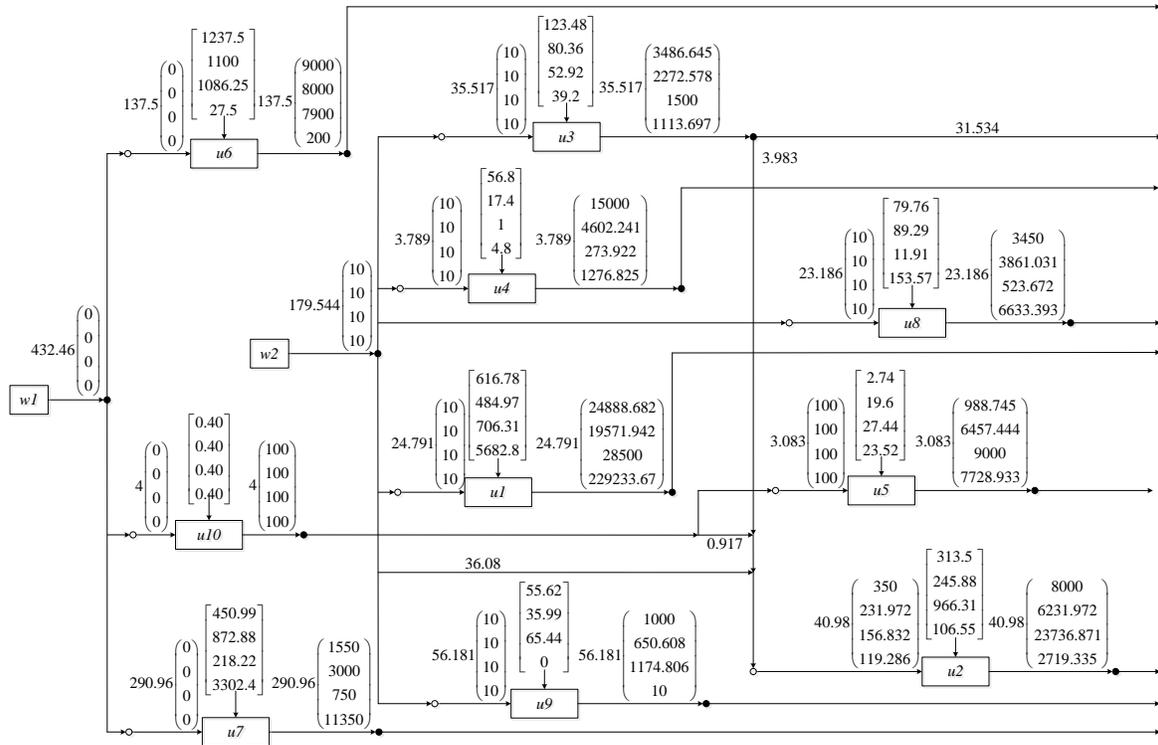


Fig. 4.24. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, reportado por Leewongtanawit y Kim, 2008, con un costo total anual de operación de 2,013,980.68 \$/año, asociado un flujo másico total de agua de 611.998 ton/h y un flujo másico total de agua verificado con el modelo WUN-CD de 612.004 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.9.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8

En la Fig. 4.25 se muestra el diseño de red asociado a una solución óptima global que se obtuvo con BARON al resolver el modelo WUN-CD aplicado al Caso de Estudio 4.8. Para obtener la solución de la Fig. 4.25, se impuso una restricción en el modelo para evitar el reciclo local en las operaciones usuarias de agua. Esta solución se obtuvo en un tiempo de CPU total de 75.19 segundos. El flujo másico total de las fuentes de agua es de 590.805 ton/h, 432.46 ton/h de la fuente de agua dulce  $w1$  y 158.345 ton/h de la fuente de agua  $w2$ , con un costo anual de operación mínimo asociado al consumo de agua de las fuentes de 1,995,754.86 \$/año.

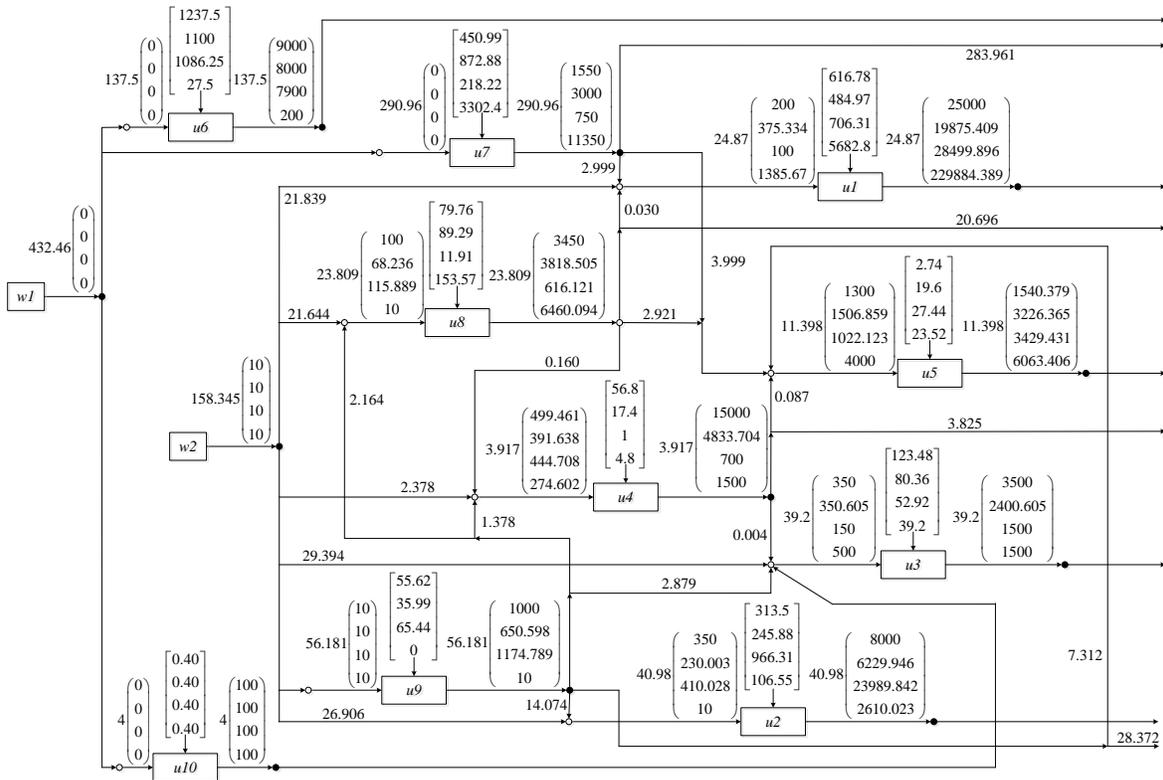


Fig. 4.25. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, asociado a una solución óptima global determinada con el resolvidor BARON, con un costo anual de operación mínimo de 1,995,754.86 \$/año, asociado a un flujo másico total de agua de 590.805 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Al comparar los diseños de red de las Figs. 4.24 y 4.25, se observa que en ambos diseños de red el flujo másico de agua dulce de la fuente  $w1$  es el mismo. Sin embargo, en el diseño de red de la Fig. 4.25, el flujo másico de agua de la fuente  $w2$  se redujo de 179.538 a 158.345 ton/h, que representa una reducción del 11.8% con respecto al diseño de red de la Fig. 4.24, por lo tanto, también se redujo el costo total anual de operación asociado al uso de agua de las fuentes en un 0.9%. La reducción en el flujo másico de agua de la fuente  $w2$  en el diseño de red de la Fig. 4.25, incrementó el flujo total de reúso de agua entre las operaciones usuarias de 7.983 a 42.007 ton/h, comparado con el diseño de red de la Fig. 4.24. El diseño de red de la Fig. 4.25 cuenta con 10 conexiones de reúso de agua adicionales, con respecto al diseño de red de la Fig. 4.24. De las diez conexiones adicionales, cuatro de ellas presentan flujos másicos de agua menores a 1 ton/h.

Para este caso de estudio se obtuvieron 980 soluciones óptimas locales con la metodología MAE, que se dividen en dos conjuntos de soluciones. El primer conjunto consiste de 582 soluciones óptimas con un flujo másico total de agua de 590.805 ton/h, 432.46 ton/h de la fuente de agua  $w1$  y 158.345 ton/h de la fuente de agua  $w2$ , con un costo

total anual mínimo de operación asociado a un flujo másico total de las fuentes de agua de 1,995,754.86 \$/año. El segundo conjunto está conformado por 398 soluciones óptimas locales con un flujo másico total de agua de 578.56 ton/h, distribuido de la siguiente forma: 476.393 ton/h de la fuente de agua  $w1$  y 102.167 ton/h de la fuente de agua  $w2$ , con un costo total anual mínimo de operación asociado a un flujo másico total de las fuentes de agua de 2,136,355.13 \$/año. Es interesante notar que el flujo másico total de las fuentes de agua en el segundo conjunto de soluciones es menor. Sin embargo, se requiere de un mayor flujo másico de agua de la fuente  $w1$ , lo que incrementa el costo total anual de operación, aunque se reduzca el flujo másico de la fuente de agua  $w2$ . Cada conjunto de soluciones representa un conjunto de diseños y topologías diferentes asociadas a un mismo flujo másico total de agua y, por ende, a un mismo costo total anual de operación.

En la Fig. 4.26 se muestra un diseño de red con una topología diferente, asociado a la solución óptima local que se obtuvo en la iteración número 45 de la metodología MAE, en un tiempo de CPU de 9.5 segundos. Este diseño de red presenta el mismo costo total anual de operación mínimo y el mismo flujo másico total de las fuentes de agua con respecto a la solución obtenida con BARON (Fig. 4.25). El tiempo de CPU total para las 1000 iteraciones de la metodología MAE fue de 211.54 segundos.

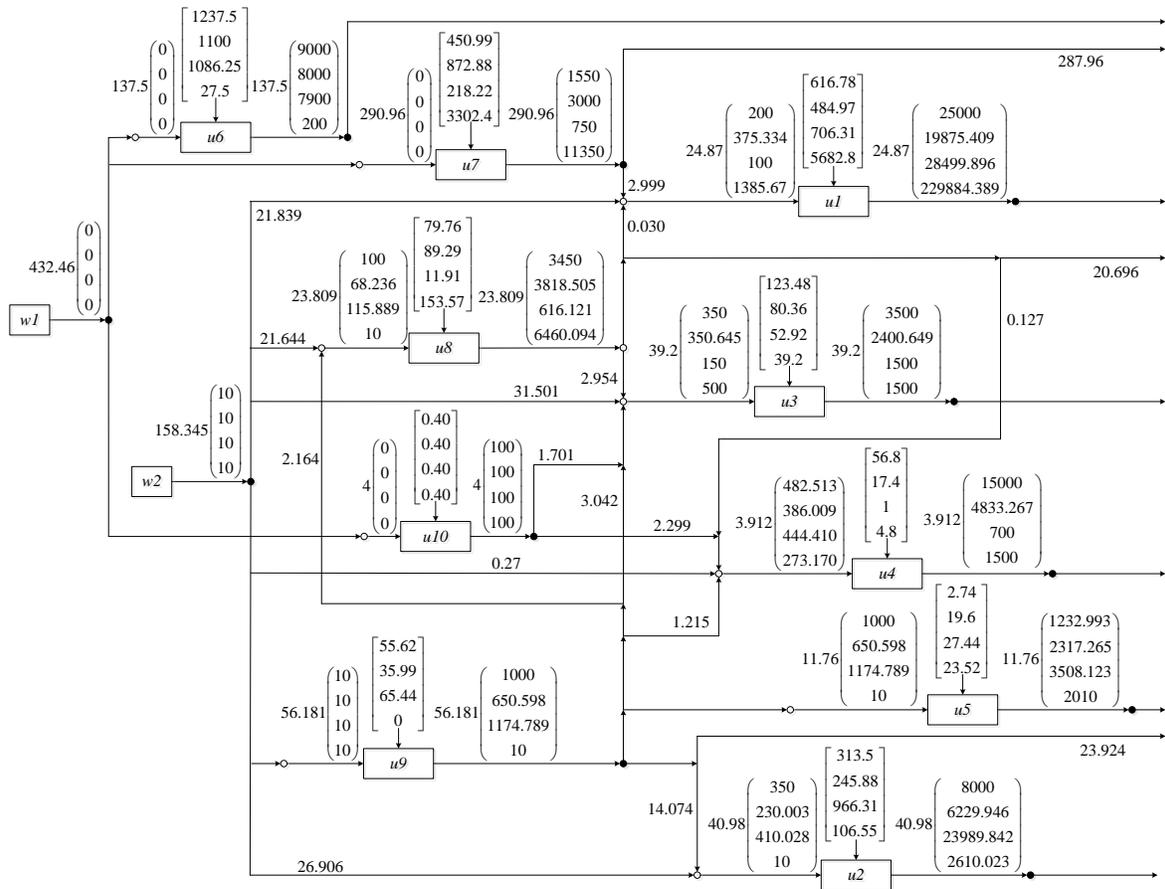


Fig. 4.26. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.8, asociado a la solución óptima local que se obtuvo en la iteración número 45 de la metodología MAE, con un flujo másico total de las fuentes de agua de 590.805 ton/h y un costo total anual de operación mínimo de 1,995,754.86 \$/año. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

#### 4.10. Caso de Estudio 4.9

Se propuso este caso de estudio, el cual está conformado por una fuente de agua dulce y dos fuentes de agua parcialmente contaminada con cuatro contaminantes, las cuales cuentan con un flujo máximo de suministro. Las fuentes de agua deben abastecer a diez operaciones usuarias de agua. Los datos asociados a las operaciones usuarias y a las fuentes de agua se muestran en las Tablas 4.13 y 4.14, respectivamente.

Tabla 4.13. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.9.

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	2.5	0	100
	B	1.7	15	115
	C	1.5	0	150
	D	13.2	5	225
$u2$	A	13.75	50	300
	B	19	20	400
	C	8.415	35	200
	D	6.89	70	200
$u3$	A	6.86	55	300
	B	9.6	50	290
	C	7	100	300
	D	4.42	110	280
$u4$	A	15.75	150	500
	B	15	180	480
	C	19.25	250	600
	D	18	200	500
$u5$	A	18.9	180	450
	B	9	250	400
	C	8.25	270	420
	D	18.4	300	530
$u6$	A	20.25	350	620
	B	18.6	430	740
	C	27.2	460	800
	D	32.5	330	830
$u7$	A	10.4	300	560
	B	20.24	410	870
	C	17.4	600	890
	D	7.68	680	800
$u8$	A	11.2	580	780
	B	21.06	600	870
	C	33.93	610	1000
	D	13.65	760	970
$u9$	A	18.4	400	800
	B	24.12	560	920
	C	17.01	655	970
	D	37.2	600	1200
$u10$	A	52.46	680	1900
	B	158.4	800	3200
	C	230.4	620	3500
	D	146.25	750	4000

Cada fuente de agua tiene asociado un costo unitario diferente, dependiendo del nivel de contaminación o pureza del agua. Si la fuente de agua no tiene contaminantes, el costo unitario asociado es mayor, como se muestra en la Tabla 4.14. Se asume que el tiempo total de operación del sistema en un año es de 8600 h. El objetivo de este caso de estudio consiste en diseñar una red óptima con el costo total mínimo de operación asociado a un flujo total de agua de las fuentes disponibles.

Tabla 4.14. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.9.

Fuente de agua $w$	$CSW_w$ (\$/ton)	Contaminante $j$	$CW_{w,j}$ (ppm)	$fw_w^U$ (ton/h)
$w1$	1.1	A	0	$\infty$
		B	0	
		C	0	
		D	0	
$w2$	0.66	A	10	80
		B	15	
		C	5	
		D	10	
$w3$	0.18	A	50	120
		B	30	
		C	20	
		D	40	

#### 4.10.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.9

En el modelo asociado al Caso de Estudio 4.9, se impuso una restricción para deshabilitar el reciclo de agua en cada una de las operaciones usuarias. Al resolver el modelo asociado a este caso de estudio, utilizando BARON, se excedió el tiempo máximo de solución establecido de 10,800 segundos. El proceso de solución se detuvo, dejando 3237 nodos abiertos. La solución reportada por BARON se obtuvo en el nodo 4123. BARON no demostró optimalidad global. Los valores de la tolerancia absoluta (epsa) y relativa (espr) resultantes son los siguientes: 6485.25 y  $7.5 \times 10^{-3}$ , respectivamente. La solución reportada por BARON tiene un costo total anual de operación mínimo de 871,047.9 \$/año, asociado a un flujo másico de agua dulce de la fuente  $w1$  de 75.41 ton/h y a un flujo másico de agua de la fuente  $w3$  de 101.851 ton/h. En la Fig. 4.27 se muestra el diseño de red asociado a la solución óptima que se obtuvo con BARON.

Por otra parte, con la metodología MAE se identificaron 5 soluciones óptimas locales diferentes, las cuales se muestran en la Tabla 4.15. En la Fig. 4.27 se muestra el diseño de red asociado a la solución óptima local que se obtuvo en la tercera iteración de la metodología MAE, en un tiempo de CPU de 0.75 segundos y que coincide con la solución óptima obtenida con BARON. El tiempo de CPU total para las 1000 iteraciones de la metodología MAE fue de 249.132 segundos.

Tabla 4.15. Soluciones óptimas diferentes obtenidas con la metodología MAE para el Caso de Estudio 4.9.

Iteración <sup>a</sup>	Valor de la función objetivo (\$/año)	Flujo de agua (ton/h)				Tiempo de CPU <sup>b</sup> asociado a la iteración (s)	Frecuencia de la solución <sup>c</sup>
		total	w1	w2	w3		
3	871,047.9	177.261	75.41	-	101.851	0.750	908
4	871,530.94	177.573	75.41	-	102.163	0.984	67
43	923,735.12	210.24	59.664	30.576	120	10.344	1
104	876,421.13	180.376	63.122	23.685	93.569	25.531	18
393	930,577.33	212.11	58.666	33.444	120	97.336	1
988	971,617.25	206.957	62.969	23.988	120	246.125	1

<sup>a</sup> Iteración en la que apareció por primera vez la solución.

<sup>b</sup> Tiempo de CPU total asociado a la iteración en la que apareció por primera vez la solución.

<sup>c</sup> Frecuencia de aparición de cada una de las soluciones.

De acuerdo con la Tabla 4.15, la solución con el costo total anual de operación mínimo, es la que se obtuvo en la tercera iteración de la metodología MAE. Esta solución requiere de un flujo másico de agua de la fuente  $w1$  de 75.41 ton/h. Sin embargo, la solución óptima local que se obtuvo en la iteración 393, es la que utiliza un menor flujo másico de agua de la fuente  $w1$  de 58.666 ton/h y es la que utiliza el mayor flujo másico total de agua de las soluciones óptimas locales obtenidas. En la solución de la iteración 393, se utiliza totalmente el flujo másico de agua de la fuente  $w3$  y 33.444 ton/h de la fuente de agua  $w2$ , para compensar la reducción en el flujo másico de agua de la fuente  $w1$ . Mientras que, en la solución obtenida en la tercera iteración, se incrementó el flujo másico de agua de la fuente  $w1$  para evitar usar la fuente de agua  $w2$  y sólo utilizar 101.851 ton/h de la fuente de agua  $w3$ .

El costo total anual de operación asociado a la solución óptima local obtenida en la iteración 393 de la metodología MAE, que corresponde al diseño de red de la Fig. 4.28, es 6.83% mayor con respecto costo total anual de operación del diseño de red de la Fig. 4.27. El flujo másico total de reúso de agua entre las operaciones usuarias en el diseño de red de la Fig. 4.27 es de 378.503 ton/h, mientras que en el diseño de red de la Fig. 4.28 es de 517.618 ton/h, que representa un 36.75% de aumento en el flujo total de reúso de agua con respecto al diseño de red de la Fig. 4.27. El incremento en el flujo másico total de reúso de agua en el diseño de red de la Fig. 4.28, provocó que el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias  $u3$ ,  $u5$ ,  $u6$  y  $u9$ , se incremente considerablemente. El incremento en el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias, da lugar a obtener un diseño óptimo de red degenerado, de acuerdo con Savelski y Bagajewicz (2003), en donde el aumento en el flujo másico de agua a través de las operaciones impide al o los contaminantes claves o de referencia, alcanzar sus concentraciones límites a la salida de las operaciones, como se muestra en el diseño de red de la Fig. 4.28.



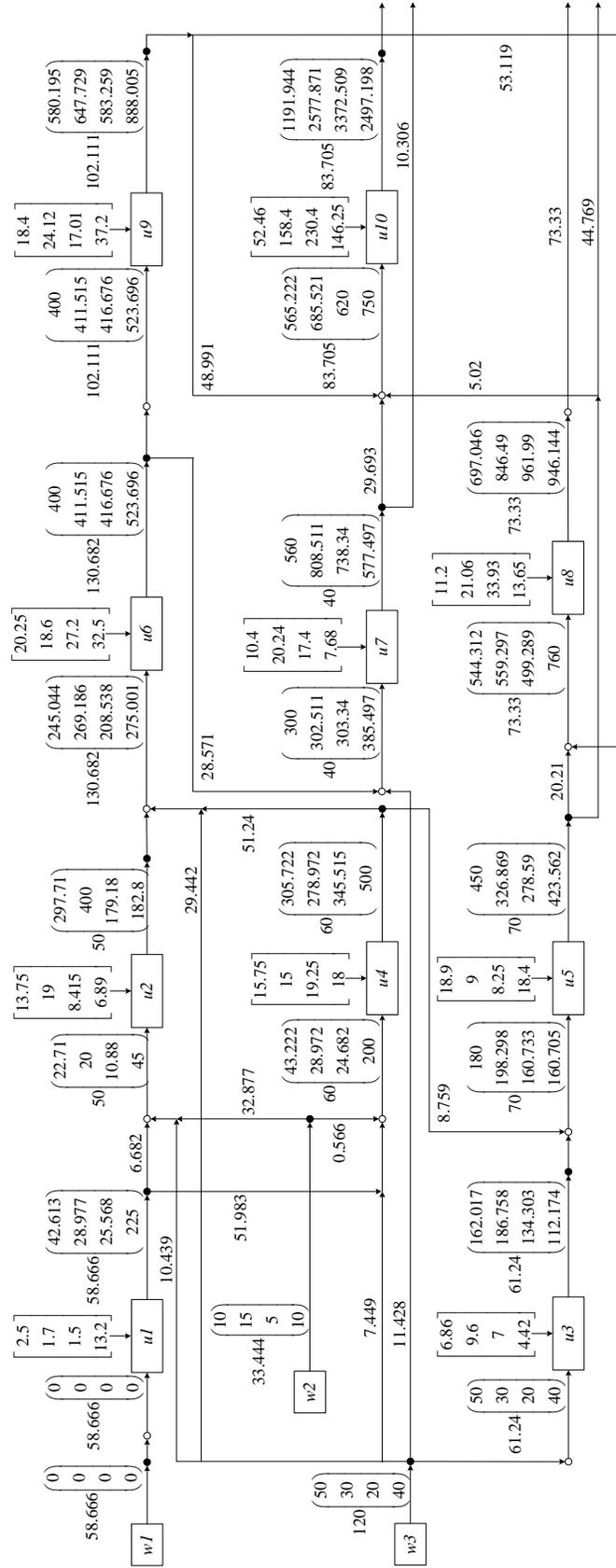


Fig. 4.28 Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.9, asociado a la solución obtenida en la iteración 393 de la metodología MAE, con un consumo total de agua de 212.11 ton/h, cuyo costo total anual de operación mínimo asociado es de 930,577.33 \$/año. Este diseño utiliza la menor cantidad de agua de la fuente w1, sin embargo, es el diseño que utiliza el mayor flujo total de agua de las fuentes de las soluciones obtenidas con la metodología MAE. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

Si se desea obtener un diseño de red cuyo costo total anual de operación sea mínimo, por concepto del flujo total de agua de las fuentes, el mejor diseño de red para este fin es el que se presenta en la Fig. 4.27. Por otra parte, si lo que se desea es utilizar un diseño de red que reduzca el flujo másico de agua de la fuente  $w1$ , considerando el costo total anual de operación, el mejor diseño de red para este propósito, es el que se presenta en la Fig. 4.28.

En términos de complejidad topológica, el diseño de red de la Fig. 4.27 cuenta en total con 21 conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias, de las cuales sólo una conexión tiene un flujo másico de agua menor a 1 ton/h, la cual corresponde a la conexión de reúso de agua de la operación  $u1$  a  $u7$ , mientras que el diseño de red de la Fig. 4.28 cuenta en total con 13 conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias de agua. Por lo tanto, topológicamente es mejor el diseño de red de la Fig. 4.28. Sin embargo, este diseño de red presenta el inconveniente de ser una solución degenerada. En donde el flujo másico de agua que pasa a través de algunas operaciones usuarias de agua impide que el o los contaminantes de referencia alcancen sus concentraciones de contaminantes límite en la salida. Aunado a ello, en estas operaciones usuarias de agua aún es posible reducir el flujo másico de agua a través de ellas, con la finalidad de reducir el flujo másico total de las fuentes de agua, para reducir costos de operación. Además, desde un punto de vista de inversión de capital, sería necesario considerar las dimensiones de las operaciones usuarias de agua, los equipos de bombeo y las tuberías, para poder operar con flujos másicos de agua mayores al flujo másico de agua necesario o mínimo en cada operación usuaria.

#### **4.11. Caso de Estudio 4.10**

Este caso de estudio nuevo está conformado por una fuente de agua dulce ( $w1$ ), dos fuentes de agua parcialmente contaminada ( $w2$  y  $w3$ ) y una fuente de agua contaminada con cinco contaminantes ( $w4$ ). Las fuentes de agua deben abastecer a 13 operaciones usuarias. Los datos de las fuentes de agua y los datos límite asociados a las operaciones usuarias de agua se muestran en las Tablas 4.16 y 4.17, respectivamente.

Se asume que el tiempo de operación de la red en un año es de 8600 h. Las fuentes de agua parcialmente contaminadas tienen un límite máximo de suministro que no puede excederse a excepción de la fuente de agua dulce y cada una de las fuentes de agua tiene asociado un costo unitario diferente.

Tabla 4.16. Datos de las fuentes de agua para el Caso de Estudio 4.10.

Fuente de agua $w$	$CSW_w$ (\$/ton)	Contaminante $j$	$CW_{w,j}$ (ppm)	$fw_w^U$ (ton/h)
$w1$	1.3	A	0	$\infty$
		B	0	
		C	0	
		D	0	
		E	0	
$w2$	0.63	A	0	200
		B	30	
		C	15	
		D	0	
		E	5	
$w3$	0.61	A	20	280
		B	0	
		C	0	
		D	35	
		E	25	
$w4$	0.17	A	50	350
		B	40	
		C	30	
		D	35	
		E	30	

Tabla 4.17. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.10.

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u1$	A	16	0	200
	B	7.26	0	110
	C	15.17	15	220
	D	16.905	5	250
	E	15	0	250
$u2$	A	12.6	0	180
	B	9.54	20	200
	C	13	0	260
	D	20.06	10	350
	E	20.1	0	300
$u3$	A	4.6	5	120
	B	9.62	0	370
	C	10.56	0	320
	D	18.675	35	450
	E	15.6	0	400
$u4$	A	10	0	500
	B	20.74	0	340
	C	13.16	0	280
	D	29.425	100	635
	E	13.035	25	420

Tabla 4.17. Datos límite asociados al Caso de Estudio 4.10. (Continuación)

Unidad usuaria de agua $u$	Contaminante $j$	$MU_{u,j}$ (kg/h)	$CU_{u,j}^{U,in}$ (ppm)	$CU_{u,j}^{U,out}$ (ppm)
$u5$	A	12.395	35	370
	B	16.985	55	450
	C	16.32	70	390
	D	33.108	66	600
	E	25.185	45	410
$u6$	A	46.97	90	700
	B	24.94	150	580
	C	25.83	220	630
	D	42.33	345	855
	E	30.6	300	900
$u7$	A	37.62	110	1250
	B	68.04	480	3000
	C	47.4	330	2700
	D	76.465	290	2155
	E	139.5	500	3600
$u8$	A	57.85	350	4800
	B	84.25	430	3800
	C	26.6	540	3200
	D	140.395	735	4000
	E	105	900	4400
$u9$	A	5.5	200	1300
	B	63	500	4700
	C	40.8	900	6000
	D	40.09	1225	3335
	E	72	1500	5100
$u10$	A	130.39	330	8000
	B	616	800	9600
	C	123.2	1600	4400
	D	432.25	3550	10050
	E	89.9	3100	6000
$u11$	A	65	3800	7050
	B	387	4500	8800
	C	171	6000	9000
	D	182.228	5050	9055
	E	167.9	5300	7600
$u12$	A	180	1000	7000
	B	79.2	600	5000
	C	150.8	800	6600
	D	338.865	1060	8850
	E	180.6	1400	5700
$u13$	A	102	3500	12000
	B	354	7000	13000
	C	90	5000	7500
	D	388.5	8000	15000
	E	57.5	6000	8500

#### 4.11.1. Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.10

En el Modelo WUN-CD se impuso una restricción para evitar el reciclo de agua en las operaciones usuarias, antes de resolverse con BARON y con la metodología MAE. Esta

restricción se impuso con base en los resultados de los casos de estudio anteriores, ya que el reciclaje de agua en las operaciones usuarias no tiene efecto alguno en la reducción del flujo total de suministro de agua de las fuentes.

Al resolver el modelo asociado a este caso de estudio utilizando BARON, el tiempo de CPU total fue de 74.4 segundos. En la Fig. 4.29 se muestra el diseño de red asociado a una solución óptima global reportada por BARON.

El diseño óptimo global de red reportado por BARON tiene un costo total anual de operación mínimo de 3,068,764.64 \$/año. De las cuatro fuentes de agua disponibles, sólo se utilizaron las fuentes de agua  $w1$ ,  $w2$  y  $w4$  con los siguientes flujos máxicos de agua, 252.5 ton/h, 19.498 ton/h y 95.878 ton/h, respectivamente. La fuente de agua  $w2$  sólo abastece a la operación usuaria  $u5$ , la fuente de agua  $w4$  abastece a las operaciones usuarias  $u5$ ,  $u6$  y  $u7$ , y la fuente de agua dulce  $w1$  abastece a las operaciones usuarias  $u1$ ,  $u2$ ,  $u3$  y  $u4$ . El número total de conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias es de 29, de las cuales 16 tienen un flujo máxico de agua menor a 1 ton/h; por lo tanto, son conexiones no deseables, desde el punto de vista de inversión de capital si se consideran costos de tuberías y bombeo, así como desde el punto de vista de operación y control en la red. Sin embargo, matemáticamente no violan ninguna restricción de concentraciones límites de contaminantes a la entrada o a la salida de las operaciones usuarias. En esta solución, el flujo máxico total de reúso de agua entre las operaciones usuarias es de 306.179 ton/h.

Cuando se utilizó la metodología MAE, se obtuvo un conjunto de 973 soluciones óptimas locales asociadas a un solo valor mínimo del costo total anual de operación por concepto del flujo máxico total de las fuentes de agua, que corresponde a 3,068,764.64 \$/año. Cada una de las soluciones óptimas locales representa un diseño de red diferente con el mismo costo total anual de operación mínimo. Algunas de las soluciones presentan la misma topología de red; sin embargo, los valores de los flujos máxicos de agua a través de algunas operaciones usuarias y los valores de los flujos máxicos de reúso de agua entre las operaciones usuarias son diferentes. El tiempo de CPU total empleado en las 1000 iteraciones de la metodología MAE, fue de 730.437 segundos.

En la Fig. 4.30 se muestra, de entre todos los diseños de red obtenidos, el diseño de red con el menor número de conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias. Este diseño de red corresponde a la solución óptima local obtenida en la iteración 420 de la metodología MAE, en un tiempo de CPU de 303.722 segundos.

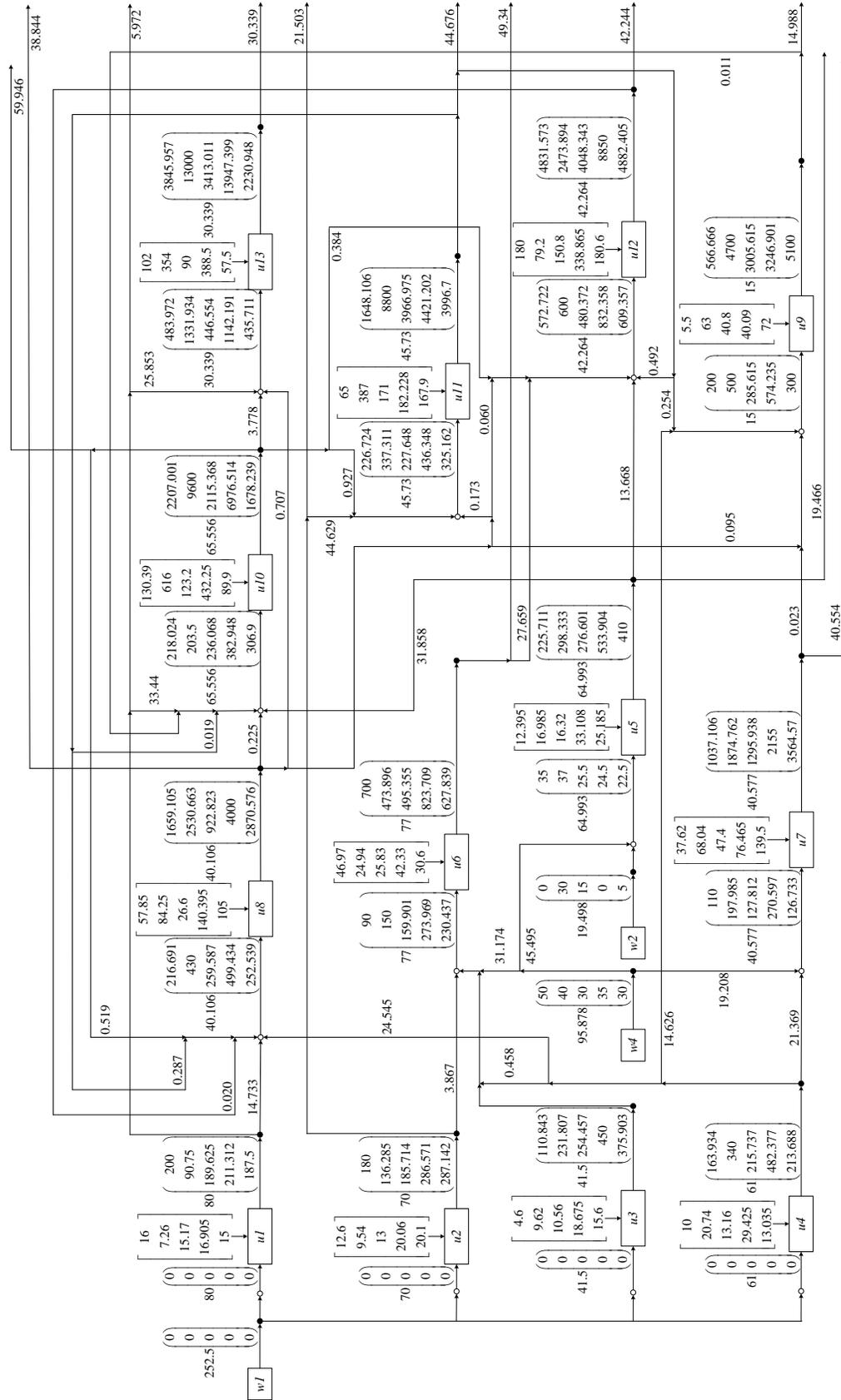


Fig. 4.29. Diseño de red asociado a una solución óptima obtenida con BARON para el Caso de Estudio 4.10, con un costo total anual de operación mínimo de 3,068,764.64 \$/año, asociado a un flujo másico total de agua de 367.876 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas másicas de los contaminantes entre corchetes cuadrados en (kg/h)).

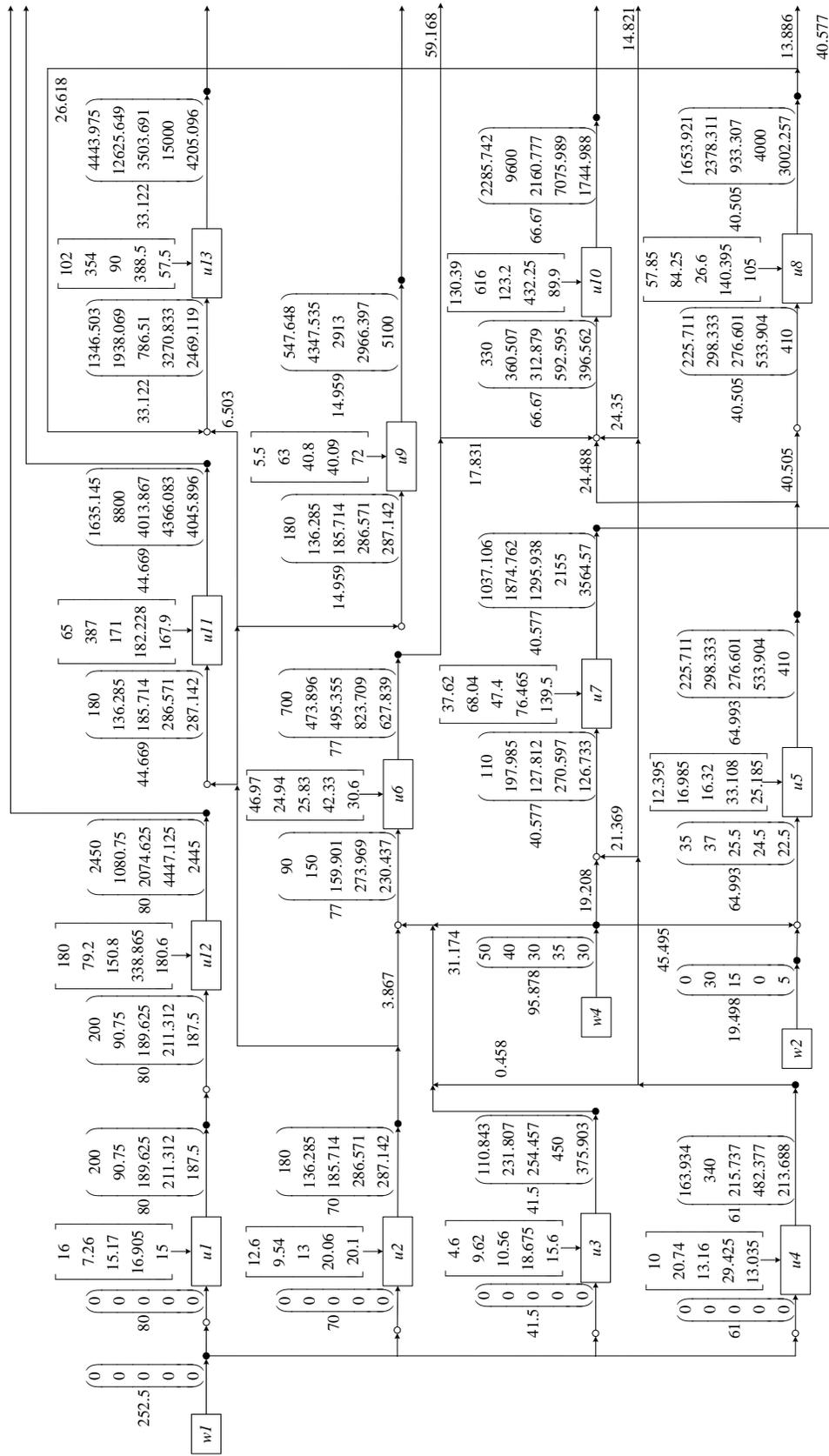


Fig. 4.30 . Diseño óptimo de red para el Caso de Estudio 4.10, asociado a la solución óptima local obtenida en la iteración 420 de la metodología MAE. Este diseño tiene un costo total anual de operación mínimo de 3,068,764.64 \$/año, correspondiente a un flujo máxico total de agua de 367.876 ton/h. (En fuente normal se muestran los flujos de agua en (ton/h), las concentraciones de los contaminantes entre paréntesis en (ppm) y las cargas máxicas de los contaminantes entre corchetes en (kg/h)).

El flujo másico total de las fuentes de agua en el diseño de red de la Fig. 4.30 es igual al del diseño de red de la Fig. 4.29. Sin embargo, el número total de conexiones de reúso de agua en el diseño de la Fig. 4.30 se redujo de 29 a 13, comparado con el diseño de red de la Fig. 4.29. Esto representa una reducción significativa de la complejidad topológica de la red, lo que conllevaría a reducir costos de tuberías, equipos de bombeo y una reducción en costos de operación y control, en caso de considerarlos. El flujo másico de reúso de agua en el diseño de red de la Fig. 4.30 es de 347.072 ton/h, que representa un aumento del 13.35% con respecto al diseño de red de la Fig. 4.29. Este aumento en el flujo másico total de reúso de agua, provocó un ligero incremento en el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias  $u8$ ,  $u10$ ,  $u12$  y  $u13$ , con respecto al diseño de red de la Fig. 4.29. Sin embargo, también presentó una ligera reducción en el flujo másico de agua a través de las operaciones usuarias  $u9$  y  $u11$ .

Los diseños de red de las Figs. 4.29 y 4.30 tienen el mismo costo total anual de operación mínimo asociado al flujo total de las fuentes de agua, pero el diseño de red de la Fig. 4.29 presenta una complejidad topológica mayor con respecto al diseño de la Fig. 4.30. Esto muestra que se pueden obtener diseños de red de diferente complejidad para un solo caso de estudio. El diseñador debe aplicar otro tipo de criterios que no se consideran en este trabajo, como, por ejemplo: el tamaño o la dimensión de las operaciones usuarias de agua, el costo de capital asociado a las operaciones y el costo de las tuberías y los equipos de bombeo. Sin embargo, considerar estos aspectos puede incrementar la complejidad de solución de los problemas, la complejidad de los diseños de red y las decisiones por parte del diseñador.

#### **4.12. Comparación de resultados para los casos de estudio abordados**

En la Tabla 4.18 se comparan las características principales (complejidad, metodología, mejor solución en términos del flujo total de agua mínimo / costo anual de operación mínimo en la red y el tiempo de CPU total) para los ocho casos de estudio (“*benchmark problems*”) de la literatura, comparados contra los resultados obtenidos en este trabajo. También se muestran los resultados obtenidos para los dos casos de estudio propuestos en este trabajo.

En la Tabla 4.18 se muestra que en este trabajo se obtuvieron y reprodujeron las mejores soluciones reportadas en la literatura para los casos de estudio 4.2, 4.6 y 4.7, respectivamente. Para los casos de estudio 4.1, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.8, en este trabajo se obtuvieron mejores soluciones que las reportadas en la literatura, en términos del flujo total de agua o en términos del costo total anual de operación asociado al uso de agua, como se muestra en el caso de estudio 4.8.

Tabla 4.18. Comparación de resultados reportados en la literatura y los resultados obtenidos en este trabajo.

Caso de estudio	$ W - U - J ^a$	De la literatura			Este trabajo / BARON / MAE	
		Autores (año) / metodología	Mejor solución reportada	Tiempo CPU (s)	Mejor solución obtenida	Tiempo CPU (s)
4.1	1-2-2	Wang y Smith (1994) / Punto de Pliegue	104 ton/h	NA <sup>b</sup>	100.571 ton/h	0.03 / 47.88
4.2	1-3-3	Doyle y Smith (1997) / Modelo de PNL	105.602 ton/h	ND <sup>c</sup>	105.602 ton/h	0.12 / 60.33
4.3	1-7-3	Wang y col. (2012) / Potencial de concentración con PL	140.93 ton/h	NA <sup>b</sup>	139.7 ton/h	10,800 / 94.07
4.4	1-8-3	Liu y col. (2009) / Potencial de concentración	174.95 ton/h	NA <sup>b</sup>	174.028 ton/h	10,800 / 115.07
4.5	1-6-3	Zhao y col. (2014) / Potencial de concentración y dos reservorios internos de agua	51.43 ton/h	NA <sup>b</sup>	50.442 ton/h	731.44 / 96.34
4.6	1-5-3	Kuo y Smith (1998) / Punto de Pliegue	111.813 ton/h	ND <sup>c</sup>	111.813 ton/h	10,800 / 83.84
4.7	1-4-3	Calixto y col. (2015) / Diagrama de fuentes de agua	81.22 ton/h	NA <sup>b</sup>	81.222 ton/h	0.62 / 62.14
4.8	2-10-4	Leewongtanawit y Kim (2008) / Software WATER	2,013,980.7 \$/año / 611.998 ton/h	ND <sup>c</sup>	1,995,754.8 \$/año / 590.805 ton/h	75.19 / 211.54
4.9	3-10-4	-	-	-	871,047.9 \$/año / 177.261 ton/h	10,800 / 249.13
4.10	4-13-5	-	-	-	3,068764.6 \$/año / 367.876 ton/h	74.4 / 730.437

<sup>a</sup> Las barras verticales denotan la cardinalidad del conjunto de fuentes de agua, el conjunto de operaciones usuarias de agua y el conjunto de contaminantes.

<sup>b</sup> NA: No aplica.

<sup>c</sup> ND: No disponible.

Dado que no se cuenta con la información sobre el tiempo de CPU total de las soluciones asociadas a los casos de estudio 4.2, 4.6 y 4.8, no es posible comparar los tiempos de solución de los modelos propuestos en la literatura contra el modelo propuesto en este trabajo.

Por otra parte, las mejores soluciones reportadas en la literatura para los casos de estudio 4.1, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.7, se obtuvieron con metodologías heurísticas de diseño. El modelo WUN-CD muestra que las soluciones obtenidas mediante las metodologías heurísticas de diseño no son tan confiables al determinar un diseño de red, ya que requieren de pasos de solución iterativos, y en ninguna de estas metodologías es posible considerar simultáneamente múltiples fuentes de agua de diferente calidad, restricciones de diseño y costos de operación. Además, la implementación de estas metodologías restringe su aplicación a un diseño de red a la vez.

Para los casos de estudio 4.1, 4.2, 4.5, 4.7 y 4.8, el resolvidor BARON demostró que las soluciones obtenidas en este trabajo corresponden a soluciones óptimas globales. Con la

metodología MAE se obtuvo para cada caso de estudio, el mismo valor asociado a la función objetivo reportada por BARON. Sin embargo, con la metodología de multi-arranque estocástico se obtuvieron, en cada caso de estudio, diferentes diseños de red asociados al mismo valor de la función objetivo, y en algunos casos se identificaron otras soluciones óptimas locales diferentes. Esto muestra que existen múltiples diseños de red con diferentes características, tales como: diferente número de conexiones, diferentes valores de flujos máxicos de agua asociados a las conexiones de reúso de agua entre las operaciones usuarias y diferentes flujos máxicos de agua a través de las operaciones usuarias. Todas estas características pueden estar asociadas al mismo valor óptimo de una función objetivo.

Los casos de estudio 4.3, 4.4 y 4.6 se consideran como problemas de tamaño mediano. Al utilizar BARON para resolver estos casos de estudio, se obtuvieron soluciones óptimas que probablemente corresponden a soluciones óptimas globales en los casos de estudio 4.3 y 4.6; sin embargo, no se demostró que lo fueran en el tiempo máximo de solución establecido (maxtime = 10,800 segundos, 3 horas). Este resultado se puede inferir con base en los valores finales de las tolerancias absolutas y relativas, respectivamente. El criterio anterior no aplica para la solución obtenida para el Caso de Estudio 4.4.

Por otra parte, al utilizar la metodología MAE, en todos los casos de estudio abordados en este trabajo, se obtuvieron diferentes diseños de red asociados al mismo valor de la función objetivo y diferentes soluciones óptimas locales asociadas a un mismo caso de estudio, en un tiempo de CPU considerablemente menor comparado con el tiempo de solución al utilizar BARON, como se muestra en el tiempo de CPU utilizado para resolver los casos de estudio 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 y 4.9.

Para el Caso de Estudio 4.9, el cual se considera como un problema de gran tamaño, el resolvidor BARON no demostró optimalidad global en el tiempo máximo de CPU establecido. En contraste, al resolver este caso de estudio con la metodología MAE, se identificó (en un tiempo de CPU 97.69% menor, con respecto al tiempo de CPU utilizado por BARON) un conjunto de soluciones óptimas locales asociadas al mismo valor de la función objetivo obtenida con BARON. Adicionalmente, se identificaron cinco conjuntos de soluciones óptimas locales asociadas a diferentes valores de la función objetivo.

En el Caso de Estudio 4.10, el resolvidor BARON demostró optimalidad global. Al utilizar la metodología MAE en este caso de estudio, se obtuvo un solo conjunto de soluciones óptimas locales con el mismo valor en la función objetivo (con diferentes topologías o diseño de la red), comparada con la solución obtenida con BARON.

Las mejores soluciones óptimas locales y los diseños de red asociadas a ellas, que se obtuvieron con la metodología MAE, son perfectamente comparables con las soluciones óptimas y los diseños de red obtenidos con BARON. Sin embargo, la metodología MAE, permitió obtener soluciones óptimas locales con diferentes topologías de red, y ofrece la posibilidad de seleccionar de entre todas las soluciones obtenidas los diseños asociados a estas soluciones que mejor se adapten a las necesidades del diseñador o del diseño deseado.



## Capítulo 5. Conclusiones

### 5.1. Introducción

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático de programación no lineal para la síntesis óptima de redes de agua con operaciones usuarias de carga másica fija de múltiples contaminantes. El modelo se desarrolló con base en una superestructura general de red, inspirada en la propuesta del sub-sistema de uso de agua desarrollado por Takama y col. (1980). La superestructura general de red utilizada integra múltiples fuentes de agua y todas las posibilidades de uso, reúso y reciclaje de agua entre las operaciones usuarias.

El criterio fundamental para la síntesis óptima de un diseño de red de agua con operaciones usuarias de carga másica fija de múltiples contaminantes utilizando el modelo desarrollado, consiste en la minimización del valor de una función objetivo asociada al costo de operación anual derivado del uso de agua de las fuentes disponibles o, en otro caso, la función objetivo minimiza el flujo másico total de agua suministrada por las fuentes de agua en la red. En el modelo se consideraron las siguientes restricciones: balances de agua, balances de contaminantes en cada elemento de la superestructura (divisores, mezcladores y operaciones usuarias de agua) y cotas superiores e inferiores para cada una de las variables en el modelo. Las operaciones usuarias de agua se modelaron como operaciones de carga másica fija para centrar el estudio en el flujo másico de agua suministrada y la variación de la concentración de los contaminantes en el agua a la entrada y a la salida en cada operación usuaria de agua.

Para resolver el modelo propuesto se utilizaron dos enfoques de solución. El primer enfoque de solución consistió en utilizar el resolvidor comercial BARON, que implementa un algoritmo de optimización global determinista del tipo ramificación y acotamiento. El segundo enfoque consiste en utilizar una metodología de multi-arranque estocástico (MAE), el cual no ha sido utilizado previamente en la literatura para la solución de un modelo de PNL asociado a la síntesis óptima de redes con operaciones usuarias de agua de carga másica fija de múltiples contaminantes.

El modelo desarrollado se aplicó en ocho casos de estudio de referencia de la literatura sobre la síntesis de redes de operaciones usuarias de agua con múltiples contaminantes que han sido abordados por diferentes grupos de investigación, los cuales han utilizado diversas metodologías de síntesis y diseño. En cinco de estos casos de estudio (casos 4.1, 4.2, 4.5, 4.7 y 4.8) se obtuvieron resultados positivos bajo el enfoque de la minimización del flujo total de agua de las fuentes, y en el Caso de Estudio 4.8 del costo de operación anual asociado al flujo total de agua de las fuentes. También se propusieron y resolvieron dos casos de estudio de mayor complejidad (hasta cuatro fuentes de agua, trece operaciones

usuarias y cinco contaminantes) (Casos de Estudio 4.9 y 4.10). En todos los casos de estudio abordados en este trabajo fue posible reproducir, validar y verificar las soluciones previamente reportadas en la literatura, lo cual muestra la versatilidad y confiabilidad del modelo desarrollado y los enfoques de solución utilizados.

Al comparar los enfoques de solución utilizados en este trabajo, con base el valor de la función objetivo y los diseños de red obtenidos, se puede concluir que la metodología MAE es tan buena como el resolvidor BARON, ya que en todos los casos de estudio abordados en este trabajo se obtuvieron las mismas soluciones y diseños de red. Sin embargo, BARON, al utilizar un algoritmo de optimización global determinista, generalmente requiere de un tiempo considerable de CPU para llegar a una solución óptima global. Por ejemplo, en los casos de estudio 4.3 y 4.6, BARON no demostró en el tiempo máximo de solución establecido (10,800 segundos) que las soluciones obtenidas corresponden a soluciones óptimas globales. Sin embargo, los valores finales de las tolerancias relativas para estos casos de estudio quedaron muy cercanos al valor de la tolerancia relativa previamente especificada. Con base en esto, se infiere que las soluciones de los casos de estudio 4.3 y 4.6 corresponden a soluciones óptimas globales. Este criterio no aplica para las soluciones obtenidas con BARON para los casos de estudio 4.4 y 4.9. Por lo tanto, la metodología MAE presenta una interesante alternativa para este tipo de problemas, ya que puede obtener las mismas soluciones (aunque no se puede demostrar optimalidad global) en un tiempo de CPU razonable.

A continuación, se presentan las principales contribuciones, conclusiones generales y particulares, derivadas de los resultados obtenidos en esta tesis de maestría. También se presentan algunas líneas de investigación, con base en el análisis de los resultados y las limitaciones de este trabajo, para futuras investigaciones.

## **5.2. Contribuciones del proyecto de tesis**

Las principales contribuciones generadas en esta tesis en el área de síntesis de redes usuarias de agua con múltiples contaminantes son las siguientes, las cuales se resumen a continuación:

1. Se desarrolló un modelo de programación no lineal versátil y general para abordar el problema de la síntesis óptima de redes de uso de agua con operaciones usuarias de carga fija de múltiples contaminantes, con base en una superestructura de red general que considera múltiples fuentes de agua, y todas las opciones de uso, reúso y reciclaje de agua entre los procesos usuarios de agua.
2. Se aplicó un enfoque de solución basado en una metodología de multi-arranque estocástico que no se había utilizado previamente en la literatura para la solución de un modelo de PNL asociado a la síntesis de redes de uso de agua con múltiples

contaminantes. Con base en los resultados obtenidos, esta metodología de solución demostró que puede obtener una variedad de soluciones óptimas locales en tiempos de CPU razonables. Los resultados también muestran que las mejores soluciones obtenidas con la metodología MAE en cada caso de estudio, corresponden a soluciones óptimas globales, considerando el valor final de la función objetivo. Este resultado se deriva de comparar, en cada caso de estudio, la mejor solución óptima local obtenida y el tiempo de CPU total utilizado por el enfoque de solución de la metodología MAE, en contraste con el valor de la función objetivo, los valores finales de convergencia, absoluta y relativa y el tiempo de CPU empleado por el resolvidor BARON para obtener una solución óptima global.

3. En cada caso de estudio, el enfoque de solución de la metodología MAE permitió identificar la existencia de diseños óptimos locales de red diferentes asociados a un mismo valor de la función objetivo y también permitió identificar soluciones óptimas locales diferentes que presentan un valor diferente en la función objetivo.
4. En este trabajo se obtuvieron mejores soluciones que las reportadas en la literatura para cinco de los ocho casos de estudio abordados (casos 4.1, 4.3, 4.4, 4.5 y 4.8); son mejores soluciones en cuanto a la reducción en el flujo total de agua de las fuentes o en la reducción del costo total anual de operación asociado al flujo total de agua de las fuentes, según sea el caso.
5. En este trabajo, en particular en las soluciones obtenidas con el resolvidor BARON para los casos de estudio 4.2, 4.4, 4.5 y 4.6, se muestra que el uso del reciclaje de agua en las operaciones usuarias no presenta ventajas en la disminución del flujo total de agua en la red y en cambio presenta una complicación en cuestiones de operación, que conllevan en la práctica a utilizar un flujo másico de agua mayor, un incremento en el costo de inversión debido a la dimensión de la operación, las tuberías, equipos de bombeo y control adicionales para mantener el proceso de producción. Además, el reciclaje de agua también conlleva a una acumulación de contaminantes hasta alcanzar la concentración límite de entrada o salida del o los contaminantes claves en las operaciones que presentan esta característica.

### **5.3. Conclusiones generales**

El modelo de programación no lineal desarrollado y su solución permitieron determinar con éxito la toma de decisión (asignaciones de flujos másicos de agua y concentraciones de contaminantes) para diseñar redes de uso de agua con operaciones multi-contaminantes, considerando el costo total anual de operación asociado al flujo total de agua utilizado para abastecer a las operaciones usuarias de agua y determinar la secuencia y la conectividad de los flujos másicos de agua entre las operaciones para cumplir con las restricciones de concentraciones límite de contaminantes en la entrada y salida en cada una de las operaciones usuarias de agua. Al reducir el flujo total de agua de las fuentes, en

consecuencia, se reduce el costo total anual de operación y el flujo total de efluentes generados.

Los enfoques de solución utilizados en el modelo de PNL asociado al problema de síntesis de redes de uso de agua con operaciones multi-contaminantes, mostraron ser eficientes. Por una parte, al utilizar el resolvidor BARON se determinaron soluciones óptimas globales para algunos casos de estudio, mientras que, para otros, con base en la magnitud del valor de la tolerancia relativa (epsr) se puede inferir que las soluciones obtenidas son potencialmente soluciones óptimas globales, aunque no se demostró que lo fueran en el tiempo de CPU máximo establecido. Por otra parte, al utilizar la metodología de multi-arranque estocástico (MAE), se mostró que esta metodología puede proporcionar diferentes soluciones óptimas locales y globales (sin demostrar que lo sean) en un tiempo de CPU menor, en contraste con el tiempo de CPU empleado para las soluciones obtenidas con BARON.

#### **5.4. Conclusiones particulares**

- La superestructura de red general utilizada para desarrollar el modelo de PNL asociado al problema de síntesis de redes de uso de agua con operaciones multi-contaminantes mostró ser aplicable a todos los casos de estudio abordados; por lo tanto, esta superestructura representa adecuadamente el problema abordado.
- El enfoque de solución con el resolvidor BARON permitió determinar soluciones óptimas globales para los Casos de Estudio 4.1, 4.2, 4.5, 4.7 y 4.8 bajo los criterios de paro establecidos, mientras que, para los Casos de Estudio 4.3, 4.4 y 4.6 se cumplió el criterio de paro de tiempo máximo de solución de 10,800 segundos, pero se concluye que las soluciones obtenidas son potencialmente soluciones óptimas globales, debido al valor muy cercano del criterio de paro de la tolerancia relativa. Por otra parte, el enfoque de solución MAE demostró obtener las mismas soluciones que las obtenidas con BARON; para los Casos de Estudio 4.3, 4.4 y 4.6 obtuvo las soluciones en un tiempo menor.
- Con el modelo matemático desarrollado fue posible reproducir para cada uno de los casos de estudio, las mejores soluciones reportadas en la literatura y para los Casos de Estudio: 4.1, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 y 4.8, permitió obtener diseños de red que requieren de un menor flujo másico de agua. Por lo tanto, el modelo desarrollado fue validado.
- Dentro de los alcances del modelo matemático desarrollado se encuentra: i) una amplia representación de problemas de síntesis de redes usuarias de agua que involucran múltiples contaminantes y fuentes de agua con diferentes niveles de concentración de contaminantes, ii) es una herramienta muy útil para validar y verificar los diseños convencionales de red asociados a las soluciones reportadas en

la literatura, iii) el modelo y los enfoques de solución utilizados permitieron la obtención de nuevos diseños de red, que no fueron anticipados por las metodologías propuestas por los diferentes grupos de investigación de la literatura, iv) el modelo desarrollado junto con el enfoque determinista de solución permitió obtener para cada caso de estudio una solución óptima global o potencialmente global, v) el modelo desarrollado junto con la estrategia de solución MAE permitió la identificación de múltiples diseños de red asociados a un mismo valor de la función objetivo, además de identificar otras soluciones óptimas locales con un consumo total de agua dulce ligeramente mayor y una complejidad topológica diferente y vi) con base en los resultados obtenidos, se determinó como innecesaria la inclusión del reciclaje local de agua en las operaciones usuarias de agua, ya que no representa ninguna ventaja sobre los diseños de red que no incluyen reciclaje.

- Las limitaciones que presenta el modelo matemático desarrollado consisten en: i) no es posible controlar la complejidad topológica en la red. Por lo tanto, en algunos diseños existen flujos máxicos de agua con valores muy pequeños que matemáticamente cumplen con las restricciones establecidas y son inherentes a la solución óptima local o global obtenida, pero en la realidad son imprácticos y pueden representar el uso de tuberías, equipos de bombeo y control adicional, ii) las soluciones obtenidas están limitadas solo a la minimización del costo total anual de operación asociada al agua utilizada de las fuentes en la red o a la minimización del flujo total de agua de las fuentes y por lo tanto no se pueden anticipar otros escenarios en donde se podrían considerar costos de tuberías y bombeo y costos de capital y operación en toda la red, y iii) el modelo matemático desarrollado se limita a un solo tipo de operaciones usuarias de agua.

## **5.5. Trabajo a futuro**

A continuación, se enlistan las sugerencias para trabajos futuros o las posibles extensiones de este trabajo de tesis.

1. Una posible extensión del modelo sería contemplar el uso de variables binarias con la finalidad de poder controlar la complejidad topológica en la red. Aunado a ello, se podrían contemplar costos de capital y operación por concepto de tuberías y equipos de bombeo. Esta extensión derivaría en un modelo de programación no lineal entera mixta (PNL-EM).
2. Una sugerencia para evitar flujos máxicos de agua pequeños consistiría en imponer restricciones de flujo con el uso de variables binarias asociadas a los flujos máxicos de agua.
3. Otra extensión del modelo consistiría en incluir otro tipo de operaciones usuarias de agua. Por ejemplo, las que se mencionan en el Capítulo 2 y posteriormente, contemplar los puntos 1 y 2.



## Referencias

Ahmetović, E., y Grossmann, I. E. (2011). Global superstructure optimization for the design of integrated process water networks. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 57(2), 434-457.

Bagajewicz, M. (2000). A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants. *Computers & Chemical Engineering* 24, 2093-2113.

Bagajewicz, M. y Savelski, M. (2001). On the use of linear models for the design of water utilization systems in process plants with a single contaminant. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 79(A), 600-610.

Box, M. J. (1965). A new method of constrained optimization and a comparison with other methods. *The Computer Journal* 8(1), 42-52.

Calixto, E. E. S., Quaresma, A. C. L., Queiroz, E. M, y Pessoa, F. L. P. (2015). Water source diagram in multiple contaminant industrial case studies: adoption of a decomposition approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 54, 10040-10053.

Dhole, V. R., Ramchandani, N., Tainsh, R. A., y Wasilewski, M. (1996). Make your process water pay for itself. *Chemical Engineering, January* 103(1), 100-103.

Douglas, J. M. (1988). *Conceptual design of chemical processes*. McGraw-Hill.

Doyle, S. J., y Smith, R. (1997). Targeting water reuse with multiple contaminants. *Process Safety and Environmental Protection* 75(3), 181-189.

El-Halwagi, M. M., y Manousiouthakis, V. (1989). Synthesis of mass exchange networks. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 35 (8), 1233-1244.

Fan, X-Y., Li, Y-P., Liu, Z-Y., y Pan, C-H. (2012). A new design method for water-using networks of multiple contaminants with the concentration potential concepts. *Chemical Engineering Science* 73, 345-353.

Feng, X., y Seider, W. D. (2001). New structure and design methodology for water networks. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 40, 6140-6146.

Gomes, J. F. S., Queiroz, E. M., y Pessoa, F. L. P. (2007). Design procedure for water/wastewater minimization: single contaminant. *Journal of Cleaner Production* 15, 474-485.

Gomes, J. F. S., Mirre, R. C., Delgado, B. E. P. C., y Queiroz, E. M. (2013). Water sources diagram in multiple contaminant processes: maximum reuse. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 52, 1667-1677.

Gunaratnam, M., Alva-Argáez, A., Kokossis, A., Kim, J. K., y Smith, R., (2005). Automated design of total water systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 44, 588-599.

Hallale, N. (2002) A new graphical targeting method for water minimization. *Advances in Environmental Research* 6, 377-390.

Hernández-Suárez, R., Castellanos-Fernández, J., y Zamora, J. M. (2004) Superstructure decomposition and parametric optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks. *Industrial & Engineering Chemical Research* 43, 2175-2191.

Hill, G. B., Pring, E. J., y Osborn, P. D. (2013). *Cooling towers: principles and practice*. Butterworth-Heinemann.

Horst, R., y Tuy, H. (1990). *Global optimization: Deterministic approaches*. 1a. edición Springer-Verlag. Berlin.

Huang, C-H., Chang, C-T., Ling, H-C., Chang, C-C. (1999). A mathematical programming model for water usage and treatment network design. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 38(7), 2666-2679.

Jezowski, J. (2010). Review of water network design methods with literature annotations. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 49(10), 4475-4516.

Karrupiah, R. y Grossmann, I. E. (2006). Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. *Computers and Chemical Engineering* 30, 650-673.

Khor, C. H., Chachuat, B., Shah, N. (2014). Optimization of water network synthesis for single-site and continuous processes: milestones, challenges, and future directions. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 54, 10257-10275.

Klemes, J. J. (Ed.). (2013). *Handbook of process integration (PI): minimization of energy and water use, waste and emissions*. Elsevier.

Kuo, W-C. J. y Smith, R. (1998). Design of water-using systems involving regeneration. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 76(B), 94-114.

Leewongtanawit, B., y Kim, J-K. (2008). Synthesis and optimization of heat-integrated multiple-contaminant water systems. *Chemical Engineering and Processing* 47, 670-694.

Li, B-H., y Chang, C-T. (2011). Multiobjective optimization of water-using networks with multiple contaminants. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 50, 5651-5660.

Li, Y., y Guan, H. (2016). A stepwise optimal design of water networks. *Chinese Journal of Chemical Engineering* 24, 787-794.

Linnhoff, B., y Flower, J. R. (1978), Synthesis of heat exchanger networks: I. Systematic generation of energy optimal networks. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 24, 633-654.

Linnhoff, B., y Hindmarsh, E. (1983). The Pinch design method for heat exchanger networks. *Chemical Engineering Science* 38(5), 745-763.

Liu, Z-Y., Yang, Y., Wan, L-Z., Wang, X., y Hou, K-H. (2009). A heuristic design procedure for water-using networks with multiple contaminants. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 55(2), 374-382.

Manan, Z. A., Tan, Y. L., y Foo, D. C. Y. (2004). Targeting the minimum water flow rate using water cascade analysis technique. *American Institute of Chemical Engineers Journal* 50(12), 3169-3183.

Mann, J. G., y Liu, Y. A. (1999). *Industrial water reuse and wastewater minimization*. McGraw-Hill.

Núñez-Serna, R. I., y Zamora, J. M. (2016). NLP model and stochastic multi-start optimization approach for heat exchanger networks. *Applied Thermal Energy* 94, 458-471.

Poplewski, G., Jezowski, J., y Jezowska, A. (2002). In: Optimal wastewater reuse networks design by adaptative random search optimization. *15<sup>th</sup> International Congress of Chemical and Process Engineering CHISA*, Praha H. 1.6.

Prakash, R., y Shenoy, U. V. (2005). Targeting and design of water networks for fixed flowrate and fixed contaminant load operations. *Chemical Engineering Science* 60, 255-268.

Ranade, V. V., y Bhandari V. M. (2014). *Industrial wastewater treatment, recycling, and reuse*. Elsevier.

Sahinidis, N. V. (1996). BARON: a general purpose global optimization software package. *Journal of Global Optimization* 8, 201-205.

Savelski, M. J., y Bagajewicz, M. J. (2000). On the optimality conditions of the water utilization systems in process plants with single contaminants. *Chemical Engineering Science* 55, 5035-5048.

Savelski, M. J., y Bagajewicz, M. J. (2003). On the necessary conditions of optimality of water utilization systems in process plants with multiple contaminants. *Chemical Engineering Science* 58, 5349-5367.

Sieniutycz, S., y Jezowski, J. (2018). *Energy optimization in process systems and fuel cells*. Elsevier.

Silori, G. K., y Khanam, S. (2018). Performance analyses of LP and MILP solvers based on newly introduced scale: Case studies of water network problems in chemical processes. *Chemical Engineering Research and Design* 136, 417-430.

Su, W-H., Li, Q-H., Liu, Z-Y., y Pan, C.H. (2012). A new design method for water-using network of multiple contaminants with single internal water main. *Journal of Cleaner Production* 29-30, 38-45.

Takama, N., Kuriyama, T., Shiroko, K. y Umeda, T. (1980). Optimal water allocation in a petroleum refinery. *Computers and Chemical Engineering* 4, 251-258.

Teles, J., Castro, P. M., y Novais, A. Q. (2008). LP-based solution strategies for the optimal design of industrial water networks with multiple contaminants. *Chemical Engineering Science* 63, 376-394.

Wang, B., Feng, X., y Zhang, Z. (2003). A design methodology for multiple contaminant water networks with single internal water main. *Computers and Chemical Engineering* 27, 903-911.

Wang, Y. P., y Smith, R. (1994). Wastewater minimization. *Chemical Engineering Science* 49(7), 981-1006.

Wang, Y. P., y Smith, R. (1995). Wastewater minimization with flowrate constraints. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 73(A), 889-904.

Wang, Z-F., Zhao, H-P., y Liu, Z-Y. (2012). Design of water-using networks by combining the concentration potential concepts with an LP approach. *Chemical Engineering Science* 69, 565-570.

WWAP (United Nations World Water Assessment Programme). (2014). *The United Nations World Water Development Report 2014: Water and energy*, Paris, UNESCO.

WWAP (United Nations World Water Assessment Programme). (2015). *The United Nations World Water Development Report 2015: Water for a Sustainable World*. Paris, UNESCO.

WWAP (United Nations World Water Assessment Programme). (2017). *The United Nations World Water Development Report 2017: Wastewater: the untapped resource*. Paris, UNESCO.

WWAP (United Nations World Water Assessment Programme). (2018). *The United Nations World Water Development Report 2018: Nature-based solutions for water*. Paris, UNESCO.

WWAP (United Nations World Water Assessment Programme). (2019). *The United Nations World Water Development Report 2019: Leaving no one behind*. Paris, UNESCO.

Zhao, H-P., Su, W-N., y Liu, Z-Y. (2014). Design of water-using networks of multiple contaminants with two internal water mains. *Journal Cleaner Production* 67, 37-44.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00139

Matrícula: 2173802038

Síntesis óptima de redes de uso de agua con operaciones multi-contaminantes.



Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 11:00 horas del día 16 del mes de julio del año 2020 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

- DR. HECTOR FERNANDO PUEBLA NUÑEZ
- DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ
- DR. CARLOS MARTINEZ VERA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: HERNAN TEODULO CORTES MONROY

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

HERNAN TEODULO CORTES MONROY  
ALUMNO

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. HECTOR FERNANDO PUEBLA NUÑEZ

VOCAL

DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ

SECRETARIO

DR. CARLOS MARTINEZ VERA