

UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

***DISCRETIZACIÓN DE PRODUCTOS BILINEALES Y SELECCIÓN DE
SOLUCIONES CANDIDATO PARA LA OPTIMIZACIÓN GLOBAL DE REDES DE
AGUA.***

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA:

JUAN JOSÉ OLIVAREZ AREYAN

ASESOR:

DR. FABRICIO NÁPOLES RIVERA

Morelia, Michoacán

Febrero 2017

ABSTRACT

DISCRETIZATION OF BILINEAL PRODUCTS AND SELECTION OF CANDIDATE SOLUTIONS FOR THE GLOBAL OPTIMIZATION OF WATER NETWORKS

Juan José Olivarez Areyan

(February) 2017

Degree in chemical engineering

Directed by: Dr. Fabricio Nápoles Rivera

Worldwide the abundant requirement of water has led the scientific community to propose several techniques for its effective use. At the industrial level, strategies have been put in place for the reuse of optimal water in the industrial process, which has had a high impact on the required fresh water costs and wastewater discharged. However, due to the complexity of processes often oversimplified models or rigorous models with nonlinear nonconvex terms are proposed, which are resolved only locally. The present project develops mathematical models of water networks for minimizing the use of fresh water satisfying highly environmental constraints, the discretization of bilinear products and selection of candidate solutions is proposed for obtain the optimal overall.

RESUMEN

DISCRETIZACIÓN DE PRODUCTOS BILINEALES Y SELECCIÓN DE SOLUCIONES CANDIDATO PARA LA OPTIMIZACIÓN GLOBAL DE REDES DE AGUA.

Juan José Olivarez Areyan

(Febrero) 2017

Licenciatura en Ingeniería Química

Dirigida por: Dr. Fabricio Nápoles Rivera

Alrededor del mundo los altos requerimiento de agua ha llevado a la comunidad científica a proponer varias técnicas para su uso eficaz. A nivel industrial se han puesto en marcha estrategias para el reúso óptimo de agua en los procesos industriales, lo que ha tenido alto impacto en los gastos de agua fresca requerida y el agua residual descargada. Sin embargo, debido a la complejidad de los procesos muchas veces se generan modelos sobresimplificados o bien modelos rigurosos con términos no lineales no convexos, los cuales se resuelven únicamente de manera local. El presente proyecto desarrolla modelos matemáticos rigurosos de redes de agua para minimizar el uso de agua fresca y obtener beneficios económicos y ambientales y se propone la solución del modelo mediante la discretización de productos bilineales y selección de corrientes candidato para obtener el óptimo global.

Palabras clave: Discretización, bilineales, soluciones, optimización y agua.

DEDICATORIA.

Dedico este trabajo a:

Primeramente a Jesucristo por haberme regalado tiempo de vida para lograr lo que hoy en día soy.

A mis papas, José Agustín Rogelio y Gricelda por todo el amor que me han brindado, apoyo y motivación constante, por los principios que me inculcaron día a día y por qué me enseñaron claramente que la vida es para quien quiere superarse y que se tiene que trabajar para salir adelante. Mi gran admiración por ustedes.

A los amigos que realmente estuvieron ahí cuando lo necesite, que gracias a su apoyo y esfuerzo se ha logrado el objetivo.

CONTENIDO.

ABSTRACT	2
RESUMEN	3
DEDICATORIA	4
CONTENIDO	5
LISTA DE FIGURAS	7
LISTA DE TABLAS	8
NOMENCLATURA	10
AGRADECIMIENTOS	14
INTRODUCCIÓN	15
HIPOTESIS	17
OBJETIVOS	17
JUSTIFICACIÓN	17
ANTECEDENTES	18
MARCO TEÓRICO	21
Tratamientos de aguas residuales	23
Tratamientos fisicoquímicos	24
• Sedimentación	24
• Filtración	25
• Coagulación-Floculación	26
• Desinfección	27
Tratamientos biológicos	27
• Aireación superficial	28
• Procesos de lodos activados	28
• Filtros percoladores	30
• Digestión anaeróbica	31
SOFTWARE GAMS ®	32
PROGRAMACIÓN LINEAL ENTERA MIXTA	32
PROGRAMACIÓN NO LINEAL ENTERA MIXTA	32
METODOLOGIA	34
CASOS DE ESTUDIO	48

RESULTADOS.....	52
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	71
REFERENCIAS	72

LISTA DE FUGURAS.

Figura 1. Reúso de agua en la industria.....	¡Error! Marcador no definido.
Figura 2. Proceso de sedimentación.	25
Figura 3. Proceso de coagulación-Floculación.....	26
Figura 4. Proceso de aireación superficial.....	28
Figura 5. Proceso de lodos activados.	29
Figura 6. Proceso de filtros percoladores.	30
Figura 7. Proceso de digestión anaeróbica.	31
Figura 8. Esquema de recicl/re-uso basado en propiedades.	34
Figura 9. Gráfico caso de estudio 1 sin selección de corrientes candidato.	54
Figura 10. Configuración óptima de la red esquema de recicl/re-uso basado en propiedades caso de estudio 1.	55
Figura 11. Gráfico caso de estudio 1 con selección de corrientes candidato.	57
Figura 12. Gráfico Caso de estudio 2 sin selección de soluciones candidato.	60
Figura 13. Configuración de la red esquema de recicl/re-uso basado en propiedades Caso de estudio 2.....	61
Figura 14. Gráfico Caso de estudio 2 con selección de corrientes candidato.	63
Figura 15. Gráfico Caso de estudio 3 sin selección de corrientes candidato.....	66
Figura 16. Gráfico Caso de estudio 3 con selección de soluciones candidato.	68

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Operadores de propiedad comunes.....	37
Tabla 2. Operadores de propiedad selectos.	48
Tabla 3. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 1.....	49
Tabla 4. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 1.....	49
Tabla 5. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 2.....	50
Tabla 6. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 2.....	50
Tabla 7. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 3.....	51
Tabla 8. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 3.....	51
Tabla 9. Caso de estudio 1 sin selección de solución candidato.	53
Tabla 10. Flujos en la configuración óptima de la red caso de estudio 1.	56
Tabla 11. Caso de estudio 1 con selección de solución candidato.	57
Tabla 12. Comparación de soluciones Caso de estudio 1.....	58
Tabla 13. Caso de estudio 2 sin selección de soluciones candidato.	60
Tabla 14. Flujos en la configuración óptima de la red Caso de estudio 2.	62
Tabla 15. Caso de estudio con selección de soluciones candidato.	62
Tabla 16. Comparación de soluciones Caso de estudio 2.....	64

Tabla 17. Caso de estudio 3 sin selección de soluciones candidato.....	65
Tabla 18. Flujos en la configuración óptima de la red Caso de estudio 3.....	67
Tabla 19. Caso de estudio 3 con selección de soluciones candidato.....	68
Tabla 20. Comparación de soluciones Caso de estudio 3.....	69
Tabla 21. Comparación general de los tres Casos de estudio con ambos métodos resueltos.	70

NOMENCLATURA

<i>i</i>	Número de corrientes de proceso.
<i>t</i>	Tecnologías disponibles.
<i>u</i>	Unidad usada a interceptar las propiedades.
<i>c</i>	Cada componente en la mezcla.
<i>in</i>	Entrada
<i>out</i>	Salida
<i>j</i>	Número de sinks de proceso.
<i>max</i>	Máximo.
<i>r</i>	Numero de corrientes frescas.
<i>Fresh</i>	Agua fresca
<i>u¹</i>	Unidad usada a interceptar las propiedades y enviada a unidad dif.
<i>p</i>	Propiedades.
<i>InUnit</i>	Entrada a la unidad.
<i>OutUnit</i>	Salida a la unidad,
<i>p'</i>	Propiedad tratada en la unidad.
<i>I</i>	Conjunto de interceptores disponibles para tratar dicha propiedad.
<i>q</i>	Segmentos.

W_i	Corrientes de proceso.
$w_{i,t}^t$	Corrientes de proceso segregadas.
$w_{i,t,u}^u$	Unidades discretizadas.
$x_{i,t,u,c}^{out}$	Composición a la salida de las unidades.
$\alpha_{t,u,c}$	Parámetro de eficiencia.
$VC_{i,t,u}$	Costo de operación de las unidades.
$V_{i,t,u}$	Parámetro de costo.
$g_{i,t,u,j}$	Flujo de salida de las unidades de tratamiento.
$w_{i,t,u}^{max}$	Unidades de proceso con una capacidad máxima.
G_j	Flujo de entrada a las unidades de proceso.
$f_{r,j}$	Flujos de corrientes frescas enviadas a cualquier unidad de proceso.
$minTAC$	Función objetivo.
$F_r CostFresh_r$	Costo unitario de las corrientes frescas.
$FC_{i,t,u} y_{i,t,u}$	Costos fijos de las unidades de tratamiento instaladas.
F_r	Corrientes frescas.
$d_{u^1,u}$	Flujos enviados desde una unidad diferente.
m_u	Punto de mezclado a la entrada a las unidades de tratamiento.
$\varphi_P(P_{p,i}^{inSource})$	Operador de propiedad que está en función de la entrada a la fuente.

$\varphi_p(P_{p,u^1}^{OutUnit})$	Operador de propiedad que está en función a la salida de la unidad.
$g_{(u,j)}$	Flujos enviados a las unidades de proceso.
$\varphi_p(P_{p,j}^{InSink})$	Operador de propiedad que está en función de la entrada del Sink.
$\varphi_p(P_{p,r}^{InFresh})$	Operador de propiedad que está en función de la entrada de la fresca.
$p_{p,j}^{minsink}$	Restricciones mínimas para los sinks.
$p_{p,j}^{maxsink}$	Restricciones máximas para los sinks.
$p_{p,j}^{minenv}$	Restricciones mínimas para la descarga al ambiente.
$p_{p,j}^{maxenv}$	Restricciones máximas para la descarga al ambiente.
$Y_{I(U)}^{U(p)}$	Variables lógicas.
$\varphi_{p'}(P_{p',U(p')}^{OutUnit})$	Variable de optimización desagregadas
$Cost_{U(p')}^{unit}$	Variable de optimización desagregadas.
$Cost_r^{Fresh} F_r$	Costo de corrientes frescas.
$Cost_u^{Unit}$	Costo de unidades de tratamiento.
$(pip_{i,u}^{In} w_{i,u})$	Costo de tuberías.
$(pip_{u,u^1}^{Int} d_{u,u^1})$	Costo de tuberías.
$(pip_{u,j}^{Exit} g_{u,j})$	Costo de tuberías.
$(pip_{r,j}^{InFresh} f_{r,j})$	Costo de tuberías.

$x_{u',u,p}$	Nueva variable.
$d_{u',u}\varphi_p$	Producto bilineal.
$d_{u',u,q}$	Discretización de corrientes.
$x_{u',u,p,q}^d$	Variable de optimización desagregada.
$\varphi_{u',p,q}^d$	Variable de optimización desagregada.
$d_{u',u}^r$	Balance de masa en tanques de mezclado.
$x_{u,p}$	Nueva segunda variable.
$m_u\varphi_p$	Segundo producto bilineal.
$m_{u,q}$	Segunda discretización de corrientes.
$x_{u,p,q}^d$	Segunda variable de optimización desagregada.
$\varphi_{u,p,q}^d$	Segunda variable de optimización desagregada.
m_u	Balance de masa en tanques de mezclado.
$x_{u,j,p}$	Nueva tercera variable.
$g_{u,j,q}$	Tercer producto bilineal.
$x_{u,j,p,q}^d$	Tercera discretización de corrientes.
$\varphi_{u,j,p,q}^d$	Tercera discretización de corrientes.
$g_{u,j}$	Balance de masa en tanques de mezclado.

AGRADECIMIENTOS.

A mi asesor, Dr. Fabricio Nápoles Rivera por el apoyo, constancia y transmisión de conocimientos. Mi admiración y respeto por la persona trabajadora y capaz. Por la paciencia que me tuvo al realizar este trabajo y por el seguimiento constante.

A la Facultad de Ingeniería Química por transmitirme todo el conocimiento posible.

Al M.C Gabriel Martínez Herrera y a la Dra. Aurora Teresita Martínez Hernández por el seguimiento, revisiones y las aportaciones para la mejora del trabajo

A mi gran amigo Edgar Lagunas y Azucena Ulloa por ser parte de este logro y compartir grandes momentos y conocimientos.

INTRODUCCIÓN.

El agua es uno de los más valiosos recursos en el mundo; debido al importante rol que juega en la vida, recientemente la demanda de agua ha aumentado dramáticamente debido al crecimiento de la población y también a los cambios en los patrones de precipitación por el cambio climático. De esta manera, existen varias regiones altamente pobladas del mundo donde el agua es muy escasa. Esto ha motivado al desarrollo de técnicas para el reúso de agua para satisfacer su demanda (Abdulla y Al-Shareef, 2009; Appan, 2000; Chilton et al., 2000). En años recientes la preocupación por la sobreexplotación de agua ha estimulado la investigación en el campo de la conservación del agua y el aumento del recurso. La sobreexplotación ha sido provocada principalmente por factores humanos tal como el crecimiento de la población, desarrollo industrial, mejora en los estándares de vida, el uso desmedido del recurso y el cambio climático. Pero además debido a las causas naturales como la desigual distribución del agua en el mundo y las limitaciones geográficas (por ejemplo en el caso de islas y las regiones áridas). El enfoque principal de esta investigación es la conservación del recurso y el aumento de agua mediante acciones específicas tales como la regeneración, reúso y reciclaje de agua. Estas estrategias han sido exitosamente implementadas en el contexto industrial.

El agua en nuestra vida es de mucha importancia, y en la mayor de las ocasiones no le damos el valor que esta se merece. Al transcurrir los días se hace más notoria la ausencia de lluvias, la contaminación de ríos y mares, elementos químicos utilizados en las fábricas y las catástrofes ecológicas que últimamente no cesan, y esto orilla a que nuestro bien máspreciado en un futuro se pueda convertir en un auténtico lujo.

El agua es un bien esencial para la existencia de la humanidad y es un grave problema por el crecimiento de la población, su alto consumo de agua y a esto se adhiere el cambio climático. A través de una investigación hecha por Fetter en 1994, muestran que las reservas de agua en el mundo contienen la siguiente distribución; 97,2% del total de agua pertenece a los océanos, continuando por los glaciares (2,14%). El agua subterránea corresponde a 0,6% de ese total, las aguas superficiales 0,009%, la humedad del suelo

(0,005%) y el agua de la atmósfera 0,001%. El agua subterránea corresponde a 98% del agua potable disponible en la tierra (Pereira y Rocha 2002).

Mencionado lo anterior, el cuidado del agua se ha convertido en la prioridad de las nuevas generaciones con el objetivo de mantener una calidad de vida adecuada. El consumo de agua en el mundo aumentó seis veces entre 1990 y 1995 más del doble de la tasa de crecimiento de la población y continúa aumentando a medida que incrementa tanto la demanda doméstica como industrial (Kirby, 2004).

En el caso de México el problema no es ajeno, puesto que el uso del líquido por parte de la población e industria ha provocado que de los 653 acuíferos existentes en el territorio, solo 102 suministran cerca del 50% del agua subterránea que se destina para todo uso (INEGI,2005).

En el año 2003 se tenía una existencia natural promedio de 476 mil 456 hectómetros cúbicos (hm³) de agua al año en el país, lo que lo ubicaba en el mundo como uno de los países con existencia media (INEGI, 2005, p.2).El sector agropecuario se encuentra con el primer lugar con el 77% en utilizar agua potable, mientras que la industria, servicios, comercio y termoeléctricas ocupan el tercer lugar, con el 10% de su función.

Sin embargo, la contaminación del bien, el desperdicio, su mala utilización e ineficiente administración, sumando el crecimiento de la población, son los componentes que influyen para que se estime que en los próximos 50 años la nación se encuentre entre los países de existencia de agua baja.

En vez de utilizar agua fresca de consumo público, recientemente se están reutilizando aguas residuales tratadas, con una calidad similar a la del agua de suministro. Además de invertir en recursos tecnológicos para disminuir el uso de agua fresca en los procesos industriales y comerciales, es conveniente pensar en procesos que permitan el uso adecuado de agua en las ciudades; es decir, darle otro uso para evitar que se convierta en agua residual, las veces necesarias como sea posible mediante tratamientos adecuados.

HIPOTESIS

Mediante la discretización de productos bilineales aplicada a modelos de redes de agua basados en propiedades se puede lograr la **optimización global** de dichos de dichos procesos, minimizando así el uso de agua fresca y el costo de tratamiento de la misma.

OBJETIVOS

Objetivo general

La optimización global de redes de agua basadas en propiedades bajo un esquema de recicló/re-uso aplicadas a la industria mediante la discretización de productos bilineales y selección de corrientes candidato.

Objetivos particulares

- Plantear un modelo matemático para resolver el problema de síntesis de redes de agua basadas en propiedades
- Proponer estrategia de discretización de productos bilineales
- Proponer el modelo discretizado basado en la discretización de productos bilineales
- Solución de casos de estudio.

JUSTIFICACIÓN

El presente trabajo se justifica, ya que en las industrias se hace necesario regenerar, reusar y reciclar el agua de las corrientes de desecho, para lograr esto, se plantean muchísimos modelos matemáticos para dar solución a este problema, modelos en los cuales se resuelven por varios métodos, sin embargo en el presente trabajo se realiza una discretización de productos bilineales y selección de corrientes candidato.

ANTECEDENTES

El Ciclo Hidrológico, así se le conoce a la reutilización del agua que es un fenómeno que se produce en el planeta desde que los seres vivos habitan en él. El agua generada por las plantas se almacena en la atmósfera en forma de vapor de agua, donde cae posteriormente sobre el suelo en forma de lluvia, para ser utilizada de nuevo por otros seres vivos. Se considera aproximadamente que en el ciclo del agua, ésta experimenta de 5 a 6 usos antes de evaporarse, la tierra, los ríos, lagos y el océano donde se cierra el ciclo hidrológico. En definitiva, la recuperación del agua no es más que una manifestación del proceso cíclico continuo que experimentan los recursos naturales del planeta.

Recientemente en México no se tiene mucho cuidado con las aguas residuales, tanto municipales como industriales, ya que cerca del 80% de ellas se vierten a drenajes sin recibir ningún tratamiento. En las ciudades la mayor parte del país se viven graves problemas con la distribución del agua y su mal aprovechamiento. La consecuencia mayoritaria de ello es la baja eficiencia en el uso del agua, aunado a los problemas de crecimiento poblacional, se ha provocado que el agua de lagos y ríos sea insuficiente en algunas zonas, la sobreexplotación de las fuentes subterráneas y que la calidad general de agua se haya deteriorado. Todo lo anterior, hace que el trabajo de conservar el agua no sea fácil y aumenta la necesidad de un cambio rotundo en la forma en la que nos encaramos a este recurso natural.

Tenemos que sacar el mayor provecho posible al agua, y más ahora, con los grandes periodos de sequía que vivimos año tras año. Debido a este problema, los organismos del país se empiezan a movilizar para tratar el agua como un bien cada vez máspreciado. Para ello se obliga a implementar medidas de control sobre el consumo y contaminación, provocan que el coste del agua, irremediablemente, se empiece a aumentar.

Cabe mencionar que la reutilización programada ha alcanzado un gran desarrollo no sólo en países con una escasez tradicional de recursos hídricos, sino específicamente en países con grandes recursos y con un elevado nivel de vida. Los grandes incrementos de la demanda de agua, con frecuencia en lugares pobres de recurso hídrico, han despertado el

interés a dirigirse hacia los efluentes de las Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) como una enorme alternativa del recurso necesario. Ya que son sometidos a un proceso adecuado de regeneración, estos efluentes son reutilizados para riego agrícola y de jardinería, para refrigeración industrial, para recuperación ambiental y para recarga de acuíferos, entre muchos más reúsos.

La idea de tratar el agua residual como un subproducto conlleva diversas exigencias técnicas que pueden resumirse en aspectos de fiabilidad tanto de su calidad como de su cantidad. Esta idea de producto es muy exigente en la práctica de un cumplimiento estricto de la calidad del agua residual empleada como materia prima, un diseño apropiado de los tanques de agua reciclada con criterios de fiabilidad y seguridad, y una operación y mantenimiento de los mismos.

El tratamiento de aguas residuales, es un proceso de tratamiento que incorpora transformaciones físicas, químicas y biológicas, con el fin de tratar y remover los contaminantes físicos, químicos y biológicos del agua, efluente del uso humano. El objetivo del tratamiento es producir agua ya limpia o reutilizable en el ambiente y un residuo sólido o fango que pueda utilizarse para diversos y diferentes propósitos.

Las aguas residuales están constituidas fundamentalmente por las aguas de abastecimiento después de haber pasado por las diversas actividades o usos por parte de la población y son generadas por residencias, instituciones y locales comerciales e industriales. Esto puede ser tratado dentro del sitio en el cual es generado o recogido y llevado mediante una red de tuberías y eventualmente bombas a una planta de tratamiento local.

La problemática de la disponibilidad del agua fresca y su alto costo a nivel industrial, ha despertado el interés de varios y actualmente se han propuesto gran cantidad de metodologías para el reuso óptimo de este valioso recurso (Dakwala *et al.*, 2009; Foo, 2009; Lovelady y El-Halwagi, 2009; Aviso *et al.*, 2010; Burgara Montero *et al.*, 2013). En las metodologías propuestas incluyen sumideros de agua nombrados “sinks” en inglés, en los cuales se representan unidades de proceso con diferentes necesidades de agua tanto de

calidad como de cantidad, incluyendo especificaciones tanto de composición como de otras propiedades. Posteriormente los *sinks* desechan grandes cantidades de este recurso con diferentes composiciones o propiedades. A este desecho se le conoce comúnmente como agua residual, que forzosamente tiene que tener un tratamiento antes de ser descargada en diferentes lugares a plantas industriales. Para poder reutilizar esta agua en plantas industriales se han propuesto redes de reciclaje, con el fin de darle un nuevo uso en otros equipos que necesiten agua tomando en cuenta el tratamiento previo de las diferentes aguas residuales con el objetivo de reducir al máximo el uso de agua fresca y, al mismo tiempo la cantidad de agua contaminada descargada al ambiente. En la figura 1 se muestra un esquema tradicional del reúso de agua en la industria.

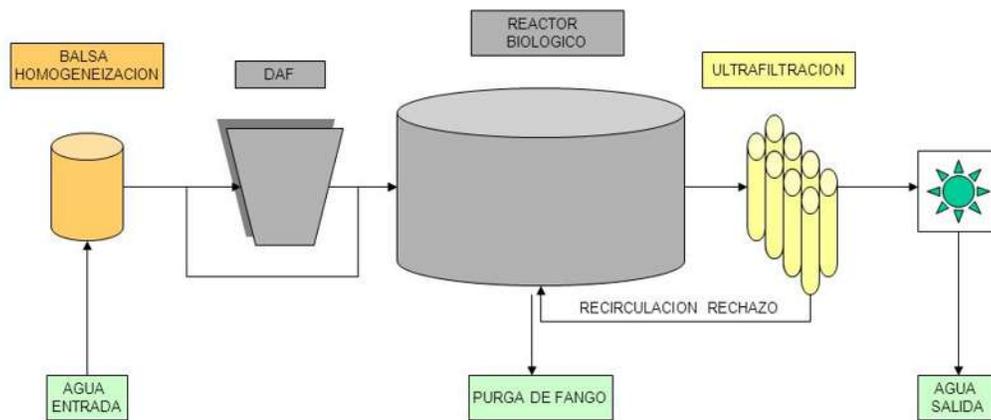


Figura 1. Reúso de agua en la industria.

MARCO TEÓRICO

Las aguas residuales industriales son de gran impacto, debido a que la mayoría de estas tienen una alta carga contaminante, por los agentes tóxicos derivados de la fabricación de los productos, en la parte de la disolución de productos químicos en procesos tales como la limpieza y recubrimiento de metales, explotación minera, la melaza en la producción de azúcar entre otros. Cuando estas aguas no son tratadas se presentan vertimientos con gran carga tóxica, que afectan los cuerpos receptores y superan los valores permitidos por las normas a nivel ambiental establecidas. Otras aguas residuales que también son de gran impacto son las aguas con efluentes corrosivos por tener un pH muy ácido o muy básico, generado en la industria de recubrimiento metálico, los textiles, en especial cuando se emplea sosa en el proceso de lavado de los equipos, el cual genera impacto y sobrepasa los rangos de pH, dependiendo del lugar donde sean vertidos. La alta carga orgánica, es también generada por la industria de bebidas, alimentos y a fabricantes de productos de aseo, esta carga contaminante se mide por medio de DBO o DQO, como también a las aguas residuales que presentan altas temperaturas ocasionando desequilibrios ecosistémicos, siendo factores importantes del impacto ambiental.

Existen distintas estrategias usadas exitosamente como la integración de masa con lo cual se ataca el problema económico y ambiental. Estas estrategias están propuestas para optimizar la transformación y separación de corrientes de proceso. Generalmente en los problemas de integración de masa existe el problema de redes de agua; en tal problema se trata la síntesis de redes de agua que permite el reciclaje/re-uso de corrientes de proceso para minimizar el uso de agua fresca y con ello las descargas al ambiente.

Hay en existencia muchos trabajos enfocados a la optimización de integración de masa pero en muchos de ellos existen limitaciones tales como:

- Son problemas de un solo componente. Regularmente existen estrategias para tratar problemas de un solo componente, cuando en la práctica industrial muy raras ocasiones solo se trata un solo componente.

- Usualmente las propiedades no son consideradas. En general solo existen restricciones ambientales en función de composiciones y no de propiedades (pH, densidad, demanda química de oxígeno, etc.); este hecho ha sido ignorado por la mayoría de las estrategias.
- La mayoría de los modelos propuestos que consideran los aspectos anteriores, en el mejor de los casos se resuelven de manera local.

Por lo tanto en el presente trabajo se propone el modelado de una red de agua basada en propiedades para optimizar el uso de dicho recurso en una industria, además se propone la solución del modelo mediante la discretización de productos bilineales y la selección de corrientes candidato.

En la literatura se han reportado trabajos exitosos por varios autores, por ejemplo, el de Takama 1980 *et al*, el cual resolvió un problema de agua en una refinería. En la modelación se toma en cuenta todas estructuras posibles entre las unidades de tratamiento, unidades con requerimiento de agua y agua de desecho. La función objetivo consiste en la minimización de agua fresca y generación de desechos. El problema resultante fue tratado como una formulación en dos niveles en la cual solo el nivel superior (problema de asignación) fue resuelto. Quesada y Grossmann 1995 propusieron un modelo para obtener redes de agua, en el cual el modelo matemático mostraba términos bilineales. Para resolver las no convexidades asociadas al modelo, utilizaron una reformulación lineal con la finalidad de obtener un límite inferior válido de la solución óptima, posteriormente usaron una búsqueda de ramificación y acotamiento espacial para obtener la estructura óptima. Lee y Grossmann 2003 desarrollaron un problema de programación disyuntiva generalizada basado en el modelo de Quesada y Grossmann, en el cual se utilizaron decisiones discretas para determinar la existencia o no existencia de unidades de proceso. Karuppiah y Grossmann 2006 propusieron una modificación al método de optimización global presentado por Quesada y Grossmann que permitía mejorar el paso de búsqueda del límite inferior y lo aplicaron al problema de redes de agua. Alva-Argaez 1992 *et al*. se enfocaron en un problema de minimización de agua desarrollando una superestructura que contiene todas las posibilidades para recicló, re-uso y regeneración de agua. El modelo resultante fue de programación mixta entera no lineal no convexo (por la presencia de términos

bilineales). Para evitar las complejidades relacionadas a la solución del problema MINLP no convexo, reformularon el problema como una secuencia de problemas mixto entero lineales (MILP) para obtener soluciones cercanas al óptimo global, pero sin dar garantías de ello. Huang 1999 *et al.* extendieron el modelo presentado por Takama 1980 *et al.* dicha extensión consiste en la posibilidad de incluir múltiples equipos y corrientes, así como el diseño de sistemas de tratamiento. Gabriel y El-Halwagi 2005 también abordaron el problema de diseño de redes de agua bajo un esquema de reciclaje/re-uso; ellos reformularon el problema con una representación simplificada que evita el mezclado de corrientes antes de las unidades de tratamiento, con lo que se eliminan los términos bilineales. Sin embargo, dicha reformulación se encuentra limitada a un solo componente, además de que se puede obtener más del número mínimo de unidades de tratamiento, ya que no se considera el costo fijo de las mismas. Hull 2007 *et al.* utilizó una técnica de optimización estocástica (PSO) para obtener soluciones globales en problemas de un solo componente. Luo y Uan 2008 también implementaron una estrategia de optimización estocástica para obtener óptimos globales; dicha estrategia requería fijar el número de unidades de tratamiento previo a la optimización.

Actualmente para estos procesos industriales se emplean tecnología o procesos eficientes que ayuden a dar un buen manejo a estas aguas residuales del sector industrial, este manejo adecuado de las aguas residuales del sector industrial, está determinada por la normatividad ambiental como la tecnología a emplear en el tratamiento de estas aguas como el costo para emplearlas, pero también en el interés que este sector quiera establecer para mitigar o reducir los impactos ambientales por sus vertimientos

Tratamientos de aguas residuales.

El fin de los tratamientos de aguas residuales es eliminar los contaminantes del agua primeramente utilizada, con una serie de procesos físicos, químicos y biológicos.

Tratamientos fisicoquímicos.

Los tratamientos físico-químicos regularmente son utilizados para preparar el agua residual para la siguiente técnica de tratamiento.

Este tratamiento consta, fundamentalmente, de dos etapas: coagulación y floculación. La primera consiste en obtener que las materias coloidales y en suspensión existentes en el agua formen coágulos, mediante operaciones mecánicas. En este caso y para favorecer esa separación, se utilizan compuestos químicos, y es por ello que se denominan tratamientos fisicoquímicos.

- **Sedimentación.**

Consiste en una operación de separación sólido-fluido en las que las partículas sólidas de una suspensión, más densas que el fluido, se separan de éste por la acción de la gravedad. Es una operación controlada por la transferencia de cantidad de movimiento.

En varios casos, como cuando existen fuerzas de interacción entre las partículas y éstas son suficientemente pequeñas (suspensiones de tipo coloidal), la sedimentación natural no es posible, pues anteriormente se tiene que proceder a la floculación o coagulación de partículas.

Para que se lleve a cabo la sedimentación en la práctica, el tamaño de las partículas y su concentración en la suspensión deben tener unos valores mínimos, del orden de 1-10 micras y 0.2% de sólido en suspensión.

La sedimentación en general se utiliza para separar partículas sólidas dispersas en un líquido. La diferencia de densidades entre las partículas sólidas y el líquido hace que, aunque éste último tenga un movimiento ascendente y las partículas sólidas sedimenten,

depositándose en el fondo de donde son eliminadas en forma de lodos. Como se observa en la Figura 2. La viscosidad del líquido frena las partículas sólidas, que deben vencer el rozamiento con el líquido en el movimiento de caída.

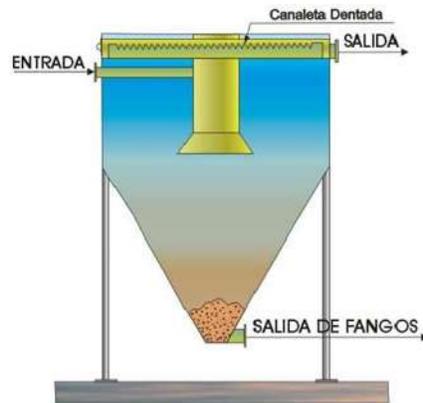


Figura 2. Proceso de sedimentación.

- **Filtración.**

La filtración es la separación de partículas sólidas contenidas en un fluido, pasándolo a través de un medio filtrante, sobre el que se depositan los sólidos, regularmente el medio filtrante utilizado es un lecho de arena, de altura variable, dispuesta en distintas capas de distinto tamaño de partícula, siendo la superior la más pequeña, de entre 0.15 y 0.3 mm. El fluido puede ser un líquido o un gas; las partículas sólidas pueden ser gruesas o finas, rígidas o flexibles, redondas o alargadas, separadas o agregados. La suspensión de alimentación puede llevar una fracción elevada o muy baja 40-5% en volumen de sólidos.

- **Coagulación-Floculación.**

Operación físico-química que admite la purificación de agua no apta para el consumo humano.

Se fundamenta en la dificultad de que algunas partículas se sedimenten naturalmente llamadas coloides. Las partículas coloidales se hacen presente de forma natural en el agua. Son de diámetro muy pequeño (1 nm a 1 micra) y tienen carga electronegativamente, lo que conlleva a que tienen fuerzas de repulsión entre las partículas vecinas.

Primeramente, la coagulación ayuda a eliminar las fuerzas de repulsión, agregando sales de metales electropositivos para neutralizarlos.

Enseguida, la floculación permitirá la agregación de partículas coloidales. Debido a su bajo peso, sólo las partículas no pueden instalarse. Los aglomerados empiezan a formarse, aumentando significativamente su peso. Esto se hace gracias a la adición de polímero que actúa como pegamento entre los coloides, como lo podemos apreciar en la Figura 3.

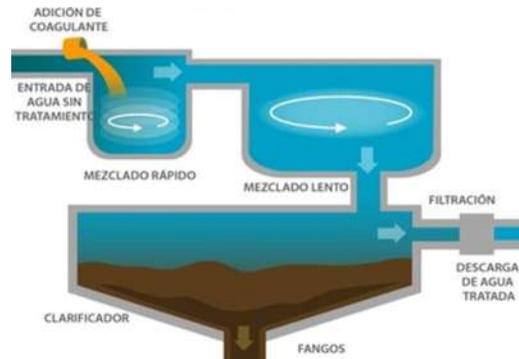


Figura 3. Proceso de coagulación-Floculación.

- **Desinfección.**

El objetivo principal de la desinfección es la destrucción o desactivación de los microorganismos patógenos que puedan encontrarse en el agua residual. Los microorganismos patógenos pueden ser bacterias, virus, protozoos entre algunos otros. Si lo que se pretende es reutilizar el agua, no basta con solo desactivar patógenos, sino cualquier otro organismo vivo.

Existen diferentes tratamientos para efectuar la desinfección, siendo las más utilizadas la desinfección con cloro en forma de gas comprimido bajo presión, soluciones de hipoclorito de sodio, o de hipoclorito de calcio. También existe la desinfección con UV, notándose un creciente interés en la aplicación para desinfectar el agua residual.

Tratamientos biológicos.

Los tratamientos biológicos en las aguas residuales dependen de las bacterias, nematodos y otros pequeños organismos que descomponen los residuos orgánicos, mediante procesos celulares normales.

El objetivo principal del tratamiento biológico es la creación de un sistema en el que los productos de la descomposición se facilite recogerlos para su adecuada eliminación.

El tratamiento biológico es a menudo un proceso de tratamiento secundario, utilizado para remover los materiales remanentes antes de ser efectuado un sistema primario.

Existe un amplio rango de procesos biológicos utilizados para el tratamiento de aguas residuales, como lo son los sistemas de disposición en tanques sépticos o aeróbicos; una amplia variedad de tipos de aireación, como la aireación superficial y por rociado; procesos de lodos activados; estanques y lagunas; filtros percoladores; y digestión anaeróbica.

- **Aireación superficial.**

La función de la aireación superficial es empujar el agua desde debajo de la superficie del agua hacia la parte superior, lo que crea su contacto con el aire, y luego las gotas caen por gravedad y regresan al agua, mezclándose con oxígeno. Los chorros de agua rompen la superficie con diversos grados de fuerza. Existen varios tipos de aireación superficial, entre los que se mencionan los aireadores flotantes. Cuando tienen una alta tasa de bombeo, pueden mezclar en forma efectiva líquidos en las lagunas y en los tanques que se utilizan en el tratamiento de agua. En la Figura 4 se aprecia el proceso de aireación superficial.

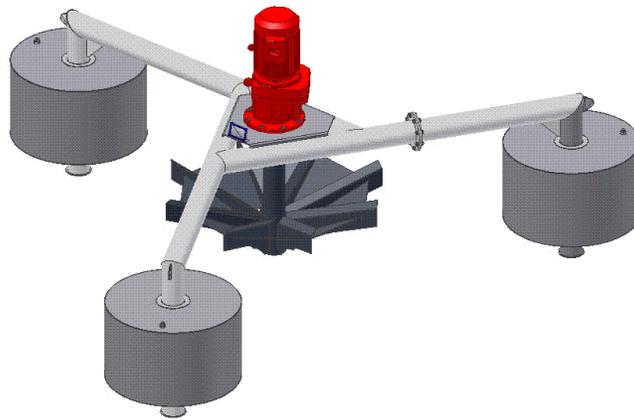


Figura 4. Proceso de aireación superficial.

- **Procesos de lodos activados.**

Este proceso es ampliamente utilizado para el tratamiento secundario de aguas residuales domésticas e industriales, regularmente en corrientes de desechos con alto contenido de materia orgánica o biodegradable. Lodo activado es un término usado para señalar los depósitos ricos en microbios que se establecen en tanques.

El proceso de lodos activados consta de tres etapas básicas:

1. Se debe contar con un reactor en el que los microorganismos se mantengan en suspensión, aireados y en contacto con todos los residuos que se estén tratando.
2. Una fase de separación líquido-sólido
3. Tener un sistema de reciclaje de lodos recircular los lodos activados al comienzo del proceso. Existen diversas variantes de procesos de lodos activados, que incluyen variaciones en el método de aireación y en la forma en el que el lodo es devuelto al proceso.

La cantidad de aire y lodo puede variarse en función del tratamiento deseado. Los lodos remanentes son separados utilizando tanques de sedimentación. Una porción de los lodos se reutiliza y los excesos son desechados, como se muestra en la Figura 5.

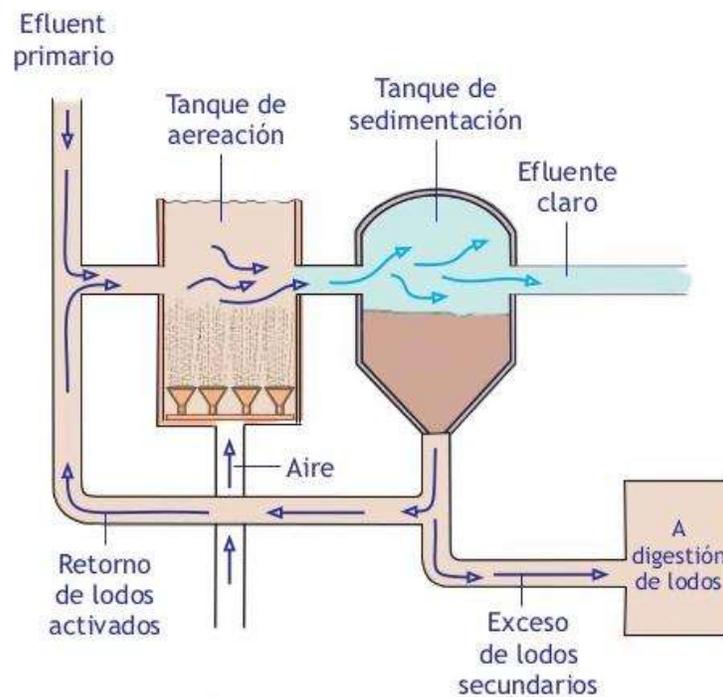


Figura 5. Proceso de lodos activados.

- **Filtros percoladores.**

Un filtro percolador es una cama de grava o ya sea un medio plástico sobre el cual se rocían las aguas residuales pre tratadas. En este proceso de filtro percolador, los microorganismos se apegan al medio del lecho y forman una capa biológica sobre éste. A medida que las aguas residuales se percolan por el medio, los microorganismos digieren y eliminan los contaminantes del agua.

Cada sistema de filtro percolador se compone por lo siguiente:

1. Un tanque séptico, que elimina los que se asientan y flotan de las aguas residuales.
2. Un tanque de dosificación/clarificador. Tanque de hormigón o fibra de vidrio que permite que los materiales biológicos se sedimenten del agua.
3. Un filtro percolador. Es un tanque ya sea de grava o de material plástico. Las aguas residuales se distribuyen sobre el medio y fluyen hacia abajo a través de la superficie.
4. Sistema de aplicación al suelo. Distribuye el agua tratada por debajo de la superficie del suelo.

A continuación en la Figura 6 se muestra el proceso de filtros percoladores.

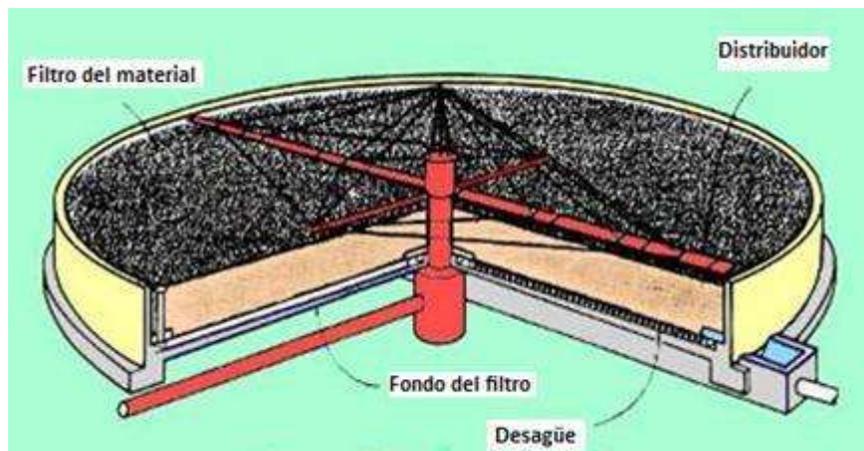


Figura 6. Proceso de filtros percoladores.

- **Digestión anaeróbica.**

La digestión anaeróbica es un tratamiento en el cual los microorganismos degastan el material biodegradable en ausencia de oxígeno. Se puede utilizar para procesar una amplia serie de materia orgánica, tanto restos de comida y pasto hasta papel inservible y residuos animales.

Esta descomposición anaeróbica consta de tres etapas importantes. En el proceso de la transformación de la materia orgánica existen productos intermedios conocidos como metabólicos. Finalizando el proceso de digestión queda un lodo líquido que es toda la materia orgánica que no se haya descompuesto completamente, se separara en sólidos y líquidos. El líquido puede someterse a tratamiento aeróbico o recircularse a través del proceso digestivo. En tanto a los sólidos pueden usarse como fertilizante o pueden ser desechados.

En la Figura 7 se observa el proceso de digestión anaeróbica.

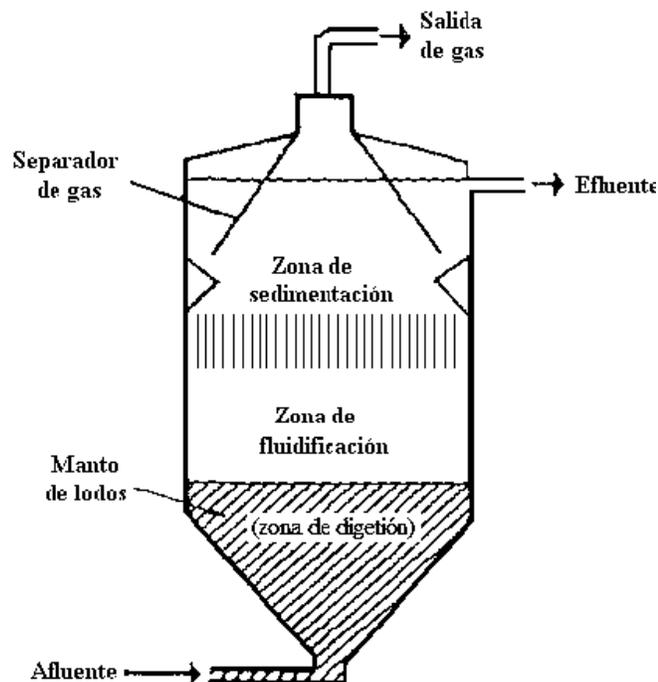


Figura 7. Proceso de digestión anaeróbica.

SOFTWARE GAMS ®

Para resolver el problema de optimización se utilizará el programa **GAMS®** (*General Algebraic Modeling System*). El programa GAMS nos permite utilizar un editor en el cual se describe todo el planteamiento del problema, como lo es la modelación matemática junto con todo tipo de parámetros necesarios, aunado a ello se le agrega el “solver” para lograr la convergencia deseada.

PROGRAMACIÓN LINEAL ENTERA MIXTA.

Programación lineal entera mixta (MILP), las variables pueden ser de tipo continuo o discreto y solamente se permiten relaciones lineales entre las mismas.

Con la esta programación se pueden tratar casos muy complejos de planificación, que tengan en cuenta una casuística compleja. Este tipo de programas es más o menos difícil de resolver dependiendo del número y la influencia de las variables discretas consideradas. Para casos de gran número de variables existen numerosas técnicas heurísticas que permiten encontrar soluciones muy buenas, válidas pese a no ser la óptima en cada caso. Muchas veces, por ser un tipo de programación más sencillo de tratar, los casos que cuentan con partes no lineales son transformados en instancias (MILP) para asegurar su resolución, esto es más verdad cuanto mayor sea el caso.

PROGRAMACIÓN NO LINEAL ENTERA MIXTA.

Programación no lineal entera mixta (MINLP), las variables pueden ser de tipo continuo o discreto y se permiten relaciones lineales y no lineales entre las mismas.

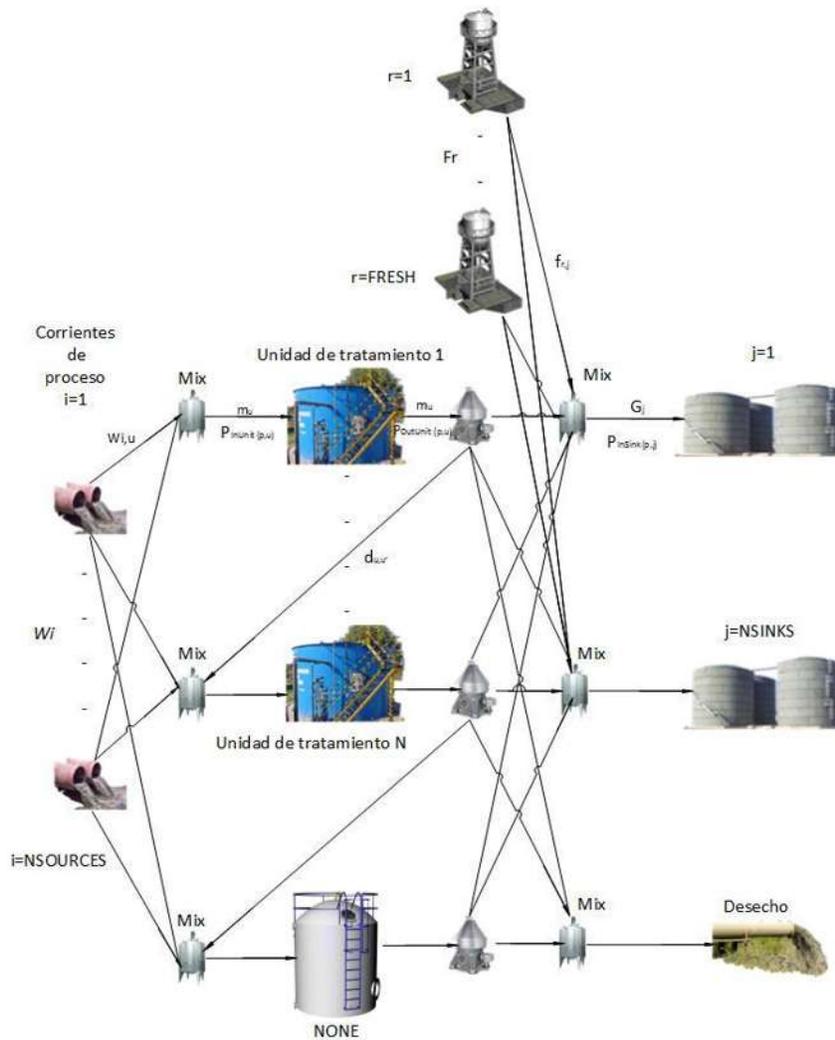
La mayor riqueza expresiva, y por ende la mayor dificultad en su tratamiento, la aporta la programación no lineal entera mixta (MINLP), que aúna las dificultades del

tratamiento no lineal y del tratamiento de posibilidades discretas. Casos de incluso muy reducido tamaño pueden ser casi imposible de resolver.

METODOLOGIA

Para explicar más a fondo y como base a la modelación propuesta haremos uso de datos de las corrientes de proceso principales de la refinería de Al Ruwais (Emiratos Árabes Unidos) en el cual se propone un esquema de reciclaje/re-uso con sistema de tratamiento distribuido como se muestra en la Figura 8 y consiste en un grupo de balances de masa en el cual también incluyen balance de propiedad en los puntos de división y mezclado de la red, balances de propiedad únicamente en los puntos de mezclado, restricciones ambientales y de proceso y disyunciones lógicas para la selección de las unidades de tratamiento de propiedades.

La función objetivo es la minimización del costo anual total de la red.



MODELO MIXTO ENTERO NO LINEAL (MINLP)

El modelo propuesto se basa en la superestructura de la Figura 8. Consiste en un conjunto de balances de masa y de propiedad en los puntos de división y mezclado de la red, así como restricciones de proceso y se describe a continuación:

DIVISION DE CORRIENTES FRESCAS.

Las corrientes frescas pueden ser enviadas a cualquier unidad de proceso para complementar, de ser necesario, las corrientes de proceso previamente tratadas para satisfacer restricciones de proceso:

$$F_r = \sum_{\substack{j \in NSINKS \\ j \neq waste}} f_{j,r}, \quad r \in FRESH \quad (2.1)$$

Nótese que las corrientes frescas no pueden ser mezcladas con las corrientes destinadas al desecho.

DIVISIÓN DE CORRIENTES DE PROCESO:

Las corrientes son segregadas y enviadas a cualquiera de las unidades de tratamiento, con la finalidad de tratar una de las propiedades de la corriente:

$$W_i = \sum_{u \in NUNITS} w_{i,u} \quad i \in NSOURCES \quad (2.2)$$

BALANCE DE MASA A LA ENTRADA DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO:

Se utiliza un esquema de reciclaje/re-uso; por tanto, el balance de masa en el punto de mezclado a la entrada a las unidades de tratamiento indica que el flujo de entrada a la

unidad es igual a la suma de los flujos de proceso enviados a dicha unidad más la sumatoria de los flujos enviados desde una unidad diferente:

$$\sum_{i \in \text{NSOURCE}} w_{i,u} + \sum_{\substack{u^1 \in \text{NUNITS} \\ u^1 \neq u}} d_{u^1,u} = m_u \quad u \in \text{NUNITS} \quad (2.3)$$

Este esquema permite tratar más de una propiedad de las corrientes de proceso. Además, Es importante mencionar que se agrega una restricción adicional para evitar recirculaciones redundantes, es decir una corriente no puede regresar a la unidad en la que ha sido previamente procesada.

BALANCE DE PROPIEDAD A LA ENTRADA DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO:

Para determinar el valor de las propiedades a la entrada de cualquiera de los interceptores, se considera que el valor de la propiedad es una contribución lineal de cada una de las corrientes mezcladas. *Sin embargo, es preciso señalar que los operadores de propiedad φ_p pueden ser no lineales y diferentes para cada propiedad en particular. La Tabla 1 muestra una lista de operadores de propiedad para algunas propiedades comunes.*

Tabla 1. Operadores de propiedad comunes.

Propiedad	Operador
Composición	$\varphi_z(z)$
Toxicidad	$\varphi_{Tox}(Tox)$
Demanda Química de Oxígeno	$\varphi_{COD}(COD)$
Densidad	$\varphi_\rho(\rho)$
Viscosidad	$\varphi_\mu(\mu)$
Presión de vapor de Reid	$\varphi_{RVP}(RVP)$
Resistividad	$\varphi_R(R)$
Reflectividad	$\varphi_{R_\infty}(R_\infty)$
Color	$\varphi_{Color}(Color)$
Olor	$\varphi_{Odor}(Odor)$

$$\sum_{i \in NSOURCE} [w_{i,u} \varphi_p(p_{p,i}^{inSource})] + \sum_{\substack{i^1 \in NUNITS \\ u^1 \neq u}} [d_{u^1,u} \varphi_p(p_{p,u^1}^{OutUnit})] = m_u \varphi_p(p_{p,u}^{InUnit}),$$

$$u \in NUNITS, p \in NPROP \quad (2.4)$$

Como se puede observar en la ecuación (2.4), se tiene términos bilineales en el balance de propiedad, debido a que tanto los flujos como propiedades de entrada son desconocidos.

BALANCE DE MASA EN EL PUNTO DE DIVISIÓN A LA ENTRADA DE UNIDADES DE TRATAMIENTO:

El flujo de salida de las unidades de tratamiento es igual a la sumatoria de los flujos enviados a las unidades de proceso más la sumatoria de los flujos enviados a otras unidades de tratamiento:

$$m_u = \sum_{j \in SINKS} g_{(u,j)} + \sum_{\substack{u^1 \in NUNITS \\ u^1 \neq u}} d_{u,u^1}, \quad u \in NUNITS \quad (2.5)$$

BALANCE DE MASA A LA ENTRADA DE UNIDAD DE PROCESO:

El flujo de entrada a las unidades de proceso es igual a la sumatoria de los flujos pretratados más el flujo de corrientes frescas:

$$G_j = \sum_{r \in FRESH} f_{r,j} + \sum_{u \in NUNITS} g_{u,j}, \quad j \in NSINKS \quad (2.6)$$

BALANCE DE PROPIEDADES A LA ENTRADA DE LAS UNIDADES DE PROCESO:

Nuevamente se requiere aplicar una regla de mezclado para determinar las propiedades a la entrada de las unidades de tratamiento. Se debe notar que este balance también contiene términos bilineales debido a que se desconocen los flujos y propiedades de las corrientes que entran a la unidad. Adicionalmente, se tiene un producto bilineal entre el flujo total de desecho y las propiedades de dichas corrientes. Para el resto de las unidades, éste no es un producto bilineal dado que los flujos de entrada no son variables de optimización, sino que son variables conocidas.

$$G_j \varphi_p(P_{p,j}^{InSink}) = \sum_{r \in FRESH} [\varphi_p(P_{p,r}^{InFresh}) f_{(r,j)}] + \sum_{u \in NUNITS} [g_{u,j} \varphi_p(P_{p,u}^{OutUnit})],$$

$$j \in NSINKS, p \in NPROP \quad (2.7)$$

RESTRICCIONES

Se incluyen un conjunto de restricciones sobre las propiedades en las unidades de proceso y en la descarga al ambiente; estas restricciones son los valores máximos o mínimos permitidos.

Para las unidades de proceso

$$P_{p,j}^{minsink} \leq P_{p,j}^{insink} \leq P_{p,j}^{maxsink}, \quad j \in NSINK, j \neq waste, p \in NPROP \quad (2.8)$$

En la descarga al ambiente

$$P_{p,j}^{minenv} \leq P_{p,waste} \leq P_{p,j}^{maxenv}, \quad j = waste. p \in NPROP \quad (2.9)$$

DISYUNCIONES LÓGICAS

Para tratar cada propiedad se considera un conjunto de unidades con eficiencias y costos dados. Cada una de estas unidades tiene un factor de conversión de la propiedad. Por lo tanto, como parte de la estrategia de optimización se debe seleccionar entre unidades de alta eficiencia-alto costo, o bien unidades de menor eficiencia-menor costo. La selección de la unidad depende de cada problema en particular. Para modelar esta decisión se utiliza la siguiente disyunción:

$$\forall I(U) \in NINT \left[\begin{array}{l} Y_{I(U)}^{U(p)} \\ \varphi_p(P_{p,U(p)}^{OutUnit}) = \varphi_p(P_{p,U(p)}^{InUnit}) (1 - \alpha_{I(U)}^{U(p)}) \\ Cost_{p,U(p)}^{unit} = Cost_{I(U)}^{U(p)} m_{U(p)} \end{array} \right]$$

Donde $Y_{I(U)}^{U(p)}$ son variables lógicas usadas para denotar que la propiedad de salida y el costo de tratamiento depende de la unidad seleccionada; la propiedad tratada en la unidad y la unidad de tratamiento son p' y $u(p')$, respectivamente; y el conjunto de interceptores disponibles para tratar dicha propiedad están dados por $I(u)$. La disyunción implica que cuando la variable booleana es verdadera (es decir cuando la variable binaria asociada $Y_{I(U)}^{U(p)}$ es igual a 1) la unidad con costo $Cost_{I(U)}^{U(p)}$ y eficiencia $\alpha_{I(U)}^{U(p)}$ es seleccionada; nótese que

únicamente una unidad puede ser seleccionada para cada propiedad, dependiendo de los requerimientos del proceso. Si la unidad no es seleccionada, entonces la variable booleana es falta (la variable binaria asociada $Y_{I(U)}^{U(p')}$ es igual a 0). En este caso la propiedad no cambia y no se añade el costo de la operación. Se debe mencionar que sólo una propiedad puede ser tratada en cada interceptor. Por lo tanto, el balance de propiedad en cada unidad para las propiedades no tratadas está dado por:

$$\varphi_{p'}(P_{p',U(p')}^{OutUnit}) = \varphi_{p'}(P_{p',u(p')}^{InUnit}), \quad U(p') \in NUNITS, \forall p \neq p' \quad (2.10)$$

La disyunción se aplica para todas las propiedades tratadas en el sistema de tratamiento, y el número de interceptores para tratar cada propiedad es conocido antes del proceso de optimización. Todos los términos en la disyunción son lineales dado que la eficiencia y el costo para las unidades de tratamiento son datos. Se usa una reformulación de cascaron convexo (Galan y Grossmann) para representar la disyunción en forma de ecuaciones algebraicas. Para seleccionar sólo una de las unidades de tratamiento se usa la siguiente ecuación:

$$\sum_{I(U)} y_{I(U)}^{U(p')} = 1, \quad U(p') \in NUNITS \quad (2.11)$$

Las variables de optimización son desagregadas de la siguiente forma:

$$\varphi_{p'}(P_{p',U(p')}^{OutUnit}) = \sum_{I(U)} \varphi_{p'}(P_{p'U(p')}^{InUnit,I(U)}), \quad U(p') \in UUNITS, \quad (2.12)$$

$$\varphi_{p'}(P_{p',U(p')}^{InUnit}) = \sum_{I(U)} \varphi_{p'}(P_{p'U(p')}^{InUnit,I(U)}), \quad U(p') \in UUNITS, \quad (2.13)$$

$$m_{U(p')} = \sum_{I(U)} m_{U(p')}^{I(U)}, \quad U(p') \in NUNITS, \quad (2.14)$$

$$Cost_{U(p')}^{unit} = \sum_{I(U)} Cost_{U(p')}^{unit,I(U)}, \quad U(p') \in NUNITS, \quad (2.15)$$

Las ecuaciones de la disyunción se reescriben en función de las variables desagregadas.

$$\varphi_{p'} \left(P_{p',U(p')}^{OutUnit,I(U)} \right) = \varphi_{p'} \left(P_{p',U(p')}^{InUnit,I(U)} \right) \left(1 - \alpha_{p',I(U)}^{U(p')} \right), \\ U(p') \in NUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.16)$$

$$Cost_{U(p')}^{unit,I(U)} = Cost_{I(U)}^{U(p')} m_{U(p')}^{I(U)}, \quad U(p') \in NUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.17)$$

Se establecen límites para las variables desagregadas.

$$\varphi_{p'} \left(P_{p',U(p')}^{OutUnit,I(U)} \right) \leq M^{\varphi_{p'}} y_{I(U)}^{U(p')}, \quad U(p') \in UUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.18)$$

$$\varphi_{p'} \left(P_{p',U(p')}^{InUnit,I(U)} \right) \leq M^{\varphi_{p'}} y_{I(U)}^{U(p')}, \quad U(p') \in UUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.19)$$

$$m_{U(p')}^{I(U)} \leq M^m y_{I(U)}^{U(p')}, \quad U(p') \in NUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.20)$$

$$Cost_{U(p')}^{unit,I(U)} \leq M^{Cost} y_{I(U)}^{U(p')}, \quad U(p') \in NUNITS, I(U) \in NINT \quad (2.21)$$

Dichos límites se establecen en base a restricciones físicas o a datos disponibles del proceso.

Es importante mencionar que en esta formulación se usa una unidad adicional con costo y eficiencias iguales a cero. Esta unidad ficticia (representada como unidad NONE) sirve

para fines de modelado, aunque físicamente podría representar las corrientes que son enviadas directamente a las unidades de proceso.

La suposición de que solo una propiedad puede ser tratada en cada unidad implica que el resto de propiedades permanece sin cambio (como se muestra en la ecuación 2.10). Sin embargo, el modelo puede ser adaptado para considerar unidades de tratamiento capaces de tratar más de una propiedad simultáneamente. En este caso, el parámetro de eficiencia para cada propiedad debería de ser conocido antes de la optimización. Si más de una propiedad es tratada en la misma unidad, la disyunción presentada y la reformulación seguirán siendo válidas, pero en este caso p sería el conjunto de propiedades que cambian y p' el conjunto de propiedades que permanecen sin cambio en la unidad.

FUNCIÓN OBJETIVO

La función objetivo consiste en la minimización del costo anual de la red, que en este caso incluye el costo de corrientes frescas, el costo de unidades de tratamiento y el costo de tuberías.

$$\begin{aligned}
MinTAC = & H_Y \sum_{r \in FRESH} Cost_r^{Fresh} F_r \\
& + H_Y \sum_{u \in NUNITS} Cost_u^{Unit} \\
& + H_Y \sum_{u \in NUNITS} \sum_{i \in SOURCES} (pip_{i,u}^{In} w_{i,u}) \\
& + H_Y \sum_{u \in NUNITS} \sum_{u^1 \in NUNITS} (pip_{u,u^1}^{Int} d_{u,u^1}) \\
& + H_Y \sum_{u \in NUNITS} \sum_{j \in SINKS} (pip_{u,j}^{Exit} g_{u,j}) \\
& + H_Y \sum_{r \in FRESH} \sum_{j \in SINKS} (pip_{r,j}^{InFresh} f_{r,j})
\end{aligned} \tag{2.22}$$

DISCRETIZACIÓN DE PRODUCTOS BILINEALES.

Los balances de propiedad incluyen varios términos bilineales como $d_{u',u} \varphi_p(P_{p,u'}^{outunit})$, $m_{u} \varphi_p(P_{p,u}^{inunit})$ y $g_{u,j} \varphi_p(P_{p,u}^{outunit})$, por lo cual este es un modelo Mixto Entero No Lineal MINLP no convexo. Para resolver dicho modelo se propone la discretización de productos bilineal, con dicho fin se incluyen nuevas variables:

$$x_{u',u,p} = d_{u',u} \varphi_p, \quad x_{u,p} = m_u \varphi_p, \quad x_{u,j,p} = g_{u,j} \varphi_p$$

Sustituyendo en ecuación (2.4) y (2.7):

$$\sum_{i \in SOURCE} [w_{i,u} \varphi_p(P_{p,i}^{insource})] + \sum_{\substack{u' \in SOURCE \\ u' \neq u}} [x_{u',u,p}(P_{p,u'}^{outunit})] = x_{u,p}(P_{p,u}^{InUnit}),$$

$$u \in NUNITS, p \in NPROP \quad (2.23)$$

$$G_j \varphi_p(P_{p,j}^{insinks}) = \sum_{r \in FRESH} [\varphi_p(P_{p,r}^{infresh}) f_{r,j}] + \sum_{u \in NUNITS} [x_{u,j,p}(P_{p,u}^{outunit})],$$

$$j \in NSINKS, p \in NPROP \quad (2.24)$$

Posteriormente los flujos involucrados en los productos bilineales son discretizados en un número determinado de intervalos t , de acuerdo a las siguientes relaciones:

$$d_{u',u,q} = \min(d_{u',u}) + (q - 1) \frac{\max(d_{u',u}) - \min(d_{u',u})}{t},$$

$$u' \in U', u \in U, q \in t + 1 \quad (2.25)$$

$$m_{u,q} = \min(m_u) + (q - 1) \frac{\max(m_u) - \min(m_u)}{t}, \quad u \in U, q \in t + 1 \quad (2.26)$$

$$g_{u,j,q} = \min(g_{u,j}) + (q - 1) \frac{\max(g_{u,j}) - \min(g_{u,j})}{t},$$

$$u \in U, j \in J, q \in t + 1 \quad (2.27)$$

Se agregan las siguientes disyunciones para seleccionar los puntos de las variables discretizadas correspondientes:

$$\vee \left[\begin{array}{c} y1_{u',u,q} \\ x_{u',u,q} = d_{u',u,q} \varphi_{u,p}(P_{p,u'}^{outunit}) \end{array} \right]$$

$$\vee \left[\begin{array}{c} y2_{u',q} \\ x_{u,p} = m_{u,q} \varphi_p(P_{p,u}^{inunit}) \end{array} \right]$$

$$\vee \left[\begin{array}{c} y3_{u,j,q} \\ x_{u,j,p} = g_{u,j,q} \varphi_p(P_{p,u}^{outunit}) \end{array} \right]$$

Las variables de optimización son desagregadas:

$$x_{u',u,p} = \sum_q x_{u',u,p,q}^d \quad u' \in U', u \in U, p \in P \quad (2.28)$$

$$\varphi_{u',p} = \sum_q \varphi_{u',p,q}^d \quad u' \in U', p \in P \quad (2.29)$$

$$x_{u,p} = \sum_q x_{u,p,q}^d, \quad u \in U, p \in P \quad (2.30)$$

$$\varphi_{u,p} = \sum_q \varphi_{u,p,q}^d, \quad u \in U, p \in P \quad (2.31)$$

$$x_{u,j,p} = \sum_q x_{u,j,p,q}^d, \quad u \in U, j \in J, p \in P \quad (2.32)$$

$$\varphi_{u,p} = \sum_q \varphi_{u,j,p,q}^d, \quad u \in U, j \in J, p \in P \quad (2.33)$$

Las ecuaciones en la disyunción se escriben en función de las variables desagregadas:

$$x_{u',u,p,q}^d = d_{u',u,q} \varphi_{p,u',q}^d, \quad u' \in U', u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.34)$$

$$x_{u,p,q}^d = m_{u,q} \varphi_{u,p,q}^d, \quad u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.35)$$

$$x_{u,j,p,q}^d = g_{u,j,q} \varphi_{u,j,p,q}^d, \quad u \in U, j \in J, p \in P, q \in t+1 \quad (2.36)$$

Se establecen límites superiores para las todas variables desagregadas:

$$x_{u',u,p,q}^d \leq M^{x_{u',u,q}} y_{1_{u',u,q}}, \quad u' \in U', u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.37)$$

$$\varphi_{u',u,p,q}^d \leq M^{\varphi_{u',u,p}} y_{1_{u',u,p}}, \quad u' \in U', u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.38)$$

$$x_{u,p,q}^d \leq M^{x,u,q} y_{2,u,p,q}, \quad u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.39)$$

$$\varphi_{u,p,q}^d \leq M^{\varphi,u,p} y_{A2,u,p}, \quad u \in U, p \in P, q \in t+1 \quad (2.40)$$

$$x_{u,j,p,q}^d \leq M^{x,u,j,q} y_{3,u,j,q}, \quad u \in U, j \in J, p \in P, q \in t+1 \quad (2.41)$$

$$\varphi_{u,j,p,q}^d \leq M^{\varphi,u,j,p} y_{3,u,j,p}, \quad u \in U, j \in J, p \in P, q \in t+1 \quad (2.42)$$

Las siguientes ecuaciones seleccionan el punto que activa la disyunción, es decir el punto en que tanto los balances de masa y de propiedad son satisfechos:

$$\sum_q y_{1,u',u,q} = 1 \quad u' \in U', u \in U \quad (2.43)$$

$$\sum_q y_{2,u,q} = 1 \quad u \in U \quad (2.44)$$

$$\sum_q y_{3,u,j,q} = 1 \quad u \in U, j \in J \quad (2.45)$$

Adicionalmente todos los balances de masa involucrados tienen que escribirse en función de las variables discretizadas y las variables binarias asociadas a ellas:

BALANCES DE MASA EN LOS TANQUES DE MEZCLADO:

$$d_{u',u}^r = \sum_{u \in U} \sum_{q \in t+1} d_{u',u,q} y_{1,u',u,q} \quad (2.46)$$

$$m_u = \sum_{u \in U} \sum_{q \in t+1} m_{u,q} y_{2,u,q} \quad (2.47)$$

$$g_{u,j} = \sum_{j \in J} \sum_{q \in t+1} g_{u,j,q} y_{3,u,j,q} \quad (2.48)$$

BALANCES DE MASA A LA ENTRADA DE LAS UNIDADES DE PROCESO:

$$G_j = \sum_{u' \in U'} \sum_{q \in t+1} d_{u',u,q} y_{1,u',u,q} \sum_{r \in FRESH} f_{r,j} \quad (2.49)$$

$$G_j = \sum_{u \in U} \sum_{q \in t+1} m_{u,q} y_{2,u,q} \sum_{r \in FRESH} f_{r,j} \quad (2.50)$$

$$G_j = \sum_{u \in U} \sum_{q \in t+1} g_{u,j,q} y_{3,u,j,q} \sum_{r \in FRESH} f_{r,j} \quad (2.51)$$

CASOS DE ESTUDIO.

Enseguida se muestra la solución a tres casos de estudio. Se toman los datos de las corrientes principales de proceso de la refinería Al Ruwais (Emiratos Árabes Unidos). Se considera una operación de 8000 h/año para los tres ejemplos. Se toman en cuenta cinco propiedades de interés que son: composición, toxicidad, demanda química de oxígeno, densidad y viscosidad. Sin embargo, solo se tienen unidades para tratar las primeras cuatro propiedades; los datos de eficiencia y costos de cada una de las unidades disponibles se muestran en la Tabla 2:

Tabla 2. Operadores de propiedad selectos.

Propiedad	Unidad	Eficiencia α	Costo unitario (\$/lb)
Composición	REC 1	0.98	0.0065
	REC 2	0.85	0.0033
Toxicidad	TOX 1	1	0.0098
	TOX 2	0.9	0.0075
DQO	AER 1	0.8	0.0065
	AER 2	0.55	0.0032
NONE	NONE	0	0

CASO DE ESTUDIO 1

Primero se resuelve el caso de estudio 1 que contiene dos corrientes de proceso, dos unidades de proceso, y una corriente fresca. La Tabla 3 muestra las características de las corrientes de proceso y la corriente fresca, la Tabla 4 muestra las restricciones ambientales y de proceso para este problema. El costo de la corriente fresca es de \$0.009/lb.

Tabla 3. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 1.

Corriente	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O2/l)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
W1	2900	0.032	0.8	75	2	1.256
W1	2450	0.022	0.5	88	2.208	1.22
F1	-	0	0	0	2.204	1.002

Tabla 4. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 1.

Unidad	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O2/l)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
			Máximo			
1	3000	0.013	2	75	2.8	1.202
2	1900	0.011	2	75	2.5	1.43
Desecho	-	0.005	0	75	3	2
			Mínimo			
1	3000	0	0	0	1.8	0.871
2	1900	0	0	0	1.7	0.782
Desecho	-	0	0	0	1	1

CASO DE ESTUDIO 2.

En este ejemplo se considera el problema de integración con tres corrientes de proceso y tres unidades de proceso; se tiene dos corrientes frescas disponibles con costos unitarios de \$0.009/lb y \$0.006/lb. La Tabla 5 muestra las características para las corrientes frescas y de proceso, mientras que la Tabla 6 muestra las restricciones ambientales y de proceso que deben ser satisfechas.

Tabla 5. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 2.

Corriente	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O2/l)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
W1	8083	0.016	0.3	0.187	2	1.256
W2	390	0.024	0.5	48.85	2.208	1.22
W3	3279	0.22	1.5	92.1	2.305	1.261
F1	-	0	0	0	2.204	1.002
F2	-	0.01	0.1	0.01	2.209	0.992

Tabla 6. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 2.

Unidad	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O2/l)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
Máximo						
1	6000	0.013	2	75	2.8	1.202
2	2490	0.011	2	100	2.5	1.43
3	3287	0.1	2	100	2.9	1.26
Desecho	-	0.005	0	75	3	2
Mínimo						
1	6000	0	0	0	1.8	0.871
2	2490	0	0	0	1.7	0.782
3	3287	0	0	0	1.85	0.775
Desecho	-	0	0	0	1	1

CASO DE ESTUDIO 3.

Este ejemplo contiene seis corrientes de proceso, seis unidades de proceso y tres corrientes frescas. La tabla 7 muestra las características de las corrientes disponibles. En la Tabla 8 se muestran las restricciones ambientales y de proceso. Los costos de corrientes frescas 1, 2 y 3 son \$0.008/lb, \$0.006/lb y \$0.003/lb, respectivamente.

Tabla 7. Características de las corrientes de proceso (W) y corrientes frescas (F) caso de estudio 3.

Corriente	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O ₂ /ml)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
W1	3100	0.16	0.4	95	2.1	1.236
W2	1800	0.1	0.7	85	2.208	1.22
W3	1750	0.11	1.3	90	2.305	1.241
W4	2000	0.12	0.8	100	2.105	1.256
W5	1300	0.09	0.4	100	2.305	1.26
W6	1400	0.2	1.5	100	2.102	1.259
F1	-	0	0	0	2.204	1.002
F2	-	0.01	0.1	0	2.209	0.992
F3	-	0.09	0.5	0	2.215	0.998

Tabla 8. Restricciones ambientales y de proceso para caso de estudio 3.

Unidad	Flujo (lb/h)	Composición (ppm)	Toxicidad (%)	DQO (mg O ₂ /l)	Densidad (lb/l)	Viscosidad (cP)
			Máximo			
1	1900	0.1	2	100	2.8	1.292
2	1600	0.01	2	100	2.5	1.28
3	2800	0.04	2	100	2.9	1.27
4	2000	0.02	2	100	2.8	1.291
5	1800	0.01	2	100	2.7	1.281
6	1000	0.01	2	100	2.7	1.281
Desecho	-	0.005	0	50	2.7	1.29
			Mínimo			
1	1900	0	0	0	1.8	0.871
2	1600	0	0	0	1.7	0.782
3	2800	0	0	0	1.85	0.775
4	2000	0	0	0	1.75	0.84
5	1800	0	0	0	1.85	0.85
6	1000	0	0	0	1.85	0.85
Desecho	-	0	0	0	1	1

RESULTADOS.

CASO DE ESTUDIO 1. SOLUCIÓN MODELO MINLP (RESOLVEDORES LOCALES).

Resolviendo el caso de estudio 1 del modelo de optimización con un método relajado lo cual incluye la solución con un resolvidor local como lo es el **SBB** y la solución para el problema MINLP es infactible pues no se encuentra solución alguna.

Enseguida se resuelve con un resolvidor local diferente como lo es el **DICOPT** y la solución para el problema MINLP da como resultado similar que utilizando SBB ya que no se encuentra solución.

Por lo tanto, en los dos resolvidores locales se llega al mismo resultado ya que ninguno de los dos converge.

SOLUCIÓN MODELO MINLP RELAJADO (RESOLVEDORES GLOBALES).

El siguiente paso es resolver el modelo de optimización, pero ahora haciéndolo con un resolvidor global como lo es el **LINDOGLOBAL** y la solución para el problema MINLP es infactible, pues se llega a un número máximo de iteraciones sin encontrar la solución, con un tiempo de computo >100000 segundos.

A continuación, se elige otro resolvidor global para el modelo de optimización el cual es el **BARON** y la solución para el problema MINLP es de igual manera que el anterior, infactible, llegando a un número máximo de iteraciones sin llegar a la solución, con un tiempo de computo >100000 segundos.

SOLUCIÓN MÉTODO DISCRETIZADO.

Se resuelve el modelo de optimización tomando en cuenta la discretización de productos bilineales y en primera estancia se resuelve solo incrementando el número de intervalos para lograr una mejor solución y llegar a la función objetivo más factible posible. En primera estancia se resuelve la modelación con un numero de segmentos igual a 3, y con ello la solución de la función objetivo es \$996,864/año, con un tiempo de computo de 0.564 segundos. Ahora se incrementa el número de segmentos a 6 y se logra una mejor función objetivo la cual es \$570,160/año con un tiempo de computo de 6.777 segundos.

Al incrementar los segmentos cada vez se llega a una mejor solución en la función objetivo como se muestra en la Tabla 9.

Tabla 9. Caso de estudio 1 sin selección de solución candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
3	996.864	0.564
6	570.16	6.777
10	328.516	83.525
13	213.987	107.42
15	228.51	139.69

Como se puede apreciar en la Tabla 9, al aumentar el número de segmentos disminuye la función objetivo, pero el tiempo de cómputo aumenta exponencialmente. Se muestra la Figura 9 para observar mejor el comportamiento.

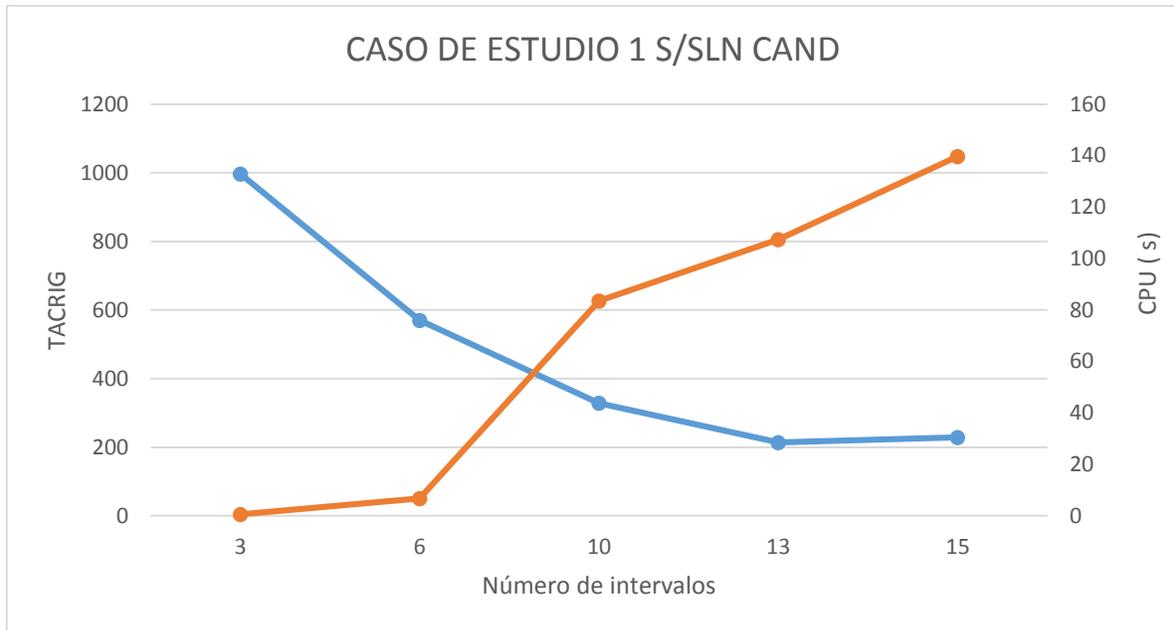


Figura 9. Gráfico caso de estudio 1 sin selección de corrientes candidato.

Al aumentar el número de intervalos y obteniendo soluciones se observa que en algunos casos de la solución existen corrientes de proceso en la cual se omiten, por lo tanto se excluyen, tomando en cuenta la función objetivo de \$213,987/año y la configuración óptima de la red se muestra en la Figura 10, los flujos para esta configuración se muestran en la Tabla 10.

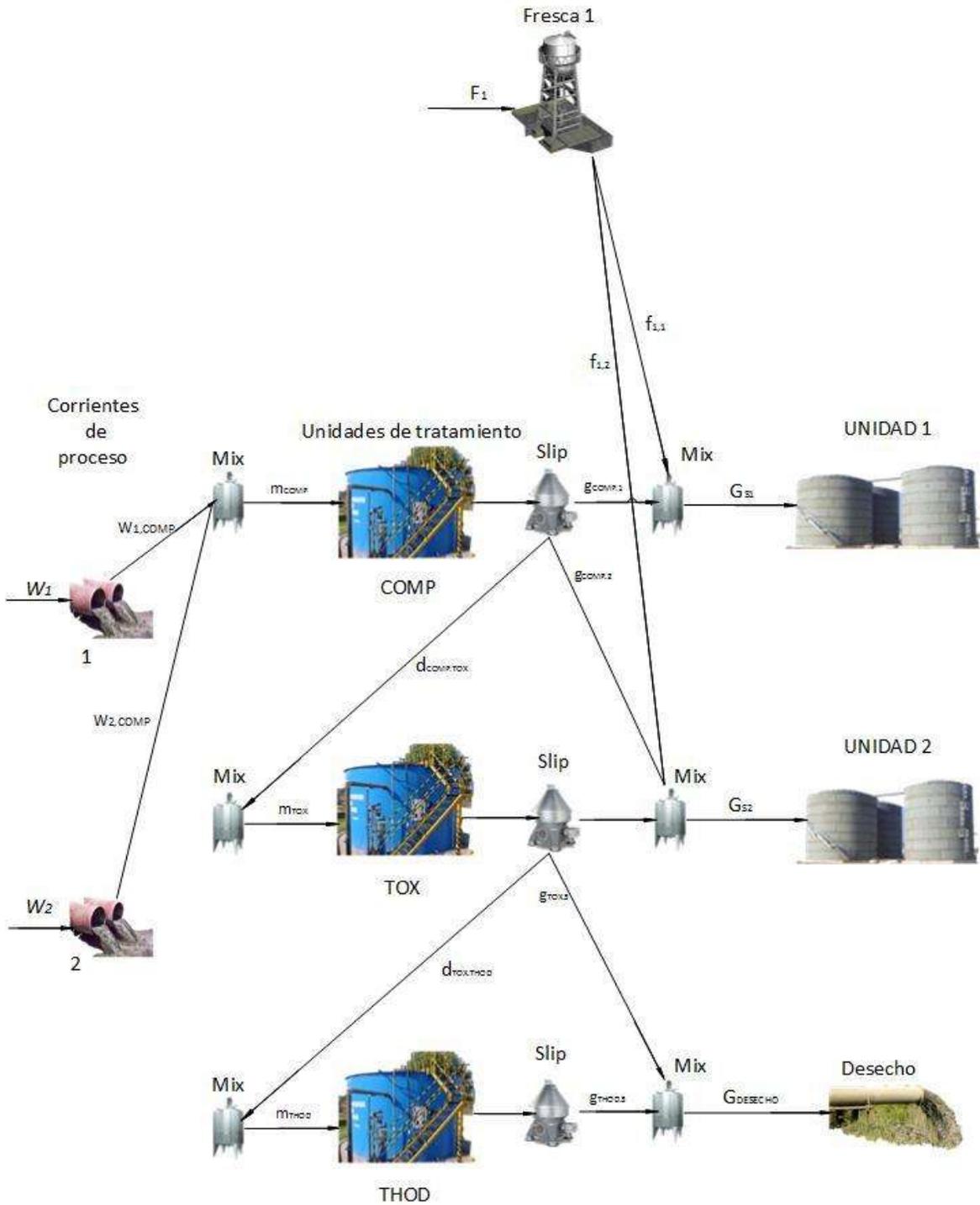


Figura 10. Configuración óptima de la red esquema de reciclo/re-uso basado en propiedades caso de estudio 1.

Tabla 10. Flujos en la configuración óptima de la red caso de estudio 1.

Corriente	Flujo (lb/h)
F_1	442
$f_{1.1}$	363
$f_{1.2}$	79
$w_{1.COMP}$	2432
$w_{2.COMP}$	1135
$d_{COMP.TOX}$	892
$d_{TOX.THOD}$	446
m_{COMP}	3567
m_{TOX}	892
m_{THOD}	446
$g_{COMP.1}$	1250
$g_{COMP.2}$	1425
$g_{TOX.3}$	446
$g_{THOD.3}$	446
g_{S1}	3000
g_{S2}	1900
$g_{Desecho}$	892

En la solución anterior al aumentar el número de segmentos disminuye la función objetivo, pero aumenta gradualmente el tiempo de cómputo, por ello es que se hace una selección de corrientes candidato para la optimización global, en el cual se selecciona la mejor convergencia aumentando solamente el número de segmentos cancelando las corrientes que en la mejor solución dan cero y se le ayuda al programa evitando que las calcule posteriormente, esto con la finalidad de obtener una mejor solución con un tiempo de cómputo mejor.

Enseguida se muestran en la Tabla 11 los resultados, seleccionando las corrientes candidato y en la Figura 11 se muestra el comportamiento de los datos obtenidos.

Tabla 11. Caso de estudio 1 con selección de solución candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
3	1066.2	0.405
6	1038.038	0.388
10	515.109	8.739
14	268.633	10.132
21	256.282	74.105
29	207.931	546.67

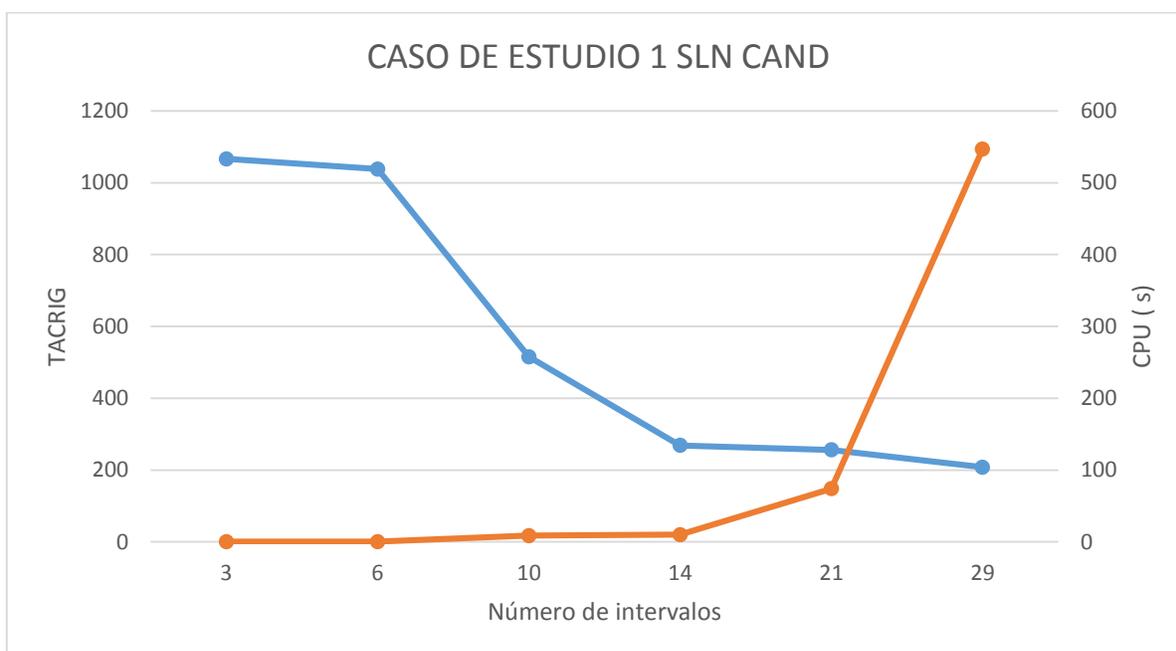


Figura 11. Gráfico caso de estudio 1 con selección de corrientes candidato.

Al hacer la comparación de ambos métodos se observa que el modelo discretizado converge a una mejor solución, pues la mejor solución en el nodo raíz para el problema discretizado da una función objetivo con un valor de \$207,931/año con un tiempo de cómputo muy razonable, mientras que con el método relajado da una función objetivo con solución infactible con resolvedores tanto locales como globales.

Enseguida se muestra en la Tabla 12 la comparación de ambas soluciones.

Tabla 12. Comparación de soluciones Caso de estudio 1.

MÉTODO	Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
Discretizado (Sin solución candidato)	3	996.864	0.564
	6	570.16	6.777
	10	328.516	83.525
	13	213.987	107.42
	15	228.51	139.69
Discretizado (Solución candidato)	3	1066.2	0.405
	6	1038.038	0.388
	10	515.109	8.739
	14	268.633	10.132
	21	256.282	74.105
	29	207.931	546.67
MINLP (Resolvedor local SBB)	-	-	-
MINLP (Resolvedor local DICOPT)	-	-	-
MINLP (Resolvedor global LINDOGLOBAL)	-	-	>100000
MINLP (Resolvedor global BARON)	-	-	>100000

CASO DE ESTUDIO 2. SOLUCIÓN MODELO MINLP (RESOLVEDORES LOCALES).

Resolviendo el caso de estudio 2 del modelo de optimización con un método relajado como se hizo en el caso de estudio 1 se utilizó un resolvidor local **SBB** y la solución para el problema MINLP es infactible.

De igual manera se cambia de tipo de resolvidor, utilizando en este caso otro resolvidor local como lo es el **DICOPT** y se llega a una solución infactible.

De la misma manera que el caso de estudio anterior se llega a la misma conclusión, por lo tanto, en los dos resolvidores locales se llega a la misma conclusión ya que ninguno de los dos converge.

SOLUCIÓN MODELO MINLP RELAJADO (RESOLVEDORES GLOBALES).

Se utiliza la misma técnica que en el anterior caso de estudio como lo es el **LINDOGLOBAL** y la solución para el problema MINLP es infactible, pues se llega a un número máximo de iteraciones sin encontrar la solución, con un tiempo de cómputo >100000 segundos.

Enseguida, se elige otro resolvidor global para el modelo de optimización el cual es el **BARON** y la solución para el problema MINLP es de igual manera que el anterior, infactible, llegando a un número máximo de iteraciones sin llegar a la solución, con un tiempo de cómputo >100000 segundos.

SOLUCIÓN MÉTODO DISCRETIZADO.

Se resuelve el modelo de optimización similar al caso de estudio 1 tomando en cuenta la discretización de productos bilineales correspondientes y se resuelve solo incrementando el número de intervalos para lograr una mejor solución y llegar a la función objetivo más factible posible. En primera instancia se resuelve la modelación con un número de

segmentos igual a 5, y con ello la solución de la función objetivo es \$477,537/año, con un tiempo de computo de 3.846 segundos.

Al incrementar los segmentos cada vez se llega a una mejor solución en la función objetivo como se muestra en la Tabla 13.

Tabla 13. Caso de estudio 2 sin selección de soluciones candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
5	477.537	3.846
7	443.968	10.132
10	449.249	156.52
12	435.922	356.01
20	437.338	679.99

La Figura 12 muestra el comportamiento aumentando el número de segmentos.

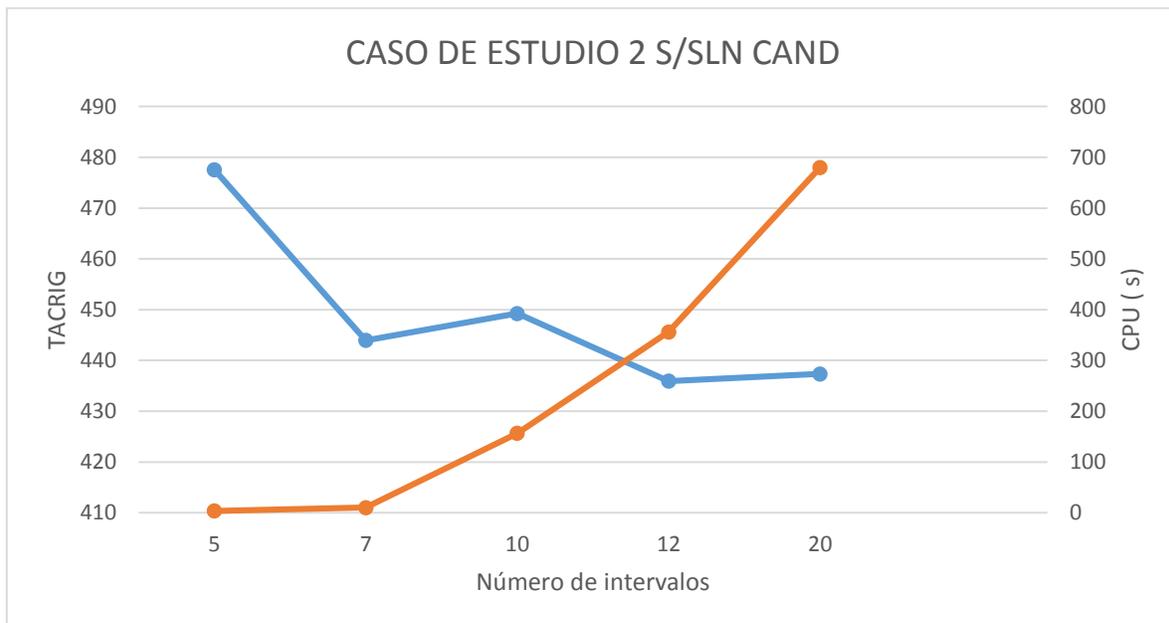


Figura 12. Gráfico Caso de estudio 2 sin selección de soluciones candidato.

En algunos casos de la solución algunas corrientes de proceso son nulas, por lo tanto no se toman en cuenta. Con una función objetivo de \$435,922/año y la configuración óptima de la red se muestran en la Figura 13, los flujos para tal configuración seleccionada se muestran en la Tabla 14.

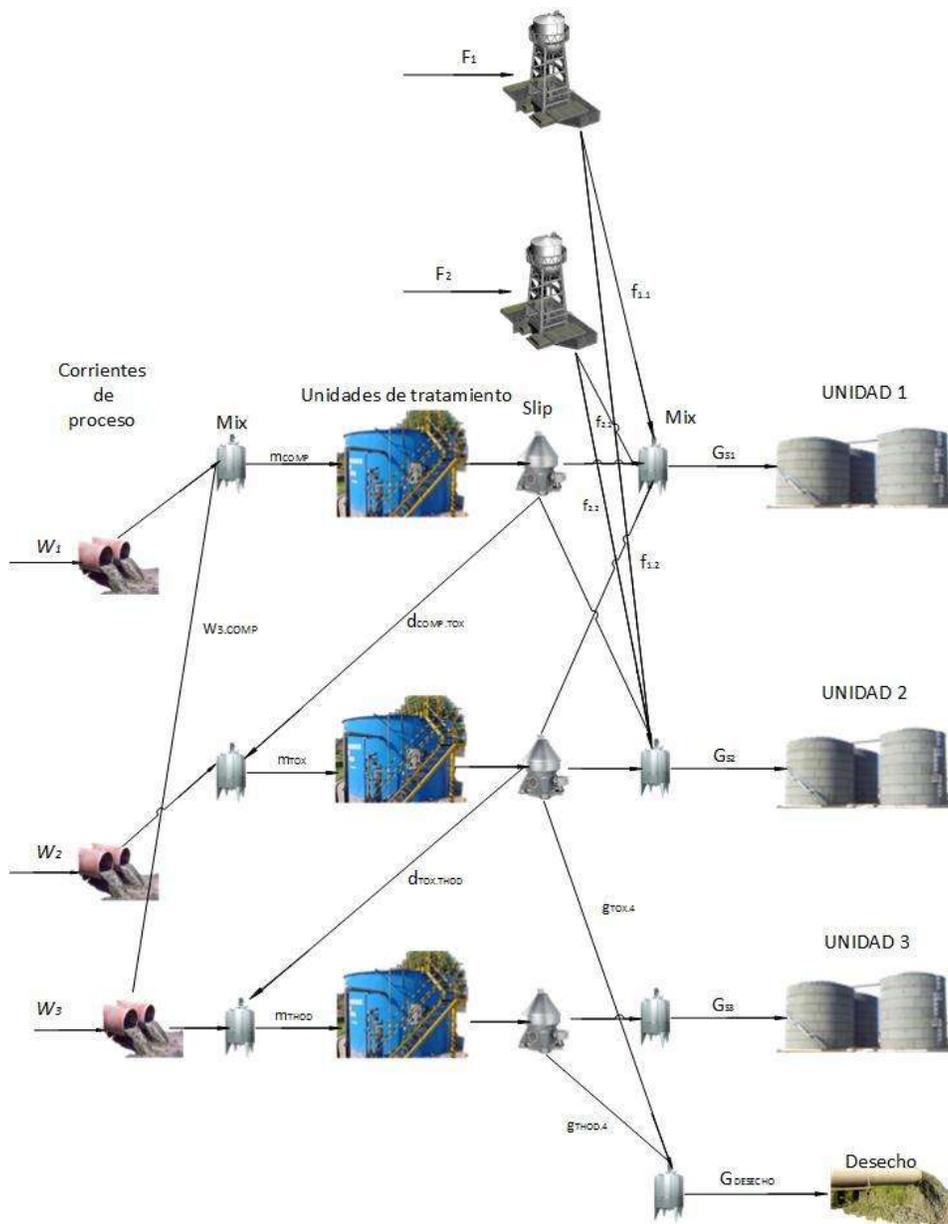


Figura 13. Configuración de la red esquema de reciclo/re-uso basado en propiedades Caso de estudio 2.

Tabla 14. Flujos en la configuración óptima de la red Caso de estudio 2.

Corriente	Flujo (lb/h)
F_1	1752
F_2	403
$f_{1.1}$	1101
$f_{1.2}$	650
$f_{2.1}$	63
$f_{2.2}$	341
$W_{3.COMP}$	2138
$d_{COMP.TOX}$	2138
$d_{TOX.THOD}$	1069
m_{COMP}	2138
m_{TOX}	2138
m_{THOD}	1069
$g_{TOX.4}$	1069
$g_{THOD.4}$	1069
g_{S1}	6000
g_{S2}	2490
g_{S3}	3287
$g_{Desecho}$	2138

Haciendo la selección de corrientes candidato para ayudar al programa y disminuir el tiempo de cómputo, se muestra la mejora en el tiempo de cómputo en la Tabla 15, la Figura 14 muestra el comportamiento.

Tabla 15. Caso de estudio con selección de soluciones candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
5	477.537	0.425
7	443.968	0.529
10	449.249	0.672
12	435.922	0.725
20	437.338	2.242

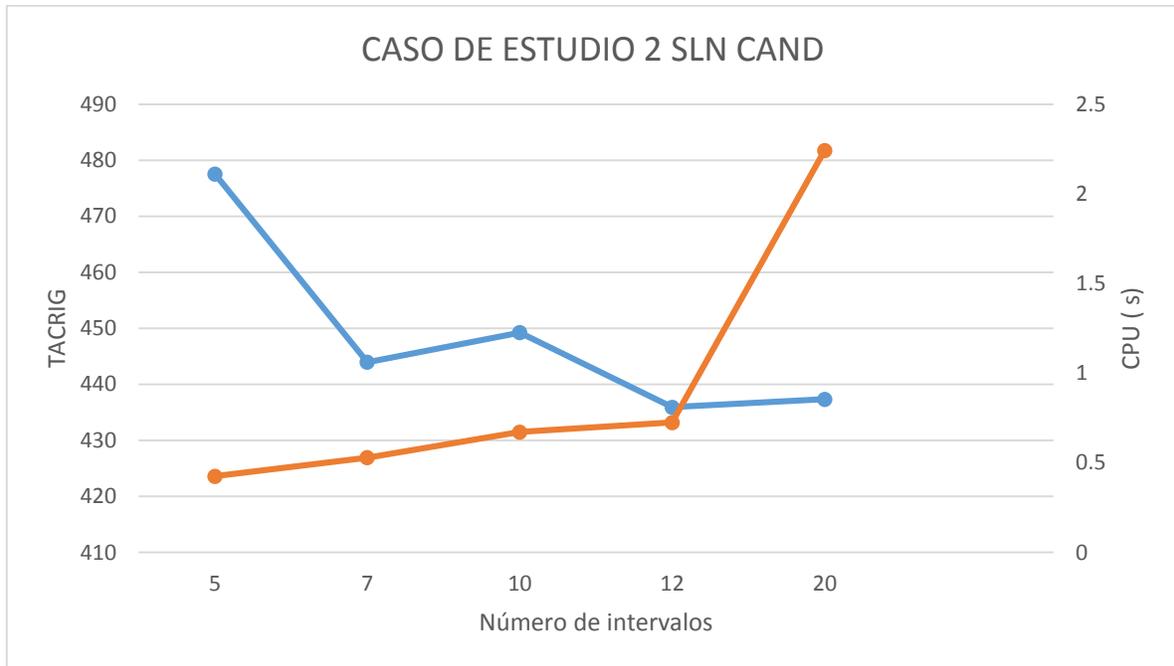


Figura 14. Gráfico Caso de estudio 2 con selección de corrientes candidato.

Se comparan ambos métodos y se observa que el método riguroso es mejor, pues la mejor solución para el problema MINLP da una función objetivo con un valor de \$435,922/año con un tiempo de computo muy considerable, mientras que con el método relajado da una función objetivo con un valor infactible en con ambos resolvedores.

En la Tabla 16 se muestran la comparación de ambos métodos.

Tabla 16. Comparación de soluciones Caso de estudio 2.

MÉTODO	Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
Discretizado (Sin solución candidato)	5	477.537	3.846
	7	443.968	10.132
	10	449.249	156.52
	12	435.922	356.01
	20	437.338	679.99
Discretizado (Solución candidato)	5	477.537	0.425
	7	443.968	0.529
	10	449.249	0.672
	12	435.922	0.725
	20	437.338	2.242
MINLP (Resolvidor local SBB)	-	-	-
MINLP (Resolvidor local DICOPT)	-	-	-
MINLP (Resolvidor global LINDOGLOBAL)	-	-	>100000
MINLP (Resolvidor global BARON)	-	-	>100000

CASO DE ESTUDIO 3. SOLUCIÓN MODELO MINLP (RESOLVEDORES LOCALES).

Al igual que los ejemplos anteriores se utilizan resolvidores globales los cuales son el **SBB** y **DICOPT** y en ambos métodos no se llega a solución alguna.

SOLUCIÓN MODELO MINLP RELAJADO (RESOLVEDORES GLOBALES).

Como se vio anteriormente con los resolvidores globales se tiene una solución infactible, de igual manera en este ejemplo no se encuentra la convergencia pues llega a un número máximo de iteraciones sin encontrar solución alguna y con un tiempo de computo >100000 segundos.

SOLUCIÓN MÉTODO DISCRETIZADO.

Se resuelve el modelo de optimización similar a los ejemplos anteriores, con un método riguroso, se resuelve la modelación con un numero de segmentos igual a 5, y con ello la solución de la función objetivo es \$742,633/año, con un tiempo de computo de 18.21 segundos. Ahora se incrementa el número de segmentos a 10 y se logra una mejor función objetivo la cual es \$594,094/año con un tiempo de computo de 664.14 segundos. La Tabla 17 muestra la variación de los datos, mientras que la Figura 15 muestra el comportamiento.

Tabla 17. Caso de estudio 3 sin selección de soluciones candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
5	742.633	18.21
10	594.094	664.14
13	544.517	1579.3
16	515.134	6229.94
21	476.208	12461.58

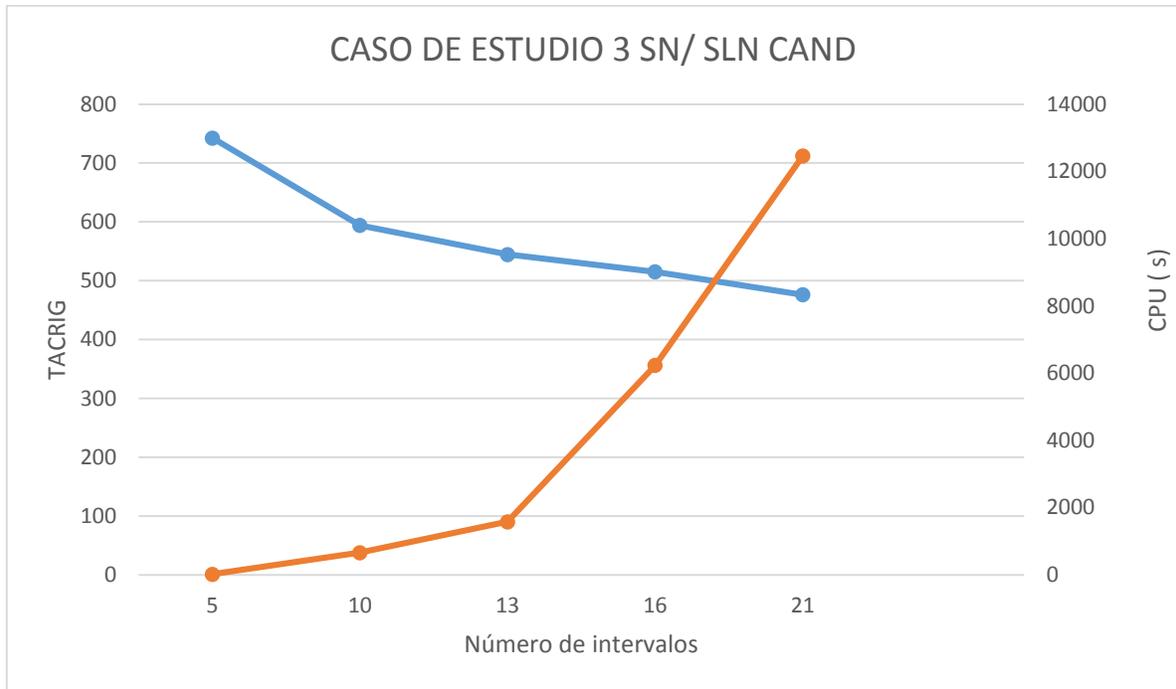


Figura 15. Gráfico Caso de estudio 3 sin selección de corrientes candidato.

En la Tabla 18 se muestra los flujos de la configuración seleccionada de la red omitiendo los flujos que no existen.

Tabla 18. Flujos en la configuración óptima de la red Caso de estudio 3.

Corriente	Flujo (lb/h)
F ₂	318
f _{2.2}	293
f _{2.5}	4
f _{2.6}	20
w _{1.COMP}	2570
w _{3.COMP}	1750
w _{4.COMP}	2000
w _{5.COMP}	225
w _{5.NONE}	568
w _{6.COMP}	1400
d _{COMP.TOX}	568
d _{COMP.NONE}	568
d _{TOX.THOD}	568
m _{COMP}	7945
m _{TOX}	568
m _{THOD}	568
m _{NONE}	1135
g _{COMP.2}	1200
g _{COMP.3}	1400
g _{COMP.4}	1600
g _{COMP.5}	1710
g _{COMP.6}	900
g _{THOD.7}	568
g _{NONE.1}	95
g _{NONE.3}	840
g _{NONE.4}	200
g _{S1}	1900
g _{S2}	1600
g _{S3}	2800
g _{S4}	2000
g _{S5}	1800
g _{S6}	1000
g _{Desecho}	568

Se hace la selección de corrientes candidato para ayudar al programa y disminuir el tiempo de cómputo, se muestra la mejora en el tiempo de cómputo en la Tabla 19, en la Figura 16 se ve el comportamiento.

Tabla 19. Caso de estudio 3 con selección de soluciones candidato.

Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
10	595.103	15.415
12	594.341	82.466
16	515.74	41.973
19	495.459	89.68
21	476.208	149.32
25	470.844	388.083

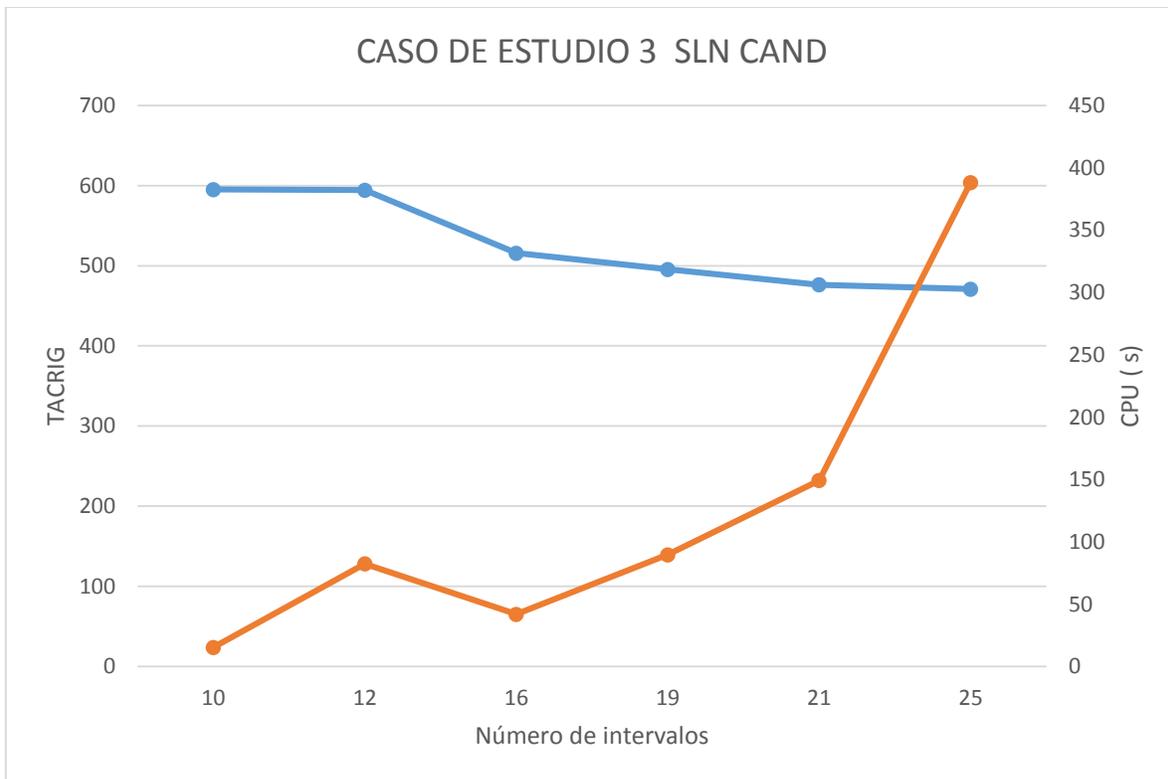


Figura 16. Gráfico Caso de estudio 3 con selección de soluciones candidato.

Se comparan ambos métodos y se observa que el método riguroso es mejor, pues la mejor solución para el problema MINLP da una función objetivo con un valor de \$470,844/año con un tiempo de computo muy considerable, mientras que con el método relajado no se obtiene solución alguna.

En la Tabla 20 se muestra una comparación de soluciones de ambos métodos.

Tabla 20. Comparación de soluciones Caso de estudio 3.

MÉTODO	Numero de intervalos	TACRIG	CPU (s)
Discretizado (Sin solución candidato)	5	742.633	18.21
	10	594.094	664.14
	13	544.517	1579.3
	16	515.134	6229.94
	21	476.208	12461.58
Discretizado (Solución candidato)	10	595.103	15.415
	12	594.341	82.466
	16	515.74	41.973
	19	495.459	89.68
	21	476.208	149.32
	25	470.844	388.083
MINLP (Resolvidor local SBB)	-	-	-
MINLP (Resolvidor local DICOPT)	-	-	-
MINLP (Resolvidor global LINDOGLOBAL)	-	-	>100000
MINLP (Resolvidor global BARON)	-	-	>100000

A continuación, se muestra la Tabla 21 con las mejores soluciones de los tres casos de estudio:

Tabla 21. Comparación general de los tres Casos de estudio con ambos métodos resueltos.

Caso de estudio	Método MINLP								Método discretizado			
	SBB		DICOPT		LINDOGLOBAL		BARON		Sin selección de solución candidato		Con solución candidato	
	TACRIG	CPU (s)	TACRIG	CPU (s)	TACRIG	CPU (s)	TACRIG	CPU (s)	TACRIG	CPU (s)	TACRIG	CPU (s)
1	-	-	-	-	-	>100000	-	>100000	213,987	107.42	207,931	146.67
2	-	-	-	-	-	>100000	-	>100000	435.922	356.01	435.922	0.725
3	-	-	-	-	-	>100000	-	>100000	476.208	12461.58	470.844	388.083

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

En el presente trabajo se presenta una estrategia de optimización global mediante la discretización de productos bilineales aplicada a la solución de redes de agua basadas en propiedades. El modelo matemático está basado en un esquema de reciclaje-reuso con unidades de tratamiento distribuidas en el cual se incluyen balances de propiedad, para realizar dichos balances se utilizan operadores de propiedad, que, a diferencia de los balances de masa convencionales, nos ayuda a determinar las características de un conjunto de corrientes que se mezclan y nos permite tener un modelo pseudolineal en el operador. Se hace referencia a los operadores de propiedad porque es sabido que las normas ambientales no solo se basan únicamente a las composiciones de la corriente de desecho, por lo cual se presentan las características que se incluye en el esquema de optimización. Se resuelven dos problemas, uno de programación mixta entera lineal y otro de programación mixta entera no lineal, el problema MINLP no muestra convergencia con resolvers locales y globales disponibles comercialmente, mientras que el modelo discretizado proporciona soluciones factibles en tiempos de cómputo cortos, además la convergencia se puede acelerar mediante la selección de corrientes candidato, lo cual también permite la refinación de las soluciones finales.

Se resolvieron casos de estudio de interés práctico con datos tomados de las principales corrientes de proceso de la refinería Al Ruwais (Emiratos Árabes Unidos) con lo cual se muestra la aplicabilidad del modelo y la estrategia de solución propuesta, las soluciones encontradas muestran la capacidad de reducir el consumo de corrientes frescas en los procesos industriales mediante la debida implementación de unidades de tratamiento. Se propone el uso de unidades de tratamiento distribuidas ya que estas han demostrado disminuir los flujos totales tratados en contraste con los esquemas centralizados.

Finalmente se concluye que la estrategia de discretización de productos bilineales es aplicable a cualquier esquema de redes de agua, incluidos los problemas de asignación y mezclado, reciclaje directo, o cualquier otro esquema donde se presente la estructura de un producto bilineal formado por un flujo y una propiedad.

REFERENCIAS

1. - Abdulla, F., Al-Shareef, A. (2009). Roof rainwater harvesting systems for household water supply in Jordan. *Desalination*. 343: 195-207.
2. - Takama, N.; Kuriyama, T.; Shoroko, K.; Umeda, T., Optimal water Allocation In a Petroleum Refinery. *Computers and Chemical Engineering* 1980, 4, 251-258.
3. - Quesada, I.; Grossmann, I., Global Optimization of Bilinear Process Networks With Multicomponent Flows, *Computers and Chemical Engineering* 1995, 19, (12) 1219-1242.
4. - Lee, S.; Grossmann, I., Global Optimization of Nonlinear Generalized Disjunctive Programming With Bilinear Equality Constraints: Applications to Process Networks. *Computer and Chemical Engineering* 2003, 27, (11), 1557-1575.
5. - Karuppiah, R.; Grossmann, I., Global Optimization for the Synthesis of Integrated Water Systems in Chemical Processes. *Computer and Chemical Engineering* 2006, 20, (4), 650- 673.
6. - Alva-Argaez, A.; Kokossis, A. C.; Smith, R., Wastewater Minimization of Industrial Systems Using an Integrated Approach. *Computer and Chemical Engineering* 1992, 22, (Suppl), S741-S744T.
7. - Huang, C. H.; Chang, C.T.; Ling, H. C., A Mathematical Programming Model For Water Usage and Treatment Network Design. *Industrial Engineering Chemistry Research* 1999, 38, (7), 2666-2679.
8. - Gabriel, F.; El-Halwagi, M. M., Simultaneous Synthesis of Waste Interception And Material Reuse Networks: Problem Reformulation For Global Optimization. *Environmental Progress* 2005, 24, (2), 171-180.

- 9.- Hull, S.; Tan, R. R.; Auresenia, J.; Fuchino, T.; Foo, C. Y. D., Water Networks Synthesis Using Mutation-Enhanced Particle Swarm Optimization Process Safety and Environmental Protection 2007, 85, (6), 507-514.
10. - Lou, Y.; Uan, X., Global Optimization for the Synthesis Of Integrated Water Systems with Particle Swarm Optimization Algorithm. Chinese Journal of Chemical Engineering 2008, 16, (1), 11-15.
11. - Dakwala, M., Mohanty, B., Bhargava, R. (2009). A process integration approach to industrial water conservation: a case study for an indian starch industry. *Journal of Cleaner Production*. 17(18):1654-1662.
12. - Foo, D. (2009). State-of-the-art review of pinch analysis techniques for water networks synthesis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 48(11):5125-5159.
13. - Lovelady, E., El-Halwagi, M. (2009). Design and integration of eco-industrial parks. *Environmental Progress and Sustainable Energy*. 28(2): 265-272.
14. - Aviso, K., Tan, R., Culaba, A. (2010). Designing eco-industrial water exchange networks using fuzzy mathematical programming. *Clean Technology and Environment policy*. 12(4):353-363.
15. - Burgara-Montero, O., Ponce-Ortega, J.M., Serna-González, M. El-Halwagi, M. (2013). Incorporation of the seasonal variations in the optimal treatment of industrial effluents discharged to watersheds. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 52:5145-5160.