



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA DE
PROCESOS E HIDRAULICA**

**OPTIMIZACION Y SINTESIS DE REDES DE
AGUA ASOCIADAS A PLANTAS DE PROCESO**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERIA
QUIMICA

PRESENTA:

ROGELIO HERNANDEZ SUAREZ

MEXICO, D.F.

SEPTIEMBRE 2004

Tesis de Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química

***OPTIMIZACIÓN Y SÍNTESIS DE REDES DE
AGUA ASOCIADAS A PLANTAS DE PROCESO***

M. en C. Rogelio Hernández Suárez

Septiembre 2004

OPTIMIZACIÓN Y SÍNTESIS DE REDES DE AGUA ASOCIADAS A PLANTAS DE PROCESO

Tesis presentada a la

Universidad Autónoma Metropolitana

Para obtener el grado de

Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

Por

Rogelio Hernández Suárez

Asesor

Juan Manuel Zamora Mata

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
México, D. F.

Septiembre 2004

A mi esposa Sara y a nuestros tres hijos, Nefrethey, Rogelio Ramsés y Salvador

A la memoria de mis padres Salvador y Elena, y mi hermano Salvador

“Since the fabric of the universe is most perfect, and is the work of a most wise Creator, nothing whatsoever takes place in the universe in which some form of maximum and minimum does not appear”

-Leohard Euler (1707-1783)

Resumen

El objetivo de esta disertación consistió en investigar el problema de optimización y síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. La motivación surge del hecho que a pesar de que los procesos de tratamiento de efluentes se utilizan ampliamente en la industria, la estructura y sus propiedades no se han estudiado de manera metodológica para producir un diseño eficiente y robusto. En esta disertación se desarrolla una metodología sistemática para la optimización y síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. El desarrollo de procedimientos sistemáticos de síntesis de tales sistemas permite diseñar la estructura y el cálculo de sus propiedades al menor costo total, e investigar sobre la robustez del diseño para explorar la posibilidad de mejorar su construcción y funcionamiento por conceptos de análisis de sensibilidad en las variables de diseño.

La naturaleza no convexa de los modelos matemáticos que describen este tipo de problemas, y la capacidad de manejar múltiples contaminantes, corrientes y unidades de tratamiento, introducen en el sistema complejidades y un crecimiento exponencial del número de posibilidades de configuraciones topológicas. Estas son algunas de las dificultades que han derivado en investigaciones con diferentes metodologías, principalmente conceptuales del tipo punto de pliegue, y de programación matemática.

El método propuesto se ha desarrollado con base en conceptos de partición del espacio de búsqueda de diseño no convexo, formulación de modelos matemáticos estructurados del proceso de tratamiento de programación no lineal (PNL) y programación lineal (PL) en estado estacionario, y propuestas de estrategias de solución. Bajo hipótesis razonables de ausencia de corrientes de reciclo y recirculaciones en el método de síntesis se propone la partición del espacio de búsqueda de diseño, que implica la descomposición de una superestructura compleja en un conjunto de superestructuras básicas de red.

El mejor diseño en cada superestructura básica de red es determinado resolviendo un conjunto de problemas de programación lineal (PL), expresados a partir de la reformulación de un modelo matemático no convexo estructurado. La exploración sistemática del espacio paramétrico definido por las variables fraccionales del problema, produce del espacio solución contenido por las superestructuras básicas de red, un diseño alternativo óptimo global de red. Se propone una estrategia de solución robusta, en dos fases, donde es posible controlar la complejidad que exhiben los modelos matemáticos por la presencia de los términos bilineales, sobre las regiones del espacio de búsqueda de diseño.

A diferencia de otras metodologías de diseño de sistemas de tratamiento de efluentes basados en estrategias de descomposición de modelos matemáticos que pueden presentar problemas durante la solución, principalmente por la suposición de buenos puntos de arranque y que pueden exhibir soluciones subóptimas. En esta disertación, el método propuesto supera estas desventajas al conducir un procedimiento heurístico-paramétrico de optimización global, con alternativas atractivas de proyecto y útiles para la toma de decisiones durante el diseño. El método se ha probado para el diseño de sistemas de tratamiento de efluentes para un número de ejemplos de la literatura, obteniéndose mejores resultados, en particular para ejemplos complicados.

ABSTRACT

Simultaneous design techniques for the synthesis of distributed wastewater treatment networks rely on the solution of nonconvex mathematical models, which give rise to multiple suboptimal solutions, and often cause failure of standard local optimization techniques. This dissertation is concerned with the development of systematic procedures for the optimization and synthesis of distributed wastewater treatment networks that allow: Optimal design of wastewater treatment structures and their important properties, and search for their distinguished robustness and explore the possibility of improving their construction by sensitivity analysis means of the design variables. In Chapter 1, we briefly present the sustainable development concept for the design of water networks and the state-of-the-art of available procedures for the synthesis of distributed wastewater treatment networks.

In Chapter 2 of this dissertation, a linear programming model is presented for targeting and design of distributed effluent treatment subsystems. For the development of the linear programming model, a single-treatment-unit basic network superstructure is established in order to remove the mass load of a given contaminant. The linear programming model can be used to target minimum treatment flowrates within the Water Pinch methodology.

Chapter 3 develops a superstructure decomposition and parametric optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks. Within the developed methodology, a typical complex network superstructure for simultaneous design is decomposed into a set of basic network superstructures, which partitions the design search space. The best treatment network design embedded in each of the basic network superstructures is determined by solving a set of linear programming problems, which is generated from a structured nonconvex mathematical model by fixing a small number of key problem variables.

In Chapter 4, an alternative mathematical model is developed within the optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks developed in Chapter 3. The applicability of the design procedures is illustrated by considering five treatment units in two Cases Studies. Chapter 5 summarizes the main results and contributions of the dissertation, and outlines several recommendations for future work.

Reconocimientos

Deseo expresar mi gratitud y aprecio a mis asesores, Juan M. Zamora Mata (UAMI) y Julián Castellanos Fernández (IMP), por la dirección, el estímulo y la crítica durante este trabajo.

Mi agradecimiento y aprecio también, al Ing. José Luis Cano Domínguez por el apoyo para realizar esta tesis.

Deseo también expresar mi reconocimiento por la ayuda y el apoyo que he recibido en la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, y al laboratorio de Simulación, Optimización y Síntesis (SOS).

Esta investigación fue financiada por
Instituto Mexicano del Petróleo a quien deseo expresar mi agradecimiento.

CONTENIDO

RESUMEN -----	iv
RECONOCIMIENTOS -----	vii
LISTA DE FIGURAS -----	xiii
LISTA DE TABLAS -----	xvii

Capítulo		Página
1	INTRODUCCIÓN -----	1
1.1	Agua y desarrollo sustentable -----	1
1.2	Planeación del diseño de sistemas industriales de agua -----	4
1.2.a	Esquema típico de diseño industrial para agua -----	5
1.2.b	Reducción de costos por el concepto de minimización del consumo de agua y generación de efluentes -----	6
1.2.c	Reducción de costos por el concepto de tratamiento de efluentes ---	7
1.2.d	Concepto de minimización del consumo de agua por uso-regeneración descentralizada de efluentes -----	8
1.2.e	El concepto de descarga cero en las industrias -----	9
1.3	El problema de síntesis de redes de agua -----	9
1.3.1	Reuso de agua y minimización de efluentes -----	11
1.3.2	Tratamiento de contaminantes -----	15
1.4	Enfoques para reducir la contaminación de agua en las industrias -----	19
1.4.1	Procedimientos conceptuales para el diseño -----	19
1.4.2	Enfoques de programación matemática para el diseño-----	22
1.5	Alcance de la investigación -----	28
1.5.1	Síntesis óptima de redes distribuidas de tratamiento de efluentes---	28
1.5.2	Diseños robustos de redes de tratamiento distribuidos de efluentes	29

1.5.3	Marco de referencia de la investigación sobre síntesis de sistemas de tratamiento de efluentes	30
1.6	Contenido de esta disertación -----	31
1.6.1	Modelo de programación lineal para asistir en el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes -----	31
1.6.2	Enfoque de descomposición de superestructura y optimización paramétrica para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes -----	31
1.6.3	Modelo matemático alternativo para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes -----	32
1.6.4	Conclusiones -----	33
2	MODELO DE PROGRAMACIÓN LINEAL PARA ASISTIR EN EL DISEÑO DE SISTEMAS DISTRIBUIDOS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES -----	34
2.1	Introducción -----	34
2.2	Descripción del problema bajo consideración -----	42
2.3	Modelo de programación lineal propuesto -----	44
2.4	Ejemplos ilustrativos -----	47
2.4.1	Ejemplo 2.1 -----	47
2.4.2	Ejemplo 2.2 -----	50
2.4.3	Regiones de diseño para la secuenciación de las plantas de tratamiento para el Ejemplo 2.2 -----	55
2.5	Conclusiones -----	56
3	DESCOMPOSICIÓN DE SUPERESTRUCTURA Y OPTIMIZACIÓN PARAMÉTRICA PARA LA SÍNTESIS DE REDES DISTRIBUIDAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES -----	58
3.1	Introducción -----	58
3.2	Declaración del problema -----	67
3.3	Enfoque de diseño propuesto -----	68

3.3.1	Descomposición de superestructura -----	68
3.3.2	Modelado de programación matemática -----	71
3.3.3	Reducción del modelo matemático y enfoque de solución -----	76
3.3.3.a	Enfoque heurístico-paramétrico de optimización para una superestructura básica de red 1-2 -----	78
3.3.3.b	Modelos de optimización (<i>BNS-1</i>), (<i>BNS-2</i>) y (<i>BNS-3</i>)----	81
3.4	Ejemplos ilustrativos -----	82
3.4.1	Ejemplo ilustrativo 3.1 -----	82
3.4.2	Ejemplo ilustrativo 3.2 -----	85
3.4.3	Ejemplo ilustrativo 3.3 -----	92
3.4.4	Ejemplo ilustrativo 3.4 -----	101
3.4.5	Ejemplo ilustrativo 3.5. -----	109
3.4.6	Ejemplo ilustrativo 3.6 -----	114
3.4.7	Ejemplo ilustrativo 3.7 -----	120
3.4.8	Desempeño y costo computacional -----	124
3.5	Conclusiones -----	125
4	MODELO MATEMÁTICO ALTERNATIVO PARA LA SÍNTESIS DE REDES DISTRIBUIDAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES -----	127
4.1	Introducción -----	127
4.1.1	Antecedentes -----	130
4.1.2	Representación del problema de diseño y descomposición de superestructura -----	133
4.2	Modelo de programación matemática -----	136
4.3	Enfoque de solución para diseñar redes de tratamiento de agua -----	143
4.4	Casos de Estudio -----	148
4.4.1	Caso de Estudio 4.1 -----	148
4.4.1.a	Diseño Parte 1 del Caso de Estudio 4.1 -----	152
4.4.1.b	Resultados computacionales Parte 1 del Caso de Estudio 4.1 -----	156

4.4.1.c	Diseño Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	157
4.4.1.d	Resultados computacionales Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	162
4.4.2	Caso de Estudio 4.2 -----	164
4.4.2.a	Resultados computacionales del Caso de Estudio 4.2 -----	172
4.4.3	Resumen de los resultados de los Casos de Estudio -----	175
4.5	Conclusiones -----	177
5	CONCLUSIONES, CONTRIBUCIONES Y TRABAJO FUTURO -----	179
5.1	Conclusiones -----	179
5.2	Contribuciones del trabajo de investigación -----	180
5.2.1	Sobre la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes -----	180
5.2.2	Sobre el diseño robusto de redes distribuidas de tratamiento de efluentes -----	182
5.3	Recomendaciones para trabajo futuro -----	185
5.3.1	Sobre la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes - -----	185
5.3.2	Sobre el diseño robusto de redes distribuidas de tratamiento de efluentes-----	187

REFERENCIAS	188
--------------------------	-----

Apéndices	Página
A MODELO (<i>BNS-r</i>) PARA LOS SIGUIENTES CASOS	197
A.1 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando una unidad de tratamiento (<i>BNS-1</i>)	198
A.2 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando dos unidades de tratamiento (<i>BNS-2</i>)	199
A.3 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando tres unidades de tratamiento (<i>BNS-3</i>)	201

FIGURAS

Figura		Página
1.1	Esquemas de planeación de sistemas industriales de agua -----	6
1.2	Representación del problema de reuso de agua -----	13
1.3	Operaciones de regeneración y reuso de agua -----	15
1.4	Diagrama del problema de tratamiento de efluentes -----	18
2.1	Determinación del flujo mínimo de efluente por la metodología de punto de pliegue -----	37
2.2	Diagrama de malla para el diseño de una subred de tratamiento de efluentes ----	42
2.3	Superestructura básica para diseño de una subred de tratamiento de efluentes ----	47
2.4	Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 2.1-----	49
2.5	Subredes de tratamiento obtenidas en la primera etapa de diseño del Ejemplo 2.2	52
2.6	Diseños de subredes obtenidas en la segunda etapa de diseño para el Ejemplo 2.2 -----	53
2.7	Diseño final de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 2.2 -----	54
2.8	Regiones de diseño para la secuenciación de plantas de tratamiento en el Ejemplo 2.2 -----	56
3.1	(a) Diseño de un sistema distribuido de tratamiento de efluentes. (b) Superestructura -----	62
3.2	Superestructuras de red típicas para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes -----	69
3.3	Superestructuras básicas de red que involucran dos unidades de tratamiento ----	70

3.4	Red óptima de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.1 -----	83
3.5	Flujo mínimo a tratamiento para diferentes concentraciones límite ambiental en el Ejemplo 3.1 -----	84
3.6	Flujo mínimo a tratamiento para diferentes concentraciones máximas de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento en el Ejemplo 3.1 -----	85
3.7	Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.2 -----	86
3.8	Flujo mínimo a tratamiento para diferentes escenarios de concentración límite ambiental de contaminantes en el Ejemplo 3.2 -----	87
3.9	Flujo mínimo a tratamiento para conjuntos diferentes de relaciones de remoción en las unidades de tratamiento en el Ejemplo 3.2 -----	88
3.10	Concentración mínima de contaminante en la descarga, para conjuntos diferentes de relaciones de remoción de contaminantes en las unidades de tratamiento en el Ejemplo 3.2 -----	89
3.11	Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes escenarios de flujos de corrientes efluentes en el Ejemplo 3.2 -----	90
3.12	Flujo total mínimo a tratamiento de los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.3 -----	93
3.13	Diseño óptimo de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.3 -----	94
3.14	Flujo total mínimo a tratamiento para diferente distribución de carga másica en los mejores diseño insertados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.3 -----	95
3.15	Costo total de tratamiento para diferentes coeficientes de costo y distribución de carga másica en el Ejemplo 3.3 -----	97
3.16	Los mejores sistemas de tratamiento con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, para diferentes coeficientes de costo en el Ejemplo 3.3 -----	98
3.17	Curvas de flujo total mínimo a tratamiento correspondientes a diferentes límites de concentración de contaminantes en el Ejemplo 3.3 -----	99

3.18	Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red, para diferentes límites de concentración de contaminantes, en el Ejemplo 3.3 -----	100
3.19	Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red, en el Ejemplo 3.4 -----	102
3.20	Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el ejemplo 3.4 -----	103
3.21	Superficie de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de superestructura básica de red, con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2 en el Ejemplo 3.4-----	104
3.22	Superficie de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños en la superestructura básica de red con un arreglo de unidades 2-1 en el Ejemplo 3.4--	105
3.23	Mapa de regiones de diseño para el Ejemplo 3.4 -----	106
3.24	Dos diseños de redes óptimas equivalentes de tratamiento de efluentes para $C_{A,e}^U = 7.9455 \text{ ppm}$ y $C_{B,e}^U = 8.8860 \text{ ppm}$ en el Ejemplo 3.4 -----	108
3.25	Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de red insertados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.5 -----	110
3.26	Los mejores diseños insertados en las superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.5 -----	111
3.27	Fracción de la carga másica de los contaminantes que será removida por la primera unidad en los mejores diseños insertados en las superestructuras básicas de red, en el Ejemplo 3. 5 -----	113
3.28	Mapas de flujo total mínimo a tratamiento para la solución del ejemplo 3.6 -----	116
3.29	Los mejores sistemas de tratamiento con arreglos des unidades 1-3-2, 3-2-1 y 3-1-2 para el Ejemplo 3.6 -----	118
3.30	Mapas de flujo total mínimo a tratamiento para la solución del Ejemplo 3.7 -----	121
3.31	Los mejores diseños de red implantados en la superestructura de red básica con arreglos 3-1-2 y 1-3-2 para el Ejemplo 3.7 -----	123

4.1	Superestructura para el diseño de un sistema distribuido de tratamiento de efluentes -----	132
4.2	Una superestructura básica de red para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, que involucra tres unidades de tratamiento -----	135
4.3	Diseño de la Parte 1 del Caso de Estudio 4.1 -----	150
4.4	Diseño de la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	151
4.5	Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños implantados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 4.1 -----	153
4.6	Redes óptimas equivalentes de tratamiento de efluentes para $C_{j,e}^U = 75 \text{ ppm}$ en la Parte 1. Caso de Estudio 4.1 -----	154
4.7	Diseño óptimo de la red de tratamiento, Parte 1 para (a) arreglo 1-2 (b) arreglo 2-1, del Caso de Estudio 4.1 -----	155
4.8	Un diseño óptimo de las redes de tratamiento de efluentes. Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	158
4.9	Diseños óptimos de las redes de tratamiento de efluentes, para un mismo flujo y arreglo de las unidades de tratamiento, Caso de Estudio 4.1 -----	160
4.10	Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes valores del intervalo $\Delta\alpha$, flujo de 187.569 t/h, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	162
4.11	Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes valores del intervalo $\Delta\alpha$, caso 2 flujo de 187.8485 t/h, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	163
4.12	Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 3-2-1-4-5*, Caso de Estudio 4.2 -----	168
4.13	Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 4*-2-3-5-1, Caso de Estudio 4.2 -----	169
4.14	Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 2-4-1*-5-3, Caso de Estudio 4.2 -----	170

TABLAS

Tabla		Página
2.1	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 2.1 -----	48
2.2	Relaciones de remoción (%) para los procesos de tratamiento para el Ejemplo 2.1 -----	48
2.3	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 2.2 -----	51
2.4	Relaciones de remoción (%) para los procesos de tratamiento para el Ejemplo 2.2 -----	51
3.1	Número de variables fraccionales transformadas a expresiones lineales en el modelo ($BNS - r$), y número máximo de problemas de PL y de PNL a resolver por el enfoque de solución propuesto -----	81
3.2	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 3.1 -----	82
3.3	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 3.2 -----	86
3.4	Relaciones de remoción (%) para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.2 -	86
3.5	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 3.3 -----	92
3.6	Datos de los procesos de tratamiento para el Ejemplo 3.3 -----	92
3.7	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 3.4 -----	101
3.8	Relaciones de remoción (%) para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.4-	101
3.9	Relaciones de remoción de contaminantes (%) para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.5 -----	109
3.10	Concentración límite ambiental para contaminantes en el Ejemplo 3.5 -----	109
3.11	Datos de las corrientes efluentes para el Ejemplo 3.6 -----	115

3.12	Relaciones de remoción de contaminantes (%) para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.6 -----	115
3.13	Funciones de costo para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.6 -----	119
3.14	Relaciones de remoción de contaminantes (%) para los procesos de tratamiento en el Ejemplo 3.7 -----	120
3.15	Concentración límite ambiental para contaminantes en el Ejemplo 3.7 -----	120
3.16	Flujos totales mínimos a tratamiento para los ejemplos 3-6 -----	124
3.17	Número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación del enfoque de solución paramétrica para los ejemplos 3-6 -----	125
4.1	Número de variables fraccionales necesarias en los lazos de control, para la optimización paramétrica de hasta 6 unidades de tratamiento -----	146
4.2	Fuentes de agua Parte 1 del Caso de Estudio 4.1 -----	148
4.3	Datos de los procesos de las unidades usuarias de agua. Caso de Estudio 4.1 -----	149
4.4	Relaciones de remoción de contaminantes (%) para los procesos de tratamiento. Caso de Estudio 4.1 -----	149
4.5	Condiciones de operación en unidades usuarias de agua y unidades de tratamiento de la Parte 1. Caso de Estudio 4.1 -----	150
4.6	Condiciones de operación de las unidades usuarias de agua y unidades de tratamiento de la Parte 2. Caso de Estudio 4.1 -----	151
4.7	Flujos totales mínimos a tratamiento para la Parte 1 del Caso de Estudio 4.1 -----	156
4.8	Número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación del enfoque de solución paramétrica para el Caso de Estudio 4.1 -----	156
4.9	Número de arreglos por unidades repetidas de tratamiento y flujos óptimos con la metodología de diseño, Caso de Estudio 4.1 -----	158
4.10	Óptimos locales con flujo mínimo de efluente a tratar igual de 187.569 t/h para la secuencia T2-T1-T1-T2-T2. Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	159
4.11	Número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación del enfoque de solución paramétrica, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1 -----	163

4.12	Datos de las corrientes efluentes para el Caso de Estudio 4.2 -----	164
4.13	Relaciones de remoción de contaminantes (%) para los procesos de tratamiento para el Caso de Estudio 4.2 -----	165
4.14	Lazos de control sobre las variables fraccionales, Caso de Estudio 4.2 -----	165
4.15	Flujos totales mínimos de efluentes respecto a los diferentes arreglos de las unidades de tratamiento, Caso de Estudio 4.2 -----	167
4.16	Flujos óptimos locales para algunos arreglos de unidades de tratamiento, Caso de Estudio 4.2 -----	172
4.17	Flujo total mínimo de efluente a tratar para los mejores diseños de red. Caso de Estudio 4.2 -----	173
4.18	Número de problemas de PL y de PNL resueltos para los mejores diseños de red. Caso de Estudio 4.2 -----	173
4.19	Estrategia de solución en el enfoque de optimización paramétrica para los mejores diseños de red, en el Caso de Estudio 4.2 -----	175
4.20	Comparación de resultados para el Caso de Estudio 4.1 -----	176
4.21	Comparación de resultados para el Caso de Estudio 4.2 -----	177

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Agua y desarrollo sustentable

El agua es un elemento clave del desarrollo sustentable, indispensable en sus aspectos sociales, económicos y ambientales. El agua es un bien económico y un bien social esencial para el desarrollo humano. La crisis global del agua está relacionada con el uso excesivo y contaminación del recurso, tanto en países desarrollados como en países en vías de desarrollo, y representa una amenaza para el desarrollo económico, para la preservación del medio ambiente y para la seguridad social. La gestión racional de este recurso resulta clave para el desarrollo sustentable; la resolución de los problemas del agua conducirá al progreso en las dimensiones económica, social y medioambiental de dicho desarrollo sustentable.

La parte ambiental es una consideración central en el diseño y operación de plantas de proceso, químicas y otras. Sin embargo, la naturaleza altamente compleja de los objetivos ambientales a una producción más limpia de procesos y prevención de la contaminación hace difícil el diseño con suficiente alcance y detalle (Young y Cabezas, 1999; Bahy y El-Halwagi, 2000). Esto ha promovido un aumento en la interacción de la actividad humana y del ambiente, lo que ha conducido al desarrollo de regulaciones en niveles locales, nacionales y globales, que en los últimos años se ocupaban sólo de problemas ambientales, por ejemplo, la preocupación con el uso de límites de concentración ambientales de descarga en límites de batería de una planta; sin embargo, ahora los requerimientos de diseño están

llegando a ser más amplios en su enfoque y alcance. Por ejemplo, la legislación HM, 1995, del gobierno Británico, requiere de regulaciones de diseño hacia el logro de objetivos de desarrollo sustentable. La práctica del diseño industrial ha seguido necesariamente requisitos legales. Sin embargo, el proceso que modela el entorno del medio ambiente ha sido a menudo lento para adaptar sus actividades a nuevas estructuras legislativas que principalmente tomen en cuenta los problemas ambientales (Organización de Cooperación y Desarrollo Económico (OECD), 1999, 2000; Sharatt, 1999).

El desarrollo sustentable proporciona una estructura para la integración de políticas ambientales y estrategias de desarrollo, y es esencial para satisfacer necesidades humanas y mejorar la calidad de vida humana. El desarrollo sustentable debe estar basado en el uso eficiente y responsable del medio ambiente y del uso de los recursos naturales, humanos y económicos. El desarrollo sustentable representa un modelo de crecimiento económico global que satisface las necesidades actuales de la humanidad, sin comprometer la capacidad de las generaciones futuras, para satisfacer sus propias necesidades. Desde el punto de vista del desarrollo industrial también significa satisfacer las necesidades actuales de crecimiento sin comprometer el medio ambiente para las generaciones futuras. El papel que la industria puede desempeñar para satisfacer los retos de medio ambiente, sociales y económicos para el desarrollo sustentable ha sido reconocido y documentado ampliamente en la literatura (p.ej., Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA), 1992; Rossiter, 1995; Sorin y Paris, 1997; Jackson, 1998). Procesos de producción más eficientes, estrategias preventivas, tecnologías más limpias y procedimientos a través del ciclo de vida del producto, por ejemplo, pueden ser importantes mecanismos para reducir los impactos sobre el uso de los recursos y el medio ambiente. Las instancias gubernamentales están comprometidas en identificar y promover prácticas sustentables con la industria para tratar los retos de preservación del medio ambiente. El estado del arte empuja a estrategias reactivas de descarga cero de tuberías en las industrias, por citar un ejemplo, centrada en la captura y enajenación de contaminantes generados durante el proceso de manufactura, a un enfoque más integral que englobe consideraciones ambientales, diseño de productos,

prácticas de adquisición y los procesos de producción (p.ej., PNUMA, 1999). Sin embargo, el cumplimiento de las reglamentaciones y políticas ambientales de los objetivos de preservación del medio ambiente y social, compite y entra en conflicto con los intereses y resultados financieros de las industrias (p.ej., Levy, 1995; Hamilton, 1995; Lanoie et al., 1998; Basset, 2000; Dearing, 2000). Algunas empresas han manifestado que han reducido la descarga de los residuos tóxicos y han experimentado efectos favorables sobre el rendimiento económico, aunque el beneficio ha sido identificado en periodos de tiempo largos (Hart y Ahuja, 1997; Khamman y Damosn, 1999). Por otro lado, algunas industrias están adoptando y explotando una imagen corporativa de ética y protección al medio ambiente, lo que ayudará a tener una mejor conexión entre el rendimiento entre medio ambiente y rendimiento financiero.

La Organización Internacional para la Normalización (ISO) ha contribuido a través del desarrollo de una serie de directrices y normas voluntarias para la industria (serie 14000), donde se busca articular guías y principios generales, proporcionar la estructura para implantar sistemas de gestión ambiental, directrices para informar, y centrar la atención en enfoques específicos sectoriales para afrontar los retos de preservación ambientales. Existen otras muchas instancias reguladoras de las industrias para establecer, controlar y evaluar los objetivos de preservación del medio ambiente, como la Cámara Internacional de Comercio (CIC); la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos (OCDE), Análisis del Medio Ambiente Global (p.ej., GEO-2000) por la Organización de las Naciones Unidas (ONU), Water Quality Act of 1987, 1992, de la Agencia de Protección al Ambiente (EPA), Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA), Consejo Europeo de Federaciones de la Industria Química (CEFIC), etc.

Sin embargo, el reto de hacer realidad el concepto del desarrollo sustentable es inmenso, y promueve el desarrollo de metodologías para la evaluación y prevención del impacto ambiental y restauración del medio natural como consecuencia de diversas actividades y elementos del cambio para la gestión integrada de los recursos hídricos en las industrias.

1.2 Planeación del diseño de sistemas industriales de agua

La planeación y diseño de plantas de proceso y de servicios requieren satisfacer objetivos económicos, ambientales y sociales. La satisfacción total simultánea de todos los objetivos generalmente no es posible, y por lo tanto exhibe un desafío por desarrollar herramientas de síntesis y análisis que puedan hacer explícitos estos compromisos de diseño de procesos. La dificultad de traducir la información de las necesidades del diseño de proceso en objetivos ambientales, promueve típicamente la optimización de costos totales en contra del potencial existente para la minimización de desechos industriales. Se han promovido marcos legales e instrumentos económicos para que los grandes consumidores de materias primas y energía adquieran conciencia pública de preservación del medio ambiente, ya que también son los grandes generadores de contaminantes y residuos.

En la planeación y diseño de plantas de proceso y de servicios, el desafío de investigación en cero emisiones industriales tiene el objetivo de lograr avances tecnológicos, que lleven a que la producción se realice sin dejar forma alguna de desechos. Todas las entradas se deben utilizar, bien sea en el producto final o deben ser convertidas en insumos con valor agregado para otras industrias. Del plan de acciones se encuentran, entre otros, los puntos siguientes: (i) La industria debe tomar la iniciativa y emprender el rediseño de sus procesos de producción, convirtiéndolos en cadenas productivas o conglomerados de industrias con cero emisiones. (ii) La industria puede concebir el mejoramiento de la productividad de las materias primas como un avance para la reducción de costos. (iii) Los gobiernos responderán abriendo los primeros parques industriales de cero emisiones, donde se pueden combinar la industria, la agricultura y la construcción.

En los procesos industriales, el agua forma parte de los recursos más intensivamente utilizados. Las refinerías y las plantas petroquímicas usan agua en grandes cantidades para operaciones como lavado, extracción, agotamiento, generación de vapor, desalado, desulfurización y otras operaciones. Después de utilizar el agua, estos procesos retornan

aguas efluentes que pueden contener diversos contaminantes. Por lo tanto, las corrientes efluentes deben ser tratadas en sistemas diseñados para alcanzar los límites de concentración para reutilización o descarga final al medio ambiente. La reglamentación ambiental para descarga de efluentes industriales en el diseño de plantas nuevas está basada en el estado del arte y la disponibilidad de plantas de tratamiento cada vez más sofisticadas y desarrolladas tecnológicamente. La limitación en la disponibilidad del agua y la generación creciente de contaminantes en los procesos industriales establecen la necesidad de cambiar sus prioridades y su método de abordar los desafíos, reorientando debidamente su función y su estructura. En la Figura 1.1 se representa de manera condensada la planeación y diseño de sistemas industriales de agua (Bagajewicz, 2000).

1.2.a Esquema típico de diseño industrial para agua

Las plantas de proceso generan corrientes contaminantes, derivado de su operación normal de producción. En la Figura 1.1(a) se muestra un esquema muy simplificado del concepto típico sobre reuso y tratamiento de agua en la industria. No hay restricción en la cantidad y en la forma de alimentación de agua a las plantas de proceso, el ordenamiento paralelo de alimentación de agua fresca a plantas de proceso tiene como efecto una demanda de grandes cantidades de agua. Por otro lado, los efluentes acuosos en la industria son tratados en un sistema único secuencial de operaciones de tratamiento, el cual está caracterizado por una corriente y el flujo total de efluentes que pasa a través de cada una de las operaciones de tratamiento, la finalidad es reducir la concentración de contaminantes transportados en las corrientes efluentes (Eckenfelder, et. al, 1985; Lankford, 1988; Higgins, 1989; McLaughlin et al., 1992; Higgins, 1995; Eckenfelder, 1999). Este ordenamiento típico secuencial centralizado de plantas de tratamiento persiste en operación en algunos lugares, y tiene el inconveniente de manejar grandes volúmenes de efluentes, entre otros problemas.

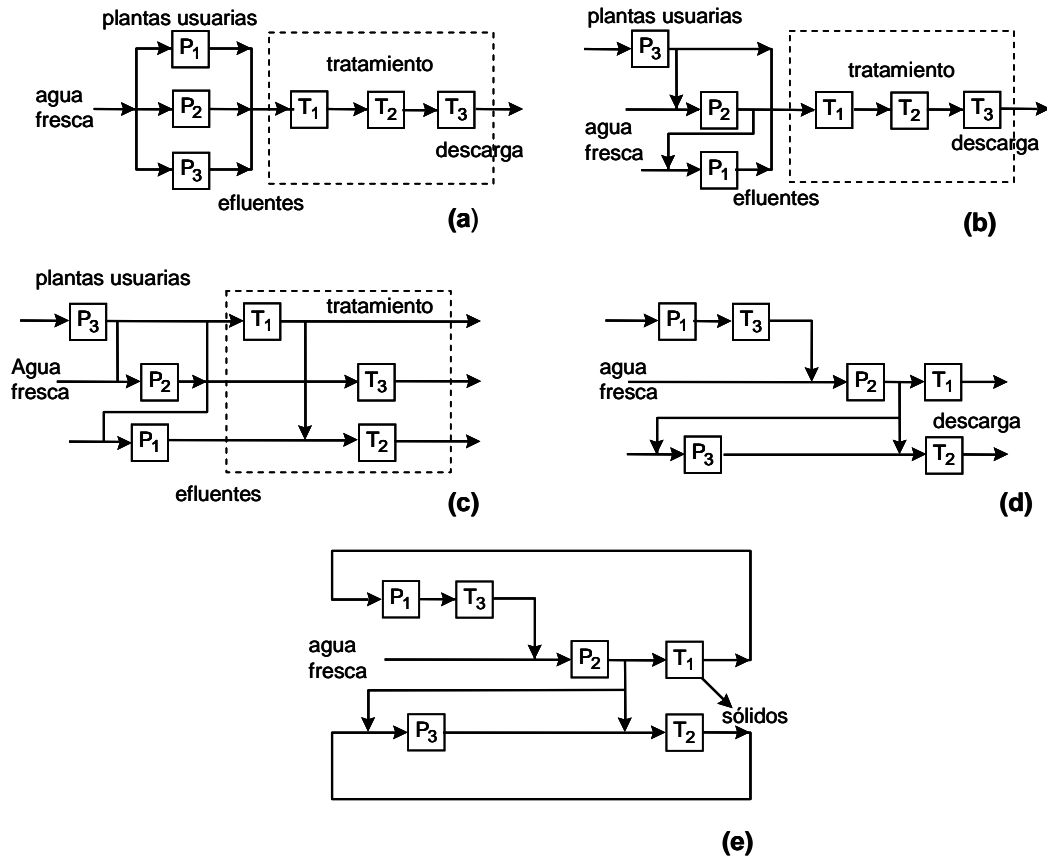


Figura 1.1 Esquemas de planeación de sistemas industriales de agua (Bagajewicz, 2000)

1.2.b Reducción de costos por el concepto de minimización del consumo de agua y generación de efluentes

La iniciativa hacia el progreso de mejores diseños de los procesos industriales, y el mejoramiento de la productividad de las materias primas como un avance para la reducción de costos, figuran entre los elementos esenciales del cambio para la gestión integrada de los recursos hídricos en las industrias. La figura 1.1(b) representa el diseño de sistemas industriales mediante el concepto de reutilización de agua. La escasez en el suministro industrial de agua promueve la investigación de diseños de plantas de proceso mediante el concepto principal de reutilización de aguas residuales. El reuso de agua tiene como

finalidad alimentar una corriente efluente de proceso a otro proceso, que demande menor nivel de calidad de agua sin la presencia de un tratamiento intermedio de efluentes. Este tipo de diseño reduce el flujo volumétrico de agua fresca y de agua tratada (Wang y Smith, 1994a, 1995a, 1995a, 1995b; Dhole et al., 1996; Olesen y Polley, 1996; Doyle y Smith, 1997; Olesen y Polley, 1997; Hallale y Fraser, 1998; Freitas et al., 2000; Sorin, y Bédard, 1999, Castro et al., 1999; Yang et al., 1999; Benko et al., 1999; Yang et al., 2000; Benko et al., 2000; Polley y Polley, 2000; Savelski y Bagajewicz, 2000; Bagajewicz et al., 2000; Bagajewicz, 2000; Dunn et al., 2001a, 2001b; Bagajewicz y Savelski, 2001; Savelski y Bagajewicz, 2001; Feng y Seider, 2001; Zhou et al., 2001; Jödicke et al., 2001; Hallale, 2002; Bagajewicz et al., 2002; Savelski y Bagajewicz, 2003; El-Halwagi et al., 2003; Wang et al., 2003).

1.2.c Reducción de costos por el concepto de tratamiento de efluentes

Las cadenas productivas actuales se han destacado por la generación de desechos que al ser tratados incorporan costos a la manufactura de los productos, en las industrias se tratan como costos necesarios; la legislación actual sanciona la producción de los desechos tóxicos mediante pagos que finalmente no solucionan el problema ambiental ni la degradación de los recursos humanos. El volumen de desperdicios industriales, ha llegado a niveles que su recolección y eliminación constituye uno de los problemas principales a que se enfrentan los municipios, los problemas ambientales por descargas de efluentes contaminados son elementos fundamentales del cambio para el manejo de los recursos en las industrias. La reducción de contaminantes en las industrias se trata de un proceso a largo plazo, que debe basarse en medidas prácticas y graduales. La Figura 1.1(c) representa el diseño de sistemas industriales mediante el concepto de tratamiento de efluentes. El desarrollo sustentable atribuye prioridad a la prevención de la contaminación, porque puede resultar ser más conveniente que la recuperación de aguas contaminadas. Se debe proteger los caudales de agua contra la contaminación a gran escala. La figura 1.1(c) representa la investigación sobre el tratamiento de aguas residuales y se orienta a realizarla de manera preferencial y

localizada, sin la combinación de todas las corrientes efluentes de las plantas generadoras y sólo combinar corrientes efluentes que por similitud de concentración y tipo de contaminantes sea conveniente (Lankford, 1988; McLaughlin et al., 1992; Wang y Smith, 1994b; Kuo y Smith, 1997). El desarrollo sustentable promueve intensificar el tratamiento de las aguas residuales y ponerlo al alcance de los presupuestos de las municipalidades y la industria. La figura 1.1(c) representa el diseño distribuido de tratamiento de efluentes de manera segregada que permiten ahorros, principalmente, al evitar mover grandes volúmenes de aguas residuales.

1.2.d Concepto de minimización del consumo de agua por uso-regeneración descentralizada de efluentes

El desarrollo sustentable, para mejorar los sistemas industriales de agua, promueve la investigación sobre la integración óptima de sistemas de agua. La figura 1.1(d) representa el diseño de un sistema de reuso de agua y tratamiento de efluentes de manera combinada. El volumen de efluentes industriales, disminuye por el concepto de la reutilización de corrientes tratadas en las plantas de proceso (Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Kuo y Smith, 1998a; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001). La integración óptima de sistemas de agua trata sobre el uso total del agua en una planta industrial, considerando cómo asignar la cantidad y la calidad del agua en cada unidad de uso de agua, el consumo de agua fresca del sistema y al mismo tiempo minimizar la generación de efluentes y el tratamiento de efluentes dentro del sitio. En los sistemas simultáneos de síntesis de sistemas de regeneración-reuso de agua, se buscan oportunidades para algunas de las corrientes efluentes sean sometidas a un proceso de tratamiento, la reducción del nivel de concentración de contaminantes permite la reutilización de estas corrientes en otras operaciones de proceso.

1.2.e El concepto de descarga cero en las industrias

La figura 1.1(e) representa la iniciativa de investigación de cero emisiones industriales o descarga cero y tiene el objetivo de lograr que todas las entradas se deben utilizar, bien sea en el producto final o deben ser convertidas en insumos con valor agregado para otras plantas. Este esquema combinado representa un circuito cerrado de diseño de reuso y tratamiento de efluentes combinado. El concepto de la reutilización generalizada de las corrientes efluentes, como medio para optimizar el uso de agua y la eliminación de las corrientes tóxicas al medio ambiente, para generar un circuito cerrado de uso y tratamiento de agua, tiene una implicación importante por la gran dificultad técnica y económica que representa. En el desarrollo de diseños de descarga cero no existen antecedentes de estudios formales y al parecer ni en la práctica, de soluciones de emisiones de descarga cero de procesos. Diepolder (1992) y Goldblatt (1993), discutieron que tan realista es el concepto de cero emisiones industriales, desde un punto de vista práctico. La comunidad de investigación no ha tratado el problema de optimizar la estructura de Figura 1.1(e), la inversión económica presenta un panorama muy poco atractivo para el proyecto de descarga cero, al menos por el momento.

1.3 El problema de síntesis de redes de agua

El desarrollo de procedimientos para el reuso de agua, con la oportunidad potencial de la calidad de agua efluente proveniente de otras plantas de proceso o bien de unidades de tratamiento son parte de las actividades de la síntesis de las redes de agua. La síntesis de redes de agua es una rama de integración de procesos y se refiere al proceso de selección y especificación de una estructura y arreglo de plantas, que pueden ser de proceso y de servicios, especificándose la operación en cada unidad. Entre las principales dificultades que se presentan para la síntesis de redes de agua, están:

- La diversidad que se presenta en las características estructurales y operacionales de los elementos que conforman un sistema a diseñar de agua (ver Figura 1.1).
- La diversidad que se presenta en diseños y costos de tecnologías disponibles para el tratamiento de corrientes efluentes.
- El crecimiento geométrico del número de posibilidades de configuraciones de un sistema.
- La generación de procedimientos sistemáticos y reproducibles para el diseño de redes de agua.
- La naturaleza no convexa de los modelos matemáticos que emergen para el diseño de redes de agua.
- La minimización de la suma de los costos de capital y operacionales del diseño de redes en pugna con la minimización de concentraciones de contaminantes.
- La generación de utilidades en pugna con el desarrollo sustentable con base en el uso eficiente y responsable del medio ambiente y del uso de los recursos naturales, humanos y económicos.

Por las dificultades que se presentan para la síntesis de redes de agua han derivado en estudios e investigaciones con diferentes enfoques, metodologías y diversas herramientas computacionales. El propósito de la síntesis de redes de agua es el desarrollo de herramientas o procedimientos automatizados que permitan lograr diseños óptimos con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el diseño (Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Wang y Smith, 1994 a, b; Kuo y Smith, 1998a; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Galan y Grossmann, 1998, Zamora y Grossmann, 1998, 1999a; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Lee y Grossmann, 2003).

Las dificultades anteriores que se presentan para resolver un modelo como es sugerido en la figura 1.1(d) o 1.1(e), y que no se han podido superar actualmente. Aún más, en la figura 1.1(e) el objetivo es eliminar la descarga de aguas residuales en el diseño de redes de agua, lo que presenta serios problemas prácticos y principalmente de carácter económico para que

se pueda resolver de manera razonable (ver p.ej., Diepolder, 1992; y Goldblatt, 1993). Por lo tanto, en el estado del arte se ha orientado la investigación hacia la división del problema de síntesis de redes de agua en dos subproblemas principalmente:

- Maximizar el reuso del agua y minimizar los volúmenes de efluentes que provienen de las plantas de proceso.
- Aplicar las tecnologías más apropiadas para llevar a cabo la remoción de los contaminantes y definir la estrategia y estructura del tratamiento, con las tecnologías seleccionadas que den un costo mínimo.

Con base en la propuesta de solución que involucra la división del problema de síntesis de redes de agua, en las siguientes secciones se revisarán los avances realizados a la fecha, en cada uno de estos subproblemas por separado.

1.3.1 Reuso de agua y minimización de efluentes

En la literatura se destacan algunas ideas iniciales para la recuperación de agua efluente y su reutilización (Mishra et al., 1975, Brill, 1976; 1979; Pingry, 1979). La oportunidad de ahorro en los costos totales por disminución de efluentes, se incorpora a aquellos logrados por las industrias por conceptos de reducción de materiales, sin considerar cambios en los productos y procesos (Rossiter, 1995). El beneficio económico en los costos de capital y de operación resulta de una óptima integración de las plantas por el reuso de agua en la reducción de volúmenes de efluentes generados y flujos de agua a tratar en las unidades de tratamiento (Lankford, 1988; McLaughlin et al., 1992; Higgings, 1995).

En la integración óptima de sistemas de agua existen esfuerzos particulares dirigidos a la reducción de los costos del consumo de agua fresca por el concepto de reuso de agua con dos posibilidades básicas (Rossiter, 1995; Wang y Smith, 1994a, Kuo y Smith, 1997):

- (a) Reuso de agua, que consiste en utilizar en forma directa agua proveniente de algunas operaciones como alimentación parcial o total a otras operaciones, incluyendo proceso y servicios de acuerdo a la concentración de contaminantes en los efluentes y a los límites permisibles de cada operación. En la Figura 1.2 (Mann y Liu, 1999) se presenta la definición formal del problema de reuso de agua.
- (b) Regeneración-reuso de agua, donde algunas de las corrientes efluentes son sometidas a un proceso de tratamiento con la finalidad de reducir el nivel de concentración de los contaminantes para que se puedan reutilizar, de acuerdo a la tolerancia de otras operaciones. La definición formal del problema de regeneración-reuso de agua se presenta ver la Figura 1.3.

Índices

- j = contaminante
 q o p = operación usuaria de agua
 r = operación de regeneración de agua

Conjuntos

- J = $\{j : j \text{ es un contaminante}\}$
 Q = $\{q : q \text{ es una operación usuaria}\}$
 R = $\{r : r \text{ es una operación de regeneración de agua}\}$

Parámetros

- $Cin_{j,q}^{\max}$ = concentración máxima de contaminante a la entrada de la operación (ppm)
 $Cout_{j,q}^{\max}$ = concentración máxima de contaminante a la salida de la operación (ppm)
 $\Delta m_{j,q}$ = carga másica de contaminante removida por la corriente en una operación (Kg/h)
 $\Delta m_{j,r}$ = carga másica de contaminante removida en el proceso de regeneración (Kg/h)

Variables positivas continuas

- $cin_{j,q}$ = concentración promedio de contaminante a la entrada de la operación (ppm)
 $cout_{j,q}$ = concentración de contaminante en la salida de la operación (ppm)
 $cout_{j,r}$ = concentración de contaminante del proceso de regeneración (ppm)

- f_q = flujo de agua fresca a la operación (t/h)
 $L_{q,p}$ = flujo de efluente a reuso (t/h)
 $L_{q,r}$ = flujo de efluente a regeneración (t/h)
 W_q = flujo de efluente a tratamiento (t/h)

Reuso de agua

El problema de reuso de agua que se describe involucra una operación genérica de proceso q , y es concebida como una operación que emplea agua a la que se descarga un flujo másico continuo de contaminantes $\Delta m_{j,q}$, $j \in J$, $q \in Q$ (Figura 1.2). Dada la naturaleza de la operación de reuso de agua, para garantizar la transferencia de materia, se requiere que el agua que se suministra tenga una concentración de contaminantes por debajo de un valor límite $Cin_{j,q}^{\max}$, $j \in J$, $q \in Q$. De la misma manera, a la salida de la operación la concentración de los contaminantes en el agua no deberá exceder de un valor $Cout_{j,q}^{\max}$, $j \in J$, $q \in Q$. Dos aspectos se desean determinar:

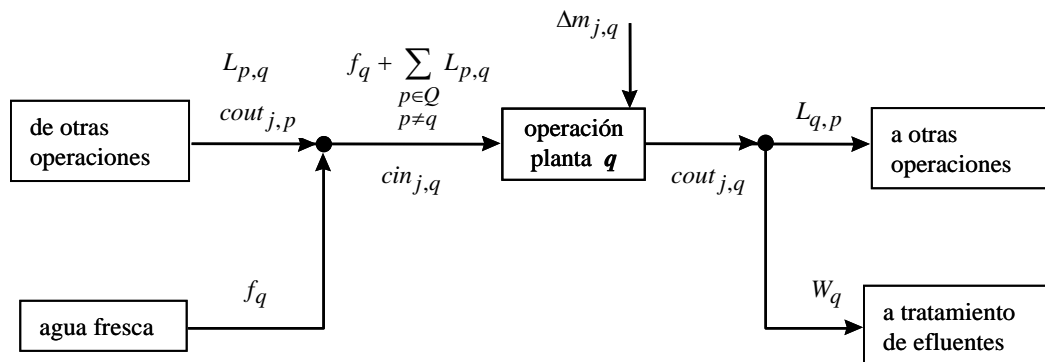


Figura 1.2 Representación del problema de reuso de agua (Mann y Liu, 1999)

- El flujo mínimo de agua fresca que se requiere para satisfacer las necesidades y condiciones de todas las operaciones que demandan agua.
- La configuración y las condiciones de operación de una red de reuso de agua que utilice el flujo mínimo de agua fresca.

Regeneración-reuso de agua

El problema de regeneración-reuso de agua se representa en la Figura 1.3, se plantea una operación genérica de proceso q , $q \in Q$, en donde se involucra una operación que emplea agua a la que se descarga un flujo másico continuo de contaminantes $\Delta m_{j,q}$. Algunas restricciones deben ser incorporadas a la operación para garantizar la transferencia de materia, por ejemplo se requiere que el agua suministrada tenga una concentración de contaminantes por debajo de un valor límite $Cin_{j,q}^{\max}$. A la salida de la operación la restricción en la concentración de los contaminantes no debe exceder de un valor $Cout_{j,q}^{\max}$. Además, en el sistema se busca simultáneamente, las oportunidades para algunas de las corrientes efluentes sean sometidas a un proceso de regeneración r , $r \in R$ en donde se ha de remover un flujo másico continuo de contaminantes $\Delta m_{j,r}$, la reducción del nivel de concentración de contaminantes permite la reutilización de estas corrientes en otras operaciones de proceso q , Figura 1.3. En regeneración-reuso se desea determinar:

- El flujo mínimo de agua fresca que se requiere para satisfacer las necesidades y condiciones de todas las operaciones que demandan agua.

- La configuración y las condiciones de operación de una red de regeneración-uso de agua que utilice el flujo mínimo de agua fresca.

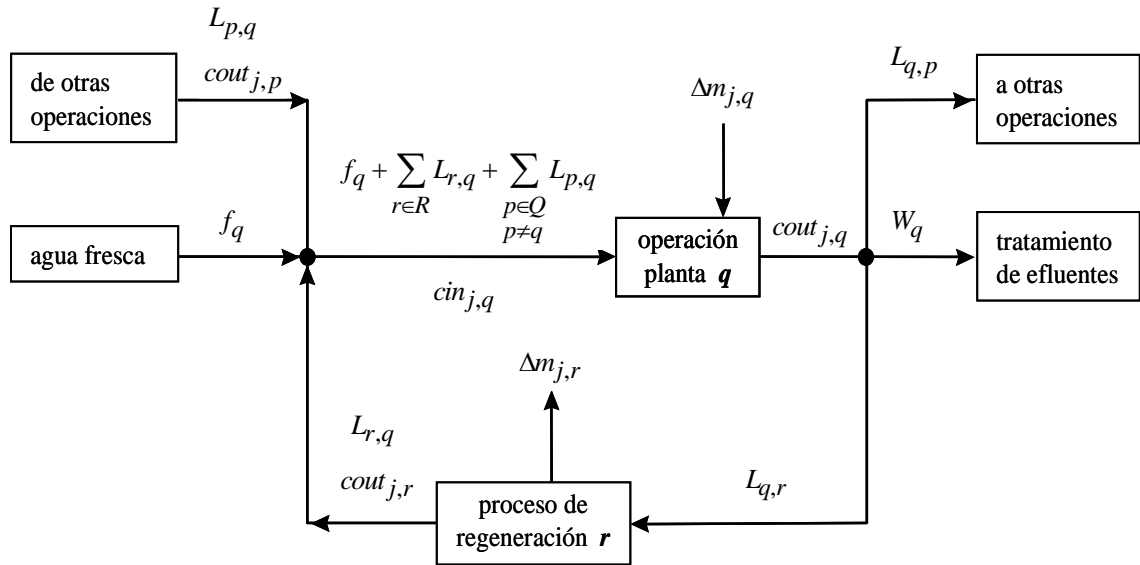


Figura 1.3 Operaciones de regeneración y reuso de agua

1.3.2 Tratamiento de contaminantes

El diseño de los procesos distribuidos de tratamiento de efluentes es una actividad compleja de síntesis de procesos, el diseño de sistemas de tratamiento de efluentes implica la selección de las unidades de tratamiento e interconexiones para satisfacer la calidad de agua requerida en la etapa final del sistema (Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Wang y Smith, 1994b; Kuo y Smith, 1998a; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Galan y Grossmann, 1998, Zamora y Grossmann, 1998, 1999a; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Lee y Grossmann, 2003). El proceso de diseño es complicado debido al gran número de alternativas que se puedan generar y evaluar contra criterios principales tales como costos y

factores ambientales, aunque las restricciones por factores de seguridad, sociales y técnicos actualmente han adquirido importancia por la disponibilidad del estado del arte en la tecnología.

Los sistemas de tratamiento de agua tienen como finalidad reducir la concentración de los contaminantes presentes en las corrientes de efluentes hasta los límites normativos en la descarga final al medio ambiente. Los costos de inversión y operación son elevados en sistemas centralizados por el potencial de contaminación a gran escala y el volumen total de efluente a manejar en los procesos de tratamiento primario, secundario y terciario (Eckenfelder et al., 1985; Lankford, 1988; Eckenfelder, 1999; Higgins, 1989; McLaughlin et al., 1992; Higgins, 1995).

En sistemas distribuidos o separados, el tratamiento de efluentes es más atractivo, debido al tratamiento segregado de corrientes con características similares en procesos comunes. Sin embargo, la elección de la tecnología para la remoción de ciertos contaminantes no es suficiente para garantizar los menores costos del tratamiento de efluentes, se tiene que analizar de manera detallada la forma de combinar las diferentes tecnologías seleccionadas (Eckenfelder *et al.*, 1985; Lankford *et al.*, 1988; Higgins, 1989). La selección e integración de las diferentes plantas de tratamiento de corrientes contaminadas continúa como un campo de investigación para lograr diseños de redes de tratamiento eficientes que puedan satisfacer los estándares ambientales con los menores costos totales. En la Figura 1.4, se presenta la definición formal del problema de tratamiento distribuido de efluentes.

Índices

i	= corriente efluente
j	= contaminante
k or ℓ	= unidad de tratamiento
e	= punto de descarga

Conjuntos

I = { i : i es una corriente efluente }

J = { j : j es un contaminante }

K = { k : k es una unidad de tratamiento }

Parámetros

$C_{i,j}$ = concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)

$c_{j,e}^U$ = concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)

$R_{j,k}$ = relación de remoción de contaminante

S_i = flujo de corriente efluente (t/h)

F_e = flujo total de efluente en el punto de descarga (t/h) $F_e = \sum_{i \in I} S_i$.

Variables positivas continuas

$c_{j,e}$ = concentración de contaminante en el punto de descarga (ppm)

$cin_{j,k}$ = concentración promedio de contaminante a la entrada de la unidad (ppm)

$cout_{j,k}$ = concentración de contaminante a la salida de la unidad (ppm)

$f_{i,e}$ = flujo desviado al punto de descarga (t/h)

$f_{i,k}$ = flujo al mezclador que precede una unidad de tratamiento (t/h)

$t_{\ell,k}$ = flujo de efluente entre unidades de tratamiento (t/h)

$t_{k,e}$ = flujo de la unidad de tratamiento al punto de descarga (t/h)

$\Delta m_{j,k}$ = carga de masa de contaminante removida en la unidad de tratamiento (Kg/h)

El problema de síntesis de redes de tratamiento de agua, se puede describir cómo la caracterización de un conjunto de plantas interconectadas k , $k \in K$, a las que se alimenta un conjunto de corrientes efluentes S_i , $i \in I$. Los contaminantes j , $j \in J$ contenidos en las corrientes efluentes presentes, con concentraciones, $C_{i,j}$, $i \in I, j \in J$, se deben de reducir hasta una concentración de contaminantes a niveles requeridos $c_{j,e}^U$ (Figura 1.4). Las operaciones de tratamiento están caracterizadas por relaciones de remoción correspondientes

a las masas-removidas/masas-alimentadas de contaminantes en las unidades de tratamiento, $R_{j,k}$ $j \in J$ y $k \in K$. En el diseño de tratamiento de efluentes se desea determinar:

- El mínimo de la suma de flujos de agua que deben ingresar a cada unidad de tratamiento para satisfacer las especificaciones, correspondientes a los niveles máximos de concentración de contaminantes permitidos a la descarga.
- La topología del sistema de tratamiento, incluyendo flujos y composiciones de entrada y salida en cada planta, y la conectividad entre unidades.

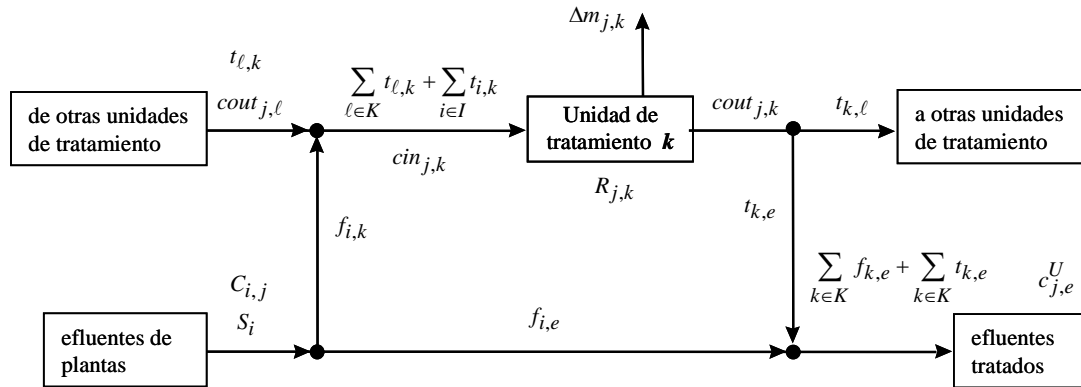


Figura 1.4 Diagrama del problema de tratamiento de efluentes

En las siguientes secciones se hace una revisión del estado del arte con relación a la síntesis de redes de agua en cada uno de estos conceptos anteriores, con énfasis en las estrategias sistemáticas importantes que se han desarrollado para resolver el problema de la síntesis de redes de agua, y en particular en los sistemas de tratamiento distribuidos de efluentes, por ser el objeto de estudio y desarrollo en esta disertación. De los procedimientos sistemáticos

importantes que se han desarrollado para resolver el problema de la síntesis de redes de agua, se pueden mencionar:

- Procedimientos conceptuales para el diseño
- Enfoques de programación matemática para el diseño

1.4 Enfoques para reducir la contaminación de agua en las industrias

1.4.1 Procedimientos conceptuales para el diseño

Los procedimientos conceptuales de diseño se han aplicado a sistemas de reuso de agua (Fig. 1.2), regeneración-reuso de agua (Fig. 1.3) y tratamiento de efluentes (Fig. 1.4), con base en procedimientos gráficos para determinar los objetivos de diseño en la síntesis de redes de agua. Estos procedimientos conceptuales se han explotado con base en el diseño original desarrollado para redes de intercambio de calor, y ha extendido sus aplicaciones a las redes de intercambio de masa (ver p.ej., Linnhoff, 1993; Linnhoff et al., 1978, 1981, 1983, 1994). En la síntesis de redes de intercambio de masa se selecciona un conjunto de agentes de separación para llevar a cabo el intercambio de masa, entre un conjunto de corrientes de proceso ricas y otro conjunto de corrientes pobres en contaminantes. El-Halwagi y Manousiouthakis (1989) proponen definir diferencias de concentraciones mínimas permisibles en una red de intercambio de masa, de manera análoga a la diferencia de temperaturas definida en sistemas de redes de intercambio de calor. El método ha sido aplicado a problemas que implican un solo contaminante. Desde estos primeros desarrollos se han adicionado a la literatura muchas aplicaciones y extensiones al concepto de redes de intercambio de masa (p.ej., El-Halwagi y Manousiouthakis, 1990 a, b y Wilson, 1998). Gupta y Manousiouthakis (1994), extienden el concepto de intercambio de masa a problemas que contienen múltiples contaminantes. Sin embargo, la síntesis de redes de uso de agua no es un caso especial del problema de redes de intercambio de masa. Algunos casos de la presencia de agua en los procesos son los siguientes: (i) El agua permanece como

el único agente de separación de masa en el proceso, por ejemplo, en operaciones de desalado de crudo, en operaciones de agotamiento en plantas de aguas amargas, extracción de productos, absorción de componentes, etc. (ii) El agua puede participar como reactivo o producto en operaciones con reactores en plantas de proceso (iii) El agua no puede ser considerada como agente de intercambio de masa en algunas operaciones, por ejemplo, en torres de enfriamiento, en la generación de vapor, en sistemas contra incendio, en lavado de equipos, etc. (iv) El agua forma parte de la misma alimentación al proceso, por ejemplo el caso del crudo alimentado a las refinerías, el agua tiene que ser separada al inicio de proceso de refinación.

Wang y Smith (1994a) presentaron una metodología conceptual de síntesis de reuso de agua mediante representaciones gráficas y consideraciones de límites físicos que se identifican como puntos de pliegue, resultantes de las curvas compuestas que relacionan las concentraciones de los contaminantes con la masa removida. El método es aplicado a problemas que contienen un solo contaminante.

Desde estos primeros desarrollos por Wang y Smith (1994a), se han adicionado otras aplicaciones y extensiones al concepto de redes de reuso de agua, para el diseño de redes que manejan uno o varios contaminantes (Wang y Smith, 1994a, 1995a, 1995b; Dhole et al., 1996; Olesen y Polley, 1996; Doyle y Smith, 1997; Olesen y Polley, 1997; 1998; Hallale y Fraser, 1998; Sorin, y Bédard, 1999, Castro et al., 1999; Polley y Polley, 2000; Feng y Seider, 2001).

Wang y Smith (1994b) proponen también una metodología conceptual de síntesis de tratamiento distribuido de efluentes, por un procedimiento gráfico similar al presentado para el problema de reuso de corrientes efluentes. La elaboración de curvas compuestas en diagramas de concentración y carga másica removida de contaminantes, constituye la base del método de diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. Una curva compuesta representa la participación de todas las corrientes de aguas residuales de

proceso. Las concentraciones de la corriente entrada y salida del tratamiento generan una línea de operación, y cuando la línea de operación toca la curva compuesta se ha definido un punto de pliegue y el flujo mínimo a tratamiento de efluente ha sido determinado.

La construcción de la red de tratamiento se realiza con base en el desarrollo de reglas heurísticas de diseño con referencia al punto de pliegue, las corrientes instaladas por arriba del punto de pliegue de la curva compuesta deben ser totalmente tratadas, las corrientes que tocan el punto de pliegue deben ser tratadas parcialmente hasta completar el flujo mínimo predeterminado y las corrientes localizadas por debajo del punto de pliegue no deben ser tratadas. Wang y Smith (1994a) también proponen identificar las oportunidades de la regeneración-reuso para diseño de sistemas de agua mediante un procedimiento de diseño conceptual gráfico. Sin embargo, existen algunos problemas en los procedimientos conceptuales de diseño: (1) aunque el requerimiento de flujo mínimo de agua de reuso o tratamiento se puede calcular con el análisis del enfoque conceptual de punto de pliegue para sistemas idealizados simples, es difícil identificar el flujo mínimo para sistemas con varias operaciones y contaminantes (2) típicamente la curva compuesta y la estructura de red se deben construir manualmente, lo cual es absolutamente tedioso para sistemas multi-contaminante (3) La calidad del diseño final depende en gran parte de la experiencia de diseñador y puede no ser reproducible (4) aunque las interacciones entre uso de agua, regeneración, y redes efluentes del tratamiento se pueden manejar con un procedimiento iterativo, estos subsistemas han de construirse de manera individual por contaminante. Consecuentemente, las oportunidades de integrar diversos tipos de unidades usuarias de agua y/o de tratamiento de efluentes, pueden resultar ser tareas complicadas.

Kuo y Smith (1997, 1998b) implementaron mediante el concepto de degradación de corrientes, el procedimiento gráfico de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes desarrollado por Wang y Smith (1994a, 1994b, 1995a, 1995b). Las pérdidas de exergía es un concepto para cuantificar la degradación de las corrientes efluentes debido al mezclado de corrientes de diferente calidad. La red seleccionada exhibe las menores pérdidas de exergía. Sin embargo, este procedimiento presenta los mismos problemas

anotados anteriormente, cuando el sistema está formado por varios contaminantes y corrientes efluentes. No obstante, estos procedimientos han mostrado ayuda en formulaciones matemáticas para encontrar puntos de arranque para la solución del problema. Posteriormente, Kuo y Smith (1998a) presentan una representación gráfica para el diseño combinado de reuso de agua y tratamiento de efluentes, aunque no se logra optimalidad por este procedimiento.

Recientemente, Freitas et al. (1999) presentaron un enfoque de diseño jerárquico para este tipo de sistemas (Douglas, 1988). Freitas et al. (1999) construyeron una base de datos relacional y un sistema experto para determinar la mejor secuencia de los procesos del tratamiento. Sin embargo, este tipo de metodologías han mostrado limitaciones para tratar la complejidad del problema cuando se dispone de varias unidades de tratamiento para remover un subconjunto de contaminantes, y el método no puede garantizar ningún tipo de solución óptima.

1.4.2 Enfoques de programación matemática para el diseño

Takama et al. (1980a, 1980b, 1981) proponen un procedimiento para minimizar el uso de agua fresca y generación de contaminantes. Takama et al. (1980a) proponen un modelo de programación matemática para la síntesis de redes de agua, mediante una representación de superestructura con la idea de reutilización generalizada de corrientes. Esta propuesta ha constituido uno de los primeros intentos para lograr un diseño óptimo en el reuso de agua. En la propuesta de síntesis de redes de agua por Takama et al., se considera una superestructura compleja incluyendo simultáneamente las operaciones de reuso y tratamiento de agua, con aplicación a una refinería. La técnica desarrollada por estos autores se basa en la descomposición del problema en una serie de subproblemas, el modelo no presenta restricciones de desigualdad y utiliza funciones de penalización; el método complejo se utiliza para la optimización de la superestructura, y se eliminan aspectos irrelevantes o redundantes durante el diseño. La solución óptima del problema no es garantizada. Sin

embargo, por las limitaciones computacionales del método utilizado y dificultades de tipo combinatorio en la propuesta, los esfuerzos por resolver el problema de diseño de redes de reuso y tratamiento de agua de manera simultánea, derivaron la división en el estudio de procedimientos sistemáticos para reuso de agua y sistemas de tratamiento de efluentes de manera separada.

El diseño de redes de agua es un problema de optimización no lineal con restricciones diferentes de naturaleza física en los balances de masa. Mediante el desarrollo de modelos de tipo computacional y matemático, se representan las redes como un conjunto de variables y las interrelaciones entre estas variables. El uso de estos modelos representa el mecanismo formal para la toma de decisiones, durante la etapa de síntesis y el diseño. La síntesis de redes busca un número discreto de alternativas para la selección de la mejor estructura de red (Bagajewicz, 2000).

Dentro de las metodologías sistemáticas para la síntesis y optimización de redes distribución y reuso de agua, el enfoque de programación matemática involucra la formulación de un modelo que establece la relación entre las variables de decisión y una función objetivo, que busca minimizar el flujo total de agua en las operaciones usuarias o el menor costo de tratamiento.

De las primeras propuestas de síntesis de redes de agua mediante la programación matemática está el trabajo presentado por Takama et al (1980a). La tendencia ha sido simplificar los modelos matemáticos no convexos que emergen en las diferentes propuestas. El diseño de redes de reuso de agua para un sólo contaminante ha sido revisado en los últimos años. La masa de contaminante es removida por la corriente disponible de agua de las operaciones o corrientes ricas de proceso y está definida por el flujo de agua y las concentraciones de la corriente de entrada y salida de agua en la operación de proceso. La restricción de concentración máxima de entrada y de salida de contaminantes en la

operación de transferencia de masa constituye la clave principal para reducir los modelos matemáticos de tipo no convexos a modelos lineales.

La imposición de las restricciones de concentraciones máximas en la salida de las unidades usuarias de agua han sido referidas en las condiciones de optimalidad por Bagajewicz et al. (2000). La condición de optimalidad sobre la concentración máxima de salida se refiere a que todas las corrientes de agua fresca alcanzan su concentración de salida máxima, y cualquier otra solución con una concentración menor a la referida se considera una solución degenerada. Esta condición de concentración máxima en la salida de las unidades usuarias ha constituido la base del diseño de redes de reuso de agua y ha sido utilizada con anterioridad como restricción o condición de diseño en diferentes propuestas por otros autores (p.ej., Takama et al., 1980a; Wang et al., 1994a; Kuo et al., 1997; Doyle et al., 1997).

Una solución al problema multi contaminante para redes de distribución y reuso de agua fue propuesta por Doyle y Smith (1997). El procedimiento iterativo primero considera construir un problema lineal suponiendo a todos los contaminantes en su concentración máxima de salida, la solución del problema lineal la utilizan como ayuda al modelo de programación no lineal para resolver el problema de varios contaminantes. Se han adicionado a la literatura otras aplicaciones y extensiones para el diseño de redes de reuso de agua (p.ej., Freitas et al., 2000; Sorin y Bédard, 1999, Castro et al., 1999; Yang et al., 1999; Benko et al., 1999; Yang et al., 2000; Benko et al., 2000; Polley y Polley, 2000; Savelski y Bagajewicz, 2000; Bagajewicz et al., 2000; Bagajewicz, 2000; Dunn et al., 2001a, 2001b; Bagajewicz y Savelski, 2001; Savelski y Bagajewicz, 2001; Jödicke et al., 2001; Hallale, 2002; Bagajewicz et al., 2002; Savelski y Bagajewicz, 2003; El-Halwagi et al., 2003; Wang et al., 2003).

Alva-Argáez et al. (1998) presentan un enfoque de solución para reuso de agua de sistemas multi-contaminante en conjunto con el tratamiento de efluentes e incluyendo costos. El modelo se puede utilizar para resolver el problema de reuso de agua. El método propuesto

utiliza la misma relajación propuesta por Doyle (1997), y adicionan al problema una función de penalización, que consiste en la sumatoria de todas holguras de las variables en las ecuaciones de balances de masa por contaminante. El problema lineal se utiliza como ayuda para determinar los flujos de agua de la red, y para obtener un nuevo sistema de concentraciones. Estas concentraciones se sustituyen en las ecuaciones de balances de masa por contaminante, de manera repetida hasta alcanzar la convergencia de manera similar al procedimiento utilizado por Takama et al (1980a). La secuencia obtenida de problemas no factibles de programación no lineal entera-mixta (PNLEM), no se garantiza la optimalidad global en la solución del problema.

Alva-Argáez, et al. (1999) presentan un modelo de trasbordo para reuso de agua, con estructura similar al presentado para redes de intercambio de calor por Papoulias y Grossmann (1983), y al presentado por El-Halwagi y Manousiouthakis (1990ab) para redes de intercambio de masa. El procedimiento de programación lineal entera-mixta se utiliza para determinar el objetivo de flujo mínimo de agua fresca, aunque en el trabajo presentado por estos autores no se muestra como se realiza el diseño de la red de reuso de agua y no es garantizada la optimalidad del modelo hacia la parte final del desarrollo.

Benko et al. (1999) modelaron el problema del ejemplo propuesto por Takama et al. (1980a) como problema no convexo de PNLEM. Los autores actualizaron los datos de los límites de concentración en un desalador para hacer el problema más realista. Este enfoque no puede garantizar optimalidad y las limitaciones numéricas pueden limitar su uso a problemas en reducida escala.

Benko et al. (2000) propusieron un enfoque de programación no lineal (PNL), de cubrir-y-eliminar, para la síntesis de redes integradas de manejo de agua. En su enfoque, Benko et al. (2000) cubren todos los sistemas candidatos alternativos incluyéndolos en una superestructura de red. Los diseños de red inferiores son entonces eliminados de consideración de una manera recurrente, interpretando los resultados de cero o cercanos de

cero de la solución óptima del programa de PNL, y removiendo las unidades o corrientes correspondientes de la superestructura antes de que se realice la solución de un nuevo problema de PNL. El proceso de optimización de la superestructura se para cuando no existen más características estructurales a ser eliminadas.

Los sistemas de tratamiento de efluentes incluyen cualquier número de corrientes que contiene contaminantes que deben ser procesados por las unidades de procesamiento disponibles, para reducir la concentración de varios contaminantes (ver Fig.1.4). Algunas ideas iniciales para la síntesis de redes de tratamiento de efluentes son por ejemplo (Mishra et al., 1975, Brill, 1976; Rossmann, 1979; Pingry, 1979). La naturaleza no convexa de los modelos matemáticos que describen este tipo de problemas, la capacidad de manejar diferentes contaminantes en el sistema y el número de unidades de operación de tratamiento que introduce un crecimiento geométrico del número de posibilidades de configuraciones topológicas del sistema son algunas de las dificultades que se pueden presentar para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes.

Estas dificultades asociadas con el diseño sistemático de redes de tratamiento de agua han derivado en estudios e investigaciones con diferentes enfoques, metodologías y diversas herramientas computacionales. El propósito de la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes está orientado al desarrollo de herramientas o procedimientos automatizados que permitan lograr diseños óptimos con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el diseño (Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Wang y Smith, 1994 a, b; Kuo y Smith, 1998a; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Galan y Grossmann, 1998, 1999; Zamora y Grossmann, 1998, 1999a; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Lee y Grossmann, 2003).

En 1998, Galan y Grossmann desarrollaron modelos no convexos de PNL y PNLEM para el diseño de plantas de tratamiento distribuido de efluentes, utilizando la superestructura de red presentada por Wang y Smith (1994b), con base en la solución de un conjunto de problemas

relajados de PL, que proporcionan puntos de inicialización para la solución del problema original de PNL. Estos autores propusieron un procedimiento heurístico multi-arranque para la optimización global del modelo no convexo desarrollado.

Huang et al. (1999) proponen un enfoque de programación no lineal similar al presentado por Galan y Grossmann (1988) para el diseño de redes del tratamiento distribuido de efluentes. El procedimiento presentado por estos autores se resuelve a partir de puntos factibles iniciales, generados con la solución del problema con la metodología de punto de pliegue, o resolviendo un sistema no lineal de ecuaciones que resultan de fijar en el modelo desarrollado de programación no lineal varias variables de diseño en niveles “razonables”. El procedimiento incluye la posibilidad de fuentes y sumideros múltiples de agua, similar al procedimiento de redes de intercambio de masa (El-Halwagi et al., 1996), pérdidas de agua y unidades repetidas de tratamiento de agua.

Tsai y Chang (2001) tomaron como base al enfoque presentado por Huang et al. (1999), y presentan una estrategia evolutiva estocástica para la síntesis de redes simultáneas de reuso-regeneración mediante el uso de un algoritmo genético. Las técnicas evolutivas imitan el comportamiento de la naturaleza y son de gran estima. Sin embargo, debido a la complejidad en problemas de programación no lineal, la solución óptima global mediante esta técnica de evolución de especies, no es garantizada.

Las técnicas de optimización global determinista aplicadas a esta clase de problemas incluyen un algoritmo de ramificación y contracción de Zamora y Grossmann (1998, 1999a), y un algoritmo de optimización global desarrollado recientemente para la solución de problemas de programación disyuntiva generalizado no convexo por Lee y Grossmann (2003). El uso de técnicas de optimización global rigurosas para la determinación de las mejores características estructurales y operacionales de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes o de redes del agua se han limitado a la solución de problemas de diseño pequeños que implican pocas corrientes y pocos contaminantes.

En esta tesis se estudia y desarrolla procedimientos sistemáticos para la optimización y síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, para las industrias de proceso. El propósito es lograr diseños óptimos de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el diseño. De esta manera, la idea es ayudar a la preservación del medio ambiente, y contribuir a los esfuerzos de alcanzar un estado del desarrollo sustentable, en materia de sistemas de tratamiento de efluentes en las industrias.

1.5 Alcance de la investigación

1.5.1 Síntesis óptima de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

El objetivo de esta tesis es estudiar el problema de optimización y síntesis de redes de agua asociadas a plantas de proceso, con aplicación en el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. En esta tesis se presenta el desarrollo de procedimientos sistemáticos de tales sistemas, que implican el diseño de la estructura y el cálculo de sus propiedades y se investiga sobre la robustez del diseño, para:

- Tratar con la naturaleza no convexa que introducen los términos bilineales presentes en las ecuaciones de balances de masa de contaminantes, en los modelos matemáticos implicados.
- Tratar con la implementación de modelos que permita la optimización global de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, con base en un enfoque heurístico-paramétrico.
- Tratar con la capacidad de manejar diferentes contaminantes y número de unidades de tratamiento que introduce un crecimiento geométrico del número de posibilidades de configuraciones del sistema.

- Tratar con diseños óptimos de alternativas para la toma de decisiones, que determina la selección y especificación del mejor sistema de tratamiento de agua, con una estructura y arreglo de plantas, especificándose la operación del sistema.

El método propuesto se deberá conceptuar como apoyo de decisión para la selección de alternativas, que pueden ser dirigidas y evaluadas para producir un diseño eficiente y robusto de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, que genere los mínimos efluentes y propicio para la reutilización de corrientes tratadas en otros procesos.

1.5.2 Diseños robustos de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

En esta tesis se presentan procedimientos de diseño que resuelven la optimización de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. El segundo alcance de esta disertación es desarrollar y presentar el proceso de diseño mediante conceptos de análisis paramétricos detallados sobre la robustez y mejora del diseño, para sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, para:

- Explorar la posibilidad de mejorar su construcción y funcionamiento por conceptos de análisis de sensibilidad en las variables de diseño.
- Lograr diseños óptimos de redes distribuidas de tratamiento de efluentes con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el diseño.

1.5.3 Marco de referencia de la investigación sobre síntesis de sistemas de tratamiento de efluentes

El desarrollo de los procedimientos que se describen en los capítulos siguientes, se realizan bajo las siguientes consideraciones:

1. La representación de alternativas de estructuras de tratamiento de efluentes de interés, candidatas a diseños factibles u óptimos, se desarrollan mediante conceptos de superestructura. La presencia de un número de diferentes unidades de tratamiento y sus interconexiones son las principales características de una superestructura. La representación del problema se realiza sobre la base de determinar una superestructura que por un lado sea lo suficientemente rica para permitir que todas las alternativas puedan ser incluidas y por otro lado que se puedan eliminar las características no deseables.
2. El desarrollo de procedimientos sistemáticos para generar la mejor estructura y cálculo de sus propiedades de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, en estado estacionario de problemas multi-contaminante, se realiza mediante la formulación de modelos matemáticos del proceso de tratamiento y resueltos al aplicar herramientas y algoritmos matemáticos necesarios para predecir su comportamiento, en problemas lineales y no lineales, utilizando para ello el lenguaje de diseño y modelado denominado GAMS (General Algebraic Modeling System) y algunos de los optimizadores o revolvedores disponibles para su solución (p. ej. DICOPT, MINOS5, OSL).
3. Para identificar el mejor diseño de una red de tratamiento, se utiliza un criterio de tipo económico lineal para medir el funcionamiento del sistema, con base en la optimización del flujo total de efluente a tratar a través del sistema o el costo total del sistema, esto cuando existe información disponible suficiente de costos de capital y de operación de unidades de tratamiento (Takama, 1980, 1981; Wang y Smith, 1994, 1995; Kuo y Smith, Galan y Grossmann, 1998, 1999; Zamora y Grossmann, 1998, 1999; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001).

1.6 Contenido de esta disertación

1.6.1 Modelo de programación lineal para asistir en el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes

En el Capítulo 2, se presenta un modelo de programación lineal (PL) que permite resolver de manera simultánea la determinación de flujo mínimo a tratar, y el diseño de subredes de tratamiento de efluentes, en el contexto de los conceptos y metodología secuencial de punto de pliegue, propuesta por Wang y Smith (1994b) y Kuo y Smith (1997). En este Capítulo se ha planteado (1) explotar las características del modelo de programación lineal, que se desarrolla con base en una superestructura de subred que involucra una unidad operacional de tratamiento y no incluye reciclo de corrientes, y (2) en el modelo se puedan añadir diversas restricciones de manera sencilla, a diferencia de las complejidades que se pueden presentar en el caso de metodologías gráficas de punto de pliegue. El modelo de programación lineal se utilizará para el desarrollo de redes bajo diferentes escenarios de concentración ambiental límite de contaminantes, que permita identificar regiones de diseño. El uso del modelo de programación propuesto se ilustra con la solución de dos ejemplos de diseños de redes.

1.6.2 Enfoque de descomposición de superestructura y optimización paramétrica para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

En el Capítulo 3, se presenta una metodología para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, con base en un enfoque de programación matemática y la optimización de un conjunto de problemas de superestructuras básicas de red, que resultan de la descomposición de superestructuras típicas de redes complejas. Los propósitos son (1) conducir una exploración sistemática de la región de diseño que permita determinar diseños óptimos globales de sistemas de tratamiento de efluentes, el procedimiento implicará el

control de la complejidad del modelo resultante por la presencia de no convexidades, debidas a los términos bilineales que aparecen en las ecuaciones de los balances de masa para los contaminantes, (2) dentro del procedimiento de solución al problema de síntesis de redes se diseña un enfoque heurístico-paramétrico de optimización, y (3) explotar el enfoque paramétrico de optimización para explorar la posibilidad de mejorar la construcción y funcionamiento de un sistema de tratamiento de efluentes, por conceptos de análisis de sensibilidad en las variables de diseño. Mediante el análisis de sensibilidad de las variables de diseño, se realiza el estudio por ejemplo, de variaciones en los coeficientes de costos de capital y operación en un sistema de agua y el impacto en el costo total de diseño de redes de tratamiento de efluentes. El procedimiento sistemático que se desarrolla se aplica a varios problemas ilustrativos, hasta para siete corrientes efluentes, cinco contaminantes y tres unidades de tratamiento.

1.6.3 Modelo matemático alternativo para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

En el Capítulo 4, se presenta un modelado alternativo para la formulación del problema de diseño, buscando que sea un problema de programación lineal; se intenta una metodología de optimización conceptualmente más sencilla y directa, que permitan realizar la tarea de síntesis para encontrar el mejor diseño de red. En el Capítulo 4, han sido planteados los siguientes objetivos (1) explotar el concepto de partición del espacio de búsqueda de diseño y descomposición de superestructura presentado en el Capítulo 3, (2) presentar la propuesta de un modelo matemático de optimización alternativo que explota la estructura bilineal que se presenta en las redes de tratamiento distribuido, donde los flujos de contaminantes se exhiben de manera explícita, dentro del procedimiento de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes propuesto, y (3) presentar una estrategia heurística de solución para problemas que involucran una cantidad mayor de unidades de tratamiento, y plantear diseños de redes de tratamiento de agua de mayor complejidad. El procedimiento es aplicado

a dos Casos de Estudio para problemas de diseño, en donde se incluyen cinco unidades de tratamiento en la solución del modelo alternativo de programación matemática.

1.6.4 Conclusiones

En el Capítulo 5, Se presentan los resultados y las contribuciones principales de esta disertación, se dan algunas conclusiones, y se muestran unas recomendaciones para el trabajo futuro

CAPÍTULO 2

MODELO DE PROGRAMACIÓN LINEAL PARA ASISTIR EN EL DISEÑO DE SISTEMAS DISTRIBUIDOS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES

2.1 Introducción

El diseño de un sistema industrial de tratamiento de agua se presenta como una respuesta de proteger al medio ambiente, procurando impedir expulsiones no reguladas de corrientes tóxicas de proceso. Contar con un sistema centralizado de tratamiento de efluentes es una práctica común en los complejos industriales. Las corrientes de efluentes de proceso, servicios auxiliares, purgas, drenajes, etc., se combinan normalmente en un colector común, este tratamiento centralizado y de uso corriente genera un costo total alto debido a la composición resultante en la corriente efluente a tratar, ocasionada por aquellos contaminantes que por su naturaleza específica (no degradables o tóxicos) producen una contaminación a escala al ser combinados. Los costos de inversión son elevados por el número requerido de unidades de tratamiento de efluentes, y los costos de operación que se incrementan por el manejo de volúmenes altos de agua a través de los procesos de tratamiento.

En un sistema distribuido de tratamiento o descentralizado, las corrientes contaminadas de composición diferente podrían requerir de tecnologías de tratamiento diferentes. Las corrientes contaminadas son tratadas de manera separada y de forma más selectiva, por lo

que se logran reducir los flujos de agua y por ende los costos del sistema de tratamiento (Eckenfelder et al., 1985; Lankford et al., 1988; Higgins, 1989). Además, las industrias tienen que seleccionar entre tecnologías de tratamiento de efluentes, cada vez más complejas y costosas, debido a que las instancias reguladoras del medio ambiente exigen límites de concentración de contaminantes cada vez más estrictos en las descargas hacia el medio ambiente.

Sin embargo, una selección apropiada de la tecnología más recomendable para la remoción de contaminantes, no es suficiente para garantizar menores costos en el diseño del sistema de tratamiento de agua. Por lo tanto, es preciso revisar de manera detallada en que forma se deberán asociar y secuenciar las diferentes tecnologías seleccionadas, con el objetivo de lograr los menores costos totales en la remoción de masa de contaminantes de las corrientes efluentes que provienen de las diferentes plantas de proceso. Las complejidades que se presentan durante el diseño son bien conocidas y han motivado el estudio y desarrollo de técnicas sistemáticas que permitan la síntesis óptima de tales sistemas.

Uno de los procedimientos disponibles para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, se basa en una extensión de los conceptos y metodología de la tecnología de punto de pliegue (Wang y Smith 1994b; Kuo y Smith, 1997), la cual fue inicialmente desarrollada como una técnica para el diseño para redes de intercambio de calor (ver p.ej., Linnhoff et al., 1993). Esta tecnología permite generar diseños de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes en varias etapas desarrolladas de una manera secuencial.

En cada etapa de diseño se adiciona al diseño global de la red, una subred que incluye una unidad de tratamiento diferente. De esta manera se van reduciendo los niveles de concentración de los contaminantes involucrados hasta llevarlos a todos por debajo de su respectiva concentración límite ambiental. Cada etapa de diseño requiere la determinación de metas para el flujo mínimo de agua que debe ser tratada en cada unidad de tratamiento que aún no ha sido incorporada al diseño global, y el diseño de una subred asociada con

cada una de dichas unidades de tratamiento. Ambas tareas, en la etapa de diseño se efectúan de una manera gráfica y secuencial en dos pasos diferentes de la metodología. La selección de una subred, y la consecuente remoción selectiva de al menos uno de los contaminantes en una etapa de diseño se realiza con criterios, por ejemplo, de precondicionamiento de efluentes en algunas plantas y arreglos característicos de operaciones de tratamiento (Wang y Smith 1994b), o por la precedencia de subredes de tratamiento que determinan las menores pérdidas de exergía debidas al mezclado de corrientes (Kuo y Smith, 1997).

El paso de determinación de la meta, t^* , de flujo mínimo de efluentes a tratar en una unidad de tratamiento disponible, marca el inicio de una etapa de diseño de subred. El flujo S_i de las corrientes efluentes, donde i especifica la corriente efluente, así como las concentraciones $C_{i,j}$ de contaminante, donde j denota a un contaminante con un límite ambiental $c_{j,e}^U$, determinan la carga másica mínima de contaminante, Δm_j , que deberá ser removida por la unidad de tratamiento en consideración.

La carga másica de contaminante que deberá ser removida de cada una de las corrientes efluentes, se acumula de acuerdo con los intervalos de concentración, definidos por el límite ambiental y las concentraciones de contaminante en las corrientes efluentes a la llegada de la subred, tal como se ilustra en la Figura 2.1. La curva compuesta resultante relaciona de esta manera las concentraciones límite ambiental y de entrada en las corrientes efluentes, con la carga másica acumulada de contaminante Δm_j que deberá ser removida por la subred de tratamiento.

La remoción de contaminantes en la planta de tratamiento se representa a través de una línea de operación cuya pendiente determina el flujo de efluente t^* que debe ser tratado, para bajar la concentración de mezcla del contaminante en las corrientes efluentes hasta el valor de su límite ambiental. Los puntos de inicio y terminación de la línea de operación,

corresponden a las concentraciones de entrada cin_j y de salida $cout_j$ de la corriente efluente de la unidad de tratamiento. La masa de contaminante removida por la unidad de tratamiento, como función de las concentraciones de entrada y salida de contaminante y el flujo de la corriente a tratar, es igual a la carga másica determinada de la curva compuesta para el contaminante j .

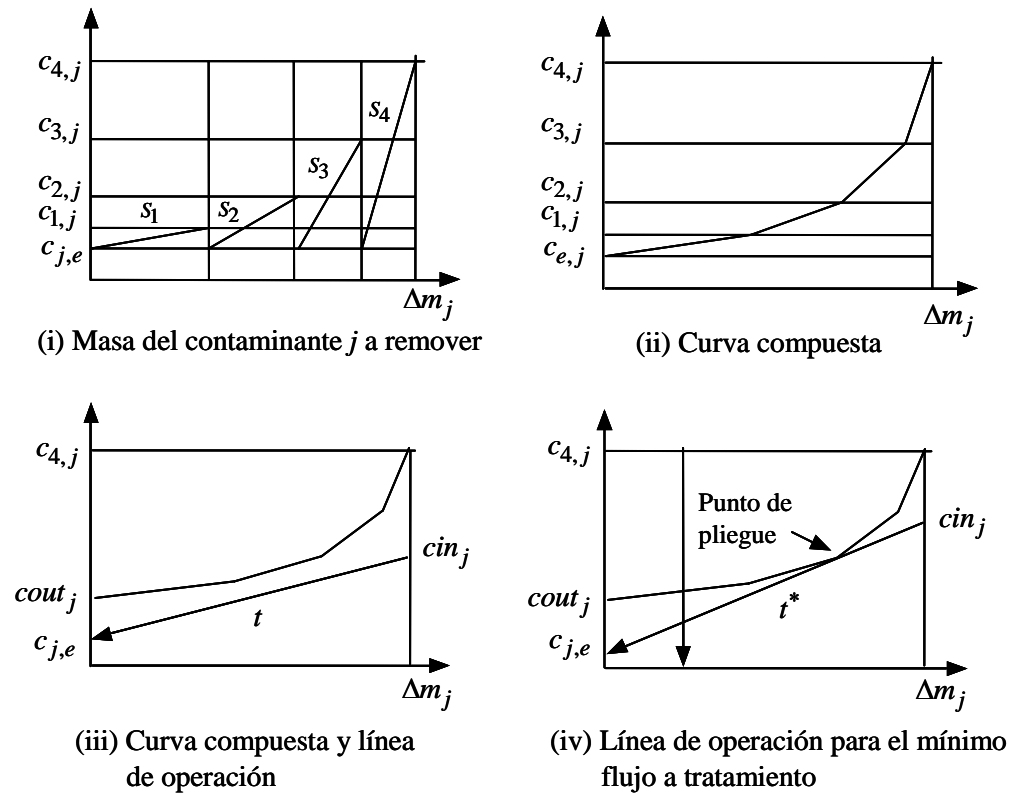


Figura 2.1 Determinación del flujo mínimo de efluente por la metodología de punto de pliegue

El punto de contacto de la línea de operación y la curva compuesta determina el flujo mínimo de efluente que debe ser tratado, o la máxima pendiente de la línea de operación delimitada por la curva compuesta, lo que se ha denominado un punto de pliegue en el

diseño de una subred de tratamiento de efluentes. La capacidad constante de remoción R_j de la unidad de tratamiento fija la relación de las concentraciones de entrada y de salida de la corriente tratada. Lo anterior representa también el mínimo costo, cuando existe proporcionalidad del costo con el flujo de efluente a tratar.

Con el auxilio de las curvas compuestas, las corrientes efluentes se clasifican de acuerdo con los niveles de concentración de los contaminantes que se desean remover en la etapa: El primer grupo lo constituyen aquellas corrientes cuya concentración inicial es mayor que la concentración en el punto de pliegue, el segundo grupo lo forman aquellas corrientes cuya concentración inicial es igual a la concentración en el punto de pliegue, y finalmente el tercer grupo está formado por aquellas corrientes cuya concentración inicial se encuentra por debajo de la concentración del punto de pliegue. También, durante este paso se aplican varias reglas de diseño para producir subredes de tratamiento independientes para la remoción de cada uno de los contaminantes presentes en las corrientes de agua efluente.

Las reglas de diseño derivadas por Wang y Smith (1994b) indican que, para cumplir con la concentración ambiental límite de un contaminante en la descarga de una subred de tratamiento, las corrientes del primer grupo deben ser totalmente tratadas, las del segundo grupo deben ser tratadas parcialmente hasta completar el flujo mínimo predeterminado y las del tercer grupo no deben ser tratadas. La aplicación de estas reglas de diseño al ejemplo ilustrativo que se incluye en la Figura 2.1 da por resultado el diseño de subred que se presenta en la Figura 2.2.

En una etapa de diseño se realizan los gráficos que sean necesarios para llevar a cabo los pasos de determinación del objetivo de flujo mínimo de efluente y de diseño de subred de tratamiento, en función del número de contaminantes presentes en las corrientes efluentes y de la cantidad de unidades de tratamiento disponibles para reducir la concentración de los contaminantes. El objetivo en una etapa de diseño es finalmente seleccionar una subred de tratamiento, que permita remover con un costo mínimo, la carga másica necesaria para

llevar la concentración inicial de al menos uno de los contaminantes involucrados hasta su límite ambiental.

En la siguiente etapa de diseño se repite el mismo proceso con los contaminantes y unidades de tratamiento remanentes, y así sucesivamente hasta que en la salida de la última etapa, la concentración de mezcla de todos los contaminantes cae por debajo de sus respectivas concentraciones límite. La selección de una subred de tratamiento de efluentes en una etapa de diseño se puede lograr, por ejemplo, mediante la propuesta del cálculo de pérdidas de exergía debido al mezclado de corrientes (Kuo y Smith, 1997). Las pérdidas de exergía debidas al mezclado de corrientes se pueden interpretar como una pérdida de potencial en un sistema debido al mezclado de corrientes. Las pérdidas de exergía debidas al mezclado de corrientes para soluciones ideales se pueden expresar como:

$$\Delta Ex = \Delta H - RT_0 \sum_{j \in J} n_j \ln \frac{1}{X_j} \quad (2.1)$$

donde,

ΔH = calor de mezclado de corrientes.

n_j = flujo molar (kmol/h).

X_j = fracción molar para cada componente.

Las corrientes de agua efluente son generalmente soluciones diluidas y se puede suponer que son ideales. Por lo tanto, ΔH puede ser omitida en (2.1),

$$\Delta Ex = -RT_0 \sum_{j \in J} n_j \ln \frac{1}{X_j} \quad (2.2)$$

La expresión en (2.2) puede escribirse en términos de los flujos máscicos y pesos moleculares de los contaminantes de la siguiente manera,

$$\Delta Ex = -RT_0 \sum_{j \in J} \left[\left(\frac{m_j}{M_j} \right) \ln \frac{1}{\frac{(m_j / M_j)}{\sum_{j \in J} (m_j / M_j)}} \right] \quad (2.3)$$

Cuando existe información disponible para las especies contaminantes se pueden calcular fácilmente n_j y X_j . Para la selección de la subred de tratamiento no se necesita el valor exacto de las pérdidas de exergía sino simplemente de las magnitudes relativas. Por ejemplo, se puede considerar en (2.3) que todos los contaminantes tienen un mismo peso molecular promedio, p.ej., el peso molecular del agua $M_j = M$. De esta manera se tiene,

$$\Delta Ex = -\frac{RT_0}{M} \sum_{j \in J} \left[m_j \ln \frac{\sum_{j \in J} m_j}{m_j} \right] \quad (2.4)$$

Además, en lugar de considerar el valor absoluto de las pérdidas de exergía, ΔEx , se pueden evaluar las pérdidas por mezclado en términos de un cambio porcentual, $\% \Delta Ex$, definido en la siguiente expresión:

$$\% \Delta Ex = \frac{\Delta Ex}{Ex_{in}} 100 \quad (2.5)$$

Donde Ex_{in} representa la exergía total de las corrientes efluentes a la llegada del mezclador. La subred de tratamiento que genera el menor cambio porcentual en la exergía de las corrientes efluentes que se mezclan, $\% \Delta Ex$, se selecciona en la etapa de diseño correspondiente.

Las corrientes efluentes que emergen de la subred de tratamiento seleccionada, se utilizan en la siguiente etapa de diseño, en donde se repiten los pasos para la generación y selección de una nueva subred, misma que abordará la remoción de otro de los contaminantes presentes en las corrientes efluentes. El diseño final es obtenido secuenciando las subredes de tratamiento, colocando una después de otra según el orden de precedencia determinado por la estrategia de secuenciación de menores pérdidas de exergía por mezclado de las corrientes efluentes.

Esta técnica de diseño es muy completa y contiene aspectos muy interesantes cuando se manejan restricciones de diseño simples, tal es el caso de corrientes que contienen un sólo contaminante. Sin embargo, debido a su naturaleza gráfica en los pasos de determinación de flujo mínimo de efluentes a tratar y de diseño de subredes, la metodología presenta serios inconvenientes al hacer la extensión a sistemas distribuidos de tratamiento para contaminantes múltiples.

En este capítulo se presenta un modelo de programación lineal (PL) que permite resolver de manera simultánea los pasos de determinación de metas de flujo mínimo a tratar y de diseño de subredes de tratamiento de efluentes, en el contexto de los conceptos y metodología secuencial de punto de pliegue, propuesta por Wang y Smith (1994b) y Kuo y Smith (1997). El modelo matemático se desarrolla con base en una superestructura de subred básica, que involucra una unidad operacional de tratamiento y no incluye reciclo de corrientes. El modelo lineal propuesto puede incorporar de manera sencilla, diversas restricciones derivadas de la tecnología de punto de pliegue para facilitar el proceso de diseño, así como otras que se pudieran requerir por bases de diseño.

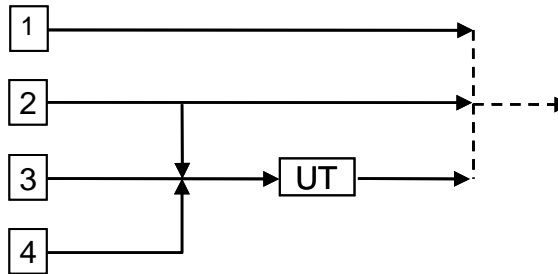


Figura 2.2 Diagrama de malla para el diseño de una subred de tratamiento de efluentes

2.2 Descripción del problema bajo consideración

En la síntesis de subredes de tratamiento distribuido de efluentes, es necesario crear una configuración representativa de las condiciones de operación de las corrientes contaminadas y que deben ser conducidas a las unidades de tratamiento. En la Figura 2.3 se presenta como base del enfoque para una subred, una superestructura conteniendo una unidad de tratamiento interrelacionada con mezcladores, divisores y sin reciclo de corrientes efluentes al mezclador inicial.

Las corrientes efluentes que requieren ser tratadas son mezcladas en el nodo M1 y enviadas a la unidad de tratamiento UT. Las corrientes tratadas o no, convergen en el nodo mezclador M2 en donde se debe satisfacer la concentración final $c_{j,e}^U$ de al menos un contaminante j . Toda corriente efluente alimentada a la superestructura de una subred tiene la posibilidad de participar de manera total, parcial o desviarse del tratamiento de efluentes. El problema de tratamiento de efluentes puede ser enunciado de la siguiente manera: Dado un conjunto de corrientes efluentes $I = \{i : i = 1, 2, \dots, n\}$, donde n es el número total de corrientes contaminantes que entran a una subred para ser tratadas; dada

una corriente efluente S_i , $i \in I$, caracterizada por una concentración $C_{i,j}$, $i \in I$, $j \in J$ de un conjunto de especies contaminantes $J = \{j: j=1,2,\dots,m\}$, donde m representa la cardinalidad del conjunto J . Se desea determinar el flujo mínimo de la corriente de agua que debe ingresar a una unidad de tratamiento de efluentes. Deberán ser determinados los flujos de las corrientes que participan en el proceso de tratamiento para reducir la concentración de contaminantes, y la composición de las corrientes de entrada y salida en una operación de tratamiento. La concentración de al menos uno de los contaminantes tratados, digamos el contaminante j , debe satisfacer la concentración máxima pre-especificada por regulaciones ambientales $c_{j,e}^U$ en la descarga de la superestructura y al menor costo posible.

Se formula un modelo de programación matemática para un subsistema de tratamiento de efluentes, con base en la superestructura básica de la Figura 2.3, y tasas de remoción constantes en las unidades, $R_j = (cin_j - cout_j) / cin_j$, $j \in J$, para cada contaminante en la operación de tratamiento. Para el diseño se ha supuesto que no hay pérdida de flujo de agua durante el proceso de tratamiento de efluentes; también son conocidas y han sido previamente caracterizadas las corrientes efluentes que entran al sistema para ser tratadas. Los valores óptimos de las variables de flujo y concentración desconocidos en la superestructura básica determinarán el diseño de la subred de tratamiento particular.

2.3 Modelo de programación lineal propuesto

Modelo R

Índices

- i = corriente efluente
 j = contaminante en una corriente
 e = punto de descarga

Conjuntos

- I = $\{i : i \text{ es una corriente efluente}\}$
 J = $\{j : j \text{ es un contaminante}\}$

Parámetros

- $C_{i,j}$ = concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)
 $c_{j,e}^U$ = concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)
 CC = coeficiente de costo de capital
 CO = coeficiente de costo de operación
 R_j = relación constante de remoción de contaminante
 S_i = flujo de la corriente efluente (t/h)
 F_e = flujo efluente total $F_e = \sum_{i \in I} S_i$ (t/h)
 Δm_j^U = masa máxima de contaminante a remover en la unidad de tratamiento (Kg/h)

Variables positivas continuas

- cin_j = concentración de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento (ppm)
 $cout_j$ = concentración de contaminante en la salida de la unidad de tratamiento (ppm)
 $c_{j,e}$ = concentración del contaminante en el punto de descarga (ppm)
 $f_{i,e}$ = flujo de efluente desviado al punto de descarga (t/h)
 f_i = flujo efluente enviado a una unidad de tratamiento (t/h)
 t = flujo a través de una unidad de tratamiento (t/h)

Función objetivo

$$\text{minimizar } (CC + CO) t \quad (2.6)$$

Restricciones del modelo

Balances de agua en los divisores iniciales de la red

$$f_i + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (2.7)$$

Balance de agua en el mezclador que precede a la unidad de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_i = t \quad (2.8)$$

Balance de agua en el mezclador final

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + t = F_e \quad (2.9)$$

Balance de contaminantes

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} C_{i,j} + (1 - R_j) \sum_{i \in I} f_i C_{i,j} = F_e c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (2.10)$$

Cotas

$$0 \leq f_i, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I \quad (2.11)$$

$$0 \leq t \leq F_e \quad (2.12)$$

De acuerdo con la ec. 2.6, el Modelo R considera la proporcionalidad de los costos de capital y de operación con el flujo de agua a tratar (p.ej., McLaughlin et al., 1992). Otras consideraciones incluyen las siguientes.

1. Una cota superior para la concentración del contaminante j en la entrada de la unidad de tratamiento, cin_j^U , puede ser establecida a través de la siguiente desigualdad lineal,

$$\sum_{i \in I} f_i C_{i,j} - t cin_j^U \leq 0 \quad (2.13)$$

2. Una cota inferior para la carga másica de contaminante j a remover en la unidad de tratamiento, Δm_j^L , puede ser establecida a través de la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 \Delta m_j^L - R_j \sum_{i \in I} f_i C_{i,j} \leq 0 \quad (2.14)$$

3. Una restricción de bajar la concentración del contaminante j en la salida de la unidad de tratamiento, debajo de una concentración $cout_j^U$, se puede establecer con la desigualdad lineal,

$$(1 - R_j) \sum_{i \in I} f_i C_{i,j} - t cout_j^U \leq 0 \quad j \in J \quad (2.15)$$

4. El Modelo R permite resolver de manera simultánea los pasos de determinación de flujo mínimo de agua a tratamiento y diseño de subred de tratamiento de efluentes sin reciclo.
5. El Modelo R hace evidente que, independientemente del número de contaminantes o corrientes efluentes involucrados, el problema que se aborda puede ser resuelto con técnicas de programación lineal.

En este capítulo, la optimización del Modelo R se realiza con un código de programación implementado en el sistema GAMS (1998), utilizando el resolutor GAMS/OSL (1997).

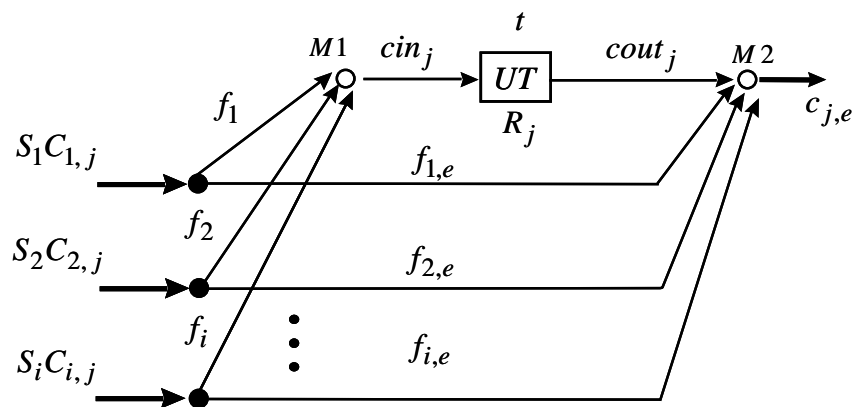


Figura 2.3 Superestructura básica para diseño de una subred de tratamiento de efluentes

2.4 Ejemplos ilustrativos

2.4.1 Ejemplo 2.1

Se busca diseñar un sistema de tratamiento de efluentes que está constituido por los contaminantes A, B y C. La concentración de los tres contaminantes y los flujos de cinco corrientes efluentes se muestran en la Tabla 2.1. Las relaciones de remoción por diseño para la única operación de tratamiento disponible son suministradas en la Tabla 2.2. La concentración límite en la descarga para los contaminantes A, B y C son 60, 50 y 70 ppm, respectivamente. Para el contaminante C se ha impuesto, por bases de diseño, el satisfacer una concentración fija de 45 ppm a la salida de la unidad de tratamiento. Para el contaminante A se restringe su concentración de entrada a la operación de tratamiento, a lo más en 430 ppm. El proceso de remoción exige que el flujo de la corriente 4 sea al menos

un tercio del flujo de la corriente 3, en la corriente de mezclado que entra a la unidad de tratamiento.

Los costos están en función del flujo t (t/h) de efluente enviado a tratamiento. El costo de capital (\$) se ha determinado en $10,300t$ y el costo de operación (\$/h) está expresado como $0.0022t$. Se ha considerado una tasa anual de retorno de 10% y un factor de servicio de 0.95 para la operación de la planta (aprox. 8322 h anuales). Se desea diseñar una red de tratamiento de efluentes que satisfaga todas las restricciones de diseño con un costo total anual mínimo.

Tabla 2.1 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 2.1

número de corriente	flujo (t/h)	concentración de contaminante (ppm)		
		A	B	C
1	10	930	300	400
2	38	350	0	150
3	25	200	700	350
4	12	0	350	300
5	30	700	150	900

Tabla 2.2 Relaciones de Remoción (%) para los Procesos de Tratamiento para el Ejemplo 2.1

proceso de tratamiento	contaminante		
	A	B	C
UT	95	85	80

La optimización del Modelo R da por resultado un costo total mínimo de 107.011 (M\$/año). El costo de capital asciende a 105.143 (M\$/año), mientras que el costo de operación se determinó en 1.868 (M\$). El flujo de efluente asociado a tratar a través del

proceso es de 102.081 t/h. En la Figura 2.4 se muestra el diseño óptimo de la red de tratamiento. Se puede observar que las corrientes 1 y 3 son totalmente tratadas, mientras que las corrientes 2, 4 y 5 son tratadas parcialmente para satisfacer las restricciones del problema.

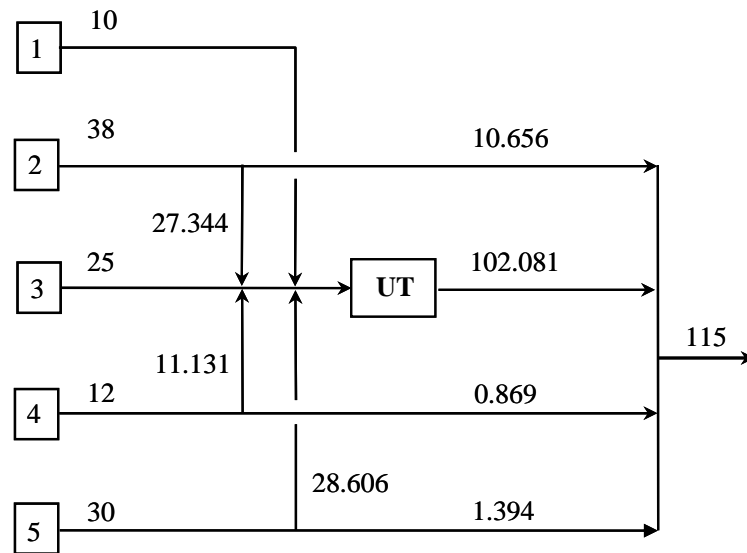


Figura 2.4 Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 2.1

Las restricciones de la relación de flujo entre las corrientes 3 y 4, la concentración máxima de entrada en la operación de tratamiento del contaminante A y la concentración fija de salida para el contaminante C en la unidad de tratamiento son satisfechas de la siguiente manera: El flujo de la corriente 4 corresponde al 44.5% de la corriente 3 se solicitó una relación de flujo de al menos un tercio. Las concentraciones de entrada a la operación de tratamiento son 430, 281 y 450 ppm para los contaminantes A, B y C respectivamente; para el contaminante A se satisface la concentración máxima de entrada a la unidad en 430 ppm. Las concentraciones de salida del proceso de tratamiento son 21.5, 42.1 y 45 ppm para los contaminantes A, B y C respectivamente; se satisface en el diseño la concentración de salida requerida en 45 ppm para el contaminante C. Finalmente, la concentración límite

para los contaminantes en la descarga del sistema son satisfechas con los valores de 60 ppm, 41.9 ppm y 67 ppm para los contaminantes A, B y C respectivamente. Se puede observar que el contaminante A está en su concentración límite requerida de 60 ppm.

2.4.2 Ejemplo 2.2 (Kuo y Smith, 1997)

Este problema trata del diseño de un sistema con contaminantes A, B y C en diferentes niveles de concentración presentes en tres corrientes de agua. Los flujos de las corrientes y concentraciones iniciales de los contaminantes se muestran en la Tabla 2.3. La concentración máxima permitida en la corriente efluente de descarga se fijan en 100 ppm para cada contaminante.

Cada uno de los tres procesos de tratamiento de efluentes I, II y III pueden remover solamente un contaminante, conforme a las tasas de remoción proporcionadas en la Tabla 2.4. Se desea diseñar un sistema de tratamiento de efluentes que pueda satisfacer las concentraciones ambientales de los contaminantes con el mínimo flujo total de agua a tratar. Los costos del tratamiento se consideran proporcionales a los flujos de agua tratados.

Para llevar a cabo el diseño y determinar el flujo total de efluentes a tratar en el sistema, una configuración de red es producida y desarrollada en tres etapas. La aplicación del Modelo R en cada etapa permitirá resolver de manera simultánea los pasos de determinación de flujo mínimo de efluente a tratar en cada unidad y el diseño de las subredes correspondientes.

Para la etapa inicial se formulan y resuelven tres problemas de programación lineal. Las soluciones de estos problemas dan por resultado las tres subredes de tratamiento mostradas en la Figura 2.5, para reducir las concentraciones de los contaminantes A, B y C a sus respectivos límites ambientales. Los flujos óptimos de efluente en las subredes obtenidas

son de 31.667, 23.283 y 23.125 t/h, para la remoción de los contaminantes A, B y C, en las unidades de tratamiento I, II y III, respectivamente.

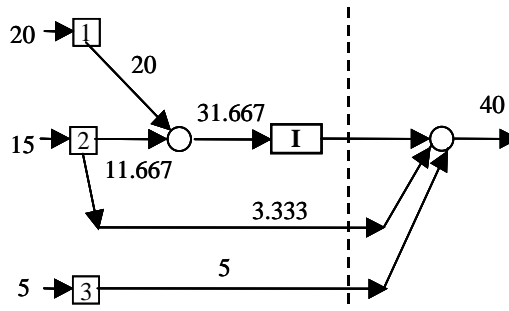
Tabla 2.3 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 2.2

número de corriente	flujo (t/h)	Concentración de contaminante (ppm)		
		A	B	C
1	20	600	500	500
2	15	400	200	100
3	5	200	1000	200

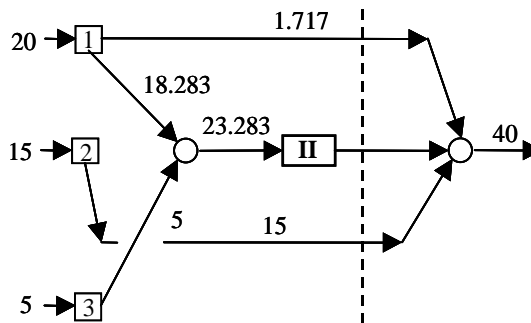
Tabla 2.4 Relaciones de Remoción (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 2.2

proceso de tratamiento	contaminante		
	A	B	C
I	90	0	0
II	0	99	0
III	0	0	80

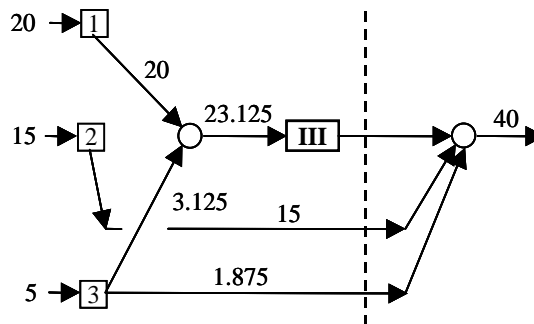
En esta etapa de diseño debe seleccionarse una de las subredes mostradas en la Figura 2.5. De acuerdo con la propuesta de Kuo y Smith (1997), la subred a seleccionar será aquella que produzca el menor cambio porcentual de exergía en el nodo de mezclado que antecede a la unidad de tratamiento. En este caso, la subred para la eliminación del contaminante C, Figura 2.5(iii), produce las menores pérdidas de exergía debido al mezclado de corrientes.



(i) Subred para el contaminante A



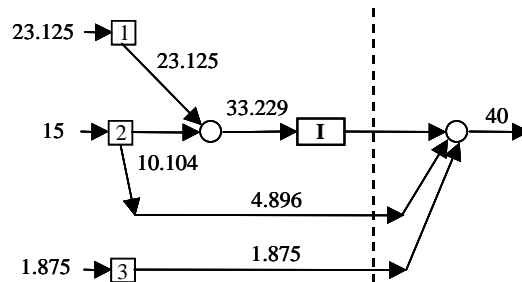
(ii) Subred para el contaminante B



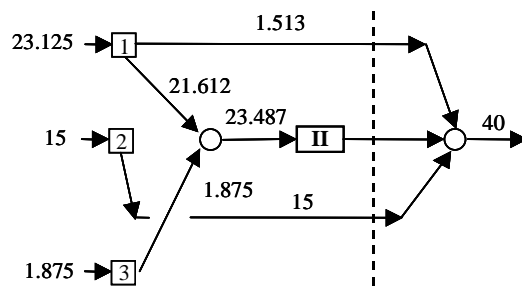
(iii) Subred para el contaminante C

Figura 2.5 Subredes de tratamiento obtenidas en la primera etapa de diseño del Ejemplo 2.2

Por lo tanto, dicha subred es seleccionada, hasta la parte de la línea punteada antes del mezclador final, para integrar la primera etapa en el diseño de red global que se desarrolla, dejando pendiente la remoción de los contaminantes A y B.



(i) Subred para el contaminante A



(ii) Subred para el contaminante B

Figura 2.6 Diseño de subredes obtenidas en la segunda etapa de diseño para el Ejemplo 2.2

En la segunda etapa de diseño se utiliza nuevamente el Modelo R en la generación de subredes de tratamiento para la eliminación de los dos contaminantes remanentes, tomando como corrientes efluentes de llegada a las que emergen de la subred previamente seleccionada, con flujos de 23.125, 15 y 1.875 t/h, para las corrientes 1, 2 y 3, respectivamente.

Por lo tanto, en esta etapa se resuelven dos problemas de programación lineal que optimizan las superestructuras básicas con las unidades de tratamiento I y II. En la Figura 2.6 se muestran los diseños de las dos subredes obtenidas para la eliminación de los contaminantes A y B. En este caso, la subred de tratamiento para el contaminante B, con un flujo de efluente a tratar de 23.487 t/h, exhibe menores pérdidas de exergía debido al mezclado de corrientes que la subred obtenida para el contaminante A. Por lo tanto, la subred de la Figura 2.6(ii) es seleccionada en la segunda etapa de diseño, quedando solamente pendiente la remoción del contaminante A.

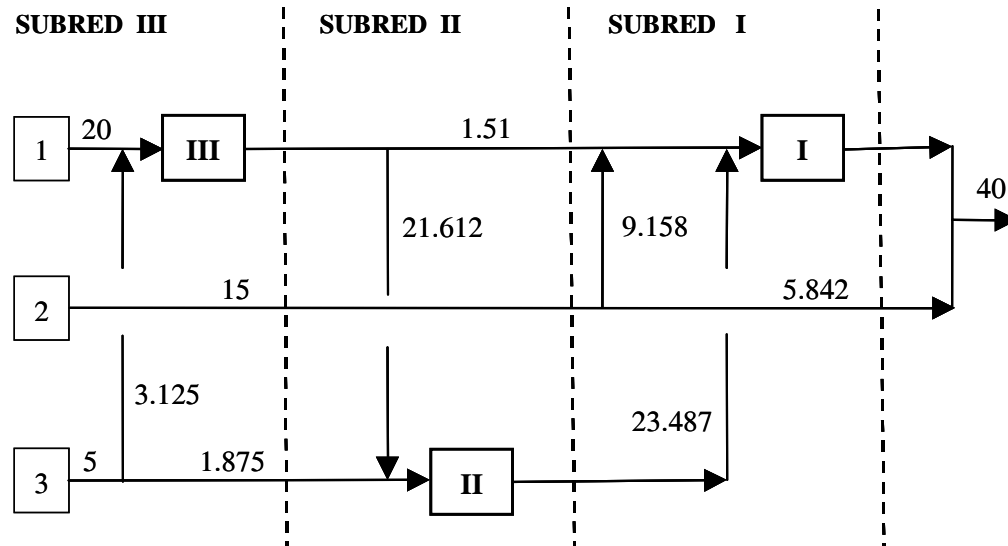


Figura 2.7 Diseño final de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 2.2 (similar a Kuo y Smith, 1997)

La etapa final de diseño toma como corrientes efluentes de llegada a las corrientes que emergen de la subred de tratamiento para el contaminante B, Figura 2.6(ii), con flujos de 1.513, 23.487 y 15 t/h, respectivamente. Tras la optimización de la superestructura básica con la unidad I se obtiene finalmente la última subred del diseño global, mismo que se muestra en la Figura 2.7.

El flujo total de agua a tratamiento es de 80.737 t/h. Para la solución de este problema se requirió la solución de 6 problemas de programación lineal; el método de punto de pliegue requiere de la elaboración separada de seis curvas compuestas y la generación gráfica de las seis subredes de tratamiento asociadas (Kuo y Smith, 1997).

2.4.3 Regiones de diseño para la secuenciación de las plantas de tratamiento para el ejemplo 2.2

El modelo de programación lineal propuesto para la síntesis de subredes de tratamiento puede ser utilizado de manera muy versátil para el desarrollo de redes distribuidas de tratamiento, bajo diferentes escenarios de interés a través de un análisis de sensibilidad. Por ejemplo, es posible estudiar de manera sistemática el efecto que tienen sobre el diseño final de la red diferentes valores para la concentración ambiental límite de los contaminantes. Esto se ilustra con la Figura 2.8, la cual fue desarrollada como una extensión del Ejemplo 2.2 en función de diferentes valores de las concentraciones límite ambientales de los contaminantes. Dicha figura permite identificar en este caso tres regiones de diseño, en donde la topología óptima de la red de tratamiento depende fuertemente de los valores de las concentraciones límite.

Los resultados de la Figura 2.8 muestran, por ejemplo, que para una concentración máxima permitida de contaminantes en la descarga por debajo de 60.5 ppm, el diseño óptimo de la red de tratamiento debe exhibir una secuencia de plantas de tratamiento II-I-III. Para una concentración máxima permitida entre 60.5 y 98 ppm, la secuencia óptima de tratamiento cambia a II-III-I. Finalmente, para valores de las concentraciones límite por arriba de 98 ppm, la mejor topología de red presenta un arreglo III-II-I.

Esta situación corresponde precisamente al caso base manejado en el Ejemplo 2.2, con una concentración límite en la descarga de 100 ppm para los tres contaminantes involucrados,

un cambio en la pendiente de las curvas en la Figura 2.8, corresponde a un cambio en la población de corrientes efluentes que entran a tratamiento.

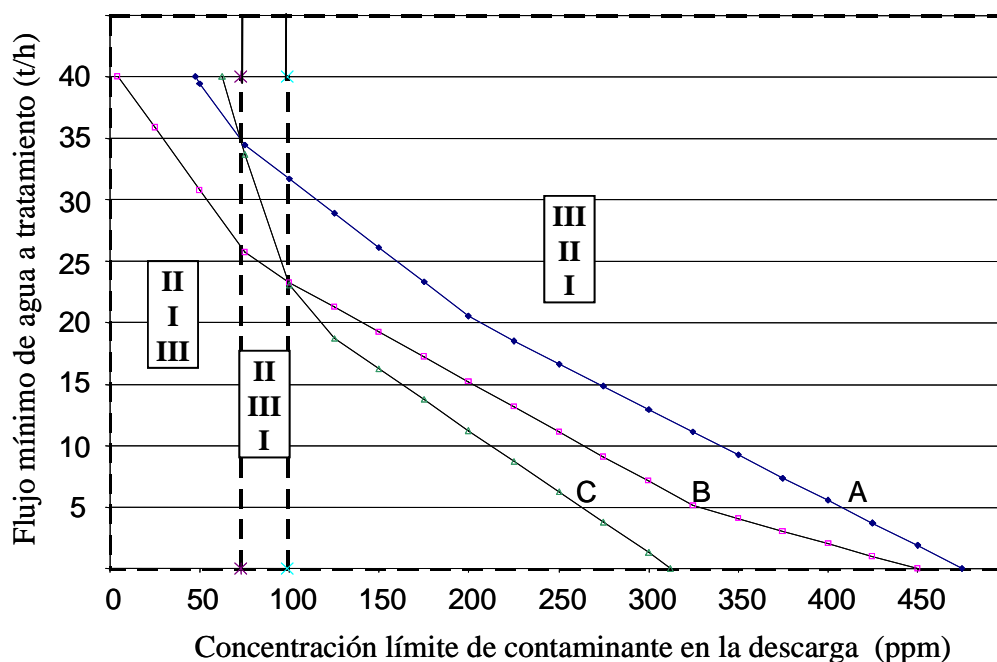


Figura 2.8 Regiones de diseño para la secuenciación de plantas de tratamiento en el Ejemplo 2.2

2.5 Conclusiones

En este capítulo se ha presentado un modelo de programación lineal para el diseño óptimo de subredes de tratamiento de efluentes, que permite resolver de manera sistemática y simultánea los pasos de determinación de metas de flujo mínimo de agua a tratamiento y de diseño de una subred de tratamiento, dentro del contexto de la metodología de punto pliegue para el diseño de redes distribuidas de tratamiento de efluentes. El modelo desarrollado permite resolver de manera sencilla problemas multi-contaminante, e

incorpora de manera bastante directa varias restricciones de diseño que no son tan fáciles de manejar con los métodos gráficos de la metodología de punto de pliegue.

Entre estas restricciones se incluyen, por ejemplo, relaciones máximas o mínimas de mezclado, una concentración máxima o mínima de contaminante en la entrada de las plantas de tratamiento, una carga másica máxima o mínima de contaminante a remover en las plantas de tratamiento, o bien volúmenes máximos o mínimos de la corriente efluente a tratamiento. Adicionalmente, y tal vez de más relevancia, el modelo matemático desarrollado pone en evidencia que, bajo las suposiciones más usuales de diseño, el problema de desarrollo de una subred de tratamiento de efluentes que incluye una unidad de tratamiento sin reciclo puede ser resuelto de manera rigurosa a través de la solución de un solo programa lineal, sin importar el número de corrientes efluentes o contaminantes presentes en el problema.

La versatilidad del modelo propuesto también se ha ilustrado con un estudio de sensibilidad paramétrica realizado bajo diferentes escenarios de valores de las concentraciones ambientales límite de los contaminantes. Dicho estudio ha permitido identificar regiones de diseño donde se presentan diferentes topologías óptimas para la red de tratamiento distribuido, en función de los valores de las concentraciones ambientales límite de los contaminantes.

En este capítulo se explotan las características del modelo de programación lineal propuesto. Sin embargo, a expensas de generalizar el modelo matemático usado a un modelo de programación no lineal, el enfoque propuesto para el cálculo del objetivo de flujo mínimo de efluente a tratamiento y diseño de subred se pueden extender para considerar la minimización de funciones de costo no lineales y la derivación de subestructuras de red que incluyan corrientes de reciclo.

CAPÍTULO 3

DESCOMPOSICIÓN DE SUPERESTRUCTURA Y OPTIMIZACIÓN PARAMÉTRICA PARA LA SÍNTESIS DE REDES DISTRIBUIDAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES

3.1 Introducción

El agua es un recurso que se utiliza intensivamente para muchos propósitos diferentes en la industria. La contaminación ordinaria del agua usada en la industria de proceso genera grandes volúmenes de efluentes que descargan contaminantes convencionales [p.ej., demanda bioquímica de oxígeno (DBO), sólidos suspendidos totales (SST), pH, aceite y grasa], no convencionales [p.ej., amoníaco, demanda química de oxígeno (DQO), cloro, fluoruros], y tóxicos (p.ej., acrilonitrilo, benceno, tetracloruro del carbón, cloroformo, fenol, plomo, tolueno) en diferentes sitios de disposición de agua, con el correspondiente impacto al medio ambiente. Un sistema de tratamiento de efluentes efectivo es esencial, y puede influenciar de manera significativa el desempeño de una industria de proceso.

La tarea principal del sistema de tratamiento de efluentes es mitigar el impacto de descarga de contaminantes sobre el medio ambiente, aunque el enfoque típico usado en la industria es un arreglo secuencial de tratamiento en dos o tres etapas, los llamados tratamientos primarios, secundarios, y terciarios los contaminantes específicos presentes en corrientes

efluentes pueden requerir tratamientos específicos (p.ej., Metcalf y Eddy, Inc., 1991; Allen y Rosselot, 1997). También, las concentraciones de contaminantes tóxicos, convencionales y no convencionales pueden ser muy diferentes en los varios puntos de descarga de efluentes especialmente en complejos industriales. Además, los costos de tratamiento de efluentes dependen fuertemente del tipo de contaminantes presentes en las corrientes efluentes y de la cantidad de agua efluente que es tratada (p.ej., McLaughlin et al., 1992; Lankford, 1998).

Los diferentes costos entre los tratamientos particulares y las diferencias en las concentraciones de contaminantes en las corrientes efluentes llama la atención a la segregación de las corrientes efluentes a sistemas de tratamiento descentralizados para reducir los volúmenes que serán tratados, particularmente en aquellos procesos de tratamiento costoso. Éstas y otras ventajas significativas que el tratamiento segregado de corrientes efluentes puede tener sobre el tratamiento típico centralizado, han sido enfatizadas por varios autores, en el cual grandes volúmenes de agua con bajas concentraciones de contaminantes tienen que ser procesados (Eckenfelder et al., 1989; Higgins, 1995). Los costos de tratamiento de efluentes también son influenciados por los estándares de descarga. Estos estándares son el resultado de regulaciones basadas en la calidad del agua en el sitio de disposición de las corrientes efluentes, e incluyen límites basados en toxicidad (ver p.ej., CWA 1987, WQA 1987, 1992; Davenport, 1992; Byers et al., 1995). La tendencia principal en regulaciones de efluentes es establecer los límites más rigurosos basados en el funcionamiento de las mejores tecnologías disponibles. Particularmente, en el diseño de plantas nuevas que se tiene la oportunidad de instalar los procesos más eficientes para reducir las descargas y considerar el estado del arte en tecnologías de tratamiento en el momento de arranque.

El aumento en la severidad en las especificaciones de la calidad del agua y la necesidad de la conservación del agua, han traído de nuevo la atención a la síntesis y optimización de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes y el manejo integrado de redes de agua

(Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Wang and Smith, 1994a, 1994b, 1995a, 1995b; Dhole et al., 1996; Olesen y Polley, 1996; Kuo y Smith, 1997; Doyle y Smith, 1997; Olesen y Polley, 1998; Kuo y Smith, 1998a, 1998b; Galan y Grossmann, 1998; Alva-Argáez et al., 1998; Hallale y Fraser, 1998; Alva-Argáez et al., 1999; Freitas et al., 2000; Sorin, y Bédard, 1999, Huang et al., 1999; Castro et al., 1999; Yang et al., 1999; Benko y Fonyo, 1999; Yang et al., 2000; Benko y Fonyo, 2000; Polley y Polley, 2000; Savelski y Bagajewicz, 2000; Bagajewicz et al., 2000; Bagajewicz, 2000; Dunn et al., 2001a, 2001b; Bagajewicz y Savelski, 2001; Savelski y Bagajewicz, 2001; Tsai y Chang, 2001; Feng y Seider, 2001; Zhou et al., 2001; Jödicke et al., 2001; Hallale, 2002; Bagajewicz et al., 2002; Savelski y Bagajewicz, 2003; El-Halwagi et al., 2003; Wang et al., 2003).

En 1989, El-Halwagi y Manousiouthakis introdujeron el problema de sintetizar redes de intercambio de masa (RIM), en las cuales ciertas especies de un conjunto de corrientes ricas se deben transferir a un conjunto de corrientes pobres. De forma semejante a los conceptos y técnicas desarrolladas con anterioridad para la síntesis de redes de intercambio de calor (p.ej., Linnhoff y Hindmarch, 1983; Linnhoff, 1993), El-Halwagi y Manousiouthakis definieron curvas compuestas para representar las operaciones de intercambio de masa y determinar los objetivos de cálculo para el grado máximo de intercambio de masa entre corrientes de proceso y uso mínimo de corrientes pobres externas.

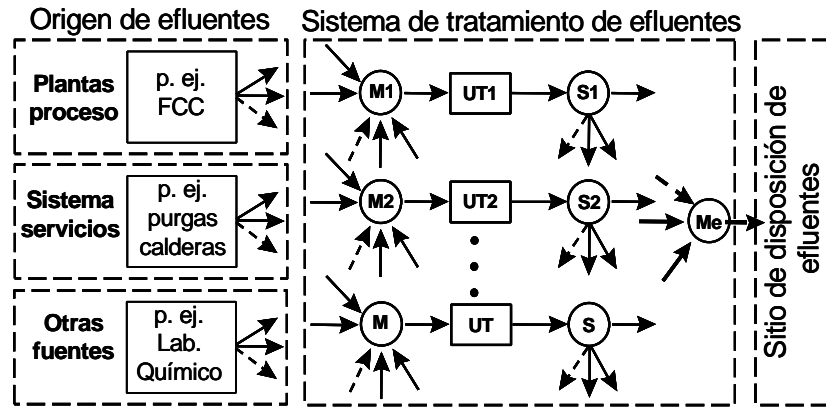
Varias limitaciones del enfoque de RIM, cuando son aplicados los métodos a la síntesis de agua fresca y minimización efluentes, se han señalado en la literatura (Dhole et al., 1996; El-Halwagi y Spriggs, 1998; Huang et al., 1999; El-Halwagi et al., 2003). Sin embargo, el uso de las ideas clave detrás de las curvas compuestas introducidas por El-Halwagi y Manousiouthakis ha dado lugar a una variación del concepto de RIM, conocido como punto de pliegue para agua, que ha estado en desarrollo por varios autores, empezando por el trabajo inicial de Wang y Smith (1994b). Actualmente, el enfoque de punto de pliegue para agua incluye varias metodologías para la síntesis, de redes de agua y de redes distribuidas

de tratamiento de efluentes. Para un resumen en los avances en la solución sistemática de estos dos problemas, se puede referir a la revisión realizada por Bagajewicz (2000).

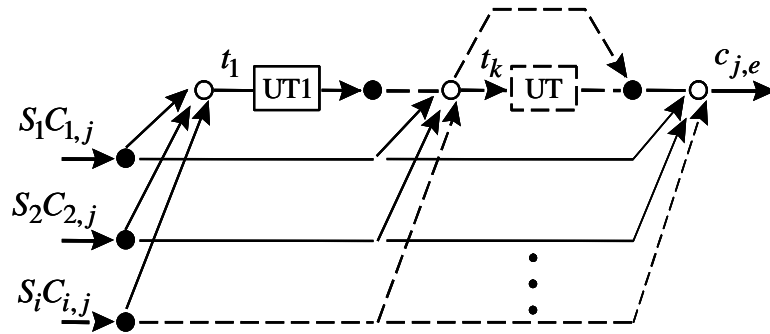
En particular, el enfoque de punto de pliegue para agua para la síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes (Wang y Smith, 1994b; Kuo y Smith, 1997) genera diseños de tratamiento distribuido de efluentes en varias etapas de una manera secuencial. Una configuración de red se produce y evoluciona en varios pasos de diseño que requieren la determinación de los objetivos de cálculo del flujo mínimo de efluentes, a través de las plantas de tratamiento disponibles para la remoción de contaminantes.

La tarea de determinación de los objetivos de flujo mínimo de efluentes a tratar en el sistema se realiza gráficamente con la ayuda de curvas compuestas, que relacionan la concentración de cada contaminante en las corrientes efluentes con la correspondiente carga másica de contaminante que necesita ser removida, y líneas de operación que describen la remoción de contaminantes en las plantas de tratamiento. Usando las curvas compuestas para los contaminantes individuales y determinado el cálculo del objetivo de flujo mínimo de efluentes a tratamiento, la metodología de diseño para redes distribuidas de tratamiento de efluentes produce subredes de tratamiento independientes para la remoción de cada uno de los contaminantes presentes en las corrientes efluentes. Al combinar las subredes de tratamiento que resultan, se obtiene un diseño total inicial de red. Este diseño total inicial de red es evolucionado y optimizado para determinar el diseño de red final.

La técnica de diseño propuesta por Wang y Smith (1994b) y Kuo y Smith (1997) es muy útil y comprensible; sin embargo, varias de sus desventajas tienen que ser señaladas. Debido a la naturaleza gráfica en el paso de determinación de los objetivos de flujo mínimo de efluentes a tratamiento, esta técnica sólo puede manejar restricciones de diseño simples. También, el cálculo del objetivo del flujo total mínimo de efluentes, determinado en la solución de problemas con contaminantes múltiples y unidades múltiples, no es riguroso.



(a)



(b)

Figura 3.1 (a) Diseño de un sistema distribuido de tratamiento de efluentes
(b) Superestructura

Además, para tener una generación y combinación apropiada de subredes en sistemas distribuidos, que implican dos o más unidades de tratamiento capaces de remover un contaminante dado, algunas decisiones tienen que tomarse con respecto a la distribución de la carga másica de contaminante y secuenciación de las unidades del tratamiento. Alternativamente, dada una secuenciación de unidades de tratamiento, los niveles máximos de concentraciones inter-unidad para los contaminantes claves se deben suponer para que la técnica de diseño sea efectiva. Estas suposiciones pueden conducir al procedimiento de diseño de punto de pliegue para agua hacia diseños sub-óptimos de redes de tratamiento de efluentes.

Los enfoques simultáneos de programación matemática para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, o para el problema más general de síntesis, en el cual el diseño de redes de agua y el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes se combinan en un sólo problema integrado de manejo de agua, también se han propuesto en la literatura. Takama et al. (1980a) trataron la distribución óptima de agua en una refinería de petróleo, dentro de una estructura no convexa de PNL (Programación no lineal) basado en una superestructura de red que asocia una alta conectividad para la reutilización de efluentes y con todos los arreglos posibles del proceso de tratamiento para las corrientes efluentes. Takama et al. (1980a) utilizaron el método complex para desarrollar diseños óptimos de red.

En 1998, Galan y Grossmann desarrollaron modelos no convexos de PNL y PNLEM (Programación no lineal entera-mixta) para el diseño de plantas de tratamiento distribuido de efluentes, utilizando la superestructura de red presentada por Wang y Smith (1994b). Estos autores propusieron un procedimiento heurístico multi-arranque, para la optimización global del modelo no convexo desarrollado con base en la solución de un conjunto de problemas relajados de PL (Programación lineal), que proporcionan puntos de inicialización para la solución del problema original de PNL.

Alva-Argáez et al. (1998) propusieron una metodología integrada para el diseño de sistemas industriales de agua, que incorpora aspectos de la metodología de punto de pliegue para agua dentro de una estructura de modelado de programación matemática. La superestructura de red utilizada por Alva-Argáez et al. (1998) incluye todas las posibilidades de reutilización de agua, regeneración, reciclaje y tratamiento. Una solución factible del modelo no convexo de PNLEM asociado es obtenida por descomposición del modelo original de PNLEM en una secuencia de problemas relajados de PLEM (programación lineal entera-mixta), en los cuales la función objetivo es aumentada con un término de penalización creciente que persiga una reducción de las no factibilidades del problema.

Huang et al. (1999) utilizaron un enfoque de PNL para la síntesis de redes integradas de uso de agua y tratamiento distribuido de efluentes. En su enfoque de diseño, el cual es similar al presentado por Galan y Grossmann (1998), para el diseño de redes del tratamiento distribuido de efluentes, es desarrollada una versión extendida de la superestructura propuesta por Takama et al. (1980a), incluyendo la posibilidad de fuentes y sumideros múltiples de agua, pérdidas de agua y unidades repetidas de tratamiento de agua. El modelo de PNL que resulta en el trabajo por Huang et al. (1999), se resuelve a partir de puntos factibles iniciales generados con la metodología de punto de pliegue para agua, o resolviendo un sistema no lineal de ecuaciones que resultan de fijar, en el modelo desarrollado de PNL, varias variables clave de diseño en niveles “razonables”.

Benko et al. (2000) propusieron un enfoque de PNL de cubrir-y-eliminar para la síntesis de redes integradas de manejo de agua (cubrir por superestructura y eliminar por PNL). En su enfoque, Benko et al. (2000) cubren todos los sistemas candidatos alternativos incluyéndolos en una superestructura de red. Los diseños de red inferiores son entonces eliminados de la consideración de una manera recurrente, interpretando los resultados de cero o cercanos de cero de la solución óptima del programa de PNL, y eliminando las unidades o corrientes correspondientes de la superestructura antes de que se realice la solución de un nuevo problema de PNL. El proceso de optimización de la superestructura se para cuando no existen más características estructurales a ser eliminadas. El conjunto de valores iniciales o estructura inicial está construida de forma heurística, en donde los flujos y capacidades de las unidades pueden ser cero, para cada evaluación de resultados en el enfoque y una nueva evaluación de alternativas, un conjunto nuevo de valores iniciales deben ser considerados.

A pesar de las contribuciones descritas, el desarrollo de diseños óptimos globales para redes distribuidas de tratamiento de efluentes o manejo de redes integradas de agua sigue siendo un problema desafiante. La idea básica detrás en los enfoques simultáneos de síntesis, es fundamentalmente la misma, la optimización de un modelo de PNL o de PNLEM asociado

a una superestructura de red, en donde se remueven sus características redundantes y se produce un diseño final de red. Estas técnicas simultáneas de diseño permiten la automatización del procedimiento de diseño, pero debido a la naturaleza no convexa de los modelos matemáticos involucrados, soluciones subóptimas o puntos estacionarios no óptimos pueden ser obtenidos cuando se utilizan técnicas de optimización estándar (local). Aún más, la transformación lineal de restricciones no convexas de problemas de diseño factibles puede definir regiones no factibles o producir matrices Hessianas indefinidas, que a menudo causan falla en técnicas de optimización local estándar (Lucia et al., 1996). Otros aspectos teóricos y prácticos relacionados con el problema complejo de determinar una solución globalmente óptima para modelos de optimización no convexos se pueden encontrar por ejemplo en Horst y Pardalos, 1995; Horst y Tuy, 1996; Floudas et al., 1999; y Tawarmalani y Sahinidis, 2002.

El uso de técnicas de optimización global estocástica o determinista para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes o redes integradas de manejo de agua es relativamente una nueva cuestión, que ha surgido solamente en algunos trabajos recientes. En 2001, Tsai y Chang ampliaron el enfoque de diseño utilizado por Huang et al. (1999), para la síntesis de redes integradas de uso de agua y de tratamiento distribuido de efluentes, construyendo una superestructura de red con un conjunto de unidades de mezclado ficticias, que no realizan ninguna transformación en la corriente, pero amplían el espacio de búsqueda de diseño proporcionando nodos adicionales de mezclado y divisores de corrientes en la superestructura de red. Tsai y Chang obtuvieron resultados interesantes en la implementación de un algoritmo genético (p.ej., Holland, 1975; Goldberg, 1989; Mitchell, 1996) para la solución de un modelo de PNL asociado con su superestructura de red. Los resultados principales incluyen el rediseño de una red de uso y de tratamiento de efluentes en una refinería, implicando tres fuentes de agua, tres sumideros del agua, siete operaciones de uso de agua con tres contaminantes y dos unidades de tratamiento de efluentes.

El uso de técnicas de optimización global rigurosas, para la determinación de la mejor estructural y características operacionales de redes distribuidas de tratamiento de efluentes o de redes del agua, se han limitado a la solución de problemas de diseño pequeños que implican pocas corrientes y pocos contaminantes. Las técnicas de optimización global determinista aplicadas a esta clase de problemas, incluyen un algoritmo de ramificación y contracción de Zamora y Grossmann (1998, 1999a), y un algoritmo de optimización global desarrollado recientemente para la solución de problemas de programación disyuntiva no convexo generalizado (Lee y Grossmann, 2003).

Un enfoque de descomposición de superestructura y optimización paramétrica se presenta en este capítulo para investigar diseños óptimos globales en la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes. La declaración formal del problema tratado se proporciona en la siguiente sección. El principal concepto detrás de la metodología propuesta consiste en particionar la región de búsqueda de diseño cubierta por una superestructura compleja típica de red para diseño simultáneo. La partición de la región de búsqueda de diseño es lograda descomponiendo una superestructura compleja de red en un conjunto de superestructuras básicas de red, sin reciclo y recirculación de corrientes.

Estas ideas y un modelo matemático no convexo estructurado para la optimización de superestructuras básicas de red se presentan en la sección 3.3, junto con un esquema de reducción del modelo para generar modelos de programación lineal, que se utilizan dentro de un procedimiento de solución ideado para conducir una búsqueda sistemática para diseños óptimos globales de red en el espacio de solución cubierto por las superestructuras básicas de red.

El uso y ventajas de la metodología propuesta y los modelos matemáticos derivados se ilustran en la sección 3.4, con la solución detallada de varios problemas de diseño, que incluyen la síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento efluentes que implican hasta cinco contaminantes, siete corrientes efluentes, y tres unidades de tratamiento.

Será demostrado que la metodología de diseño propuesta ayuda no solamente en la determinación de diseños óptimos globales, también permite una solución robusta del problema de diseño bajo una variedad de escenarios diferentes, permitiendo en algunos casos la identificación de regiones de diseño sobre la cuál una topología de red dada prevalece sobre otras alternativas. Finalmente, en la sección 3.5 se darán algunas conclusiones.

3.2 Declaración del Problema

El problema de diseño de un sistema distribuido de tratamiento efluente tratado en este capítulo puede ser establecido como sigue (ver Figura 3.1). Dado un conjunto de corrientes efluentes, I , con diferentes flujos, S_i , $i \in I$, arrastrando un conjunto de contaminantes, J , con concentraciones de contaminante $C_{i,j}$, $i \in I$, $j \in J$. Las concentraciones de todos los contaminantes en las corrientes efluentes se deben reducir en un conjunto de plantas de tratamiento, K , para satisfacer los límites ambientales, $c_{j,e}^U$, antes de la descarga final. Cada una de las plantas de tratamiento disponibles pueden remover, en un cierto grado, un subconjunto de los contaminantes presentes en las corrientes efluentes. Una matriz de relaciones de remoción constantes, $R_{j,k}$, $j \in J$, $k \in K$, especifica las fracciones masa de los contaminantes que se pueden remover en las unidades de tratamiento disponibles. Se supone que los procesos de tratamiento funcionan sin pérdida de efluentes, y que los costos de capital y de operación son proporcionales al flujo tratado.

La tarea de diseño bajo consideración consiste en determinar la topología y condiciones operacionales de la red de tratamiento de efluentes que conseguirá la remoción requerida de contaminantes al mínimo costo. Restricciones de diseño adicionales pueden incluir, por ejemplo, la aplicación total, parcial o ningún tratamiento para todas de un subconjunto de

corrientes efluentes, la especificación de flujos mínimos y máximos a través de unidades de tratamiento particulares, la especificación de concentraciones máximas de contaminantes en las entradas de unidades de tratamiento particulares, y la especificación de concentraciones objetivo de contaminantes en las salidas de unidades de tratamiento particulares.

3.3 Enfoque de diseño propuesto

3.3.1 Descomposición de superestructura

En la Figura 3.2 se presentan superestructuras de red típicas para el problema de diseño establecido anteriormente en la declaración del problema, dentro de un marco de modelado matemático simultáneo para un problema de diseño que involucra tres unidades de tratamiento (Kuo y Smith, 1997; Galan y Grossmann, 1998; Alva-Argáez et al., 1998; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Zamora y Grossmann, 1998). Las superestructuras de red mostradas en la Figura 3.2 incluyen unidades de tratamiento, divisores de corrientes en la entrada del sistema y en las salidas de las unidades del tratamiento, mezcladores en las entradas de las unidades de tratamiento y uno final en la salida del sistema, y una rica conectividad que asocia todos los arreglos posibles de tratamiento, recirculaciones de corrientes, todas las combinaciones posibles de corrientes efluentes que se pueden alimentar a las unidades del tratamiento, y el desvío de corrientes efluentes al punto final la descarga.

Aunque estas superestructuras son versátiles y comprensibles, su optimización requiere de modelos matemáticos que incluyen términos bilineales no convexos, implicando por ejemplo, productos de flujos de corrientes y concentraciones en los balances de masa para los contaminantes en mezcladores (Alva-Argáez et al., 1998; Zamora y Grossmann, 1998), o productos de flujos de contaminantes y variables fraccionales en los balances de masa para los contaminantes en divisores (Galan y Grossmann, 1998).

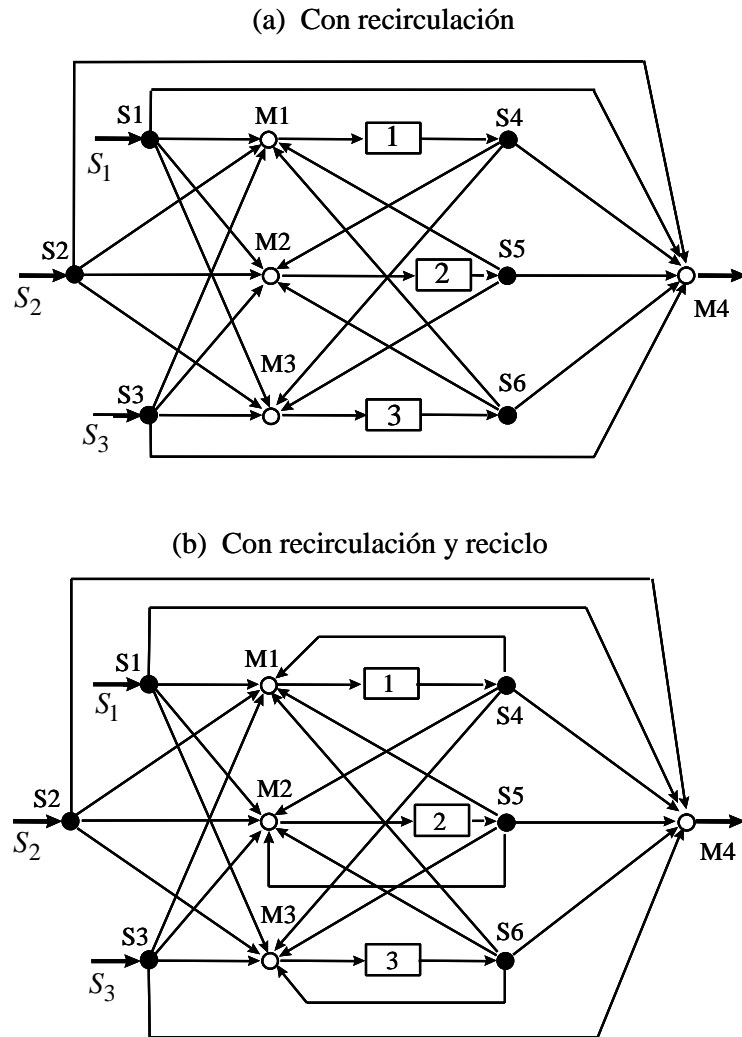


Figura 3.2 Superestructuras de red típicas para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes

Por lo tanto, la selección de una superestructura de red particular para desarrollar un diseño de red distribuida de tratamiento de efluentes deberá tomar en consideración la complejidad del modelo matemático asociado.

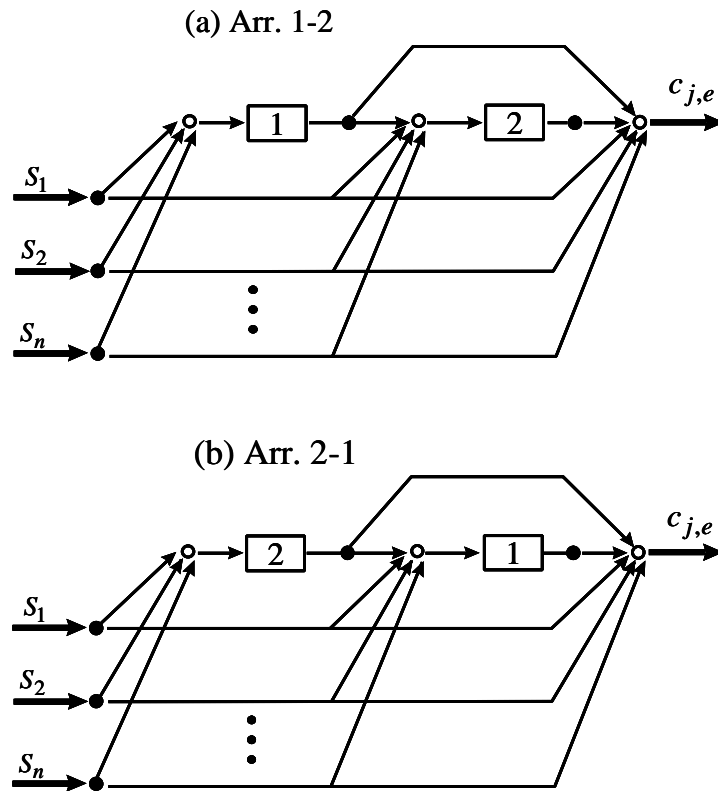


Figura 3.3 Superestructuras básicas de red que involucran dos unidades del tratamiento

Muy probablemente, un número alto de características topológicas diferentes incorporadas en la superestructura conduce a un modelo matemático con una complejidad mayor. Además, aunque una característica estructural como reciclo de corrientes mostrados en la Figura 3.2(b) puede ser necesaria en algunos casos particulares para hacer factible la operación de un sistema de tratamiento, o para bajar la concentración de contaminantes en la entrada de una unidad de tratamiento, su inclusión debe ser cuidadosamente evaluada. De otra forma, una corriente de reciclo puede constituir una característica innecesaria cuya única consecuencia práctica es complicar la representación matemática de la superestructura.

Con el propósito de conducir una búsqueda sistemática para determinar diseños óptimos globales en la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, un enfoque de descomposición de superestructura se utiliza en este capítulo. Dentro del enfoque propuesto, una superestructura de red típica que involucra n unidades de tratamiento se descompone en un conjunto de $n!$ superestructuras básicas de red, que se optimizan individualmente para obtener un conjunto de diseños de red alternativos, de los cuales se selecciona un diseño de red final. Las superestructuras básicas de red presentan como características topológicas principales, diferentes arreglos de las unidades de tratamiento en donde todo efluente y corriente tratada fluyen en la dirección del flujo corriente abajo en el sistema. La Figura 3.3 presenta las dos superestructuras básicas de red que son obtenidas descomponiendo una superestructura de red típica que implica dos unidades de tratamiento.

Un aspecto importante se implica en el esquema de descomposición. La optimización del problema de diseño de la superestructura compleja es intercambiado por la optimización de un conjunto de problemas menos complicados basados en superestructuras básicas de red. También, la complejidad de la superestructura de red para la solución de un problema de diseño se reduce a expensas de excluir porciones del espacio de solución que incluyen diseños de red que se caracterizan por la recirculación y reciclo de corrientes. Puesto que la reutilización de efluentes no es un alcance en este trabajo, esta última consideración constituye una suposición de simplificación razonable.

3.3.2 Modelado de programación matemática

El esquema de descomposición de superestructura simplifica el problema de diseño dividiendo y excluyendo algunas porciones del espacio de solución. Además, la falta de conectividad corriente arriba en una superestructura básica de red disminuye la complejidad matemática de los subproblemas que necesitan ser tratados. Sin embargo, estos elementos metodológicos no son suficientes para prevenir el uso de términos no convexos y variables

que complican el diseño en los modelos matemáticos asociados, para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes. Otro paso hacia la reducción del número de términos y variables complicadas se logra con el desarrollo del siguiente modelo matemático estructurado, para la optimización de una superestructura básica de la red que implica n unidades de tratamiento.

Modelo BNS- n

Índices

i	= corriente efluente
j	= contaminante
k or ℓ	= unidad de tratamiento
e	= punto de descarga

Conjuntos

I	= $\{i : i \text{ es una corriente efluente}\}$
J	= $\{j : j \text{ es un contaminante}\}$
K	= $\{k : k \text{ es una unidad de tratamiento}\}$

Parámetros

$C_{i,j}$	= concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)
$c_{j,e}^U$	= concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)
CC_k	= coeficiente de costo de capital
CO_k	= coeficiente de costo de operación
$R_{j,k}$	= relación de remoción de contaminante
S_i	= flujo de corriente efluente (t/h)
F_e	= flujo total de efluente en el punto de descarga (t/h)
	$F_e = \sum_{i \in I} S_i .$

Variables positivas continuas

$c_{j,e}$	= concentración de contaminante en el punto de descarga (ppm)
$f_{i,e}$	= flujo desviado al punto de descarga (t/h)
$f_{i,k}$	= flujo al mezclador que precede una unidad de tratamiento (t/h)

- t_k = flujo a través de una unidad de tratamiento (t/h)
 $\Delta m_{j,k}$ = carga másica de contaminante removida en una unidad de tratamiento (Kg/h)
 $\alpha_{\ell,k}$ = fracción del flujo de salida de la ℓ -th unidad que es enviado a k -th unidad
 $\alpha_{k,e}$ = fracción del flujo de salida de la k -th unidad que es enviado al punto de descarga

Función objetivo

$$\text{Minimizar } t = \sum_{k \in K} (CC_k + CO_k) t_k \quad (3.1)$$

Restricciones del modelo

Balances de masa para agua en los divisores iniciales de la red

$$\sum_{k \in K} f_{i,k} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (3.2)$$

Balances de masa para agua en mezcladores que preceden las unidades de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_{i,k} + \sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell < k}} \alpha_{\ell,k} t_\ell = t_k \quad k \in K \quad (3.3)$$

Conservación de agua en divisores después de las unidades de tratamiento

$$\sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell > k}} \alpha_{k,\ell} + \alpha_{k,e} = 1 \quad k \in K \quad (3.4)$$

Balance de masa para agua en el mezclador final de la red

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + \sum_{k \in K} \alpha_{k,e} t_k = F_e \quad (3.5)$$

Balances de masa y remoción de contaminantes en las unidades de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_{i,k} C_{i,j} + \sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell < k}} \alpha_{\ell,k} (1 - R_{j,\ell}) \frac{10^3 \Delta m_{j,\ell}}{R_{j,\ell}} = \frac{10^3 \Delta m_{j,k}}{R_{j,k}} \quad j \in J, k \in K \quad (3.6)$$

Balances de masa para contaminantes en el mezclador final de la red

$$\sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{k \in K} \sum_{i \in I} f_{i,k} C_{i,j} + \sum_{k \in K} (1 - R_{j,k}) \alpha_{k,e} \frac{10^3 \Delta m_{j,k}}{R_{j,k}} = F_e c_{j,e} \quad j \in J \quad (3.7)$$

Cargas máxicas mínimas de contaminantes que son removidas de las corrientes efluentes

$$\sum_{k \in K} \Delta m_{j,k} \geq \Delta m_j^L \quad j \in J \quad (3.8)$$

Cotas

$$0 \leq c_{j,e}^L \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (3.9)$$

$$0 \leq f_{i,k}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I, k \in K \quad (3.10)$$

$$0 \leq t_k^L \leq t_k \leq t_k^U \leq F_e \quad k \in K \quad (3.11)$$

$$0 \leq \Delta m_{j,k}^L \leq \Delta m_{j,k} \leq \Delta m_{j,k}^U \leq m_j^U \quad j \in J, k \in K \quad (3.12)$$

$$0 \leq \alpha_{\ell,k}, \alpha_{k,e} \leq 1 \quad \ell, k \in K, \ell < k \quad (3.13)$$

NOTAS

- 1) El flujo máxico de contaminante j en la entrada del sistema de tratamiento, m_j^U , es dado por,

$$10^3 m_j^U = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} \quad (3.14)$$

- 2) La carga másica total mínima de contaminante j que será removida por el sistema de tratamiento, Δm_j^L , puede ser obtenida de la expresión,

$$10^3 \Delta m_j^L = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} S_i c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (3.15)$$

- 3) Para el caso en el cual todas las unidades de tratamiento puedan procesar el conjunto total de corrientes efluentes, la carga másica total máxima de contaminante j que un sistema de tratamiento pudiera remover es igual a,

$$\Delta m_j^U = \frac{1}{10^3} \left[1 - \prod_{k \in K} (1 - R_{j,k}) \right] \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} \quad j \in J \quad (3.16)$$

Por lo tanto, la concentración mínima alcanzable de contaminante j en la descarga del sistema de tratamiento sería dada por,

$$c_{j,e}^L = \left[\prod_{k \in K} (1 - R_{j,k}) \right] \frac{\sum_{i \in I} S_i C_{i,j}}{\sum_{i \in I} S_i} \quad j \in J \quad (3.17)$$

De este modo, $c_{j,e}^L$ proporciona un medio simple de identificar problemas no factibles de diseño en los cuales, para un contaminante dado j , la concentración máxima de contaminante permitida en la descarga es menor que la concentración mínima que puede ser lograda por el diseño, es decir, $c_{j,e}^U < c_{j,e}^L$.

- 4) Una cota superior para la concentración de un contaminante j en la entrada de una unidad de tratamiento k , $Cin_{j,k}^U$, se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 \Delta m_{j,k} - Cin_{j,k}^U R_{j,k} t_k \leq 0 \quad (3.18)$$

- 5) Una solicitud de reducir la concentración de un contaminante j en la salida de una unidad de tratamiento k , por debajo de una concentración $Cout_{j,k}^U$, se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 (1 - R_{j,k}) \Delta m_{j,k} - R_{j,k} Cout_{j,k}^U t_k \leq 0 \quad (3.19)$$

- 6) Para la solución del Modelo $BNS-n$, todas las relaciones de remoción deben ser diferentes a cero, ver las ecuaciones (3.6) y (3.7). Si los datos del problema establecen algunas relaciones de remoción iguales a cero, entonces en el Modelo $BNS-n$ se pueden fijar en los datos valores insignificante muy pequeños (por ejemplo 10^{-6}).

3.3.3 Reducción del modelo matemático y enfoque de solución

El Modelo $BNS-n$ es un modelo de programación no lineal que incluye términos bilineales en las ecuaciones (3.3), (3.5)-(3.7). Sin embargo, se puede observar que todos los productos bilineales en el Modelo $BNS-n$ incluyen también una variable fraccional del tipo $\alpha_{\ell,k}$, que especifica la fracción del flujo total tratado en la unidad ℓ que también se debe tratar en la unidad k , o una variable fraccional del tipo $\alpha_{k,e}$, que especifica la fracción del flujo total tratado en la unidad k que no requiere ningún otro tratamiento y se envía al punto de descarga final de efluentes. De hecho, la optimización de una superestructura básica de red incluyendo n unidades de tratamiento involucra el uso de $n(n+1)/2$ variables fraccionales

en los términos bilineales en el Modelo $BNS-n$. Una reducción en el número de las variables fraccionales puede ser lograda en la formulación matemática usando las n ecuaciones de conservación para efluentes en los divisores después de las unidades de tratamiento, ecuación (3.4). Este esquema de reducción del modelo da lugar a un Modelo de programación no lineal $BNS-r$, que incluye términos bilineales solamente con las variables fraccionales $n(n-1)/2$ remanentes.

Resultados interesantes se pueden derivar del Modelo $BNS-r$ para la optimización de superestructuras básicas de red que implican unas cuantas unidades del tratamiento. Por ejemplo, en la optimización de una superestructura básica de red que implica solamente una unidad de tratamiento, el Modelo $BNS-r$ se reduce a un Modelo de programación lineal $BNS-1$. Este resultado es significativo porque pone en evidencia que, sin importar el número de contaminantes o de corrientes efluentes a ser tratados en una superestructura básica de red con una unidad de tratamiento, la optimización puede ser realizada a optimalidad global o mostrar ser no factible resolviendo un solo problema de PL. Este resultado fue presentado inicialmente por Zamora et al. (1999b).

Otro resultado interesante proviene de la aplicación del esquema de reducción en la optimización de una superestructura básica de red, que involucra dos unidades de tratamiento. En este caso, el Modelo $BNS-r$ se reduce al Modelo $BNS-2$, que incluye solamente una variable fraccional en los términos bilineales. Por ejemplo, una vez que las ecuaciones en (3.4) se hayan utilizado en el esquema de reducción para generar el Modelo $BNS-2$, para la optimización de una superestructura básica de red que exhibe un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, sólo una variable fraccional, $\alpha_{1,2}$ o $\alpha_{1,e}$, permanece como complicada en las variables de los términos bilineales del modelo. Como una consecuencia, el Modelo $BNS-2$ resulta ser un modelo de programación matemática estructurado que se puede reducir fácilmente a un Modelo de programación lineal, $BNS-2L$, asignando un valor fijo a la única variable fraccional complicada remanente. Este resultado sugiere fuertemente el siguiente enfoque de optimización heurístico-paramétrico en dos fases, para la

optimización global no determinista de superestructuras básicas de red, que implican dos unidades de tratamiento.

3.3.3.a Enfoque heurístico-paramétrico de optimización para una superestructura básica de red 1-2

Inicialización

Paso 1. Fijar $t^* = \infty$, $\alpha_{1,2}^* = \infty$

Fijar $\alpha = 1$, y especifique el tamaño del paso de búsqueda, $\Delta\alpha$.

Fase 1 (búsqueda de PL)

Paso 2. Resolver el Modelo de PL-BNS-2L, generado con $\alpha_{1,2} = \alpha$. Si el Modelo BNS-2L resulta ser no factible ir al paso 7.

Paso 3. Si la solución óptima del Modelo BNS-2L presenta un valor de la función objetivo, $t_{2L}^* < t^*$, entonces fijar $t^* = t_{2L}^*$, y $\alpha_{1,2}^* = \alpha$.

Fase 2 (búsqueda de PNL)

Paso 4. Resuelva el Modelo de PNL-BNS-2 de la solución óptima del Modelo BNS-2L.

Paso 5. Si la solución óptima del Modelo BNS-2 presenta un valor de la función objetivo $t_2^* < t^*$, con un valor óptimo asociado de la variable fraccional $\hat{\alpha}_{1,2}$, entonces fijar $t^* = t_2^*$ y $\alpha_{1,2}^* = \hat{\alpha}_{1,2}$.

Paso 6. Fijar $\alpha = \alpha - \Delta\alpha$. Si $\alpha \geq 0$ ir al paso 2.

Paso de terminación

Paso 7. Si $t^* = \infty$, entonces es probable que, si $\Delta\alpha$ es lo suficientemente pequeño, el Modelo *BNS-2* es no factible. De otra forma, el mejor diseño de red resuelto insertado en la superestructura básica de red exhibe una variable fraccional óptima $\alpha_{1,2}^*$, y un costo total de tratamiento igual a t^* .

De este modo, el enfoque de solución heurístico-paramétrico presentado, para una superestructura básica de red con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2 es logrado básicamente resolviendo el Modelo *BNS-2*, de una colección de puntos de arranque, generados sistemáticamente a través de la solución de un conjunto de problemas de PL, que son definidos asignando diferentes valores fijos para $\alpha_{1,2}$ en el Modelo *BNS-2*. Una secuencia apropiada de valores para $\alpha_{1,2}$, generados asignando un valor suficientemente pequeño al parámetro $\Delta\alpha$, producirá lo más probablemente un diseño óptimo global de red insertado en la superestructura básica de red o dar evidencia sobre la no factibilidad del Modelo no convexo *BNS-2*.

A expensas de aumentar los recursos computacionales requeridos, el enfoque de solución paramétrica propuesto para la optimización de superestructuras básicas de red se puede extender fácilmente a través de la adición de una serie de lazos anidados correspondientes a transformar a expresiones lineales a cada una de las variables fraccionales en el Modelo *BNS-r*. La Tabla 3.1 presenta el número de variables fraccionales y el número máximo de problemas de PL y de PNL que se resolverán por el enfoque de solución paramétrica en la optimización de una superestructura básica de red, con hasta seis unidades de tratamiento. Estos resultados, que se proporcionan para varios valores del paso de búsqueda, $\Delta\alpha$,

muestran claramente la naturaleza altamente demandante de los recursos computacionales requeridos por la estrategia de búsqueda en el caso del peor panorama. El número máximo de problemas de PL y de PNL, que necesita ser resuelto en el peor de los casos para realizar la exploración sistemática del espacio de búsqueda, aumenta dramáticamente con el número de unidades de tratamiento presentes en la superestructura básica de red; sin embargo, no es una función del número de contaminantes o de corrientes efluentes presentes en el problema.

Consecuentemente, de acuerdo con los resultados presentados en la Tabla 3.1, para mantener el tiempo de cálculo razonablemente acotado, el tamaño del paso de búsqueda necesita ser aumentado en la optimización de superestructuras básicas de red con un número mayor de unidades del tratamiento. Por lo tanto, la eficacia del enfoque de solución heurístico-paramétrico propuesto para determinar diseños óptimos globales puede disminuir cuando aumenta el número de unidades de tratamiento en una superestructura básica de red. A pesar de esta desventaja, el enfoque de solución paramétrico propuesto proporciona una manera robusta y sistemática para explorar el espacio de diseño cubierto por una superestructura básica de red.

Además, es importante enfatizar que la eficacia del enfoque de solución propuesto permanece independiente del número de contaminantes y del número de corrientes efluentes que se tratarán en una superestructura básica de red. También se debe destacar, que dado el estado del arte para la solución de modelos de PL, la determinación de diseños de red factibles en la fase I del enfoque de solución propuesto llega a ser una tarea muy robusta, de tal forma que entrega un punto de arranque factible para la optimización del modelo no convexo $BNS - r$ en la fase 2, o prueba la no factibilidad de este modelo bajo el correspondiente conjunto de valores fijados de la variable fraccional.

De este modo, toda solución óptima obtenida en la fase I proporciona, no sólo el mejor diseño de red de tratamiento realizable asociado a los valores correspondientes de la

variable fraccional, sino también suministra información que es útil para identificar y acotar la región del espacio de búsqueda abarcado, en el cual diseños de red de tratamiento factibles pueden ser encontrados.

Tabla 3.1 Número de Variables Fraccionales Transformadas a Expresiones lineales en el Modelo $BNS - r$, y Número Máximo de Problemas de PL y de PNL a Resolver por el Enfoque de Solución Propuesto

No. de unidades de trat.	No. de variables fraccionales	no. máximo de problemas de PL y PNL explorados						
		$\Delta\alpha=0.05$	$\Delta\alpha=0.1$	$\Delta\alpha=0.2$	$\Delta\alpha=0.25$	$\Delta\alpha=0.3\bar{3}$	$\Delta\alpha=0.5$	$\Delta\alpha=1$
1	0	1	1	1	1	1	1	1
2	1	21	11	6	5	4	3	2
3	3	4,851	726	126	75	40	18	6
4	6	8.59×10^6	208×10^3	7,056	2,625	800	180	24
5	10	91.3×10^9	209×10^6	889×10^3	184×10^3	28,000	2700	120
6	15	4.9×10^{15}	627×10^9	224×10^6	23.2×10^6	1.57×10^6	680×10^3	720

3.3.3.b Modelos de optimización $BNS-1$, $BNS-2$ y $BNS-3$

El uso del procedimiento heurístico-paramétrico de optimización se aplica a la solución de siete problemas de diseño que incluyen hasta cinco contaminantes y siete corrientes efluentes. Los Modelos de optimización de superestructura básica de red involucrando una, dos y tres unidades de tratamiento $BNS-1$, $BNS-2$ y $BNS-3$ respectivamente, se presentan en el apéndice A.

3.4 Ejemplos Ilustrativos

3.4.1 Ejemplo 3.1 (Wang and Smith, 1994b)

Considere el diseño de una red de tratamiento de efluentes que implica una unidad de tratamiento y un solo contaminante, A. Los flujos de las corrientes efluentes y las concentraciones de entrada al sistema se dan en la Tabla 3.2. La unidad del tratamiento tiene una relación de remoción $R_{A,1} = 0.99$ para el contaminante A presente en las corrientes efluentes. Es permitido un máximo de concentración del contaminante de $c_{A,e}^U = 20$ ppm en el punto de descarga de la red. Se supone una disminución continua de los costos de tratamiento con la disminución del flujo a través de la unidad de tratamiento.

La Figura 3.4 presenta la red óptima de tratamiento de efluentes para este ejemplo. Algunos requerimientos adicionales sobre el tratamiento y diseños alternativos del sistema pueden ser obtenidos muy fácilmente resolviendo el Modelo *BNS-1* bajo diferentes escenarios.

Tabla 3.2 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 3.1

número de corriente	flujo (t/h)	concentración de contaminante A (ppm)
1	40	400
2	30	100
3	20	30

Por ejemplo, la Figura 3.5 presenta el flujo mínimo requerido a tratamiento para lograr diferentes valores de límite ambiental para la concentración de contaminante en la descarga. Los cambios en la pendiente en la Figura 3.5 se relacionan con los cambios en la población de las corrientes que necesitan ser tratadas para alcanzar el límite ambiental especificado. De este modo, el diseño de red óptimo que corresponde a los límites ambientales por arriba de 41.778 ppm trata solamente una fracción de la corriente 1.

Diseños óptimos que corresponden a los límites ambientales entre 8.778 y 41.778 ppm incluyen en el tratamiento la corriente 1 y una fracción de la corriente 2. Finalmente, diseños óptimos que corresponden a los límites ambientales entre 2.178 y 8.778 ppm se incluyen en el tratamiento a las corrientes 1, 2 y una fracción de la corriente 3. Según la expresión (3.17), la concentración más baja del contaminante que se puede alcanzar en el punto de la descarga es $c_{A,e} = 2.178$ ppm. Este escenario corresponde al caso en el cual las tres corrientes efluentes se tratan completamente. Para valores de límite ambiental por debajo de 2.178 ppm, el Modelo *BNS-1* llega a ser no factible, significando que la superestructura básica de red asociada no contiene un diseño de red permitido. Para alcanzar una concentración más baja del contaminante en el punto de la descarga, sería requerida una corriente de reciclo o una segunda unidad del tratamiento.

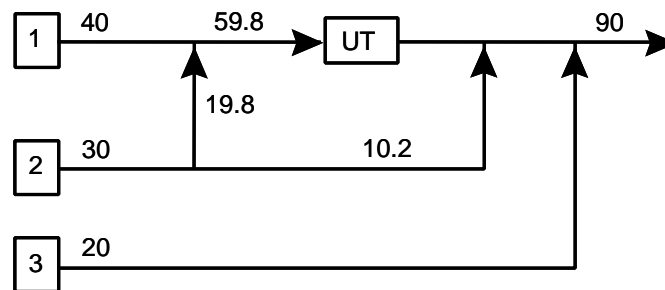


Figura 3.4 Red óptima de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.1

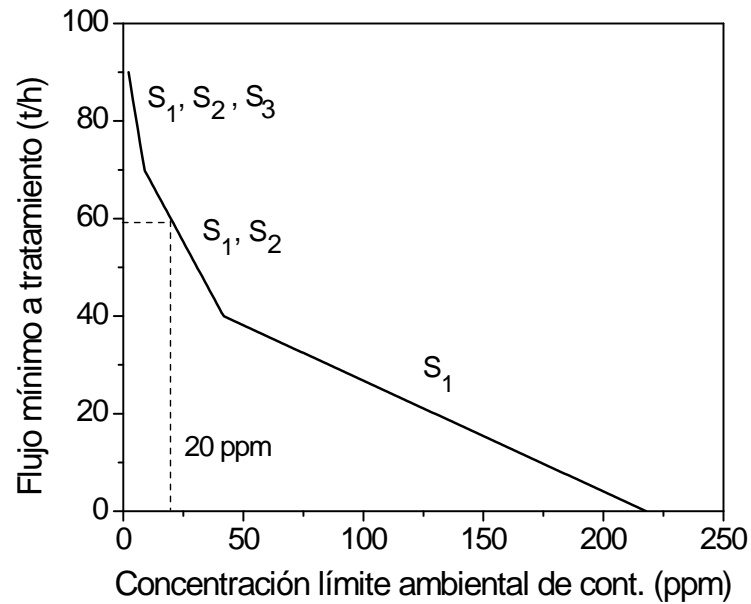


Figura 3.5 Flujo mínimo a tratamiento para diferentes concentraciones límite ambiental en el Ejemplo 3.1

La Figura 3.6 ilustra el efecto de la restricción en la concentración máxima de contaminante en la entrada de la unidad del tratamiento que tendría sobre el flujo mínimo a tratamiento. Esta figura muestra que una concentración máxima en la entrada por arriba de 300.67 ppm no tiene ningún efecto en el flujo mínimo a tratamiento. Para concentraciones máximas de entrada por abajo de 300.67 ppm, el flujo mínimo a tratamiento aumenta con relación a la disminución de la concentración máxima de entrada a un mínimo de 209.19 ppm, abajo del cual el Modelo *BNS-I* llega a ser no factible.

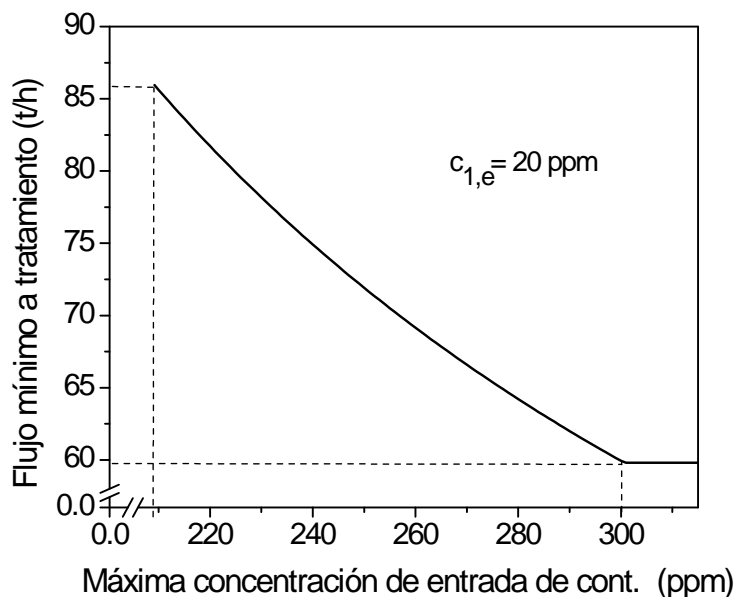


Figura 3.6 Flujo mínimo a tratamiento para diferentes concentraciones máximas de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento en el Ejemplo 3.1

3.4.2 Ejemplo 3.2

El Ejemplo 3.2 considera un problema de diseño que implica una unidad del tratamiento, siete corrientes efluentes y cinco contaminantes nombrados como, A, B, C, D y E. Los flujos de las corrientes efluentes y las concentraciones de los contaminantes se dan en la Tabla 3.3. Para propósitos ilustrativos se asume que la unidad de tratamiento disponible puede remover los cinco contaminantes, de acuerdo con la información de relación de remoción proporcionada en la Tabla 3.4. Los límites ambientales de concentración para los contaminantes son 1000, 500, 150, 400 y 600 ppm, respectivamente. Se supone que los costos de tratamiento son proporcionales al flujo tratado.

Tabla 3.3 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 3.2

número de corriente	flujo (t/h)	concentración de contaminante (ppm)				
		A	B	C	D	E
1	18	1390	10	250	200	400
2	25	14000	110	400	600	2800
3	50	25	100	1350	2500	3115
4	60	8550	800	45	220	230
5	36	500	300	600	500	500
6	12	50	1500	400	200	100
7	8	2300	12500	200	1000	200

Tabla 3.4 Relaciones de Remoción (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 3.2

proceso de tratamiento	contaminante				
	A	B	C	D	E
UT	99	70	80	60	55

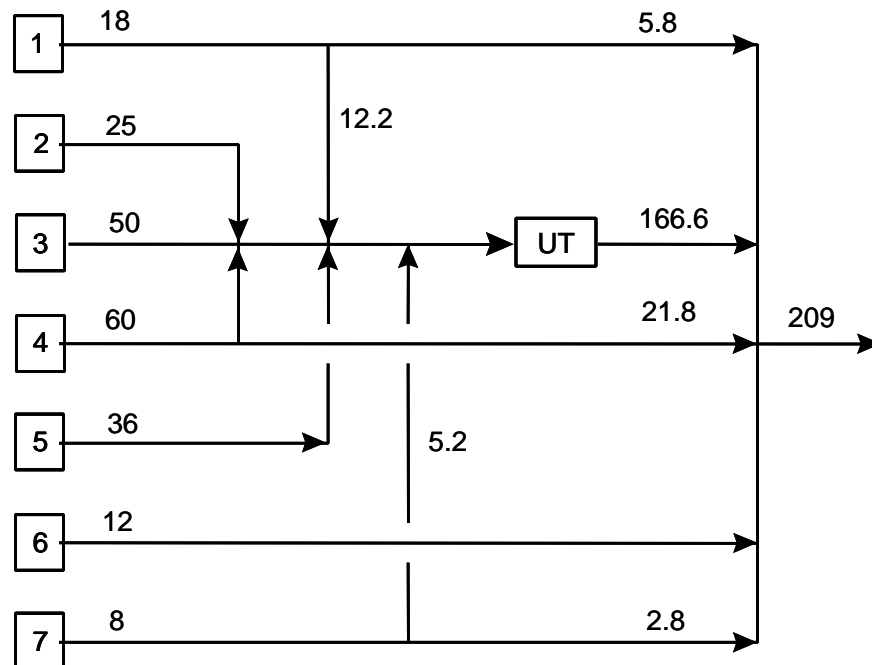


Figura 3.7 Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.2

La Figura 3.7 presenta el diseño de red óptimo para el Ejemplo 3.2. El flujo mínimo a tratamiento en este caso corresponde a 166.6 t/h. En el diseño de la red, las corrientes 2, 3 y 5 se tratan completamente; las corrientes 1, 4, y 7 se tratan parcialmente y la corriente 6 se desvía al punto de descarga de la red. Las concentraciones de los contaminantes en la descarga son 1000, 500, 137.7, 386.4 y 600 ppm. Por lo tanto, los contaminantes A, B y E se liberan al ambiente en sus límites de concentración establecidos.

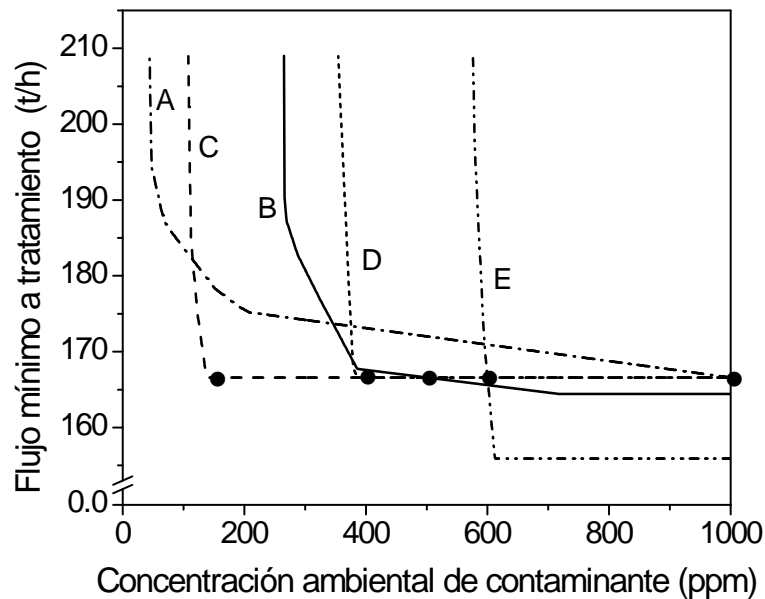


Figura 3.8 Flujo mínimo a tratamiento para diferentes escenarios de concentración límite ambiental de contaminantes en el Ejemplo 3.2

La Figura 3.8 presenta cinco curvas diferentes, cada una de ellas generada independientemente, con el propósito de cuantificar el flujo mínimo a tratamiento que sería requerido bajo una variedad de escenarios hipotéticos, en los cuales el límite ambiental de concentración de uno de los contaminantes se ajusta a diferentes valores, mientras que todo el resto permanece sin cambio. Un punto en las curvas indica el límite de concentración utilizado en la solución del caso base del Ejemplo 3.2.

Observe que para este ejemplo, una reducción moderada en los límites ambientales de concentración de los contaminantes A y B producirían solamente un aumento pequeño en los costos de tratamiento. Por otra parte, un ajuste ligero en los límites de concentración para los contaminantes C, D, y particularmente para el contaminante E causaría un aumento significativo en costos de tratamiento. De acuerdo con la expresión en (3.17), las concentraciones de contaminante mínimas alcanzables son 44.32, 265.17, 107.85, 354.45 y 576.07 ppm para los contaminantes A, B, C, D y E, respectivamente.

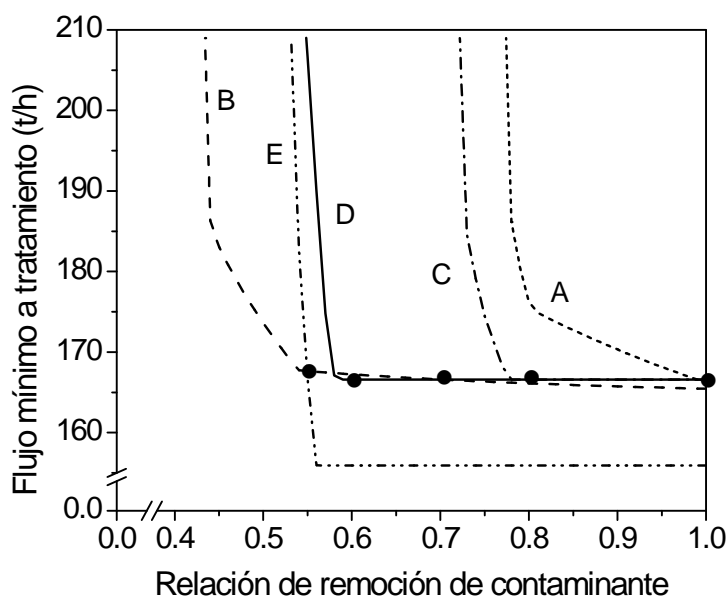


Figura 3.9 Flujo mínimo a tratamiento para conjuntos diferentes de relaciones de remoción en las unidades de tratamiento en el Ejemplo 3.2

La Figura 3.9 también presenta cinco curvas de flujo mínimo a tratamiento. Sin embargo, esta vez el único parámetro que se ha variado para obtener cada una de las curvas es la relación de remoción de la unidad de tratamiento correspondiente a un contaminante dado.

Un punto en las curvas indica las relaciones de remoción utilizadas en la solución del Ejemplo 3.2. Los valores operacionales mínimos identificados de las relaciones de remoción en la unidad del tratamiento son: 0.775, 0.435, 0.722, 0.549 y 0.532 para los contaminantes A, B, C, D, y E, respectivamente. Por debajo de cualquiera de estos valores particulares, la operación de tratamiento llega a ser no factible con los sistemas de tratamiento insertados en la correspondiente superestructura básica de red. Además, si las relaciones de remoción del Ejemplo 3.2 se toman como referencia, entonces la operación de la unidad de tratamiento con respecto al contaminante E llega a ser crítica; un deterioro menor en la relación de remoción del contaminante E aumentaría considerablemente los costos de tratamiento. Además, un detrimento en 3.27% en la relación de remoción de este contaminante sería suficiente para hacer la operación de tratamiento no factible.

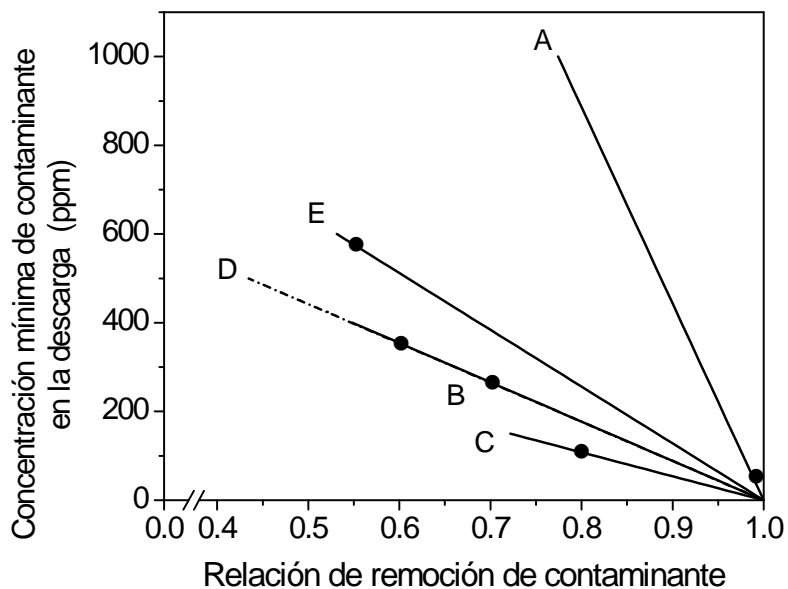


Figura 3.10 Concentración mínima de contaminante en la descarga, para conjuntos diferentes de relaciones de remoción de contaminantes en las unidades de tratamiento en el Ejemplo 3.2

La Figura 3.10 presenta la concentración mínima de contaminante que se podría alcanzar en el punto de descarga bajo diferentes valores de las relaciones de remoción de los contaminantes. Observe que los segmentos de línea en la Figura 3.10 terminan arriba en el lado izquierdo, en las correspondientes relaciones de remoción mínimas operacionales.

En la Figura 3.11 se muestran siete curvas, representando el flujo mínimo a tratamiento que sería requerido bajo diferentes escenarios, en los cuales uno de los flujos de las corrientes efluentes se varían a la vez. Un punto en las curvas indica el caso base de los flujos de efluentes, según lo utilizado en la solución del Ejemplo 3.2. Una vez más, varios aspectos y conclusiones pueden ser puntualizados si el caso base se toma como referencia.

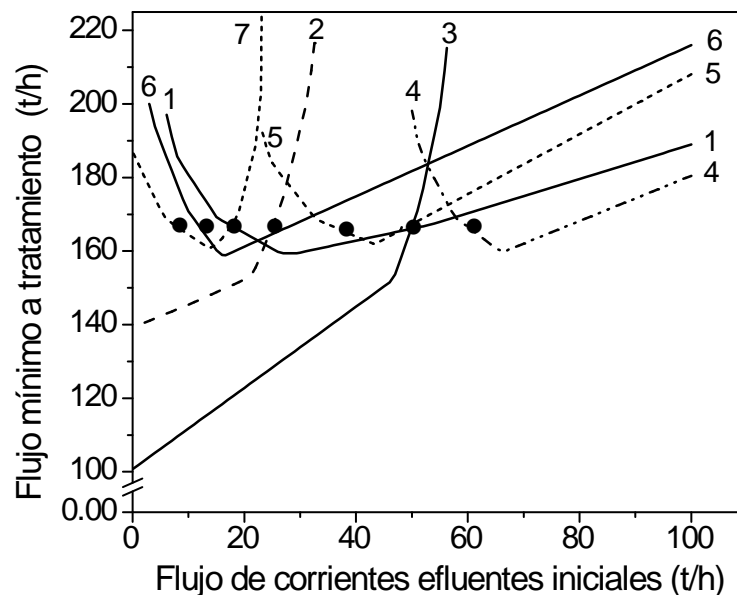


Figura 3.11 Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes escenarios de flujos de corrientes efluentes en el Ejemplo 3.2

Por ejemplo, debido a la imposibilidad de satisfacer el límite ambiental de concentración del contaminante E, el problema de diseño se tornaría no factible si uno de los flujos de las

corrientes efluentes 1, 4, 5 o 6, es forzada por debajo de los valores 6.089, 49.925, 22.660 o 2.987 t/h, respectivamente. Este interesante aspecto confirma el hecho de que la unidad de tratamiento disponible tiene una capacidad de remoción marcadamente pequeña con respecto al contaminante E. En este aspecto, las corrientes 1, 4, 5, 6, y 7 desempeñan un papel crítico en bajar la concentración por dilución del contaminante E.

Además, las curvas de flujo mínimo a tratamiento asociadas con los cambios en flujos de las corrientes efluentes 1, 4, 5, 6, y 7 en la Figura 3.11, indican que un aumento moderado en cualquiera de uno de estos flujos puede conducir a una reducción del flujo a tratamiento. De hecho, estas cinco curvas presentan un mínimo en el flujo a tratamiento en 29.375, 66.281, 43.375, 16.661, y 13.894 t/h, en cada una de las curvas respectivas. También, pueden ser identificados los intervalos de flujo, para las corrientes 1, 4, 5, 6, y 7, en los cuales un diseño de red óptimo se puede lograr con un flujo de efluente a tratamiento por debajo del flujo a tratamiento requerido para el caso base (166.6 t/h). Estos intervalos de flujo son [18-51.56], [60-77.38], [36-48.17], [12-27.90] y [8-17.58] t/h, para las corrientes 1, 4, 5, 6, y 7, respectivamente.

La Figura 3.11 también revela que un aumento en cualquiera de los flujos correspondientes a las corrientes 2 y 3 conducirán a costos de tratamiento más altos. Más significativo es que la Figura 3.11 pone en evidencia que cualquier esfuerzo por disminuir los costos de tratamiento debe considerar la reducción en los flujos de efluentes que corresponden a las corrientes 3 y 2, en este orden de precedencia. Puesto que las corrientes 3 y 2 están en los lugares 2 y 4, con respecto a los flujos de las corrientes efluentes, esta conclusión pudiera no ser inmediata.

3.4.3 Ejemplo 3.3 (Kuo y Smith, 1997)

El Ejemplo 3.3 considera el diseño de una red distribuida de tratamiento de efluentes que implica dos unidades de tratamiento y un solo contaminante, para el cual se establece un límite ambiental de descarga de 30 ppm. La Tabla 3.5 presenta los flujos y concentraciones del contaminante en el conjunto de corrientes efluentes. La Tabla 3.6 proporciona las relaciones de remoción que caracterizan el funcionamiento de dos unidades de tratamiento disponibles. La Tabla 3.6 también especifica concentraciones máximas de contaminante en la entrada de las unidades del tratamiento. Para ambas unidades de tratamiento, los costos de tratamiento son proporcionales al flujo tratado.

Tabla 3.5 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 3.3

número de corriente	flujo (t/h)	concentración de contaminante A (ppm)
1	20	800
2	30	400
3	50	200

Table 3.6 Datos de los Procesos de Tratamiento para el Ejemplo 3.3

proceso de tratamiento	relación de remoción del contaminante A	$cin_{A,K}^U$ (ppm)
1	90	600
2	99	200

En este caso, dos superestructuras básicas de red, que corresponden a los arreglos de las unidades de tratamiento 1-2 y 2-1 se deben analizar para alcanzar el mejor diseño de red. La Figura 3.12 presenta las curvas totales mínimas de flujo a tratar obtenidas de la optimización de las dos superestructuras básicas de red, en términos de las variables fraccionales correspondientes. La Figura 3.12 revela que el diseño de red que minimiza el

flujo total de efluente a tratar exhibe una topología paralela, que se deriva de la solución del Modelo *BNS-2*, con $\alpha_{1,2}^*=0$ para un arreglo 1-2, o $\alpha_{2,1}^*=0$ para un arreglo 2-1. El flujo total mínimo a tratar para el mejor diseño de red, presentado en la Figura 3.13, es 99.495 t/h. En este diseño de red, las corrientes efluentes 1 y 2 se tratan totalmente en la unidad 1, y salvo una pequeña fracción de la corriente 3, toda la corriente es tratada en la unidad 2.

En términos de minimizar el flujo total de efluente a tratar, la Figura 3.12 también da evidencia de la superioridad que los diseños de red con un arreglo 1-2 de unidades de tratamiento tendrían sobre los diseños con un arreglo 2-1 de las unidades de tratamiento.

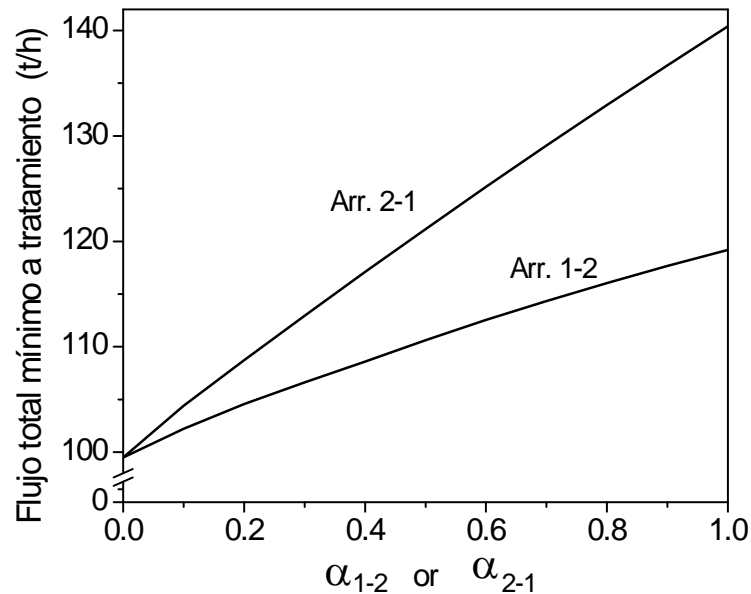


Figura 3.12 Flujo total mínimo a tratamiento de los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.3

Para ambos tipos de arreglos, un flujo mayor entre las unidades de tratamiento conduce a costos de tratamiento más altos. Los diseños de red óptimos seriales en los cuales todo el flujo que se trata en la unidad líder también se trata en la unidad siguiente, $\alpha_{1,2}=1$ o $\alpha_{2,1}=1$, requerirían los flujos totales de efluente a tratar iguales a 119.19 y 140.04 t/h, para los arreglos 1-2 y 2-1, respectivamente.

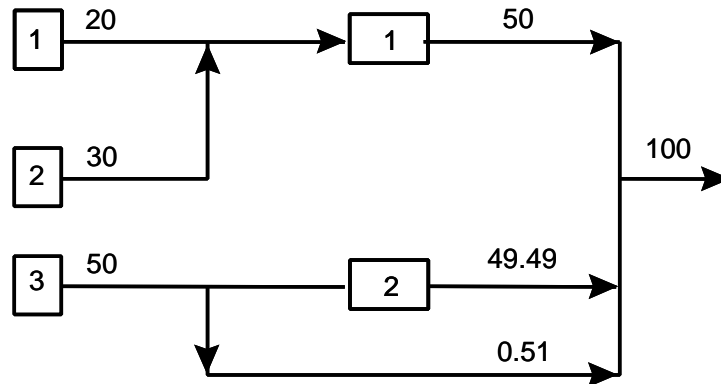


Figura 3.13 Diseño óptimo de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.3

La aplicación de cómo la carga másica total de contaminante se debe distribuir entre las unidades de tratamiento en este ejemplo ha sido tratada con un enfoque gráfico, que optimiza el objetivo de flujo de diseño por Kuo y Smith (1997). La misma pregunta se puede resolver de una manera más rigurosa y más exacta dentro del enfoque de diseño propuesto en este capítulo. La Figura 3.14 muestra el flujo total mínimo a tratamiento requerido por los mejores diseños de red, obtenidos para diferentes cargas másicas de contaminante en la unidad 1 de tratamiento y de la optimización paramétrica de las dos superestructuras básicas de red.

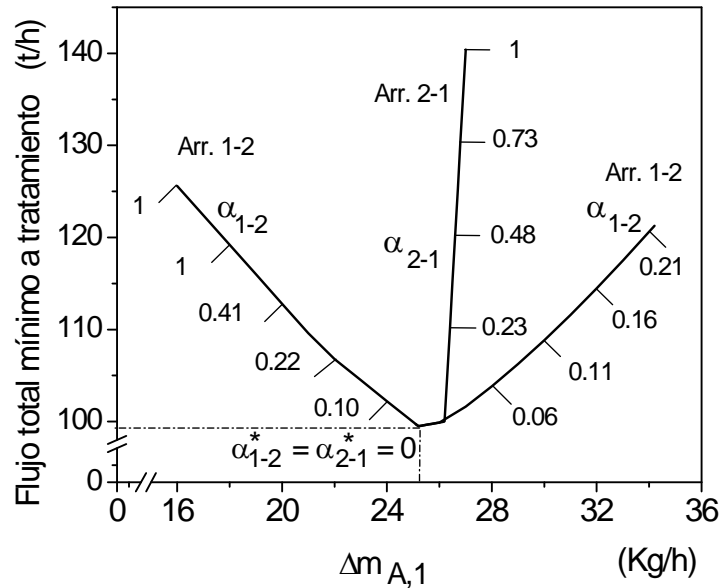


Figura 3.14 Flujo total mínimo a tratamiento para diferente distribución de carga másica en los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red, en el Ejemplo 3.3

Los resultados demuestran que los diseños factibles con un arreglo 1-2 se pueden localizar con una carga másica $\Delta m_{A,1}$ entre 15.895 y 34.2 kg/h. Por otra parte, los diseños factibles con un arreglo 2-1 serán solamente viables con una $\Delta m_{A,1}$ entre 25.1 y 27.0 kg/h. Claramente, las dos unidades de tratamiento son imprescindibles, puesto que un mínimo de 35 kg/h de contaminante se debe remover del conjunto de corrientes efluentes. También, la falta de flexibilidad en el problema por los valores relativamente altos de las cargas másicas para la unidad de tratamiento 1 en diseños factibles con un arreglo 2-1 se debe a la restricción sobre la concentración máxima de contaminante permitida en la entrada de la unidad 2 de tratamiento.

Las dos curvas en la Figura 3.14 presentan un flujo total mínimo a tratamiento en $\Delta m_{A,1}^* = 25.2$ kg/h, con $\alpha_{1,2}^* = 0$ o $\alpha_{2,1}^* = 0$. Este valor establece la mejor distribución de carga másica entre las unidades de tratamiento para este problema, y corresponde al diseño paralelo del sistema presentado en la Figura 3.13.

Es importante mencionar que, aunque la metodología propuesta por Kuo y Smith (1997) produce la topología del sistema mostrada en la Figura 3.13, la tendencia para la mejor distribución de carga másica mostrada en su Figura 3.8, para el caso TP I/TP II=1, no es correcta, ya que señala una tendencia hacia un diseño de red con un valor mucho más bajo de la carga másica de contaminante en la unidad 1.

El efecto del tener diferentes coeficientes de costos de capital y de operación para las unidades de tratamiento también se puede estudiar rigurosa y sistemáticamente con el enfoque de diseño propuesto. La Figura 3.15 presenta las curvas totales mínimas de costo de tratamiento obtenidas para diferentes valores de la suma de los coeficientes de costo para la unidad 1 de tratamiento. Los resultados en la Figura 3.15 para diseños de red con un arreglo 2-1 muestran las curvas de costo total de tratamiento con tendencias muy similares señalando siempre hacia diseños óptimos con topologías paralelas, y un costo total mínimo de tratamiento localizado en $\Delta m_{A,1}^* = 25.2$ kg/h. Por otra parte, los resultados para diseños de red con un arreglo 1-2 muestran las curvas de costo total de tratamiento con un mínimo en diferentes posiciones que varían de $\Delta m_{A,1}^* = 25.2$ a 31.372 kg/h.

El mínimo de cada curva especifica la mejor distribución de carga másica para el problema definido con la suma correspondiente de coeficientes de costo. Un valor asintótico en $\Delta m_{A,1} = 31.372$ kg/h se observa para valores bajos de la suma de los coeficientes de costo para la unidad 1 de tratamiento.

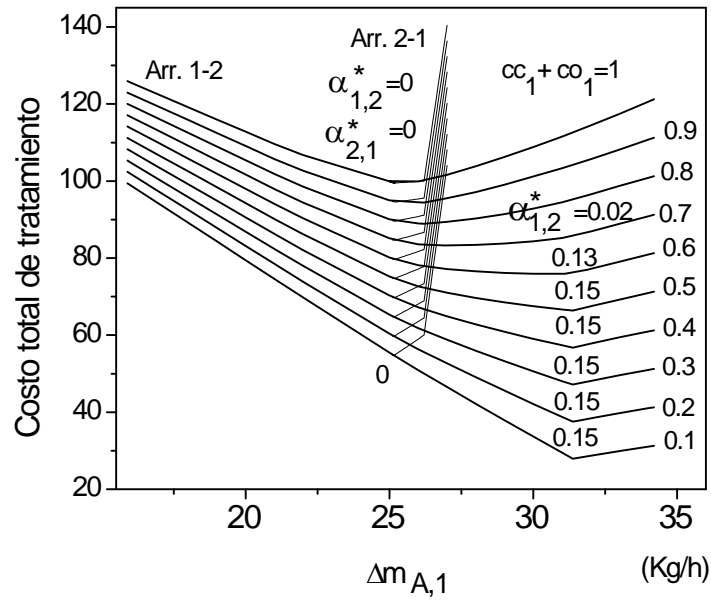


Figura 3.15 Costo total de tratamiento para diferentes coeficientes de costo y distribución de carga másica en el Ejemplo 3.3

Puesto que diseños factibles con un arreglo 1-2 se pueden encontrar con cargas másicas hasta $\Delta m_{A,1} = 34.2$ kg/h, este comportamiento extremo indica que reduciendo el costo de tratamiento en la unidad 1 no puede compensar más los costos derivados de tratamiento en la unidad 2.

La Figura 3.16 presenta la evolución del mejor sistema de tratamiento con un arreglo 1-2, con valores decrecientes de la suma de los coeficientes de costo para la unidad 1 de tratamiento.

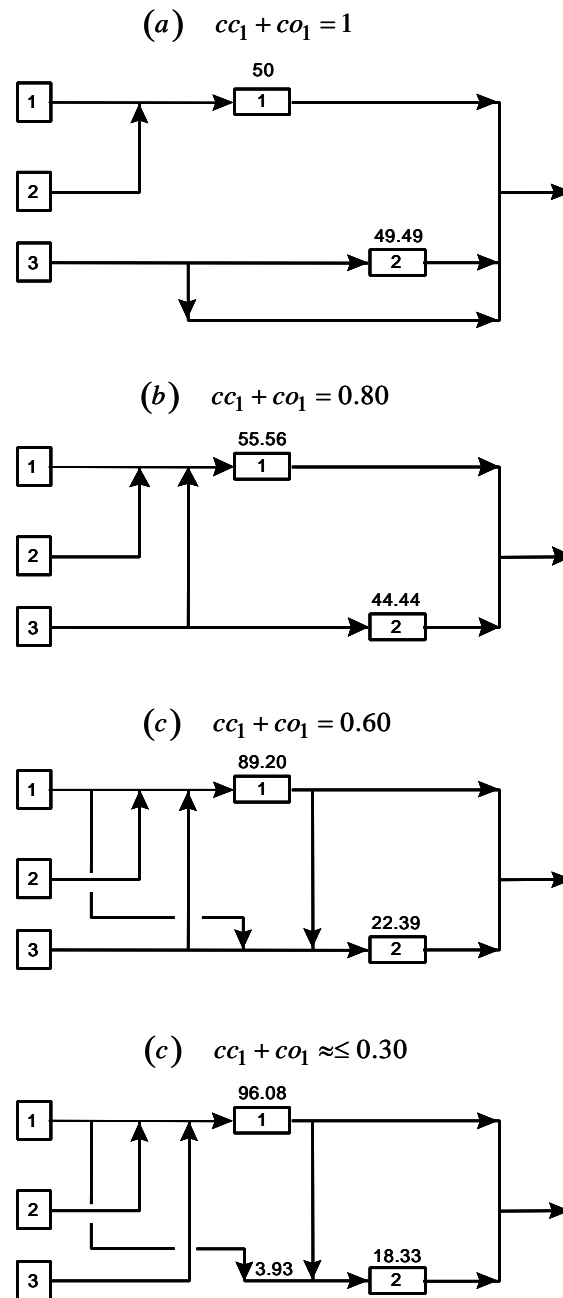


Figura 3.16 Los mejores sistemas de tratamiento con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, para diferentes coeficientes de costo en el Ejemplo 3.3

La Figura 3.17 presenta las curvas de flujo óptimo a tratamiento derivadas de la optimización paramétrica del Modelo *BNS-2*, para la superestructura básica de red con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, y diferentes especificaciones para el valor límite ambiental de contaminante. Cada punto en las curvas de la Figura 3.17 representa la solución óptima del problema de programación lineal obtenido al fijar la variable fraccional $\alpha_{1,2}$ en el Modelo *BNS-2*. Por lo tanto, el punto más bajo en la izquierda de cada una de las curvas se asocia a un diseño óptimo global de la superestructura básica de red con un arreglo 1-2. Los principales resultados relativos a diferentes límites de concentración de contaminante, y sus flujos óptimos globales de tratamiento se presentan en las curvas de costo-beneficio incluidas en la Figura 3.18.

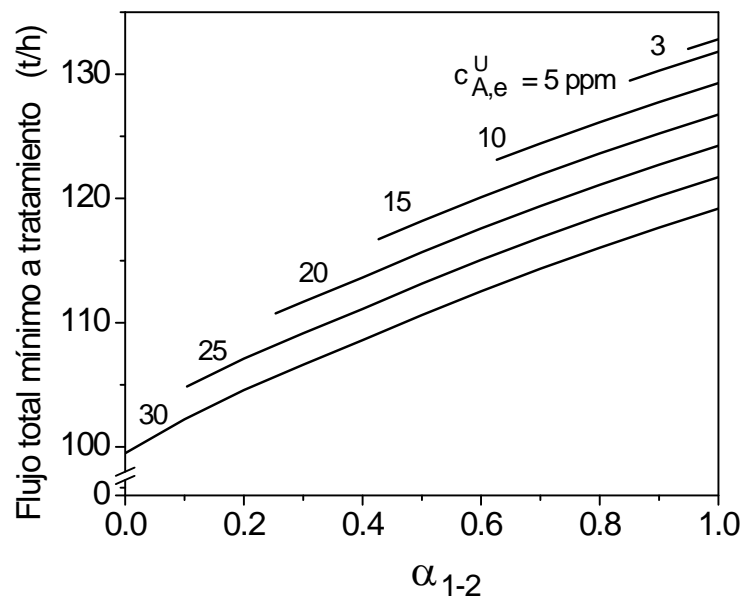


Figura 3.17 Curvas de flujo total mínimo a tratamiento correspondiente a diferentes límites de concentración de contaminante, en el Ejemplo 3.3

La figura 3.18 revela una limitación adicional en los diseños de red, en los cuales la unidad 2 de tratamiento precede la unidad 1 de tratamiento. Puesto que la unidad 2 de tratamiento tolera una concentración de entrada de contaminante a lo más de 200 ppm, una fracción

significativa de las corrientes efluentes entrantes se envía directamente a la unidad 1 de tratamiento. Este hecho restringe la explotación completa de la excelente capacidad de remoción de contaminante en la unidad 2 de tratamiento; también limita el espacio de diseño de los sistemas de tratamiento con un arreglo 2-1 para flujos totales a tratamiento por debajo de 150 t/h.

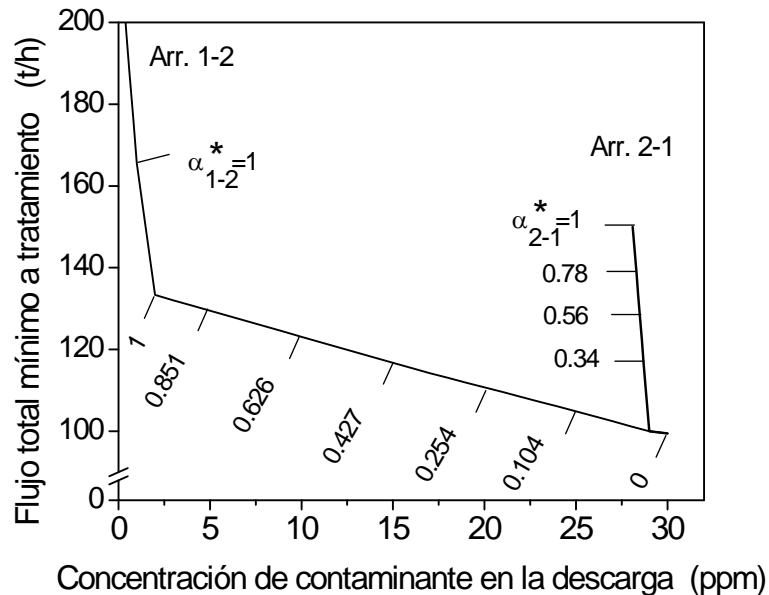


Figura 3.18 Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red, para diferentes límites de concentración de contaminante, en el Ejemplo 3.3

En consecuencia, el valor más bajo del límite ambiental de concentración que es posible alcanzar con diseños de red con un arreglo 2-1 es 28.1 ppm. Por otra parte, se pueden manejar límites ambientales de concentración más pequeños con diseños de red con un arreglo 1-2. La unidad 1 de tratamiento desempeña un doble papel en el diseño, removiendo parte del contaminante y preacondicionando las corrientes efluentes para el tratamiento en la unidad 2. Un límite mínimo de concentración de contaminante de 0.38 ppm se puede alcanzar con un diseño serial, con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2.

3.4.4 Ejemplo 3.4 (Wang y Smith, 1994b)

La Tabla 3.7 presenta los datos de las corrientes de agua para el Ejemplo 3.4, que incluye dos corrientes efluentes y dos contaminantes. La Tabla 3.8 incluye las relaciones de remoción de dos unidades de tratamiento disponibles. El límite ambiental de concentración es 10 ppm para los dos contaminantes. El costo de tratamiento se minimiza para el mínimo flujo tratado.

Tabla 3.7 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 3.4

número de corriente r	flujo (t/h)	concentración de contaminante (ppm)	
		A	B
1	40	100	20
2	40	15	200

Tabla 3.8 Relaciones de Remoción (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 4

proceso de tratamiento	contaminante	
	A	B
1	95	0
2	0	97.6

La Figura 3.19 presenta los resultados obtenidos de la optimización paramétrica de las dos superestructuras básicas de red en este problema.

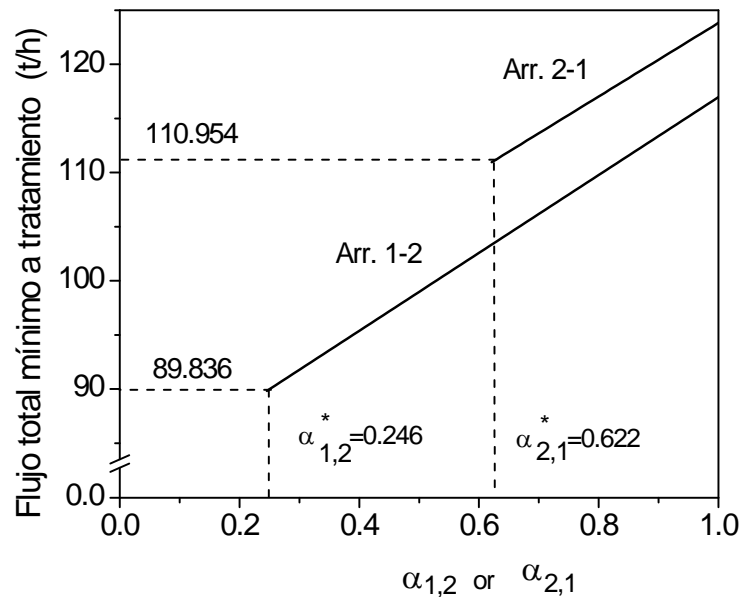


Figura 3.19 Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños insertados en las dos superestructuras básicas de red, en el Ejemplo 3.4

Dos segmentos de línea representan el flujo total mínimo a tratamiento, requerido por los mejores diseños de red insertados en cada una de las superestructuras básicas de red, en términos de la variable fraccional correspondiente. Los diseños factibles con arreglos 1-2 y 2-1 inician a partir de valores para las variables fraccionales de $\alpha_{1,2}^* = 0.246$ y $\alpha_{2,1}^* = 0.622$, respectivamente. De hecho, estos valores de la variable fraccional identifican los diseños óptimos globales insertados en las superestructuras básicas de red respectivas. La Figura 3.19 también demuestra que, en este caso, los diseños con arreglo de las unidades de tratamiento 1-2 son superiores a los diseños con un arreglo 2-1. El mejor diseño de red que exhibe un arreglo 1-2 se muestra en la Figura 3.20, con un flujo total mínimo a tratamiento igual a 89.836 t/h. La mejor solución con un arreglo 2-1 requiere un flujo total mínimo a tratamiento de 110.954 t/h.

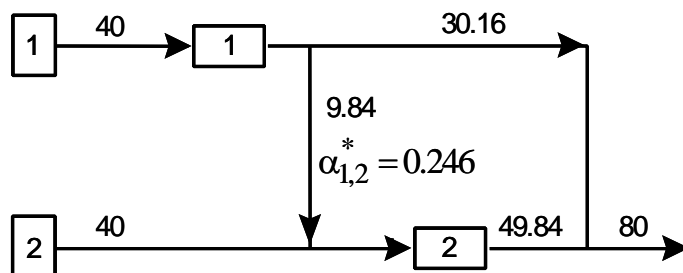


Figura 3.20 Diseño óptimo de la red de tratamiento de efluentes para el Ejemplo 3.4

Este problema también ha sido tratado por Galan y Grossmann (1998). Es interesante observar que, con el enfoque de optimización multi-arranque propuesto por Galan y Grossmann, las dos mejores soluciones descritas en el párrafo anterior también fueron determinadas. Las técnicas multi-arranque son muy útiles y de gran valor. Sin embargo, tiene que ser precisado que las soluciones obtenidas en este trabajo están determinadas dentro de un marco más riguroso y confiable, basado enteramente en la solución de un sistema de problemas de programación lineales, en comparación con la solución intrínsecamente incierta de un conjunto de problemas de programación no convexos, que está implicada en el enfoque de optimización multi-arranque propuesto por Galan y Grossmann.

Como extensión del ejemplo propuesto por Wang y Smith (1994b), se considera ahora el efecto de diferentes valores límite de concentración sobre el flujo total mínimo a tratamiento de los mejores diseños de red insertados en las dos superestructuras básicas de red. Las Figuras 3.21 y 3.22 presentan las superficies de flujo óptimo a tratamiento derivadas de la optimización paramétrica del Modelo *BNS-2*, bajo diferentes escenarios de límite ambiental de concentración de los contaminantes A y B. Cada punto sobre estas superficies especifica el mejor diseño de red asociado al punto correspondiente en el plano de los límites de concentración de contaminante.

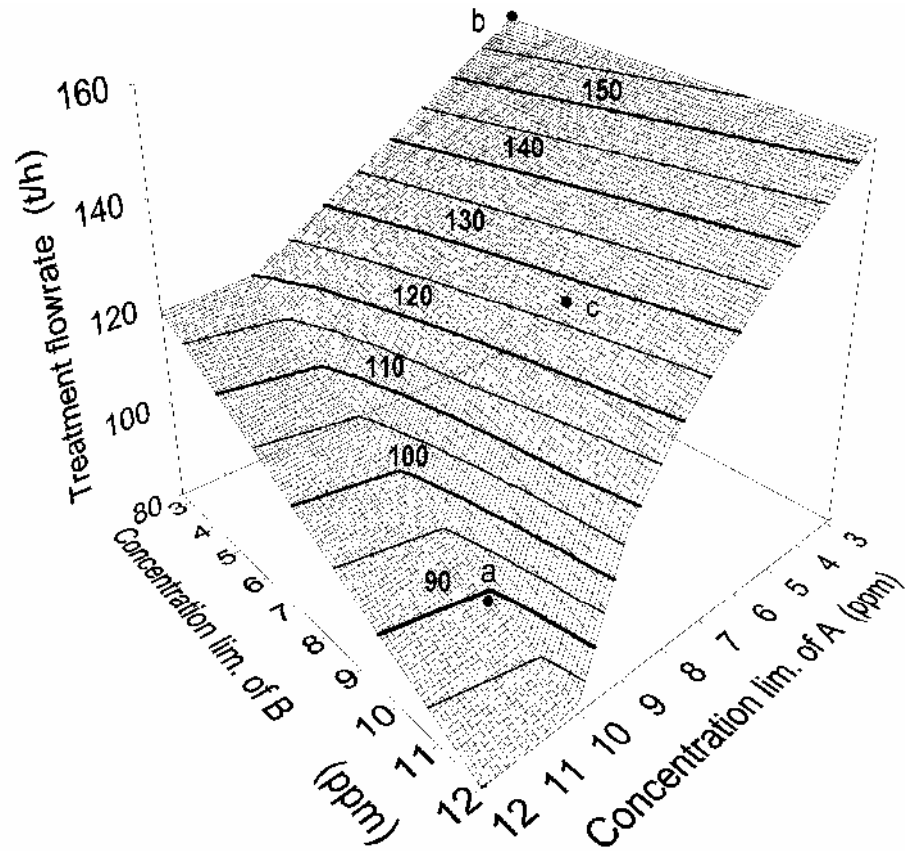


Figura 3.21 Superficie de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de superestructura básica de red, con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2 en el Ejemplo 3.4

Por ejemplo, el punto (a) en la Figura 3.21, en las coordenadas (10,10) ppm representa el mejor diseño para el caso base propuesto por Wang y Smith (1994b), con $\alpha_{1,2}^* = 0.246$ y un flujo total mínimo a tratamiento de 89.836 t/h, según lo presentado en la Figura 3.20. El punto (b) en la Figura 3.21, de coordenadas (2.875, 2.640) ppm representa los límites mínimos de concentración alcanzable, y el mejor diseño de red con un arreglo 1-2 que sea capaz de lograr estos límites de concentración. Los mismos límites mínimos de concentración se pueden también alcanzar con el mejor diseño de red con un arreglo 2-1, representado por el punto (b) en la Figura 3.22.

En las superficies de flujo total mínimo a tratamiento representadas en las Figuras 3.21 y 3.22 se puede observar que demandan diferentes niveles de flujos a tratamiento para el caso de valores bajos de límites de concentración de los contaminantes A y B. Sin embargo, una situación muy notable se presenta de las diferencias de las pendientes de las superficies de flujo total mínimo a tratamiento, con respecto una de la otra. La superficie correspondiente a los diseños óptimos con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, en la Figura 3.21 exhibe un cambio más abrupto en el flujo a tratamiento con respecto a una disminución del límite de la concentración del contaminante A, que a una disminución del límite de concentración del contaminante B.

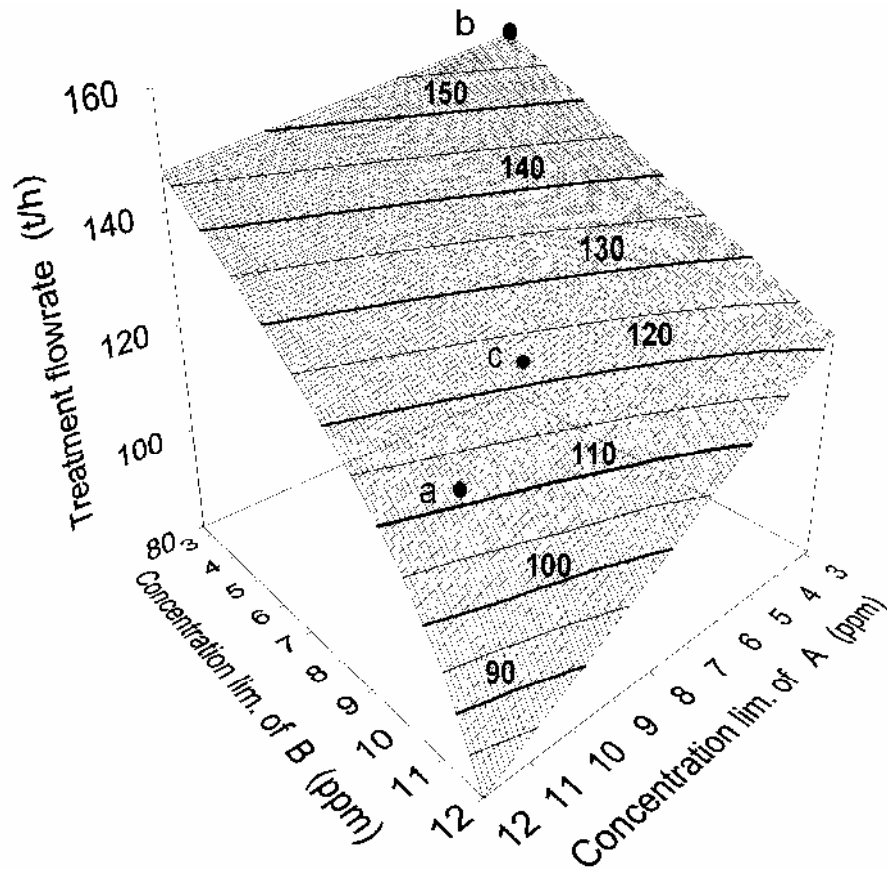


Figura 3.22 Superficie de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de superestructura básica de red, con un arreglo de unidades de tratamiento 2-1 en el Ejemplo 3.4

Un comportamiento opuesto se observa en la superficie de diseños óptimos con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, en el cual cambios mayores en el flujo total a tratamiento se obtienen con los cambios en el límite de concentración del contaminante b. Esta diferencia en tendencias da lugar a regiones óptimas de diseño identificables en el espacio de los límites de concentración de los contaminantes a y b, en el cual en un caso el mejor diseño con un arreglo 1-2, o en otro caso el mejor diseño con un arreglo 2-1 prevalece uno sobre el otro.

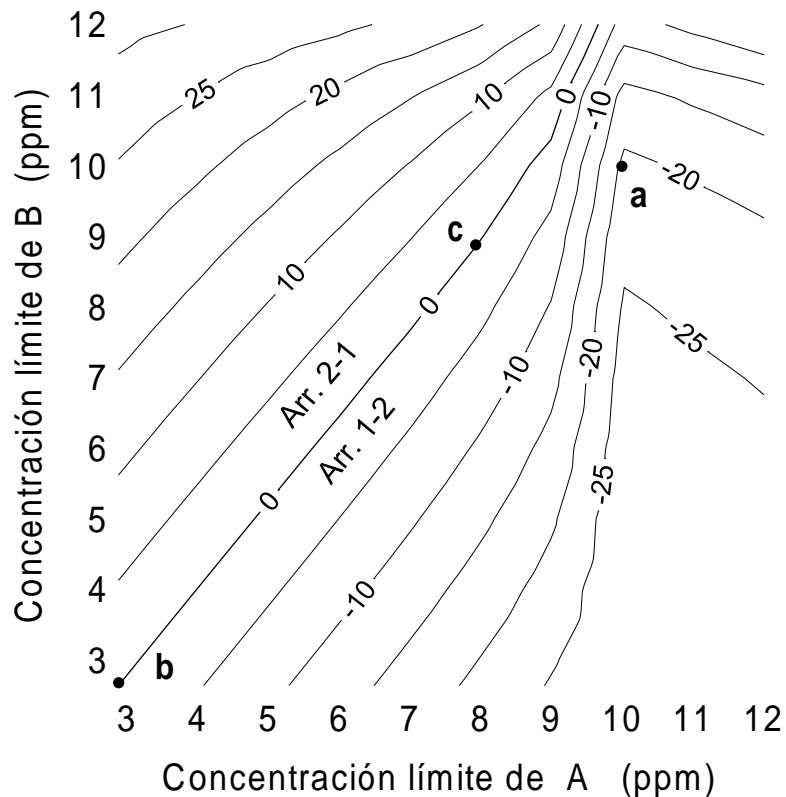


Figura 3.23 Mapa de regiones de diseño para el Ejemplo 3.4

La figura 3.23 representa este resultado a través de las curvas de contorno que representan las diferencias en los flujos totales mínimos de los mejores diseños con arreglos 1-2 y 2-1. Aquí, el punto (a), colocado en los límites de concentración de (10, 10) ppm en una curva

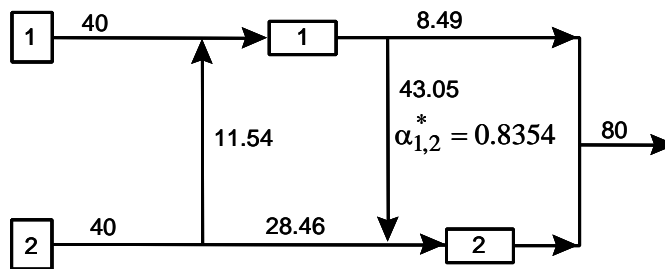
de contorno con un nivel de -21.118 t/h, representa la diferencia en los flujos totales de los mejores diseños insertados en las superestructuras básicas de red con arreglos 1-2 y 2-1 (89.836 y 110.954 t/h). Por lo tanto, un valor negativo en una curva de contorno en la figura 3.23 indica que la mejor solución posible para los límites de concentración en contacto con la curva de contorno tendrá un diseño de red con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2. Similarmente, un valor positivo en una curva de contorno indica que la mejor solución posible para los límites de concentración en contacto con la curva de contorno tendrá un diseño de red con un arreglo de unidades de tratamiento 2-1.

Para valores de límites de concentración situados en la curva de contorno con un nivel igual a cero en la Figura 3.23, las mejores soluciones que emergen de las dos superestructuras básicas de red serán igualmente buenas, en términos de minimizar el flujo total a tratamiento. Para ilustrar este resultado, considere el problema de diseño con límites de concentración dados por el punto (c) en la Figura 3.23, situado en la curva de contorno con un nivel cero en las coordenadas (7.9455 , 8.8800) ppm. Para este caso, las Figuras 3.21 y 3.22 muestran diseños óptimos de red equivalentes disponibles con arreglos 1-2 y 2-1, con un flujo total mínimo a tratamiento igual a 123.05 t/h. La Figura 3.24 presenta estos dos diseños óptimos de red equivalentes.

La Figura 3.23 es también de gran ayuda en términos de establecer la conveniencia de un determinado arreglo de unidades de tratamiento, con respecto a posibles cambios en el límite ambiental de concentración de contaminantes. Por ejemplo, si el caso base con límites de concentración de 10 ppm se considera como referencia, entonces en la Figura 3.23 se observa que cualquier disminución del límite de concentración del contaminante B pondría el problema de diseño de forma marcada, en la región en la cual un diseño óptimo con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2 prevalece sobre un diseño óptimo con un arreglo de unidades de tratamiento 2-1. Sin embargo, una disminución pequeña en el límite de concentración del contaminante A disminuirá o eliminará la ventaja del mejor diseño con un arreglo 1-2 sobre el mejor diseño con un arreglo 2-1. De hecho, una disminución de

2 ppm en el límite de concentración del contaminante A sería más que suficiente para invertir la situación inicial, y situaría el problema de diseño en la región en donde el mejor diseño con un arreglo de unidades de tratamiento 2-1 supera el mejor diseño con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2.

(a) Arr. 1-2 Flujo mínimo a tratamiento = 123.05 t/h



(b) Arr. 2-1 Flujo mínimo a tratamiento = 123.05 t/h

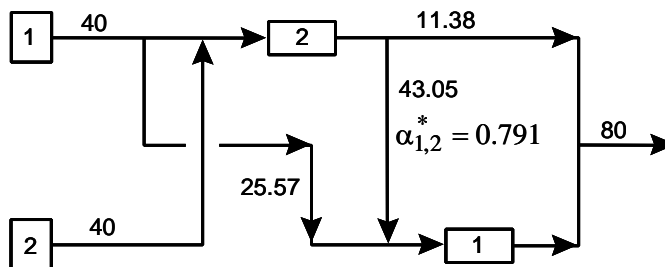


Figura 3.24 Dos diseños de redes óptimas equivalentes de tratamiento de efluentes para $C_{A,e}^U = 7.9455 \text{ ppm}$ y $C_{B,e}^U = 8.8860 \text{ ppm}$ en el Ejemplo 3.4

3.4.5 Ejemplo 3.5

El Ejemplo 3.5 trata una extensión del Ejemplo 2, que incluye siete corrientes efluentes y cinco diferentes contaminantes. Los datos para las corrientes efluentes se dan en la Tabla 3.3, Una segunda unidad de tratamiento se adiciona al problema con las relaciones de remoción de especificadas en la Tabla 3.9. Igualmente, los límites ambientales de concentración de los cinco contaminantes se presentan en la Tabla 3.10. Los costos de tratamiento son asumidos proporcionales al flujo total de tratamiento.

Tabla 3.9 Relaciones de Remoción de Contaminantes (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 3.5

proceso de tratamiento	contaminante				
	A	B	C	D	E
1	99	70	80	60	55
2	90	88	55	85	90

Tabla 3.10 Concentración Límite Ambiental para Contaminantes en el Ejemplo 3.5

contaminante	límite ambiental (ppm)
A	150
B	200
C	140
D	175
E	200

Figura 3.25 presenta las curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de red implantados en las superestructuras básicas de red con arreglos 1-2 y 2-1, en términos de las variables fraccionales con transformaciones lineales correspondientes. La optimización paramétrica muestra en este caso que diseños de red con un arreglo de unidades de tratamiento 2-1 prevalecen sobre diseños de red con un arreglo de unidades de

tratamiento 1-2. Los diseños factibles para los valores iniciales de las variables fraccionales iguales a $\alpha_{1,2}=0.5737$ y $\alpha_{2,1}=0.4300$ corresponde a los arreglos 1-2 y 2-1, respectivamente. Las dos curvas de flujo total a tratamiento en la Figura 3.25 presentan un valor mínimo para el flujo total a tratamiento, situado en $\alpha_{1,2}^*=0.7081$, en la curva para diseños con arreglo 1-2 y en $\alpha_{2,1}^*=0.6524$ en la curva para los diseños con un arreglo 2-1.

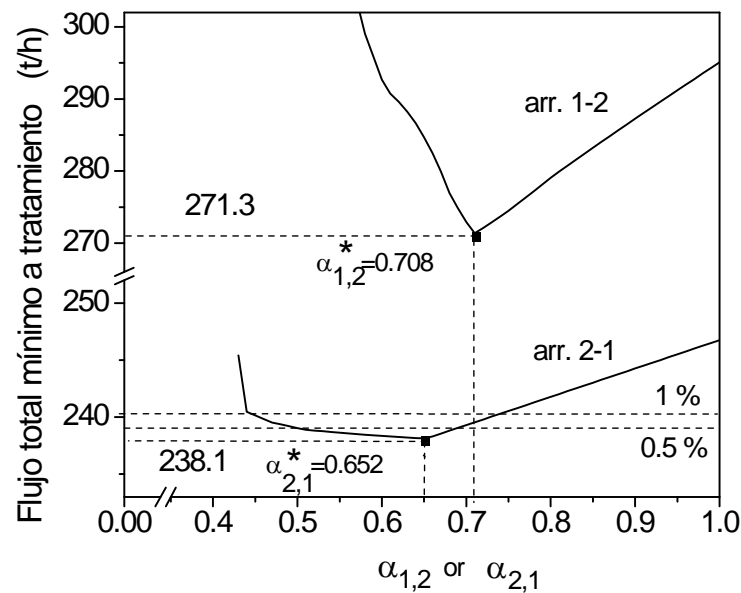
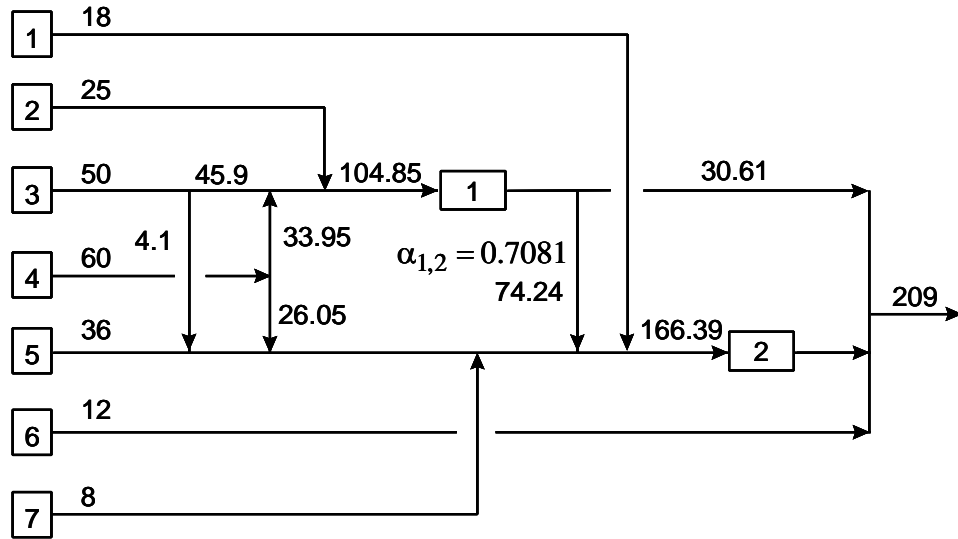


Figura 3.25 Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños de red, insertados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.5

El mejor diseño de red distribuida de tratamiento se muestra en la Figura 3.26(a), con un flujo total a tratamiento de 238.13 t/h y un arreglo de unidades de tratamiento 2-1, en el cual el 65.24% del flujo tratado en la unidad 2 también se trata en la unidad 1. De acuerdo con la Figura 3.25, el mejor sistema de tratamiento con un arreglo 2-1 podría funcionar con diferentes valores $\alpha_{2,1}$ sin incurrir en un aumento alto en los costos totales de tratamiento.

(b) Arr. 1-2. Flujo mínimo a tratamiento = 271.24 t/h



(a) Arr. 2-1. Flujo mínimo a tratamiento = 238.13 t/h

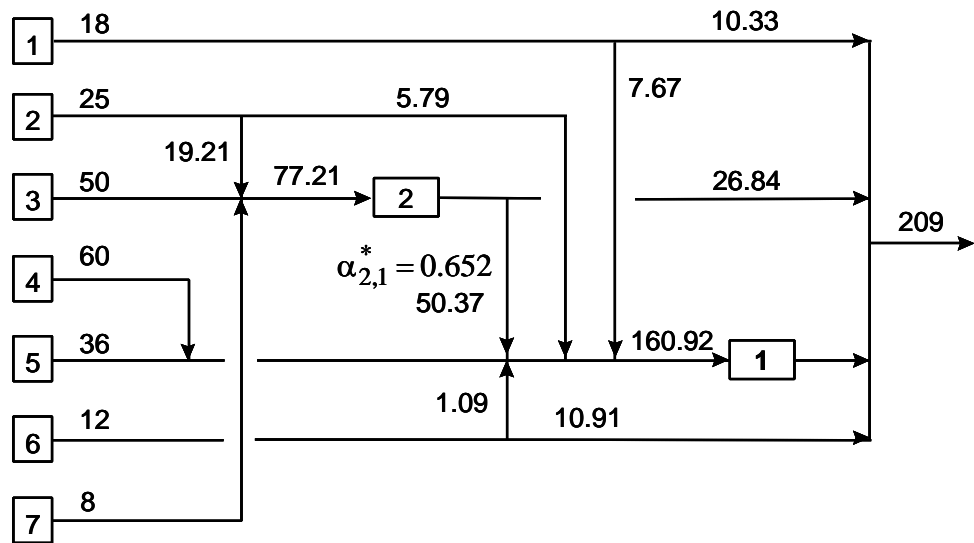


Figura 3.26 Los mejores diseños insertados en las superestructuras básicas de red en el Ejemplo 3.5

Por ejemplo, si $\alpha_{2,1}$ se encuentra entre 0.48 y 0.69, entonces los costos de tratamiento seguirían estando a lo más en 0.5% sobre el costo total mínimo a tratamiento.

En el mejor diseño de red, las corrientes efluentes 3 y 7 se tratan en la unidad 2, líder del arreglo, fracciones de la corriente efluente 2 se tratan en las unidades 1 y 2, las corrientes efluentes 4 y 5 se tratan en la unidad 1, y las corrientes efluentes 1 y 6 se tratan parcialmente en la unidad 1 y parcialmente desviadas al punto de descarga de la red. Los contaminantes A, B, C y E se expulsan al ambiente en sus límites de concentración correspondientes en el diseño de red presentado en la Figura 3.26(a).

Una diferente asignación de corrientes efluentes se observa en la Figura 3.26(b), que presenta el mejor diseño de red con un arreglo de unidades de tratamiento 1-2, con un flujo total a tratamiento de 271.24 t/h. Aquí, el 70.81% del flujo tratado en la unidad 1 se envía a la unidad 2 de tratamiento. La corriente efluente 2 se trata en la unidad 1, fracciones de las corrientes efluentes 3 y 4 se tratan en las unidades 1 y 2, las corrientes efluentes 1, 5 y 7 se tratan en la unidad 2, y la corriente efluente 6 no recibe ningún tratamiento. En este caso, solamente los contaminantes A, C y E se expulsan al ambiente en sus respectivos límites ambientales de concentración.

Las cargas másicas totales mínimas de contaminantes que se removerán por el sistema de tratamiento en este problema son 894.92, 142.93, 83.44, 148.625 y 225.75 kg/hr, para los contaminantes A, B, C, D y E, respectivamente. Por lo tanto, cualquier solución del problema que remueva cargas másicas de los contaminantes mayores o iguales a estas cantidades definirá un sistema de tratamiento factible. Conocer el contaminante que se debe remover de manera preferencial en cada etapa de un sistema de tratamiento, y en qué medida la carga másica total de contaminantes se debe distribuir en problemas multi-contaminantes que implican varias unidades de tratamiento, cada una con capacidad para remover varios contaminantes, se vuelven problemas complejos que dependen de varios aspectos y condiciones.

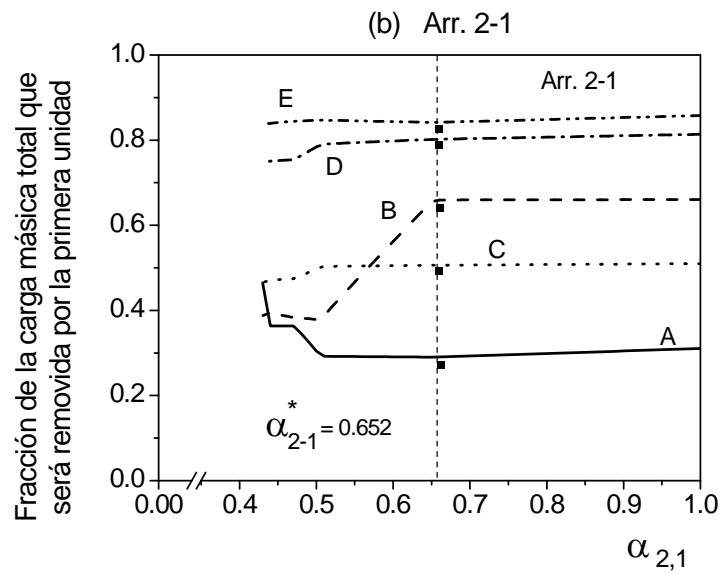
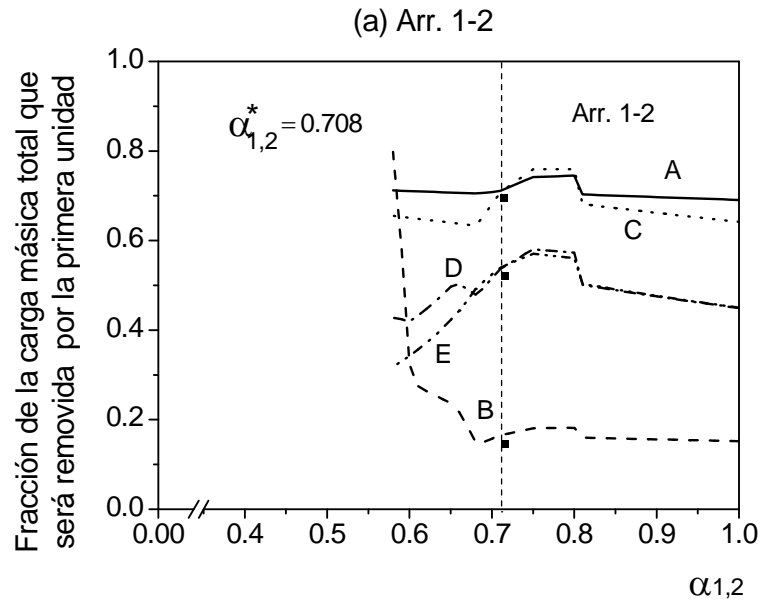


Figura 3.27 Fracción de la carga másica de los contaminantes, que será removida por la primera unidad en los mejores diseños insertados en las superestructuras básicas de red, en el Ejemplo 3.5

Entre estos factores determinantes se pueden incluir, el arreglo de las unidades de tratamiento, las relaciones de remoción de contaminante relativas en las unidades de tratamiento, los valores de costos de capital y operación relativos de las unidades de tratamiento, la distribución y los niveles de concentración de contaminantes en las corrientes efluentes para ser tratados, y los límites ambientales de concentración establecidos para el conjunto de contaminantes.

Las Figuras 3.27(a) y (b) presentan varias curvas con las estrategias óptimas que resultan para la distribución de carga másica entre las unidades de tratamiento, en los mejores sistemas de tratamiento implantados en las dos superestructuras básicas de red para el ejemplo 3.5.

3.4.6 Ejemplo 3.6 (Takama et al., 1980a; Kuo y Smith, 1997)

El Ejemplo 3.6 consiste de un caso de estudio, inicialmente tratado por Takama et al. (1980a) pero modificado por Kuo y Smith (1997) para hacer más realistas varios datos. El caso de estudio incluye tres corrientes efluentes producidas por una refinería, incluyendo los contaminantes H_2S , aceite y sólidos suspendidos (ss), de acuerdo con los datos de las corrientes efluentes presentados en la Tabla 3.11. Las relaciones de remoción de las tres unidades disponibles del tratamiento se presentan en la Tabla 3.12. La unidad 1 de tratamiento es un agotador de agua altamente eficiente en la remoción de H_2S . La unidad 2 de tratamiento es un proceso combinado de coagulación, sedimentación y de filtración, que quita parcialmente los tres contaminantes. La unidad 3 de tratamiento es un separador API que esencialmente quita el aceite y los sólidos suspendidos. Los límites ambientales de concentración de los tres contaminantes son 5, 20 y 100 ppm, respectivamente. Se supone que los costos de tratamiento son proporcionales al flujo total a tratamiento.

Tabla 3.11 Datos de las Corrientes Efluentes para el Ejemplo 3.6

número de corriente	flujo (t/h)	concentración contaminante (ppm)		
		H ₂ S	OIL	SS ^a
1	13.1	390	10	250
2	32.7	16,780	110	400
3	56.5	25	100	350

^aSólidos suspendidos

Tabla 3.12 Relaciones de Remoción de Contaminantes (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 3.6

proceso de tratamiento	contaminante		
	H ₂ S	OIL	SS ^a
1	99.9	0	0
2	90	70	98
3	0	70	50

^aSólidos suspendidos

Debido a que la relación de remoción de un separador API disminuye con la reducción en la concentración de entrada, se descartan de consideración los arreglos de tratamiento donde la unidad 2 precede a la unidad 3. Por lo tanto, solamente los arreglos de unidades de tratamiento 1-3-2, 3-1-2 y 3-2-1 se analizan para la solución de este problema de diseño.

Los mapas de contorno de flujo total mínimo a tratamiento, desarrollados con la optimización paramétrica del Modelo *BNS-r* para las tres superestructuras básicas de red restantes, se presentan en la Figura 3.28. Las porciones de los mapas de contorno en los cuales los contornos de nivel incluidos representan las regiones del diseño en las cuales pueden ser obtenidas redes de tratamiento factibles. Por otra parte, las áreas sombreadas en los mapas corresponden a las regiones de diseño en las cuales ningún diseño factible existe.

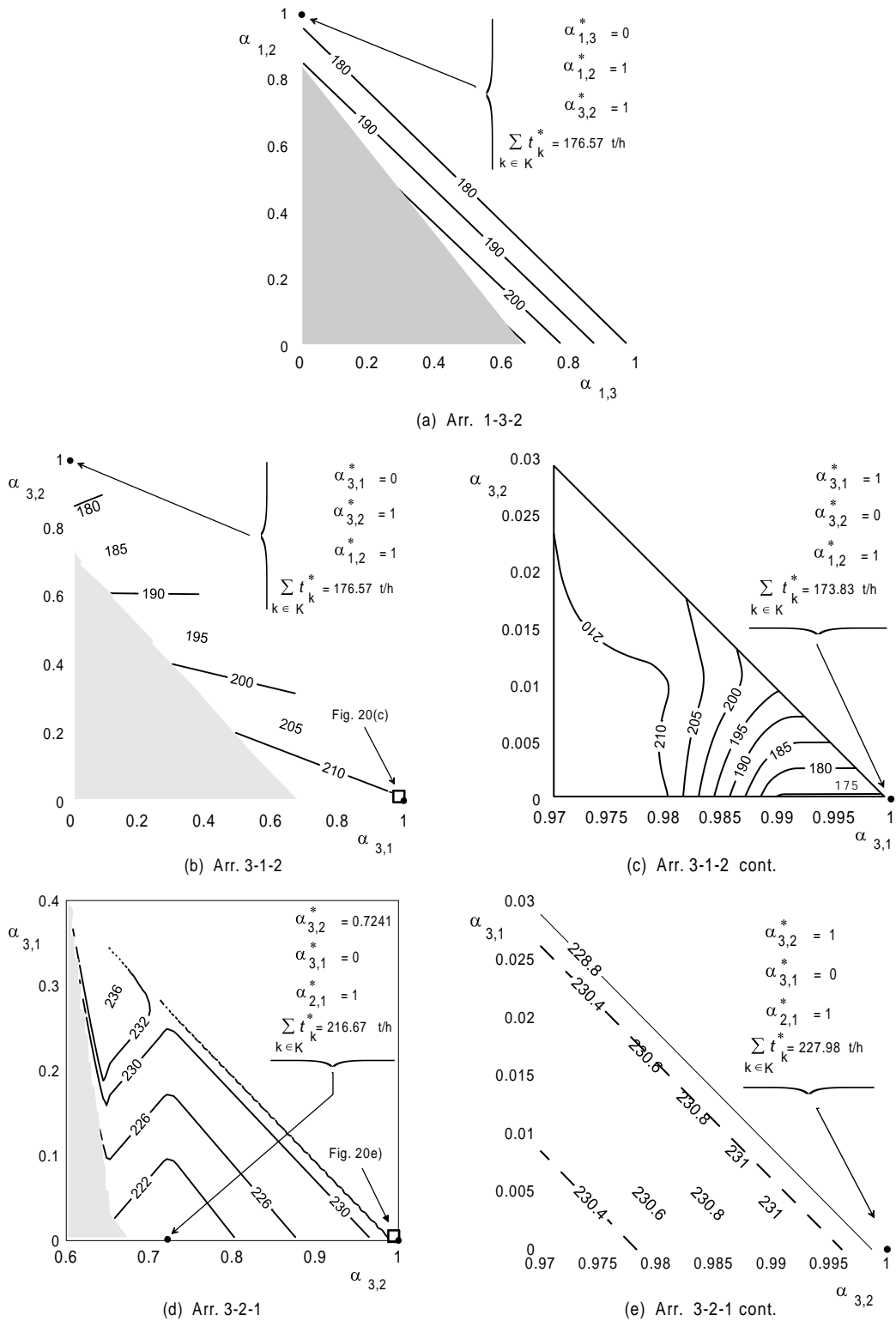


Figura 3.28 Mapas de flujo total mínimo a tratamiento para la solución del Ejemplo 3.6

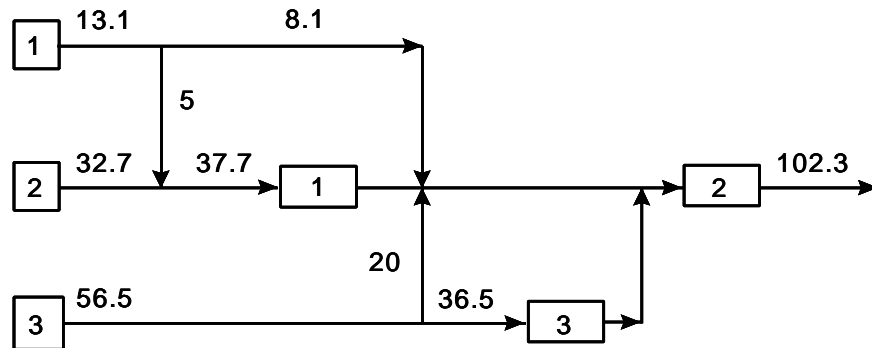
La Figura 3.28(a), producida con la optimización paramétrica sobre las variables fraccionales $\alpha_{1,3}$, $\alpha_{1,2}$ y $\alpha_{3,2}$ indica que el mejor diseño de red insertado en la superestructura básica de red, con un arreglo de unidades de tratamiento 1-3-2 requiere de un flujo total mínimo a tratamiento de 176.57 t/h. Este diseño de red, que se presenta en la Figura 3.29(a), exhibe una sub-red inicial de tratamiento con una topología paralela que incluye las unidades 1 y 3 ($\alpha_{1,3}^* = 0$).

Debido a esta característica estructural, el diseño óptimo de red presentado en la Figura 3.29(a) también se obtiene cuando se realiza la optimización paramétrica de la superestructura básica de red con un arreglo 3-1-2, véase la Figura 3.28(b). Los valores óptimos de las variables fraccionales $\alpha_{1,2}^* = 1$ y $\alpha_{3,2}^* = 1$ en las Figuras 3.28(a) y 3.28(b) especifican simplemente que todo efluente tratado en las unidades 1 y 3 de tratamiento, debe ser tratado después en la unidad 2 de tratamiento.

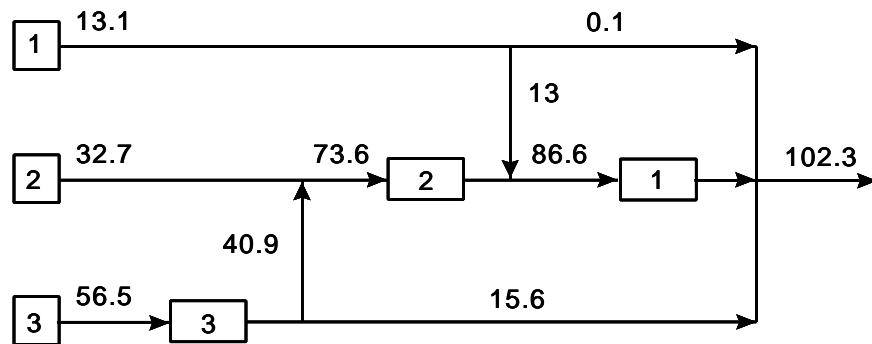
El mapa de flujo total mínimo a tratamiento, derivado de la optimización paramétrica de la superestructura básica de red, con un arreglo de unidades de tratamiento 3-2-1 se presenta en las Figuras 3.28(d) y 3.28(e). Estas figuras muestran que la superestructura básica de red 3-1-2 implanta dos diseños óptimos locales de redes a tratamiento, con flujos totales mínimos a tratamiento de 216.67 y de 227.98 t/h, respectivamente.

El primero de estos diseños de red es presentado en la Figura 3.29(b), y tiene una topología secuencial en la cual 72.41% del flujo tratado en la unidad 3 de tratamiento se envía para tratamiento en la unidad 2 ($\alpha_{3,2}^* = 0.7241$), y todo lo que se trata en la unidad 2, posteriormente es tratado en la unidad 1 ($\alpha_{2,1}^* = 1$).

(a) Arr. 1-3-2. Flujo mínimo a tratamiento 176.6 t/h



(b) Arr. 3-2-1. Flujo mínimo a tratamiento 216.7 t/h



(c) Arr. 3-1-2. Flujo mínimo a tratamiento 173.9 t/h

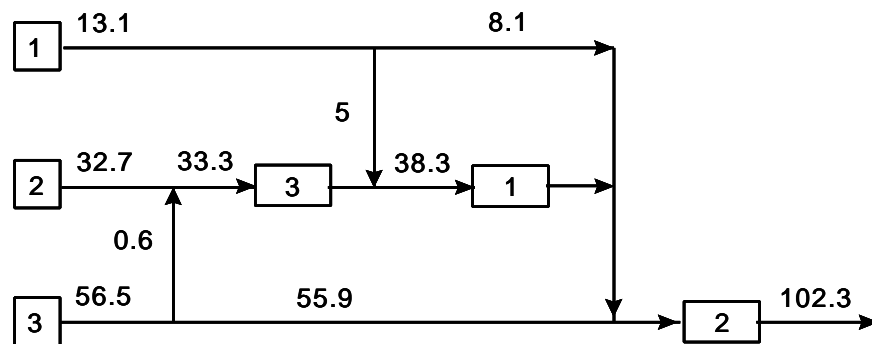


Figura 3.29 Los mejores sistemas de tratamiento con arreglos de unidades 1-3-2, 3-2-1 y 3-1-2 para el Ejemplo 3.6

El mejor diseño de red para este problema se obtiene cuando la optimización paramétrica de la superestructura básica de red, con un arreglo 3-1-2, se realiza sobre la porción inferior derecha de la región de diseño factible en la Figura 3.28(b). Un mapa de flujo total mínimo a tratamiento ampliado se presenta en la Figura 3.28(c), y el mejor diseño de red asociado se muestra en la Figura 3.29(c). Este mejor diseño de red total exhibe una topología secuencial que requiere un flujo total mínimo a tratamiento de 173.83 t/h. En este diseño, todo lo que se trata en la unidad 3 de tratamiento se trata luego en la unidad 1 de tratamiento ($\alpha_{3,1}^* = 1$), y todo el que se trata en la unidad 1 es más adelante tratado en la unidad 2 ($\alpha_{1,2}^* = 1$).

Table 3.13 Funciones de Costo para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 3.6

tasa de retorno anual (%)		10
horas de operación (h/año)		8600
proceso	costo de capital (\$)	costo de operación (\$/h)
1	$16,800 * t^{0.7}$	$1.0 * t$
2	$12,600 * t^{0.7}$	$0.0067 * t$
3	$4,800 * t^{0.7}$	0

Kuo y Smith (1997) resolvieron este caso de estudio utilizando las funciones de costo incluidas en la Tabla 3.13. Es interesante observar que si estas funciones de costo se utilizan para comparar los dos mejores diseños obtenidos en este trabajo, minimizando el flujo total a tratamiento, entonces el diseño de red óptimo con un arreglo de unidades de tratamiento 3-1-2 (flujo total mínimo a tratamiento de 173.83 t/h) resulta ser 1.29% más costoso que el diseño de red óptimo obtenido de la optimización paramétrica de sistemas con un arreglo de unidades de tratamiento 1-3-2 (flujo total mínimo a tratamiento de 176.57 t/h), que de hecho es la solución del problema reportada por Kuo y Smith (1997).

3.4.7 Ejemplo 3.7

El Ejemplo 3.7 es un problema hipotético muy general de diseño que incluye tres unidades de tratamiento y el mismo sistema de siete corrientes efluentes tratados en los Ejemplos 3.2 y 3.5. Los datos de las corrientes efluentes se dan en la Tabla 3.3, las relaciones de remoción de las unidades de tratamiento se presentan en la Tabla 3.14, y los límites ambientales de concentración para los contaminantes se proporcionan en la Tabla 3.15. Como en ejemplos anteriores, los costos de tratamiento se suponen proporcionales al flujo total de tratamiento.

Tabla 3.14 Relaciones de Remoción de Contaminante (%) para los Procesos de Tratamiento en el Ejemplo 3.7

proceso de tratamiento	contaminante				
	A	B	C	D	E
1	99	70	80	60	55
2	90	88	55	85	90
3	45	65	88	80	85

Tabla 3.15 Concentración Límite Ambiental para Contaminantes en el Ejemplo 3.7

contaminante	límite ambiental (ppm)
A	15
B	40
C	45
D	32
E	25

La solución de este problema de diseño requiere la optimización paramétrica de las seis superestructuras básicas de red, que están implicados en este caso.

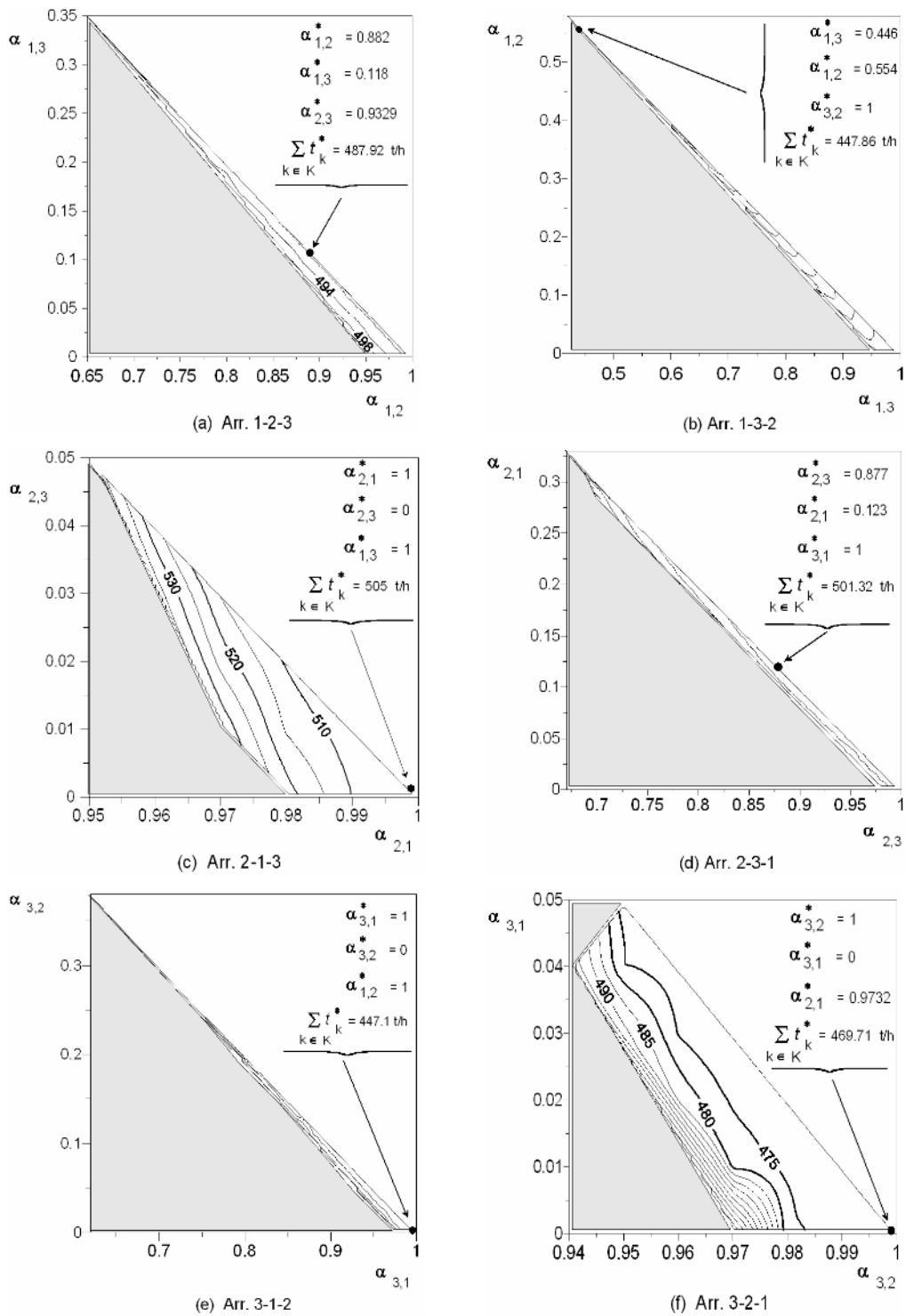


Figure 3.30. Mapas de flujo total mínimo a tratamiento para la solución del Ejemplo 3.7

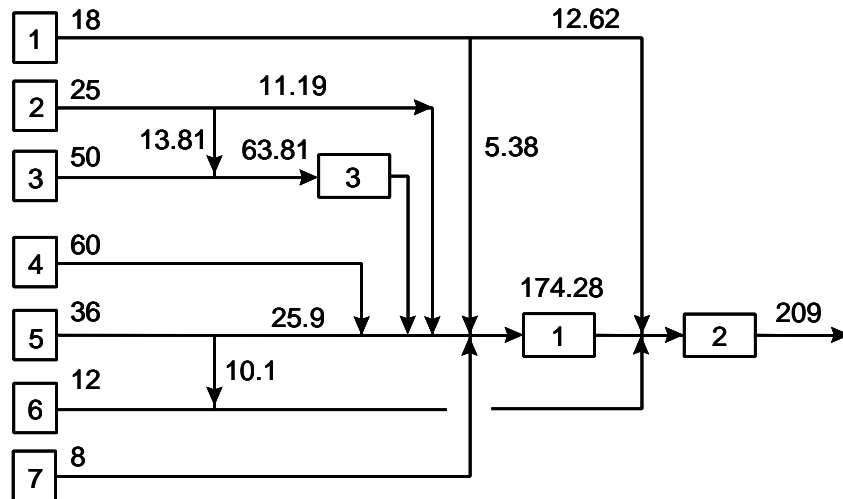
Estas superestructuras corresponden a los arreglos de unidades de tratamiento 1-2-3, 1-3-2, 2-1-3, 2-3-1, 3-1-2 y 3-2-1. Los mapas de contorno de flujo total mínimo a tratamiento obtenidos de la optimización paramétrica de las seis superestructuras básicas de red se presentan en la Figura 3.30.

De manera similar, como en el ejemplo anterior, las porciones de los mapas de contorno en los cuales los contornos de nivel incluidos representan las regiones de diseño en las cuales pueden ser obtenidos sistemas de tratamiento factibles. Por otra parte, las áreas sombreadas en los mapas corresponden a las regiones de diseño en las cuales ningún diseño factible. Un punto en cada uno de los mapas de contorno en la Figura 3.30 señala el mejor diseño asociado a la correspondiente superestructura básica de red.

El flujo total mínimo a tratamiento, de los mejores diseños insertados en las seis superestructuras básicas de red, son 447.09, 447.86, 469.71, 487.92, 501.32 y 505.00 t/h para los arreglos de las unidades de tratamiento 3-1-2, 1-3-2, 3-2-1, 1-2-3, 2-3-1 y 2-1-3, respectivamente. La Figura 3.31 presenta los diseños de red óptimos que corresponden a los arreglos de las unidades de tratamiento 3-1-2 y 1-3-2. Es importante observar que a pesar de las diferencias en los arreglos de las unidades de tratamiento y distribución de las corrientes efluentes, los mejores diseños con arreglos de las unidades de tratamiento 3-1-2 y 1-3-2 difieren solamente en 0.18% en el flujo total a tratamiento.

También, se observa que la unidad 1 de tratamiento maneja un flujo total de 174.3 y de 93.9 t/h en los diseños de red óptimos con arreglos 3-1-2 y 1-3-2, respectivamente. Por otra parte, la unidad 3 de tratamiento procesa un flujo de 63.8 y de 145 t/h en los mejores diseños con arreglos 3-1-2 y 1-3-2, respectivamente. Por lo tanto, un criterio adicional para la selección del arreglo de las unidades de tratamiento en este ejemplo pudo ser la preferencia o conveniencia en la selección de la capacidad de proceso para las unidades 1 y 3 de tratamiento.

(a) Arr 3-1-2. Total treatment flowrate = 447.09 t/h



(b) Arr. 1-3-2. Total treatment flowrate = 447.85 t/h

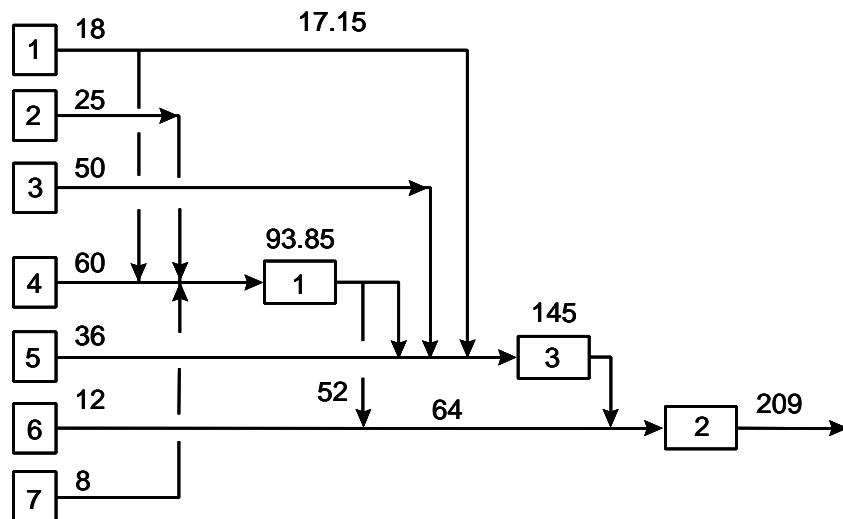


Figura 3.31 Los mejores diseños de red implantados en la superestructura de red básica con arreglos 3-1-2 y 1-3-2 para el Ejemplo 3.7

3.4.8 Desempeño y costo computacional

En la aplicación de técnicas globales de optimización en el desarrollo de diseños óptimos globales, el desempeño eficiente y la cantidad de recursos computacionales requeridos son las preocupaciones importantes. La Tabla 3.16 muestra los flujos totales mínimos a tratamiento asociados con los mejores diseños de red a tratamiento para nueve superestructuras básicas de red implicadas en la solución de cuatro problemas ilustrativos. Los resultados presentados se obtienen con la ejecución del enfoque heurístico-paramétrico de optimización propuesto, con siete valores diferentes del paso de búsqueda, $\Delta\alpha = 1, 1/2, 1/3, 1/4, 1/5, 1/10$ y $1/20$.

Tabla 3.16 Flujos Totales Mínimos a Tratamiento para los Ejemplos 3-6

ejemplo	arreglo	flujo total mínimo a tratamiento (t/h)						
		$\Delta\alpha=0.05$	$\Delta\alpha=0.1$	$\Delta\alpha=0.2$	$\Delta\alpha=0.25$	$\Delta\alpha=0.3\bar{3}$	$\Delta\alpha=0.5$	$\Delta\alpha=1$
3	1-2	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495
3	2-1	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495	99.495
4	1-2	89.836	89.836	89.836	89.836	89.836	89.836	89.836
4	2-1	110.95	110.95	110.95	110.95	110.95	110.95	110.95
5	1-2	271.23	271.23	271.23	271.23	271.23	271.23	271.23
5	2-1	238.13	238.13	238.13	238.13	238.13	238.13	238.13
6	1-3-2	176.56	176.56	176.56	176.56	176.56	176.56	176.56
6	3-1-2	173.83	173.83	173.83	173.83	173.83	173.83	173.83
6	3-2-1	216.66	216.66	216.66	216.66	216.66	216.66	227.98

La naturaleza de la búsqueda sistemática que se realiza, y la consistencia de los resultados obtenidos, con tendencia constante con respecto a la disminución de los valores del tamaño de paso de búsqueda, lleva a concluir que, lo más probable, se ha determinado un diseño óptimo global para cada una de las superestructuras básicas de red analizadas.

Observe también que salvo uno de todos los casos en la Tabla 3.16, el mejor diseño de red fue determinado incluso con el valor más grande del tamaño de paso de búsqueda. Debido a las implicaciones prácticas posibles, este resultado es alentador. La Tabla 3.17 presenta el número real de problemas resueltos de PL y de PNL cuando se realiza la búsqueda

sistemática para diseños de red óptimos globales para los ejemplos ilustrativos 3-6 enlistados.

Tabla 3.17 Número de Problemas de PL y de PNL Resueltos con la Aplicación del Enfoque de Solución Paramétrica para los Ejemplos 3-6

ejemplo	arreglo	número de problemas de PL y de PNL						
		$\Delta\alpha=0.05$	$\Delta\alpha=0.1$	$\Delta\alpha=0.2$	$\Delta\alpha=0.25$	$\Delta\alpha=0.3\bar{3}$	$\Delta\alpha=0.5$	$\Delta\alpha=1$
3	1-2	21	11	6	5	4	3	2
3	2-1	21	11	6	5	4	3	2
4	1-2	17	9	5	5	4	3	2
4	2-1	9	5	3	3	3	3	2
5	1-2	10	6	4	3	3	2	2
5	2-1	13	7	4	4	3	3	2
6	1-3-2	952	178	52	38	24	12	5
6	3-1-2	661	152	45	34	20	12	5
6	3-2-1	445	133	41	29	18	11	5

3.5 Conclusiones

Un esquema de descomposición para una superestructura compleja de red es la base de la metodología propuesta en este capítulo, para el diseño de redes distribuidas de tratamiento de efluentes que no presentan reciclo o recirculación de corrientes. El conjunto de superestructuras básicas de red derivadas del esquema de descomposición presentado, proporciona una manera de particionar el espacio de búsqueda de diseño, y proporciona un conjunto de sub-problemas de diseño de los cuales se obtienen redes distribuidas de tratamiento de efluentes alternativas.

Se han desarrollado modelos estructurados de PNL y de PL, y se han utilizado dentro de un procedimiento heurístico-paramétrico de optimización global, ideado para conducir una búsqueda sistemática de los mejores diseños de red alternativos, implantados en el conjunto de superestructuras básicas de red.

Los resultados en este trabajo ponen en evidencia que, bajo las suposiciones más comúnmente aceptadas, la complejidad de un problema de diseño para una red distribuida de tratamiento de efluentes, sin reciclo o recirculaciones, es aumentada por el número de unidades tratamiento disponibles, pero no por el número de contaminantes o de corrientes efluentes. De hecho, este trabajo ha demostrado que un sub-problema de diseño que implica una superestructura básica de red con una unidad del tratamiento se puede resolver a optimalidad global, o demostrarse no ser factible resolviendo un sólo problema de programación lineal.

El uso del procedimiento heurístico-paramétrico de optimización se ha ilustrado a través de la solución de siete problemas de diseño, que incluyen hasta cinco contaminantes, siete corrientes efluentes, y tres unidades de tratamiento. La solución de estos problemas demuestra que el enfoque de diseño propuesto es muy robusto, y muy útil en la determinación de diseños globales alternativos de red óptimos. Regiones de diseño se han identificado a través del desarrollo de superficies totales mínimas de costos de tratamiento y de mapas de contorno, que establecen el predominio de ciertos arreglos de unidades de tratamiento sobre porciones particulares del espacio de búsqueda de diseño.

Las regiones del espacio de búsqueda de diseño en donde no hay diseños factibles disponibles también se han identificado de una manera muy confiable, también se han determinado distribuciones óptimas de carga másica de contaminante y diseños óptimos equivalentes de una red de tratamiento de efluentes.

CAPÍTULO 4

MODELO MATEMÁTICO ALTERNATIVO PARA LA SÍNTESIS DE REDES DISTRIBUIDAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES

4.1 Introducción

La prevención de la contaminación y el tratamiento de efluentes es una seria preocupación en las industrias de proceso, por las cantidades de recursos que requieren ser gastados por conceptos de adquisición de tecnologías avanzadas y diseño de mejores sistemas de tratamiento de efluentes; la falta de generación de utilidad económica y retorno de inversión por estos conceptos también es motivo de preocupación. Esto hace al tratamiento de aguas efluentes un asunto de importancia fundamental en la mayoría de los sitios industriales. Desde el punto de vista de diseño, el estudio del tratamiento de efluentes se ha centrado recientemente en el desarrollo de sistemas distribuidos tendientes hacia la reducción o eliminación total de descargas efluentes. El impacto de la escasez de agua fresca en los procesos y las regulaciones más estrictas sobre los efluentes industriales ha fomentado la búsqueda de soluciones óptimas para la reutilización y el tratamiento de agua en la industria.

Las complicaciones asociadas con el diseño sistemático de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, por la presencia de no convexidades en las ecuaciones de masa en las corrientes contaminadas y el crecimiento geométrico del número de posibilidades de configuraciones del sistema, han derivado en estudios e investigaciones con diferentes enfoques, metodologías y diversas herramientas computacionales. El propósito es el desarrollo de herramientas o procedimientos automatizados que permitan lograr diseños óptimos con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el diseño.

Estas son algunas de las razones por las cuales en la literatura se puede encontrar preferencia por el uso de técnicas de programación matemática para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, y en general para la síntesis de procesos. Algunas de las causas del incremento de estas preferencias en los últimos años se deben a los avances en la tecnología de cómputo con procesadores cada vez más rápidos y eficientes, al progreso sustancial en los métodos y programas para resolver problemas de optimización y al incremento en la eficiencia de los códigos de optimización por el desarrollo de lenguajes de modelado poderosos, se menciona por ejemplo, el sistema GAMS (General Algebraic modelling system; Brooke et al., 1998).

De cualquier forma, aún cuando las mejores técnicas de optimización se encuentren disponibles, no se puede esperar un desempeño confiable y eficiente en formulaciones arbitrarias de problemas de optimización para la síntesis de procesos. Frecuentemente, para un problema dado, hay varias formulaciones diferentes las cuales parecen ser equivalentes pero en realidad pudieran demandar un esfuerzo computacional diferente. Aún más, una formulación puede llevar a un óptimo global, mientras otra puede llevar a soluciones subóptimas (Kocis y Grossmann, 1989; Biegler et al., 1997; Edgar et al., 2001; Reklaitis, et al., 2002).

Por lo tanto, se puede enfatizar la importancia que puede tener en los resultados la formulación de problemas, por ejemplo, del tipo de programación lineal (PL), programación no lineal (PNL), programación lineal entera-mixta (PLEM), programación no lineal entera-mixta (PNLEM), y otros, los cuales pueden mostrar que la formulación del problema puede ser crítica para una solución eficiente. De manera particular se debe tener cuidado en formulaciones de problemas de PNL, por las no convexidades presentes en estos problemas que puede ocasionar soluciones locales. Es recomendable determinar si formulaciones alternativas pueden superar estas dificultades, de manera que se puedan incluir algunas restricciones en flujos o transformaciones en el modelado del problema para evitar términos bilineales. La forma particular de una formulación de PNL puede tener un gran impacto sobre el desempeño del algoritmo y optimalidad global de la solución obtenida (Drug, 1985; Kocis y Grossmann, 1987, 1988, 1989; Floudas, 1989, 1995, 2000; Biegler et al., 1997; Edgar et al., 2001; Reklaitis et al., 2002).

En este capítulo, se presenta un procedimiento de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, mediante un modelo matemático de optimización alternativo donde los flujos de contaminantes se exhiben de manera explícita, y se utiliza el concepto de partición del espacio de búsqueda de diseño y optimización paramétrica desarrollados en el Capítulo 3. El procedimiento propuesto se utiliza para resolver problemas de programación no lineales, que se presentan en sistemas de tratamiento de efluentes, para evitar algunas dificultades de convergencia (p.ej., singularidades, no convexidades) que se experimentan con esquemas no lineales. Asimismo, se presenta un procedimiento simple para el análisis estructural de sensibilidad para el diseño y toma de decisiones de redes distribuidas de tratamiento de efluentes. También, dentro de los objetivos de este capítulo se busca la aplicación de la metodología de diseño a redes de tratamiento de efluentes, con una complejidad mayor con respecto al capítulo 3, al incluir en las superestructuras de redes básicas hasta cinco unidades de tratamiento.

4.1.1 Antecedentes

El problema de síntesis de redes de tratamiento de efluentes se refiere al proceso de selección óptima de la configuración y parámetros que describen la operación de un sistema determinado, y reducir la concentración de un subconjunto de contaminantes por las unidades de procesamiento de efluentes. La naturaleza no convexa de los modelos matemáticos que describen este tipo de problemas, la capacidad de manejar diferentes contaminantes en el sistema y el número de unidades de operación de tratamiento, introduce un crecimiento geométrico del número de posibilidades de configuraciones del sistema, lo que ha recibido mucha atención en los últimos años. Esto ha motivado el desarrollo de enfoques totalmente diversos de síntesis de tratamiento distribuido de efluentes y de algoritmos diferentes para su solución (Takama et al., 1980a, 1980b, 1981; Wang y Smith, 1994 a, b; Kuo y Smith, 1998b; Alva-Argáez et al., 1998, 1999; Galan y Grossmann, 1998, Zamora y Grossmann, 1998, 1999a; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Lee y Grossmann, 2003).

Sin embargo, en la formulación del problema de síntesis de tratamiento de efluentes puede contener típicamente muchas ecuaciones no lineales que describen el funcionamiento del sistema, balances de masa para los contaminantes en torno a cada punto de mezclado y divisores, así como también balances de masa en torno a cada operación, mediante la representación de modelos de programación no lineal (PNL). Algunas características estructurales y geométricas del diseño, y restricciones lógicas en la formulación, pueden introducirse mediante el uso de variables binarias asociadas con posibles conexiones o selección de operaciones de tratamiento, con representaciones de modelos de programación no lineal entera-mixta (PNLEM). Con todo, la formulación del modelo origina un problema no lineal no convexo, el cual frecuentemente exhibe mínimos locales y causa dificultades de convergencia. Como procedimiento de solución de problemas bilineales, se han desarrollado diferentes estrategias de descomposición de modelos de PNL en una secuencia de problemas relajados de PL, usados en la optimización para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de agua.

Alva-Argáez et al. (1998) han propuesto una estrategia de descomposición del problema original de PNLEM en una secuencia de problemas de PLEM para la síntesis de problemas industriales de agua. El problema de diseño no lineal es resuelto a partir de las características estructurales de la solución del problema lineal. Alva-Argáez et al. (1998) introducen variables artificiales en las ecuaciones para los balances de masa en la solución al problema de diseño, de manera semejante a la propuesta de Takama et al. (1980). En la función objetivo es incorporada la suma de las variables artificiales. Dentro del procedimiento de solución iterativo propuesto, una secuencia de puntos infactibles es generada hasta que en la solución final todas las variables artificiales son llevadas a cero. No se logran soluciones óptimas con este método.

Galan y Grossmann (1998) han desarrollado un procedimiento de descomposición del problema original de PNL en una secuencia de problemas relajados de PL, para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de agua. El método está basado en la solución sucesiva de modelos de PL y PNL. El procedimiento usa un modelo de PL y diferentes funciones objetivo para generar puntos de arranque para el modelo de PNL. El modelo de PL relajado incorpora información de acotamiento lineal para lograr reemplazar las ecuaciones no lineales no convexas. La relajación de PL es similar a la empleada por Quesada y Grossmann (1995), quienes han planteado un procedimiento de ramificación y acotamiento para obtener una solución óptima global. El procedimiento utiliza subestimadores de PL para determinar las cotas de las variables involucradas en los términos no convexos de flujos totales y flujos individuales, las cotas se aplican a los subestimadores en el sub problema de PL. Finalmente, entre todos los resultados generados de los modelos de PL y PNL, se selecciona el mejor resultado para la función objetivo. Sin embargo, no hay garantía que el óptimo global será obtenido.

Takama et al. (1980), y Benko et al. (2000) entre otros, han planteado también procedimientos de solución de descomposición de modelos de PNL para la optimización de problemas no convexos. Puesto que, en problemas estructurales de optimización de tratamiento de efluentes el esfuerzo de cómputo puede ser relevante en la solución de

problemas de programación no lineal (PNL), una medida de eficacia en los algoritmos matemáticos puede ser el número de los subproblemas de PNL o PL que deben ser resueltos.

En el Capítulo 3 se ha presentado un procedimiento de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, que involucra un modelo estructurado de programación matemática desarrollado de manera confiable y de solución sistemática. El procedimiento propuesto involucra un esquema de descomposición que permite fragmentar y explorar sistemáticamente el espacio de diseño contenido en una superestructura de red de un sistema. Dentro de las características estructurales del modelo presentado, el procedimiento de solución involucra la reducción de restricciones no lineales en mezcladores y divisores, hasta generar subproblemas lineales que definen diseños factibles, sin importar el número de contaminantes o corrientes efluentes presentes en un problema. La metodología de diseño desarrollada permite identificar regiones de diseño no factibles, así como realizar estudios paramétricos para cuantificar el impacto por cambios en diversos parámetros del problema, por ejemplo, debido a cambios en los flujos máxicos de contaminantes y corrientes efluentes.

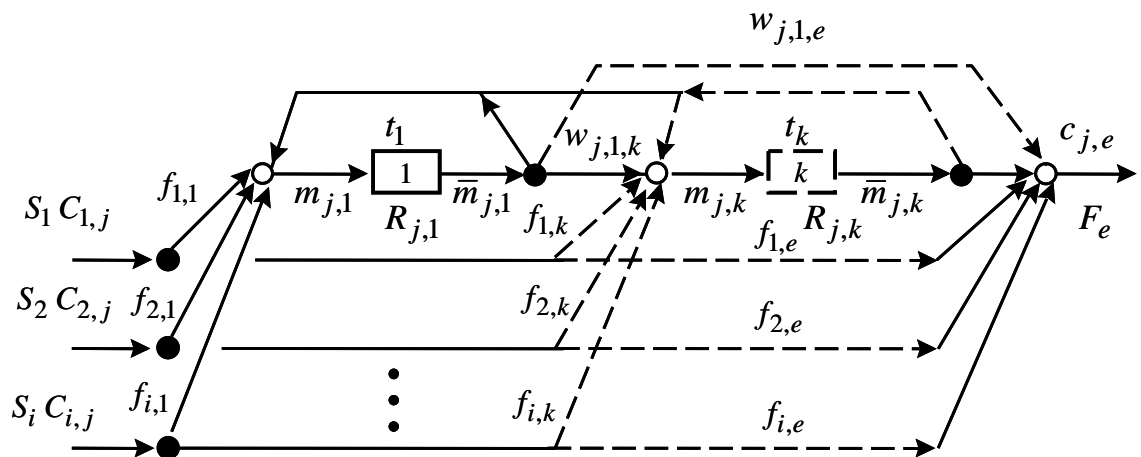


Figura 4.1 Superestructura para el diseño de un sistema distribuido de tratamiento de efluentes

4.1.2 Representación del problema de diseño y descomposición de superestructura

Para formular un problema de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes como un problema de programación matemática, una superestructura debe ser considerada que incluye diseños alternativos de los cuales el proceso óptimo sea seleccionado. La superestructura en la Figura 4.1 muestra las características estructurales, divisores, mezcladores y unidades de tratamiento que pueden ser interconectadas; el problema se plantea con base en la reducción de la concentración de un conjunto j , $j \in J$ de contaminantes hasta límites de concentración ambiental preestablecidos $c_{j,e}^U$, $j \in J$, dichos contaminantes son acarreados en un conjunto i , $i \in I$ de corrientes efluentes con flujo S_i , $i \in I$. Para la eliminación de los contaminantes se dispone de un conjunto k , $k \in K$ de unidades de tratamiento. Las capacidades de las unidades de tratamiento se caracterizan por tasas de remoción constantes de contaminantes $R_{j,k}$, $j \in J$, $k \in K$.

Por otra parte, la descomposición de superestructura en la Figura 4.1 define el espacio de búsqueda de las alternativas de redes de tratamiento de efluentes, involucra una forma de descomposición entre un problema complejo y un sistema de subproblemas en tamaño y estructura menos complicados, que ha resultado como una variante en los procedimientos y estrategias de solución en sistemas de optimización, en comparación a las metodologías de descomposición de modelos de optimización que se encuentran en la literatura (ver p.ej., Kocis y Grossmann, 1987; Floudas et al, 1989; Galan y Grossmann, 1998; Alva-Argáez et al., 1998). En este capítulo se explota la propuesta del Capítulo 3, de la descomposición de una superestructura compleja que resulta en una serie de problemas de estructura especial o subproblemas de red básica que son resueltos para determinar la solución óptima. En la Figura 4.1, una superestructura típica de red que involucra n unidades de tratamiento se descompone en un sistema de $n!$ superestructuras básicas de red, que se optimizan individualmente para obtener un conjunto de diseños de redes alternativas, de los cuales se selecciona un diseño de red final. Por ejemplo, en la Figura 4.2 se presenta una de seis

superestructuras básicas de red que emergen de la descomposición de una superestructura típica compleja en un sistema formado por tres unidades de tratamiento (Kuo y Smith, 1997; Galan y Grossmann, 1998; Alva-Argáez et al., 1998; Huang et al., 1999; Tsai y Chang, 2001; Zamora y Grossmann, 1998).

El enfoque de descomposición de superestructura, tiene como objetivos:

- Reducir la presencia de no convexidades debido en principio, al conjunto de restricciones en el modelo de optimización.
- Auxiliar en la formulación de modelos de programación no lineal (PNL) estructurados que involucra variables continuas.
- Conducir una búsqueda sistemática para determinar diseños óptimos en la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes.
- Favorecer en el procedimiento la generación de un conjunto de problemas de PL, para generar puntos confiables de arranque para el modelo de PNL, en la estrategia de solución.

De manera resumida se describe que la elección de una superestructura que pueda tomar en consideración la complejidad del modelo matemático asociado, para desarrollar el diseño de una red distribuida de tratamiento de efluentes, se presenta al incorporar un número alto de características topológicas diferentes en la superestructura, que conduce a un modelo matemático con mayor complejidad.

Consecuentemente, la eficacia de las técnicas de solución se convierte en aspecto crítico para el diseño del sistema. El reciclo de corrientes puede ser necesaria en algunos casos particulares para hacer factible la operación de un sistema de tratamiento, o para bajar la concentración de contaminantes en la entrada de una unidad de tratamiento, pero puede constituir una característica innecesaria cuya única consecuencia práctica es complicar la representación matemática de la superestructura.

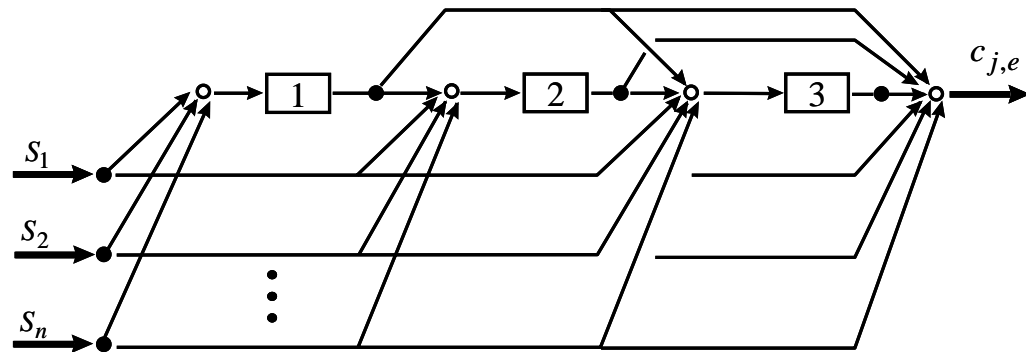


Figura 4.2 Una superestructura básica de red para el diseño de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes, que involucra tres unidades de tratamiento

Las superestructuras básicas de red, que emergen del enfoque de descomposición de superestructura, presentan las características estructurales siguientes:

- 1 La dirección del flujo de efluentes y corrientes tratadas es corriente abajo en el sistema.
- 2 El espacio de solución del problema de diseño está formado por el conjunto de los espacios de solución de las superestructuras básicas de red, que resultan por el número de unidades de tratamiento que forman un sistema.
- 3 La complejidad de la superestructura de red para la solución de un problema de diseño se reduce a expensas de excluir porciones del espacio de solución que incluyen diseños de red que caracterizan recirculación y reciclaje de corrientes.

En principio la reutilización de efluentes no forma parte del alcance en este trabajo, esta última consideración (3), constituye una suposición de simplificación razonable. El número de superestructuras básicas de red que se optimizan, para obtener un conjunto de diseños de red alternativos de los cuales se selecciona un diseño de red final. El número de superestructuras básicas de red puede ser reducido con base a una selección preliminar, al

implicar restricciones determinadas por precedencias y limitaciones de tipo operacional, en algunos problemas.

4.2 Modelo de programación matemática

El esquema de descomposición de superestructura en la Figura 4.1 simplifica el problema de diseño, al dividir y excluir algunas porciones del espacio de solución. La formulación del modelo matemático alternativo para la optimización de redes distribuidas de tratamiento de efluentes se realiza con base en el uso explícito de flujos de contaminantes (FC) y flujos totales de efluentes, remoción en las unidades de tratamiento y de variables fraccionales, en las ecuaciones de balances de masa de contaminantes en nodos mezcladores y divisores, y unidades de tratamiento, que exhiben la presencia de términos bilineales. Se puede suponer lo siguiente:

- El flujo másico del contaminante j , $j \in J$ en la corriente de salida de la unidad de tratamiento k , $k \in K$ puede ser expresado como una relación lineal del flujo másico del contaminante de la corriente de entrada, expresado como una relación de remoción $R_{j,k}$, $j \in J, k \in K$.
- Es baja la concentración de los contaminantes para j , $j \in J$ en las corrientes tratadas t_k , $k \in K$, se supone que el flujo total de la corriente de salida no cambia en la unidad de tratamiento.
- Los objetivos incluyen el desarrollo de uno o varios diseños alternativos de red de tratamiento de efluentes, que implican la selección de flujos y composiciones de las corrientes al optimizar una función objetivo.
- Se supone que los costos de capital y de operación son proporcionales al flujo tratado. En el diseño final, la topología y las condiciones operacionales de la red de tratamiento de efluentes permitirán la remoción requerida de contaminantes al mínimo costo.

Modelo CF-*n**Índices*

- i = corriente efluente
 j = contaminante
 k or ℓ = unidad de tratamiento
 e = punto de descarga

Conjuntos

- I = $\{i : i \text{ es una corriente efluente}\}$
 J = $\{j : j \text{ es un contaminante}\}$
 K = $\{k : k \text{ es una unidad de tratamiento}\}$

Parámetros

- $C_{i,j}$ = concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)
 $c_{j,e}^U$ = concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)
 CC_k = coeficiente de costo de capital
 CO_k = coeficiente de costo de operación
 $R_{j,k}$ = relación de remoción de contaminante
 S_i = flujo de corriente efluente (t/h)
 F_e = flujo total de efluente en el punto de descarga (t/h)

$$F_e = \sum_{i \in I} S_i .$$
 $m_{j,k}^L$ = carga másica mínima de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento (Kg/h)
 $m_{j,k}^U$ = carga másica máxima de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento (Kg/h)

Variables positivas continuas

- $c_{j,e}$ = concentración de contaminante en el punto de descarga (ppm)
 $f_{i,e}$ = flujo desviado al punto de descarga (t/h)
 $f_{i,k}$ = flujo al mezclador que precede una unidad de tratamiento (t/h)
 $m_{j,k}$ = carga másica de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento (Kg/h)
 $\bar{m}_{j,k}$ = carga másica de contaminante en la salida de la unidad de tratamiento (Kg/h)
 t_k = flujo a través de una unidad de tratamiento (t/h)
 $t_{\ell,k}$ = flujo de efluente entre unidades de tratamiento (t/h)

- $t_{k,e}$ = flujo de la unidad de tratamiento al punto de descarga (t/h)
 $w_{j,k,e}$ = carga másica de contaminante de la unidad de tratamiento k -ésima desviada al punto de descarga (Kg/h)
 $w_{j,\ell,k}$ = carga másica de contaminante entre unidades de tratamiento (Kg/h)
 $\alpha_{\ell,k}$ = fracción del flujo de salida de la ℓ -ésima unidad, enviado a la k -ésima unidad
 $\alpha_{k,e}$ = fracción del flujo de salida de la k -ésima unidad, enviado al punto de descarga

Función objetivo

$$\text{Minimizar } t = \sum_{k \in K} (CC_k + CO_k) t_k \quad (4.1)$$

Restricciones del modelo

Balances de masa para agua en los divisores iniciales de la red

$$\sum_{k \in K} f_{i,k} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (4.2)$$

Balances de masa para agua en mezcladores que preceden las unidades de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_{i,k} + \sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell < k}} t_{\ell,k} = t_k \quad k \in K \quad (4.3)$$

Balances de masa para agua en divisores después de las unidades de tratamiento

$$\sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell > k}} t_{k,\ell} + t_{k,e} = t_k \quad k \in K \quad (4.4)$$

Balance de masa para agua en el mezclador final de la red

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + \sum_{k \in K} t_{k,e} = F_e \quad (4.5)$$

Balances de masa para contaminantes en los divisores iniciales de la red

$$\sum_{k \in K} f_{i,k} C_{i,j} + f_{i,e} C_{i,j} = S_i C_{i,j} \quad i \in I, \quad j \in J \quad (4.6)$$

Balances de masa para contaminantes en mezcladores que preceden las unidades de tratamiento

$$10^{-3} \sum_{i \in I} f_{i,k} C_{i,j} + \sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell < k}} w_{j,\ell,k} = m_{j,k} \quad k \in K, \quad j \in J \quad (4.7)$$

Balances de masa para contaminantes en divisores después de las unidades de tratamiento

$$\sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell > k}} w_{j,k,\ell} + w_{j,k,e} = \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.8)$$

Balances de masa para contaminantes en el mezclador final de la red

$$10^{-3} \sum_{i \in I} f_{i,e} C_{i,j} + \sum_{k \in K} w_{j,k,e} = 10^{-3} F_e c_{j,e} \quad j \in J \quad (4.9)$$

Remoción de contaminantes en las unidades de tratamiento

$$\bar{m}_{j,k} = (1 - R_{j,k}) m_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.10)$$

Condición para las corrientes que salen de los divisores después de las unidades de tratamiento tengan las mismas relaciones de carga másica para cada contaminante

$$w_{j,k,\ell} = \alpha_{k,\ell} \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k, \ell \in K, \quad \ell > k \quad (4.11)$$

$$w_{j,k,e} = \alpha_{k,e} \bar{m}_{j,k} \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.12)$$

Las variables fraccionales también son usadas para distribuir el flujo total en los divisores después de las unidades de tratamiento

$$t_{k,\ell} = \alpha_{k,\ell} t_k \quad k, \ell \in K, \quad \ell > k \quad (4.13)$$

$$t_{k,e} = \alpha_{k,e} t_k \quad k \in K \quad (4.14)$$

Donde,

$$\sum_{\substack{\ell \in K \\ \ell > K}} \alpha_{k,\ell} + \alpha_{k,e} = 1 \quad k \in K \quad (4.15)$$

Cotas

$$0 \leq \alpha_{k,\ell}, \alpha_{k,e} \leq 1 \quad (4.16)$$

$$c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (4.17)$$

$$0 \leq m_{j,k}^L \leq m_{j,k} \leq m_{j,k}^U \leq m_j^U \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.18)$$

$$0 \leq w_{j,\ell,k}, w_{j,k,e} \leq m_{j,k}^U \quad j \in J, \quad \ell, k \in K \quad (4.19)$$

$$0 \leq f_{i,k}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I, \quad k \in K \quad (4.20)$$

$$0 \leq t_k \leq F_e \quad k \in K \quad (4.21)$$

$$0 \leq t_{\ell,k}, t_{k,e} \leq t_k \quad \ell, k \in K \quad (4.22)$$

Notas

- 1) El flujo másico total de contaminante j en la entrada del sistema de tratamiento,

m_j^U , está dado por,

$$10^3 m_j^U = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} \quad j \in J \quad (4.23)$$

- 2) La carga másica total mínima de contaminante j que será removida por el sistema de tratamiento, Δm_j^L , puede ser obtenida de la siguiente expresión,

$$10^3 \Delta m_j^L = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} S_i c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (4.24)$$

- 3) Para el caso en el cual todas las unidades de tratamiento puedan procesar el conjunto total de corrientes efluentes, la carga másica total máxima de contaminante j que un sistema de tratamiento podría remover es igual a,

$$\Delta m_j^U = \frac{1}{10^3} \left[1 - \prod_{k \in K} (1 - R_{j,k}) \right] \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} \quad j \in J \quad (4.25)$$

Por lo tanto, la concentración mínima que se puede lograr de contaminante j en la descarga del sistema de tratamiento estaría dado por,

$$c_{j,e}^L = \left[\prod_{k \in K} (1 - R_{j,k}) \right] \frac{\sum_{i \in I} S_i C_{i,j}}{\sum_{i \in I} S_i} \quad j \in J \quad (4.26)$$

De este modo, $c_{j,e}^L$ proporciona un medio simple de identificar problemas de diseño no factibles en los cuales, para un contaminante dado j , la concentración máxima de contaminante permitida en la descarga es menor que la concentración mínima que puede ser lograda por el sistema de tratamiento, es decir $c_{j,e}^U < c_{j,e}^L$.

- 4) Una cota superior para la concentración de un contaminante j en la entrada de una unidad de tratamiento k , $Cin_{j,k}^U$ se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 m_{j,k} - Cin_{j,k}^U t_k \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.27)$$

De manera similar una concentración mínima de contaminante permitida en la unidad de tratamiento, se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 m_{j,k} - Cin_{j,k}^L t_k \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.28)$$

- 5) Un requerimiento de fijar la concentración de un contaminante j en la salida de una unidad de tratamiento k , $Cout_{j,k}^T$, se puede establecer con la siguiente desigualdad lineal,

$$10^3 (1 - R_{j,k}) m_{j,k} - Cout_{j,k}^T t_k \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.29)$$

- 6) Una cota superior para la carga másica removida de un contaminante j , $\Delta m_{j,k}^{UB}$, en una unidad de tratamiento k , se puede establecer con la desigualdad lineal siguiente,

$$R_{j,k} m_{j,k} - \Delta m_{j,k}^{UB} \leq 0 \quad j \in J, \quad k \in K \quad (4.30)$$

donde

$$\sum_{k \in K} \Delta m_{j,k}^{UB} \geq \Delta m_j^L \quad j \in J \quad (4.31)$$

4.3 Enfoque de solución para diseñar redes de tratamiento de agua

La presencia de no convexidades, ecs (4.11-4.14), puede causar dificultades en la solución del problema de PNL al exhibir más de una solución local. El enfoque de diseño propuesto en el Capítulo 3, que trata el problema de cómo evitar las dificultades con los modelos no lineales de redes distribuidas de tratamiento de PNL es también conservado para el Modelo ($CF-n$) presentado en este capítulo, se destacan,

- La optimización de una superestructura básica de red incluyendo n unidades de tratamiento implica el uso de $n(n+1)/2$ variables fraccionales en los términos bilineales en el Modelo ($CF-n$).
- Una reducción en el número de las variables fraccionales en la formulación matemática puede ser lograda usando las n ecuaciones de conservación para efluentes en los divisores después de las unidades de tratamiento, ecuación (4.15).
- Este esquema de reducción del modelo da lugar a un Modelo de programación no lineal ($CF-r$), que incluye términos bilineales solamente con las variables fraccionales $n(n-1)/2$ remanentes.
- Por consiguiente, el Modelo no lineal ($CF-n-PNL$) resulta ser un modelo de programación matemática estructurado que, asignando valores fijos a las variables fraccionales de complejidad remanente, se puede reducir a un Modelo de programación lineal, ($CF-n-PL$).

Se presenta un enfoque de optimización heurístico-paramétrico de optimización para una superestructura básica de red extendido a un número mayor de unidades de tratamiento, respecto al Capítulo 3. Una estrategia de solución de partición del espacio de diseño en dos fases se propone en este trabajo, en el cual se busca encontrar el óptimo global de los problemas no convexos de PNL. Para iniciar se asignan valores para el flujo total a tratamiento y las variables fraccionales y se especifica el tamaño de paso de búsqueda. En la primera fase se resuelve el modelo de programación lineal ($CF-PL-n$), a partir de los

valores de inicialización de las variables fraccionales, se determina una solución óptima de diseño o se detecta la no factibilidad de un problema de diseño.

En la segunda fase se resuelve el modelo de programación no lineal (CF-n-PNL) a partir de la solución óptima del modelo lineal (CF-n-PL), conservándose el mejor valor de la función objetivo de las dos fases, se incrementa de forma controlada y sistemática la variable fraccional, y de acuerdo al tamaño de paso de búsqueda se regresa a la fase 1, hasta que el proceso de diseño se hace no factible o se termina el barrido de las variables fraccionales de flujo. Se finaliza la estrategia de solución con el mejor diseño de red o se detecta un diseño de red no factible.

Inicialización

Paso 1. Fijar $t^* = \infty$, $\alpha_{k,\ell}^* = \infty$

Fijar $\alpha = 1$ para las variables fraccionales $\alpha_{\ell,k}$ de acuerdo a las restricciones (4.15) y (4.16), y conforme al número de unidades de tratamiento presentes y número de variables fraccionales, representando el primer lazo de control. En la Tabla 4.1, se muestra el número de lazos de control necesarios para la optimización paramétrica, hasta de 6 unidades.

Especifique el tamaño del paso de búsqueda, $\Delta\alpha$.

Fase 1 (búsqueda de PL)

Paso 2. Resolver el Modelo PL (CF-n-PL), generado con $\alpha_{k,\ell} = \alpha$, de acuerdo a las restricciones (4.15) y (4.16). Si el Modelo (CF-n-PL) resulta ser no factible ir al paso 7.

Paso 3. Si la solución óptima del Modelo ($CF-n-PL$) presenta un valor de la función objetivo, $t_{PL}^* < t^*$, entonces fijar $t^* = t_{PL}^*$, y $\alpha_{\ell,k}^* = \alpha$.

Fase 2 (búsqueda de PNL)

Paso 4. Resuelva el Modelo de PNL ($CF-n-PNL$) de la solución óptima del Modelo ($CF-n-PL$).

Paso 5. Si la solución óptima del Modelo ($CF-n-PNL$) presenta un valor de la función objetivo $t_{PNL}^* < t^*$, con un valor óptimo asociado de la variable fraccional $\hat{\alpha}_{\ell,k}$, entonces fijar $t^* = t_{PNL}^*$ y $\alpha_{\ell,k}^* = \hat{\alpha}_{\ell,k}$.

Paso 6. Fijar $\alpha = \alpha - \Delta\alpha$. Si $\alpha \geq 0$ ir al paso 2.

Paso 7. Incorporar el siguiente lazo de control conforme un orden predeterminado, por ejemplo, ver la Tabla 4.1, y por número de unidades de tratamiento presentes y número de variables fraccionales $\alpha_{\ell,k}$, mientras no sea el último lazo ir al paso 2. El lazo incorporado contiene los lazos de control anteriores.

Paso de terminación

Paso 8. Si $t^* = \infty$, entonces es probable que, si $\Delta\alpha$ es lo suficientemente pequeño, el Modelo ($CF-n-PL$) es no factible. De otra forma, el mejor diseño de red resuelto insertado en la superestructura básica de red exhibe una variable fraccional óptima $\alpha_{\ell,k}^*$, y un costo total de tratamiento igual a t^* .

Tabla 4.1 Número de Variables Fraccionales Necesarias en los Lazos de Control, para la Optimización Paramétrica de hasta 6 Unidades de Tratamiento

no. de unidades de tratamiento	número de variables fraccionales
2	$\alpha_{1,2}$
3	$\alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{2,3}$
4	$\alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{1,4}, \alpha_{2,3}, \alpha_{2,4}, \alpha_{3,4}$
5	$\alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{1,4}, \alpha_{1,5}, \alpha_{2,3}, \alpha_{2,4}, \alpha_{2,5}, \alpha_{3,4}, \alpha_{3,5}, \alpha_{4,5}$
6	$\alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{1,4}, \alpha_{1,5}, \alpha_{1,6}, \alpha_{2,3}, \alpha_{2,4}, \alpha_{2,5}, \alpha_{2,6}, \alpha_{3,4}, \alpha_{3,5}, \alpha_{3,6}, \alpha_{4,5}, \alpha_{4,6}, \alpha_{5,6}$

Se resalta la importancia en la fase I del enfoque de solución presentado, que entrega para las variables valores de arranque factibles para la optimización del modelo no convexo ($CF - r$) en la fase 2, o prueba la no factibilidad de este modelo bajo el correspondiente conjunto de valores fijados de las variables fraccionales. De este modo, cada solución óptima obtenida en la fase I proporciona no sólo el mejor diseño de red realizable de tratamiento asociado a los valores correspondientes de las variables fraccionales, sino también suministra información que es útil para identificar y acotar la región del espacio de búsqueda implicado, en el cual diseños de red factibles de tratamiento pueden ser encontrados.

El esquema de descomposición de superestructura y modelado para el algoritmo CF-n se presenta como una metodología de optimización conceptualmente más sencilla y directa, que permite realizar la tarea de síntesis para encontrar el mejor diseño de red de igual forma al modelo presentado en el Capítulo 3. Algunas características distintivas con respecto al modelo CF-n son las siguientes:

La formulación del Modelo ($CF-n$), para la optimización de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, se realiza con base en el uso explícito de flujos de contaminantes y flujos totales de efluentes en nodos mezcladores, divisores y unidades de tratamiento, y no así de cargas másica removidas en las unidades de tratamiento.

- Se puede conocer de manera explícita las características operacionales de las variables en los diseños de superestructuras básicas de red, con base en la optimización del Modelo estructurado (*CF-n*).
- Para la solución del Modelo (*CF-n*), no son necesarias que todas las relaciones de remoción deban ser diferentes a cero. En el Capítulo 3, sí los datos del problema establecen algunas relaciones de remoción iguales a cero, entonces en el modelo se pueden fijar valores insignificante muy pequeños (por ejemplo 10^{-6}).
- La formulación del Modelo (*CF-n*), favorece la propuesta de un procedimiento automatizado total (PNLEM), para conducir una búsqueda sistemática de las alternativas de las superestructuras básicas de red para determinar diseños óptimos en la síntesis de redes de tratamiento distribuido.

El procedimiento propuesto en las secciones previas es usado para resolver dos Casos de Estudio, de problemas de diseño de redes distribuidas de tratamiento de efluentes que han sido reportados en la literatura. Se ha utilizado GAMS como el sistema de modelado de ecuaciones. El revolvedor de PL se ha utilizado GAMS/OSL y el revolvedor de PNL se ha utilizado GAMS/MINOS5.

4.4 Casos de Estudio

4.4.1 Caso de Estudio 4.1 (Tsai y Chang, 2001)

Considere un proceso ficticio con dos fuentes de agua y un destino de descarga. En el proceso existen dos contaminantes A y B que deben reducir su concentración para descargarse al ambiente. Las propiedades de las fuentes de agua se presentan en la Tabla 4.2. Se dispone de manera ilimitada de la fuente de agua W_1 . La descarga ambiental para los contaminantes A y B se han establecido en 75 ppm. Los datos de proceso para las unidades usuarias de agua se presentan en la Tabla 4.3. Los datos de proceso para las unidades de tratamiento de efluentes disponibles están dados en la Tabla 4.4. No existe pérdida de agua en las unidades de tratamiento. Tsai y Chang (2001) resolvieron este problema, mediante una estrategia integrada de diseño de redes de uso de agua y tratamiento de efluentes usando técnicas de algoritmos genéticos. En primer lugar, llevaron a cabo la síntesis de la red de agua, Parte 1 del Caso de Estudio 4.1, considerando exclusivamente las dos plantas usuarias de agua (Tabla 4.3) y las dos plantas de tratamiento de agua (Tabla 4.4). Después, Tsai y Chang (2001), proponen resolver el mismo problema de síntesis, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, pero considerando en el problema de diseño unidades repetidas de tratamiento de efluentes de la Tabla 4.4.

Tabla 4.2 Fuentes de Agua Parte 1 del Caso de Estudio 4.1

fuente no.	contaminantes (ppm)		flujo máx. (t/h)
	A	B	
W1	10	20	∞
W2	600	300	50

Tabla 4.3 Datos de los Procesos de las Unidades Usuarias de Agua. Caso de Estudio 4.1

unidad	contaminante	carga másica (Kg/h)	conc. entrada max. (ppm)	conc. salida max. (ppm)
U1	A	10	200	600
	B	5	100	300
U2	A	2	40	120
	B	8	120	360

Tabla 4.4 Relaciones de Remoción de Contaminantes (%) para los Procesos de Tratamiento. Caso de Estudio 4.1

proceso de tratamiento	contaminantes		flujo máx. (t/h)
	A	B	
T1	80	10	50
T2	20	70	50

Primero se presenta una breve descripción de la solución de problema de diseño originalmente propuesta por Tsai y Chang (2001). La configuración del diseño de red se representa en la Figura 4.3 para la primera parte del problema. El diseño presentado en la superestructura exhibe un arreglo 2-1 de unidades de tratamiento y un flujo total de agua a tratar de 87.90 t/h. Los flujos y concentraciones de entrada y de salida de las corrientes en las unidades usuarias de agua y unidades de tratamiento, son mostrados en la Tabla 4.5.

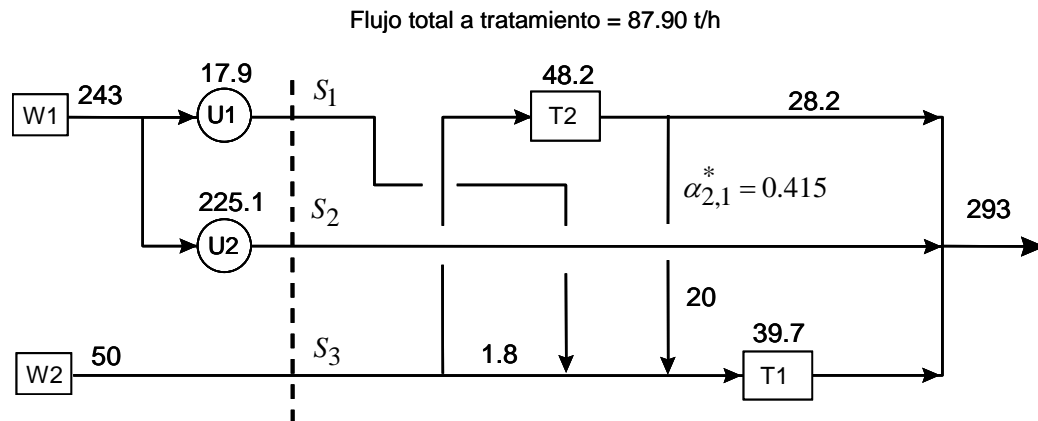


Figura 4.3 Diseño de la Red de la Parte 1, Caso de Estudio 4.1, por Tsai y Chang, 2001.

Tabla 4.5 Condiciones de Operación en Unidades Usuarias de Agua y Unidades de Tratamiento de la Parte 1. Caso de Estudio 4.1

unidad de proceso	flujo (t/h)	contaminante	conc. entrada max. (ppm)	conc. salida max. (ppm)
U1	17.9	A	10.0	568.9
		B	20.0	299.5
U2	225.1	A	10.0	18.9
		B	20.0	55.5
T1	38.7	A	525.6	105.1
		B	194.0	174.6
T2	48.2	A	600.0	480.0
		B	300.0	90.0

En la segunda parte del problema, Tsai y Chang, 2001, evaluaron el efecto en el diseño al incorporar unidades repetidas de tratamiento de efluentes. Específicamente, se introducen en la superestructura un conjunto de dos unidades de tratamiento de agua del tipo T1 y un conjunto de tres unidades de tratamiento del tipo T2. Los resultados del diseño de la red de unidades usuarias de agua y unidades de tratamiento de efluentes se presentan en la Figura

4.4, el flujo total a tratamiento reportado es igual a 187.90 t/h y los datos de proceso correspondientes a las corrientes son mostrados en la Tabla 4.6.

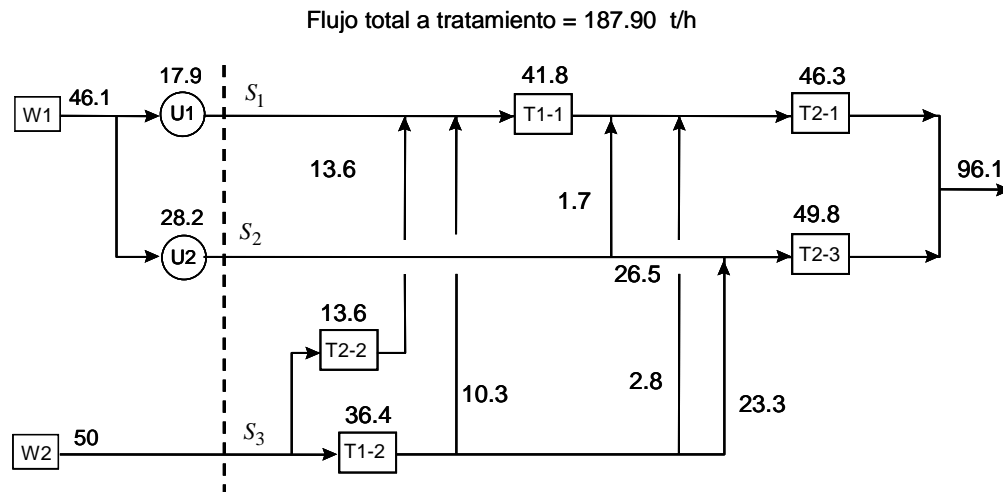


Figura 4.4 Diseño de la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, por Tsai y Chang, 2001.

Tabla 4.6 Condiciones de Operación de las Unidades Usuarias de Agua y Unidades de Tratamiento de la Parte 2. Caso de Estudio 4.1

Unidad de proceso	Flujo (t/h)	contaminante	conc. entrada max. (ppm)	conc. salida max. (ppm)
U1	17.9	A	10.0	569.2
		B	20.0	299.6
U2	28.2	A	10.0	80.8
		B	20.0	303.3
T1-1	41.8	A	429.2	85.8
		B	224.2	201.7
T1-2	36.4	A	600.0	120.0
		B	300.0	270.0
T2-1	46.3	A	87.6	70.1
		B	209.4	62.8
T2-2	13.6	A	600.0	480.0
		B	300.0	90.0
T2-3	49.8	A	99.1	79.3
		B	287.7	86.3

4.4.1.a **Diseño Parte 1 del Caso de Estudio 4.1**

El problema de optimización de redes distribuidas de tratamiento de efluentes consiste en seleccionar los flujos máxicos de contaminantes y flujos totales de las corrientes para optimizar una función objetivo, dada por el flujo total procesado por las unidades. La mayor dificultad en optimizar este tipo de modelo es causado por la presencia de términos bilineales en las ecuaciones de balances de masa de contaminantes. Un problema de esta naturaleza es normalmente tratado mediante métodos con base en algoritmos de diseño automatizados. Sin embargo, no sólo se busca diseños automatizados que identifiquen los arreglos de alternativas cuyo desempeño global satisfaga los límites ambientales requeridos en la descarga de un sistema de tratamiento de la manera más económica, sino obtener la mejor solución de diseño en el procedimiento de síntesis de redes.

En esta sección, se utiliza la metodología y modelo matemático de diseño propuestos para redes de tratamiento de efluentes, para el diseño de las Partes 1 y 2 del Caso de Estudio. Las Figuras 4.3 y 4.4 son divididas mediante un segmento de línea discontinua, las secciones de diseño de uso de agua y de tratamiento de efluentes y se han identificado las corrientes efluentes S_1 , S_2 y S_3 , con la finalidad de realizar el diseño de la sección de tratamiento de efluentes exclusivamente, por ser el objeto de análisis del problema en nuestro caso. Por lo tanto, los datos de los procesos de tratamiento, para la Parte 1 del Caso de Estudio son extraídos de la Tabla 4.4. Los datos de las corrientes efluentes y las concentraciones de los contaminantes a la salida de las unidades usuarias de agua son extraídos de la Figura 4.3 y Tabla 4.5, respectivamente.

Los resultados obtenidos de la optimización de las superestructuras básicas de red con arreglos 1-2 y 2-1 de las unidades de tratamiento, se presentan en las curvas de flujo total mínimo a tratamiento en términos de las variables fraccionales correspondientes, en la Figura 4.5. Los mejores diseños de red representados en la Figura 4.5 muestran que diseños factibles con arreglos 1-2 y 2-1, se presentan a partir de valores para las variables

fraccionales de $\alpha_{1,2}=0.4796$ y $\alpha_{2,1}=0.3869$, respectivamente. En la Figura 4.5, el mejor diseño de red para el arreglo 1-2 exhibe un flujo total a tratamiento de 87.00 t/h para el valor de la variable fraccional de $\alpha_{1,2}^* = 0.4923$, y se identifica mediante un punto sobre la curva del arreglo 1-2. De manera semejante, un punto sobre la curva que identifica el arreglo 2-1 muestra el mejor de diseño de red que exhibe un flujo total a tratamiento de 87.36 t/h, para el valor de la variable fraccional de $\alpha_{2,1}^* = 0.4038$.

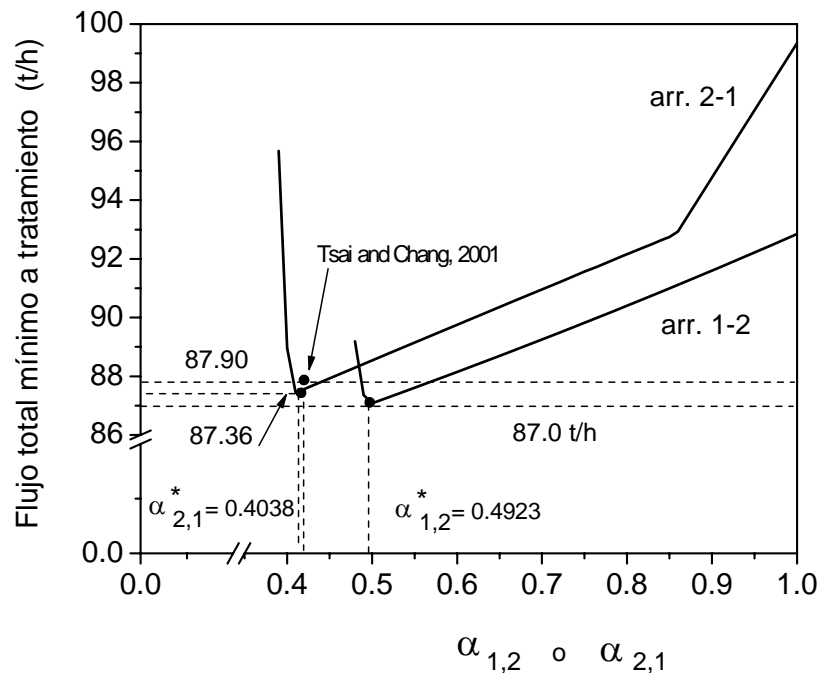


Figura 4.5 Curvas de flujo total mínimo a tratamiento para los mejores diseños implantados en las dos superestructuras básicas de red en el Ejemplo 4.1

También se representa en la Figura 4.5 la solución reportada por Tsai y Chang (2001), con un flujo total a tratamiento de 87.90 t/h, correspondiendo un valor de la variable fraccional $\alpha_{2,1}^* = 0.415$ y la representación correspondiente del diseño de red fue mostrada en la Figura 4.3, que exhibe un arreglo 2-1 de las unidades de tratamiento. Se puede observar en

la Figura 4.5 que la solución por Tsai y Chang de 87.90 t/h está localizada por arriba de la curva calculada para los mejores diseños de red para el arreglo 2-1 de las unidades de tratamiento.

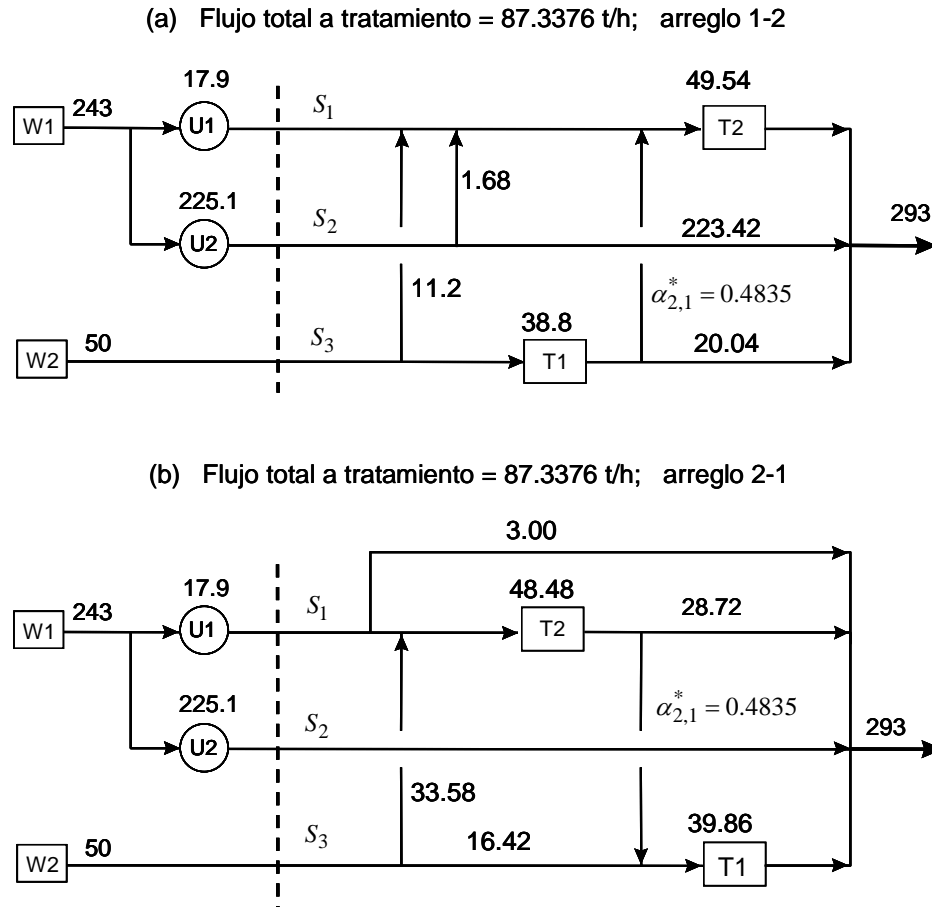


Figura 4.6 Redes óptimas equivalentes de tratamiento de efluentes para $C_{j,e}^U = 75 \text{ ppm}$ en la Parte 1. Caso de Estudio 4.1

Otro aspecto estructural de interés en la Figura 4.5 corresponde a la identificación del punto de intersección de las dos curvas para los arreglos de unidades de tratamiento 1-2 y 2-1. La Figura 4.6 muestra las dos topologías diferentes de diseños de red en donde las dos configuraciones muestran un flujo total mínimo de efluente de 88.3375 t/h y un valor para la variable fraccional de $\alpha_{1,2} = \alpha_{2,1} = 0.4835$. Los contaminantes A y B se envían al ambiente en sus límites de concentración de 75 ppm. En las figuras 4.6-4.9, la sección de uso de agua está representada únicamente como referencia del problema de diseño.

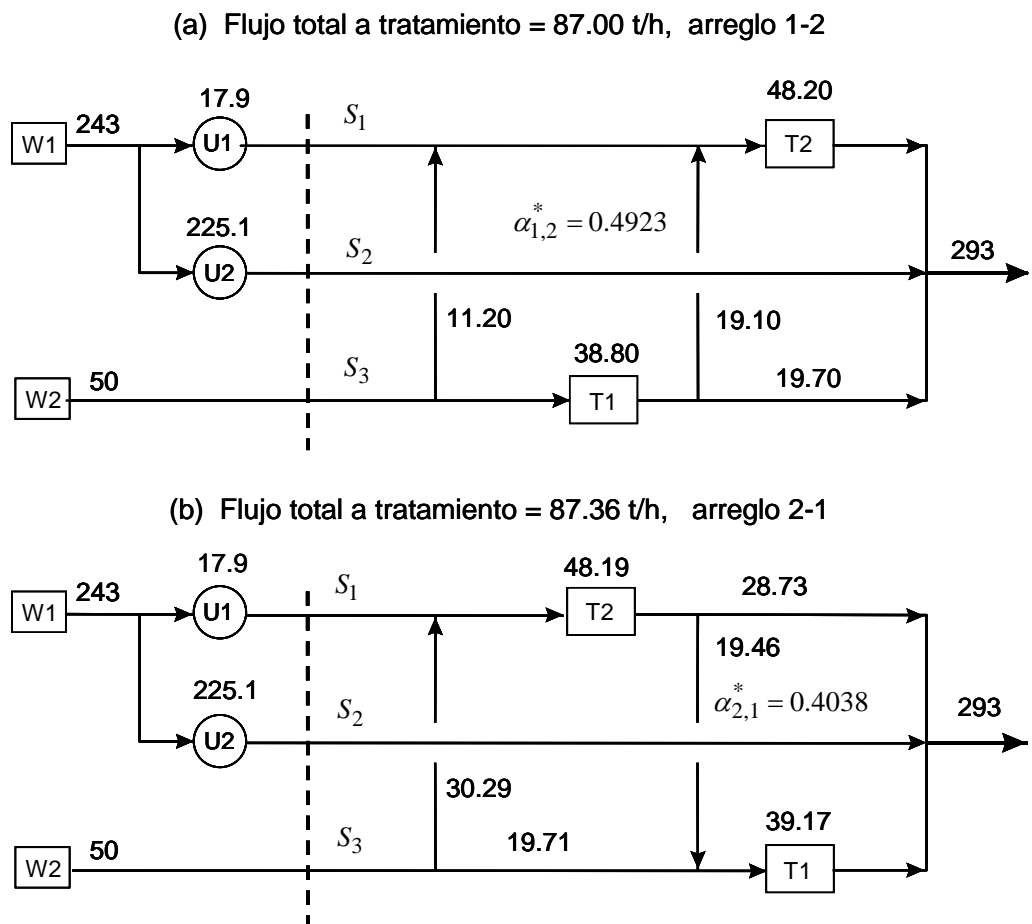


Figura 4.7 Diseño óptimo de la red de tratamiento, Parte 1 para (a) arreglo 1-2 (b) arreglo 2-1, del Caso de Estudio 4.1

Los mejores diseños de red para los arreglos de unidades de tratamiento 1-2 y 2-1, de la Parte 1 del Caso de Estudio 4.1, exhiben un flujo mínimo de efluentes a tratar que corresponda a 87.00 t/h para el arreglo 1-2 y 87.36 t/h para el arreglo 2-1. La Figura 4.7 muestra los dos diseños de red, en particular para la secuencia de unidades 1-2, las corrientes 1 y 3 son completamente tratadas y la corriente 2 se desvía al punto de descarga del sistema sin tratamiento alguno. Las concentraciones de los dos contaminantes en la descarga son 75 ppm, es decir, los contaminantes A y B se liberan al ambiente en sus límites de concentración establecidos.

4.4.1.b Resultados computacionales Parte 1 del Caso de Estudio 4.1

La Tabla 4.7 muestra los flujos totales mínimos de efluentes a tratar asociados con los mejores diseños de red para los arreglos 1-2 y 2-1 de las unidades de tratamiento. Los resultados presentan gran consistencia en los flujos a tratamiento para diferentes valores del tamaño de paso de la variable $\Delta\alpha$, para la solución de la primera Parte del Caso de Estudio 4.1. En la Tabla 4.8 se presenta el número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación de la metodología de diseño propuesta.

Tabla 4.7 Flujos Totales Mínimos a Tratamiento para la Parte 1 del Caso de Estudio 4.1

arreglo	flujo total mínimo a tratamiento (t/h)						
	$\Delta\alpha=0.05$	$\Delta\alpha=0.1$	$\Delta\alpha=0.2$	$\Delta\alpha=0.25$	$\Delta\alpha=0.3\bar{3}$	$\Delta\alpha=0.5$	$\Delta\alpha=1$
1-2	87.00	87.00	87.00	87.00	87.00	87.00	87.00
2-1	87.36	87.36	87.36	87.36	87.36	87.36	87.36

Tabla 4.8 Número de Problemas de PL y de PNL Resueltos con la Aplicación del Enfoque de Solución Paramétrica para el Caso de Estudio 4.1

arreglo	número de problemas de LP y de NLP						
	$\Delta\alpha=0.05$	$\Delta\alpha=0.1$	$\Delta\alpha=0.2$	$\Delta\alpha=0.25$	$\Delta\alpha=0.3\bar{3}$	$\Delta\alpha=0.5$	$\Delta\alpha=1$
1-2	21	11	6	5	4	3	2
2-1	21	11	6	5	4	3	2

4.4.1.c **Diseño Parte 2 del Caso de Estudio 4.1**

El problema de diseño se modifica en esta sección y se consideran unidades repetidas de tratamiento de efluentes. Se incorpora en la superestructura de diseño un conjunto de dos unidades de tratamiento de efluente del tipo T1 y un conjunto de tres unidades de tratamiento del tipo T2. Los datos de los 5 procesos de tratamiento, para la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, son extraídos de la Tabla 4.4. Los datos de las corrientes efluentes y las concentraciones de los contaminantes a la salida de las unidades usuarias de agua, son extraídos de la Figura 4.4 y Tabla 4.6, respectivamente.

Para resolver la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, mediante la metodología de diseño propuesta, se requiere la optimización paramétrica de 120 superestructuras básicas de red que resultan de la descomposición de una superestructura compleja que exhibe 5 unidades de tratamiento. Sin embargo, el número de problemas de PL y de PNL que se tienen que resolver, se reduce drásticamente en la aplicación del enfoque de solución paramétrica desarrollado; debido principalmente a las restricciones impuestas al problema por el uso repetido de dos unidades del tipo de proceso de tratamiento de agua T1 y tres unidades del tipo de proceso de tratamiento T2. De esta forma el número de superestructuras diferentes a optimizar se reduce solamente a 10 de los 120 posibles arreglos de las unidades de tratamiento. En la segunda columna de la Tabla 4.9 se presentan los 10 diferentes arreglos posibles debido a la presencia de unidades repetidas de tratamiento.

En la Tabla 4.9 se presentan los resultados obtenidos de la optimización paramétrica de la metodología de diseño, para el Caso de Estudio 4.1. Los resultados presentan soluciones múltiples óptimas, para los mejores diseños del problema involucrados en las superestructuras básicas de red. Por ejemplo, los arreglos identificados 1-7 exhiben un mismo flujo total mínimo a tratamiento de 187.569 t/h, mientras que los arreglos identificados 8-10 exhiben mismo un flujo total mínimo a tratamiento de 187.849 t/h, estos datos se identifican en la primera y tercera columnas de la Tabla 4.9.

La Tabla 4.9 tiene como significado de diseño, una reducción muy significativa del espacio de búsqueda de diseño y del número de grados de libertad del problema por el uso de unidades repetidas de tratamiento de efluentes en el Caso de Estudio 4.1.

Tabla 4.9 Número de Arreglos por Unidades Repetidas de Tratamiento y Flujos Óptimos con la Metodología de Diseño, Caso de Estudio 4.1

no. arreglo	secuencia de unidades de tratamiento	flujos óptimos t/h								
		1	2	3	4	5	6	7	8	
1	T1-T1-T2-T2-T2	187.569	192.15							
2	T1-T2-T1-T2-T2	187.569	187.80	187.85	192.15					
3	T1-T2-T2-T1-T2	187.569	187.80	187.85	192.15					
4	T1-T2-T2-T2-T1	187.569	187.80	187.85	192.15					
5	T2-T1-T1 T2-T2	187.569	187.80	187.85	191.04	192.15	192.34	194.21		
6	T2-T1-T2-T1 T2	187.569	187.80	187.85	191.04	192.15	192.34	194.21		
7	T2-T1-T2-T2-T1	187.569	187.80	187.85	191.04	192.15	192.34	194.21		
8	T2-T2-T1-T1-T2	187.849	191.04	191.85	192.15	192.18	192.34	192.35	221.38	
9	T2-T2-T1-T2-T1	187.849	191.04	191.85	192.15	192.18	192.34	192.35	221.38	
10	T2-T2-T2-T1-T1	187.849	191.04	191.85	192.15	192.18	192.34	192.35	221.38	

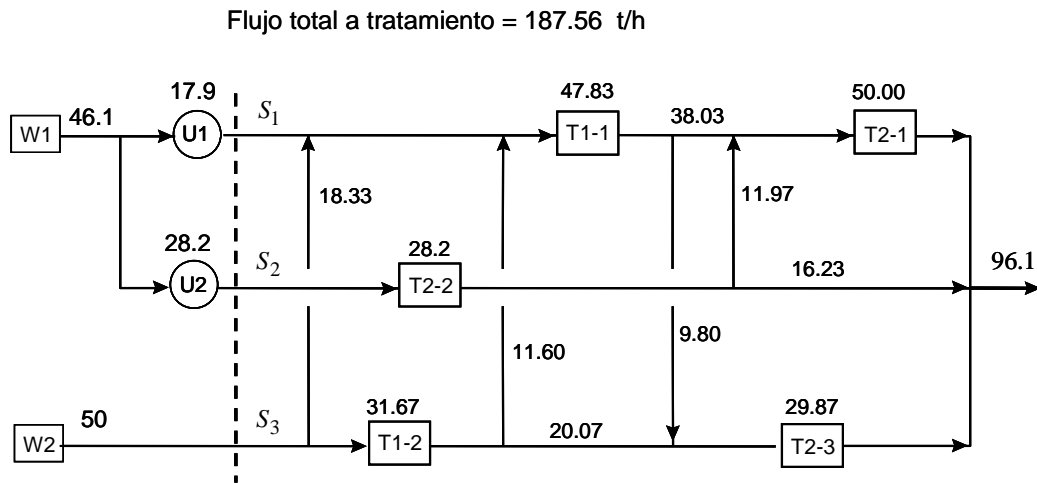


Figura 4.8 Un diseño óptimo de las redes de tratamiento de efluentes. Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

Tabla 4.10 Óptimos Locales con Flujo Mínimo de Efluente a Tratar Igual de 187.569 t/h para la Secuencia T2-T1-T1-T2-T2. Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

solución	T2	T1	T1	T2	T2
1	50.000	29.499	35.480	22.695	49.896
2	50.000	29.499	31.552	28.200	48.319
3	50.000	29.499	16.601	50.000	41.469
4	50.000	29.499	11.970	50.000	46.100
5	50.000	29.499	28.200	50.000	29.870
6	50.000	29.499	12.099	49.964	46.007
7	50.000	29.499	25.661	32.559	49.851
8	50.000	31.881	21.498	28.200	47.989
9	49.766	29.733	28.200	29.870	50.000
10	47.897	29.880	31.621	28.200	49.990
11	41.469	38.030	46.100	11.970	50.000
12	41.469	38.030	11.970	46.100	50.000
13	38.844	40.655	29.870	28.200	50.000
14	38.367	41.131	46.100	11.970	50.000
15	35.367	44.132	28.200	50.000	29.870
16	35.018	44.481	27.735	34.780	45.556
17	32.593	46.906	28.200	29.870	50.000
18	30.925	48.574	50.000	28.200	29.870
19	29.499	50.000	28.200	48.969	30.901
20	29.499	50.000	28.200	50.000	29.870
21	29.499	50.000	28.200	47.892	31.979
22	29.499	50.000	46.100	11.970	50.000
23	29.499	50.000	28.200	29.870	50.000
24	29.499	50.000	28.200	31.233	48.638
25	29.498	50.000	50.000	28.200	49.989

La Tabla 4.9 exhibe también algunas soluciones óptimas locales para la función objetivo del flujo total mínimo a tratar, para las diferentes secuencias de unidades de tratamiento de las 10 superestructuras básicas de red, identificadas para el Caso de Estudio 4.1. Los diferentes tamaños de pasos utilizados de la variable fraccional dentro de la metodología de diseño propuesta son 1, 1/2 1/3, 1/4, y 1/5 en la solución del problema.

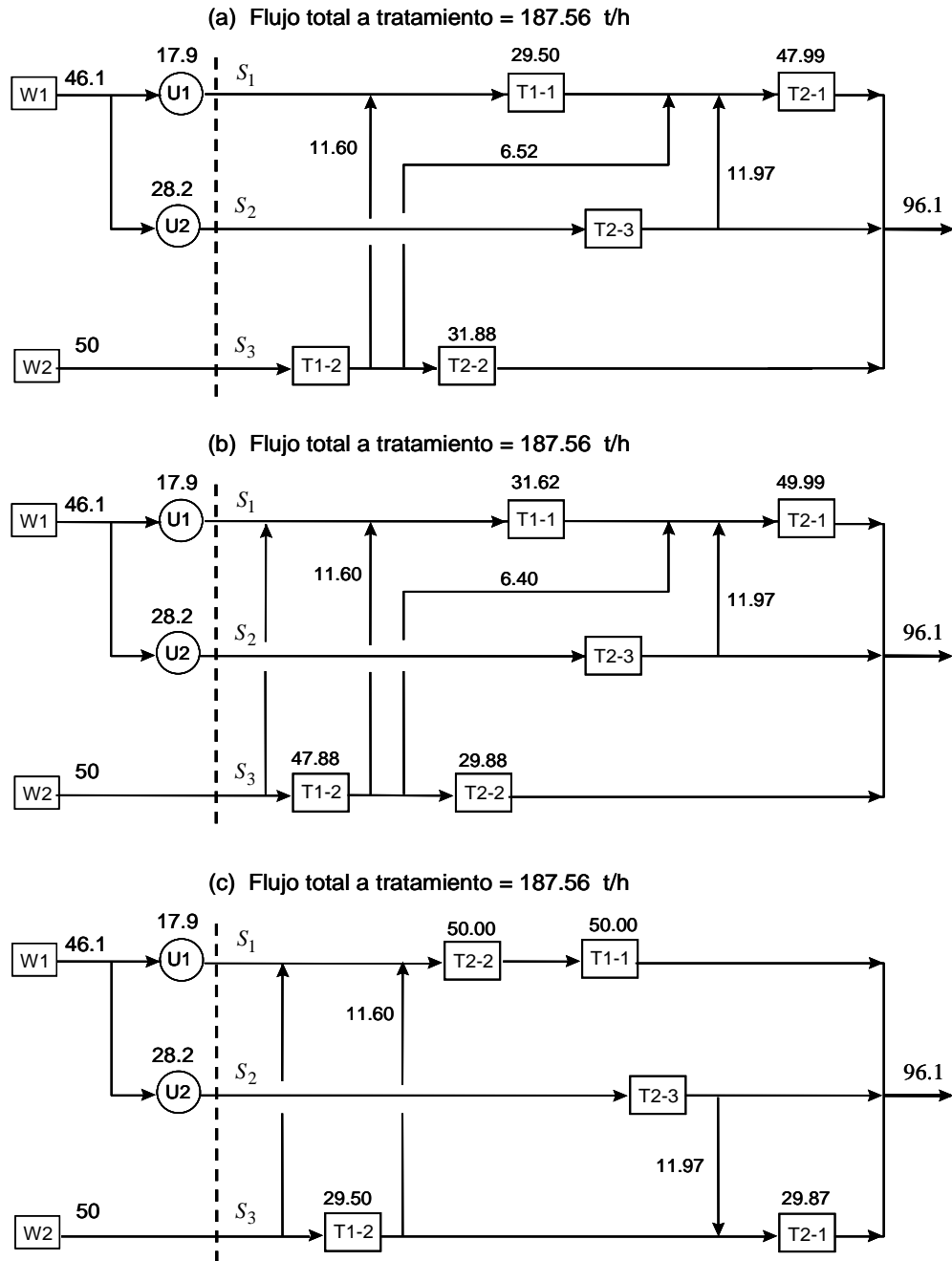


Figura 4.9 Diseños óptimos de las redes de tratamiento de efluentes, para un mismo flujo y arreglo de las unidades de tratamiento, Caso de Estudio 4.1

En la Figura 4.8 se presenta un diseño óptimo de una red de tratamiento para la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, que exhibe un flujo total mínimo a tratamiento de 187.569 t/h, en donde se puede identificar un arreglo de unidades T1-T2-T1-T2-T2. Este diseño de red de tratamiento puede compararse, en la parte del problema identificada para el tratamiento de efluentes, a la topología original propuesta por Tsai y Chang, 2001 (ver Figura 4.4). En la figura 4.8, el flujo de la corriente S_3 que proviene de la fuente de agua W_2 , es tratado completamente entre las unidades de tratamiento del tipo T1. También, los flujos de las corrientes efluentes S_2 y S_3 entrantes son tratadas totalmente en la superestructura básica de red. Para cumplir con las concentraciones ambientales para los contaminantes A y B son necesarias las cinco unidades de tratamiento, con un flujo total tratado en las unidades del tipo T1 de 79.50 t/h y en las unidades T2 de 108.07 t/h.

Otro aspecto que se debe resaltar en los resultados obtenidos con el enfoque de diseño es la multiplicidad de soluciones locales que se presentan por el uso de unidades repetidas en el diseño de la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1, además de los óptimos locales que se exhiben en los arreglos identificados como 1-10 de las unidades de tratamiento en la Tabla 4.9. En la Tabla 4.10 se presentan algunas soluciones óptimas múltiples con un mismo flujo total mínimo a tratamiento de 187.569 t/h, para diseños de red con un arreglo de unidades repetidas de tratamiento en el orden T1-T2-T1-T2-T2. En la columna 1 se representa el número de la solución óptima que se reporta y en las columnas siguientes (2-5) se representa el flujo óptimo de agua por cada una de las cinco unidades de tratamiento consideradas en el problema de diseño. La Tabla 4.10 da evidencia de sólo algunas soluciones óptimas, de decenas existentes, que satisfacen las restricciones del problema. En la Figura 4.9 se muestran tres de las configuraciones óptimas de red que satisfacen el flujo de 187.5692 t/h, correspondientes a los óptimos locales para las soluciones identificadas como 8, 10 y 25 en la Tabla 4.10.

4.4.1.d Resultados computacionales Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

En las Figuras 4.10 y 4.11 se representa de manera gráfica el comportamiento constante de los flujos totales mínimos a tratamiento, asociados con los mejores diseños de las superestructuras básicas de red para los diferentes arreglos de las unidades de tratamiento, en la solución de la Parte 2 del Caso de Estudio 4.1. En la Figura 4.10 se identifica un comportamiento constante para los flujos totales mínimos de efluentes a tratar (187.56 t/h) como función de los diferentes valores del parámetro $\Delta\alpha$, para 7 diferentes arreglos de unidades de tratamiento. Una situación similar se presenta para la Figura 4.11, pero para 3 diferentes arreglos de unidades de tratamiento y un flujo a tratar constante de 187.84 t/h. En las Figuras 4.10 y 4.11, los mejores diseños de red en el espacio de búsqueda de diseño, fueron determinados de inicio con el valor más grande del tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha = 1$, y muestran una tendencia constante con respecto a la disminución de los valores del paso de búsqueda $\Delta\alpha$. En la Figura 4.10, los 7 arreglos identificados de las unidades de tratamiento han presentado los flujos constantes de efluente a tratar de 187.569 t/h con el procedimiento propuesto, y comparativamente están por debajo al flujo reportado de 187.9 t/h por Tsai y Chang, 2001.

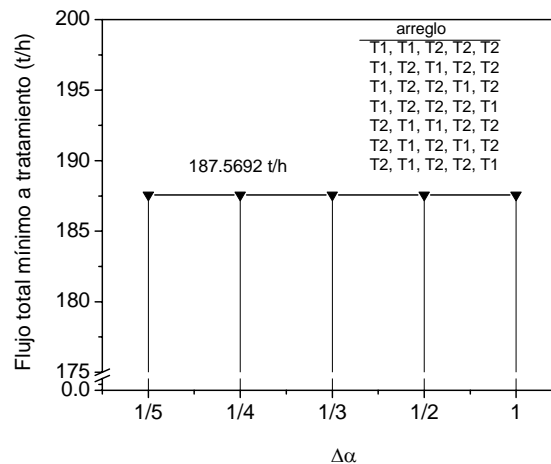


Figura 4.10 Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes valores del intervalo $\Delta\alpha$, flujo de 187.569 t/h, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

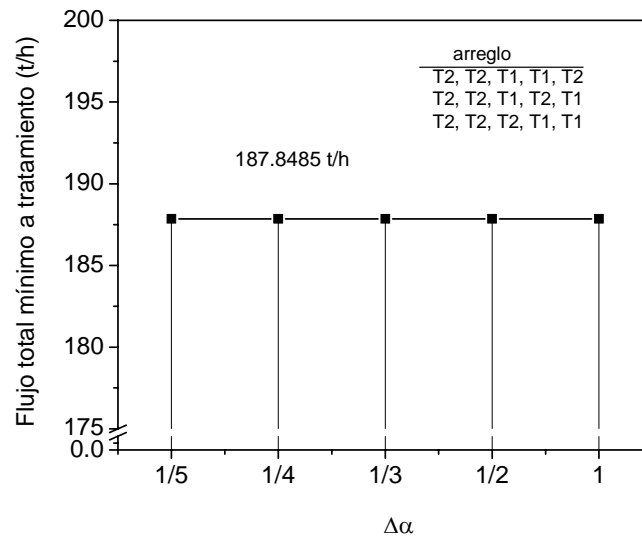


Figura 4.11 Flujo total mínimo a tratamiento para diferentes valores del intervalo $\Delta\alpha$, caso 2 flujo de 187.848 t/h, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

Tabla 4.11 Número de Problemas de PL y de PNL Resueltos con la Aplicación del Enfoque de Solución Paramétrica, Parte 2 del Caso de Estudio 4.1

arreglo	Número de problemas de PL y PNL				
	$\Delta\alpha = 0.20$	$\Delta\alpha = 0.25$	$\Delta\alpha = 0.33$	$\Delta\alpha = 0.5$	$\Delta\alpha = 1$
T1, T1, T2, T2, T2	107640	36750	2835	1097	66
T1, T2, T1, T2, T2	110039	37043	3068	1084	66
T1, T2, T2, T1, T2	110039	37043	3068	1084	66
T1, T2, T2, T2, T1	110039	37043	3068	1084	66
T2, T1, T1, T2, T2	107083	37030	3283	1056	66
T2, T1, T2, T1, T2	107083	37030	3283	1056	66
T2, T1, T2, T2, T1	107083	37030	3283	1056	66
T2, T1, T1, T1, T2	107773	37005	3269	1004	66
T2, T2, T1, T2, T1	107733	37005	3269	1004	66
T2, T2, T2, T1, T1	107733	37005	3269	1004	66

La Tabla 4.11 presenta, por tipo de arreglo de las unidades de tratamiento y tamaño de paso $\Delta\alpha$, el número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación del enfoque de solución paramétrica en el Ejemplo 4.2. Al tomar valores de tamaño de paso menores en el procedimiento de búsqueda, se incrementa de manera importante el número de cálculos realizados.

4.4.2 Caso de Estudio 4.2 (Galan and Grossmann, 1998)

El Caso de Estudio 4.2 consiste de un problema de diseño de un sistema distribuido de tratamiento de efluentes, presentado originalmente por Galan y Grossmann, 1998. El problema involucra 12 corrientes efluentes y 6 contaminantes, que deben ser tratados en 5 unidades de tratamiento. Los datos de las corrientes efluentes se presentan en la Tabla 4.12. Las relaciones de remoción para los procesos de tratamiento se presentan en la Tabla 4.13. Las concentración máxima de contaminante permitido en la descarga de efluentes es de 100 ppm, para todo contaminante.

Tabla 4.12 Datos de las Corrientes Efluentes para el Caso de Estudio 4.2

número de corriente	flujo (t/h)	concentración de contaminantes (ppm)					
		A	B	C	D	E	F
1	19	1100	500	500	200	800	100
2	7	40	0	100	300	910	200
3	8	200	220	200	500	150	0
4	6	60	510	500	200	780	100
5	17	400	170	100	300	900	0
6	12	0	0	0	500	140	0
7	2	610	310	500	2000	830	0
8	24	370	120	100	300	950	300
9	15	290	350	200	500	0	0
10	1	0	0	200	500	100	0
11	33	10	50	1	60	20	30
12	6	300	10	20	150	120	270

Tabla 4.13 Relaciones de Remoción de Contaminantes (%) para los Procesos de Tratamiento para el Caso de Estudio 4.2

procesos de tratamiento	contaminantes					
	A	B	C	D	E	F
1	99	0	0	0	0	0
2	0	99	0	0	0	0
3	0	0	99	0	0	0
4	0	0	0	99	90	0
5	0	0	0	0	99	99

Galan y Grossmann (1998) presentaron un modelo de PNL y de PNLEM para la superestructura presentada por Wang y Smith (1994b), para el diseño de plantas distribuidas de tratamiento de efluentes. La idea básica del procedimiento es resolver un modelo relajado de PL (PLEM) del modelo no convexo original y usar esta solución como un punto de inicio del problema de PNL. Diferentes funciones objetivo son usadas en el problema relajado, las cuales conducen a diferentes óptimos y por lo tanto a diferentes puntos de inicio para el problema de PNL, el cual puede llevar a diferentes soluciones óptimas locales. Cuando varias soluciones son obtenidas, se selecciona la mejor función objetivo como la cota superior del óptimo global. Galan y Grossmann (1998) aplicaron este procedimiento multiarranque al problema de diseño, reportando en la solución el uso de las cinco unidades y un flujo total mínimo a tratamiento igual a 191.61 t/h. Sin embargo, los detalles operacionales del diseño y la topología desarrollada durante la optimización del sistema no fueron reportados por Galan y Grossmann.

Tabla 4.14 Lazos de Control sobre las Variables Fraccionales, Caso de Estudio 4.2

unidades de tratamiento	variables fraccionales
1	$\alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{1,4}, \alpha_{1,5}$
2	$\alpha_{2,3}, \alpha_{2,4}, \alpha_{2,5}$
3	$\alpha_{3,4}, \alpha_{3,5}$
4	$\alpha_{4,5}$
5	

La metodología de diseño propuesta en este capítulo es aplicada al Caso de Estudio 4.2 que involucra 5 unidades de tratamiento. La solución de este problema de diseño requiere la optimización paramétrica de $5! = 120$ superestructuras básicas de red. Estas superestructuras corresponden a los diferentes arreglos de las unidades de tratamiento, es decir, 12345, 12354, ..., 54321. La optimización paramétrica se realiza sobre las variables fraccionales, como se muestra en la Tabla 4.14. Los resultados de la solución del problema de diseño del Caso de Estudio 4.2, mediante la metodología de diseño propuesta, son presentados en la Tabla 4.15. La mejor solución para el valor de la función objetivo corresponde a un flujo total mínimo a tratamiento de 176.192 t/h. En la solución del Caso de Estudio 4.2, se exhiben soluciones múltiples óptimas, es decir, el resultado del flujo total mínimo a tratar de 176.192 t/h se presenta para los diseños insertados en las superestructuras básicas de red, con arreglo de unidades de tratamiento de 32145*, 3215*4, 421*53, 4*3251 y 43*152. Un asterisco significa que no existe esa unidad en la solución del problema y en el diseño de la estructura requiere de sólo 4 unidades de tratamiento (Tabla 4.15).

La Figura 4.12 presenta un diseño óptimo de red para el arreglo de operaciones de tratamiento 32145*, con flujo total mínimo a tratamiento de 176.192 t/h. Respecto al comportamiento operacional del sistema de tratamiento, las corrientes efluentes 1, 5, 7 y 8 son totalmente tratadas, a diferencia de las corrientes 4, 6, 10, 11 y 12, que son enviadas directamente al mezclador final de la red sin recibir algún tipo de tratamiento. Estas últimas corrientes ejercen una acción de dilución importante en la concentración final de los contaminantes, en particular, la corriente 11 tiene el mayor flujo volumétrico de 33 t/h de todas las corrientes. Las corrientes efluentes 2 y 3 son parcialmente tratadas en la cuarta unidad de tratamiento y la corriente 9 es parcialmente tratada en la segunda unidad de tratamiento. En el diseño de red para el arreglo 32145* de unidades de tratamiento de la Figura 4.12, las unidades 2, 1 y 4 reciben el flujo total tratado de las unidades 3, 2 y 1 respectivamente. Los contaminantes A, B, C, D, y E se descargan al ambiente en sus límites de concentración de diseño, la concentración final del contaminante F es de 91.4 ppm.

Tabla 4.15 Flujos Totales Mínimos de Efluentes Respecto a los Diferentes Arreglos de las Unidades de Tratamiento, Caso de Estudio 4.2

flujo óptimo (t/h)	arreglos de unidades de tratamiento ^a								
176.192	32145*	3215*4	421*53	4*3251	43*152				
177.326	31245*	3125*4	4*2351	412*53	41*352				
183.051	23145*	2315*4	241*53	3*4251	34*152				
184.884	21345*	2135*4	3*2451	31*452	214*53				
187.256	24135*	2513*4	251*43	35241	35*142				
188.704	53241	53142	54231	54213	54312	54123	54132	54321	
189.528	52341	52431	53421	53412					
189.709	21435*	2153*4	215*43	3*2541	31*542				
189.797	53124	52134	52143	53214					
190.066	52314	52413	51234	51243	51324	51342	51423	51432	
191.179	1325*4	142*53	14*352	2*4351	13245*				
191.313	42135*								
191.401	41235*								
191.61 t/h solución reportada por Galan y Grossmann									
192.285	12345*	124*53	13*452	2*3451	1235*4				
197.502	45312	45231	45213	45321	45123	45132			
198.39	43215	43125							
198.772	42315	41325							
199.058	12435*	1253*4	125*43	2*3541	13*542				
199.617	15234	15243							
199.634	15342	15423	15432	25341	25431				
199.698	42531	43521	43512						
199.894	14235*								
200.179	15324								
201.307	42513	41523	41532						
201.861	14325*								
203.051	14523	14532							
203.639	24531								
204.363	1352*4	13425*							
204.757	31425	31524							
204.89	34125	3*5124							
206.551	35421	35412							
208.051	34521	34512							
209.137	34215	35214							
211.6	32415	32514							
216.557	25413								
216.576	25314								
217.374	24315								
219.505	23415	23514	24513						

^aUn asterisco significa que la unidad marcada no es necesaria en la solución

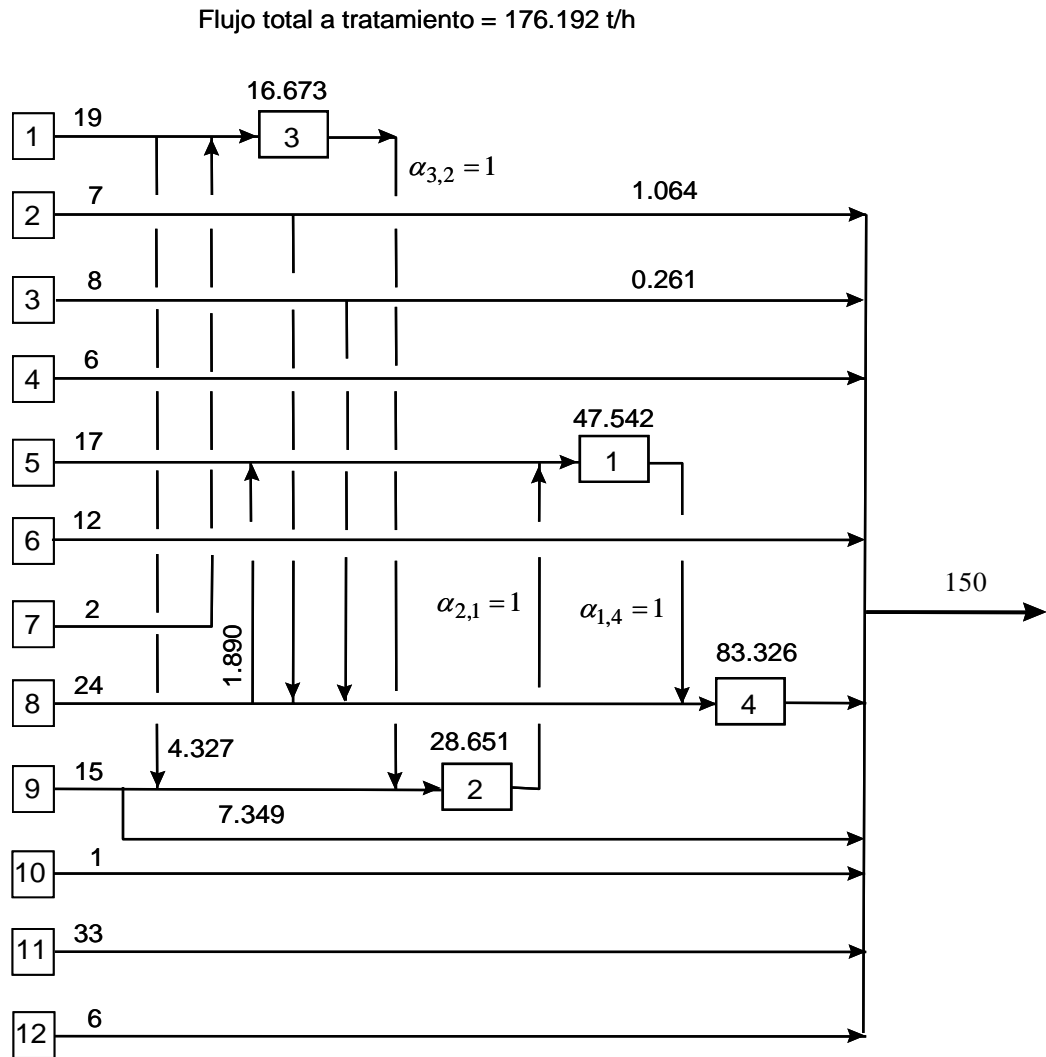


Figura 4.12 Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 3-2-1-4-5*, Caso de Estudio 4.2

En la Figura 4.13, se representa el diseño óptimo de la superestructura básica de red con un flujo total mínimo a tratamiento de 177.326 t/h, para un arreglo de 4*2351 de unidades de tratamiento. Para este flujo total mínimo de 177.326 t/h también existen soluciones óptimas múltiples, que corresponden a arreglos de unidades de tratamiento de 31245*, 31254*, 412*53 y 41*352. En el diseño de red de tratamiento de efluentes para la

operación del sistema con arreglo 4*2351, la unidad de tratamiento 3 sólo recibe efluente de la unidad de tratamiento 2 y no recibe alimentación de las corrientes efluentes iniciales. En la Tabla 4.15 se muestran otras soluciones óptimas múltiples asociados con los arreglos de unidades y flujos totales óptimos a tratamiento.

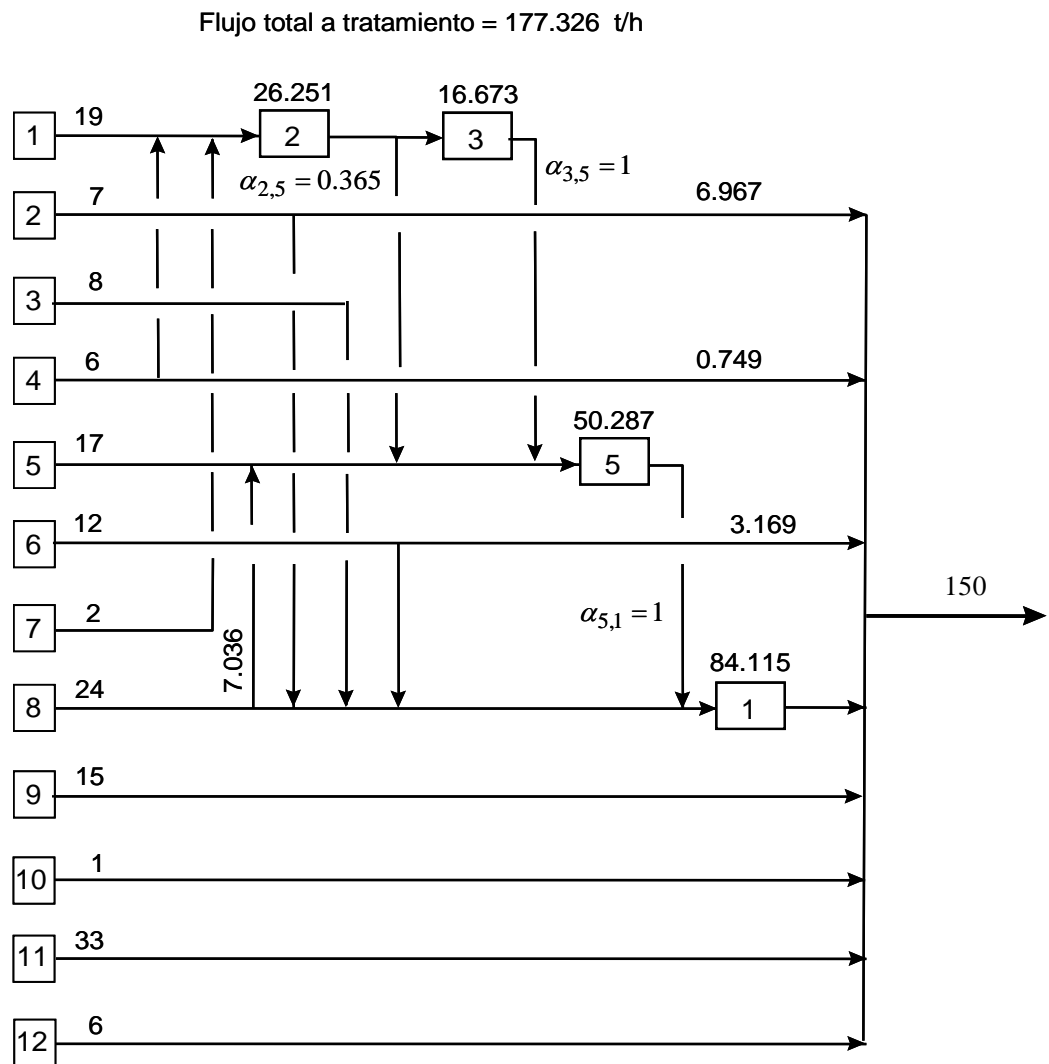


Figura 4.13 Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 4*-2-3-5-1, Caso de Estudio 4.2

Otro resultado operacional se presenta en la Figura 4.14, en donde se muestra el mejor diseño de superestructura básica de red con un flujo total mínimo a tratamiento de 183.052 t/h, para un arreglo de 241*53 de unidades de tratamiento. Para el flujo total mínimo de 183.052 t/h también existen a soluciones óptimas múltiples que corresponden a arreglos de unidades de tratamiento de 23145*, 23154*, 3*4251 y 34*152.

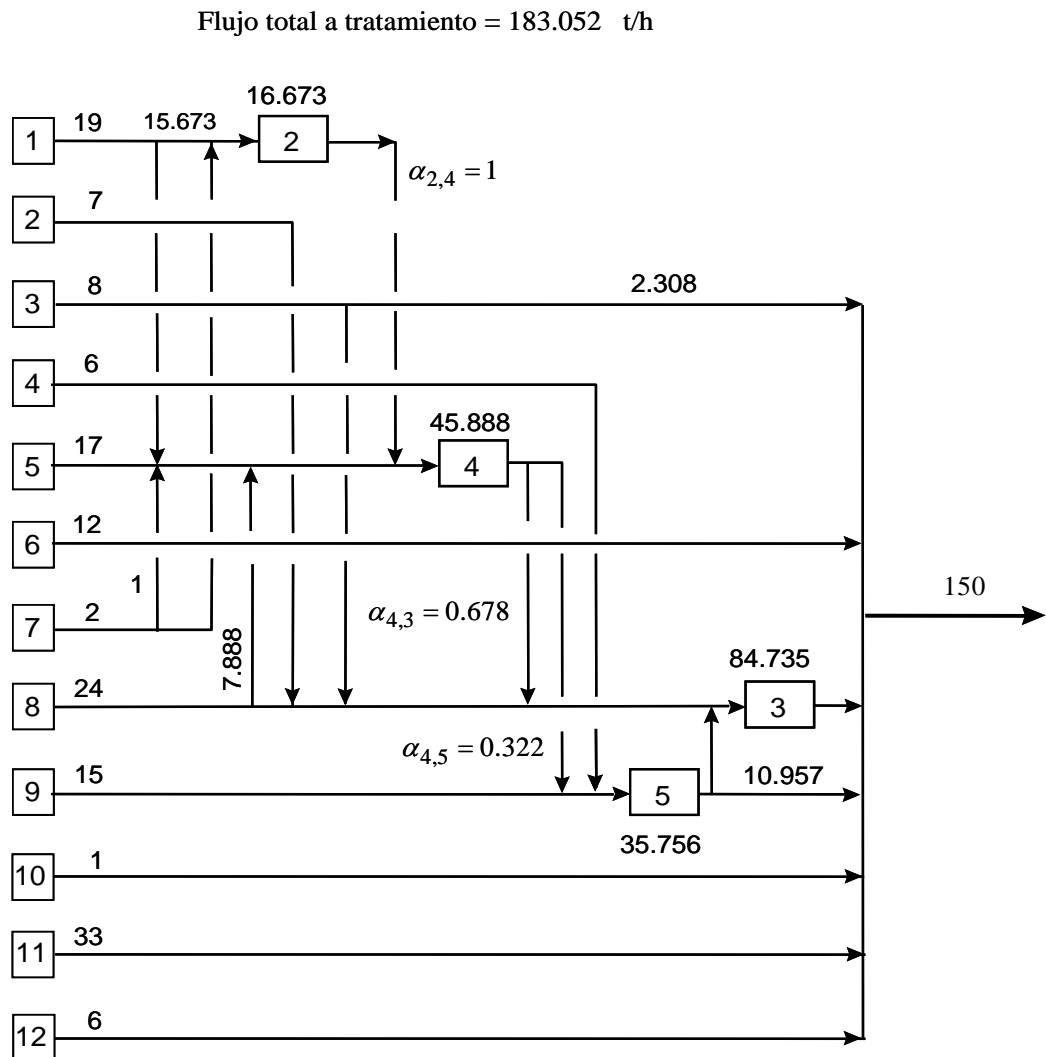


Figura 4.14 Diseño óptimo de la red de tratamiento para el arreglo 2-4-1*-5-3, Caso de Estudio 4.2

Con base en la optimización de las superestructuras básicas de red con el uso de la metodología de diseño propuesta, se presentan los siguientes resultados operacionales y/o estructurales para el Caso de Estudio 4.2.

- En la Tabla 4.15 se pueden localizar 13 valores de los flujos totales mínimos a tratamiento asociados a los mejores diseños de superestructuras básicas de red, que están por debajo de la solución del flujo mínimo de efluente de 191.61 t/h, reportado por Galan y Grossmann, 1998. Este último flujo se ha marcado como un valor de referencia en la tabla 4.15.
- Con relación al punto anterior, 61 diseños de las superestructuras básicas de red de los 120 posibles arreglos de unidades de tratamiento presentan un flujo total mínimo de efluente a tratar por debajo del flujo mínimo de efluente de 191.61 t/h reportado Galan y Grossmann (Tabla 4.15).
- Con relación al número de unidades de tratamiento necesarias para cumplir las concentraciones de descarga de los contaminantes, 36 de los diseños óptimos obtenidos requieren sólo de 4 unidades de tratamiento para satisfacer las restricciones del problema (Tabla 4.15), todos están por debajo del flujo mínimo de efluente de 191.61 t/h reportado Galan y Grossmann, en donde la solución presentada requiere de la presencia de las cinco unidades de tratamiento disponibles.

En la Tabla 4.16 se muestra una relación de los valores óptimos locales, para los 10 mejores diseños de arreglos de unidades de tratamiento, mostrados en la columna 2, derivada de los resultados de la optimización paramétrica de las superestructuras básicas de redes de tratamiento (Tabla 4.15). Para la solución del problema de diseño se han utilizado diferentes tamaños de paso del parámetro $\Delta\alpha = 1, 1/2, 1/3, 1/4$ y $1/5$. De la Tabla 4.16 también se exhiben valores por debajo del flujo total reportado por Galan y Grossmann (1998), de algunas soluciones locales para el flujo total tratado por secuencia de las unidades de tratamiento.

Tabla 4.16 Flujos Óptimos Locales para Algunos Arreglos de Unidades de Tratamiento, Caso de Estudio 4.2

no. arreglo	secuencia de unidades de tratamiento	flujos óptimos t/h							
1	32145*	176.192	190.616						
2	3215*4	176.192	190.616	190.884					
3	421*53	176.192	190.616	190.884	193.596	206.317	209.421	212.004	
		212.160	218.032						
4	4*3251	176.192	190.534	190.616	190.884	209.038	210.381	210.820	
		211.658	212.004	218.032					
5	43*152	176.192	190.534	190.616	190.884	206.317	210.381	210.820	
		212.004	218.032						
6	31245*	177.326	191.431	191.570	193.887				
7	3125*4	177.326	191.431	191.570	193.887				
8	4*2351	177.326	191.431	191.570	193.866	193.887	193.902	194.671	
		207.593	210.226	210.820	213.322				
9	412*53	177.326	191.431	191.570	193.887	193.902	194.012	206.317	
		207.659	222.091						
10	41*352	177.326	191.431	191.570	193.887	193.902	194.218	194.365	
		207.659	216.156	222.091					

4.4.2.a Resultados computacionales del Caso de Estudio 4.2

En la Tabla 4.17 se muestran los flujos totales mínimos a tratamiento asociados con los mejores diseños de red, para diez arreglos de superestructuras básicas involucradas en el Caso de Estudio 4.2 (Tabla 4.15). Los valores en los flujos totales a tratamiento se han determinado para diferentes valores de tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha$. Se puede notar la gran consistencia en los resultados para el flujo total mínimo a tratar para los diferentes tamaños de paso utilizados.

La Tabla 4.18 presenta el número de problemas de PL y de PNL resueltos con la aplicación de la metodología de diseño propuesta, para el Caso de Estudio 4.2, en función del arreglo de las unidades de tratamiento y para diferentes tamaños de paso de búsqueda $\Delta\alpha$.

Tabla 4.17 Flujo Total Mínimo de Efluente a Tratar para los Mejores Diseños de Red. Caso de Estudio 4.2

arreglo	flujo total mínimo a tratamiento (t/h)				
	$\Delta\alpha = 0.20$	$\Delta\alpha = 0.25$	$\Delta\alpha = 0.33$	$\Delta\alpha = 0.50$	$\Delta\alpha = 1.0$
32145*	176.192	176.192	176.192	176.192	176.192
3215*4	176.192	176.192	176.192	176.192	176.192
421*53	176.192	176.192	176.192	176.192	176.192
4*3251	176.192	176.192	176.192	176.192	176.192
43*152	176.192	176.192	176.192	176.192	176.192
31245*	177.326	177.326	177.326	177.326	177.326
3125*4	177.326	177.326	177.326	177.326	177.326
4*2351	177.326	177.326	177.326	177.326	177.326
412*53	177.326	177.326	177.326	177.326	177.326
41*352	177.326	177.326	177.326	177.326	177.326

Tabla 4.18 Número de Problemas de PL y de PNL Resueltos para los Mejores Diseños de Red. Caso de Estudio 4.2

arreglo	Número de problemas de PL y PNL				
	$\Delta\alpha = 0.20$	$\Delta\alpha = 0.25$	$\Delta\alpha = 0.33$	$\Delta\alpha = 0.50$	$\Delta\alpha = 1.0$
32145*	108604	37168	3328	1040	64
3215*4	108124	37242	3328	977	82
421*53	108186	37235	2922	955	98
4*3251	107866	37129	3002	1210	100
43*152	107859	38043	3188	1095	99
31245*	108763	37373	3696	1012	75
3125*4	111121	37139	3244	1222	82
4*2351	107783	36998	2867	1372	99
412*53	107834	37023	3318	1112	77
41*352	107663	36769	2861	1073	100

En la Tabla 4.19 se representa la estrategia de solución seguida para resolver el número de problemas de PL y PNL, en función del tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha$, que involucra cinco unidades de tratamiento presentes para el Caso de Estudio 4.2. El número de problemas de PL y PNL aumenta considerablemente al utilizar tamaños de paso $\Delta\alpha$ menores (Tabla 4.18).

- Con la aplicación del procedimiento de diseño se determinan los flujos totales de efluentes asociados a los diferentes arreglos de las unidades de tratamiento (Tabla 4.15), los valores de tamaño de paso de búsqueda utilizados son $\Delta\alpha = 1$ y $1/2$. Para el Caso de Estudio 4.2 los resultados para valores de tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha = 1/2$, han mostrado una gran consistencia (116/120) con los resultados de la función objetivo para el tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha = 1$, lo que permite considerar una estrategia que permita una disminución del espacio explorado, reduciendo el número de superestructuras exploradas en el espacio de diseño (Tabla 4.19).
- Se realiza una selección de los arreglos de unidades de tratamiento para aplicar el procedimiento de diseño para valores de tamaño de paso de búsqueda $\Delta\alpha = 1/3$, para determinar los flujos totales de efluentes para estos arreglos de unidades de tratamiento. Para el Caso de Estudio 4.2 se han seleccionado superestructuras de red que han presentado los flujos totales de efluentes de 176.192, 177.326, 183.051 y 184.884 t/h, que en total significan los 5 mejores arreglos de unidades de tratamiento por cada flujo seleccionado (Tabla 4.15).
- A continuación, el procedimiento de diseño es usado para superestructuras de red que han presentado los mejores flujos totales de efluentes de 176.192 y 177.326 t/h, los valores de tamaño de paso de búsqueda utilizados son $\Delta\alpha = 1/4$ y $1/5$. Los resultados de los flujos totales mínimos de efluentes a tratar han mostrado una gran consistencia y estos valores se exhiben en la Tabla 4.17

Tabla 4.19. Estrategia de Solución en el Enfoque de Optimización Paramétrica para los Mejores Diseños de Red, en el Caso de Estudio 4.2

arreglo	Número de problemas de PL y PNL				
	$\Delta\alpha = 0.20$	$\Delta\alpha = 0.25$	$\Delta\alpha = 0.33$	$\Delta\alpha = 0.50$	$\Delta\alpha = 1.0$
176.192	x	x	x	x	x
177.326	x	x	x	x	x
183.051			x	x	x
184.884			x	x	x
todas				x	x

4.4.3 Resumen de los resultados de los Casos de Estudio

En este capítulo se han tratado dos Casos de Estudio de problemas de diseño. Los resultados obtenidos mediante la metodología de diseño propuesta, superan a los mejores diseños de red de tratamiento de efluentes reportados en la literatura, para estos dos Casos de Estudio. También se da evidencia de la existencia de la multiplicidad de soluciones óptimas locales que se exhiben en los Casos de Estudio 4.1 y 4.2. Los resultados muestran las siguientes características distintivas.

Caso de Estudio 4.1

La solución reportada por Tsai y Chang (2001) presenta una configuración de diseño de red que exhibe un arreglo 2-1 de unidades de tratamiento (Figura 4.3), y un flujo total de efluente a tratar de 87.90 t/h, para la solución del problema de diseño en la parte 1. El mejor diseño de red por el método de diseño desarrollado muestra una estructura con arreglo de unidades de tratamiento 1-2 (Figura 4.7a), y exhibe un flujo mínimo total de efluente a tratar de 87.0 t/h. La diferencia en flujo de efluente a tratamiento corresponde a 0.9 t/h con respecto a la solución de Tsai y Chang. Nuestro resultado ha mejorado la solución reportada en 1.023%.

Para la parte 2 del Caso de Estudio, el problema de diseño involucra la presencia de unidades repetidas de tratamiento en una configuración de 5 unidades de tratamiento (Figura 4.4). La solución reportada por Tsai y Chang (2001) para el flujo mínimo total de efluente a tratar corresponde a 187.90 t/h. Nuestra solución (Figura 4.8) para el flujo mínimo total corresponde a 187.569 t/h; este resultado mejora en 0.176% a la mejor solución presentada por Tsai y Chang, en la parte de tratamiento de efluentes.

Tabla 4.20 Comparación de Resultados para el Caso de Estudio 4.1

solución	flujos totales (t/h)		diferencia en flujos (t/h)	diferencia (%)
	la mejor solución Tsai y Chang	metodología de diseño propuesta, arreglo 1-2		
parte 1	87.90	87.0	0.90	1.023%
parte 2	187.90	187.569	0.331	0.176%

Las técnicas evolutivas imitan el comportamiento de la naturaleza y son de gran valor. Sin embargo, se tiene que señalar que las soluciones obtenidas en este trabajo están basadas enteramente en la solución de un conjunto de problemas de programación lineal, y mejoran las soluciones reportadas con base en evolución de especies mediante estrategias de algoritmos genéticos propuestos por Tsai y Chang, 2001.

Caso de Estudio 4.2

La solución reportada por Galan y Grossmann (1998) para el flujo mínimo total de efluente a tratar corresponde a 176.192 t/h. En la tabla 4.21 se muestran los principales resultados por el método de diseño desarrollado. Por medio de la metodología de diseño propuesta se obtiene un flujo mínimo total a tratamiento de 176.192 t/h. La diferencia en flujo a tratamiento corresponde a 15.418 t/h de efluente y nuestro resultado ha mejorado la solución reportada en 8.751%, respecto a la solución de Galan y Grossmann (1998).

Tabla 4.21 Comparación de Resultados para el Caso de Estudio 4.2

flujos totales (t/h)			
la mejor solución	metodología de diseño	diferencia en	diferencia
Galan y Grossmann	propuesta	flujos (t/h)	(%)
191.61	176.192	15.418	8.751%

También muy importantes resultados son los 13 valores de los flujos totales mínimos a tratamiento obtenidos por debajo de la solución del flujo mínimo de efluente de 191.61 t/h, reportado por Galan y Grossmann, que corresponde a 61 diseños de las superestructuras básicas de red de los 120 posibles arreglos de unidades de tratamiento.

Otro resultado que debe ser resaltado corresponde al número de unidades de tratamiento necesarias para cumplir las concentraciones de descarga de los contaminantes, en donde 36 de los diseños óptimos obtenidos requieren sólo de 4 unidades de tratamiento para satisfacer las restricciones del problema, todos por debajo del flujo mínimo de efluente de 191.61 t/h, reportado Galan y Grossmann, en donde la solución presentada requiere de la presencia de las cinco unidades de tratamiento disponibles.

4.5 Conclusiones

En este capítulo se presentó un procedimiento de diseño de síntesis de redes de tratamiento distribuido, con un modelo matemático alternativo para el modelado de una serie de problemas que son resueltos para determinar la solución óptima del problema. En la propuesta del modelo matemático de optimización alternativo los flujos de contaminantes se exhiben de manera explícita, y se explota el concepto de partición del espacio de búsqueda de diseño y optimización paramétrica desarrollados en el Capítulo 3. Para tratar

con las dificultades asociadas a la naturaleza no convexa, en el modelo matemático estructurado que se presenta se logra reducir la presencia de no convexidades implicadas en el diseño de PNL de redes de tratamiento. La idea principal es presentar una formulación del problema buscando que sea un problema de programación lineal; se pretende una metodología de optimización conceptualmente más sencilla y directa, que permita realizar la tarea de síntesis para encontrar el mejor diseño de redes de tratamiento de efluentes.

Se han presentado en este capítulo problemas de diseño de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, en dos Casos de Estudio, con un nivel de complejidad que involucra cinco unidades de tratamiento. La eficacia de las técnicas de solución y los resultados obtenidos con otros métodos reportados en la literatura se comparan con los resultados del enfoque de diseño propuesto en este capítulo. Los resultados obtenidos con la metodología de diseño propuesta, exhiben diseños superiores de redes distribuidas de tratamiento de efluentes y mejores resultados para la función objetivo del flujo total mínimo a tratamiento, comparando con los diseños que han sido reportados en la literatura.

También, derivado de los resultados obtenidos de la optimización paramétrica de las superestructuras básicas de redes mediante la metodología de diseño propuesta, se da evidencia de la existencia de la multiplicidad de soluciones óptimas locales por causas, de las restricciones y características particulares de cada problema de diseño en los Casos de Estudio 4.1 y 4.2.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

5.1 Conclusiones

En esta tesis se desarrolló una metodología sistemática para la optimización y síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes. El desarrollo de procedimientos sistemáticos y automatizados de tales sistemas, permiten el diseño de la estructura y el cálculo de sus propiedades al menor costo total. La investigación se ha extendido para evaluar la robustez del diseño en sistemas de tratamiento para explorar la posibilidad de mejorar su construcción y funcionamiento por conceptos de análisis de sensibilidad en las variables de diseño. Lo anterior se ha logrado específicamente mediante el desarrollo de conceptos de partición del espacio de búsqueda de diseño no convexo y superestructura básica de red, la formulación de modelos matemáticos estructurados de programación no lineal (PNL) y programación lineal (PL) del proceso de tratamiento en estado estacionario, y propuestas robustas de estrategias de solución. El análisis de la robustez del diseño proporciona un entendimiento sobre las limitaciones y aplicabilidad de los resultados a problemas de diseño óptimos de superestructuras básicas de red. La relevancia de la propuesta de la metodología sistemática para la optimización y síntesis de sistemas distribuidos de tratamiento de efluentes es que producirá, lo más probable, un diseño óptimo global de red insertado en la superestructura básica de red o dar evidencia sobre la no factibilidad del Modelo no convexo.

Para el desarrollo del procedimiento de síntesis, las siguientes ideas y resultados particulares fueron producidos:

5.2 Contribuciones del trabajo de investigación

5.2.1 Sobre la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

1. Un modelo de programación lineal se desarrolló, para el diseño óptimo de subredes de tratamiento de efluentes, que permite resolver de manera sistemática y simultánea la determinación del flujo mínimo de agua a tratamiento y el diseño de una subred de tratamiento, dentro del contexto de la metodología de punto pliegue para el diseño de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, propuesta por Wang y Smith (1994b) y Kuo y Smith (1997). La relevancia en el modelo matemático desarrollado es que puede ser resuelto de manera rigurosa a través de la solución de un sólo programa lineal, esto sin importar el número de corrientes efluentes o contaminantes presentes en el problema (Capítulo 2).
2. Una propuesta de partición del espacio de búsqueda de diseño no convexo mediante el concepto de descomposición de superestructuras complejas en un conjunto de superestructuras básicas de red, en tamaño y estructura de menor complejidad para la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes (Capítulo 3). La importancia de este esquema de partición del espacio de búsqueda de diseño no convexo es que proporciona una manera de conducir una exploración sistemática de la región de diseño que permita diseños óptimos de redes de tratamiento de efluentes alternativas. También se debe destacar que el enfoque de descomposición para superestructuras complejas propuesto, representa una variante inédita de diseño en los procedimientos y estrategias de solución en sistemas de optimización, en comparación a las metodologías de descomposición de modelos matemáticos de optimización no convexos, en este tipo de problemas.
3. Un modelo matemático no convexo de PNL estructurado (*BNS-n*) ha sido desarrollado como parte del procedimiento progresivo de diseño para tratar con la

naturaleza no convexa del problema y reducir la presencia de términos bilineales en las restricciones. El modelo incluye términos bilineales en las ecuaciones (3.3), (3.5)-(3.7). La importancia en el procedimiento de diseño propuesto es que se induce a explotar la presencia de las variables fraccionales de flujo del tipo $\alpha_{\ell,k}$, o $\alpha_{k,e}$ en todos los productos bilineales en las ecuaciones de masa de contaminantes del Modelo no convexo estructurado *BNS-n*, con la finalidad del control de la complejidad del modelo estructurado. Se debe destacar que la optimización del modelo se realiza, a diferencia de la mayoría de los problemas no lineales, a partir de puntos de arranque generados de manera sistemática y organizada a través de la solución de un conjunto de problemas de programación lineales, y los valores de las variables fraccionales se mantienen en regiones acotadas, que tienen representación o sentido físico y evitan operaciones indefinidas en soluciones factibles del modelo.

4. Un procedimiento heurístico-paramétrico de optimización fue desarrollado. La solución secuencial de solución para los modelos de PL y PNL en dos fases fue ideado para conducir una búsqueda sistemática en el espacio de solución implicado por las superestructuras básicas de red. El proceso de optimización tiene un significado importante en los resultados, dado el estado del arte para la solución de modelos de PL, la determinación de diseños de red factibles en la fase I del enfoque de solución propuesto llega a ser una tarea muy robusta, de tal forma que entrega un punto de arranque factible para la optimización del modelo no convexo *BNS - r* en la fase 2, o prueba la no factibilidad de este modelo, bajo el correspondiente conjunto de valores fijados de la variable fraccional. También, se debe resaltar en los resultados que toda solución óptima obtenida en la fase I proporciona, no sólo el mejor diseño de red de tratamiento realizable asociado a los valores correspondientes de la variable fraccional, sino que también tiene un significado en el suministro de información que es útil para identificar y acotar la región del espacio de búsqueda abarcado, en el cual diseños de red de tratamiento factibles pueden ser encontrados. Como resultado más importante, producirá lo más probable, un diseño óptimo global de red insertado en la

superestructura básica de red o dar evidencia sobre la no factibilidad del Modelo no convexo (*BNS-r*).

5. Un modelo matemático de optimización alternativo fue desarrollado, dentro del procedimiento de síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes, en donde los flujos de contaminantes se exhiben de manera explícita y se presenta una estrategia heurística de solución en dos fases, extendida a problemas que involucran una cantidad mayor de unidades de tratamiento (Capítulo 4). Son resueltos dos Casos de Estudio reportados en la literatura, en los cuales hemos mejorado los resultados. Un caso de Estudio ha sido reportado por Tsai y Chang (2001), resuelto por técnicas de algoritmos genéticos, en donde hemos mejorado los resultados para la función objetivo en 0.618% y 0.176% para la parte 1 y 2 del problema de diseño, respectivamente. El otro caso reportado en la literatura, es el resuelto por Galan y Grossmann (1998), por técnicas de optimización multiarranque de programación matemática. En este segundo caso hemos mejorado el resultado para la función objetivo en 8.751% para el flujo total de efluente a tratamiento (ver 4.4.3). No obstante, la búsqueda de resultados óptimos globales por diferentes estrategias de optimización, en ambos casos han contribuido al desarrollo de la síntesis de redes de tratamiento distribuido de efluentes.

5.2.2 Sobre el diseño robusto de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

Dentro del procedimiento heurístico-paramétrico que se ha propuesto, para la optimización y síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes se ha investigado sobre la robustez del diseño y se ha explorado la posibilidad de mejorar su construcción por conceptos de análisis de sensibilidad en las variables de diseño. Los resultados tienen como significado que se pueden lograr diseños óptimos de redes distribuidas de tratamiento de efluentes con alternativas atractivas de diseño y útiles para la toma de decisiones durante el

diseño. Para la investigación sobre la robustez del diseño, las siguientes ideas y resultados particulares fueron producidos.

- 1 Se ha investigado sobre escenarios de flujo mínimo requerido, para lograr diferentes valores de límite ambiental de concentración de contaminante en la descarga (Ejemplo 3.1). También, se resuelve de manera directa, la población de las corrientes que necesitan ser tratadas para alcanzar el límite ambiental de descarga (Figura 3.5). Estos resultados son importantes en la representación del flujo mínimo requerido, para el caso de un contaminante, ya que compara de manera más simple con las reglas de diseño de la tecnología de punto de pliegue o Water Pinch.
- 2 Se ha desarrollado para el flujo mínimo a tratamiento que sería requerido, un análisis paramétrico sobre las variables de diseño, bajo una variedad de escenarios hipotéticos. (a) límite ambiental de concentración (b) relaciones de remoción en unidades de tratamiento para los contaminantes y (c) flujos de las corrientes efluentes que entran al sistema. Los resultados muestran de manera concluyente, que el diseño óptimo de la red distribuida de tratamiento de efluentes en el Ejemplo 3.2, es operacionalmente no atractiva.
- 3 Se demostró tendencias de costos totales de tratamiento, con respecto al análisis paramétrico de distribuciones óptimas de cargas másicas de un sistema (Ejemplo 3.3). Estos resultados permitieron evidenciar que la gráfica de tendencia para la distribución de carga másica propuesta por Kuo y Smith (1997), fue elaborada de manera incorrecta. También, corresponden al análisis paramétrico de la distribución óptima de cargas másicas de un sistema y el estudio del costo-beneficio de manejo de flujos en determinadas unidades de una red de tratamiento bajo escenarios de diferentes coeficientes de costos de tratamiento. Los resultados tienen clara repercusión en la toma de decisiones por las tendencias de los costos de inversión de las unidades de tratamiento.

- 4 El procedimiento heurístico-paramétrico de optimización propuesto permite identificar, para este tipo de problemas, regiones de diseño a través del desarrollo de superficies totales mínimas de costos de tratamiento y de mapas de contorno, que establecen el predominio de ciertos arreglos de unidades de tratamiento sobre porciones particulares del espacio de búsqueda de diseño (Ejemplo 3.4). La importancia en los resultados se pueden reflejar en el análisis de los costos de tratamiento, por efecto de la variación individual o simultánea de las concentraciones de los contaminantes y la selección de redes alternativas de diseño.

- 5 Mapas de contorno de flujo total mínimo a tratamiento son desarrollados con la optimización paramétrica del Modelo $BNS - r$. Las porciones de los mapas de contorno, en los Ejemplos 3.6 y 3.7, en los cuales los contornos de nivel incluidos, tienen como significado las regiones del diseño en las cuales pueden ser obtenidas redes de tratamiento factibles. Por otra parte, el significado de los resultados en áreas sombreadas en los mapas corresponden a las regiones de diseño en las cuales ningún diseño factible existe. Se demostró que minimizando el flujo total a tratamiento, no necesariamente corresponde al menor costo en el diseño de red óptimo, cuando son utilizadas funciones de costo, como en el caso del Ejemplo 3.6 (Kuo y Smith, 1997).

5.3 Recomendaciones para Trabajo Futuro

Las recomendaciones siguientes para el trabajo futuro, conducirán a las mejoras y a las extensiones del trabajo desarrollado en esta disertación.

5.3.1 Sobre la síntesis de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

- 1 En el caso del modelo matemático desarrollado para problemas de una subred de tratamiento de efluentes que incluye una unidad de tratamiento sin reciclo, y que puede ser resuelto de manera rigurosa a través de la solución de un sólo programa lineal (PL), el desafío consiste en desarrollar un procedimiento que permita la selección de una subred de tratamiento de efluentes en una etapa de diseño, y se pueda definir un orden de precedencia en la secuenciación de las plantas de tratamiento. El desarrollo de conceptos de regiones de diseño es una alternativa que pudiera ser de interés para extenderse a problemas con unidades de tratamiento que puedan remover más de un contaminante.
- 2 Es necesaria una extensión al procedimiento de descomposición de superestructura, a problemas bajo conceptos de rediseño de plantas de tratamiento de efluentes. Los resultados prácticos que se pueden obtener pueden conducir a significativos ahorros en los costos de capital. La decisión para reemplazar un sistema de tratamiento o rediseñar una red de tratamiento de efluentes es una decisión delicada de alternativas en función de costos. Los retos de diseño son: (a) incorporar al modelo características que permitan evaluar sistemas de tratamiento existentes con restricciones de diseño actuales, por detrimento en la eficiencia de remoción o acoplamientos prohibidos o forzados en la estructura, o rehabilitar un sistema con una demanda de capacidad incrementada en flujos de efluentes o para satisfacer los nuevos límites de concentración de contaminantes en la descarga, y otras, (b) incorporar al modelo

desarrollado conceptos de geometría de un sistema de tratamiento, longitudes y diámetros de tubería, criterios de velocidades o caídas de presión permisibles, costos de tubería, límites permisibles de corrosión, costos de bombeo y en general todo elemento existente o incidente en el proceso de diseño.

- 3 Es necesario continuar el desarrollo de un procedimiento automático de PNLEM, para conducir una búsqueda sistemática de las alternativas de las superestructuras básicas de red, para determinar diseños óptimos en la síntesis de redes de tratamiento distribuido. La propuesta de una nueva formulación de un modelo corresponde a una extensión al modelo matemático del enfoque de descomposición de superestructura y optimización paramétrica por medio de un modelo de optimización no lineal entero-mixto, con finalidad de una búsqueda del mejoramiento del enfoque propuesto. El problema de diseño puede demandar un esfuerzo mayor de cómputo debido a la incorporación de un número determinado de variables enteras en el procedimiento de diseño.
- 4 Es necesario extender el enfoque de descomposición, de síntesis de redes de tratamiento distribuido de efluentes, al caso de reciclaje y recirculación de corrientes. El reto en la incorporación de corrientes de reciclaje y recirculación a la formulación del modelo incorporando nuevas ecuaciones no lineales, que incluyen términos no convexos en el modelado de mezcladores o divisores. Sin embargo, se pretende tratar con los términos bilineales en la metodología de diseño, de forma semejante a la desarrollada en el enfoque de descomposición presentada en esta disertación. El problema y reto que se tiene que resolver reside en el contenido del número de variables fraccionales, que se incrementarán en relación al número de unidades de tratamiento, corrientes de recirculación y reciclaje presentes en la formulación del modelado matemático del sistema.

5.3.2 Sobre el diseño robusto de redes distribuidas de tratamiento de efluentes

- 1 La extensión del enfoque de descomposición y optimización paramétrica al diseño óptimo de redes de tratamiento distribuido de efluentes, bajo conceptos de incertidumbre es muy interesante y puede producir resultados prácticos de utilidad. La calidad y flujo de las corrientes efluentes que se incorporan al sistema de tratamiento cambian como consecuencia de la incertidumbre que puede existir en las alimentaciones de las plantas de proceso de donde provienen.
- 2 Finalmente, se buscaría la posibilidad de combinar el enfoque de descomposición de superestructura y optimización paramétrica propuesto, para la síntesis de redes de agua con los objetivos de distribución y reuso de agua en los complejos industriales (Figura 1.1.e). La recomendación también es explorar la posibilidad de combinar el enfoque propuesto con alguna de las técnicas disponibles actuales, en las áreas de distribución y reuso de agua (p. ej. Yang et al., 2000; Benko y Fonyo, 2000; Polley y Polley, 2000; Dunn et al., 2001a, 2001b; Feng y Seider, 2001; Zhou et al., 2001; Hallale, 2002; Savelski y Bagajewicz, 2003; Wang et al., 2003).

REFERENCIAS

- Allen, D. T.; Rosselot, K. S. *Pollution Prevention for Chemical Processes*; John Wiley and Sons: New York, 1997.
- Alva-Argáez, A.; Kokossis, A.; Smith, R. Wastewater Minimisation of Industrial Systems Using an Integrated Approach. *Comput. Chem. Eng.* **1998**, *22*, S741.
- Alva-Argáez, A.; Vallianatos, A.; Kokossis, A. A Multi-Contaminant Transshipment Model for Mass Exchange Networks and Wastewater Minimisation Problems. *Comput. Chem. Eng.* **1999**, *23*, 1439.
- Bagajewicz, M.; Rivas, M.; Savelski, M. J. A Robust Method to Obtain Optimal and Suboptimal Design and Retrofit Solutions of Water Utilization Systems with Multiple Contaminants in Process Plants. *Comput. Chem. Eng.* **2000**, *24*, 1461.
- Bagajewicz, M. A Review of Recent Design Procedures for Water Networks in Refineries and Process Plants. *Comput. Chem. Eng.* **2000**, *24*, 2093.
- Bagajewicz, M.; Savelski, M. J. On the Use of Linear Models for the Design of Water Utilization Systems in Process Plants with a Single Contaminant. *Trans. Inst. Chem. Eng. A.* **2001**, *79*, 600.
- Bagajewicz, M.; Ropera, H.; Savelski, M. Energy Efficient Water Utilization Systems in Process Plants. *Comput. Chem. Eng.* **2002**, *26*, 59.
- Bahy, M. N.; El-Halwagi, M. M. Pollution Prevention Targets through Integrated Design and Operation. *Comput. Chem. Eng.* **2000**, *24*, 1455.
- Basset, J. M. Presentation at the OECD Business and Industry Policy Forum on Environmental Management: Challenges for Industry, **2000**, 27 September.
- Benko, N.; Rev. E.; Fonyo, Z. Optimal Water Use and Treatment Allocation. *Comput. Chem. Eng.* **1999**, *23*, S589.
- Benko, N.; Rev, E.; Fonyo, Z. The Use of Nonlinear Programming to Optimal Water Allocation. *Chem. Eng. Commun.* **2000**, *178*, 67.
- Biegler, L.T.; Grossmann, I.E.; Westerberg, A.W. *Systematic Methods of Chemical Process Design*, Prentice Hall, New Jersey. 1997.

- Brooke, A.; Kendrick, D.; Meeraus, A. y Raman, R. GAMS. *General Algebraic Modelling System*, GAMS Development Corporation. Washington, DC. USA. 1998.
- Byers, W.; Doerr, W.; Krishnan, R.; Peters, D. *How to Implement Industrial Water Reuse: A Systematic Approach*; American Institute of Chemical Engineers (AIChE): New York, 1995.
- Castro, P.; Fernandes, M. C.; Nunes P. C. Improvements for Mass Exchange Networks Design. *Chem. Eng. Sci.* **1999**, *54*, 1649.
- Clean Water Act of 1987; U.S. Environmental Protection Agency, U.S. Government Printing Office: Washington, DC. **1987**.
- Davenport, G. B. Wastewater Treatments How, What, and Why Me? *Chem. Eng. Prog.* **1992**, *88*, 29.
- Dearing, A. Sustainable Innovation: Drivers and Barriers in OECD, Innovation and the Environment. **2000**.
- Dhole, V. R.; Ramchandani, N.; Tainsh, R. A.; Wasilewski, M. Make Your Process Water Pay for Itself. *Chem. Eng.* **1996**, *103*, 100.
- Diepolder, P. Is 'Zero Discharge' Realistic? *Hydrocarbon Processing*. **1992**, *October*.
- Doyle, S. J.; Smith, R. Targeting Water Reuse with Multiple Contaminants. *Trans. Inst. Chem. Eng. B.* **1997**, *75*, 181.
- Dunn, R. F.; Wenzel, H.; Overcash, M. R. Process Integration Design Methods for Water Conservation and Wastewater Reduction in Industry: Part I Design for Single Contaminants. *J. Clean Prod. Processes.* **2001a**, *3*, 307.
- Dunn, R. F.; Wenzel, H.; Overcash, M. R. Process Integration Design Methods for Water Conservation and Wastewater Reduction in Industry: Part II Design for Multiple Contaminants. *J. Clean Prod. Processes.* **2001b**, *3*, 319.
- Eckenfelder, W.W., Jr.; Patoczka, J.; Watkin, A.T. Wastewater treatment, *Chemical Engineering* **1985**, *92*, 60.
- Eckenfelder, W. W., Jr. *Industrial Water Pollution Control*, 3rd. ed.; McGraw-Hill: New York, 1999.
- Edgar, T. F.; Himmelblau, D. M.; Lasdon, L. S. *Optimization of Chemical Processes*, 3rd. ed.; McGraw-Hill: New York, 2001.

- El-Halwagi, M. M.; Manousiouthakis, V. Synthesis of Mass Exchange Networks. *AIChE J.* **1989**, *35*, 1233.
- El-Halwagi, M. M.; Manousiouthakis, V. Automatic Synthesis of Mass Exchange Networks with Single Component Targets, *Chem. Engn. Sci.* **1990a**, *49*, 2813.
- El-Halwagi, M. M.; Manousiouthakis, V. Simultaneous Synthesis of Mass Exchange and Regeneration Networks. *AICHE J.* **1990b**, *36*, 1209.
- El-Halwagi, M. M.; Hamad, A. A.; Garrison, G. W. Synthesis of Waste Interception and Allocation Networks. *AIChE J.* **1996**, *42*, 3087.
- El-Halwagi, M. M.; Spriggs, H. D. Solve Design Puzzles with Mass Integration. *Chem. Eng. Prog.* **1998**, *94*, 25.
- El-Halwagi, M. M.; Gabriel, F.; Harell, D. Rigorous Graphical Targeting for Resource Conservation via Material Recycle/Reuse Networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, *42*, 4319.
- Feng, X.; Seider W. D. New Structure and Design Methodology for Water Networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2001**, *40*, 6140.
- Floudas, C. A.; Aggarwal, A.; Ciric, A. R. Global Optimum Search for Nonconvex NLP and MINLP Problems. *Comp. Chem. Engng.* **1989**, *13*, 1117.
- Floudas, C. A. Nonlinear and mixed-integer optimization. Fundamentals and applications. Topics in chemical engineering. Oxford University Press, New York, 1995.
- Floudas, C. A. *Deterministic Global Optimization: Theory, Methods and Applications*; Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, The Netherlands, 1999.
- Freitas, I. S. F.; Costa, C. A. V.; Boaventura, R. A. R. Conceptual Design of Industrial Wastewater Treatment Processes: Primary Treatment. *Comput. Chem. Eng.* **2000**, *4*, 251.
- Galan, B.; Grossmann, I. E. Optimal Design of Distributed Wastewater Treatment Networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1998**, *37*, 4036.
- Galan, B.; Grossmann, I. E. Optimization Strategies for the Design and Synthesis of Distributed Wastewater Treatment Networks *Comput. Chem. Eng. Supp.* **1999**, S161.
- GAMS/DICOPT. General Algebraic Modelling System, *Framework for solving MINLP models. From Carnegie Mellon University*, GAMS Development Corporation. Washington, DC. USA. 1997.

- GAMS/MINOS. General Algebraic Modelling System, *NLP solver from Stanford University*, GAMS Development Corporation. Washington, DC. USA. 1997.
- GAMS/OSL. General Algebraic Modelling System, *High performance LP/MIP solver from IBM*, GAMS Development Corporation. Washington, DC. USA. 1997.
- Goldberg, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*; Addison-Wesley: Reading, MA, 1989.
- Goldblatt, M. E.; Eble, K. S.; Feathers, J. E. Zero Discharge: What, Why, and How. *Chemical Engineering Progress* **1993**, 22.
- Gupta, A.; Monousiouthakis. V. Waste Reduction Through Multicomponent Mass Exchange Network Synthesis. *Comp. Chem. Engng.* **1994**, 18, Suppl. S585.
- Hallale, N.; Fraser, D. M. Capital Cost Targets for Mass Exchange Networks. A Special Case: Water Minimization. *Chem. Eng. Sci.* **1998**, 53, 293.
- Hallale, N. A New Graphical Targeting Method for Water Minimisation. *Adv. Environ. Res.* **2002**, 6, 377.
- Hamilton, J. T. Pollution as News: Media and Stock Market Reactions to the TRI Data. *Journal of Environmental Economics and Management.* **1995**, 28, 98.
- Hart, S. L.; Ahuja, G. Does it Pay to be Green? An Empirical Examination of the Relationship Between Emission Reduction and Firm Performance. *Business Strategy and the Environment* **1997**, 5, 30.
- Higgins, T.E. *Hazardous Waste Minimization Handbook*. Lewis Publishers Inc. Boca Raton, Florida. USA. 1989.
- Higgins, T. E. *Pollution Prevention Handbook*; Lewis Publishers: Boca Raton, Florida. USA. 1995.
- HM Government. The environment Act. London: HMSO. **1995**.
- Holland, J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*; University of Michigan Press: Ann Arbor, MI. 1975.
- Horst, R., Pardalos, P. M., Eds. *Handbook of Global Optimization (Nonconvex Optimization and Its Applications)*; Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, The Netherlands, 1995.

- Horst, R.; Tuy, H. *Global Optimization: Deterministic Approaches*, 3rd ed.; Springer-Verlag: Berlin, 1996.
- Huang, Ch.; Chang, Ch.; Ling, H. A Mathematical Programming Model for Water Usage and Treatment Network Design. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1999**, *38*, 2666.
- Jackson, T.; Clift, R. Where's the Profit in Industrial Ecology. *Journal of Industry Ecology.* **1998**, *1*, 3.
- Jödicke, G.; Fischer, U.; Hungerbühler, K. Wastewater Reuse: A New Approach to Screen for Designs with Minimal Total Costs. *Comput. Chem. Eng.* **2001**, *25*, 203.
- Kallrath, J. Mixed Integer Optimization in the Chemical Process Industry. *Trans. Inst. Chem. Eng. A.* **2000**, *78*, 809.
- Khamman, M.; Damosn, L, A. EPA's Voluntary 33/50 Program: Impact on Toxic Releases and Economic Performance of Firms. *Journal of Environmental Economics and Management.* **1999**, *37*, 1.
- Kocis, G. R.; Grossmann, I. E. Relaxation Strategy for the Structural Optimization of Process Flow Sheets. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1987**, *26*, 1869.
- Kocis, G. R.; Grossmann, I. E. Global Optimization of Nonconvex Mixed-Integer Nonlinear Programming (MINLP) Problems in Process Synthesis. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1988**, *27*, 1407.
- Kocis, G. R.; Grossmann, I. E. A Modelling and Decomposition Strategy for the MINLP Optimization of Process Flowsheets. *Comput. Chem. Eng.* **1989**, *13*, 797.
- Kuo, W. C. J.; Smith, R. Effluent Treatment System Design. *Chem. Eng. Sci.* **1997**, *52*, 4273.
- Kuo, C. J.; Smith, R. Design of Water-Using Systems Involving Regeneration. *Trans. Inst. Chem. Eng. B*, **1998a**, *76*, 94.
- Kuo, W. C. J.; Smith, R. Designing for the Interactions between Water-Use and Effluent Treatment. *Trans. Inst. Chem. Eng. A.* **1998b**, *76*, 287.
- Lankford, P. W.; Eckenfelder, W. W., Jr.; Torrens, K. D. Reducing Wastewater Toxicity. *Chem. Eng.* **1988**, 72-81.
- Lanoie, P.; Benoît, L.; Maité, R. Can Capital Markets Create Incentives for Pollution Control. *Ecological Economics.* **1998**, *26*, 31.

- Lee, S.; Grossmann, I. E. Global Optimization of Nonlinear Generalized Disjunctive Programming with Bilinear Equality Constraints: Applications to Process Networks *Comput. Chem. Eng.* **2003**, *27*, 1557.
- Levy, David L. The Environmental Practices and Performances of Transnational Corporations, *Transnational Corporations*, **1995**, *4*, 1.
- Linnhoff, B.; Flower, J. R. Synthesis of Heat Exchanger Networks, *Aiche J.* **1978**, *24*, Part I and II, 633.
- Linnhoff, B.; Turner, J. A. Heat Recovery Networks: New Insights Yield Big Savings. *Chemical Engineering.* **1981**, *88*, 56.
- Linnhoff, B.; Hindmarsh, E. The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks. *Chem. Eng. Sci.* **1983**, *38*, 745.
- Linnhoff, B. Pinch Analysis-A State of the Art Overview. *Trans IChemE.* **1993**, *71*, Part A, 503.
- Linnhoff, B.; Hindmarsh, E. Use Pinch Analysis to Knock Down Capital Costs and Emissions. *Chem. Engng Progr.* **1994**, *32*.
- Lucia, A.; Xu, J.; Layn, K. M. Nonconvex Process Optimization. *Comput. Chem. Eng.* **1996**, *20*, 1375.
- Mann, G. J.; Liu, Y.A. *Industrial Water Reuse and Wastewater Minimization*, McGraw-Hill, New York. 1999.
- McLaughlin, L. A.; McLaughlin, H. S.; Groff, K. A. Develop an Effective Wastewater Treatment Strategy. *Chem. Eng. Prog.* **1992**, *88*, 34.
- Metcalf and Eddy Inc. *Wastewater Engineering: Treatment, Disposal and Reuse*, 3rd ed.; McGraw-Hill: New York, 1991.
- Mishra, P. N.; Fan, L. T.; Erickson, L. E. Application of Mathematical Optimization Techniques in Computer Aided Design of Wastewater Treatment Systems, *AICHE symposium series* **1975**, *71*, 136.
- Mitchell M. *An Introduction to Genetic Algorithms*; MIT Press: Cambridge, MA, 1996.
- OECD, Codes of Corporate Conduct – An Expanded Review of Their Contents, TD/TC/ **1999**.

- OECD, The OECD Guidelines for Multinational Enterprises - 2000 Revision, OECD, Paris. Presentation at the OECD Business and Industry Policy Forum on Environmental Management: Challenges for Industry, 27 September, **2000**.
- Olesen, S. G.; Polley, G. T. Dealing with Plant Geography and Piping Constraints in Water Network Design. *Process Saf. Environ. Prot.* **1996**, *74*, 273.
- Olesen, S. G.; Polley, G. T. A Simple Methodology for the Design of Water Networks Handling Single Contaminants. *Trans. Inst. Chem. Eng. A.* **1997**, *75*, 420.
- Papoulias, S. A.; Grossmann, I. E. A Structural Optimization Approach in Process Synthesis II: Heat Recovery Networks. *Comput. Chem. Eng.* **1983**, *7*, 707.
- Pingry, D. E.; Shaftel, T. L. Integrated Water Management with Reuse: A programming Approach. *Water Resources Research.* **1979**, *15*, 8.
- Polley, G. T.; Polley, H. L. Design Better Water Networks. *Chem. Eng. Prog.* **2000**, *96*, 47.
- Quesada, I.; Grossmann, I. E. An LP/NLP Based Branch and Bound Algorithm for Convex MINLP Optimization Problems. *Comp. Chem. Engng.* **1992**, *19*, 1219.
- Quesada, I., Grossmann, I. E. Global optimization of bilinear process networks with multicomponent flows. *Comp. Chem. Engng.* **1995**, *16*, 937.
- Reklaitis, G. V.; Ravindran, A.; Ragsdell, K. M. *Engineering Optimization. Methods and Applications*. 2nd ed.; John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Rossiter, A P.; Nath, R. *Wastewater Minimization Using Nonlinear Programming*. McGraw-Hill, New York, 1995.
- Rossmann, L A. Synthesis of Waste Treatment Systems by Implicit Enumeration. *Journal WPCF.* **1980**, *52*, 148.
- Savelski, J. M.; Bagajewicz, M. J. On the Optimality Conditions Water Utilization Systems in Process Plants with Single Contaminants. *Chem. Eng. Sci.* **2000**, *55*, 5035.
- Savelski, J. M.; Bagajewicz, M. J. Algorithmic Procedure to Design Water Utilization Systems Featuring a Single Contaminant in Process Plants. *Chem. Eng. Sci.* **2001**, *56*, 1897.
- Savelski, M.; Bagajewicz, M. On The Necessary Conditions of Optimality of Water Utilization Systems in Process Plants with Multiple Contaminants. *Chem. Eng. Sci.* **2003**, *58*, 5349.
- Sharatt, P. Environmental Criteria Design. *Comput. Chem. Eng.* **1999**, *23*, 1469.

- Sorin, M.; Paris, J. Combined Energy and Pinch Approach to Process Analysis. *Comput. Chem. Eng.* **1997**, *21*, S23.
- Sorin, M.; Bédard, S. The Global Pinch Point in Water Reuse Networks. *Trans. Inst. Chem. Eng. B.* **1999**, *77*, 305.
- Takama, N.; Kuriyama, T.; Shiroko, K.; Umeda, T. Optimal Planning of Water Allocation in Industry. *J. Chem. Eng. Jpn.* **1980b**, *13*, 478.
- Takama, N.; Kuriyama, T.; Shiroko, K.; Umeda, T. Optimal Water Allocation in a Petroleum Refinery. *Comput. Chem. Eng.* **1980a**, *4*, 251.
- Takama, N.; Kuriyama, T.; Shiroko, K.; Umeda, T. On the Formulation of Optimal Water Allocation Problem by Linear Programming. *Comput. Chem. Eng.* **1981**, *5*, 119.
- Tawarmalani, A. M.; Sahinidis, N. V. *Convexification and Global Optimization in Continuous and Mixed-Integer Nonlinear Programming: Theory, Algorithms, Software, and Applications*; Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, The Netherlands, 2002.
- Tsai, M.; Chang, Ch. Water Usage and Treatment Network Design Using Genetic Algorithms. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2001**, *40*, 4874.
- Wang, Y. P.; Smith, R. Design of Distributed Effluent Treatment Systems. *Chem. Eng. Sci.* **1994a**, *49*, 3127.
- Wang, Y. P.; Smith, R. Wastewater Minimization. *Chem. Eng. Sci.* **1994b**, *49*, 981.
- Wang, Y. P.; Smith, R. Time Pinch Analysis. *Trans. Inst. Chem. Eng. A*, **1995a**, *73*, 905.
- Wang, Y. P.; Smith, R. Wastewater Minimization with Flowrate Constraints. *Trans. Inst. Chem. Eng. A*, **1995b**, *73*, 889.
- Wang, B.; Feng, X.; Zhang, Z. A Design Methodology for Multiple-Contaminant Water Networks with Single Internal Water Main. *Comput. Chem. Eng.* **2003**, *27*, 903.
- Water Quality Act of 1987; U.S. Environmental Protection Agency, U.S. Government Printing Office: Washington, DC, **1987**.
- Water Quality Act of 1992; U.S. Environmental Protection Agency, U.S. Government Printing Office: Washington, DC, **1992**.

- Wilson, S. and Manousiouthakis, V. Minimum Utility Cost for a Multicomponent Mass Exchange Operation. *Chem. Eng. Sci.* **1998**, 53, 3887.
- WP (99) 56/FINAL, OECD, Paris, **1999**.
- Yang, Y. H.; Lou, H. H.; Huang, Y. L. Optimal Design of a Water Reuse System in an Electroplating Plant. *J. Plating Surf. Finish.* **1999**, 86, 80.
- Yang, Y. H.; Lou, H. R.; Huang, Y. L. Synthesis of an Optimal Wastewater Reuse Network. *Int. J. Waste Manage.* **2000**, 20, 311.
- Young, D. M.; Cabezas, H. Designing Sustainable Processes with Simulation: Waste Reduction (WAR) algorithm. *Comput. Chem. Eng.* **1999**, 23, 1477.
- Zamora, J. M.; Grossmann, I. E. Continuous Global Optimization of Structured Process System Models. *Comput. Chem. Eng.* **1998**, 22, 1749.
- Zamora, J. M., Grossmann, I. E. A Branch and Contract Algorithm for Problems with Concave Univariate, Bilinear and Linear Fractional Terms. *J. Global Optim.* **1999a**, 14, 217.
- Zamora, J. M.; Castellanos, J.; Hernández, R. Targeting and Design of Distributed Wastewater Treatment Systems through Linear Programming. Presented at the AIChE Annual Meeting, Dallas, TX, Oct 31-Nov 5, **1999b**; Paper 216i.
- Zhou, H.; Lou, H. H.; Huang, Y. L. Design of a Switchable Water Allocation Network Based on Process Dynamics. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2001**, 40, 4866.

APÉNDICE A

MODELO (*BNS-r*) PARA LOS SIGUIENTES CASOS

- A.1 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando una unidad de tratamiento (*BNS-1*)**
- A.2 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando dos unidades de tratamiento (*BNS-2*)**
- A.3 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando tres unidades de tratamiento (*BNS-3*)**

A.1 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando una unidad de tratamiento (*BNS-1*)

$$\text{Minimize } (CC_1 + CO_1) t_1 \quad (\text{A1-1})$$

Subject to

$$f_{i,1} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (\text{A1-2})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1} = t_1 \quad (\text{A1-3})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + t_1 = F_e \quad (\text{A1-4})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1} C_{i,j} = \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} \quad j \in J \quad (\text{A1-5})$$

$$\sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,1} C_{i,j} + (1 - R_{j,1}) \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} = F_e c_{j,e} \quad j \in J \quad (\text{A1-6})$$

$$0 \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (\text{A1-7})$$

$$0 \leq f_{i,1}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I \quad (\text{A1-8})$$

$$0 \leq t_1^L \leq t_1 \leq t_1^U \leq F_e \quad (\text{A1-9})$$

$$0 \leq \Delta m_j^L \leq \Delta m_{j,1} \leq m_j^U \quad j \in J \quad (\text{A1-10})$$

A.2 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando dos unidades de tratamiento (BNS-2)

$$\text{Minimize } (CC_1 + CO_1)t_1 + (CC_2 + CO_2)t_2 \quad (\text{A2-1})$$

Subject to

$$f_{i,1} + f_{i,2} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (\text{A2-2})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1} = t_1 \quad (\text{A2-3})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,2} + \alpha_{1,2}t_1 = t_2 \quad (\text{A2-4})$$

$$\alpha_{1,2} + \alpha_{1,e} = 1 \quad (\text{A2-5})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + (1 - \alpha_{1,2})t_1 + t_2 = F_e \quad (\text{A2-6})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1}C_{i,j} = \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} \quad j \in J \quad (\text{A2-7})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,2}C_{i,j} + (1 - R_{j,1})\alpha_{1,2} \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} = \frac{10^3 \Delta m_{j,2}}{R_{j,2}} \quad j \in J \quad (\text{A2-8})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,1} C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,2} C_{i,j} + (1 - R_{j,1})(1 - \alpha_{1,2}) \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} \\ + (1 - R_{j,2}) \frac{10^3 \Delta m_{j,2}}{R_{j,2}} = F_e C_{j,e} \quad j \in J \end{aligned} \quad (\text{A2-9})$$

$$\Delta m_{j,1} + \Delta m_{j,2} \geq \Delta m_j^L \quad j \in J \quad (\text{A2-10})$$

$$0 \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (\text{A2-11})$$

$$0 \leq f_{i,1}, f_{i,2}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I \quad (\text{A2-12})$$

$$0 \leq t_k^L \leq t_k \leq t_k^U \leq F_e \quad k = 1, 2 \quad (\text{A2-13})$$

$$0 \leq \Delta m_{j,k}^L \leq \Delta m_{j,k} \leq \Delta m_{j,k}^U \leq m_j^U \quad j \in J, k = 1, 2 \quad (\text{A2-14})$$

$$0 \leq \alpha_{1,2}, \alpha_{1,e} \leq 1 \quad (\text{A2-15})$$

A.3 Modelo de optimización de superestructura básica de red involucrando tres unidades de tratamiento (BNS-3)

$$\text{Minimize } (CC_1 + CO_1)t_1 + (CC_2 + CO_2)t_2 + (CC_3 + CO_3)t_3 \quad (\text{A3-1})$$

Subject to

$$f_{i,1} + f_{i,2} + f_{i,3} + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (\text{A3-2})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1} = t_1 \quad (\text{A3-3})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,2} + \alpha_{1,2}t_1 = t_2 \quad (\text{A3-4})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,3} + \alpha_{1,3}t_1 + \alpha_{2,3}t_2 = t_3 \quad (\text{A3-5})$$

$$\alpha_{1,2} + \alpha_{1,3} + \alpha_{1,e} = 1 \quad (\text{A3-6})$$

$$\alpha_{2,3} + \alpha_{2,e} = 1 \quad (\text{A3-7})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + (1 - \alpha_{1,2} - \alpha_{1,3})t_1 + (1 - \alpha_{2,3})t_2 + t_3 = F_e \quad (\text{A3-8})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,1}C_{i,j} = \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} \quad j \in J \quad (\text{A3-9})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,2}C_{i,j} + (1 - R_{j,1})\alpha_{1,2} \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} = \frac{10^3 \Delta m_{j,2}}{R_{j,2}} \quad j \in J \quad (\text{A3-10})$$

$$\sum_{i \in I} f_{i,3}C_{i,j} + (1 - R_{j,1})\alpha_{1,3} \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} + (1 - R_{j,2})\alpha_{2,3} \frac{10^3 \Delta m_{j,2}}{R_{j,2}} = \frac{10^3 \Delta m_{j,3}}{R_{j,3}} \quad j \in J \quad (\text{A3-11})$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,1} C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,2} C_{i,j} - \sum_{i \in I} f_{i,3} C_{i,j} \\
& + (1 - R_{j,1})(1 - \alpha_{1,2} - \alpha_{1,3}) \frac{10^3 \Delta m_{j,1}}{R_{j,1}} + (1 - R_{j,2})(1 - \alpha_{2,3}) \frac{10^3 \Delta m_{j,2}}{R_{j,2}} \\
& + (1 - R_{j,3}) \frac{10^3 \Delta m_{j,3}}{R_{j,3}} = F_e c_{j,e} \quad j \in J
\end{aligned} \tag{A3-12}$$

$$\Delta m_{j,1} + \Delta m_{j,2} + \Delta m_{j,3} \geq \Delta m_j^L \quad j \in J \tag{A3-13}$$

$$0 \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \tag{A3-14}$$

$$0 \leq f_{i,1}, f_{i,2}, f_{i,3}, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I \tag{A3-15}$$

$$0 \leq t_k^L \leq t_k \leq t_k^U \leq F_e \quad k = 1, 2, 3 \tag{A3-16}$$

$$0 \leq \Delta m_{j,k}^L \leq \Delta m_{j,k} \leq \Delta m_{j,k}^U \leq m_j^U \quad j \in J, k = 1, 2, 3 \tag{A3-17}$$

$$0 \leq \alpha_{1,2}, \alpha_{1,3}, \alpha_{2,3}, \alpha_{1,e}, \alpha_{2,e} \leq 1 \tag{A3-18}$$



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00002

OPTIMIZACION Y SINTESIS DE REDES DE AGUA ASOCIADAS A PLANTAS DE PROCESO.

En México, D.F., se presentaron a las 11:00 horas del día 14 del mes de septiembre del año 2004 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. JESUS ALVAREZ CALDERON
- DR. EDUARDO SALVADOR PEREZ CISNEROS
- DR. MIGUEL ANGEL RODRIGUEZ TORAL
- DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ
- DR. JUAN MANUEL ZAMORA MATA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, a la obtención del grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS
DE: ROGELIO HERNANDEZ SUAREZ

de acuerdo con el artículo 78 fracción IV 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.



Rogelio Hernandez Suarez
ROGELIO HERNANDEZ SUAREZ
FIRMA DEL ALUMNO

REVISÓ

Carmen Llorens Fabregat
LIC. CARMEN LLORENS FABREGAT
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

Tomas Viveros Garcia
DR. TOMAS VIVEROS GARCÍA

PRESIDENTE

Jesus Alvarez Calderon
DR. JESUS ALVAREZ CALDERON

VOCA

Eduardo Salvador Perez Cisneros
DR. EDUARDO SALVADOR PEREZ CISNEROS

VOCAL

Miguel Angel Rodriguez Toral
DR. MIGUEL ANGEL RODRIGUEZ TORAL

VOCAL

CANCELADO
DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ

SECRETARIO

Juan Manuel Zamora Mata
DR. JUAN MANUEL ZAMORA MATA