UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLAS DE HIDALGO

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

Diseño de Estrategias para Minimizar el Efecto en el Ambiente de los Efluentes Industriales

Tesis presentada por:

OSCAR BURGARA MONTERO

A la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química como requisito parcial para obtener el grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS
EN
INGENIERÍA QUÍMICA

Asesor:

Doctor en Ciencia en Ingeniería Química José María Ponce Ortega

Morelia, Mich. **Enero, 2014**

RESUMEN

DISEÑO DE ESTRATEGIAS PARA MINIMIZAR EL EFECTO EN EL AMBIENTE DE LOS EFLUENTES INDUSTRIALES

Por

Oscar Burgara Montero

Enero 2014

Doctor en Ciencias en Ingeniería Química

Dirigida por: Dr. José María Ponce Ortega

En el presente trabajo se presentan estrategias basadas en programación matemática para minimizar el impacto adverso de los efluentes industriales que son descargados a reservorios naturales. Específicamente son abordados tres problemas: El primero consiste en incrementar la capacidad de autodepuración de los sistemas macroscópicos (cuencas hidrológicas) por medio de un conjunto de unidades de tratamiento de efluentes acuosos disponibles a través de un sistema distribuido; con la finalidad de incrementar la exactitud del modelo anterior, en el segundo problema se incorporan los efectos de la estacionalidad en las cuencas hidrológicas. El incremento del oxígeno disuelto es una de las medidas más importantes para restaurar los ríos y cuerpos de agua, es por ello que en el tercer problema se aborda el desarrollo de una metodología para determinar la localización óptima de sistemas de discos auto-rotatorios en los afluentes con la finalidad de incrementar la aireación y la capacidad de degradar contaminantes. Los tres problemas antes mencionados comparten temas comunes en la estrategia de solución, los cuales se enlistan a continuación:

1.- Para rastrear los contaminantes y el oxígeno disuelto en las cuencas hidrológicas, el sistema macroscópico es caracterizado matemáticamente por un modelo cuantitativo de análisis de materiales (MFA).

2.- Los problemas son formulados como modelos de optimización multi-objetivo.

3.- Los modelos se establecen a través de una formulación disyuntiva que permite la selección óptima de las tecnologías de tratamiento.

Palabras Claves: Análisis de flujo de materiales, sistema de tratamiento distribuido, multi-objetivo.

ABSTRACT

DESIGN OF STRATEGIES TO MINIMIZE THE EFFECT ON THE ENVIRONMENT OF THE INDUSTRIAL EFFLUENT.

by

Oscar Burgara Montero

Enero 2014

Doctor of Philosophy in Chemical Engineering

Directed by: Ph.D. José María Ponce Ortega

In this work, are presented strategies based on mathematical programming to minimize the adverse impact of industrial effluents discharged into natural reservoirs. Specifically three problems are addressed: The first consists in increasing the self-purification capacity of macroscopic systems (watersheds) by a set of processing operations available aqueous effluents through a distributed system. In order to increase applicability of the previous model, the second problem is to incorporate the effects of seasonality in watersheds. The increase in dissolved oxygen is one of the most important means for restoring the rivers and water bodies; hence, the third problem is to place systems based on self-rotating disks in the tributaries increasing aeration and the ability to degrade contaminants. The three aforementioned problems share common aspects in the solution strategy:

1.- To trace contaminants and dissolved oxygen in the river , the macroscopic system is characterized mathematically by the quantitative materials flow analysis (MFA) model.

2.- The problems are formulated as multi-objective optimization models.

3.- The models are set through disjunctive formulations that allow the selection of optimal treatment technologies.

Key words: Material Flows Analysis, Distributed treatment system, miti-objective.

DEDICATORIA

Gracias a todas esas persona importantes en mi vida, que siempre estuvieron listas para brindarme toda su ayuda, apoyo y por toda su motivación para poder lograr este gran objetivo, ahora me toca regresar un poco de todo lo inmenso que han otorgado. Con todo mi cariño está tesis la dedico a ustedes:

A mi padre, madre, hermano y al amor de mi vida

TABLA DE CONTENIDOS

RESUMEN ii

ABSTRACT iii

DEDICATORIA iv

TABLA DE CONTENIDO v

LISTA DE FIGURAS ix

LISTA DE TABLAS xi

NOMENCLATURA xii

AGRADECIMIENTOS xxiv

CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN 25

I.1. Generalidades 25

I.2. Antecedentes 27

I.3. Justificación 31

1.4. Hipótesis 32

I.5. Objetivos 32

1.5.1. Objetivo General 32

1.5.2. Objetivos particulares 32

CAPÍTULO II DISEÑO ÓPTIMO DE SISTEMAS DE TRATAMIENTO DISTRIBUIDOS PARA LOS AFLUENTES DESCARGADOS A LOS RÍOS 33

II.1. Planteamiento del problema 33

II.2. Formulación del modelo 36

II.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río 39

II.2.2 Balance por componente para cada tramo de río 39

II.2.3 Balance general de masa para los afluentes 40

II.2.4 Balance por componente para cada afluente 41

II.2.5 Descargas agrícolas y usos 41

II.2.6 Diseño para el sistema de tratamiento distribuido 42

II.2.7 Restricciones para la calidad del agua en tramos de río específicos 45

II.2.8 Función objetivo 46

II.2.9 Observaciones para el modelo 47

II.3 Resultados y Discusiones 48

II.3.1 Caso de estudio 1 48

II.3.2 Caso de estudio 2 54

II.3.3 Caso de estudio 3 60

CAPÍTULO III INCORPORACIÓN DE LAS VARIACIONES ESTACIONALES EN EL TRATAMIENTO ÓPTIMO DE EFLUENTES INDUSTRIALES DESCARGADOS EN LAS CUECAS 65

III.1. Planteamiento del problema 65

III.2. Formulación del modelo 67

III.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río en cualquier periodo 69

III.2.2 Balance por componente para cada tramo de río en cualquier periodo 69

III.2.3 Balance general de masa para los afluentes en cualquier periodo de tiempo 70

III.2.4 Balance por componente para cada afluente en cualquier periodo de tiempo 70

III.2.5 Descargas agrícolas y usos en cada periodo de tiempo de operación..... 71

III.2.6 Diseño del sistema de tratamiento distribuido multi-periodo 72

III.2.7 Tratamiento para los efluentes industriales descargados a los afluentes 74

III.2.8 Tratamiento para los efluentes industriales descargados a los tramos de río 76

III.2.9 Función objetivo..... 79

III.3 Resultados y Discusiones 80

III.3.1 Caso de estudio 1..... 81

III.3.2 Caso de estudio 2..... 90

CAPÍTULO IV. DISEÑO ÓPTIMO DE UN SISTEMA DE TRATAMIENTO DISTRIBUIDO PARA EL INCREMENTO DE OXÍGENO EN LAS CUENCAS A TRAVÉS DE DISCOS AUTO-ROTATORIOS..... 96

IV.1. Planteamiento del problema..... 96

IV.2. Desarrollo teórico y formulación matemática..... 99

IV.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río..... 100

IV.2.2 Balance para el oxígeno disuelto en cada tramo de río. 101

IV.2.3 Balance general de masa para los afluentes 101

IV.2.4 Balance para determinar la cantidad de oxígeno disuelto en los afluentes 102

IV.2.5 Descargas agrícolas y el flujo de agua utilizada en los sistemas de riego 102

IV.2.6 Diseño del sistema de tratamiento distribuido 103

IV.2.7 Función objetivo..... 107

IV.3 Resultados y Discusiones 109

IV.3.1 Caso de estudio 109

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES 121

Conclusiones del capítulo II 121

Conclusiones del capítulo III..... 122

Conclusiones del capítulo IV..... 122

Recomendaciones para trabajo futuro 123

BIBLIOGRAFÍA..... 124

APÉNDICE A

OPTIMIZACIÓN AMBIENTAL, ECONÓMICA Y DE SEGURIDAD DE LOS SISTEMAS DE TRATAMIENTO DISTRIBUIDOS PARA LOS EFLUENTES INDUSTRIALES DESCARGADOS EN LAS CUENCAS HIDROLÓGICAS..... 131

LISTA DE FIGURAS

2.1 Superestructura para el sistema de tratamiento distribuido de unidades de tratamientos de efluentes acuosos 35

2.2 Representación del modelo MFA 37

2.3 Superestructura para *n* interceptores para *j* efluentes 42

2.4 Representación del drenaje Bahr el-Baqar 49

2.5 Curva Pareto para la minimización un solo contaminante en la cuenca hidrológica 52

2.6 Configuración óptima para el Caso de estudio1 para una concentración menor que 0.40 ppm 53

2.7 Curvas Pareto para el Caso de estudio multi-componente 56

2.8 Configuración óptima para el caso B del caso de estudio 2 59

2.9 Sistema Balsas 61

2.10 Soluciones Pareto para la minimización de contaminantes en el río Balsas ... 63

3.1 Definición esquemática del problema abordado 66

3.2 Representación del modelo para segregar la cuenca en diferentes secciones a través de un planteamiento MFA 68

3.3 Representación esquemática para el tratamiento de efluentes industriales 73

3.4 Sistema de Drenaje Bahr El-Baqar 82

3.5 Curva Pareto para el Caso de estudio 1 restringiendo el componente A..... 85

3.6 Sistema de tratamiento distribuido multiperiodo para una concentración de descarga del componente A. $CQ^{dis} \geq 1.843$ ppm 86

3.7 Curva de Pareto para el Caso de estudio 1 restringiendo el componente B 88

3.8 Sistema de tratamiento distribuido multiperiodo para una concentración de descarga del componente B. $CQ^{dis} \geq 1.595$ ppm..... 89

3.9 Parte media de la cuenca del Balsas (considerado en el Caso de estudio 2) 91

3.10 Curvas Pareto para los escenarios situados en el Balsas 93

3.11 Configuración óptima para el sistema de tratamiento distribuido en la cuenca del Balsas..... 95

4.1 Representación esquemática de una cuenca hidrológica típica 98

4.2 Representación del modelo teórico de análisis de flujo de materiales (MFA). 100

4.3 Superestructura para el sistema de tratamiento distribuido de discos auto-rotatorios..... 105

4.4 Sistema de drenaje Bahr El-Baqar con baja concentración de oxígeno disuelto..... 112

4.5 Soluciones Pareto para deferentes concentraciones de oxígeno disuelto 113

4.6 Diagrama esquemático de la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para el escenario A 116

4.7 Diagrama esquemático de la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para el escenario B..... 120

LISTA DE TABLAS

2.1 Datos de las unidades de tratamiento para el caso de estudio 1 51

2.2 Concentraciones de los componentes clave para el caso de estudio 2 54

2.3 Costos unitarios y eficiencias de los interceptores para el caso de estudio 2.. 55

2.4 Configuración óptima para el escenario A del caso de estudio 2..... 57

2.5 Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio 3..... 62

3.1 Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio1..... 83

3.2 Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio 2..... 92

4.1 Datos para el sistema de discos auto-rotatorios 110

4.2 Estándares para el oxígeno disuelto 111

4.3 Configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para una concentración de oxígeno disuelto de 7.5 ppm (Escenario A) 115

4.4 Configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para una concentración de oxígeno disuelto de 9 ppm (Escenario B) 118

Nomenclatura.

Índices

i	Tramo de río.
j	Afluente.
l	Número de componentes.
$n(i)$	Tramos específicos que requieren restricciones de composición.
x	Interceptor.
w	Número de descargas industriales.
t	Periodos.

Conjuntos

I	Número de tramos de río.
J	Número de afluentes.
L	Número de contaminantes.
X	Número de unidades de tratamiento.
$N(I)$	Subconjunto para tramos específicos que requieren restricciones de composición.
W	Número de industrias.
T	Número de periodos.

Parámetros

$A_{i,j}$	Área cubierta por el afluente *j* en el tramo de río *i*, acre o ha.
$CD_{i,j,l}$	Concentración del contaminante *l* en la descarga agrícola en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CIND_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en las descargas industriales vertidas en el afluente *j* del tramo de río *i*, ppm.

$CL_{i,l}$ Concentración del contaminante *l* de las pérdidas por filtración y evaporación del tramo de río *i*, ppm.

$CL_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en las pérdidas por filtración y evaporación del afluente *j*, ppm.

$CP_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en las precipitaciones en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CQ_{n(i)}^{deseado}$ Límite para la concentración deseada en algunos tramos de río.

CQ_{l}^{dis} Concentración de los contaminantes *l* en la disposición final, ppm.

$CQ_{i-1,l}$ Concentración del contaminante *l* en el flujo de entrada en el tramo de río *i*, ppm.

$CWS_{i,j,l}^{\text{sin}\,tratamiento}$ Concentración del contaminante *l* en el agua residual descargada sin tratamiento en el afluente *j* del tramo de río *i*, ppm.

$CWS_{i,j,l}^{tratada}$ Concentración del contaminante *l* en el agua residual tratada descargada en el afluente *j* del tramo de río *i*, ppm.

$CT_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en la descarga del afluente *j* al tramo de río *i*, ppm.

$CU_{i,l}$ Concentración del contaminante *l* en el agua fresca usada de los tramos de río *i*, ppm.

$CU_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en el agua fresca usada del afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

D_i Descargas directas al tramo de río *i*, m^3/s.

$D_{i,j}$	Descarga agrícolas al afluente *j* del tramo de río *i*, m^3/s.
FC_x	Costo fijo para interceptor *x*, US$.
H_Y	Horas de operación por año, h/año.
$IND_{i,j}$	Descarga industrial al afluente *j* del tramo de río *i*, m^3/s.
k	Constante cinética para la degradación de los contaminantes en el sistema.
k_f	Factor de anualización, $año^{-1}$.
$L_{i,j}$	Pérdidas totales de agua (filtración y evaporación) del afluente *j*, m^3/s.
L_i	Pérdidas totales de agua (filtración y evaporación) del tramo de río *i*, m^3/s.
N_i	Número total de tramo s de río.
P_i	Precipitaciones en el tramo de río *i*, m^3/s.
$P_{i,j}$	Precipitaciones en el afluente *j* al tramo de río *i*, m^3/s.
Q_i	Flujo a la salida del tramo de río *i*, m^3/s.
Q_{i-1}	Flujo a la entrada al tramo de río *i*, m^3/s.
$S_{i-1,j}$	Acumulación que existe en el periodo *i-1* en el tramo de río *j*, m^3/s.
$S_{i,j}$	Acumulación que existe en el periodo *i* en el tramo de río *j*, m^3/s.
$T_{i,j}$	Descarga del afluente *j* en el tramo de río *i*, m^3/s.
$U_{i,j}$	Agua fresca usada del afluente *j* del tramo de río *i*, m^3/s.
U_i	Agua fresca usada en el tramo de río *i*, m^3/s.
V_i	Volumen del tramo de río *i*, m^3.

$V_{i,j}$ Volumen del afluente *j* descargado en el tramo de río *i*, m^3.

VC_x Costo variable unitario para el interceptor *x*, US$/$m^3$.

C_1 Constante para la eficiencia de los discos auto-rotatorios para el caudal, $1/m^3$.

C_2 Constante para la eficiencia de los discos auto-rotatorios para el número de filas y el espaciamiento, 1/número de filas m.

C_3 Constante para la eficiencia de los discos auto-rotatorios para el número de filas, 1/ número de filas.

C_4 Constante para la eficiencia de los discos auto-rotatorios para el espaciamiento, 1/m.

C_5 Constante para la eficiencia de los discos auto-rotatorios, adimensional.

$CapCost_{i,j}^{MAX}$ Límite superior para el costo de capital de los discos auto-rotatorios, US$.

$OpCost_{i,j}^{MAX}$ Límite superior para el costo de operación de los discos auto-rotatorios, US$/h.

Cu_{EFLU}^{op} Costo de operación unitario para el flujo del afluente, US$/$m^3$.

Cu_{ND}^{op} Costo de operación unitario para el número de discos, US$/h número de filas.

Cu_{ESP}^{op} Costo de operación unitario para el espaciado entre discos, US$/h m.

$DOD_{i,j}$ Concentración de *DO* en el efluente agrícola descargado en el tramo de rio *i*, ppm.

$DOINDR_{i,j}$ Concentración de *DO* en el efluente industrial *j* descargado en el tramo de rio *i*, ppm.

$DOINDT_{i,j}$ Concentración de *DO* en el efluente industrial *j* descargado en el afluente *i*, ppm.

DOL_i Concentración de *DO* en las pérdidas totales (filtración y evaporación) en el tramo de río *i*, ppm.

$DOL_{i,j}$ Concentración de *DO* en las pérdidas por filtración y evaporación del afluente *j*, ppm.

$DOP_{i,j}$ Concentración de *DO* en las precipitaciones en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$DO^{deseado}$ Concentración de *DO* deseada en el área de captación final, ppm.

$DOWS_{i,j}^{\sin tratamiento}$ Concentración de *DO* en las descargas de agua residual sin tratamiento, ppm

$DOWS_{i,j}^{tratada}$ Concentración de *DO* en las descargas de agua residual tratada, ppm.

$DOEFLU_{i,j}$ Concentración de *DO* en el afluente *j*, ppm.

$DOEFLU_{i,j}^{MAX}$ Límite superior para la concentración de *DO* en el afluente después del tratamiento, ppm.

$EFLU_{i,j}$ Velocidad de flujo para el afluente *j*, m^3/s.

$ESP_{i,j}^{MAX}$ Límite superior para el espaciado entre discos auto-rotatorios, m.

$ESP_{i,j}^{MIN}$ Límite inferior para el espaciado entre discos auto-rotatorios, m.

$FCost$ Costo fijo para los discos auto-rotatorios, US$.

$INDR_i$ Efluente industrial descargado en el tramo de río, m^3/s.

$INDT_{i,j}$ Efluente industrial descargado en el afluente, m^3/s.

k_{DO} Constante de velocidad para la degradación del oxígeno disuelto en el sistema, ppm/m^3.

$ND_{i,j}^{MAX}$ Límite superior para el número de discos auto-rotatorios.

$ND_{i,j}^{MIN}$ Límite inferior para el número de discos auto-rotatorios.

$U_{i,j}$ Agua usada en el afluente *j* del tramo de río *i*, m^3/s.

U_i Agua usada en el tramo de río *i*, m^3/s.

VC_{EFLU} Costo variable unitario para los discos auto-rotatorios asociado con el flujo, US$/$m^3$.

VC_{ESP} Costo variable unitario para los discos auto-rotatorios asociado al espaciado entre discos, US$/m.

VC_{ND} Costo variable unitario para los discos auto-rotatorios asociado al número de filas discos, US$/número de filas.

$WS_{i,j}^{\text{sin } tratamiento}$ Descarga de agua residual sin tratamiento en el afluente *j*, m^3/s.

$WS_{i,j}^{tratada}$ Descarga de agua residual con tratamiento en el afluente *j*, m^3/s.

Parámetros con variación en el tiempo (*t*).

$CD_{i,j,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en la descarga agrícola en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CL_{i,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en las pérdidas por filtración y evaporación en el tramo de río *i*, ppm.

$CL_{i,j,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en las pérdidas por filtración y evaporación en el afluente *j* en el tramo de río *i* ppm.

$CP_{i,j,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en las precipitaciones en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CQ_{i-1,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el flujo de entrada en el tramo de río *i*, ppm.

$CS_{i,j,l,t}^{\text{sin } tratamiento}$ Concentración del contaminante *l* en el agua residual descargada sin tratamiento en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CS_{i,j,l,t}^{tratada}$ Concentración del contaminante *l* en el agua residual tratada descargada en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CU_{i,j,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el agua fresca usada en el afluente *j* descargado en el tramo de río *i*, ppm.

$CU_{i,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el agua fresca usada en el tramo de río *i*, ppm.

$D_{i,t}$ Descargas directas en el tramo de río *i*, m^3/s.

$D_{i,j,t}$ Descarga agrícolas en el afluente *j* en el tramo de río *i*, m^3/s.

$ET_{i,j,t}$ Descarga en el afluente *j* en el tramo de río *i*, m^3/s.

$IND_{i,j,t}$ Descarga industrial en el afluente *j* en el tramo de río *i*, m^3/s.

$L_{i,j,t}$ Pérdidas por filtración y evaporación en el afluente *j*, m^3/s.

$L_{i,t}$ Pérdidas por filtración y evaporación en el tramo de río *i*, m^3/s.

$P_{i,t}$ Precipitaciones en el tramo de río *i*, m^3/s.

$P_{i,j,t}$ Precipitaciones en el afluente *j* en el tramo de río *i*, m^3/s.

$Q_{i,t}$ Flujo de salida en el tramo de río *i*, m^3/s.

$Q_{i-1,t}$ Flujo de entrada en el tramo de río *i*, m^3/s.

$WS_{i,j,t}^{\text{sin}\,tratamiento}$ Agua residual descargada sin tratamiento en el afluente *j* en el tramo de río *j*, m^3/s.

$WS_{i,j,t}^{tratada}$ Agua residual tratada descargada en el afluente *j* en el tramo de río *j*, m^3/s.

$U_{i,j,t}$ Agua fresca en el afluente *j* descargado en el tramo de río *i*, m^3/s.

$U_{i,t}$ Agua fresca en el tramo de río *i*, m^3/s.

$V_{i,t}$ Volumen del tramo de río *i*, m^3.

$V_{i,j,t}$ Volumen del afluente *j* descargado en el tramo de río *i*, m^3.

Variables

$CTR_{i,j,l}$ Concentración del contaminante *l* en el afluente *j* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento, ppm

$CTR_{i,j,l}^{d1}$ Concentración desagregada del contaminante *l* en el afluente *j* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento para la primera disyunción, ppm.

$CTR_{i,j,l}^{d2}$ Concentración desagregada del contaminante *l* en el afluente *j* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento para la segunda disyunción, ppm.

$CQ_{i,l}$ Concentración del contaminante *l* en el flujo de salida en el tramo de río *i*, ppm.

fs_x Flujo segregado de las aguas residuales en el afluente *j* al interceptor *x*.

$r_{i,l}$ Reacción llevada a cabo en el tramo de río *i*.

$r_{i,j,l}$ Reacción llevada a cabo en el afluente *j* que se descarga en el tramo de río *i*.

$y_{i,j}$ Variable binaria asociada a la existencia de la unidad de tratamiento instalada en el afluente *i* que desemboca en el tramo de río *i*.

z_x Variable binaria asociada a la existencia del interceptor *x*.

$CapCost_{i,j}$ Costo de capital de los discos auto-rotatorios, US$.

$DOEFLUat_{i,j}$ Concentración de *DO* en el afluente *j* después del tratamiento, ppm.

$DOEFLUat_{i,j}^{d1}$ Concentración desagregada de *DO* en el afluente *j* después del tratamiento, para la primera disyunción, ppm.

$DOEFLUat_{i,j}^{d2}$ Concentración desagregada de *DO* en el afluente *j* después del tratamiento, para la segunda disyunción, ppm.

DOQ_i Concentración de *DO* que existe en el tramo de río *i*, ppm.

DOQ_{i-1} Concentración de *DO* en el flujo de entrada en el tramo de río *i*, ppm.

DOU_i Concentración de *DO* en el agua usada en el tramo de río *i*, ppm.

$DOU_{i,j}$ Concentración de *DO* en el agua utilizada del afluente *j*, ppm.

$ESP_{i,j}$ Espaciado entre los discos instalados en el afluente *j*, m.

$ND_{i,j}$ Número de discos instalados en afluente *j*.

OF Función Objetivo.

$OpCost_{i,j}$ Costo de operación de los discos auto-rotatorios, US$/h.

$y_{i,j}$ Variable binaria asociada a la existencia del sistema de discos auto-rotatorios.

Variables con variación en el tiempo (t).

$CET_{i,j,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el afluente *j* en el tramo de río *i*, ppm.

$CINDTat_{i,j,l,t,w}$ Concentración del contaminante *l* en el efluente industrial *w* descargado en el afluente *j* después del tratamiento, ppm.

$CINDRat_{i,l,t,w}$ Concentración del contaminante *l* en el efluente industrial *w* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento, ppm.

$CINDTat_{i,j,l,t,w}^{d1}$ Concentración del contaminante *l* desagregada del efluente industrial *w* descargado en el afluente *j* después del tratamiento, para la primera disyunción, ppm.

$CINDRat^{d1}_{i,l,t,w}$ Concentración del contaminante *l* desagregada del efluente industrial *w* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento, para la primera disyunción, ppm.

$CINDTat^{d2}_{i,j,l,t,w}$ Concentración del contaminante *l* desagregada del efluente industrial *w* descargado en el afluente *j* después del tratamiento, para la segunda disyunción, ppm.

$CINDRat^{d2}_{i,l,t,w}$ Concentración del contaminante *l* desagregada del efluente industrial *w* descargado en el tramo de río *i* después del tratamiento, para la segunda disyunción, ppm.

$CQ^{dis}_{i,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el área de disposición final, ppm.

$CQ_{i,l,t}$ Concentración del contaminante *l* del flujo de salida en el tramo de río *i*, ppm.

$CU_{i,l,t}$ Concentración del contaminante *l* en el agua fresca del tramo de río *i*, ppm.

$fs_{i,j,x,t,w}$ Flujo segregado desde los efluentes industriales *w* descargados en el afluente *j* enviado al interceptor *x.*

$fs^{1}_{i,j,x,w}$ Flujo segregado desde los efluentes industriales *w* vertidos en el afluente *j* para determinar el costo de capital variable.

$fsr_{i,x,t,w}$ Flujo segregado desde los efluentes industriales *w* descargados en el tramo de río *i* y enviado al interceptor *x.*

$fsr^{1}_{i,x,w}$ Flujo segregado desde los efluentes industriales vertidos en el tramo de río *i* para determinar el costo de capital variable del interceptor *x*.

$r_{i,l,t}$ Reacción llevada a cabo en el tramo de río *i.*

$r_{i,j,l,t}$ Reacción llevada a cabo en el afluente *j* que se descarga en el tramo de río *i.*

TAC	Costo total anual, US$/año.
$y_{i,j,t,w}$	Variable binaria asociado a la existencia de la unidad de tratamiento utilizado para tratar el efluente industrial descargado en el afluente *j*.
$z_{i,j,x,t,w}$	Variable binaria asociado a la existencia del interceptor *x* utilizado para tratar el efluente industrial descargado en el afluente *j*.
$z^1_{i,j,x,w}$	Variable binaria utilizada para activar el costo de capital fijo de la unidad de tratamiento para tratar el efluente industrial *w* descargado en el afluente *j* en todo el tiempo de operación.
$yr_{i,t,w}$	Variable binaria asociado a la existencia de la planta de tratamiento utilizado para tratar el efluente industrial descargado en el tramo de río *i*.
$zr_{i,x,t,w}$	Variable binaria asociado a la existencia de la interceptor *x* utilizado para tratar el efluente industrial descargado tramo de río *i*.
$zr^1_{i,x,w}$	Variable binaria utilizada para activar el costo de capital fijo de la unidad de tratamiento para tratar el efluente industrial *w* descargado en el tramo de río *i* en todo el tiempo de operación.

Símbolos Griegos

$\lambda_{i,j}$	Flujo agrícola por área, m^3/ha*s.
α	Factor de eficiencia para remover los contaminantes del interceptor *x*.
$\beta_{i,j}$	Uso agrícola del agua en el afluente *j*, m^3/ha*s.
$\Omega^{\min}_{i,j,x}$	Límite inferior para el flujo segregado.
$\Omega^{\max}_{i,j,x}$	Límite superior para el flujo segregado.
$\alpha_{i,j}$	Factor de eficiencia para incrementar el *DO* en los afluentes *j*, adimensional.

$\alpha_{i,j}^{MAX}$	Límite máximo para la eficiencia de los discos auto-rotatorios, adimensional.
$\alpha_{i,j}^{MIN}$	Límite inferior para la eficiencia de los discos auto-rotatorios, adimensional.
εe	Exponente para el costo de capital relacionado con el espaciado entre filas, adimensional.
δe	Exponente para el costo de capital relacionado con el flujo tratado, adimensional.
ξe	Exponente para el costo de capital relacionado con el número de discos, adimensional.

Símbolos

FTOT	Flujo total de efluentes industriales tratados en el horizonte de tiempo.
WWTP	Planta de tratamiento de agua residual.
ZTOT	Número total de unidades de tratamiento instaladas en el horizonte de tiempo.

AGRADECIMIENTOS

Le estoy muy agradecido al Dr. José María, asesor de este proyecto, por ser parte fundamental para su conclusión.

Al comité tutorial de este proyecto de tesis

Dr. Medardo Serna González, Dr. Eusiel Rubio Castro, Dr. Jaime Agustín Castro Montoya, Dr. Fabricio Nápoles Rivera por su atención y aportaciones

A mis amigos

Le externo un enorme agradecimiento a mis amigos por compartir la carga de los malos momentos y agrandar los momentos felices de corazón. Dr. Rafael Maya Yescas, Gladis, Andrés, Mariana, Lupita, Luis Fernando, Julián, Nany…Muchas gracias

A Dios por cruzar a estas maravillosas personas en mi camino

Finalmente, a CONACYT y a la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo les hago llegar mis más gratos agradecimientos.

Oscar Burgara Montero

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

I.1 Generalidades.

La situación del agua en el mundo es muy compleja. Esta que es un recurso vital para un gran número de actividades que no sólo competen a los humanos, sino que es fuente primordial para el desarrollo de las diferentes especies, y a pesar de tal importancia es el recurso más mal administrado en el mundo (Fakayode, 2005). Las fuentes de contaminación de agua son en gran medida agrupadas en fuentes puntuales y fuentes no puntuales. Las fuentes puntuales son definidas como descargas localizadas de contaminantes e incluyen el agua residual proveniente de los municipios e industrias, descargas de fosas sépticas, y los vertidos de residuos peligrosos. Las fuentes no puntuales de contaminación se producen habitualmente en grandes áreas y debido a su carácter difuso, son más complejas y difíciles de controlar que las fuentes puntuales. Este tipo de fuentes de contaminación son originadas principalmente por la aplicación de pesticidas, herbicidas y fertilizantes en toda actividad agrícola que influyen en la calidad del agua superficial y subterránea.

En la industria, la composición de los líquidos residuales varía con el tipo de proceso. En esta actividad, el agua se utiliza como materia prima, como medio de producción, como medio de transporte, para enfriamiento y para el lavado, entre otras cosas. A medida, que el agua utilizada recorre el proceso de producción va adquiriendo diferentes contaminantes, que pueden ser incompatibles con la disposición final que se le dará al líquido residual o efluente. Las fluctuaciones de cantidad de agua residual que proceden de diferentes industrias, dependen de diferentes causas:

- Diferentes tipos de industrias.
- Diferentes procesos de producción.
- Tamaño de la planta.
- Modo de operación (*Batch* o continuo).
- Actividades temporales (p.e., industrias que tienen mayor producción en tiempo de cosechas agrícolas).

Las aguas residuales procedentes de las industrias contienen sustancias disueltas y en suspensión. Dentro de las sustancias disueltas hay elementos orgánicos que pueden ser biodegradables o no biodegradables, y/o elementos inorgánicos (sales de amoniaco, fosfatos, nitratos, etc.); como también elementos tóxicos. En los materiales en suspensión también se encuentran sustancias orgánicas y /o sustancias inorgánicas.

Debido a la gran variedad en la composición de las aguas residuales, que dependen del tipo de proceso industrial en el cual se generan y de las materias primas e insumos utilizados, se hace imprescindible la caracterización de dichas aguas y su cuantificación volumétrica.

En ese sentido, la diversidad de culturas, de climas, así como actividades políticas y financieras de cada país ha ocasionado que cada quien busque nuevos y mejores procedimientos para la administración de los recursos hídricos (cuencas hidrológicas). Por lo que cada día un mayor número de soluciones para los problemas hidrológicos provendrán de áreas diferentes al sector y de diferentes profesiones, lo que trae como consecuencia que las soluciones a este problema sean integrales, es decir, la solución para un problema de cuencas ubicadas en México podrán ser utilizadas en cuencas de otros países considerando sus características climáticas, físicas, sociales, económicas, ambientales e institucionales. Es por ello que la ingeniería química se ha orientado a tratar de resolver este tipo de problemas. Y debido a que el enfoque holístico en los procesos químicos ha permitido determinar que el rendimiento óptimo de los mismos no depende únicamente del buen funcionamiento de las unidades individualmente sino de su buen funcionamiento en conjunto, en la actualidad se busca la integración de los procesos químicos con el ambiente y que éste tenga el mínimo impacto. Por lo tanto, en este trabajo se proponen estrategias que nos permitan el manejo adecuado de los desechos industriales descargados a los ríos. Tales estrategias son descritas a continuación:

I.2 Antecedentes.

Continuamente los ríos y los cuerpos receptores de aguas son modificados por diferentes fuentes. En zonas agrícolas los efluentes generados contienen altas concentraciones de nitrógeno y fósforo que al ser vertidos enriquecen los sistemas de nutrientes provocando un excesivo crecimiento de biomasa (algas) que acompaña a la primera etapa de la eutrofización (Chindah y col., 2004; Emongor y col., 2005; Furtado y col., 1998; Ugochukwu, 2004). Así también, en los cuerpos de agua se produce y se consume oxígeno, tal producción está relacionada con la fotosíntesis y su consumo dependerá de las reacciones para la descomposición de la materia orgánica y otras reacciones químicas relacionadas con la descomposición de compuestos inorgánicos. Tales procesos naturales son muy importantes para lograr la sustentabilidad de las cuencas ya que pueden degradar los contaminantes contenidos en las corrientes residuales. Sin embargo, esta simbiosis ha sido alterada drásticamente debido al considerable incremento de la población global lo que ha incrementado significativamente la actividad industrial y, consecuentemente, las cantidades de aguas residuales altamente contaminadas descargadas a los ríos y cuerpos de agua. Por ejemplo, en México D.F. las industrias instaladas a lo largo de la ciudad descargan alrededor de $8x10^9$ m^3/año de efluentes, con más de 9.5 millones de toneladas de DBO, del cual sólo el 18 % son removidos por sistemas de tratamiento. Para resolver este problema, los gobiernos han impuesto normas ambientales estrictas en efluentes industriales que requieren el uso efectivo de tecnologías de tratamiento. Sin embargo, el tratamiento de efluentes industriales sólo satisface las normas ambientales en sitios específicos pero no toma en consideración las interacciones con otras descargas de las cuencas. Además, estas normas típicamente omiten los fenómenos químicos y bioquímicos que pasan en la cuenca así como los cambios que ocurren durante el año debido a los fenómenos naturales y humanos implicados. Por lo tanto, tal enfoque descuida las interacciones entre la descarga industrial y otras descargas y usos que pueden causar severos problemas de contaminación lo que hace a las normas locales insuficientes para cumplir los limites (p. e., regional) de los objetivos ambientales.

Usualmente unidades de tratamiento centralizadas han sido consideradas para limpiar los ríos contaminados, donde las tecnologías de tratamiento se instalan en el extremo final de los ríos (Best y col., 1998; Kennish, 1999). Recientemente, el concepto de sistema de tratamiento

distribuido se ha investigado sistemáticamente, y varias metodologías se han desarrollado y aplicado con excelentes resultados para reducir el costo de tratamiento de los efluentes industriales. (ver por ejemplo, Wang y Smith 1994; Kuo y Smith 1997; Doyle y Smith 1997; Galan y Grossmann 1998; Alva-Argaez y col. 1998; 1999; Benko y col. 2000; Savelski y Bagajewicz 2000; 2001; 2003; Hernández-Suarez at al. 2004; Gunaratnam y col. 2005; Gabriel y El-Halwagi 2005; Karuppiah y Grossmann 2006; Teles y col. 2008; Putra y Amminudin 2008; Ng y col. 2009; Ponce-Ortega y col. 2010; Nápoles-Rivera y col. 2010). Las metodologías antes mencionadas han demostrado que la consideración de sistemas de tratamiento distribuidos simultáneamente con sistemas de tratamiento centralizados genera mejores resultados. Esto porque se determina la mejor relación entre la cantidad de masa a tratar, la ubicación y el número de unidades de tratamiento. Sin embargo, tales metodologías han considerado únicamente las restricciones ambientales y de proceso de las corrientes de aguas residuales industriales para el tratamiento de ellas antes de su descarga, sin evaluar como las descargas resultantes afectan la sustentabilidad de la cuenca circundante, incluso si se ajusta a las normas ambientales impuestas por las autoridades.

Por otro lado, los ríos en muchos países reciben cantidades cada vez mayores de aguas residuales no tratadas de las industrias, zonas residenciales y zonas agrícolas. Estas descargas tienen un gran impacto adverso en el ambiente circundante, afectando no sólo la calidad del agua y la integridad ecológica de la cuenca, sino también el desarrollo social y económico en la región. Es por ello que se requiere el desarrollo de modelos para el manejo sustentable de las cuencas hidrológicas. En este contexto, Cooper (1986) empleo el modelo Streeper-Phelps que considera a los ríos como un reactor de flujo pistón para evaluar la dinámica del oxígeno disuelto. Drolc y Koncan (1996) utilizaron el modelo de calidad del agua QUAL2E para evaluar el impacto de las descargas de las aguas residuales sobre la concentración de oxígeno disuelto en el río Sava cerca de Ljubljana. Así también, la técnica del análisis de flujo de materiales (MFA) ha sido particularmente útil para el seguimiento de especies químicas que causan contaminación en los ríos. La técnica MFA también se ha utilizado para analizar las causas de los problemas de contaminación en una región considerando todas las actividades relevantes tales como: suministro de agua, usos del agua, descarga de corrientes contaminantes, fenómenos físicos y procesos químicos y biológicos que impactan a los ríos. En este sentido, Baccini y Bruner (1991)

desarrollaron un modelo MFA para analizar ecosistemas con actividades humanas que intercambian masa y energía con sus alrededores. Además, Lampert y Brunner (1999) propusieron un modelo MFA para rastrear los principales nutrientes en el río Danubio. Drolc y Koncan (2002) realizaron un estudio usando la estrategia del análisis de flujo de materiales para el río Krka en Eslovenia, donde se determinó que la agricultura contribuye de manera significativa a la carga de fosforo total anual en el sistema macroscópico además de las plantas de tratamiento de aguas residuales. El-Baz y col. (2005) combinaron una herramienta de simulación con la técnica de análisis de flujo de materiales para proporcionar un análisis completo y obtener información útil para el transporte y destino de los principales contaminantes en una cuenca hidrológica. Esta metodología fue utilizada en el drenaje egipcio Bahr-El Baqar, donde las especies objetivo fueron iones de amonio. Después, El-Baz y col. (2005) desarrollaron un enfoque sistemático para proporcionar estrategias de solución involucrando el modelo MFA con herramientas de síntesis para detectar soluciones óptimas alternativas. Lovelady y col. (2009) invirtieron el modelo de calidad del agua (análisis de flujo de materiales). Este enfoque comienza con el final en mente, es decir, se especifican primero las características deseadas de las descargas al sistema (lago) y después se procede a determinar la localización exacta de las nuevas instalaciones industriales. Entonces el MFA se incluye en una formulación de optimización para determinar la concentración máxima permitida para las descargas del proceso cumpliendo con los requerimientos ambientales generales de la cuenca hidrológica. Del mismo modo, Lira-Barragán y col. (2011a; 2011b) implementaron un modelo MFA para determinar la localización óptima de nuevas instalaciones industriales considerando la sustentabilidad de la cuenca circundante. Después, Lira-Barragán y col. (2012) extendieron su modelo en términos de propiedades en lugar de restricciones de composición, las cuales son más apropiadas para sistemas constituidos por varios contaminantes. Los trabajos mencionados han producido importantes avances desde el punto de vista de optimización en la comprensión de las características de las cuencas, la interacción entre ellas y con sus alrededores. Sin embargo, no han proporcionado un marco general para el diseño de unidades de tratamiento distribuido en las cuencas hidrológicas integradas con el objetivo de apoyar su gestión sostenible.

Nótese que la mayoría de las metodologías reportadas para el tratamiento de los efluentes industriales han sido basadas en la composición de las corrientes de desecho lo que representa una desventaja significativa debido a que las corrientes de desecho están constituidas por un gran número de componentes que hacen imposible su cuantificación y es más sencillo determinar propiedades especificas tales como: *pH*, toxicidad, demanda química de oxígeno, color, olor, oxígeno disuelto, etc. El oxígeno disuelto es un constituyente no conservativo que nos indica la calidad del agua, y este es un requisito nutricional esencial para la mayoría de los organismos debido a su dependencia del proceso de respiración aerobia para la generación de energía. Los microorganismos utilizan el oxígeno para el crecimiento, mantenimiento y la producción de metabolitos, por lo que la escases de oxígeno afecta de manera significativa la vida acuática (Calik y col., 2004; García-Ochoa y col., 2000; Liu y col., 2006). Además el oxígeno incrementa la capacidad de autodepuración en la biodegradación de los contaminantes para restaurar los ríos y los cuerpos receptores y mantener buena calidad del agua, es por ello, que el oxígeno disuelto se considera una de las más importantes medidas para la remediación de los cuerpos de agua. Existen métodos convencionales que son usados normalmente para el incremento del oxígeno disuelto a través de superficies de aireación mecánica o por dilución de los contaminantes. Sin embargo, estos métodos consumen muchas horas hombre, recursos materiales y económicos; ya que el costo de energía que representa la aireación en los sistemas de tratamiento es del más del 50% (Hamamoto y col., 1997; Schuyler, 1997;Ferrer y col., 1998;). De esta manera, los discos auto-rotativos (self-RBC) representan una alternativa muy económica debido a que los costos de operación son casi nulos; el costo por mantenimiento es despreciable y el consumo de energía para su movimiento no representa ningún costo, esto debido a que aprovechan la energía mecánica natural (energía libre) de los ríos haciéndolos girar y provocando turbulencia a través del proceso de auto-rotación e influyendo directamente en la oxigenación de la corriente de agua donde sean colocados.

Finalmente, en base al análisis anterior en la siguiente sección se presentan las limitaciones de los trabajos reportados a fin de presentar el aporte científico de la presente tesis.

I.3 Justificación.

Como se analizó previamente existen varios trabajos reportados para el tratamiento óptimo de los efluentes industriales descargados a los ríos, como ha sido mostrado en la sección de antecedentes de esta tesis, las metodologías reportadas presentan al menos una de las siguientes limitaciones:

- Se han considerado unidades de tratamiento centralizadas; siendo importante resaltar que un sistema distribuido ha mostrado ser mucho más eficiente desde el punto de vista económico, en términos de la integración másica dentro de una planta o instalación industrial. Esto hace atractivo desarrollar una superestructura y su correspondiente modelo de optimización que incluya esquemas de tratamiento distribuidos en el contexto macroscópico.
- Los modelos basados en la estrategia MFA para el diseño de sistemas macroscópicos de tratamiento de efluentes no han considerado la estacionalidad de las diferentes descargas. Esto es importante ya que existen muchas descargas estacionales que cambian drásticamente los flujos y composiciones en el sistema. El considerar la estacionalidad del sistema permitirá obtener resultados más confiables.
- Las metodologías reportadas que consideran los modelos MFA han sido basadas exclusivamente en la composición de las corrientes; en este sentido propiedades importantes como la cantidad de oxígeno disuelto no ha sido considerada propiamente. Menos aún el diseño óptimo de un sistema que permita incrementar esta propiedad a través de discos auto-rotatorios en el esquema macroscópico.

En este sentido, para superar las limitaciones mencionadas anteriormente, en esta tesis se presenta primeramente en el Capítulo II un modelo de optimización para el tratamiento óptimo de los efluentes industriales descargados a los ríos a través de un modelo MFA que permite el análisis global del sistema. Posteriormente en el Capítulo III se propone un modelo de optimización para considerar la estacionalidad de las descargas en tratamiento óptimo de las descargas industriales a los ríos. Adicionalmente, en el Capítulo IV se propone un modelo de

optimización para el incremento del oxígeno disuelto en un sistema macroscópico a través de discos auto-rotatorios.

I.4 Hipótesis.

Los modelos matemáticos que se desarrollarán, permitirán obtener soluciones óptimas para el mejoramiento del tratamiento de los efluentes industriales descargados a las cuencas hidrológicas con el uso de sistemas de tratamiento distribuido y al mismo tiempo dar soluciones que permitan tener procesos sustentables.

I.5 Objetivos.

I.5.1 Objetivo general.

El objetivo general del presente proyecto es desarrollar estrategias que nos permitan minimizar el impacto de los efluentes industriales descargados al ambiente considerando simultáneamente aspectos económicos y ambientales.

I.5.2 Objetivos particulares.

1. Formular un modelo de programación disyuntiva que permita predecir la localización óptima de una nueva planta de tratamiento considerando simultáneamente aspectos económicos y el impacto ambiental de los desechos descargados al ambiente a través del modelo MFA desarrollado anteriormente.
2. Proponer un modelo de optimización MINLP multi-objetivo multi-periodo para el diseño óptimo de sistemas de tratamiento distribuidos para los efluentes industriales descargados en las cuencas.
3. Desarrollar un modelo de programación matemática que nos permita determinar la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido de discos auto-rotativos para incrementar el oxígeno disuelto en las cuencas hidrológicas.

CAPÍTULO II

DISEÑO ÓPTIMO DE SISTEMAS DE TRATAMIENTO DISTRIBUIDO PARA LOS EFLUENTES DESCARGADOS EN LOS RÍOS.

En este capítulo se presenta una formulación general de optimización para el diseño de sistema de tratamiento distribuido de efluentes descargados en los ríos con el menor costo que permita satisfacer la sustentabilidad del sistema de la cuenca hidrológica (es decir, que la descarga total no exceda la capacidad de auto-depuración de los ríos). El modelo propuesto considera la localización óptima de las unidades de tratamiento que permitan alcanzar objetivos específicos para la calidad del agua a través de la cuenca. Además incluye la selección óptima de los afluentes a ser tratados (configuración del sistema de tratamiento distribuido), la identificación de la eficiencia de remoción para las unidades de tratamiento requeridas a lo largo del sistema macroscópico, la cual depende de las restricciones la calidad del agua a lo largo del río. El modelo se basa en la técnica de análisis de flujo de materiales para rastrear todas las descargas a través del río y tener en cuenta la sostenibilidad en la disposición final de la cuenca hidrológica. Así también, el modelo puede incorporar restricciones de calidad de agua para las distintas secciones de la cuenca que se establezcan por los usuarios del agua, tales como los sectores agrícolas, industriales y residenciales. Debido a que los objetivos económico (es decir, el costo total anual del sistema de tratamiento distribuido) y ambiental (es decir, características deseadas de las descarga a la disposición final de la cuenca) se contraponen entre sí, se generan conjuntos Pareto para los distintos requisitos de la calidad del agua.

II.1 Planteamiento del problema.

La **Figura 2.1** muestra un sistema típico de cuenca hidrológica, donde el río principal es alimentado por varios afluentes ($T_{i,j}$), y la concentración del río ($CQ_{i,j}$) está cambiando a lo largo de su trayectoria, debido a la existencia de cargas de fuentes puntuales tales como aguas residuales industriales y domésticas, y fuentes no puntuales que están relacionados con las precipitaciones atmosférica y las zonas agrícolas adyacentes. Estos efluentes pueden tener altas concentraciones de contaminantes, disminuyendo la capacidad de auto-purificación del sistema y causando un impacto adverso en el ambiente (por ejemplo, el exceso de nitratos y fosfatos de los fertilizantes o de las aguas residuales generan eutrofización, lo que representa el agotamiento del oxígeno en el agua y provoca la reducción de la producción de especies acuáticas y de otros

animales, otro ejemplo es el arsénico de los herbicidas que causan la muerte de la fauna en los ríos y lagos). Nótese que en la **Figura 2.1** un conjunto de unidades de tratamiento está disponible para cada efluente que permita alcanzar los límites ambientales impuestos en distintas secciones del río principal de la cuenca hidrológica. Este enfoque proporciona un tratamiento distribuido de efluentes de manera que los volúmenes a tratar se pueden reducir. Cada operación de tratamiento tiene una relación de remoción para cada uno de los diferentes componentes presentes en los efluentes. Una unidad de tratamiento ficticia puede ser usada para modelar el caso cuando el efluente no necesita ser tratado, o si únicamente un porcentaje necesita ser tratado para cumplir la concentración máxima permisible en el área de captación final (CQ^{dis}). Existen restricciones intermedias en los lugares donde ciertas condiciones se requieren para el uso del agua. Por ejemplo, si el agua de un sitio específico se utiliza para la agricultura, se establecen restricciones para permitir satisfacer la calidad del agua requerida ($CQ^{desired}$); lo mismo se hace para usos domésticos e industriales. Para satisfacer estas restricciones, el comportamiento del río es simulado tomando en cuenta todos los flujos de las entradas y de las salidas a través de la técnica MFA.

La función objetivo consiste en minimizar simultáneamente el costo total anual (TAC) y el impacto ambiental, que se obtiene minimizando la concentración de descarga al río principal y al área de captación final de la cuenca hidrológica. Por lo tanto, este es un problema de optimización multi-objetivo. Los costos de capital y operación para las unidades de tratamiento dependen del tipo de unidad seleccionada, el caudal tratado, la concentración de entrada y de salida, la configuración y las condiciones de operación. Para evitar complicaciones numéricas durante el proceso de optimización, en el presente trabajo varias unidades de tratamiento con configuraciones y condiciones dadas de operación son simuladas antes del proceso de optimización, teniendo en cuenta sólo las tecnologías de tratamiento que son apropiados para la remoción de los contaminantes en la cuenca hidrológica. Este enfoque proporciona eficiencias de remoción para los contaminantes y las expresiones de costos que dependen sólo de la velocidad de flujo tratado. Para considerar al efecto de la concentración de entrada a las unidades de tratamiento, un conjunto de restricciones respecto a la concentración de entrada en cada unidad discretizada, se puede imponer en el modelo y las concentraciones de salida están relacionadas con las eficiencias de remoción determinadas por el proceso de simulación. Finalmente para

considerar las economías de escala, el costo de capital para las unidades de tratamiento incluye los costos fijos y variables, así como un factor exponencial.

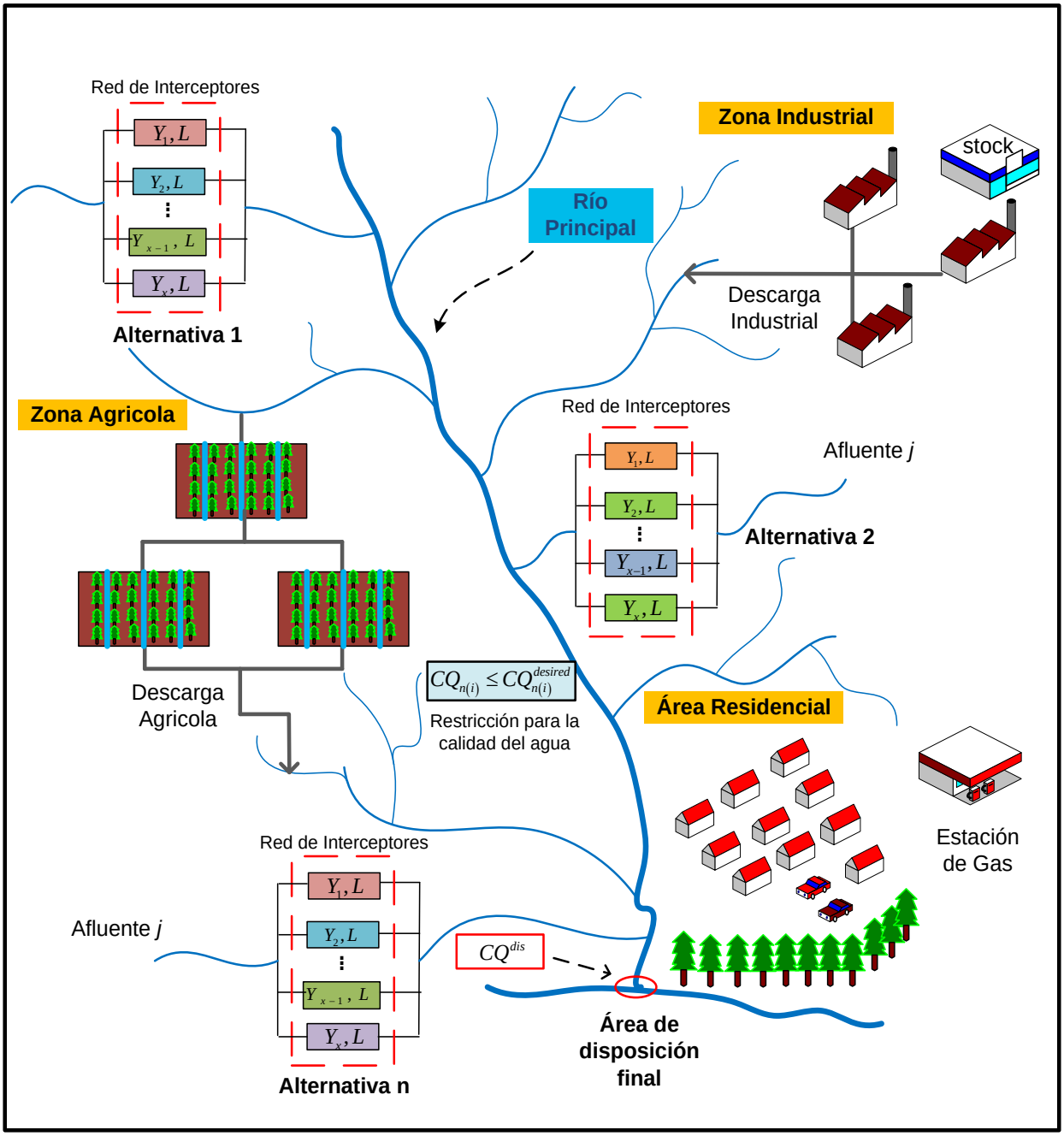

Figura 2.1. Superestructura para el sistema de tratamiento distribuido de unidades de tratamiento de efluentes acuosos.

II.2 Formulación del Modelo.

En primer lugar, los conjuntos utilizados en la formulación del modelo se definen para una mejor comprensión: *i* es un subíndice usado para denotar cualquier sección del río, mientras que *Ni* corresponde al número total de secciones de río definido para un problema en específico; *I* es un conjunto que contiene a toda *i*, *j* es un subíndice representa los efluentes descargados en el río, *J* es un conjunto que contiene a toda *j*, *X* es un conjunto que contiene a toda *x*, *L* es un conjunto que contiene a toda *l*. *x* es un subíndice usado para denotar las unidades de tratamiento (incluyendo el interceptor ficticio usado para modelar el *bypass* de las corrientes) y el subíndice *l* es utilizado para representar el número de contaminantes. El modelo MFA considera todas las entradas en el río principal, el uso y descarga de la actividad agrícola, las descargas con y sin tratamiento de aguas residuales provenientes de los sectores industriales y domésticos. También, el modelo toma en cuenta fenómenos naturales tal como la precipitación, filtración y evaporación. Estos eventos pueden alterar significativamente la composición de los materiales trasportados en el río; por lo tanto, para proporcionar un adecuado seguimiento a la composición promedio de los componentes peligrosos, se requiere dividir el río en secciones llamados tramos de río donde la concentración promedio puede ser considerada constante (estas secciones son representadas en la **Figura 2.2a**). El flujo y la concentración en cada sección del río difieren de otra parte del río, debido a los flujos de entrada y salida. Esto se representa como una serie de reactores CSTR como se muestra en la **Figura 2.2b**. Los efluentes son descargados en el río principal, que recibe efluentes con y sin tratamiento provenientes de la industria y de la actividad agrícola. Los flujos ($T_{i,j}$) y la concentración ($CT_{i,j}$) de los afluentes modifican el flujo ($Q_{i,}$) y la concentración (CQ_i) de los tramos de río donde son descargados.

Además, el modelo involucra términos de reacción para tomar en cuenta las reacciones químicas y bioquímicas que se llevan a cabo por la flora y la fauna a través del río, que pueden degradar o producir componentes peligrosos. Por lo tanto, es muy importante considerar estos términos para rastrear los contaminantes a través de la cuenca.

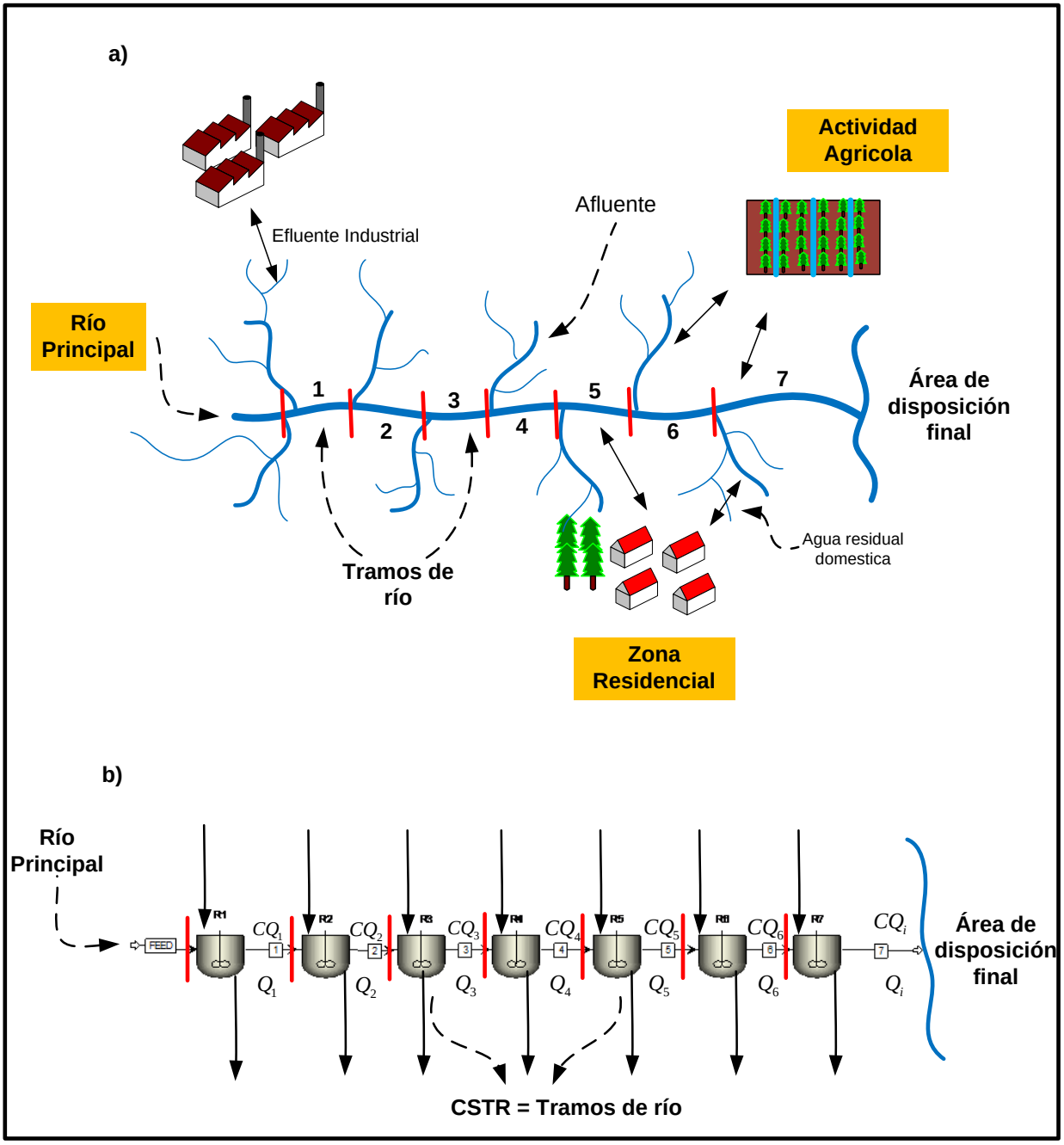

Figura 2.2 Representación del modelo MFA.

Por otra parte, la formulación del modelo permite considerar el balance entre la concentración de descarga en el área de captación final y el costo total anual asociado, lo cual esta fuertemente relacionado con la localización y selección de los sistemas de tratamiento; entonces, restricciones ambientales estrictas generan un mayor costo total anual. Aquí cada

unidad de tratamiento disponible es caracterizada en terminos de los tipos de contamiantes presentes en los efluentes, los parametros de diseño y las variables de operación, la concentración de entrada, la concentración de salida (es decir, los limites especificados en la cuenca hidrografica), y la cantidad del efluente que se trata. Por lo tanto, la eficiencia de remoción para cada contaminante en las unidades de tratamiento y el costo de una unidad de tratamiento puede ser expresado por las siguientes funciones:

$$\alpha_{x,l} = \alpha_{x,l}\left(\begin{array}{c} Parametros\,de\,Operacion, Configuracion, Condiciones\,de\,entrada, \\ Condiciones\,de\,salida, Flujo\,Tratado \end{array}\right), \forall l \in L, x \in X$$

$$Costo_{x,l} = Costo_{x,l}\left(\begin{array}{c} Parametros\,de\,Operacion, Configuracion, Condiciones\,de\,entrada, \\ Condiciones\,de\,salida, Flujo\,Tratado \end{array}\right), \forall l \in L, x \in X$$

Con el fin de simplificar el proceso de optimización, una serie de simulaciones de unidades de tratamiento específicos (en función de los contaminantes) se realiza antes de la optimización (para las configuraciones y condiciones dadas de funcionamiento). Esto con la idea de proporcionar los datos necesarios en el cálculo de la eficiencia de eliminación y el costo unitario de cada tecnología de tratamiento disponible involucrado en la superestructura.

Como consecuencia, la concentración en la salida de la unidad de tratamiento puede ser expresada como una función de la unidad de tratamiento seleccionada y de la concentración de entrada: $C_{x,l}^{out} = C_{x,l}^{in}\alpha_{x,l},\ \forall l \in L, x \in X$; también, el costo total de cada unidad de tratamiento disponible puede ser representado como una función del flujo tratado (es decir, los costos de capital $Ccap_x = CF_x + VC_x\ fs_x^{\gamma},\ x \in X$ y para los costos de operación $Cop_x = Cu_x^{op}\ fs_x,\quad x \in X$). Por lo tanto, los parámetros presentes de la función de costos relacionadas a las unidades de tratamiento (es decir, *CFx, VCx,* Cu_x^{op} y γ) son determinados antes del proceso de optimización, durante el cual únicamente se deben de seleccionar las unidades de tratamiento utilizadas y los caudales tratados, obteniéndose de esta manera modelos de optimización que no representan grandes complicaciones para su solución.

II.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río.

El flujo de salida de cada tramo de río i $\left(Q_i\right)$ es igual al flujo de entrada en el tramo de río $\left(Q_{i-1}\right)$ más las descargas industriales $\left(IND_i\right)$, las descargas directas $\left(D_i\right)$, la precipitación promedio $\left(P_i\right)$, la suma de todos los efluentes descargados en el tramo de río $\sum_{j=1}^{N_{Efl,i}} T_{i,j}$, menos la extracción por los fenómenos naturales de filtración y evaporación $\left(L_i\right)$ y también se resta el uso de agua que se extrae de cada tramo de río $\left(U_i\right)$.

$$Q_i = Q_{i-1} + P_i + D_i + IND_i + \sum_{j=1}^{N_{Eflu,i}} T_{i,j} - L_i - U_i, \ \forall i \in I \tag{2.1}$$

Observe que el modelo propuesto considera tanto descargas puntuales (por ejemplo, descargas industriales, descargas directas, descargas con tratamiento y sin tratamiento) como descargas no puntuales como la precipitación y las descargas agrícolas.

II.2.2 Balance por componente para cada tramo de río.

La cantidad de masa del contaminante que sale de cada tramo de río $\left(Q_i * CQ_{i,l}\right)$ es igual a la entrada de masa del contaminante en cada tramo de río $\left(Q_{i-1} * CQ_{i-1,l}\right)$, más la cantidad de masa que se encuentra en la precipitación $\left(P_i * CP_{i,l}\right)$, más la cantidad de masa que se encuentra en las descargas directas $\left(D_i * CD_{i,l}\right)$, más la masa del componente peligrosos en las descargas industriales $\left(IND_i * CIND_{i,l}\right)$, más la cantidad del contaminante en los efluentes $\sum_{i=1}^{N_{Efl,i}} T_{i,j} * CT_{i,j,l}$, menos las pérdidas por evaporación y filtración del contaminante $\left(L_i * CL_{i,l}\right)$, la cantidad del contaminante que se encuentra en las corrientes de uso $\left(U_i * CU_{i,l}\right)$, y menos la degradación del contaminante en cada tramo de río $\left(\int_{V=0}^{V_i} r_i dV_i\right)$. Por lo tonto, el balance por componente para cada tramo de río es descrito de la siguiente manera:

$$Q_i * CQ_{i,l} = Q_{i-1} * CQ_{i-1,l} + P_i * CP_{i,l} + D_i * CD_{i,l} + IND_i * CIND_{i,l} + \sum_{i=1}^{N_{Efl,i}} T_{i,j} * CTR_{i,j,l} - L_i * CL_{i,l} - U_i * CU_{i,l} - \int_{V=0}^{V_i} r_{i,l} dV_i,$$

$$\forall i \in I, l \in L \qquad (2.2)$$

El último término de la ecuación (2.2) corresponde a la reacción que se lleva a cabo en cada tramo de río, y esto se puede expresar como una reacción de primer orden como sigue:

$$\int_{V=0}^{V_i} r_{i,l} dV_i = K_{i,l} * CQ_{i,l} * V_i$$

donde, $K_{i,l}$ es la constante de velocidad de Arrhenius que puede ser determinada experimentalmente, y V_i es el volumen para cada tramo de río *i* del río principal de la cuenca hidrológica. El término de reacción $\left(\int_{V_i=0}^{V_i} r_{i,l} dV_i \right)$ es muy interesante porque considera las reacciones químicas y bioquímicas que ocurren y que toman lugar en el río por la flora y la fauna dentro del sistema, lo cual puede producir o eliminar los componentes peligrosos considerados.

II.2.3 Balance general de masa para los afluentes.

El balance de masa para los afluentes *j* que son descargados en los tramos de río *i* se describe como sigue:

$$T_{i,j} = WS_{i,j}^{\text{sin } tratar} + WS_{i,j}^{tratadas} + IND_{i,j} + P_{i,j} + D_{i,j} - L_{i,j} - U_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J \qquad (2.3)$$

El flujo que deja el afluente *j* y entra al tramo de río *i* $\left(T_{i,j}\right)$ es igual a la suma de las descargas con o sin tratamiento ($WS_{i,j}^{\ tratadas}, WS_{i,j}^{\text{sin } tratar}$), del flujo de aguas residuales provenientes de las industrias ($IND_{i,j}$), del flujo de las precipitaciones ($P_{i,j}$), del flujo de las descargas agrícolas ($D_{i,j}$) menos las pérdidas de agua por evaporación y filtración ($L_{i,j}$) y el agua usada o extracción de corrientes ($U_{i,j}$).

II.2.4 Balance por componente para cada afluente.

La cantidad de masa de cada componente que deja cada afluente *j* y es dirigida al tramo de río *i* se calcula como sigue:

$$T_{i,j} * CT_{i,j,l} = WS_{i,j}^{\text{sin}\,tratar} * CWS_{i,j,l}^{\text{sin}\,tratar} + WS_{i,j}^{tratadas} * CWS_{i,j,l}^{tratadas} + IND_{i,j} * CIND_{i,j,l} + P_{i,j} * CP_{i,j,l} + D_{i,j} * CD_{i,j,l} - L_{i,j} * CL_{i,j,l}$$
$$-U_{i,j} * CU_{i,j,l} - \int_{V=0}^{V_{i,j}} r_{i,j,l} dV_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J, l \in L \tag{2.4}$$

Nótese que el balance por componente para cada afluente incluye el término de reacción $\left(\int_{V=0}^{V_{i,j}} r_{i,j} dV_{i,j} \right)$. Esto permite tomar en cuenta la degradación natural de los componentes en el sistema macroscópico. Y usualmente este término reactivo es considerado a partir de cinéticas de primer orden.

II.2.5 Descargas agrícolas y usos.

Las descargas agrícolas $D_{i,j}$ y usos $U_{i,j}$ son proporcionales a las áreas agrícolas en los alrededores de la cuenca hidrológica. Estas descargas y usos se calculan como sigue:

$$D_{i,j} = \lambda_{i,j} * A_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J \tag{2.5}$$

$$U_{i,j} = \beta_{i,j} * A_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J \tag{2.6}$$

donde $\lambda_{i,j}$ es el flujo de agua por unidad de área en m^3/acre*s, $\beta_{i,j}$ es el flujo de agua para uso agrícola por unidad de área en el afluente *j* en m^3/acre*s y $A_{i,j}$ es el área que cubre el afluente *j* en acres.

II.2.6 Diseño para el sistema de tratamiento distribuido.

Existen varias unidades de tratamiento que pueden ser usadas para los diferentes afluentes descargados al río principal de la cuenca hidrológica (ver **Figura 2.3**).

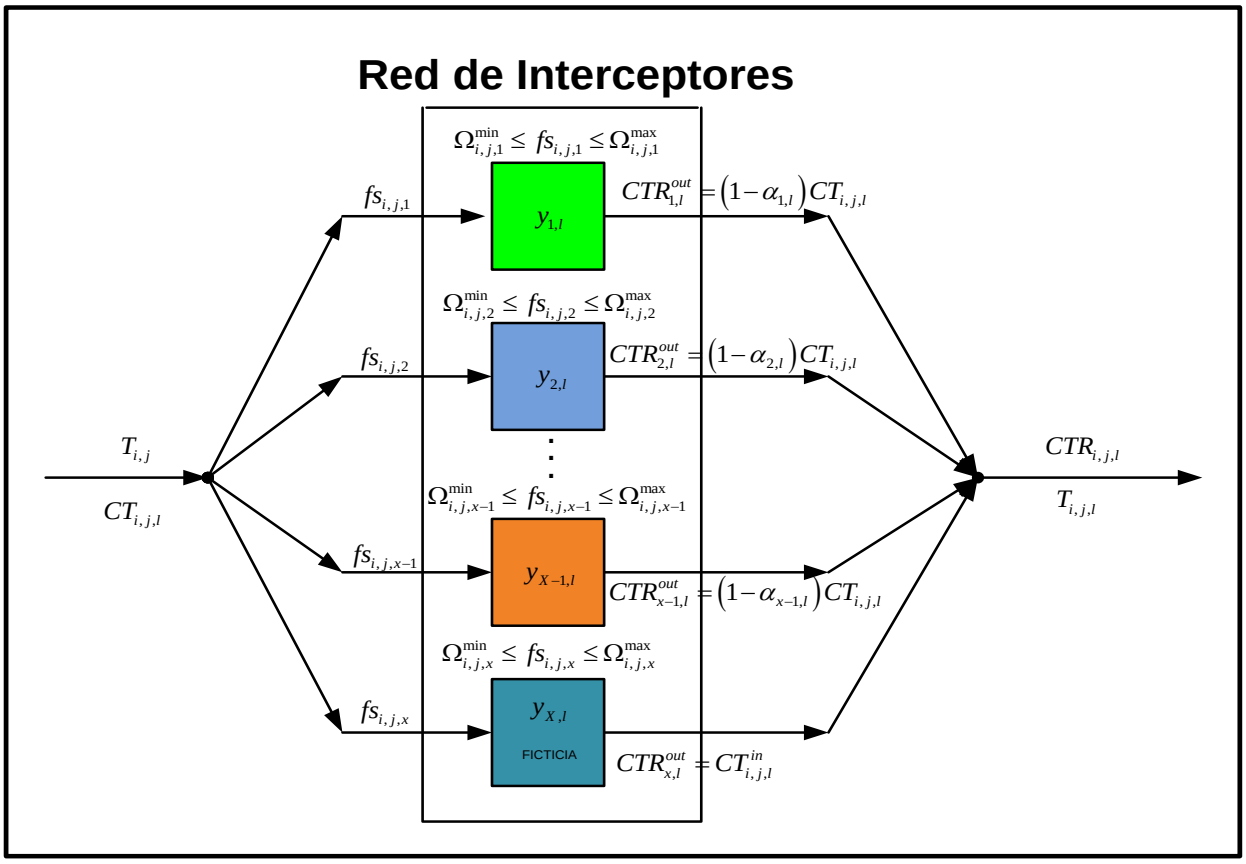

Figura 2.3 Superestructura para *n* interceptores para *j* efluentes.

Para un sistema macroscópico, usualmente el número de afluentes es muy grande; muchos de estos afluentes pueden ser tratados para satisfacer las restricciones ambientales y asegurar la sustentabilidad del sistema. Por lo tanto, el problema consiste en determinar el flujo de los afluentes que deben ser tratados y la eficiencia de remoción que debe ser usada para cumplir estas restricciones al menor costo posible. Aquí la selección de las unidades de tratamiento que conformarán el sistema de tratamiento distribuido, es modelado a través de la siguiente disyunción utilizada en función de cada afluente *j* que se descarga en cada tramo de río *i*:

$$\begin{bmatrix} Y_{i,j} \\ T_{i,j} = \sum_{x \in X} fs_{i,j,x} \\ \sum_{x \in X} fs_{i,j,x} * (1-\alpha_{x,l}) * CT_{i,j,l} = T_{i,j} * CTR_{i,j,l}, \forall l \in L \\ \begin{bmatrix} Z_{i,j,x} \\ fs_{i,j,x} \geq \Omega_{i,j,x}^{\min} \\ fs_{i,j,x} \leq \Omega_{i,j,x}^{\max} \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Z_{i,j,x} \\ fs_{i,j,x} = 0 \end{bmatrix}, \forall x \in X \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y_{i,j} \\ CTR_{i,j,l} = CT_{i,j,l}, \forall l \in L \\ fs_{i,j,x} = 0, \forall x \in X \end{bmatrix}, \forall i \in I, \forall j \in J$$

En la disyunción anterior, $CT_{i,j}$ es la concentración para el afluente *j* que es descargado en el tramo de río *i* sin ningún tratamiento, mientras que $CTR_{i,j}$ es la concentración del afluente *j* que se somete a un tratamiento previo a ser descargado en el tramo de río *i* . Nótese que el modelo anterior tiene una disyunción anidada. En el primer nivel, la variable Booleana $Y_{i,j}$ está asociada a la existencia de la unidad de tratamiento. Si la variable Booleana es verdadera las ecuaciones de diseño para la planta de tratamiento se aplican; por otra parte, si ésta es falsa ($\neg Y_{i,j}$), no existe ninguna unidad de tratamiento y la concentración final de descarga es igual a la concentración de entrada en el afluente. En este caso, también el costo de la unidad de tratamiento (interceptor) es cero. En el segundo nivel, la variable Booleana $Z_{i,j,x}$ es asociada con la existencia de los flujos segregados en la planta de tratamiento; cuando el flujo segregado existe, $Z_{i,j,x}$ es verdadera. El flujo segregado debe ser mayor que un límite inferior $\Omega_{i,j,x}^{\min}$ y menor que un límite superior $\Omega_{i,j,x}^{\max}$. Finalmente, $CTR_{i,j.l}$ es la concentración final de descarga del afluente *j* al tramo de río *i* para el componente *l*.

Para reformular la disyunción anterior como un conjunto de ecuaciones algebraicas, las variables Booleanas son transformadas en variables binarias. De esta manera, cuando la variable Booleana es verdadera, la variable binaria asociada es igual a uno, y cuando la variable Booleana es falsa, la variable binaria asociada es igual a cero. Tal reformulación es hecha por medio de la técnica *convex hull* (Raman y Grossmann 1994; Ponce-Ortega y col. 2009a) obteniendo el siguiente conjunto de ecuaciones.

Primero, las variables continuas son desagregadas como sigue:

$$CTR_{i,j,l} = CTR^{d1}_{i,j,l} + CTR^{d2}_{i,j,l} \quad , \forall i \in I,\ j \in J, l \in L \tag{2.7}$$

Entonces, las ecuaciones dentro de cada disyunción se expresan en términos de las variables desagregadas.

$$y_{i,j} * T_{i,j} = \sum_{x \in X} fs_{i,j,x}, \ \ \forall i \in I,\ j \in J \tag{2.8}$$

$$\sum_{x \in X} fs_{i,j,x} * \left(1 - \alpha_{x,l}\right) * CT_{i,j,l} = T_{i,j} * CTR^{d1}_{i,j,l}, \ \ \forall i \in I,\ j \in J, l \in L \tag{2.9}$$

$$CTR^{d2}_{i,j,l} = CT_{i,j,l} * (1 - y_{i,j}), \ \ \forall i \in I,\ j \in J, l \in L \tag{2.10}$$

Limites superiores son requeridos para las variables desagregadas:

$$CTR^{d1}_{i,j,l} \le CT_{i,j,l} * y_{i,j}, \quad \forall i \in I,\ j \in J, l \in L \tag{2.11}$$

$$CTR^{d2}_{i,j,l} \le CT_{i,j,l} * (1 - y_{i,j}), \quad \forall i \in I,\ j \in J, l \in L \tag{2.12}$$

Y las ecuaciones de las disyunciones anidadas se expresan como sigue:

$$fs_{i,j,x} \ge \Omega^{\min}_{i,j,x} * z_{i,j,x}, \quad \forall i \in I,\ j \in J, x \in X \tag{2.13}$$

$$fs_{i,j,x} \le \Omega^{\max}_{i,j,x} * z_{i,j,x}, \quad \forall i \in I,\ j \in J, x \in X \tag{2.14}$$

Finalmente, las siguientes relaciones lógicas son requeridas para asegurar que cualquier unidad de tratamiento se puede utilizar cuando la ubicación es seleccionada para tratar el afluente.

$$(1 - y_{i,j}) + \sum_{x} z_{i,j,x} \ge 1, \quad \forall i \in I,\ j \in J \tag{2.15}$$

$$y_{i,j} + (1 - z_{i,j,x}) \ge 1, \quad \forall i \in I,\ j \in J, x \in X \tag{2.16}$$

En la relaciones anteriores, si la variable Booleana ($Y_{i,j}$) es verdadera, entonces, la variable binaria asociada $y_{i,j}$ es uno. En este caso, $CTR^{d2}_{i,j,l}$ debe ser cero y $CTR_{i,j,l}$ es igual a $CTR^{d1}_{i,j,l}$ de acuerdo a las ecuaciones (2.12) y (2.7), respectivamente; por lo tanto, las ecuaciones (2.9) y (2.10) son aplicadas. Por otra parte, cuando la variable Booleana $Y_{i,j}$ es falsa, entonces la variable binaria asociada $y_{i,j}$ es cero y la variable desagregada $CTR^{d1}_{i,j,l}$ también es cero debido a la relación (2.11); como consecuencia, las ecuaciones (2.8) y (2.9) no se aplican y únicamente se aplica la ecuación (2.10). Similarmente, cuando $y_{i,j}$ es uno, entonces al menos una $z_{i,j,x}$ debe ser uno (ver la ecuación (2.15)), y se aplican las ecuaciones (2.13) y (2.14). Por otro lado, cuando $y_{i,j}$ es cero, todas las $z_{i,j,x}$ deben ser cero debido a la ecuación (2.16), y $fs_{i,j,x}$ es cero por la ecuación (2.15).

II.2.7 Restricciones para la calidad del agua en tramos de río específicos.

A través de la cuenca hidrológica, se extrae agua para varios tipos de uso como: Industriales, agrícolas (incluyendo diferentes tipos de agricultura) y domésticos (para diferentes propósitos). Por lo tanto, el agua es extraída de lugares específicos para estas diferentes actividades, y la calidad del agua requerida depende del tipo de uso de esta agua. De esta manera, la composición de los contaminantes específicos se restringe de acuerdo con el uso del agua en las secciones específicas de la cuenca hidrológica. El modelo propuesto es capaz de considerar estas restricciones a través de las siguientes relaciones:

$$CQ_{n(i)} \le CQ^{desired}_{n(i)}, \ \forall n(i) \in N(I) \tag{2.17}$$

Donde *N(I)* representa el subconjunto de los tramos de río *n* de todos los tramos de río que requiere una calidad de agua especifica.

II.2.8 Función Objetivo.

El modelo es formulado como un problema de optimización multi-objetivo para la minimización simultanea del costo total anual y la concentración final de los componentes peligrosos en el área de disposición final de la cuenca hidrológica de la siguiente manera.

$$OF = \{\min TAC \; ; \; \min CQ^{dis}\} \tag{2.18}$$

Nótese que estos dos objetivos se contradicen entre sí, en otras palabras, cuando la concentración en la disposición final disminuye, el costo total anual para el tratamiento de los efluentes incrementa; mientras que, cuando la concentración en el área de disposición final aumenta, el costo total anual disminuye.

La función objetivo del costo total anual se expresa de la siguiente manera:

$$TAC = k_f \sum_i \sum_j \sum_x \left[FC_x * z_{i,j,X} + VC_x * fs_{i,j,x}^{\gamma} \right] + H_Y \sum_i \sum_j \sum_x Cu_x^{op} * fs_{i,j,x} \tag{2.19}$$

En la ecuación anterior, TAC es el costo total anual (US$/año), que es igual al costo de capital para las unidades de tratamiento requeridas para tratar cualquier afluente (incluyendo los costos fijos y los costos variables) y el costo de operación para las unidades de tratamiento. k_f es un factor utilizado para anualizar el costo de capital (año^{-1}), H_Y es el número de horas que operan las plantas de tratamiento por año (horas/año), FC_x es el costo fijo, VC_x es el costo variable para el interceptor *x*, Cu_x^{op} es el costo unitario para la operación de la unidad de tratamiento *x* y, finalmente, γ es el exponente del costo de capital que toma en cuenta el efecto de las economías de escala.

Para determinar el conjunto de soluciones Pareto óptimas que compensen ambos objetivos, el método *constraint* es usado en este trabajo (Haimes y col., 1971). En este método, la estrategia básica es transformar un problema de optimización multi-objetivo en una serie de problemas con un solo objetivo por la elección únicamente de uno de los objetivos como el objetivo a ser minimizado (en este caso, el *TAC*) y definiendo los otros como restricciones (en este caso, la concentración de descarga CQ^{dis} en el área de disposición final). Esta estrategia permite identificar el costo mínimo requerido para una concentración dada en el área de

disposición final; al mismo tiempo, esta metodología permite identificar la inversión adicional necesaria para satisfacer las limitaciones ambientales más estrictas. Además podría ser muy útil cuando es importante tomar las decisiones gubernamentales asociado con este tipo de problemas.

II.2.9 Observaciones para el modelo.

- La formulación del modelo presenta la posibilidad de seleccionar el sistema de tratamiento óptimo para la cuenca hidrológica y consiste en un problema mixto entero no lineal (MINLP).
- El modelo permite la selección óptima de diferentes tecnologías de tratamiento a través de la selección de diferentes eficiencias de remoción y sus costos unitarios correspondientes.
- La formulación multi-objetivo permite identificar el conjunto de soluciones óptimas que son muy útiles para las decisiones gubernamentales.
- El modelo para la cuenca hidrológica se basa en una formulación MFA y considera las principales extracciones y descargas a los ríos, que son necesarias para determinar los flujos promedios y las concentraciones de los componentes peligrosos a través de la cuenca hidrológica.

II.3 Resultados y Discusiones.

Tres casos de estudio son presentados para mostrar la aplicación del modelo propuesto. Los tres casos de estudio son resueltos como problemas MINLP con el resolvedor DICOPT (Viswanathan y Grossman 1990) incluido en el *software* GAMS (Brooke y col. 2006). El primer (problema de un componente clave) y el segundo problema (problema multi-componente) corresponden al drenaje Bahr El-Baqar localizado en Egipto, que es uno de los principales drenajes en el Delta del Nilo, y el tercer caso de estudio es un problema multi-objetivo que corresponde a la cuenca hidrológica del río Balsas, que es uno de los más largos e importantes de México. Antes del proceso de optimización, dependiendo de los contaminantes a remover para cada caso de estudio, varias unidades de tratamiento con configuraciones dadas y condiciones de operación fueron simuladas para determinar las eficiencias de remoción, así como los costos unitarios de capital y operación.

Estos tres ejemplos se presentan a continuación:

II.3.1 Caso de estudio 1.

El drenaje Bahr El-Baqar (ver **Figure 2.4**) es el drenaje más largo en el este del delta del Nilo en Egipto. El punto de inicio se origina a partir de la intersección del drenaje Qalyubia y el drenaje Belbies comenzando en la parte norte del Cairo. El punto final es la entrada en el lado sur del lago Manzala, que tiene una superficie de 1000 km^2 y una profundidad promedio de 1 m. El drenaje recibe varios tipos de descargas incluyendo el drenaje agrícola, las aguas residuales domesticas tratadas y no tratadas, y las corrientes de aguas residuales industriales. Los detalles del sistema de drenaje han sido reportados por Lovelady y col. (2009).

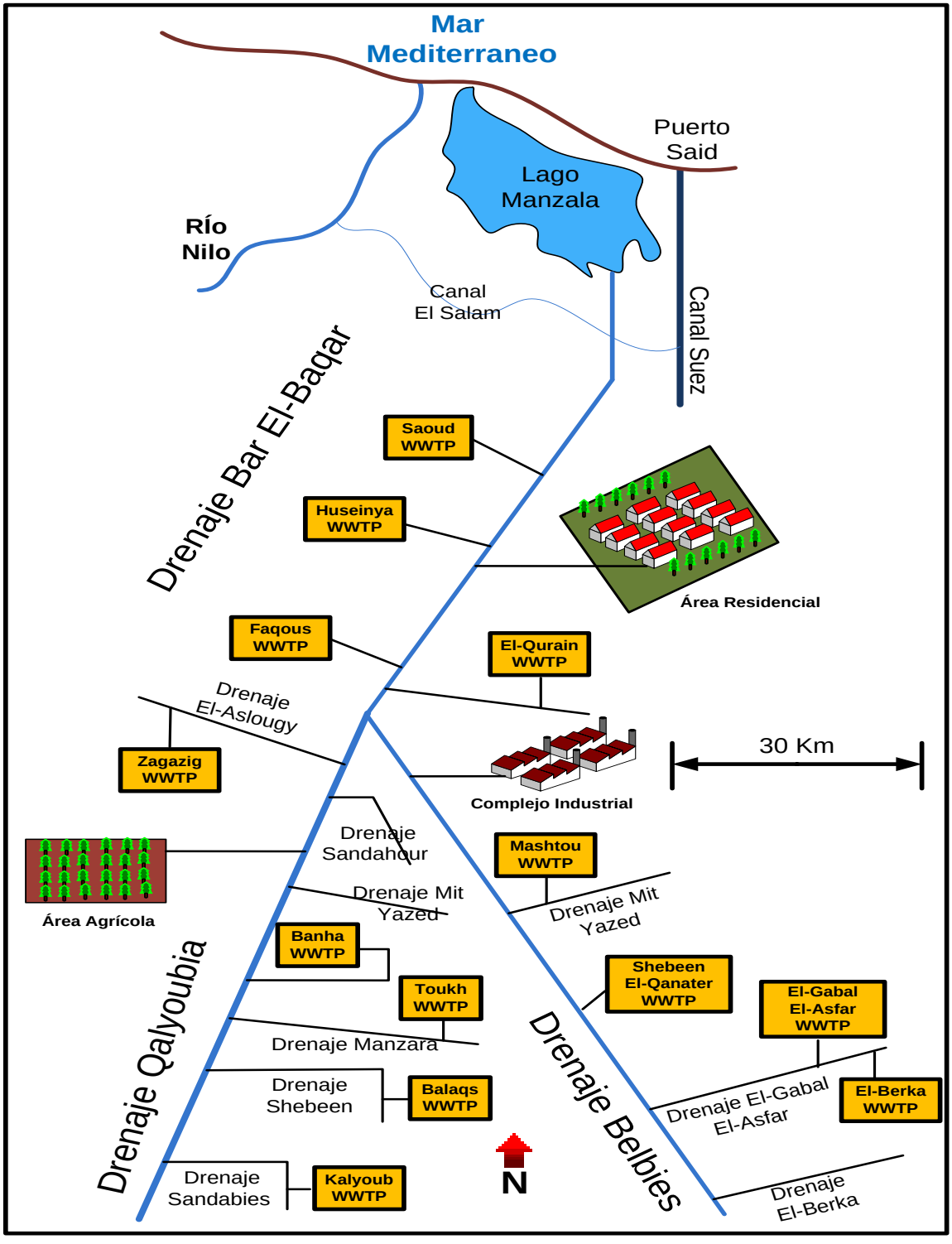

Figura 2.4 Representación del drenaje Bahr el-Baqar.

Para este caso, el fosforo se ha considerado como el compuesto clave para controlar el problema de la eutrofización debido a las múltiples zonas agrícolas y plantas de fertilizantes que se encuentran alrededor de este drenaje; además, esto permite aplicar la metodología propuesta a un problema de un sólo contaminante. Las características del sistema Bahr El-Baqar son usadas como datos de entrada del modelo MINLP presentados en este trabajo.

El sistema de tratamiento distribuido puede ser colocado a lo largo del río principal para ayudar a la remoción del fosforo y de este modo disminuir la concentración final en el área de captación final, la cual tiene un valor de 1.3 ppm antes de la instalación del sistema de tratamiento.

Para resolver este caso de estudio, las siguientes suposiciones se han considerado (Lovelady y col., 2009):

- Precipitación insignificante: El flujo de la precipitación ha sido eliminado de acuerdo con el clima de Egipto.
- Pérdida insignificante. La evaporación del agua es insignificante en comparación con los flujos convectivos.
- La concentración de fósforo por las plantas existentes de tratamiento de aguas residuales (WWTP) tiene un valor de 9 ppm. Esta suposición se basa en pruebas de laboratorio para diferentes tratamientos.
- La concentración de fósforo para las aguas residuales sin tratamiento es de 15 ppm.
- La concentración de fósforo en el agua tratada es de 9,75 ppm.
- La concentración de fósforo en las corrientes de aguas residuales agrícolas es de 1,5 ppm.
- El término de reacción química para la degradación del fósforo en los tramos de río toma la siguiente forma:

$$\int_{V=0}^{V_i} r_i dV_i = k * CQ_i * V_i, \quad \forall i \in I$$

donde *k* es la constante de velocidad de reacción determinada experimentalmente (Lovelady y col., 2009), CQ_i es la concentración del fosforo en el tramo de río y V_i es el volumen del tramo de río.

Por otro lado, el término de reacción química de los afluentes toma la siguiente forma:

$$\int_{V=0}^{V_{i,j}} r_{i,j} dV_{i,j} = k * CT_{i,j} * V_{i,j}, \qquad \forall i \in I, j \in J$$

Donde $k = 9.041909x10^{-6} / s$ para todos los tramos de río y los afluentes. Además, el valor para $\lambda_{i,j}$ es 0.000066 m^3/acre*s para todos los tramos de río, para los tramos de río 1-6, 8, 12-15 $\beta = 0.000023$ m^3/acre*s y para los tramos de río 7, 9-12 $\beta = 0.000011$ m^3/acre*s. El tiempo de operación de la planta (H_Y) es 8000 hr/año y el factor usado para anualizar el costo de capital (k_f) es 0.25 $año^{-1}$. La **Tabla 2.1** muestra los costos unitarios y eficiencias para los interceptores considerados.

Tabla 2.1 Datos de las unidades de tratamiento para el caso de estudio 1.

Interceptor	Costo Fijo, US$	Costo Variable, US$/$m^3$	Eficiencia, α_i	Costo Operacional, US$ /m^3
1	2000	1	0.8	1.7 E-3
2	1500	0.033	0.9	1.4E-3
3	1300	0.0067	0.55	0.9E-3
4	0	0	0	0

El modelo consiste en 360 variables binarias, 831 variables continuas y 920 restricciones y se resuelve en aproximadamente 0.16 s de tiempo de CPU para cada punto de la curva Pareto.

La **Figura 2.5** muestra la curva Pareto óptima. El conflicto entre los dos objetivos se muestra en esta figura; disminuyendo la concentración de descarga CQ^{dis} en el área de captación final, el *TAC* incrementa considerablemente. Esto es a consecuencia de incrementar el número de afluentes a ser tratados, lo cual también incrementa el número de unidades de tratamiento. En la curva Pareto presentada en la **Figura 2.5**, la solución correspondiente a una concentración de descarga en el área de captación final menor que 0.40 ppm ha sido seleccionada, porque para este

caso se obtiene un costo razonable para una buena calidad del agua. Tal solución es representada en la **Figura 2.6**, la cual ilustra el sistema de tratamiento distribuido para satisfacer las restricciones ambientales al menor costo. La **Figura 2.6** muestra que 7 unidades de tratamiento instaladas a lo largo del sistema macroscópico son necesarias para satisfacer las restricciones ambientales a lo largo del río principal y que la concentración de descarga en el área de captación final sea menor que 0.4 ppm. Es importante señalar que cuando las restricciones ambientales son más estrictas, el número de unidades de tratamiento y el costo asociado incrementan sustancialmente.

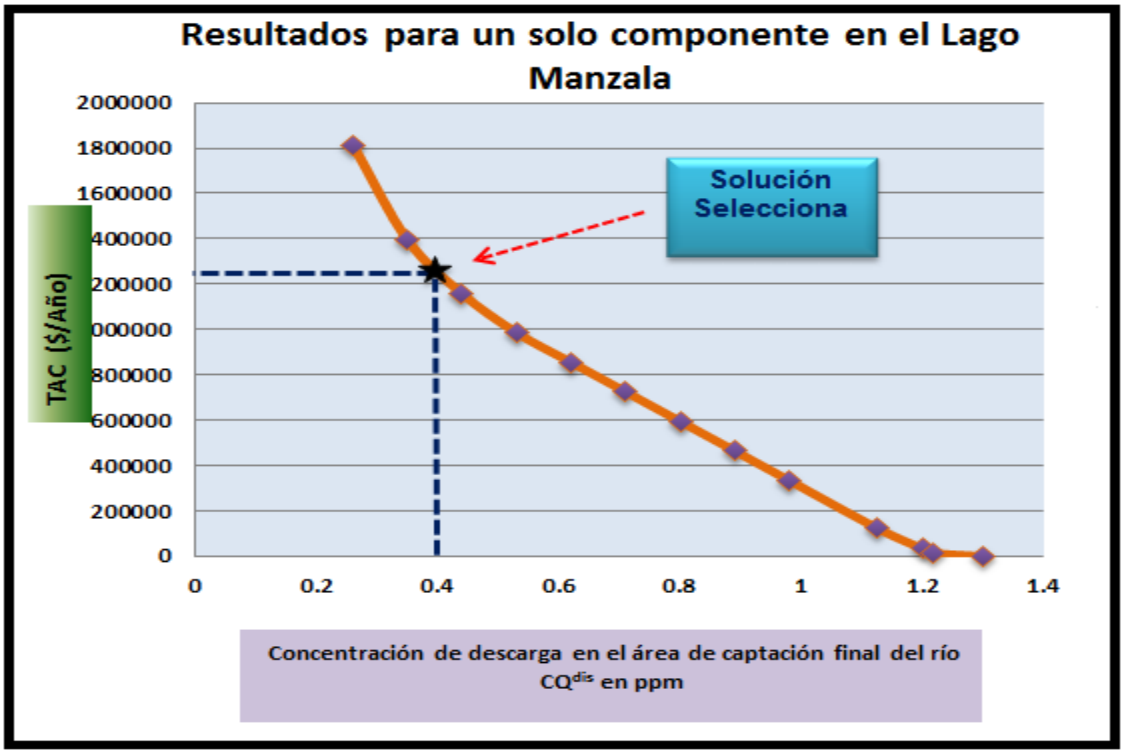

Figura 2.5 Curva Pareto para la minimización un solo contaminante en la cuenca hidrológica.

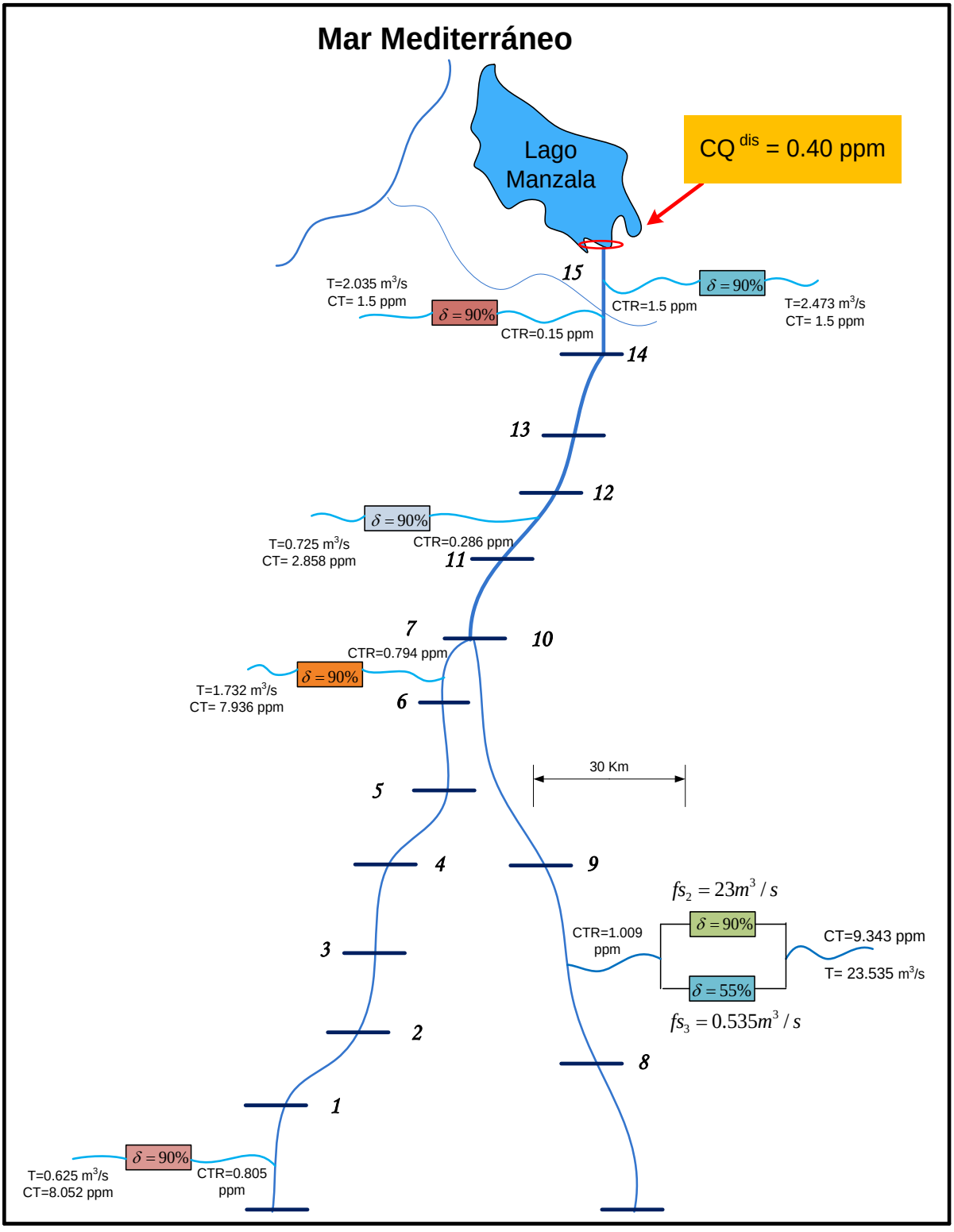

Figura 2.6. Configuración óptima para el caso de estudio1 para una concentración menor que 0.40 ppm.

II.3.2 Caso de estudio 2.

En este caso, el mismo sistema del drenaje Bahr El-Baqar y el lago Manzala han sido considerados; sin embargo, se ha extendido para incluir dos componentes peligrosos: fosforo (indicado como contaminante número 1) y azufre (indicado como contaminante número 2), para mostrar la aplicabilidad de la metodología propuesto para un problema multi-componente (ambos son componentes clave para evitar problemas ambientales). La concentración para las diferentes corrientes de entrada y salida para este caso de estudio son mostradas en la **Tabla 2.2**. La reacción para la degradación de los contaminantes sigue los modelos cinético de primer orden, y las constante para el fosforo es la misma que en el Ejemplo 1; mientras que, para el azufre la constante $k_2 = 0.8832452\text{E-}5/s$ ha sido considerada. El tiempo de operación de la planta (H_Y) es 8000 hr/año y el factor de anualización (k_f) es 0.25/año. La **Tabla 2.3** muestra los costos unitarios y eficiencias para los interceptores considerados.

Tabla 2.2 Concentraciones de los componentes clave para el caso de estudio 2.

Tipo de Corriente	Concentración para el Fosforo mg/L	Concentración para el Azufre mg/L
Precipitación	0	0
Evaporación	0	0
WWTP	9	7.5
Agua Sin Tratamiento	12	11.5
Agua Tratada	9.75	7.75
Descarga Agrícola	1.5	2

Tabla 2.3. Costos unitarios y eficiencias de los interceptores para el caso de estudio 2.

Interceptor	Costo Fijo, US$	Costo Variable, US$ /m^3	Eficiencia α_1	Eficiencia α_2	Costo Operacional, US$ /m^3
1	2000	0.235	0.8	0.65	1.67E-3
2	1500	0.193	0.9	0.7	1.3E-3
3	1300	0.168	0.55	0.75	0.89E-3
4	0	0	0	0	0

La concentración en la disposición final debe ser menor que la que naturalmente el sistema sea capaz de degradar y evitar la acumulación de los contaminantes. Originalmente, sin el sistema de tratamiento distribuido, las concentraciones que existen en el sistema son 1.3 mg/L para el fosforo y 1.132 mg/L para el azufre. Este problema consiste de 459 variables binarias, 1151 variables continuas y 2910 restricciones. La solución del problema MINLP para cada punto de la curva Pareto consume aproximadamente 1.2 s. La **Figura 2.7** muestra las soluciones óptimas dependiendo de diferentes restricciones respecto a la máxima concentración permisible de los contaminantes claves en el área de captación final. Cada curva representa diferentes concentraciones superiores en el área de captación final para el compuesto azufre. Como se esperaba, la curva para la restricción estricta del azufre (es decir, $CQ_2 \leq 0.4$ppm) tiene el costo más alto, ya que requiere más interceptores para tratar un gran número de afluentes y, por consiguiente, el aumento de los costos de capital y operación incrementando así el costo total anual. Las curvas para las descargas con concentraciones de azufre de $CQ_2 \leq 0.6$ ppm, $CQ_2 \leq 0.8$ ppm, $CQ_2 \leq 1.132$ ppm presentan el mismo comportamiento, debido a que utilizan el mismo número de unidades de tratamiento para satisfacer las restricciones impuestas en el área de captación final, pero cambiando la localización al instalarlos.

Como puede verse el escenario descrito en las **Figura 2.7** puede ser una herramienta de gran importancia para quienes toman las decisiones en torno a seleccionar la solución que mejor satisfaga sus necesidades específicas. Por otro lado, los gobiernos pueden identificar la inversión adicional necesaria para una concentración dada en la disposición final. Note que en la **Figura 2.7** dos escenarios han sido seleccionados para ser presentados, en el que las concentraciones de los componentes clave se reducen de modo que el sistema es capaz de degradar los contaminantes en los afluentes. La discusión de mencionados escenarios se aborda a continuación:

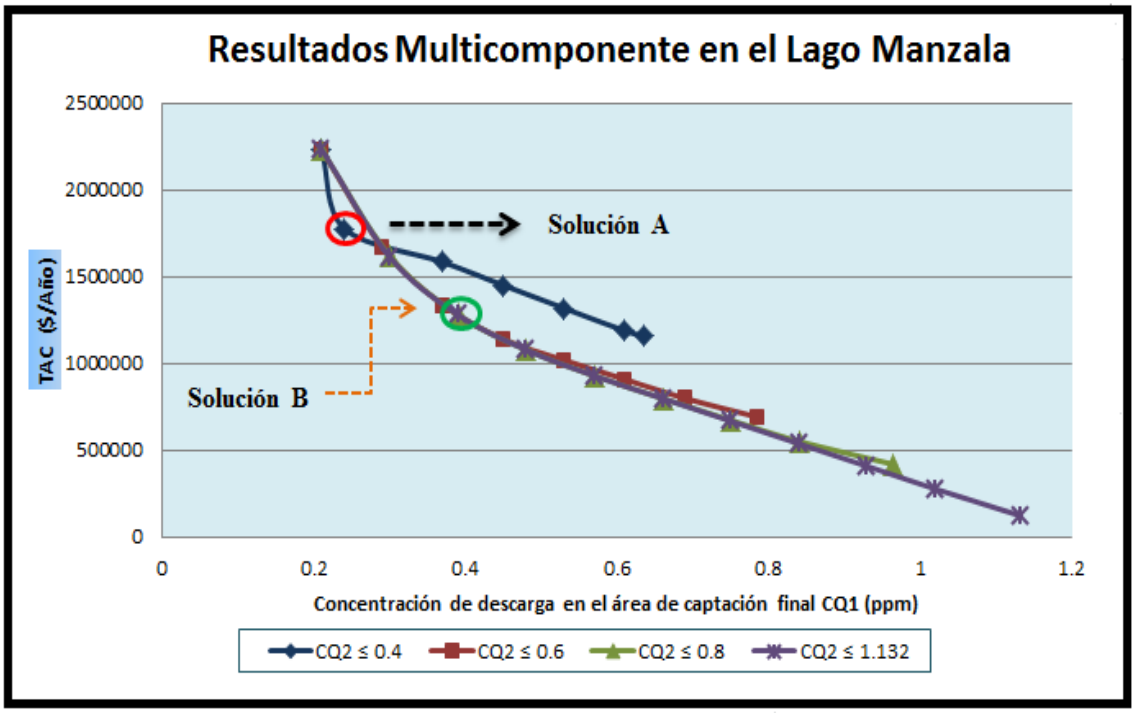

Figura 2.7 Curvas Pareto para el caso de estudio multi-componente.

Primer Escenario (Solución A). La curva Pareto generada en el límite estricto, $CQ_2 \leq$ 0.4 ppm, para la concentración de descarga del azufre se muestra en la **Figura 2.7**. Esta solución satisfice los requerimientos del decisor. La **Tabla 2.4** muestra la localización de las unidades de tratamiento, la eficiencia de los interceptores, y la concentración de descarga en los tramos de río ($CTR_{i,j,l}$). Como puede verse 28 unidades de tratamiento son requeridas para satisfacer estas restricciones generando un costo total anual de US$1,800,000/año.

Tabla 2.4 Configuración óptima para el caso A del caso de estudio 2.

Tramo de río	Afluente	CT_1 ppm	CT_2 ppm	Interceptor	CTR_1 ppm	CTR_2 ppm	fs m3/s
1	1	8.052	6.504	2	0.805	1.951	1.247
2	1	4.039	3.761	2	1.727	0.952	0.396
				3			5.794
3	2	3.404	3.607	3	1.532	0.902	3.073
6	1	1.318	1.763	3	0.593	0.441	0.116
	2	1.287	1.722	3	0.579	0.431	0.589
	3	1.057	1.419	3	0.475	0.355	1.799
	4	1.003	1.347	3	0.629	0.663	1.799
7	1	1.279	1.711	3	0.575	0.428	0.479
	2	1.43	1.908	3	0.643	0.477	0.055
	3	7.936	6.425	2	0.794	1.928	1.732
9	1	9.343	7.329	1	0.956	2.226	0.535
				2			23
	2	4.493	3.933	2	0.449	1.18	0.214
10	2	1.324	1.77	3	0.596	0.442	0.668
11	1	1.286	1.72	3	0.579	0.43	0.083
	2	1.236	1.655	3	0.556	0.414	0.165
	3	1.18	1.584	3	0.532	0.396	1.705
12	1	2.858	2.797	2	0.286	0.839	0.725
	2	1.284	1.718	3	0.578	0.43	0.086
	3	1.309	1.751	3	0.589	0.438	0.258
13	1	1.5	2	2	0.15	0.6	0.731
	2	1.251	1.674	2	0.125	0.502	0.439
14	1	1.5	2	2	0.15	0.6	0.731
	2	1.5	2	2	0.15	0.6	2.021
15	1	1.5	2	2	0.15	0.6	2.035
	2	1.5	2	2	0.15	0.6	2.473

Segundo Escenario (Solución B). La solución B es un punto seleccionado de las tres curvas generadas para las concentraciones de descarga de $CQ_2 \leq 0.6$ ppm, $CQ_2 \leq 0.8$ ppm, $CQ_2 \leq 1.132$ ppm, debido a que tienen el mismo comportamiento (es decir, que utilizan el mismo número de unidades para satisfacer la restricción colocada en la disposición final).

El punto B está en equilibrio porque si nos movemos a la izquierda de la gráfica el impacto ambiental se reduce, pero el costo aumenta de forma exponencial y, por el otro lado, si nos movemos hacia la derecha se reduce el costo, pero aumenta el impacto ambiental. La **Figura 2.8** muestra las soluciones óptimas para las concentraciones de descarga de $CQ_1 \leq 0.4$ ppm para el componente clave 1 y $CQ_2 \leq 1.132$ ppm para el componente clave 2. La solución óptima indica que 6 unidades de tratamiento son requeridas para satisfacer las restricciones impuestas en el área de disposición final con un costo total anual asociado de US$1,250,000/año.

Nótese que cuando las restricciones son más estrictas sobre la disposición final se necesitan más interceptores para el tratamiento de los afluentes que se descargan en el río principal. Además, el método propuesto permite distribuir las unidades de tratamiento (optimizando la localización, el tipo de unidad de tratamiento y el flujo tratado) para dar la solución con el mínimo costo para una calidad dada de agua a través de la cuenca hidrológica y asegurar la sostenibilidad del área de captación final.

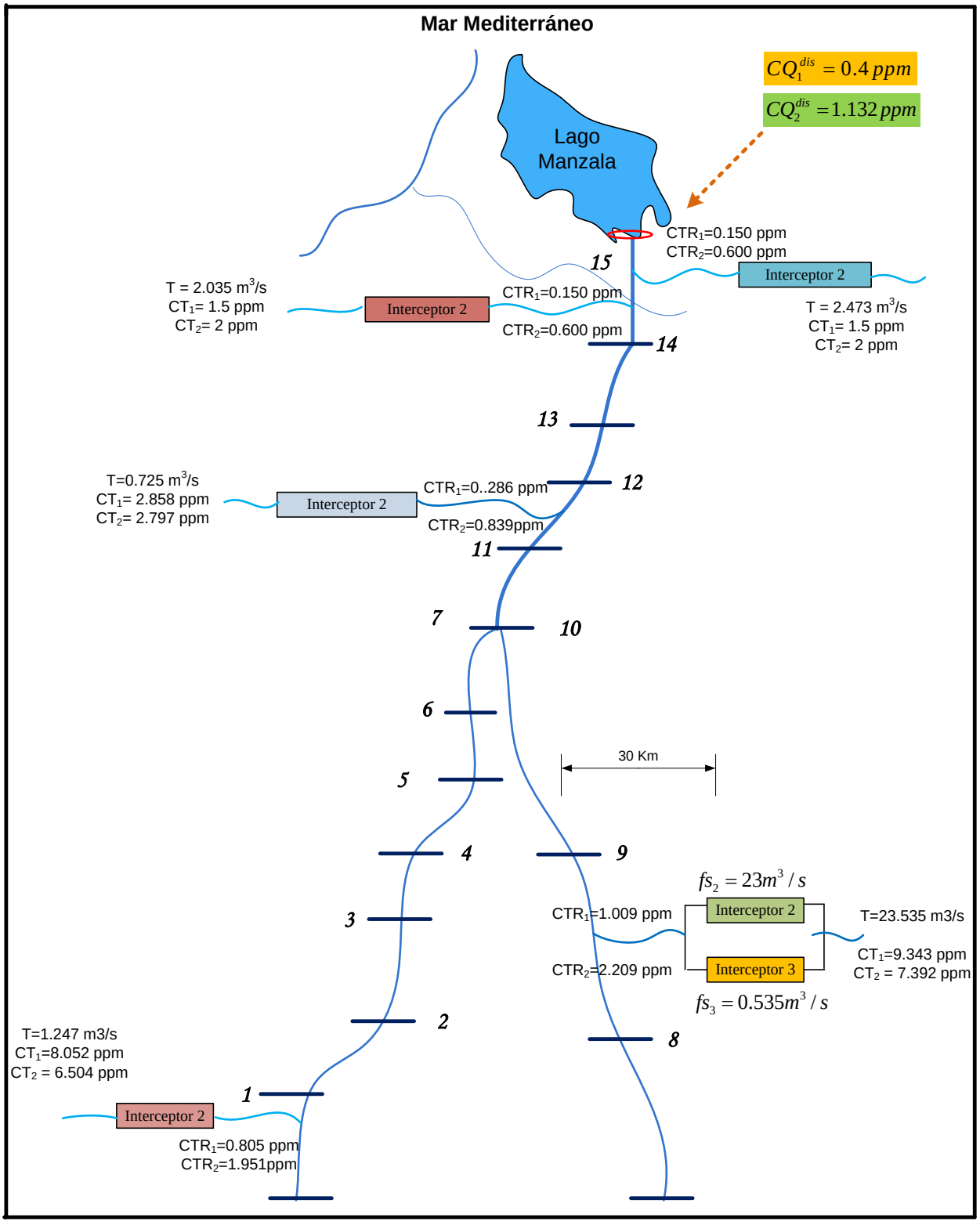

Figura 2.8. Configuración óptima para el escenario B del caso de estudio 2.

II.3.3 Caso de estudio 3.

El sistema de la cuenca del Balsas (CONAGUA 2008, 2009) es considerado para este ejemplo. Este sistema macroscópico es uno de los ríos más largo de México, el cual abastece varios flujos de agua con diferentes calidades para asistir con agua las diferentes actividades que se realizan alrededor del sistema macroscópico. La **Figura 2.9** muestra las principales corrientes del sistema Balsas donde dos componentes son considerados como los contaminantes principales. Las siguientes suposiciones se hacen para los contaminantes de este ejemplo.

- Las concentraciones de las descargas sanitarias sin tratamiento $\left(CS_{i,j}^{\text{sin } tratar}\right)$ son 0.5 ppm para el primer contaminante y 0.35 ppm para el segundo contaminante.
- La concentración de las descargas sanitarias ($CS_{i,j}^{tratada}$) son 0.03 ppm y 0.09 ppm para los contaminantes 1 y 2 respectivamente.
- Las concentraciones en la descarga industrial ($CIND_{i,j}$) para los contaminantes 1 y 2 son 0.06 ppm y 0.03 ppm, respectivamente.
- Las concentraciones en la precipitación ($CP_{i,j}$) es 0 ppm para ambos contaminantes.
- Las concentraciones en las descargas agrícolas ($CD_{i,j}$) son 0.055 ppm para el primer contaminante y para el segundo contaminante es de 0.065 ppm.
- Las concentraciones de las descargas directas (CD_i) son 0.075 ppm y 0.095 ppm para los contaminantes 1 y 2, respectivamente.

La **Tabla 2.5** muestra los datos para las unidades de tratamiento consideradas para el caso de estudio 3**.** Además, la interacción química entre los contaminantes y el ambiente está representada por una reacción de primer orden con constantes cinéticas de $k_1 = 0.9041909\text{E}-5/\text{s}$ y $k_2 = 0.8832452\text{E}-5/\text{s}$ para los contaminantes 1 y 2, respectivamente. Además, en este caso $\lambda_{i,j} = 0.000148\,\text{m}^3/\text{ha*s}$ y $\beta_{i,j} = 0.000296\,\text{m}^3/\text{ha*s}$, el tiempo de operación de la planta es de 8400 hr/año y el factor de anualización es de 0.1 año^{-1}. Las restricciones para las concentraciones de descarga en el área de captación final para los componentes clave son 0.037 ppm para el contaminante 1 y 0.07 ppm para el contaminante 2.

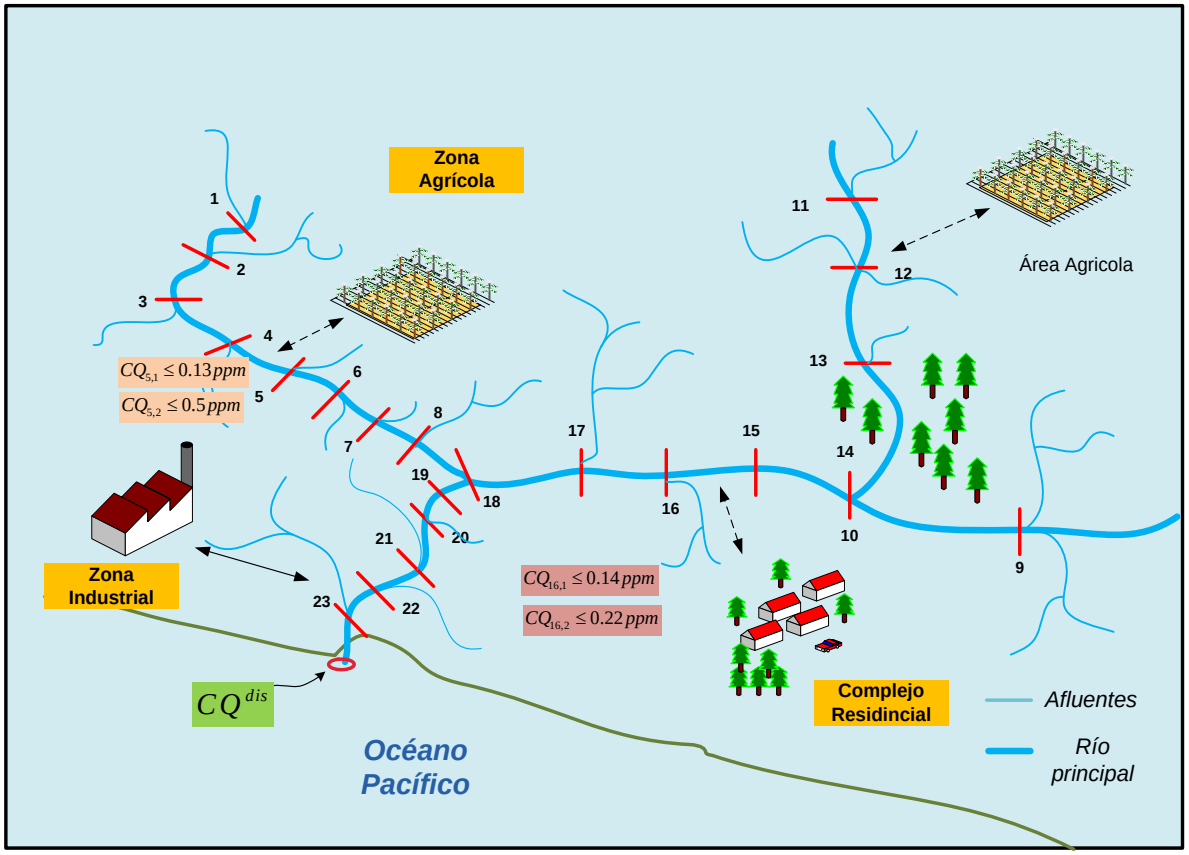

Figura 2.9 Sistema Balsas.

Este problema consiste de 2530 variables binarias, 8515 variables continuas y 9205 restricciones. Cada punto del método *constraint* es resuelto en un tiempo promedio de 300 s. El río principal es dividido en 23 tramos de río para cuantificar y rastrear los contaminantes a lo largo del sistema macroscópico. Se tienen restricciones específicas para la calidad del agua en los tramos de río 5 y 16 impuestas al modelo debido al uso del agua en diferentes actividades (ver **Figura 2.9**). Tres escenarios se presentan para mostrar el comportamiento del modelo para las restricciones estipuladas en la disposición final, cuyas descripciones y resultados son discutidos a continuación.

Tabla 2.5. Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio 3.

Interceptor	Costo Fijo, US$	Costo Variable, US$ /m^3	Factor de Eficiencia, α_1	Factor de Eficiencia, α_2	Costo de Operación, US$ /m^3
1	195,000	0.058	0.95	0.65	1.7E-3
2	186,000	0.052	0.88	0.46	1.38E-3
3	179,500	0.049	0.85	0.67	0.9E-3
4	175,400	0.047	0.82	0.72	1.32E-3
5	170,000	0.043	0.79	0.54	1.23E-3
6	162,000	0.039	0.75	0.45	0.89E-3
7	158,000	0.035	0.73	0.66	0.98E-3
8	144,000	0.031	0.71	0.56	1.44E-3
9	137,500	0.028	0.68	0.44	1.33E-3
10	126,000	0.025	0.64	0.78	1.20E-3
11	0	0	0	0	0

Caso A. Para lograr la sostenibilidad del sistema, es necesario reducir la concentración de los contaminantes que se encuentran inicialmente en el sistema. En el caso A, la concentración en el área de captación final para el contaminante 2 es manipulada como una restricción (es decir, $CQ_2 \leq 0.07$ ppm); mientras que, la concentración para el contaminante 1 es restringida entre los limites superior e inferior para producir la curva Pareto mostrada en la **Figura 2.10**. Una solución del conjunto del conjunto de soluciones óptimas es seleccionada y marcada como el punto A. La cual tiene las siguientes concentraciones de descarga para los componentes clave: CQ_1 = 0.017 ppm y CQ_2 = 0.04 ppm respectivamente. Para satisfacer esta restricción son necesarias 53

unidades de tratamiento colocadas a través del sistema macroscópico con un costo total anual asociado de US$9,338,352/año.

Caso B. En este caso, la concentración para el contaminante 1 es manipulada de la misma manera que el caso anterior y el límite para la concentración de descarga del contaminante 2 en el área de captación final es de $CQ_2 \leq 0.05$ ppm. La soluciones obtenidas son presentadas en el conjunto Pareto de la **Figura 2.10**, donde la solución óptima (Punto BC) tiene una concentración de descarga para el contaminante 1 de 0.019 ppm y esto requiere la instalación de 20 unidades de tratamiento colocadas a lo largo de la cuenca hidrológica lo cual representa una inversión de US$2,947,392/año. Esto es 68% menos que el costo total anual generado en el caso A, pero con una menor calidad de agua.

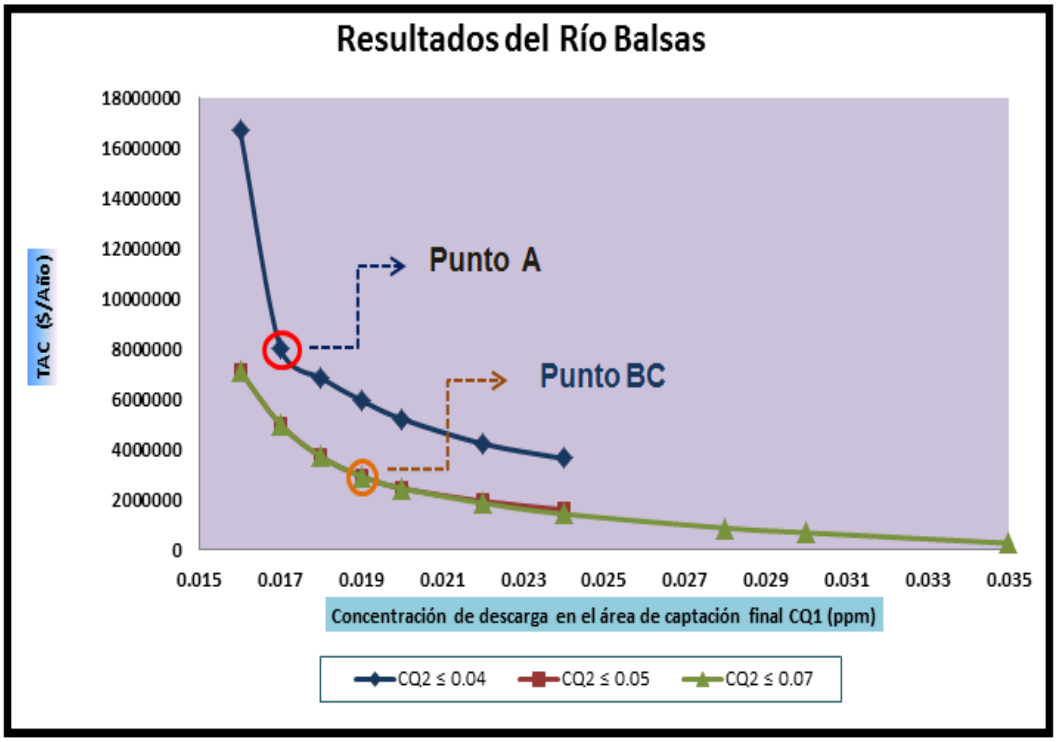

Figura 2.10 Soluciones Pareto para la minimización de contaminantes en el río Balsas.

Caso C. Para este caso, la concentración para el componente clave 1 es manipulada como en el caso anterior, la concentración de descarga para el componente clave 2 se fija en $CQ_2 \leq 0.07$ ppm. Las soluciones óptimas obtenidas para estas restricciones son mostradas también en la **Figura 2.10**. Nótese que este caso tiene un comportamiento muy similar la curva Pareto con respecto a la del caso B; esto es debido a que los límites para las concentraciones del contaminante 2 ($CQ_2 \leq 0.05$ ppm y $CQ_2 \leq 0.07$) requieren el mismo número de unidades de tratamiento en razón de que las restricciones para el contaminante clave 1 se activan y éstas desactivan las restricciones para el contaminante 2. Los resultados fueron validados a través de los balances de masa y balances por componente en la cuenca hidrológica, así como mediante la simulación de las unidades de tratamiento seleccionadas después de la optimización.

CAPÍTULO III

INCORPORACIÓN DE LAS VARIACIONES ESTACIONALES EN EL TRATAMIENTO ÓPTIMO DE EFLUENTES INDUSTRIALES DESCARGADOS EN LAS CUENCAS.

En este capítulo se presenta un modelo de programación matemática para el tratamiento óptimo de los efluentes industriales vertidos a las cuencas hidrológicas considerando las descargas principales y sus usos, así como los fenómenos naturales y los efectos de la estacionalidad en las cuencas hidrológicas. Estas últimas debido a las variaciones en las descargas y usos de agua en la cuenca durante todo el año. Así también, se emplea un enfoque de optimización multi-período combinado con un modelo de MFA para describir el comportamiento estacional de las cuencas hidrológicas, lo que es adecuado para los casos en que la influencia de los cambios climáticos en la cuenca es considerable. Además, este enfoque permite considerar la variación de las descargas industriales en los diferentes períodos del año. La función objetivo consiste en minimizar el costo total anual para el tratamiento de los efluentes industriales, teniendo en cuenta los costos de capital y operacionales para cumplir con las restricciones de calidad del agua a lo largo de la cuenca y evitar la acumulación de los contaminantes en el área de captación final.

III.1 Planteamiento del Problema.

El problema abordado en este capítulo es descrito como sigue. Dada una cuenca hidrológica (ver **Figura 3.1**) donde varias descargas (por ejemplo, aguas residuales domésticas, industriales y efluentes agrícolas) y usos (sistemas de riego, uso doméstico y en sistemas de enfriamiento en las industrias, etc), así como, el impacto de los fenómenos naturales sobre la concentración de los contaminantes a lo largo de la cuenca que en diferentes maneras dependen de los cambios estacionales que afectan la sostenibilidad del sistema. El problema consiste en determinar la configuración y operación de un sistema distribuido para el tratamiento de los efluentes industriales descargados para garantizar la sostenibilidad del sistema macroscópico al mínimo costo total anual, teniendo en cuenta las diferentes restricciones en términos de la calidad del agua a lo largo de la cuenca y en el área de captación final, así como los cambios estacionales

de las descargas de agua y sus usos diferentes. Para el seguimiento de los contaminantes a través de la cuenca, un modelo MFA se implementa en una formulación multi-periodo.

El objetivo de la optimización consiste en determinar los efluentes industriales que deben ser tratados, así como las unidades de tratamiento utilizados para obtener una concentración deseada en el área de captación final satisfaciendo las diferentes restricciones a lo largo de la cuenca en todos los diferentes períodos.

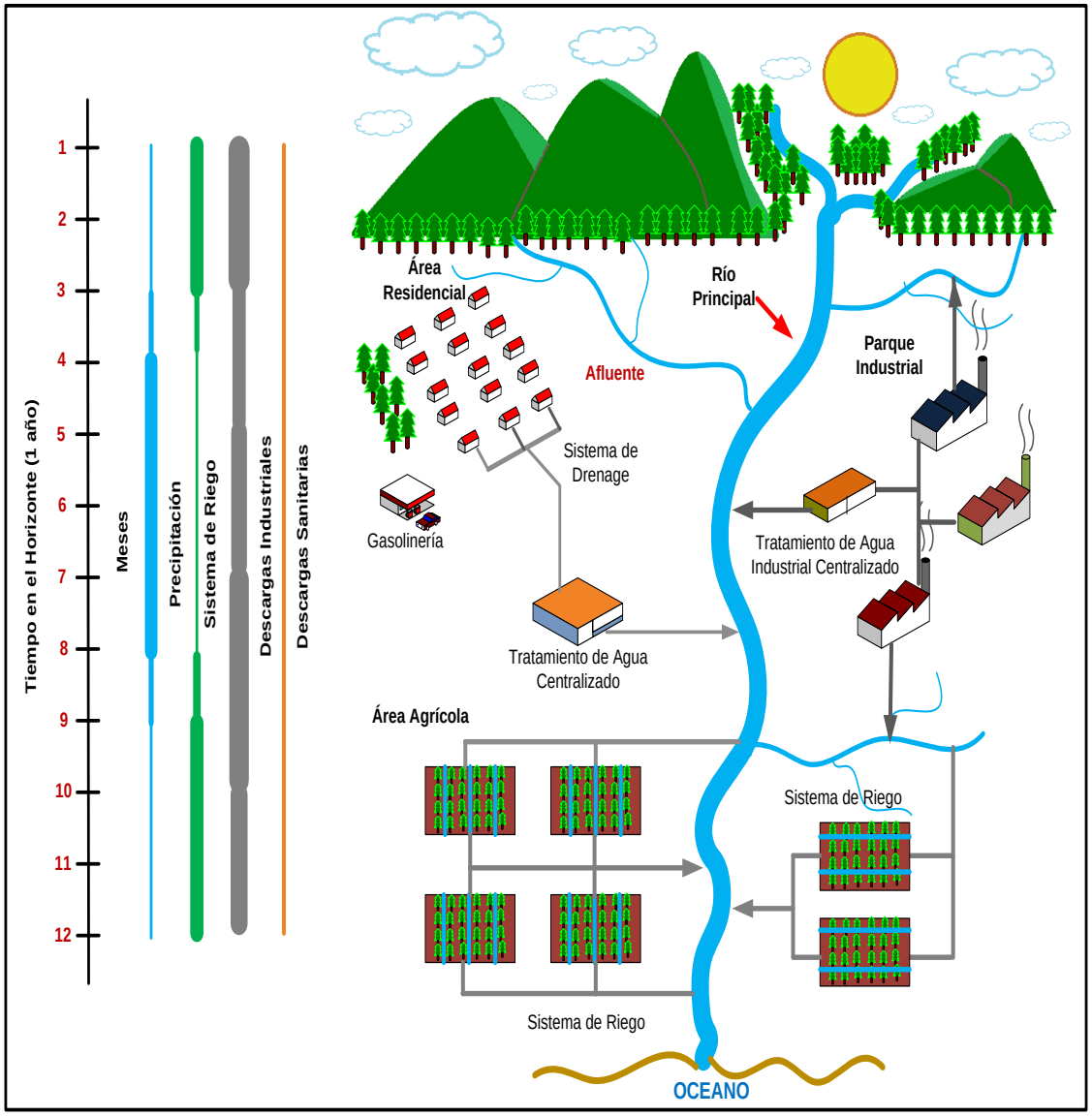

Figura 3.1 Definición esquemática para el problema abordado.

III.2 Formulación del Modelo.

En el modelo propuesto, el tiempo juega un papel muy importante debido a la variabilidad estacional de las entradas, salidas y los fenómenos de transformación de la cuenca. Para considerar estos efectos, se requieren ecuaciones diferenciales y para implementarlas en un enfoque de optimización se requiere un método de discretización. Los métodos de discretización producen grandes problemas algebraicos que hacen difícil su aplicación en un enfoque de optimización. En lugar de eso, en el presente trabajo un método de optimización multi-período se implementa para tener en cuenta las variaciones de las variables del sistema con respecto al tiempo. Varias formulaciones de optimización multi-periodo se han propuesto para el diseño y planificación de procesos *batch* (ver por ejemplo, Sahinidis y col., 1989; Paules y Floudas, 1992; Varvarezos y col., 1992; Papalexandri y Pistikopoulos, 1994; Dedopoulos y Shah, 1996; Sahinidis y Liu, 1996; Iyer y Grossmann, 1997; Iyer y Grossmann, 1998), que pueden ser usadas como referencias para desarrollar el modelo del problema en estudio en este trabajo.

La formulación del modelo multi-periodo para el tratamiento óptimo distribuido de los efluentes industriales descargados en la cuenca hidrológica propuesto en este trabajo está basado en la representación general mostrada en la **Figura 3.2**, donde el sistema es dividido en t periodos ($t = \{1 \ldots T\}$). Antes de presentar la formulación del modelo, los siguientes conjuntos son definidos: I representa el número de tramos de río, J representa el número de afluentes, L representa el número de contaminantes, X el número de unidades de tratamiento, W el número de descargas industriales y T es el horizonte de tiempo (es este caso hemos utilizado 12 meses). Para modelar la representación mostrada en la **Figura 3.2**, un modelo MFA en un marco multi-período es presentado; esto considera los cambios en todas las entradas y salidas del río principal y sus afluentes para cada período. El modelo toma en cuenta los fenómenos naturales de precipitación, filtración y evaporación; como es conocido estos fenómenos alteran significativamente la composición de los materiales transportados por la cuenca. Para proporcionar un seguimiento adecuado de los contaminantes, la cuenca se divide en secciones (llamados tramos) en el que la concentración media se considera constante (véase la **Figura 3.2**). El número de secciones depende del sistema en específico y se determina mediante la identificación de zonas de la cuenca donde el flujo promedio y las concentraciones permanecen constantes (por ejemplo, secciones donde afluentes con gran volumen cortan el curso principal). De acuerdo con este enfoque de

modelado, cada sección del río puede ser representada como un sistema de reactores CSTR interconectados en estado no estacionario.

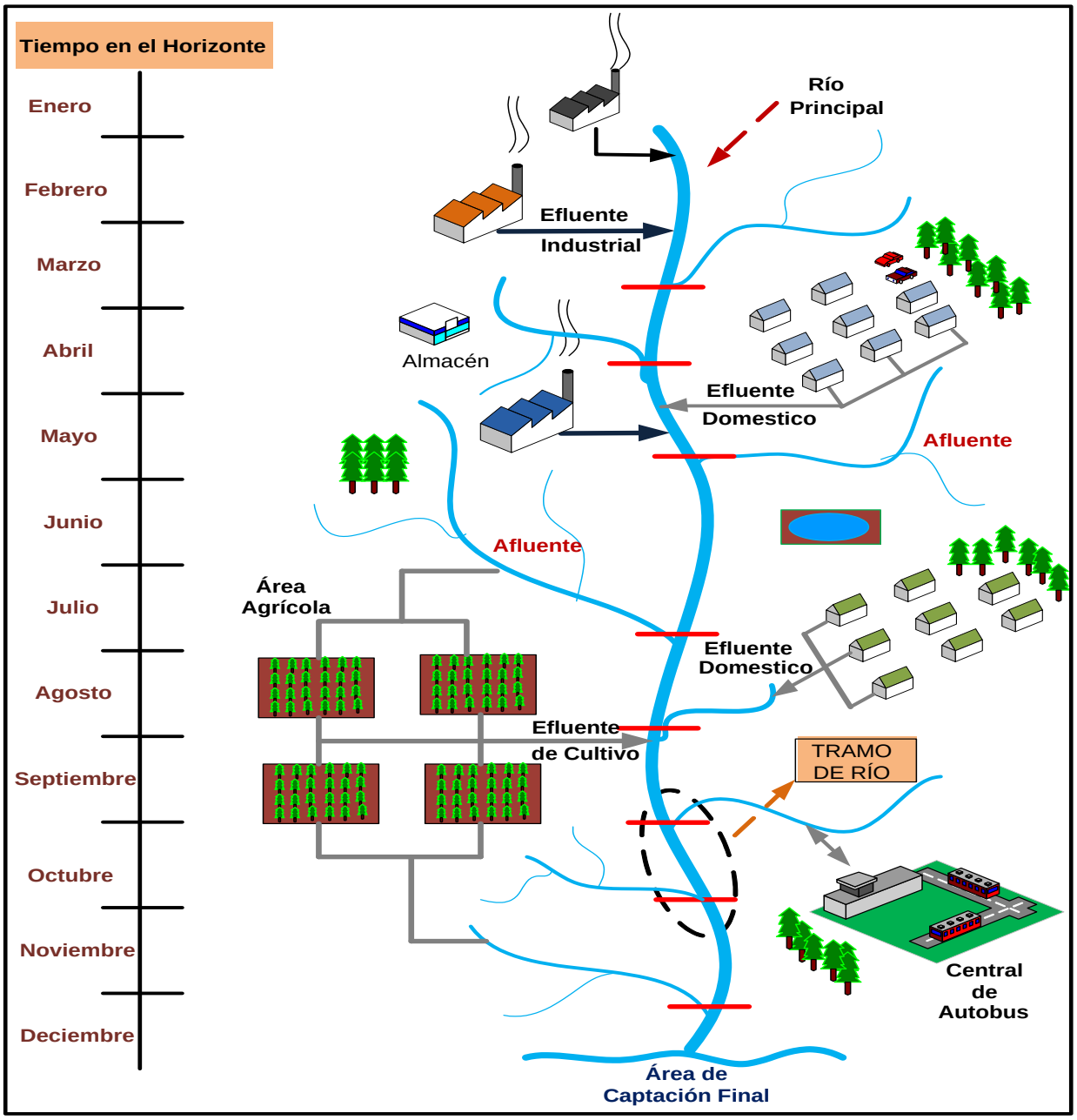

Figura 3.2 Representación del modelo para segregar la cuenca en diferentes secciones a través de un planteamiento MFA.

Para modelar la cuenca utilizando la representación mostrada en la **Figura 3.2**, las siguientes ecuaciones son utilizadas:

III.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río en cualquier periodo.

El flujo volumétrico de salida para cada tramo de río *i* $\left(Q_{i,t}\right)$ es igual a la acumulación que existe en el periodo anterior ($S_{i,t-1}$) más el flujo del tramo de río anterior $\left(Q_{i-1,t}\right)$, menos la acumulación en el periodo actual ($S_{i,t}$) más la suma de todos los efluentes industriales descargados en los tramo de río en este periodo $\left(\sum_{w=1}^{|W|} INDR_{i,t,w}\right)$, más las descargas directas $\left(D_{i,t}\right)$, más el flujo en el temporal de precipitaciones $\left(P_{i,t}\right)$, más la suma de todos los tributarios descargados en el tramo de río $\left(\sum_{j=1}^{N_{Efl,i}} ET_{i,j,t}\right)$, menos las pérdidas debido a los fenómenos naturales de filtración y evaporación $\left(L_{i,t}\right)$ y el uso de agua en cada tramo de río en el periodo actual $\left(U_{i,t}\right)$

$$Q_{i,t} = S_{i,t-1} + Q_{i-1,t} - S_{i,t} + \sum_{w=1}^{|W|} INDR_{i,t,w} + P_{i,t} + D_{i,t} + \sum_{J=1}^{N_{Eflu\,j}} ET_{i,j,t} - L_{i,t} - U_{i,t} \quad ,\forall i \in I, \forall t \in T \tag{3.1}$$

III.2.2 Balance por componente para cada tramo de río en cualquier periodo.

La cantidad de contaminante (*l*) que existe en cada tramo de río ($Q_{i,t-1} * CQ_{i,t-1}$) es igual a la masa acumula en cada tramo de río en el periodo anterior ($S_{i,t-1} * CQ_{i,t-1}$), menos la acumulación de contaminantes en el periodo presente ($S_{i,t} * CQ_{i,l,t}$) , más los contaminantes que entran del tramo anterior del río $\left(Q_{i-1,t} * CQ_{i-1,l,t}\right)$, más los contaminantes transportados por las precipitaciones ($P_{i,t} * P_{i,t}$), más las descargas directas ($D_{i,t} * CD_{i,l,t}$), más la masa de los contaminantes trasportados por las descargas industriales $\left(\sum_{w=1}^{|W|} INDR_{i,t,w} \times CINDRat_{i,l,t,w}\right)$, más la masa de los contaminantes transportada por los afluentes $\left(\sum_{i=1}^{N_{Efl,i}} ET_{i,j,t} \times CET_{i,j,l,t}\right)$, y

substrayendo las pérdidas por filtración y evaporación ($L_{i,t}$ * $CL_{i,l,t}$), el uso ($U_{i,t}$ *$CU_{i,l,t}$), y la masa que reacciona en el periodo actual en el correspondiente tramo de río $\left(\int_{V=0}^{V_i} r_{i,t} dV_{i,t}\right)$, se tiene:

$$Q_{i,t} \times CQ_{i,l,t} = S_{i,t-1} \times CQ_{i,l,t-1} - S_{i,t} \times CQ_{i,l,t} + Q_{i-1,t} \times CQ_{i-1,l,t} + P_{i,t} \times CP_{i,l,t} + D_{i,t} \times CD_{i,l,t} + \sum_{w=1}^{|W|} INDR_{i,t,w} \times CINDRat_{i,l,t,w}$$
$$+ \sum_{i=1}^{N_{Efl,i}} ET_{i,j,t} \times CET_{i,j,l,t} - L_{i,t} \times CL_{i,l,t} - U_{i,t} \times CU_{i,l,t} - \int_{V=0}^{V_i} r_{i,t} dV_{i,t}, \quad i \in I, \forall l \in L, \forall t \in T \tag{3.2}$$

III.2.3 Balance general de masa para los afluentes en cualquier periodo.

La velocidad de salida de cada afluente ($ET_{i,j,t}$) que se descarga en el río principal varia en los diferentes periodos, esto debido a las fluctuaciones de las diferentes descargas y usos con respecto del tiempo. Y este es igual a la sumatoria de los flujos de las descargas tratadas $\left(WS_{i,j,t}^{tratada}\right)$ y sin tratar$\left(WS_{i,j,t}^{\text{sin}\,tratar}\right)$, aguas residuales industriales$\left(\sum_{w=1}^{|W|} INDT_{i,j,t,w}\right)$, precipitaciones ($P_{i,j,t}$), descargas agrícolas ($D_{i,j,t}$), menos las perdidas debido a la evaporación y filtración ($L_{i,j,t}$) y el agua usada de cada afluente en cada periodo ($U_{i,j,t}$).

$$ET_{i,j,t} = WS_{i,j,t}^{\text{sin}\,tratar} + WS_{i,j,t}^{tratada} + \sum_{w=1}^{|W|} INDT_{i,j,t,w} + P_{i,j,t} + D_{i,j,t} - L_{i,j,t} - U_{i,j,t} \quad , \forall i \in I, j \in J, t \in T \tag{3.3}$$

III.2.4 Balance por componente en el afluente en cualquier periodo de tiempo.

Los contaminantes que salen de cada afluente en cualquier período ($ET_{i,j,t} \times CET_{i,j,l,t}$) son determinados por los contaminantes presentes en las descargas no tratadas y tratadas a cada afluente ($WS_{i,j,t}^{\text{sin tratar}} \times CWS_{i,j,l,t}^{\text{sin tratar}}$) y tratadas ($WS_{i,j,t}^{\text{tratada}} \times CWS_{i,j,l,t}^{\text{tratada}}$), en las descargas industriales $\left(\sum_{w=1}^{|W|} INDT_{i,j,t,w} \times CINDTat_{i,j,l,t,w}\right)$, en las precipitaciones ($P_{i,j,t} \times CP_{i,j,l,t}$), en las descargas directas

($D_{i,j,t} \times CD_{i,j,l,t}$), menos las pérdidas por filtración y evaporación ($L_{i,j,t} \times CL_{i,j,l,t}$), usos ($U_{i,j,t} \times CU_{i,j,l,t}$) y el consumo natural $\left(\int_{V=0}^{V_{i,j,t}} r_{i,j,l,t} dV_{i,j,t} \right)$ en el afluente para el periodo considerado:

$$ET_{i,j,t} \times CET_{i,j,l,t} = WS_{i,j,t}^{\text{sin tratar}} \times CWS_{i,j,l,t}^{\text{sin tratar}} + WS_{i,j,t}^{\text{tratada}} \times CWS_{i,j,l,t}^{\text{tratada}} + \sum_{w=1}^{|W|} INDT_{i,j,t,w} \times CINDTat_{i,j,l,t,w} + P_{i,j,t} \times CP_{i,j,l,t}$$

$$+D_{i,j,t} \times CD_{i,j,l,t} - L_{i,j,t} \times CL_{i,j,l,t} - U_{i,j,t} \times CU_{i,j,l,t} - \int_{V=0}^{V_{i,j,t}} r_{i,j,l,t} dV_{i,j,t}, \qquad \forall t \in T, \forall i \in I, \forall j \in J, \forall l \in L \qquad (3.4)$$

En la ecuación anterior, el termino $\left(\int_{V=0}^{V_{i,j,t}} r_{i,j,l,t} dV_{i,j,t} \right)$ es un expresión de reacción que representa la degradación natural de los contaminantes en cada tributario, que considera la cinética ($r_{i,j,l,t}$) así como el volumen en el afluente en cada período.

III.2.5 Descargas agrícolas y usos en cada período del tiempo de operación.

Las descargas agrícolas $D_{i,j,t}$ y usos $U_{i,j,t}$ son proporcionales al área agrícola que rodea la cuenca. Estas descargas y usos se calculan como sigue:

$$D_{i,j,t} = \lambda_{i,j,t} \times A_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J, t \in T \qquad (3.5)$$

$$U_{i,j,t} = \beta_{i,j,t} \times A_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J, t \in T \qquad (3.6)$$

Donde $\lambda_{i,j,t}$ es el caudal por unidad de área en m^3/acre s, que varía de acuerdo con el ciclo agrícola. $\beta_{i,j,t}$ es una parámetro para el flujo de agua del afluente *j* usado para riego, que depende de la estación de año y se da en unidades de m^3/acre s. Finalmente, $A_{i,j}$ es el área que cubre el afluente *j* en acres. Nótese que en los casos considerados en este trabajo, las relaciones lineales anteriores entre el agua descargada y utilizada y la zona agrícola correspondiente se basan en la experiencia y en informes estadísticos. (Ver referencias El-Baz y col., 2005a; 2005b; Lovelady y col., 2009; Lira-Barragán y col., 2011a; 2011b; Burgara-Montero y col., 2012; CONAGUA, 2011; SEMARNAT, 2011).

Además, el modelo propuesto es capaz de manejar diferentes tipos de funciones para relacionar las descargas de aguas residuales agrícolas y el agua utilizada en la actividad agrícola, incluyendo la posibilidad de modelar dichas descargas y usos en términos de datos (usados en el modelo como parámetros) que proceden de la información estadística presentada, o para incluir funciones más complicadas que correlacionan las descargas de aguas residuales agrícolas y los usos como funciones de la superficie agrícola, así como el tipo de cultivo, la ubicación, la técnica de riego, etc. (considerando las relaciones lineales o no lineales). Observe que las correlaciones lineales son más adecuados para la solución del problema de optimización en consideración, ya que requieren un menor número de parámetros; sin embargo, las relaciones no lineales pueden proporcionar resultados más precisos. Entonces, el tipo de correlación aplicada depende de la precisión requerida, así como de la información disponible, y que va a determinar la complejidad del problema MINLP multi-periodo correspondiente.

III.2.6 Diseño del sistema de tratamiento distribuido multi-periodo.

En las pasadas dos décadas, varias metodologías para el diseño óptimo de redes de uso de agua han sido reportadas (ver, por ejemplo, Wang y Smith, 1994; Kuo y Smith, 1997; Doyle y Smith, 1997; Galan y Grossmann, 1998; Alva-Argaez y col., 1998; 1999; Benko y col., 2000; Savelski y Bagajewicz, 2000; 2001; 2003; Hernandez-Suarez y col., 2004; Gunaratnam y col., 2005; Gabriel y El-Halwagi, 2005; Karuppiah y Grossmann, 2006; Teles y col., 2008; Putra y Amminudin, 2008; Ng y col., 2009; Ponce-Ortega y col., 2010; Nápoles-Rivera y col., 2010). En general, estas metodologías encuentran soluciones óptimas con configuraciones del tratamiento distribuidos, donde las corrientes de aguas residuales industriales pueden ser segregadas, recicladas y reutilizadas en el interior de la planta para reducir el costo de tratamiento asociado. Sin embargo, sólo la integración del agua en el interior de las instalaciones industriales se ha considerado, dejando de lado las interacciones que ocurren en la cuenca circundante con todos los efluentes descargados al ambiente. Tomando en cuenta este último aspecto, en este trabajo se propone un tratamiento macroscópico distribuido para los efluentes industriales para garantizar la sostenibilidad del sistema. Por lo tanto, una formulación de un sistema de tratamiento distribuido multi-periodo se ha desarrollado para determinar el tratamiento de las descargas industriales vertidos en los tramos de río y en los afluentes que garanticen la sostenibilidad del sistema macroscópico en todos los periodos del horizonte de tiempo.

Este modelo se establece a través de una formulación disyuntiva que permite la selección óptima de las tecnologías de tratamiento.

La **Figura 3.3** muestra la representación esquemática para el diseño del sistema de tratamiento distribuido de los efluentes industriales, donde cada efluente es segregado y enviado a las diferentes unidades de tratamiento disponibles para eliminar los contaminantes con diferentes costos de capital y operación y con capacidades diferentes para removerlos.

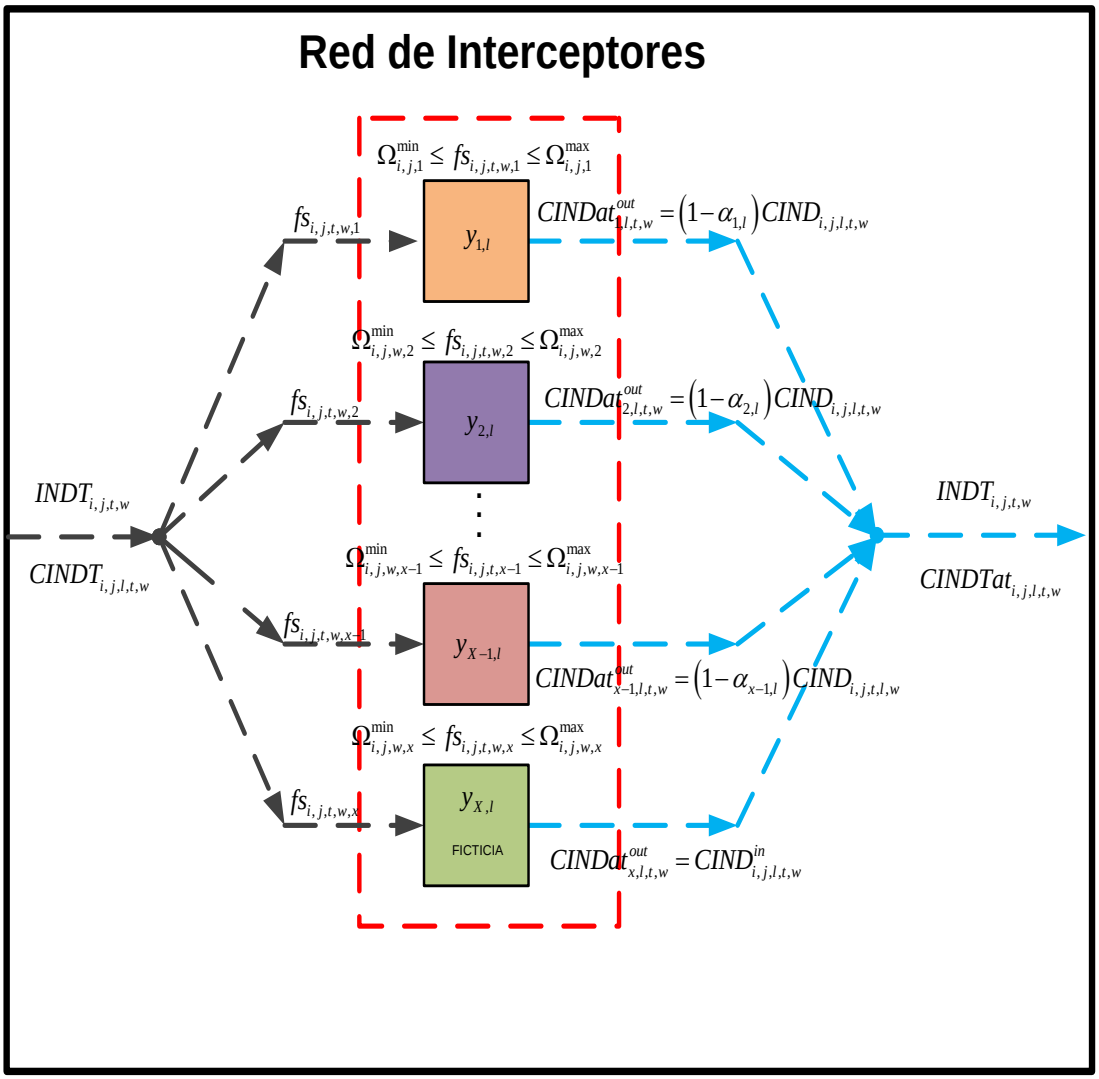

Figura 3.3 Representación esquemática para el tratamiento de efluentes industriales.

III.2.7 Tratamiento para los efluentes industriales descargados a los afluentes.

El problema consiste en determinar el flujo segregado de cada efluente industrial en cada periodo para ser tratados en cada unidad. Con esto el diseño del sistema de tratamiento distribuido es modelado a través de la siguiente disyunción, la cual está planteada para cada efluente industrial *w* descargado en los afluentes *j* en cada periodo *t*:

$$\begin{bmatrix} Y_{i,j,t,w} \\ INDT_{i,j,t,w} = \sum_{x \in X} fs_{i,j,t,w,x} \\ \sum_{x \in X} fs_{i,j,x,t,w} * (1 - \alpha_{x,l}) * CINDT_{i,j,l,t,w} = INDT_{i,j,t,w} * CINDTat_{i,j,l,t,w}, \forall l \in L \\ \begin{bmatrix} Z_{i,j,x,t,w} \\ fs_{i,j,x,t,w} \geq \Omega^{\min}_{i,j,w,x} \\ fs_{i,j,x,t,w} \leq \Omega^{\max}_{i,j,w,x} \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Z_{i,j,x,t,w} \\ fs_{i,j,x,t,w} = 0 \end{bmatrix}, \forall x \in X \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y_{i,j,t,w} \\ CINDTat_{i,j,l,t,w} = CINDT_{i,j,l,t,w} \\ fs_{i,j,x,t,w} = 0 \end{bmatrix}, \forall i \in I, \forall j \in J, \forall t \in T, \forall w \in W$$

En la disyunción anterior $CINDT_{i,j,l,t,w}$ es la concentración de los efluentes industriales descargados a los afluentes sin ningún tratamiento en cada periodo, mientras que $CINDTat_{i,j,l,t,w}$ es la concentración después del tratamiento. La variable Booleana $Y_{i,j,t,w}$ está asociada con los requerimientos de las unidades de tratamiento en un periodo dado. Si esta es verdadera las ecuaciones de diseño de la unidad de tratamiento se aplican. Por otro lado, si es falsa ($\neg\ Y_{i,j,t,w}$) no existe ninguna unidad de tratamiento y por lo tanto la concentración después del tratamiento es igual a la concentración de entrada. En la disyunción anidada la variable Booleana $Z_{i,j,x,t,w}$ está asociada con la existencia del flujo segregado en la unidad de tratamiento; cuando $Z_{i,j,x,t,w}$ es verdadera, el flujo segregado existe. El flujo segregado debe ser mayor a un límite inferior $\Omega^{\min}_{i,j,w,x}$ y menor a un límite superior $\Omega^{\max}_{i,j,w,x}$ para poder ser tratado.

Para poder modelar la disyunción anterior es necesario reformularla como un conjunto de ecuaciones algebraicas, en la cuáles las variables Booleanas son transformadas en variables binarias. De este modo, cuando la variable Booleana es verdadera, la variable binaria asociada toma el valor de uno, y cuando la variable Booleana es falsa, la variable asociada es igual con cero. Lo anterior se realiza utilizando la reformulación *convex hull* (ver Raman y Grossman, 1994; Ponce-Ortega y col., 2009) para obtener las siguientes ecuaciones:

Se segregan las variables continuas para cada disyunción como sigue:

$$CINDTat_{i,j,l,t,w} = CINDTat^{d1}_{i,j,l,t,w} + CINDTat^{d2}_{i,j,l,t,w}\ ,\ \ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.7}$$

Límites superiores son requeridos para las variables desagregadas:

$$CINDTat^{d1}_{i,j,l,t,w} \le CINDT_{i,j,l,t,w} \times y_{i,j,t,w}, \forall i \in I, \forall j \in J, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.8}$$

Entonces, las ecuaciones de cada disyunción se expresan en términos de las variables desagregadas:

$$y_{i,j,t,w} \times INDT_{i,j,t,w} = \sum_{x \in X} fs_{i,j,x,t,w},\ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.9}$$

$$\sum_{x \in X} fs_{i,j,x,t,w} \times (1-\alpha_{x,l}) \times CINDT_{i,j,l,t,w} = INDT_{i,j,t,w} \times CINDTat^{d1}{}_{i,j,l,t,w},\ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.10}$$

$$CINDTat^{d2}_{i,j,l,t,w} = CINDT_{i,j,l,t,w} \times (1-y_{i,j,t,w}),\ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.11}$$

Las ecuaciones para la disyunción anidada se expresan como sigue:

$$fs_{i,j,x,t,w} \ge \Omega^{\min}_{i,j,w,x} \times z_{i,j,x,t,w}\ , \forall i \in I, \forall j \in J, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.12}$$

$$fs_{i,j,x,t,w} \le \Omega^{\max}_{i,j,w,x} \times z_{i,j,x,t,w}\ ,\ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.13}$$

Las Ecuaciones (3.12) y (3.13) indican el flujo mínimo y máximo para los flujos segregados a tratar.

Para asegurar que cualquier tecnología de tratamiento puede ser utilizada sólo cuando se selecciona la localización para el tratamiento y se tomen en cuenta los costos de instalación es necesario colocar las siguientes relaciones lógicas:

$$(1-y_{i,j,t,w}) + \sum_{x} z_{i,j,x,t,w} \ge 1,\ \ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.14}$$

$$y_{i,j,t,w} + (1-z_{i,j,x,t,w}) \ge 1,\ \ \forall i \in I, \forall j \in J, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.15}$$

Observe que las dos últimas ecuaciones no son redundantes; la ecuación (3.14) se utiliza para modelar el caso cuando hay un sistema de tratamiento y la variable binaria asociada $y_{i,j,t,w}$ es igual a uno.

En este caso, al menos uno de las $z_{i,j,x,t,w}$ debe ser igual a uno para satisfacer la restricción dada por la ecuación (3.14). Además, la ecuación (3.15) se utiliza para modelar el caso cuando una unidad de tratamiento existe y la variable binaria asociada $z_{i,j,x,t,w}$ debe ser uno; entonces, el sistema de tratamiento debe instalarse en esta localización y la variable binaria correspondiente $y_{i,j,t,w}$ debe ser igual a uno, también. Si sólo consideramos la ecuación (3.14), cuando $z_{i,j,x,t,w}$ es igual a uno, entonces $y_{i,j,t,w}$ puede ser cero o uno, ya que en este caso no habría una restricción que defina $y_{i,j,t,w}$ como uno , lo que se realiza por la ecuación (3.15) del modelo propuesto. De manera similar, si la ecuación (3.14) se elimina del modelo y sólo se considera la ecuación (3.15), la siguiente situación podría ocurrir: si $y_{i,j,t,w}$ es uno, entonces $z_{i,j,x,t,w}$ puede ser cero o uno como la ecuación (3.15) no obliga a $z_{i,j,x,t,w}$ a tomar el valor de uno en este caso. Por lo tanto, estas relaciones no son redundantes por lo que ambas son necesarias en el modelo.

El costo fijo es independiente del tiempo, y los costos de capital dependen sólo de la capacidad máxima requerida para todos los períodos. Entonces, primero se requiere una nueva variable binaria para indicar que la unidad de tratamiento existe ($z^1_{i,j,x,w}$) si esto es necesario en al menos un período:

$$z^1_{i,j,x,w} \geq z_{i,j,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall j \in J, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.16}$$

Luego, para determinar el costo de capital asociado a la unidad de tratamiento, únicamente la capacidad máxima utilizada en todos los períodos $\left(fs^1_{i,j,x,w} \right)$ es considerada:

$$fs^1_{i,j,x,w} \geq fs_{i,j,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall j \in J, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.17}$$

III.2.8 Tratamiento para los efluentes industriales descargados en los tramos de río.

Respecto al diseño del sistema de tratamiento distribuido de efluentes industriales vertidos en los tramos de río, otra disyunción se necesita para cada efluente industrial *w* descargados en cada sección de la cuenca *i*.

Esta disyunción es similar a la utilizada para el tratamiento de los efluentes industriales, la diferencia está solamente en la ubicación de las descargas de los efluentes industriales. La superestructura utilizada para diseñar el sistema de tratamiento distribuido para los efluentes industriales descargados en los tramos de río se presenta en la **Figura 3.3**, y la disyunción correspondiente es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} YR_{i,t,w} \\ INDR_{i,t,w} = \sum_{x \in X} fsr_{i,t,w,x} \\ \sum_{x \in X} fsr_{i,x,t,w} * (1-\alpha_{x,l}) * CINDR_{i,l,t,w} = INDR_{i,t,w} * CINDRat_{i,l,t,w}, \forall l \in L \\ \begin{bmatrix} ZR_{i,x,t,w} \\ fsr_{i,x,t,w} \geq \Omega_x^{\min} \\ fsr_{i,x,t,w} \leq \Omega_x^{\max} \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg ZR_{i,x,t,w} \\ fsr_{i,x,t,w} = 0 \end{bmatrix}, \forall x \in X \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg YR_{i,t,w} \\ CINDRat_{i,l,t,w} = CINDR_{i,l,t,w} \\ fsr_{i,x,t,w} = 0 \end{bmatrix}, \forall i \in I, \forall t \in T, \forall w \in W$$

En la disyunción anterior $CINDR_{i,l,t,w}$ es la concentración de los efluentes industriales w descargados en los diferentes tramos de río i sin ningún tratamiento, y $CINDRat_{i,l,t,w}$ es la concentración correspondiente después del tratamiento. En la primera disyunción la variable Booleana $YR_{i,l,t,w}$ está asociada con la existencia de la unidad de tratamiento, si es verdadera, se aplican las ecuaciones de diseño asociadas a la unidad de tratamiento para los efluentes industriales descargados en los diferentes tramos de río, pero si es falsa ($\neg$ $YR_{i,j,t,w}$) no hay ninguna unidad de tratamiento, por lo tanto, $CINDR_{i,l,t,w}$ es igual con $CINDRat_{i,l,t,w}$. En la disyunción anidada la variable Booleana $ZR_{i,x,t,w}$ está asociada con la existencia del flujo segregado en la unidad de tratamiento, cuando $ZR_{i,x,t,w}$ es verdadera existe el flujo segregado.

Utilizando la reformulación del *convex hull* obtenemos las siguientes ecuaciones:

Las variables continuas son desagregadas para cada disyunción como sigue:

$$CINDRat_{i,l,t,w} = CINDRat_{i,l,t,w}^{d1} + CINDRat_{i,l,t,w}^{d2}, \quad \forall i \in I, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.18}$$

Limites superiores para las variables desagregadas son necesarios:

$$CINDRat_{i,l,t,w}^{d1} \leq CINDR_{i,l,t,w} \times yr_{i,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.19}$$

Entonces, las ecuaciones de cada disyunción son fijadas en términos de las variables segregadas:

$$yr_{i,t,w} \times INDR_{i,t,w} = \sum_{x \in X} fsr_{i,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.20}$$

$$\sum_{x \in X} fsr_{i,x,t,w} \times (1-\alpha_{x,l}) \times CINDR_{i,l,t,w} = INDR_{i,t,w} \times CINDRat^{d1}{}_{i,l,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.21}$$

$$CINDRat^{d2}_{i,l,t,w} = CINDR_{i,l,t,w} \times (1-yr_{i,t,w}), \quad \forall i \in I, \forall l \in L, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.22}$$

Las ecuaciones para la disyunción anidada son como sigue:

$$fsr_{i,x,t,w} \geq \Omega_x^{\min} \times zr_{i,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.23}$$

$$fsr_{i,x,t,w} \leq \Omega_x^{\max} \times zr_{i,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.24}$$

Las siguientes relaciones lógicas son necesarias para asegurarse de que cualquier tecnología de tratamiento puede ser utilizada sólo cuando se selecciona la ubicación para el tratamiento:

En primer lugar, cuando se selecciona un sitio para instalar una unidad de tratamiento, la variable binaria $yr_{i,t,w}$ es uno y por lo menos una tecnología $zr_{i,x,t,w}$ debe ser seleccionada; esto es modelado como sigue:

$$(1-yr_{i,t,w}) + \sum_x zr_{i,x,t,w} \geq 1, \quad \forall i \in I, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.25}$$

Además, cuando una tecnología se elige para tratar un efluente industrial descargado al afluente, la variable binaria asociada $zr_{i,x,t,w}$ es uno y luego una instalación de tratamiento debe ser instalado en esta ubicación y la variable binaria correspondiente $yr_{i,t,w}$ debe ser uno; esto es modelado como sigue:

$$yr_{i,t,w} + (1-zr_{i,x,t,w}) \geq 1, \quad \forall i \in I, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.26}$$

Observe que estas dos relaciones anteriores no son redundantes, y se aplica la misma explicación dada para las relaciones (3.14) y (3.15).

Para considerar los costos de capital asociados a la existencia de las unidades de tratamiento, si estas unidades se requieren en cualquier período (es decir, $zr_{i,x,t,w}$=1), entonces los costos de capital fijos deben ser considerado (es decir, $zr^{1}_{i,x,w}$=1); esto es modelado como sigue:

$$zr^{1}_{i,x,w} \geq zr_{i,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.27}$$

La siguiente relación es necesaria para determinar el flujo máximo tratado en cualquier período de tiempo y este caudal se usa para calcular el costo de capital correspondiente a las unidades de tratamiento:

$$fsr^{1}_{i,x,w} \geq fsr_{i,x,t,w}, \quad \forall i \in I, \forall x \in X, \forall t \in T, \forall w \in W \tag{3.28}$$

III.2.9 Función objetivo.

El modelo es formulado como un problema de optimización multi-objetivo en un esquema multi-periodo para la minimización simultanea del costo total anual y la concentración final de los componentes peligrosos descargados en la disposición final del río de la siguiente manera:

$$OF = \{\min TAC; \min CQ^{dis}\} \tag{3.29}$$

Estos dos objetivos se contradicen entre sí, dicho de otra manera, cuando la concentración en la disposición final decrece, el costo total anual por tratar los efluentes industriales incrementa; mientras que cuando la concentración de descarga en la disposición final se relaja, el costo total anual decrece. Las restricciones impuestas a la disposición final deben cumplirse en todos los períodos de tiempo, sin embargo, debido a que las descargas y los usos varían en cada período, el caudal tratado puede variar entre los diferentes períodos y esto se debe optimizar simultáneamente. El costo total anual es la suma de los costos de capital y de operación para las unidades de tratamiento en el sistema de tratamiento distribuido utilizado a través de todo el horizonte de tiempo. Por lo tanto, el costo total anual se expresa como sigue:

$$TAC = k_f \times \left(\sum_{i\in I}\sum_{j\in J}\sum_{x\in X}\sum_{w\in W}\left[FC_x \times z^1_{i,j,x,w} + VC_x \times fs^{1}_{i,j,x,w} \right]^{\gamma} + \sum_{i\in I}\sum_{x\in X}\sum_{w\in W}\left[FC_x \times zr^1_{i,x,w} + VC_x \times fsr^{1}_{i,x,w} \right]^{\gamma} \right)$$
$$+ H_Y \times \left(\sum_{i\in I}\sum_{j\in J}\sum_{x\in X}\sum_{t\in T}\sum_{w\in W} Cu^{op}_x \times fs_{i,j,x,t,w} + \sum_{i\in I}\sum_{x\in X}\sum_{t\in T}\sum_{w\in W} Cu^{op}_x \times fs_{i,x,t,w} \right) \quad (3.30)$$

En la ecuación anterior, *TAC* es el costo total anual (US$/año), que incluye el costo de capital para las unidades de tratamiento necesarias para el tratamiento de los efluentes industriales vertidos en los afluentes y en los tramos de río más los costos de operación demandado por las unidades de tratamiento para todos los períodos. k_f es el factor utilizado para anualizar los costos de capital (año^{-1}), H_Y es el número de horas de funcionamiento para cada período (horas/periodo), FC_x es el costo fijo unitario y VC_x es el costo variable unitario para el interceptor *x*, Cu^{op}_x es el costo unitario para la operación de las unidades de tratamiento *x* y finalmente γ es un exponente que se utiliza para considerar el efecto de las economías de escala.

Para resolver este problema de optimización multi-objetivo, el método *constraint* se utiliza en este trabajo (para los detalles sobre el método *constraint* ver el libro de Diwekar (2008)) para determinar el conjunto de soluciones óptimas Pareto. La estrategia básica de este método consiste en convertir el problema multi-objetivo en una serie de problemas con un único objetivo, seleccionando una como función objetivo (en este caso, el *TAC*) y la otra es incluida en las restricciones del modelo como un límite superior (en este caso la concentración de descarga CQ^{dis} en la disposición final). El procedimiento de cálculo se repite para varios posibles límites superiores de la concentración final del contaminante clave en el área de captación final. Esta estrategia permite la identificación del costo más bajo para una concentración dada superior en la disposición final y, al mismo tiempo, es capaz de determinar el número de unidades de tratamiento requeridas, así como los flujos tratados en cada período.

III.3 Resultados y discusiones.

Se presentan dos casos de estudio para mostrar la aplicación del modelo propuesto; los cuales son resueltos como problemas MINLP utilizando el resolvedor SBB incluido en el software GAMS (Brooke y col., 2011) usando una computadora con un procesador i7-3520M a 2,9 GHz y 8 GB de RAM.

El primer caso de estudio considera dos componentes claves y corresponde al drenaje Bahr El-Baqar localizado en Egipto. El segundo caso de estudio también considera dos componentes para la cuenca del Balsas, que es ubicada en la parte suroeste de México. El proceso de optimización , dependerá de los contaminantes a ser removidos, varias unidades de tratamientos con configuraciones dadas y condiciones de operación fueron simuladas para determinar la eficiencia de remoción, así como los costos de capital y costos unitarios de operación. Los dos casos de estudio se presentan a continuación:

III.3.1 Caso de Estudio 1.

El lago Manzala es un lago poco profundo de agua turbia, de aproximadamente 1000 km^2 ubicado en el extremo nororiental del Delta de Nilo y separado del Mar Mediterráneo únicamente por una cresta arenosa de playa. El agua contaminada por las actividades agrícolas, domesticas e industriales es transportada por el Drenaje Bahr El-Bar (ver **Figura 3.4**) y este desemboca en la parte sur del Lago Manzala, lo que ha provocado impactos negativos a la salud humana, a las actividades económicas tales como la pesquera, la cría de ganado y la explotación agrícola. Fosforo y azufre son los contaminantes claves considerados, los cuales son descargados en el drenaje Bahr El-Baqar y este a su vez los transporta hasta el sistema macroscópico del lago Manzala. Estos contaminantes proveen las condiciones para el incremento exponencial de biomasa disminuyendo así la concentración de oxígeno disuelto provocando eutrofización en los cuerpos de agua. Las descargas varían de periodo en periodo a lo largo del tiempo de operación el cual es de un año, cada periodo (en este caso un mes) es caracterizado con diferentes flujos y diferentes concentraciones de descarga , provenientes de las diferentes actividades desarrolladas a lo largo del drenaje.

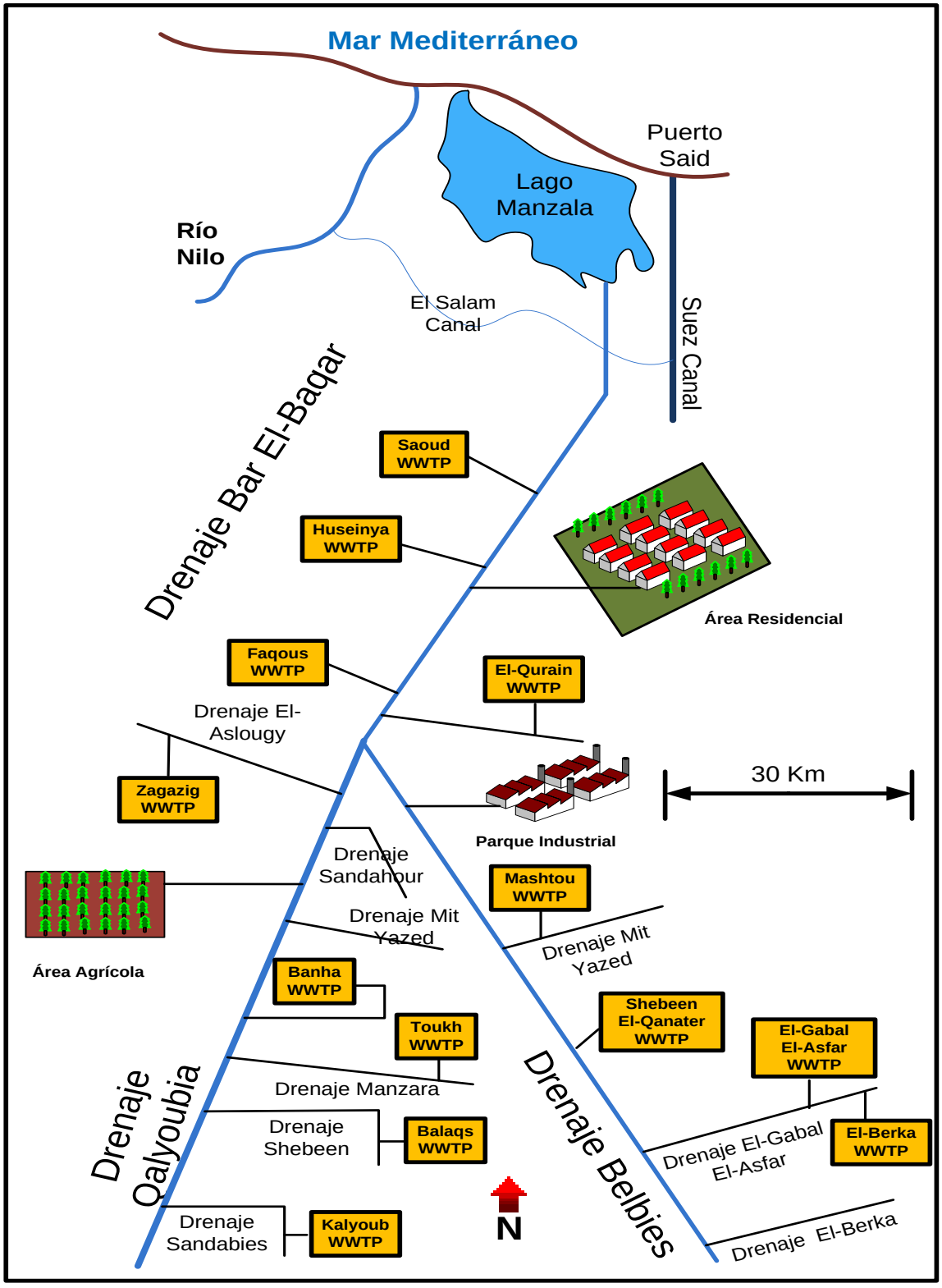

Figura 3.4 Sistema de Drenaje Bahr El-Baqar.

Las características del drenaje Bahr El-Baqar de cada periodo se usaran como parámetros de entrada para el modelo MINLP multi-periodo descrito en este trabajo. El sistema de tratamiento distribuido que existirá en cada periodo se colocará a lo largo del drenaje para remover los contaminantes y así ayudar a minimizar la concentración de descarga en el área de disposición final. La concentración inicial en el área de captación final para el contaminante A y B (fosforo y azufre) son 2.193 y 1.955 ppm, respectivamente (Lovelady y col., 2009). La **Tabla 3.1** muestra los datos para los interceptores considerados en este caso de estudio.

Tabla 3.1. Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio1.

Interceptor	**Costo fijo unitario, US$**	**Costo variable unitario, US$ /m^3**	**Eficiencia para el componente 1** α_1	**Eficiencia para el componente 2** α_2	**Costo de operación unitario,US$ /m^3**
1	2,000	0.235	0.8	0.65	1.67E-3
2	1,500	0.193	0.9	0.7	1.3E-3
3	1,300	0.168	0.55	0.75	0.89E-3
4	0	0	0	0	0

La concentración a la disposición final debe ser menor que la que naturalmente el sistema es capaz de degradar para evitar la acumulación de contaminantes en el sistema asegurando su sostenibilidad. Sin tratamiento, teniendo en cuenta los vertidos y usos diferentes a través del horizonte, los contaminantes no se pueden eliminar naturalmente, puesto que la concentración real excede la capacidad de auto depuración. De esta manera, el método propuesto es implementado para resolver este problema, que consiste de 27,753 variables discretas, 66,534 variables continuas y 126,149 restricciones.

El enfoque consiste entonces en determinar el conjunto óptimo de soluciones de Pareto que compensan ambos objetivos (*TAC y* CQ^{dis} para cada contaminante considerado). Para determinar las soluciones de Pareto, el método *constraint* es implementado (Diwekar, 2008), y las curvas diferentes para los contaminantes considerados se presentan (nótese que cada solución satisface las restricciones ambientales a través de la cuenca de ambos contaminantes considerados). La solución del problema MINLP para cada punto de la curva Pareto consume un promedio de 16 minutos.

En primer lugar, la curva de Pareto para el costo asociado de una concentración dada de contaminante A en la descarga final es determinada (ver **Figura 3.5**). Cada punto de la curva Pareto indica el número de unidades de tratamiento (*ZTOT*) usadas a través del tiempo de operación (12 meses) incluyendo el flujo total tratado (*FTOT*) y el costo total anual correspondiente. Nótese en la **Figura 3.5** que los objetivos *TAC* y CQ^{dis} se contradicen entre sí, es decir, restringir la concentración de descarga requiere más unidades de tratamiento y esto se refleja con un incremento significativo del costo total anual. Así también, en la **Figura 3.5** la solución más estricta del ambiente (que se encuentra en el lado izquierdo) requiere 18 unidades adicionales de tratamiento y se trató un flujo total de 8.24 m^3/s mayor que la solución ambiental más relajada para el componente A en el área de captación final (situado en el lado derecho). Observe también en esta **Figura 3.5** que para una reducción de 1,893 ppm a 1,845 ppm de contaminante A en la disposición final, 4 unidades de tratamiento adicionales son necesarios junto con un incremento de 34.4% en el flujo total a tratar, lo que representa un incremento de US$142,350/año en el *TAC*. Mientras que para una reducción de la concentración en el área de captación final del contaminante A de 2.193 ppm a 2.043 ppm, sólo 4 unidades de tratamiento adicionales son necesarias con un incremento en el caudal total a tratar de 2.2 m^3/s, que corresponde a un incremento de US$46,467/año en el *TAC*. Por lo tanto, esta curva mostrada en la **Figura 3.5** puede ser útil para seleccionar la mejor solución que balancee los objetivos considerados.

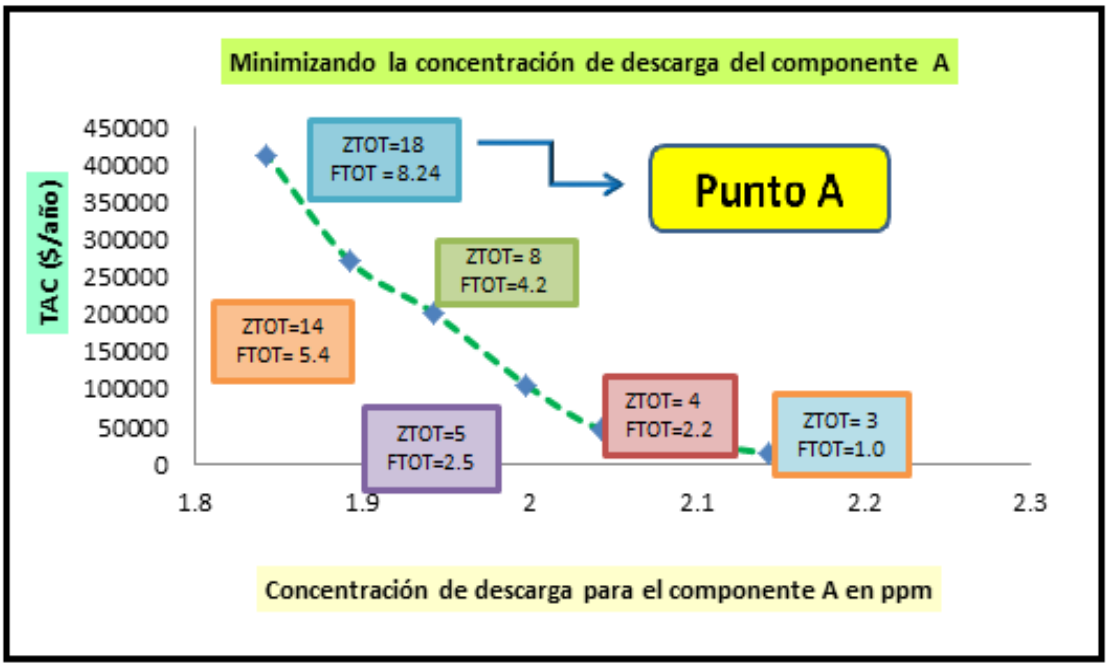

Figura 3.5 Curva Pareto para el caso de estudio1 restringiendo componente A.

Como ejemplo, la **Figura 3.6** muestra la configuración para el sistema de tratamiento distribuido (Punto A) requerida para satisfacer una restricción de $CQ^{dis} \geq 1.843$ ppm en términos de la concentración de descarga en el área de captación final del componente A. Aquí el costo total anual asociado es de US$ 413,850/año y el número total de unidades de tratamiento requeridas son 18 (de las cuales 10 son interceptores tipo uno, 4 son interceptores tipo dos y 4 son interceptores tipo tres, con las eficiencias y costos correspondientes indicados en la **Tabla 3.1**). Además, el flujo total a tratar en todos los períodos es 8.241 m^3/s, por lo que hay que destacar que en este caso 95% de los efluentes tratados son descargadas en los tramos de río en lugar que los que descargan a los afluentes. Nótese que los efluentes tratados se distribuyen a lo largo de la cuenca para satisfacer las restricciones impuestas a través de la cuenca en función de diversos usos del agua.

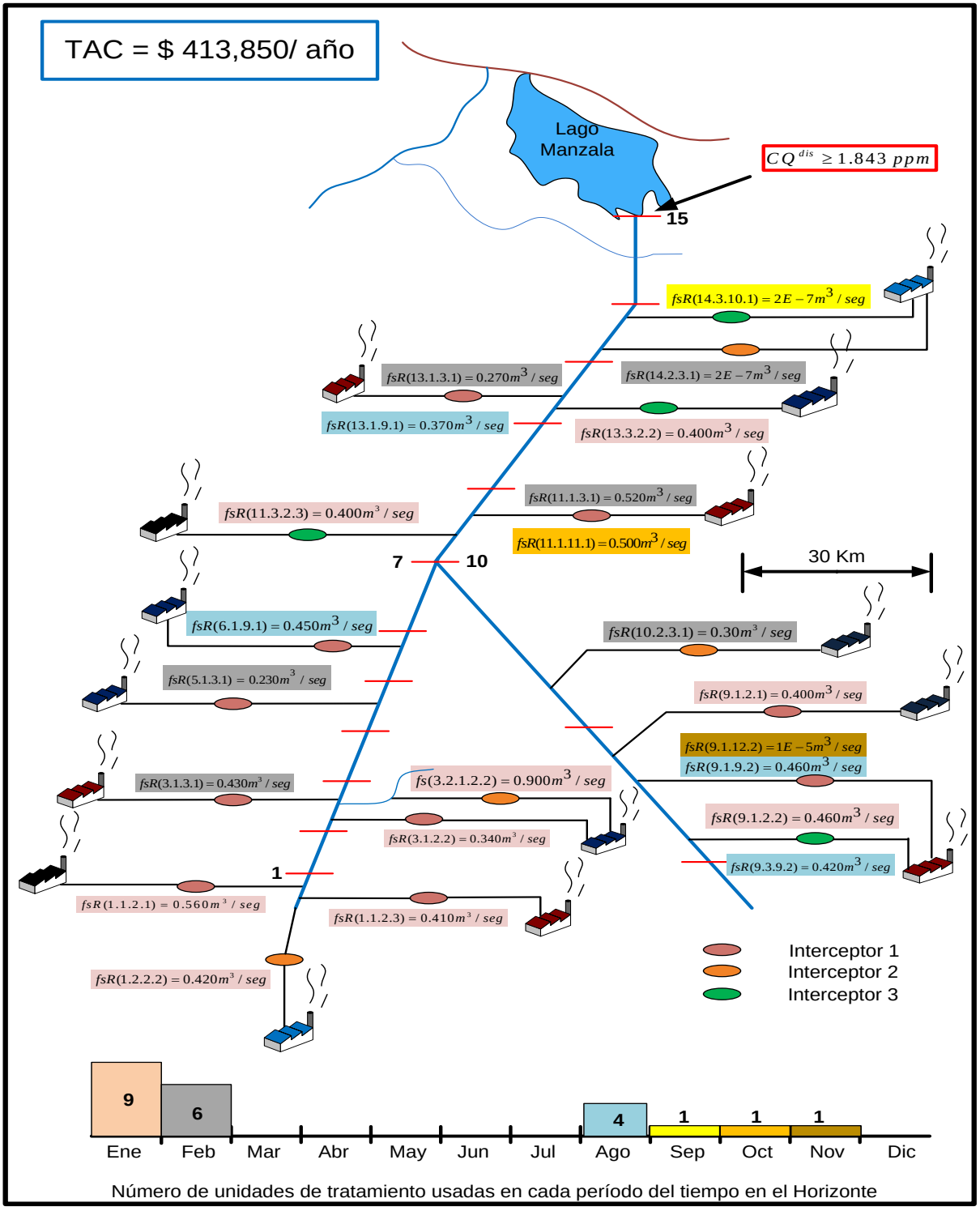

Figura 3.6 Sistema de tratamiento distribuido multi-periodo para una concentración de descarga del componente A. $CQ^{dis} \geq 1.843$ ppm.

Por otro lado, la curva de Pareto para el balance *TAC* y CQ^{dis} relacionada al componente B y que cumpla las restricciones ambientales respecto a los componentes A y B a través de la cuenca se presenta en la **Figura 3.7**. Donde la concentración inicial del componente B descargada en el área de captación final en las condiciones iniciales es 1,955 ppm. Misma que para reducirse demanda la instalación de un sistema de tratamiento distribuido a lo largo del drenaje considerando la variabilidad durante el año. Véase que cada punto de la curva de Pareto de la **Figura 3.7** representa el costo anual total correspondiente generado por el número total de unidades de tratamiento (*ZTOT*) instalados a lo largo de la cuenca y el caudal total de aguas residuales industriales tratadas (*FTOT*) durante el horizonte de tiempo. Nótese en la **Figura 3.7** que la solución más estricta del ambiente (que se encuentra en el lado izquierda) representa 16 unidades de tratamiento para tratar 7.65 m^3/s para una concentración del componente B en el área de captación final de 1.595 ppm. La solución para una concentración del componente B en el área de captación final de 1.64 ppm requiere seis unidades de tratamiento menos; también el caudal tratado disminuye 21% dando una reducción en el *TAC* de 48%. Además, para disminuir la concentración del componente B en el área de captación final de 1,955 ppm a 1,79 ppm sólo 5 unidades de tratamiento son necesarios para manejar un caudal total de 2.442 m^3/s, produciendo un costo total de US$ 68,759/año. De esta manera, la curva de Pareto mostrada en la **Figura 3.7** puede ser útil para el inversionista, de tal forma que le permita elegir la solución que mejor compense los objetivos considerados.

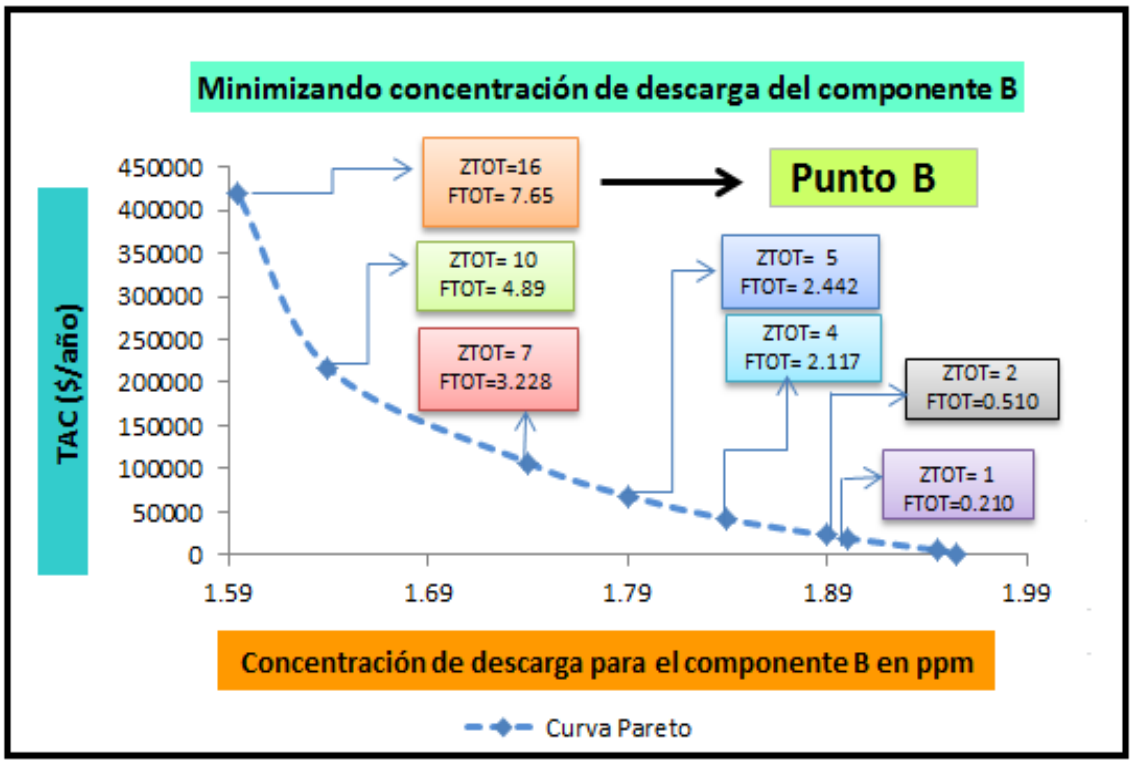

Figura 3.7 Curva de Pareto para el caso de estudio 1 restringiendo el componente B.

Como ejemplo adicional, a partir de la curva de Pareto mostrada en la **Figura 3.7** se ha seleccionado el punto en el que se tiene una concentración de descarga del componente clave B de $CQ^{dis} \geq 1.595$ ppm (Punto B). Tal punto representa esquemáticamente la configuración del sistema de tratamiento distribuido obtenido para satisfacer esta restricción durante todo el tiempo de operación. La **Figura 3.8** muestra el sistema de tratamiento distribuido, que consta de 16 unidades de tratamiento con diferentes eficiencias de eliminación (una de tipo 1, catorce de tipo 2 y una de tipo 3) distribuidas a lo largo de la cuenca a través de las cuales se trata un flujo total de 7.65 m^3/s, lo que representa un costo total anual de US$418,420/año. Observe que el número de unidades de tratamiento para este caso es menor que el primer caso en el que la concentración del componente A se redujo, pero el costo asociado es similar.

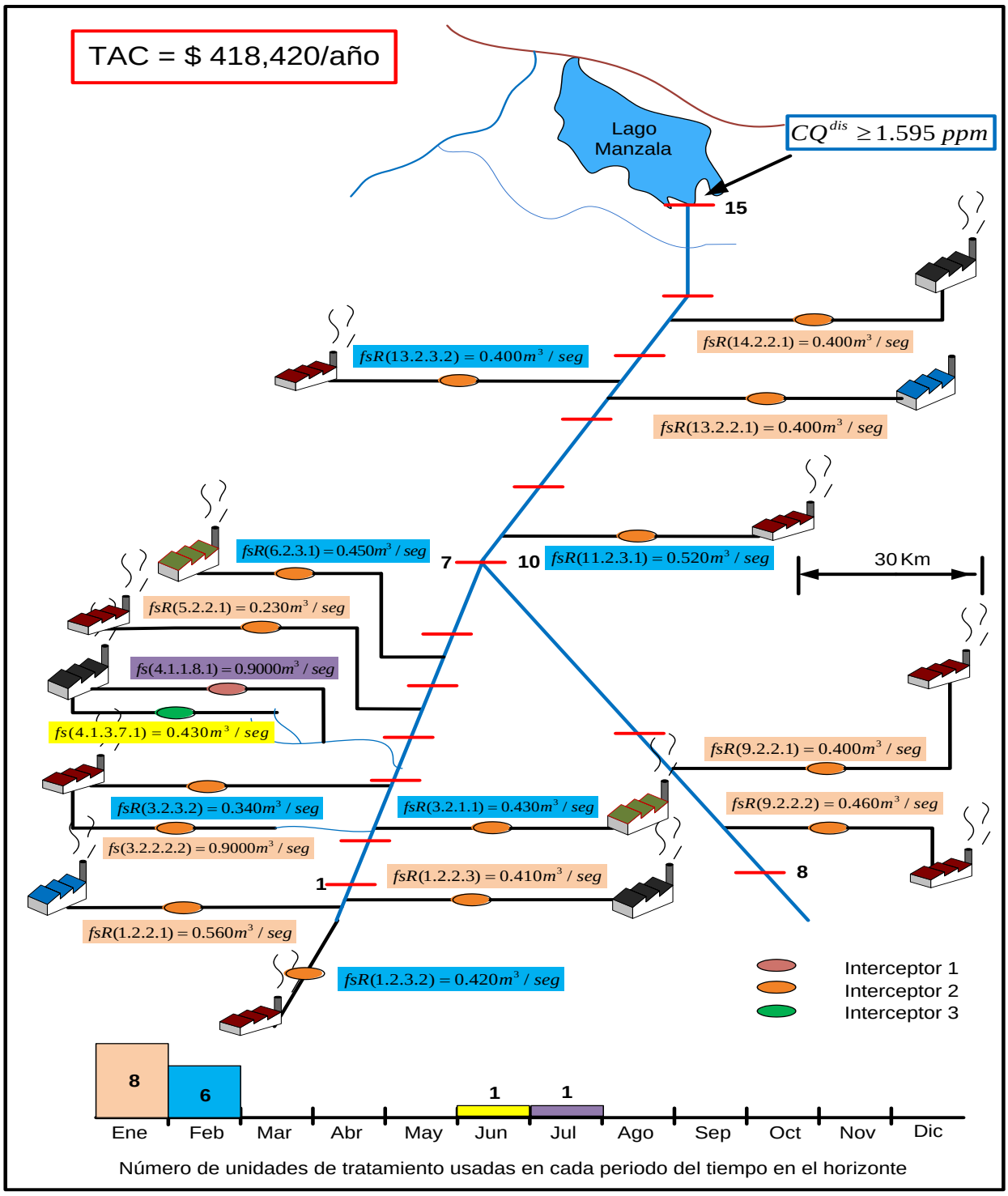

Figura 3.8 Sistema de tratamiento distribuido multi-periodo para una concentración de descarga del componente B. $CQ^{dis} \geq 1.595$ ppm.

III.3.2 Caso de Estudio 2.

La cuenca del río Balsas (CONAGUA, 2011) es una de las más extensas e importantes de México, su superficie es de aproximadamente 112,320 km^2, constituye una depresión con dirección este-oeste en la parte centro sur de México. En este trabajo el manejo de la cuenca del Balsas se hizo dividiendo a este en tres regiones denominadas como Alto Balsas, Medio Balsas y Bajo Balsas. Para este caso de estudio la parte de la cuenca hidrológica que se caracterizo fue el medio balsas (**Figura 3.9**) debido a que corresponde al lugar donde se realizan más actividades industriales. El modelado del sistema se realizó tomando en cuenta las entradas más importantes, las corrientes de salida y la variación respecto a la temporada del año. En la actualidad, la cuenca del Balsas está muy contaminada debido a que varios efluentes industriales se vierten al sistema sin un tratamiento adecuado, lo que reduce su capacidad de auto-purificación y permite la acumulación de contaminantes. Esto tiene graves efectos sobre la flora y la fauna, así como en la calidad de vida de las ciudades de los alrededores. Las aguas residuales de las actividades industriales contiene varios tipos de contaminantes (minerales, orgánicos, metales pesados, etc.). Al respecto en este trabajo dos componentes son considerados; los cuales corresponden a metales pesados. El cadmio es el componente 1 (componente clave 1) mientras que el componente dos corresponde al mercurio (componente clave 2). Estas sustancias son muy tóxicas y difíciles de eliminar de forma natural, y se acumulan fácilmente en el tejido de los organismos vivos del ecosistema. Además, pasan de un organismo a otro en la cadena de alimentación aumentando su concentración en cada enlace, alcanzando los niveles más altos en los extremos de la cadena (humano) y causando daños irreversibles a la salud humana. El propósito de este ejemplo es determinar la configuración óptima para el sistema de tratamiento distribuido de los efluentes industriales que permita reducir el nivel de contaminantes en la cuenca con el mínimo costo posible.

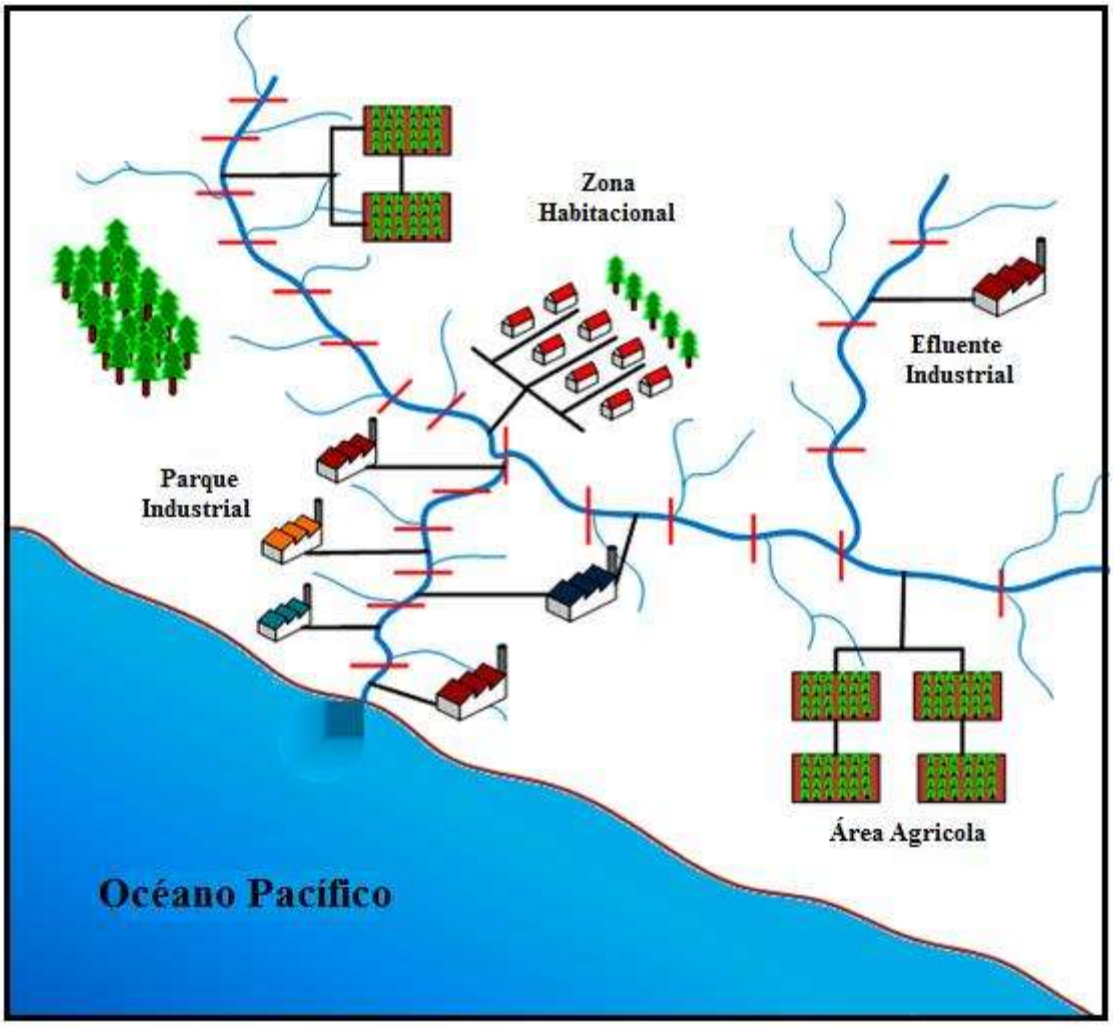

Figura 3.9 Parte media de la cuenca del Balsas (considerado en el caso de estudio 2).

La **Tabla 3.2** muestra los datos de las unidades de tratamiento consideradas en este ejemplo, que incluyen los costos unitarios fijos y variables de capital, la eficiencia para eliminar los contaminantes y el costo unitario de operación. La interacción química entre los contaminantes y el ambiente está representado por una reacción de primer orden con constantes de velocidad de $k_1 = 0.9541909\text{E}-5/\text{s}$ y $k_2 = 0.9832452\text{E}-5/\text{s}$ para los contaminantes clave 1 y 2, respectivamente. Además, el factor utilizado para anualizar los costos de capital k_f es 0.1 año^{-1}.

Las concentraciones de descarga en el área de captación final de los principales contaminantes en las condiciones iniciales (t = 0) son 29.448 ppm y 35.946 ppm para el componente 1 y 2, respectivamente. Cabe señalar que estas concentraciones cambian a través de los diferentes periodos del horizonte de tiempo.

Tabla 3.2 Datos para los interceptores considerados en el caso de estudio 2.

Interceptor	Costo fijo unitario, US$	Costo variable unitario, US$/m^3	Eficiencia para el contaminante 1 α_1	Eficiencia para el contaminante 2 α_2	Costo de operación unitario, US$ /m^3
1	1950	0.50	0.95	0.65	1.7E-3
2	0	0	0	0	0

La información proporcionada por CONAGUA (2011) en torno a las precipitaciones, descargas industriales, descargas domésticas y agrícolas, la evaporación y la filtración de cada mes se utilizan como datos de entrada para el modelo MINLP propuesto, que consiste en 31,119 variables binarias, de 116,379 variables continuas y 203,648 restricciones. El tiempo consumido en generar un punto en la curva Pareto es de 10,076 segundos. A fin de mostrar las potencialidades del modelo propuesto y analizar el problema desde diferentes perspectivas, se presentan tres escenarios para observar el comportamiento del modelo propuesto. Mismos que son presentados a continuación:

El primer escenario consiste en minimizar la concentración del componente 1 y dejar libre la concentración del componente 2 en el reservorio final. La curva Pareto obtenida para este escenario se muestra en la **Figura 3.10** donde cada punto representa el *TAC* que se genera por la instalación de las unidades de tratamiento necesarias para satisfacer las restricciones impuestas. Nótese que en la parte izquierda de la **Figura 3.10** cuando la concentración de descarga es más estricta, más unidades de tratamiento son necesarias, aumentando considerablemente el costo total anual. Mientras que en el lado derecho de la **Figura 3.10**, las concentraciones de descarga están relajadas y un menor número de unidades de tratamiento son necesarios, disminuyendo de esta manera el costo total anual.

Note que en la parte derecha de la **Figura 3.10** se tiene una sección donde la concentración disminuye significativamente, pero el incremento en el *TAC* no es significativo. Por otro lado, en el lado derecho de la **Figura 3.10** el *TAC* aumenta drásticamente por pequeñas disminuciones de la concentración del contaminante 1 en la descarga final.

El segundo escenario consiste en minimizar la concentración del componente 1 y fijar un límite superior para la concentración del componente 2 en el área de disposición final, (es decir, $CQ^{dis} \geq 25$ ppm). La **Figura 3.10** muestra las curvas de soluciones óptimas para satisfacer estas limitaciones; como se puede observar, el costo asociado es significativamente mayor que el correspondiente al escenario 1**.** Por ejemplo, para una concentración de componente 1 de 18 ppm (correspondiente a una concentración del componente 2 de 29 ppm), 33 unidades de tratamiento son necesarias para cumplir esta restricción y el flujo total tratado es de 284 m^3/s, lo que representa un costo total anual de US$1.61 MM/año. Respecto al segundo escenario, la concentración del componente 1 es 15 ppm y la del componente 2 es de 25 ppm; para satisfacer esta restricción, 44 unidades de tratamiento se emplean con un flujo total a tratar de 330.5 m^3/s, y el costo total anual para esta configuración es de US$1.71 MM/año. Este último es 6% más costoso que el del primer escenario.

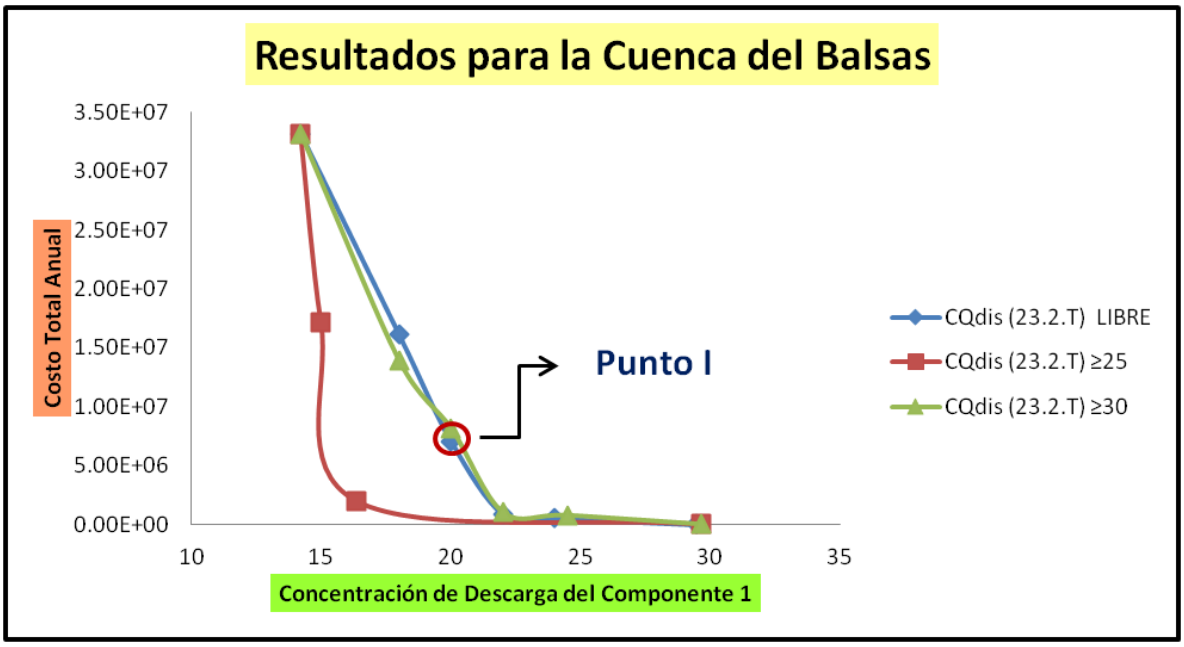

Figura 3.10. Curvas Pareto para los escenarios situados en el Balsas

El tercer escenario consiste en minimizar la concentración del componente 1 y fijar el límite superior para la concentración del componente 2 en el área de captación final de $CQ^{dis} \geq 30$ ppm. Nótese que esta restricción en torno al componente 2 es más relajada en el escenario 3 en comparación con el escenario 2.

Es de destacar que la curva Pareto que representa al escenario 3 es similar a la correspondiente al escenario 1, esto es porque la restricción correspondiente para el componente 2 no se activa debido a las limitaciones estrictas sobre el componente 1. Cabe señalar que en la **Figura 3.10** cuando se tienen restricciones más estrictas de la concentración de contaminantes en la zona de captación final, las unidades de tratamiento adicionales que son necesarias, a su vez, producen costos totales anuales más altos; Además, este costo aumenta de forma exponencial con respecto a la reducción de la concentración en la zona de captación. De esta manera, la curva de Pareto mostrada en la **Figura 3.10** puede ser útil para el inversionista a fin de que pueda elegir la solución que mejor compensa los objetivos opuestos.

El **punto I** tomado de la curva de la **Figura 3.10** se obtuvo del tercer escenario y la configuración correspondiente del sistema de tratamiento se muestra en la **Figura 3.11**, en la cual se satisfacen las concentraciones de descarga de los componentes 1 y 2, respectivamente. Aquí, la concentración de descarga para el componente 1 es de 20 ppm y para el componente 2 es de 30 ppm; y la satisfacción de las restricciones demanda 21 unidades de tratamiento, de las cuales 17 unidades de tratamiento se utilizan para tratar los efluentes descargados en los afluentes y sólo 4 unidades de tratamiento se utilizan para tratar efluentes que se descargan en los tramos de río y el flujo total tratado es de 137 m^3/s, generando un *TAC* de US$ 8.14 MM/año. Observe que en la **Figura 3.11**, el flujo tratado cambia en los diferentes períodos del año, debido a que las concentraciones y volúmenes descargados también varían en los diferentes períodos.

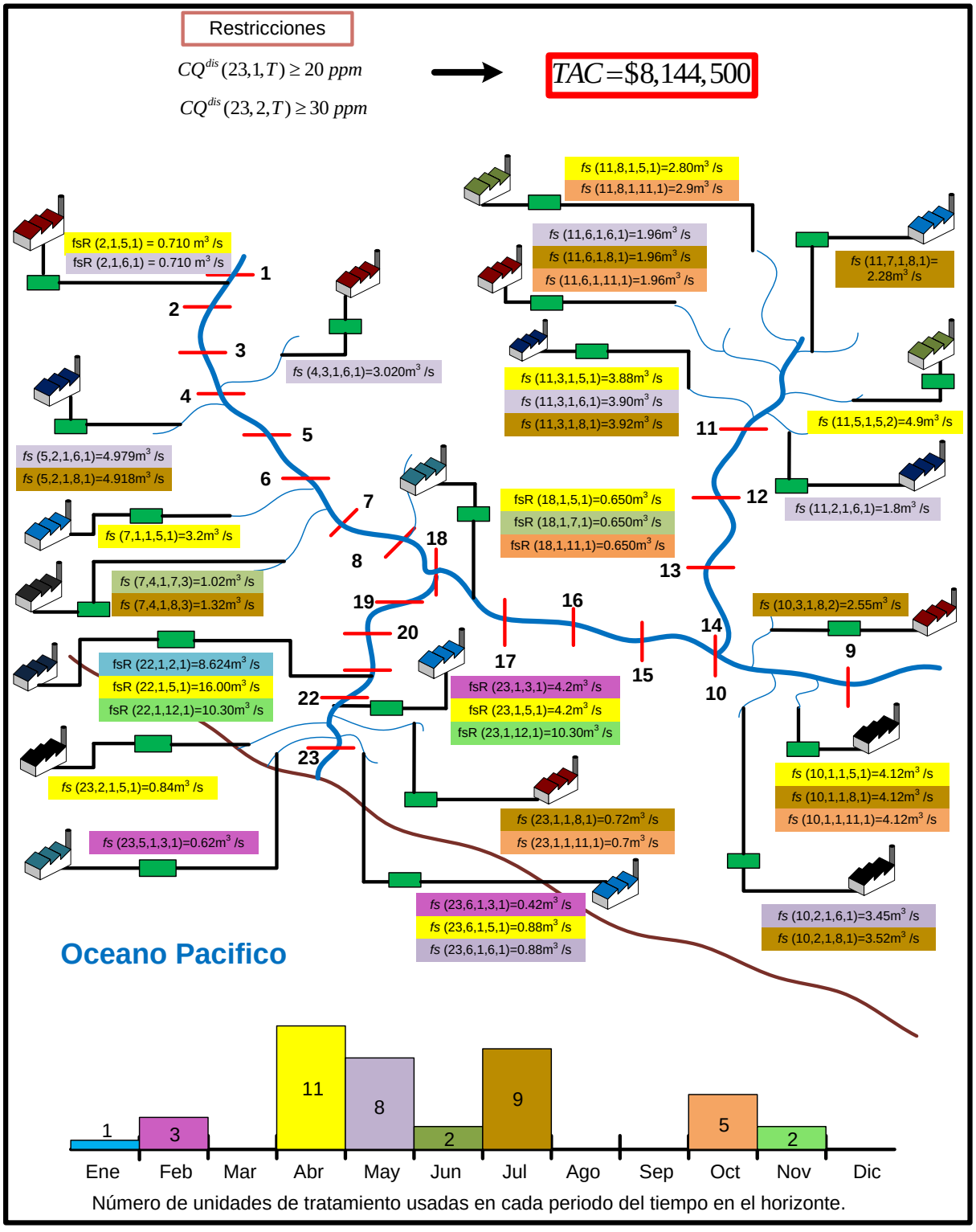

Figura 3.11. Configuración óptima para el sistema de tratamiento distribuido instalado en cada periodo en la cuenca del Balsas.

CAPÍTULO IV

DISEÑO ÓPTIMO DE UN SISTEMA DE TRATAMIENTO DISTRIBUIDO PARA EL INCREMENTO DEL OXÍGENO DISUELTO EN LAS CUENCAS A TRAVÉS DE DISCOS AUTO-ROTATORIOS.

En este capítulo se presenta un modelo de programación matemática para determinar la ubicación óptima de un sistema de discos auto-rotatorios; la selección de los afluentes que deben ser tratados, el número óptimo de discos que se instalarán y el espaciado óptimo entre ellos y a fin de incrementar el oxígeno disuelto en las áreas de captación final donde desemboca el río principal de la cuenca hidrológica. La eficiencia de los discos auto-rotatorios para el incremento del oxígeno disuelto está asociada al flujo tratado, al número de discos que se instalarán y a la separación entre ellos. Para modelar el sistema de discos auto-rotatorios, se propone un modelo matemático basado en varios experimentos, donde las variables de diseño son el flujo tratado, la ubicación para instalar el sistema, el número de filas de discos auto-rotatorios y el espaciado entre las filas. El modelo propuesto es multi-objetivo ya que considera la minimización del costo total anual del sistema de tratamiento (objetivo económico) que permita obtener la calidad de agua deseada (objetivo ambiental). Además se propone una metodología para mostrar las interacciones entre los objetivos considerados para permitir la toma de decisiones y elegir la mejor solución.

IV.1 Planteamiento del problema.

El problema que se aborda en este capítulo se escribe como sigue:

La **Figura 4.1** muestra un sistema de cuencas el cual recibe una descarga continua de efluentes con un alto contenido de sustancias toxicas y materia orgánica que disminuyen considerablemente la capacidad de autodepuración natural de los ríos, deteriorando así las condiciones para el desarrollo de los ecosistemas. La presencia de materia orgánica en gran proporción es un indicativo de que en el sistema macroscópico la concentración de oxígeno disuelto es mínima, lo cual provoca estrés en el desarrollo de las especies.

El problema consiste en desarrollar un procedimiento sistemático para encontrar la configuración óptima de un sistema de discos auto-rotatorios (SRD) que pueda ser colocado en la cuenca hidrológica con el objetivo de incrementar el oxígeno disuelto de tal forma que se alcance un nivel deseado en el área de captación final.

Para rastrear el oxígeno disuelto a través del río, el sistema es caracterizado matemáticamente por un modelo de análisis de flujo de materiales (MFA). El modelo MFA toma en cuenta aspectos relevantes tales como: las entradas, salidas, reacciones químicas/bioquímicas y las interacciones con sus alrededores. El modelo de optimización permitirá identificar los afluentes donde se necesitan incrementar la concentración de oxígeno disuelto y las eficiencias del sistema de tratamiento que satisfagan las restricciones impuestas a través del río.

La función objetivo es minimizar el costo total anual (*TAC*) y maximizar la calidad del agua simultáneamente. Este último, se obtiene incrementando la concentración de oxígeno disuelto en los afluentes y en las áreas de captación final. Por lo tanto, éste es un problema de optimización multi-objetivo. Los costos de capital y operación dependen del número de SRD, del flujo, del espaciado entre los discos y de la concentración de oxígeno disuelto en el flujo de entrada. Por otra parte, este trabajo identifica las eficiencias requeridas para aumentar el oxígeno disuelto basándose en la velocidad de flujo, el número de discos, y la separación entre los mismos.

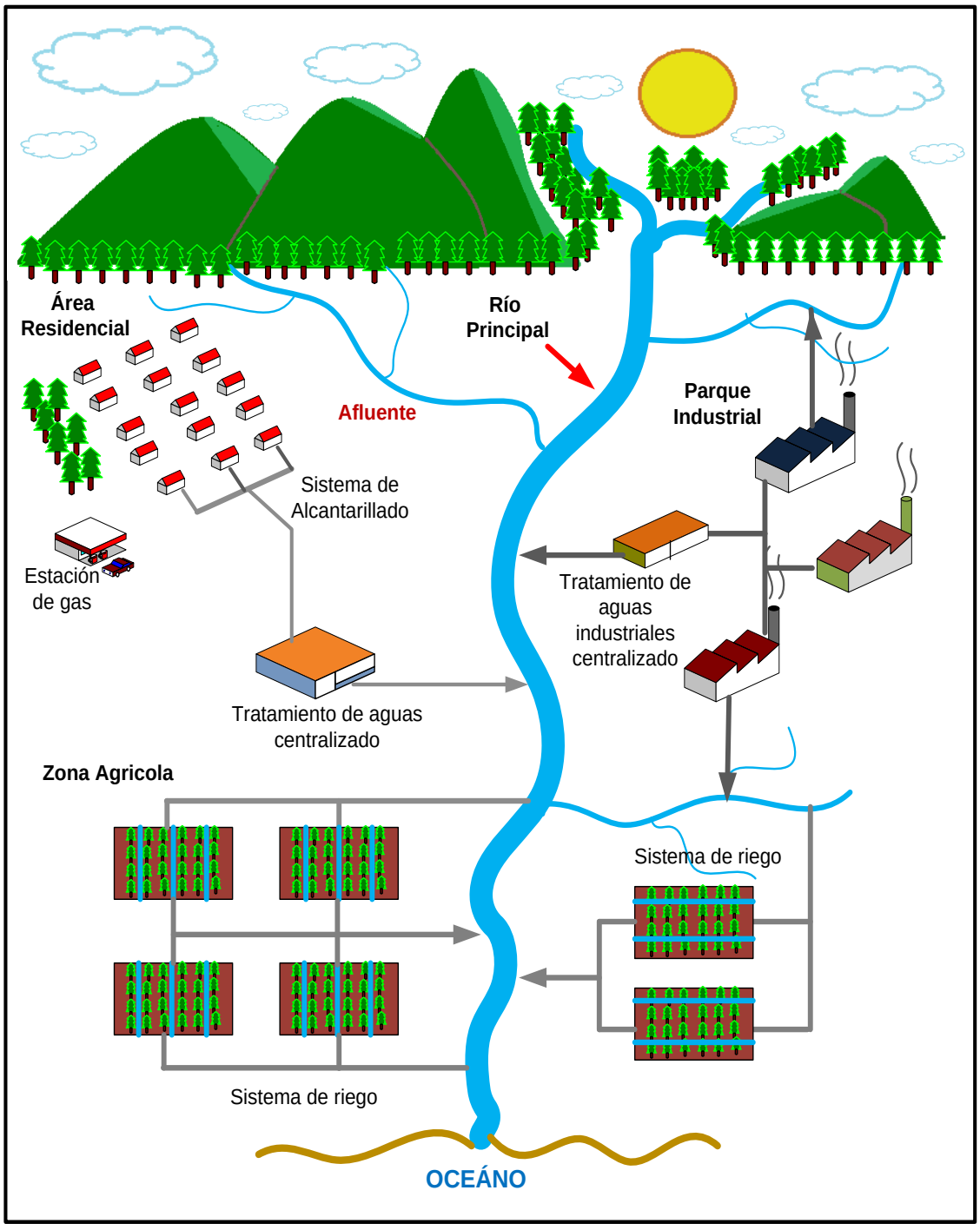

Figura 4.1 Representación esquemática de una cuenca hidrológica típica.

IV.2 Desarrollo teórico y formulación matemática.

En este trabajo se propone un modelo para determinar la eficiencia y el costo de un sistema de discos auto-rotatorios basado en datos experimentales obtenidos de la simulación de varios experimentos. La variación del oxígeno disuelto a la salida se obtuvo por la manipulación de variables tales como el flujo, el número de discos auto-rotatorios instalados y el espaciado entre los discos. Basándose en estos experimentos, se obtuvieron correlaciones exactas para la implementación en un modelo de programación matemática, que considera una formulación MFA para el modelado de la cuenca hidrológica. El modelo teórico de análisis de flujo de materiales (MFA) evalúa todas las entradas y salidas en el río principal de la cuenca hidrológica y en los ríos secundarios (afluentes), el uso y las descargas originadas por la actividad agrícola, las descargas con y sin tratamiento de las aguas residuales provenientes de los sectores industrial y doméstico. Además, toma en cuenta los fenómenos naturales como precipitaciones, evaporación y filtración; estos fenómenos alteran significativamente la composición del oxígeno disuelto en el sistema macroscópico. Para proporcionar un seguimiento adecuado a la composición promedio del oxígeno disuelto, se requiere dividir el río en secciones llamados tramos de río, donde la concentración promedio puede considerarse constante (estas secciones se representan en la **Figura 4.2**). El flujo y la concentración de oxígeno disuelto son diferentes en cada tramo del río, esto debido a que en cada tramo existen flujos de entradas y de salida. Los afluentes que desembocan en el río principal, reciben también descargas de los diferentes sectores (agrícola, industrial y doméstico). El flujo ($EFLU_{i,j}$) y la concentración de oxígeno disuelto ($DOEFLU_{i,j}$) de los afluentes modifican el flujo y la concentración de los tramos de río donde son descargados. Así también, el modelo considera los términos de reacción que toman en cuenta las reacciones químicas y bioquímicas que se llevan a cabo para la producción y consumo de oxígeno disuelto. Por lo tanto, es muy importante considerar estos términos con la idea de rastrear el oxígeno disuelto a través de la cuenca hidrológica.

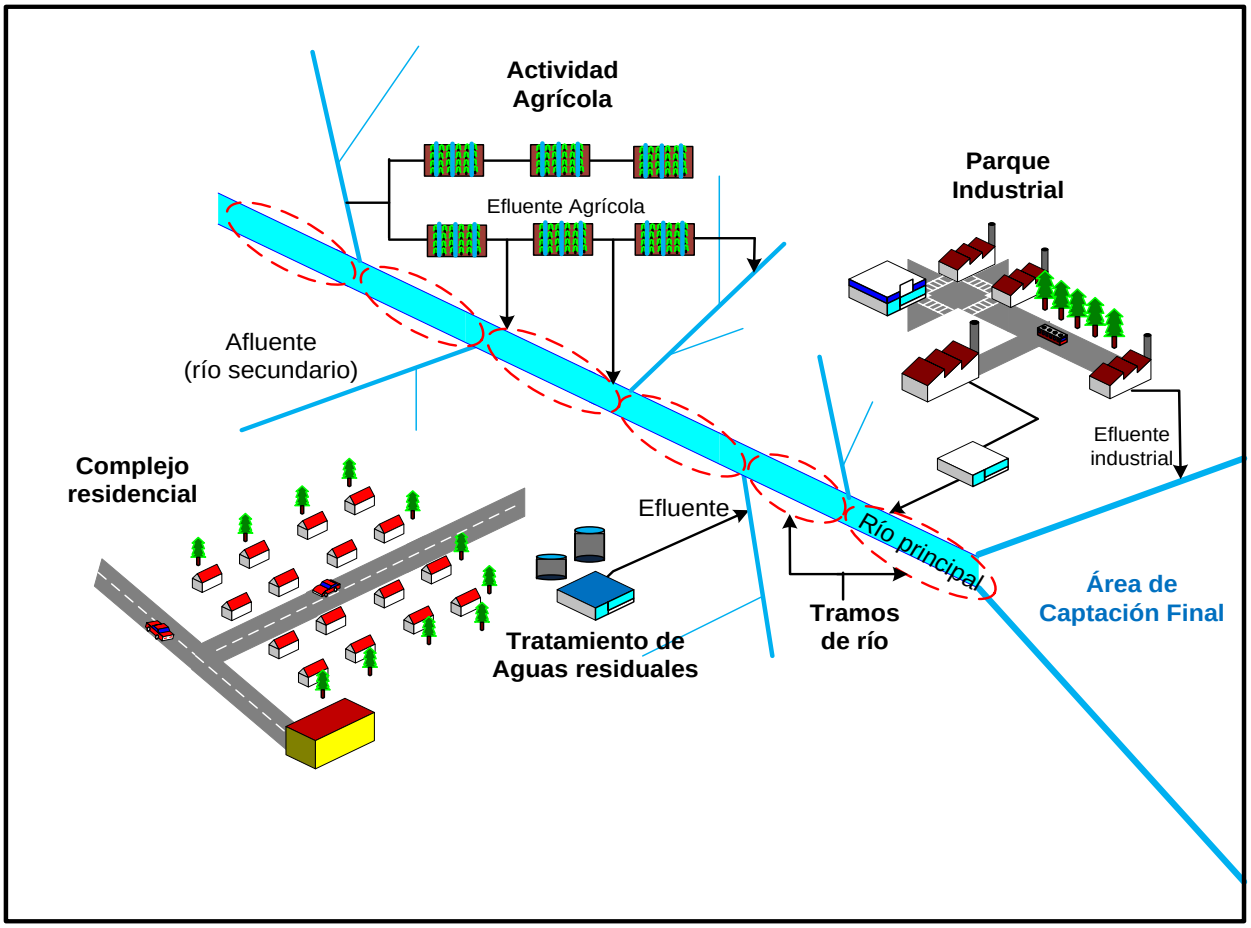

Figura 4.2 Representación del modelo teórico de análisis de flujo de materiales (MFA).

La formulación matemática del modelo propuesto se describe a continuación:

IV.2.1 Balance general de masa para cada tramo de río.

$$Q_i = Q_{i-1} + INDR_i + P_i + D_i + \sum_{J=1}^{N_{Eflu\,j}} EFLU_{i,j} - L_i - U_i \quad ,\forall i \in I \tag{4.1}$$

la ecuación (4.1) indica que el flujo volumétrico a la salida de cada tramo de río (Q_i) es igual al flujo de entrada del tramo de río anterior (Q_{i-1}), más la adición de los efluentes industriales descargados directamente en el río principal $(INDR_i)$, más las descargas directas (D_i), más el flujo volumétrico de las precipitaciones (P_i), más el flujo de los ríos secundarios

que desembocan en los tramos del río principal $\left(\sum_{j=1}^{N_{Efl,i}} EFLU_{i,j}\right)$, menos la salidas del tramo de río tales como los fenómenos naturales de filtración y evaporación (L_i), y el uso de agua (U_i).

IV.2.2 Balance para el oxígeno disuelto en cada tramo de río.

La ecuación (4.2) representa la cantidad de oxígeno disuelto (*DO*) que existe en cada tramo de río $(Q_i \times DOQ_i)$, la cual es igual a la cantidad de oxígeno disuelto que entra del tramo de río anterior $(Q_{i-1} \times DOQ_{i-1})$, más la cantidad de *DO* que existe en las precipitaciones $(P_i \times DOP_i)$, más el *OD* de las descargas directas $(D_i \times DOD_i)$, más el oxígeno disuelto que existen en los efluentes industriales $(INDR_i \times DOINDR_i)$, y el oxígeno que trasportan los afluentes $\left(\sum_{i=1}^{N_{Efl,i}} EFLU_i \times DOEFLU_i\right)$, menos las pérdidas de *DO* originadas por la filtración y evaporación $(L_{i,} \times DOL_i)$, también por el uso $(\mathrm{U}_i \times DOU_i)$, y el oxígeno disuelto que desaparece al degradar la materia orgánica existente; esto se expresa con una reacción de primer orden $\left(\int_{V=0}^{V_i} r_i dV_i\right)$.

$$Q_i \times DOQ_i = Q_{i-1} \times DOQ_{i-1} + P_i \times DOP_i + D_i \times DOD_i + INDR_i \times DOINDR_i + \sum_{j=1}^{N_{Efl,i}} EFLU_{i,j} \times DOEFLU_{i,j}$$
$$-L_i \times DOL_i - U_i \times DOU_i - \int_{V=0}^{V_i} r_i dV_i, \quad \forall i \in I \tag{4.2}$$

IV.2.3 Balance general de masa en los afluentes.

$$EFLU_{i,j} = WS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}} + WS_{i,j}^{\text{tratada}} + INDT_{i,j} + P_{i,j} + D_{i,j} - L_{i,j} - U_{i,j} \quad , \forall i \in I, j \in J \tag{4.3}$$

El flujo del afluente ($EFLU_{i,j}$) que es descargado en el río principal es igual a la sumatoria de todas las descargas que recibe el afluente tales como: las aguas residuales con tratamiento $(WS_{i,j}^{\text{tratada}})$, aguas residuales sin tratamiento $(WS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}})$, efluentes industriales

($INDT_{i,j}$), precipitaciones ($P_{i,j}$), descargas agrícolas ($D_{i,j}$), menos las pérdidas causadas por los fenómenos naturales de evaporación y filtración ($L_{i,j}$) y el agua que se utiliza de los afluentes ($U_{i,j}$).

IV.2.4 Balance para determinar la cantidad de oxígeno disuelto en los afluentes.

El oxígeno disuelto que existe en los afluentes ($EFLU_{i,j} \times DOEFLU_{i,j}$) está dado por el *DO* de las descargas sin tratamiento ($WS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}} \times DOWS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}}$) y tratadas ($WS_{i,j}^{\text{tratada}} \times DOWS_{i,j}^{\text{tratada}}$), más el *DO* de las descargas industriales ($INDT_{i,j} \times DOINDT_{i,j}$), el *DO* de las precipitaciones ($P_{i,j} \times DOP_{i,j}$), el *DO* de las descargas directas ($D_{i,j} \times DOD_{i,j}$), como el oxígeno disuelto depende directamente de la temperatura se disminuye su concentración por el fenómeno de evaporación y también por la filtración ($L_{i,j} \times DOL_{i,j}$), y la degradación natural $\left(\int_{V=0}^{V_{i,j}} r_{i,j} dV_{i,j} \right)$.

$$EFLU_{i,j} \times DOEFLU_{i,j} = WS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}} \times DOWS_{i,j}^{\text{sin tratamiento}} + WS_{i,j}^{\text{tratada}} \times DOWS_{i,j}^{\text{tratada}} + INDT_{i,j} \times DOINDT_{i,j} + P_{i,j} \times DOP_{i,j}$$
$$+ D_{i,j} \times DOD_{i,j} - L_{i,j} \times DOL_{i,j} - U_{i,j} \times DOU_{i,j} - \int_{V=0}^{V_{i,j}} r_{i,j} dV_{i,j}, \quad \forall i \in I, \forall j \in J \tag{4.4}$$

IV.2.5 Descargas agrícolas y el flujo de agua utilizada en los sistemas de riego.

Las descargas agrícolas ($D_{i,j}$) y los usos ($U_{i,j}$) son proporcionales a las áreas agrícolas que existen alrededor de la cuenca hidrológica. Estas descargas y usos se calculan como sigue:

$$D_{i,j} = \lambda_{i,j} \times A_{i,j}, \qquad \forall i \in I, j \in J \tag{4.5}$$

$$U_{i,j} = \beta_{i,j} \times A_{i,j}, \qquad \forall i \in I, j \in J \tag{4.6}$$

Donde $\lambda_{i,j}$ es el flujo por unidad de área $\mathrm{m}^3/\mathrm{acre\,seg}$ y el parámetro $\beta_{i,j}$ es el flujo de agua del afluente *j* usado por los sistemas de riego, este flujo de agua está dado por unidad de área $\mathrm{m}^3/\mathrm{acre\,seg}$ y $A_{i,j}$ es el área que cubre el afluente *j* en acres.

IV.2.6 Diseño del sistema de tratamiento distribuido.

El sistema de discos auto-rotatorios usados para incrementar el oxígeno disuelto en la cuencas puede ser instalado en cualquier afluente que desemboca en el río principal (véase la **Figura 4.3**); de esta manera, hay varias posibilidades para ubicar los discos auto-rotatorios. Por lo tanto, el modelo de optimización debe seleccionar los mejores lugares para instalar estos sistemas, el flujo dirigido a estos dispositivos, el número de discos requeridos, el espaciado entre los discos y en consecuencia la eficiencia asociada para mejorar el oxígeno disuelto al mínimo costo total. Para diseñar el sistema de tratamiento distribuido de discos auto-rotatorios, la disyunción siguiente se utiliza para cada afluente *j* que desemboca en cada tramo de río *i*:

$$\begin{bmatrix} Y_{i,j} \\ (\alpha_{i,j}) \times DOEFLU_{i,j} = DOEFLUat_{i,j} \\ \alpha_{i,j} = C_1 \times EFLU_{i,j} + C_2 \times ND_{i,j} \times ESP_{i,j} + C_3 \times ND_{i,j} + C_4 \times ESP_{i,j} + C_5 \\ \alpha_{i,j}^{MIN} \le \alpha_{i,j} \le \alpha_{i,j}^{MAX} \\ ND_{i,j}^{MIN} \le ND_{i,j} \le ND_{i,j}^{MAX} \\ ESP_{i,j}^{MIN} \le ESP_{i,j} \le ESP_{i,j}^{MAX} \\ CapCost_{i,j} = FCost + VC_{EFLU} \times EFLU_{i,j}^{\delta e} + VC_{ND} \times ND_{i,j}^{\xi e} + VC_{ESP} \times ESP_{i,j}^{\varepsilon e} \\ OpCost_{i,j} = Cu_{EFE}^{op} \times EFLU_{i,j} + Cu_{ND}^{op} \times ND_{i,j} + Cu_{ESP}^{op} \times ESP_{i,j} \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} \neg Y_{i,j} \\ DOEFLUat_{i,j} = DOEFLU_{i,j} \\ \alpha_{i,j} = 0 \\ ND_{i,j} = 0 \\ ESP_{i,j} = 0 \\ CapCost_{i,j} = 0 \\ OpCost_{i,j} = 0 \end{bmatrix}, \forall i \in I, \forall j \in J \vee$$

En la disyunción anterior $DOEFLU_{i,j,}$ es el oxígeno disuelto en el afluente *j* que es descargado en el tramo de río *i*, $DOEFLUat_{i,j}$ es el oxígeno disuelto una vez que el afluente pasa a través de los discos auto-rotatorios. $\alpha_{i,j}$ es la eficiencia para incrementar el oxígeno disuelto que depende del efluente tratado ($EFLU_{i,j}$), el espaciado entre discos ($ESP_{i,j}$) y el número de discos ($ND_{i,j}$). La variable Booleana $Y_{i,j}$ está asociada con la existencia del sistema de discos auto-rotatorios (SRD), si es verdadera, la ecuaciones de diseño para el sistema de discos se aplican; por otra parte si es falsa ($\neg Y_{i,j}$) el sistema de discos no existe, por lo tanto, la concentración de

oxígeno disuelto a la salida es igual a la concentración de oxígeno disuelto en la entrada del afluente. *FC* es el costo fijo unitario y VC_{EFLU} es el costo variable unitario para el flujo tratado, VC_{ND} es el costo variable unitario para el número de discos auto-rotatorios, VC_{ESP} es el costo variable unitario para el espaciado entre los discos. Cu_{EFLU}^{op} es el costo operacional unitario para el tratamiento del flujo del afluente, Cu_{ND}^{op} es el costo operacional unitario para el número de discos auto-rotatorios y Cu_{ESP}^{op} es el costo operacional unitario por el espaciado entre los discos. δe, ξe y εe son los exponentes empleados en la estimación del costo de capital para el flujo tratado, el número de discos auto-rotatorios y el espaciado entre discos, respectivamente. Además, $CapCost_{i,j}$ y $OpCost_{i,j}$ son los costos de capital y operacional del sistema de discos auto-rotatorios utilizados para tratar los afluentes *j* que son descargados en el tramo de río *i*.

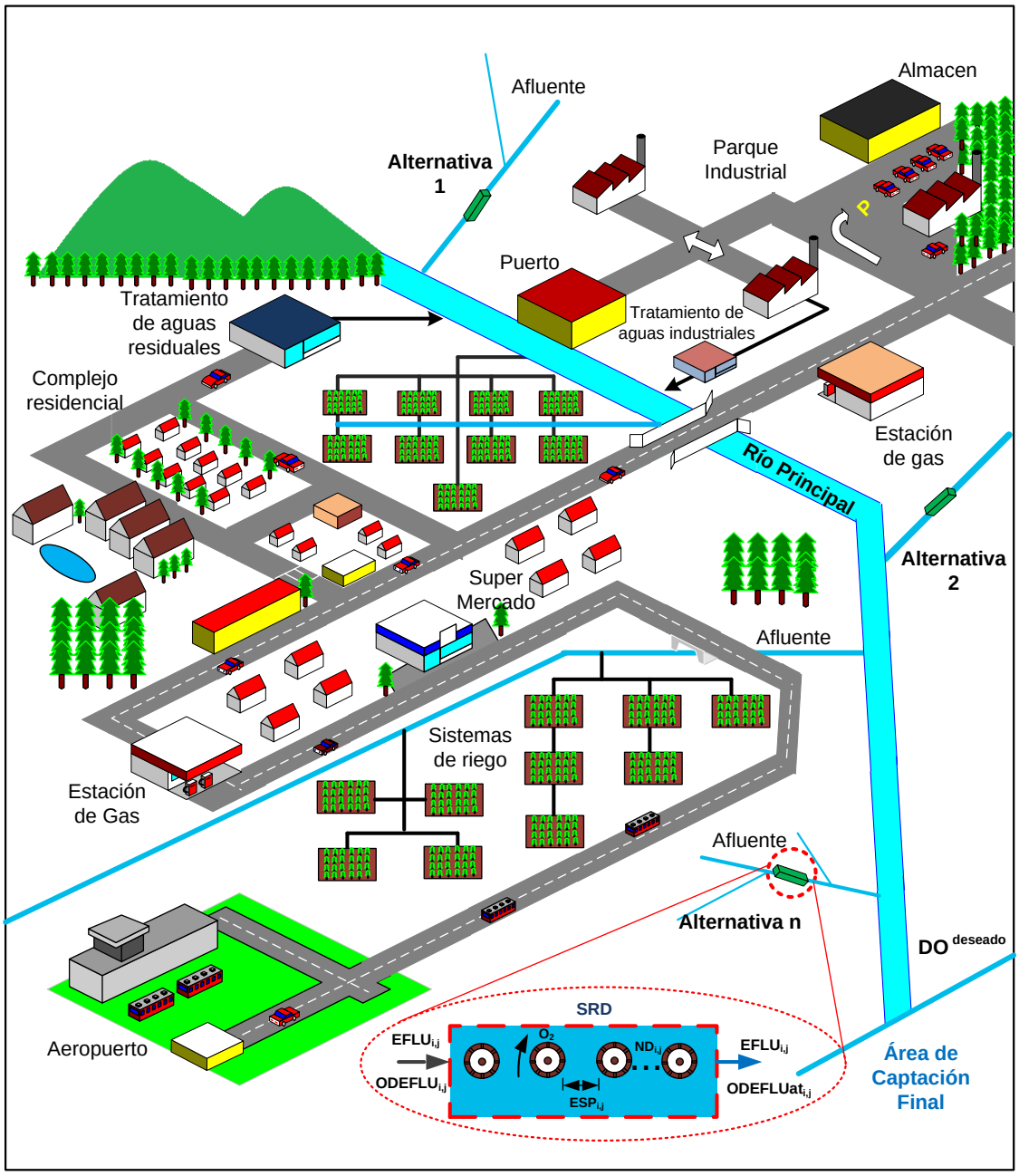

Figura 4.3 Superestructura para el sistema de tratamiento distribuido de discos auto-rotatorios.

Para reformular una disyunción previamente presentada como un conjunto de ecuaciones algebraicas, varias técnicas pueden ser usadas, incluyendo el *convex hull* y la *big M* (para ejemplos como antecedentes, se remite el lector a las reformulaciones de Raman y Grossmann, 1994; Ponce-Ortega y col., 2009).

Usualmente, el *convex hull* es una buena opción para reformular disyunciones que incluyen términos lineales, la *big M* requiere parámetros adicionales; no obstante, para el caso considerado en este capítulo el *convex hull* produce una gran cantidad de nuevas variables desagregadas, así como varias nuevas restricciones, que complican el método de solución debido a que el tiempo computacional aumenta significativamente. De esta manera, en el presente trabajo se propone una nueva reformulación que requiere un menor número de variables y relaciones que pueden ser resueltas fácilmente y un corto tiempo de CPU. En la reformulación, las variables Booleanas son transformadas en variables binarias. Por lo tanto, cuando la variable booleana es verdadera, la variable binaria asociada es igual a uno; mientas que cuando la variables binarias son falsas las variables binarias asociadas son cero. Entonces, la anterior disyunción es reformulada como sigue:

Primeramente, la variable continua $DOEFLUat_{i,j}$ es desagregada de la siguiente manera:

$$DOEFLUat_{i,j} = DOEFLUat_{i,j}^{d1} + DOEFLUat_{i,j}^{d2}, \quad \forall i \in I, j \in J \tag{4.7}$$

Entonces, las ecuaciones de cada disyunción se fijan en términos de las variables desagregadas.

$$\alpha_{i,j} \times DOEFLU_{i,j} \times y_{i,j} = DOEFLUat_{i,j}^{d1}, \quad \forall i \in I, j \in J \tag{4.8}$$

$$DOEFLUat_{i,j}^{d2} = DOEFLU_{i,j} \times (1 - y_{i,j}), \quad \forall i \in I, j \in J \tag{4.9}$$

$$\alpha_{i,j} = C_1 \times EFLU_{i,j} \times y_{i,j} + C_2 \times ND_{i,j} \times ESP_{i,j} + C_3 \times ND_{i,j} + C_4 \times ESP_{i,j} + C_5 \times y_{i,j}, \quad \forall i \in I, j \in J \tag{4.10}$$

La ecuación (4.10) matemáticamente representa la relación entre la variable dependiente (eficiencia, $\alpha_{i,j}$ la cual se define como la cantidad de DO incrementado en el afluente descargado en el tramo de río respecto al DO original en cada corriente) con las variables independientes (afluente tratado $EFLU_{i,j}$, número de filas entre discos $ND_{i,j}$, espaciado entre las filas $ESP_{i,j}$).

La correlación de la eficiencia para incrementar el oxígeno disuelto a través de los discos auto-rotatorios se obtuvo de una regresión multi-variable sobre datos obtenidos de una serie de experimentos, donde el flujo, el número de discos y el espaciado entre discos fueron

manipulados. La ecuación obtenida es no lineal debido a un término bilineal, esta relación tiene un factor de correlación R^2 de 0.9, el cual es lo suficientemente bueno para el diseño preliminar. Si se requiere aumentar este factor de correlación, relaciones cuadráticas pueden ser consideradas, lo que aumenta el factor de correlación a 0.99, pero el proceso de optimización se complica significativamente.

La ecuación (4.11) representa el costo de capital generado por la instalación del sistema de discos auto-rotatorios como una función de las variables independientes consideradas.

$$CapCost_{i,j} = FCost \times y_{i,j} + VC_{EFLU} \times EFLU_{i,j}^{\delta e} \times y_{i,j} + VC_{ND} \times ND_{i,j}^{\xi e} + VC_{ESP} \times ESP_{i,j}^{\varepsilon e},\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.11}$$

La ecuación (4.12) representa el costo de operación como una función de las variables independientes como sigue:

$$OpCost_{i,j} = Cu_{EFLU}^{op} \times EFLU_{i,j} \times y_{i,j} + Cu_{ND}^{op} \times ND_{i,j} + Cu_{ESP}^{op} \times ESP_{i,j},\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.12}$$

Los límites superiores para las variables desagregadas se expresan como siguen:

$$DOEFLUat_{i,j}^{d1} \le DOEFLU_{i,j}^{MAX} \times (y_{i,j}),\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.13}$$

$$DOEFLUat_{i,j}^{d2} \le DOEFLU_{i,j}^{MAX} \times (1 - y_{i,j}),\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.14}$$

También hay límites para las variables continuas como sigue:

$$\alpha_{i,j}^{MIN} \times y_{i,j} \le \alpha_{i,j} \le \alpha_{i,j}^{MAX} \times y_{i,j},\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.15}$$

$$ND_{i,j}^{MIN} \times y_{i,j} \le ND_{i,j} \le ND_{i,j}^{MAX} \times y_{i,j},\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.16}$$

$$ESP_{i,j}^{MIN} \times y_{i,j} \le ESP_{i,j} \le ESP_{i,j}^{MAX} \times y_{i,j},\ \forall i \in I, j \in J \tag{4.17}$$

IV.2.7 Función objetivo.

El modelo es formulado como un problema de optimización multi-objetivo donde se minimiza el costo total anual y se maximiza la concentración de oxígeno disuelto en el área de captación final de los ríos como sigue:

$$FO = \{\min TAC \; ; \; \max OD^{desired}\} \tag{4.18}$$

Estos dos objetivos son directamente proporcionales, esto significa que cuando la concentración de oxígeno disuelto aumenta también el costo total anual aumenta; por otro lado, cuando la concentración de oxígeno disuelto disminuye, el costo total anual también disminuye. Esto es debido a que para incrementar el oxígeno disuelto en el sistema macroscópico es necesaria la instalación de discos auto-rotatorios en los afluentes con la mayor eficiencia y los costos más altos a lo largo del río principal y con ello satisfacer la restricción impuesta en el área de captación final. El costo total anual es la suma del costo de capital para el sistema de discos auto-rotatorios requerido para incrementar el oxígeno disuelto en cualquier afluente y los costos de operación asociados al funcionamiento del sistema. Por lo tanto, el costo total anual se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} TAC = kf \times \left(\sum_i \sum_j \left[FC \times y_{i,j} + VC_{EFLU} \times EFLU_{i,j}^{\delta} \times y_{i,j} + VC_{ND} \times ND_{i,j}^{\lambda} + VC_{ESP} \times ESP_{i,j}^{\varepsilon} \right] \right) + \\ Hy \times \sum_i \sum_j \left[Cu_{EFLU}^{op} \times EFLU_{i,j} \times y_{i,j} + Cu_{ND}^{op} \times ND_{i,j} + Cu_{ESP}^{op} \times ESP_{i,j} \right] \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\forall i \in I, \; j \in J$$

En la ecuación anterior, *TAC* es el costo total anual (US$/año). k_f es el factor usado para anualizar el costo de capital (año^{-1}), H_Y es el número de horas de operación por año (horas/año).

El método *constraint* (ver Diwekar, 2008) es utilizado para resolver este problema de optimización multi-objetivo, para determinar el conjunto de soluciones Pareto. En este método, la estrategia consiste en convertir un problema multi-objetivo en una serie de problemas con un sólo objetivo, se selecciona una función objetivo que se conserva como tal para ser minimizada (en este caso el *TAC*) y definir la otra como restricción (en este caso el oxígeno disuelto $DO^{deseado}$ en el área de captación final). Esta estrategia nos permite identificar el menor costo posible para una concentración dada en el área de captación final, al mismo tiempo, esta metodología permite identificar la inversión adicional necesaria para satisfacer requisitos ambientales estrictos, lo cual es muy útil para la toma de decisiones gubernamentales relacionadas con estos problemas.

IV.3 Resultados y discusiones.

IV.3.1 Caso de estudio.

Un caso de estudio es usado para mostrar la aplicación del modelo propuesto. El caso de estudio es resuelto como un problema MINLP con el resolvedor SBB junto con los resolvedores CONOPT and CPLEX incluidos en el software GAMS (Brooke y col., 2011). Existen otros resolvedores disponibles en GAMS para resolver problemas MINLP (por ejemplo, DICOPT and BARON), pero DICOPT generalmente funciona mejor para los modelos que tienen una parte combinatorial significativa y complicada, mientras que BARON es un resolvedor de optimización global que requiere buenos límites de las variables involucradas y que consume gran tiempo computacional. Mientras que SBB funciona bien para los modelos que tienen un menor número de variables discretas, pero no linealidades más complejas (y probablemente para modelos no convexos) como el modelo propuesto. Este caso corresponde al drenaje Bahr El-Baqar localizado en Egipto. El número de sistemas de discos auto-rotatorios para ser colocados en los afluentes y la configuración de cada sistema (número de discos, el espaciado y el caudal tratado) dependen de la concentración de oxígeno disuelto deseada en el área de captación final. El agua contaminada por la actividad agrícola, industrial y doméstica es trasportada por el drenaje Bar El-Baqar (**Figura 4.4**) el cual desemboca en la parte sur del lago Manzala. Esta descarga continúa de agua contaminada en el área de captación disminuye la capacidad de auto depuración e incrementa la acumulación de contaminantes, esto afecta significativamente a la salud humana y actividades económicas como la pesca, la cría de ganado y la explotación agrícola. El incremento de la concentración de oxígeno disuelto en el área de captación es una medida para mejorar la calidad del agua ya que mayores concentraciones de oxígeno disuelto crean las condiciones para el desarrollo de microorganismos para la oxidación de materia orgánica y minimiza el estrés para el desarrollo de las especies sensibles a la falta de oxígeno.

Las características del drenaje Bar El-Baqar fueron usadas como parámetros de entrada para el modelo de optimización MINLP descrito en este trabajo. El modelo considera la posibilidad de incluir sistemas de discos auto-rotatorios en cada afluente que desemboca en el río principal, de esta manera, el modelo de optimización debe determinar el lugar para instalar los sistemas SRD y las características de diseño.

La **Tabla 4.1** muestra los datos para el costo fijo, costos variables unitarios y los costos de operación unitarios para el sistema de discos auto-rotatorios.

Tabla 4.1 Datos para el sistema de discos auto-rotatorios.

Costo fijo para los discos auto-rotatorios, *FCost* (US$)		**400**
Costo Variable Unitario		
VC_{EFLU} (US$/m^3)	VC_{ESP} (US$/m)	VC_{ND} (US$/número de filas)
8000E-3	200E-3	1000E-3
Costo de Operación Unitario		
Cu_{EFLU}^{op} **(US$/m^3)**	Cu_{ESP}^{op} (US$/h m)	Cu_{ND}^{op} (US$/h número de filas)
0.056	0.046	0.086

La reacción para el consumo de oxígeno disuelto debido al proceso de biodegradación natural de la materia orgánica sigue un modelo cinético de primer orden. La constante cinética k_{DO} es de 0.9041909E^{-5}/s y el factor usado para anualizar el costo de capital (k_f) es de 0.33 año^{-1}. Además,el valor parar $\lambda_{i,j}$ es 0.000066 m^3/acre s para todos los tramos de río, para los tramos de río 1-6, 8, 12-15 $\beta = 0.000023$ m^3/acre s y para los tramos de río 7, 9-12 $\beta = 0.000011$ m^3/acre s. El tiempo de operación es de 8000 horas/año. La concentración de las diferentes descargas en el drenaje principal y en los afluentes son 0 ppm para la precipitación y evaporación, 3.4 ppm para los efluentes industriales, 2.5 ppm para las aguas residuales sin tratamiento y las aguas residuales procedentes de la agricultura, y 4.2 ppm para el agua tratada (Phiri y col., 2005; Igbinosa y Okoh 2009).

La concentración de oxígeno disuelto en el lago de Manzala antes de la instalación del sistema de tratamiento es 3.5 ppm.

Lo cual origina la desaparición de organismos y especies sensibles a la falta de oxígeno. La **Tabla 4.2** muestra la interpretación acerca de los estándares para el oxígeno disuelto en los cuerpos de agua (ríos o lagos).

Tabla 4.2. Estándares para el oxígeno disuelto (Mack, 2003).

Estándares DO (ppm)	Interpretación
9-10	Muy saludable para toda la vida acuática
5-6	Nivel mínimo para los peces sanos
2-4	Peces estresados
1-2	Peces muertos

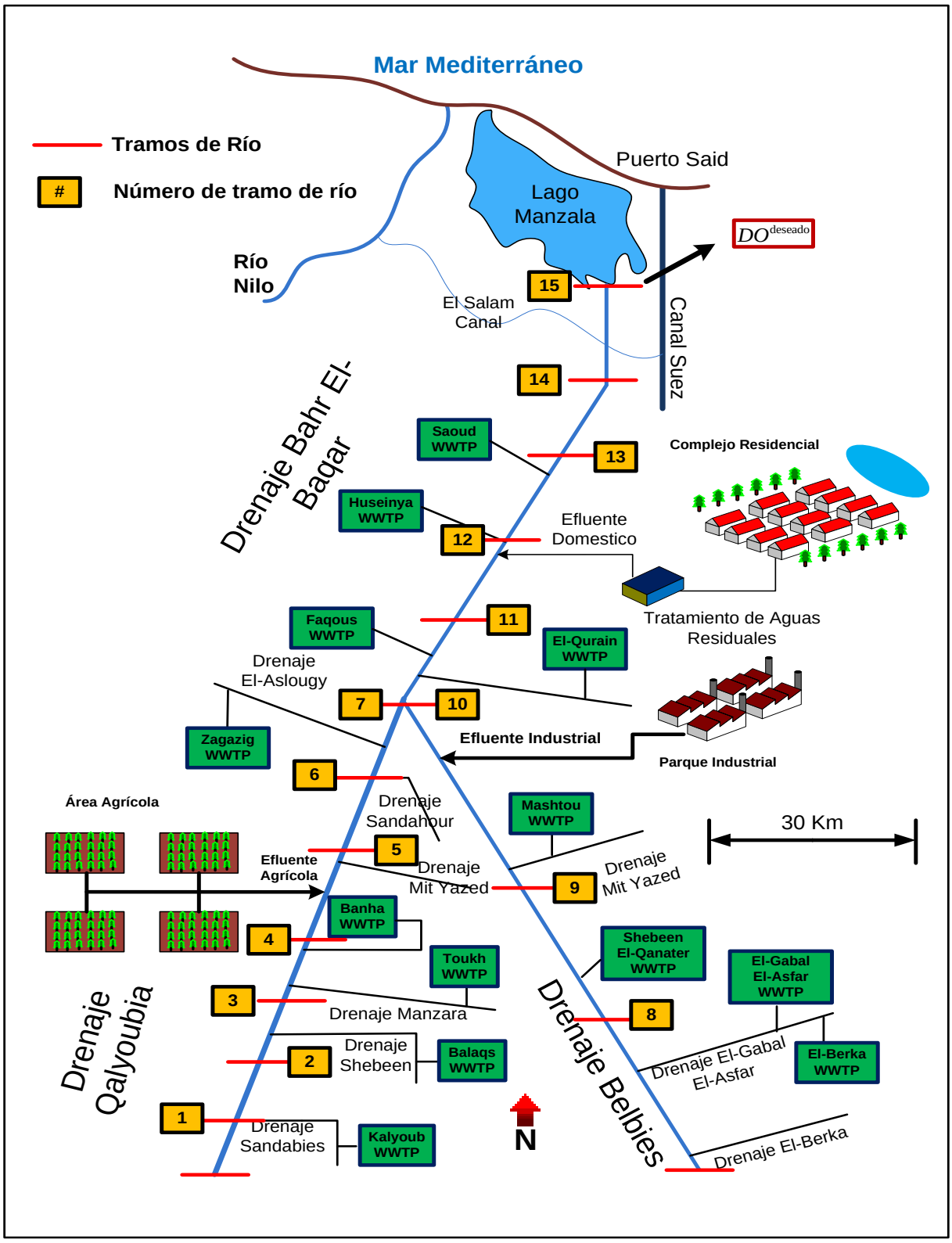

Fig. 4.4 Sistema de drenaje Bahr El-Baqar con baja concentración de oxígeno disuelto.

La curva Pareto (**Figura 4.5)** muestra las soluciones obtenidas para diferentes concentraciones de oxígeno disuelto impuestas en el área de captación. Cada punto de la curva representa el costo total anual generado por la instalación de los sistemas de discos auto-rotatorios para incrementar la concentración de oxígeno disuelto a lo largo de río, así como la configuración del sistema (flujo tratado, número de discos, espaciado entre discos) y satisfaciendo de esta manera la concentración de oxígeno disuelto deseada en la zona de captación final. Nótese que en el lado derecho de la **Figura 4.5** cuando la concentración de oxígeno incrementa, mayor es el costo total anual, esto es debido a que para una concentración mayor de oxígeno disuelto se requiere la colocación de un gran número de discos auto-rotatorios para aumentar la turbulencia en los afluentes donde están instalados y aumentando así la aireación (oxígeno disuelto). De lo contrario, a la izquierda de la **Figura 4.5** la calidad del agua disminuye y los discos auto-rotatorios necesarios son menos, y el costo total anual asociado disminuye también. El responsable de las decisiones puede seleccionar la solución que mejor satisfaga sus necesidades específicas. Por otro lado, los gobiernos pueden identificar la inversión adicional necesaria para una concentración dada en la disposición final. Dos escenarios han sido seleccionados para ser presentados en el presente trabajo, en el que las concentraciones para el oxígeno disuelto aumentan de modo que el sistema sea capaz de degradar los contaminantes en los afluentes y en el área de captación.

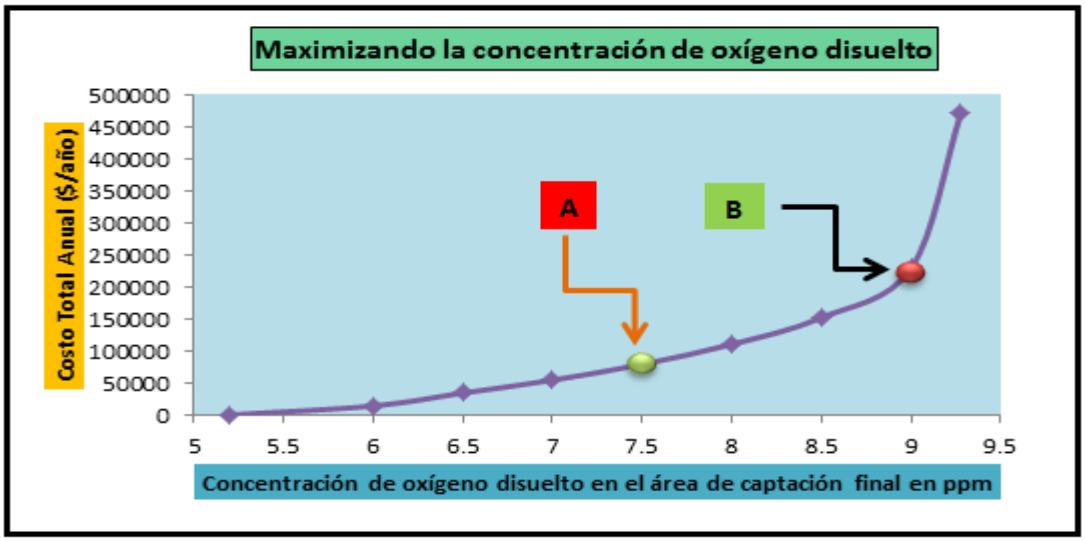

Figura 4.5 Soluciones Pareto para diferentes concentraciones de oxígeno disuelto.

Primera solución (Escenario A). La solución A del conjunto Pareto representa la concentración de 7.5 ppm de oxígeno disuelto en el área de captación final. La **Tabla 4.3** muestra la configuración del sistema de tratamiento distribuido colocado en los afluentes a lo largo de la cuenca hidrológica, incluyendo el flujo, la concentración de oxígeno disuelto después de pasar a través del sistema de discos, el número de discos instalados, el espacio entre los discos y la eficiencia para satisfacer la concentración de oxígeno disuelto impuesta en la zona de captación. Los sistemas de tratamiento distribuido nos permiten la instalación de sistemas SRD a lo largo de la cuenca hidrológica, esto disminuye el caudal de agua tratada. Si se implementan los sistemas centralizados tradicionales, solamente un sistema de SRD será colocado en la parte final del sistema con lo que el caudal tratado sería mucho mayor incrementando significativamente el costo del tratamiento. Por otra parte, en un sistema centralizado no se cumplen todas las restricciones colocadas en los diferentes tramos de río. La **Figura 4.6** muestra la solución obtenida para la configuración del sistema de tratamiento distribuido que satisface la concentración de 7.5 ppm en el área de captación final, en el que cada sistema de SRD instalado tiene una eficiencia asociada para incrementar el oxígenos disuelto en las corrientes de agua donde sean instalados. Fue necesaria la instalación de 8 sistemas SRD a lo largo del sistema macroscópico, cada uno con configuraciones específicas. El costo anual total (TAC) para este escenario A es de US$ 79,052 / año.

Tabla 4.3. Configuración óptima para el sistema de tratamiento distribuido para una concentración de oxígeno disuelto de 7.5 ppm (Escenario A).

Afluente	Entrada *DO*	Espaciado (m)	Número de discos	Velocidad de flujo (m^3/s)	Eficiencia	Salida *DO*
1.1	8.03	4	2	1.247	2.666	21.422
2.1	4.05	4	20	6.19	3	12.64
3.2	3.54	4	2	0.099	2.584	9.168
7.3	7.97	4	5	1.732	2.749	21.912
12.1	4.51	3.2	2	0.725	2.655	12.172
14.2	4.35	4	2	2.021	2.631	11.445
15.1	4.35	4	2	2.035	2.63	11.442
15.2	4.25	4	2	2.473	2.611	11.357

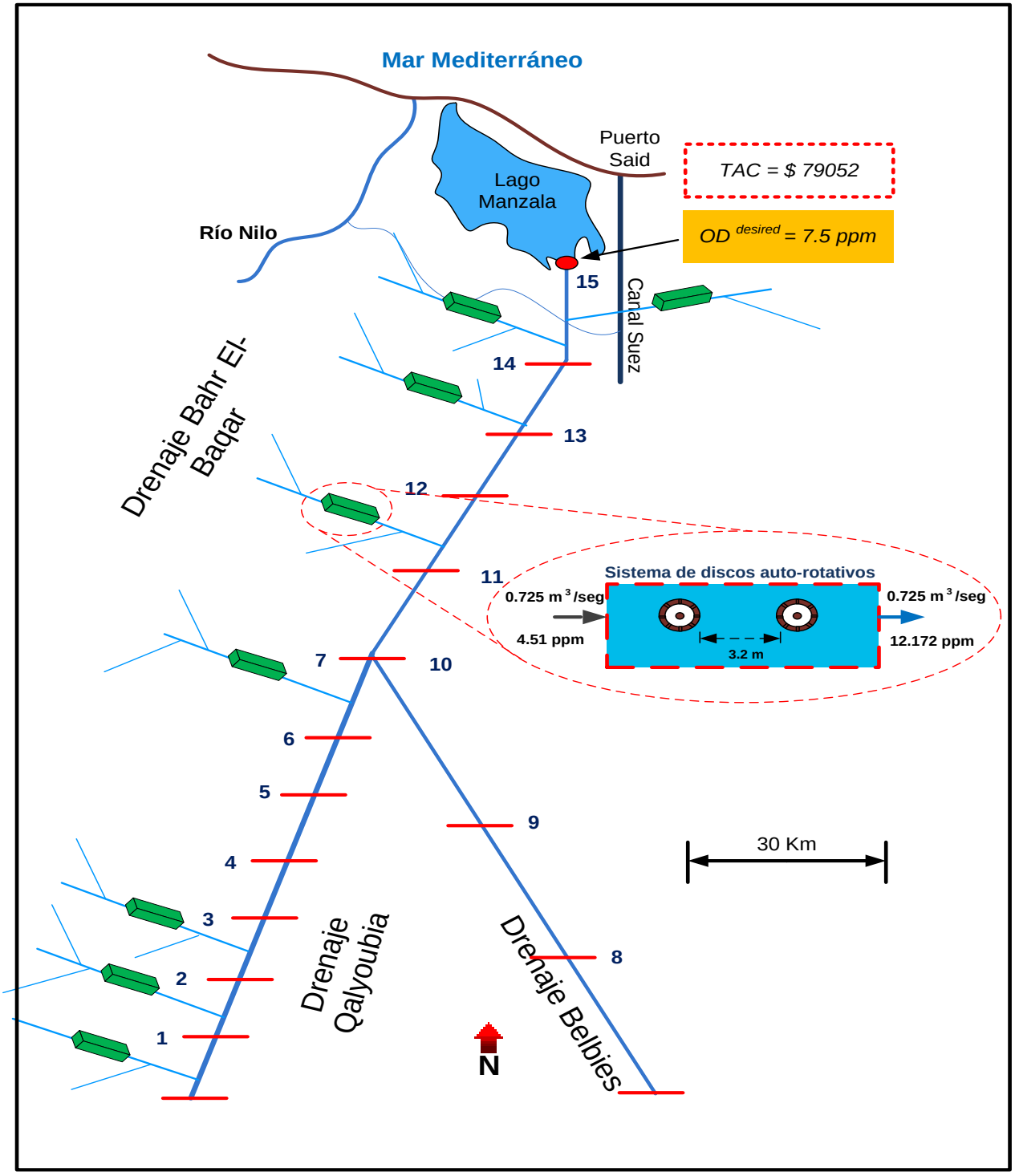

Figura 4.6 Diagrama esquemático para la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para el escenario A.

Segunda solución (Escenario B). El punto B de la curva Pareto de la **Figura 4.5** representa la concentración deseada en el área de captación final de 9 ppm, y de acuerdo con la **Tabla 4.2** ésta representa una concentración de oxígeno muy apropiada para toda la vida acuática. La **Tabla 4.4** muestra la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para aumentar el oxígeno disuelto en la cuenca. La **Figura 4.7** muestra el diagrama esquemático del sistema de tratamiento que indica los afluentes seleccionados para la instalación de los sistemas de disco auto-rotatorios garantizando la concentración deseada de oxígeno disuelto en la zona de captación. Téngase en cuenta que cuando la concentración de oxígeno disuelto que se desee en el área de captación es alta, el costo total anual asociado incrementa. Esto es una consecuencia de aumentar el número de los efluentes a tratar, lo que también aumenta el número de discos auto-rotatorios. Además, el método propuesto permite distribuir las unidades de tratamiento (la optimización de la ubicación y la eficiencia) para dar la solución con el costo mínimo aunado a una calidad dada de agua a través de la cuenca que permita asegurar la sostenibilidad del área de captación final.

Tabla 4.4 Configuración óptima para el sistema de tratamiento distribuido para una concentración de oxígeno disuelto de 9 ppm (Escenario B).

Afluente	Entrada *DO*	Espaciado (m)	Número de discos	Velocidad de flujo (m^3/s)	Eficiencia	Salida *DO*
1.1	8.035	4	20	1.247	3.296	26.484
1.2	3.34	4	2	0.439	2.702	9.024
1.5	3.041	4	2	0.387	2.705	8.233
2.1	4.055	4	20	6.19	3.073	12.464
2.2	5.698	4	2	0.192	2.713	15.461
2.3	3.336	4	2	0.243	2.711	9.044
3.2	3.548	4	20	3.073	3.214	11.403
3.4	3.893	0.45	2	0.116	2.546	9.912
4.3	3.498	4	4	0.774	2.757	9.646
4.4	3.828	4	2	0.151	2.715	10.394
5.1	3.214	4	2	0.344	2.707	8.699
6.1	3.824	4	2	0.213	2.712	10.371
6.3	3.064	4	2	0.589	2.695	8.259
6.4	2.908	4	20	2.657	3.232	9.399
7.1	3.708	4	3	0.479	2.7	10.012
7.3	7.971	4	20	1.732	3.274	26.096
9.2	5.534	4	2	0.214	2.712	15.011

10.2	3.839	2	4	0.688	2.691	10.33
11.2	3.585	4	2	0.165	2.715	9.731
11.3	3.428	4	20	1.705	3.275	11.287
12.1	4.584	4	20	0.725	3.319	15.216
12.3	3.797	4	2	0.258	2.71	10.293
13.1	4.35	4	20	0.731	3.319	14.438
13.2	3.626	4	2	0.434	2.702	9.8
14.1	4.35	4	20	0.731	3.319	14.438
14.2	4.35	4	20	2.021	3.261	14.186
15.1	4.35	4	20	2.035	3.26	14.183
15.2	4.35	4	18	2.473	3.241	14.027

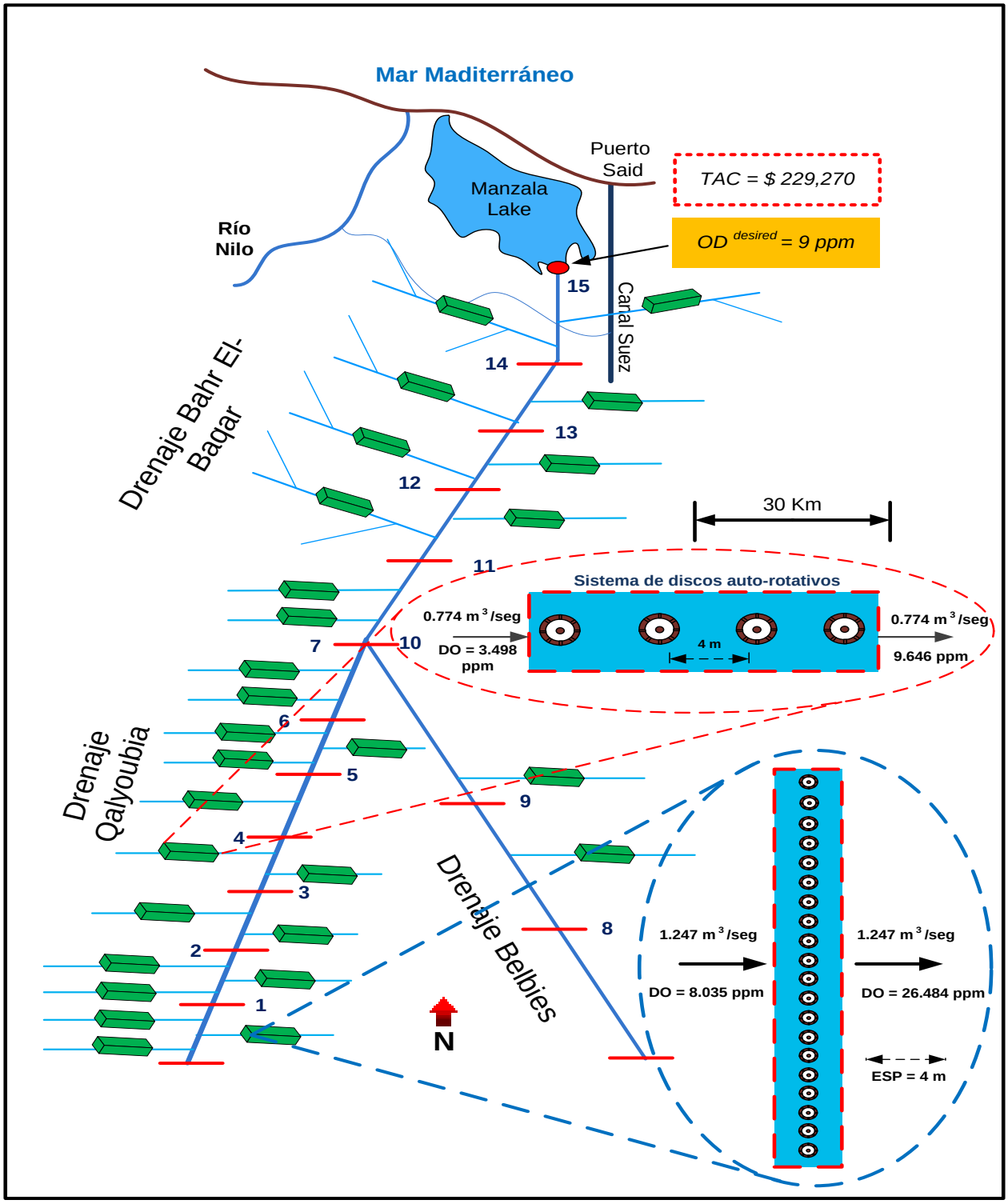

Figura 4.7 Diagrama esquemático de la configuración óptima del sistema de tratamiento distribuido para el Escenario B**.**

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Los modelos propuestos pueden ser útiles para determinar el costo total mínimo necesario para obtener los requisitos específicos de calidad del agua en las diferentes secciones y en el área de captación final de las cuencas con un sistema de tratamiento distribuido.

A continuación se presentan las conclusiones para cada problema abordado:

Conclusiones del capítulo II.

En este capítulo se presenta un modelo MINLP multi-objetivo para el diseño óptimo de sistemas de tratamiento distribuidos de cuencas integradas para garantizar su sostenibilidad. Criterios económicos (es decir, el costo anual total) e impacto ambiental (es decir, la concentración de descarga en el área de captación final de la cuenca hidrológica) se minimizan simultáneamente sobre una superestructura que implica un número de posibles combinaciones de localización de tratamiento de efluentes y los tipos de unidades de tratamiento. El modelo se basa en una formulación de programación disyuntiva y considera todas las entradas y salidas que se asocian con la cuenca a través de un modelo de MFA. Para evitar complicaciones numéricas, un enfoque de discretización (es decir, las configuraciones y condiciones de operación dadas) se utilizó para simular cada unidad de tratamiento involucrada en la superestructura antes del proceso de optimización, esta simulación proporciona la información necesaria para desarrollar modelos de costos y para generar expresiones para las eficiencias de remoción de las unidades de tratamiento que son usadas en la formulación matemática. La aplicación del modelo MINLP para dos cuencas hidrológicas (una en Egipto y la otra en México) permitió obtener las correspondientes curvas de Pareto, para guiar el proceso de diseño bajo diferentes escenarios. Los resultados muestran que el modelo propuesto puede ser útil para determinar el costo total mínimo necesario y obtener los requisitos específicos de calidad del agua en las diferentes secciones y en el área de captación final de la cuenca con un sistema de tratamiento distribuido. Por lo tanto, la metodología puede ser útil para los gobiernos a fin de determinar la inversión necesaria que se requiere a fin de mejorar la calidad del agua a través de las cuencas hidrológicas.

Conclusiones del capítulo III.

En este capítulo se ha presentado un modelo MINLP multi-objetivo y multi-periodo de optimización para el diseño óptimo de sistemas de tratamiento distribuidos para el tratamiento de los efluentes industriales descargados en las cuencas. El modelo considera los efectos de la estacionalidad de las descargas de aguas residuales y usos diferentes y representa los cambios en el funcionamiento del sistema en el tiempo y en toda la cuenca. Este aspecto de estacionalidad también afecta la acumulación de agua en las diferentes secciones de la cuenca, las cuales pueden alterar significativamente la capacidad de autodepuración de las cuencas hidrológicas. El modelo MFA le da seguimiento a los flujos y concentraciones sobre las coordenadas espaciales y temporales y establece un vínculo con las variables de optimización.

A través de dos casos de estudio se muestra la aplicabilidad del modelo propuesto en el diseño sostenible de los sistemas de tratamiento distribuido de los efluentes descargados en las cuencas hidrológicas. Un caso de estudio tiene que ver con el estudio del drenaje Bahr El-Baqar que descarga en el lago Manzala localizado en Egipto y este a su vez está conectado con el mar Mediterráneo. El otro caso de estudio consiste en la cuenca del Balsas, ubicada en México donde el área de captación final es el océano Pacífico. Los resultados muestran que los efectos de la estacionalidad de las descargas tienen una gran influencia en el diseño óptimo del sistema. Además, los resultados indican que el número de unidades de tratamiento requeridas aumenta significativamente con respecto a la concentración deseada en la descarga final. También se ha observado que hay ventajas y desventajas importantes entre la eficiencia y el costo de las tecnologías de tratamiento.

Conclusiones del capítulo IV.

En este capítulo se ha presentado un modelo MINLP multi-objetivo para el diseño óptimo de sistemas de tratamiento distribuidos que permita asegurar la sostenibilidad de las cuencas hidrológicas. El objetivo ambiental (aumento el oxígeno disuelto en las zonas de captación) se maximiza y el objetivo económico (costo total anual) se minimiza simultáneamente en una superestructura donde hay una serie de posibilidades para la selección de los efluentes a tratar a través de un sistema de discos auto-rotatorios.

El modelo propuesto se basa en una formulación de programación disyuntiva y el modelo MFA se utilizó para evaluar todas las entradas y salidas de los ríos principales y secundarios (afluentes).

El modelo MINLP propuesto se aplicó al drenaje Bahr el-Baqar (localizado en Egipto), los resultados óptimos se muestran a través de curvas Pareto, donde varios escenarios interesantes se pueden identificar. Estos muestran que el modelo propuesto puede ser útil para determinar el costo total mínimo respecto a requisitos específicos de calidad del agua en el área de captación final de la cuenca con un sistema de tratamiento distribuido de discos auto-rotatorios.

El incremento de oxígeno disuelto en la cuenca es una cuestión importante para mejorar la calidad del agua, y el sistema de discos auto-rotatorios es una manera económica para lograr esta tarea, y se combina con un modelo de optimización MFA que proporciona una herramienta útil en el diseño de sistemas de tratamiento de aguas.

Recomendaciones para trabajo futuro.

Finalmente, como recomendación para trabajo futuro se debe tomar en cuenta la síntesis de los sistemas de tratamiento distribuidos que incluyen un diseño detallado de las operaciones de tratamiento individuales. Esto es para mejorar la exactitud de los resultados de optimización si se requiere. Además, recientemente se han desarrollado algunos enfoques para la integración de agua en la planta basadas en las propiedades de las corrientes (es decir, la toxicidad, la demanda química de oxígeno, la densidad, la viscosidad, etc.) para sistemas constituidos por varios componentes (véase, por ejemplo, Ponce-Ortega y col. 2009b; 2010; 2011; Nápoles-Rivera y col 2010). Por lo tanto, una recomendación adicional para mejorar los modelos propuestos es incluir balances de propiedad para los casos en que se presenten múltiples contaminantes y considerar restricciones basadas en propiedades, que son muy comunes en la práctica.

Bibliografía.

Alva-Argaez A., Kokossis A. C., Smith R., 1998, "Wastewater minimization of industrial systems using an integrated approach", Computers and Chemical Engineering, 22, S741-S744.

Alva-Argaez A., Vallianatos A., Kokossis A., 1999, "A multi-contaminant transshipment model for mass exchange networks and wastewater minimization problems", Computers and Chemical Engineering, 23 (10), 1439-1453.

Baccini P., Brunne P., 1991, "Metabolism of the Anthroposphere" Springer-Verlag: Berlin.

Benko N., Rev E., Fonyo Z., 2000, "The use of nonlinear programming to optimal water allocation", Chemical Engineering Communications, 178, 67-101.

Best G., Niemirycz E., Bogacka T., 1998, "International river water quality: Pollution and restoration", Spon Press: London, UK.

Brooke A., Kendrick D., Meeruas A., Raman R., 2006, "GAMS-Language guide", GAMS Developed Corporation: Washington, D.C.

Burgara-Montero O., Ponce- Ortega J. M., Serna-González M., El-Halwagi M. M., 2012, "Optimal design of distributed treatment systems for the effluents discharged to the rivers", Clean Technologies and Environmental Policy, 14, 925-942.

Calik P., Yilgora P., Ayhanb P., Demir A. S., 2004 "Oxygen transfer effects on recombinant benzaldehyde lyase production", Chemical Engineering Science, 59, 5075-5083.

Chapra S. C., 2008 "Surface water-quality modeling, Waveland Pr Inc: Lon Grove, IL.

Chindah A. C., Braide A. S., Sibeudu O. C., 2004, "Distribution of hydrocarbons and heavy metals in sediment and a crustacean (shrimps-Penaeus notialis) from the bonny/new calabar river estuary", Niger Delta. Ajeam-Ragee, 9, 1-14.

CONAGUA., 2008, "Mexican National Water Commission", Water Statistics, http://www.conagua.gob.mx/OCB07/Temas/EstadisticasBALSAS-FINALago09.pdf (Accessed October 2010).

CONAGUA., 2009, "Mexican National Water Commission", Water Atlas in Mexico. (Accessed October 2010).

CONAGUA., 2011, "Mexican National Water Commission", Water Statistics. http://www.conagua.gob.mx/OCB07/Contenido/Documentos/EstadisticasBALSAS.pdf (accessed 2012).

CONAGUA., 2011, "Mexican National Water Commission", Water Atlas in Mexico. http://smn.cna.gob.mx/index.php?option=com_content&view=article&id=12&Itemid=77 (accessed 2012).

Cooper B., 1986, "Developing management guidelines for river nitrogenous oxygen demand", Journal of the Water Pollution Control Federation**,** 58 (8), 845-852.

Doyle S. J., Smith R., 1997, "Targeting water reuse with multiple contaminants", Process Safety and Environmental Protection, 75 (B3), 181-189.

Dedopoulos I. T., Shah N., 1996, "Long-term maintenance policy optimization in multipurpose process plants", Chemical Engineering Research and Design**,** 74 (A3), 307-320.

Drolc A., Zagorc-Koncan J., 1996, "Water quality modeling of the river Sava, Slovenia", Water Research**,** 30 (11), 2587-2592.

Drolc A., Zagorc-Koncan J., 2002, "Estimation of source of total phosphorus in a river basin and assessment of alternatives for river pollution reduction", Environment International, 28 (5), 393-400.

El-Baz A. A., Ewida K. T., Shouman M. A., El-Halwagi M. M., 2005, "Material flow analysis and integration of watersheds and drainage systems: I. Simulation and application to ammonium management in Bahr El-Baqar drainage system", Clean Technologies and Environmental Policy, 7 (1), 51-61.

El-Baz A. A., Ewida K. T., Shouman M. A., El-Halwagi M. M., 2005, "Material flow analysis and integration of watersheds and drain systems: II. Integration and solution strategies with application to ammonium management in Bahr El-Baqar drain system", Clean Technologies and Environmental Policy, 7 (1), 78-86.

Emongor V., Kealotswe E., Koorapetse I., Sankwasa S., Keikanetswe S., 2005, "Pollution indicators in Gaberone effluent", Journal of Applied Science, 5, 147-150.

Fakayode S. O., 2005, "Impact of industrial effluents on water quality of the receiving Alaro River in Ibadan, Nigeria", Ajeam-Ragee, 10, 1-13.

Ferrer J. M. A., Rodrigo A. S., Penya-roja J. M., 1998 "Energy saving in the aeration process by fuzzy logic control", Water Science and Technology, 38, 209-217.

Furtado A. A. L., Albuquerque R. T., Leite S. G. F., Pecanha R. P., 1998, "Effect of hydraulic retention time on nitrification in an airlift biological reactor", Brazilian Journal of Chemical Engineering , 15, 1-7.

Gabriel F. B., El-Halwagi M. M., 2005 "Simultaneous synthesis of waste interception and material reuse networks: Problem reformulation for global optimization", Environmental Progress, 24 (2), 171-180.

Galan B., Grossmann I. E., 1998, "Optimal design of distributed wastewater treatment networks", Industrial and Engineering Chemistry Research, 37 (10), 4036-4048.

García-Ochoa F., Castro E. G., Santos V. E., 2000 "Oxygen transfer and uptake rates during xanthan gum production", Enzyme and Microbial Technology, 27, 680-690.

Gunaratnam M., Alva-Argaez A., Kokossis A., Kim J. K., Smith R., 2005, "Automated design of total water systems", Industrial and Engineering Chemistry Research**,** 44 (33), 588-599.

Haimes Y. Y., Lasdon L. S., Wismer D. A., 1971, "On a bicriterion formulation of the problems of integrated system identification and system optimization", IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics**,** 1, 296-297.

Hamamoto Y., Tabata S., Okubo Y., 1997, "Development of the intermittent cyclic process for simultaneous nitrogen and phosphorus removal", Water Science and Technology, 35, 145-152.

Hernandez-Suarez R., Castellanos-Fernandez J., Zamora J. M., 2004 ,"Superstructure decomposition and parametric optimization approach for the synthesis of distributed wastewater treatment networks", Industrial and Engineering Chemistry Research, 43 (9), 2175-2191.

Igbinosa E. O., Okoh A. I., 2009, "Impact of discharged wastewater effluents on the physico-chemical qualities of a receiving watershed in a typical rural community", International Journal Environmental Science and Technology, 6, 175182.

Iyer R. R., Grossmann I. E., 1997, "Optimal multiperiod operational planning for utility systems", Computers and Chemical Engineering, 21 (8), 787–800.

Iyer R. R., Grossmann I. E., 1997, "A bilevel decomposition algorithm for long-range planning of process networks", Industrial and Engineering Chemistry Research, 37 (2), 474–481.

Ji, Z. G., 2008, "Hydrodynamics and water quality: Modeling rivers, lakes, and estuaries", Wiley-Interscience: Hobeken, NJ.

Karuppiah R., Grossmann I. E., 2006, "Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes", Computers and Chemical Engineering, 30 (4), 650-673.

Kennish M. J., 1999, "Estuary restoration and maintenance", CRC Press Boca Raton, Florida, USA.

Kuo W. C. J., Smith R., 1997, "Effluent treatment system design", Chemical Engineering Science, 52 (23), 4273-4290.

Lampert C., Brunner P. H., 1999, "Material accounting as a policy tool for nutrient management in the Danube Basin", Water Science and Technology, 40 (10), 43-49.

Lira-Barragan L. F., Ponce-Ortega J. M., Serna-Gonzalez M., El-Halwagi M. M., 2011 "An MINLP model for the optimal location of a new industrial plant with simultaneous consideration of economic and environmental criteria", Industrial and Engineering Chemistry Research, 50 (2), 953-964.

Lira-Barragan L. F., Ponce-Ortega J. M., Serna-Gonzalez M., El-Halwagi M. M., 2011 "Synthesis of water networks considering the sustainability of the surrounding watershed", Computers and Chemical Engineering, 35 (12), 2837-2852.

Lira-Barragán L. F., Ponce-Ortega J. M., Nápoles-Rivera F., Serna-González M., El-Halwagi M. M., 2012, "Incorporating the property-based water networks and surrounding watersheds in site selection of industrial facilities", Industrial and Engineering Chemistry Research**,** DOI: 10.1021/ie3003792.

Liu Y. S., Wu J. Y., Ho K. P., 2006 "Characterization of oxygen transfer conditions and their effects on Phaffia rhodozyma growth and carotenoid production in shake-flask cultures", Biochemical Engineering Journal, 27, 331-335.

Lovelady E. M., El-Baz A. A., El-Monayeri D., El-Halwagi M. M., 2009, "Reverse problem formulation for integrated process discharges with wastewater and drainage systems: Managing phosphorus in lake Manzala", Journal of Industrial Ecology, 13 (6), 914-927.

Mack P., 2003, "Dissolved oxygen and the three S.",1-12. Home Page: http://illinois.sierraclub.org/RPG/ reports/do1.pdf. (accessed Jun 22, 2012).

Morrison G., Fatoki O. S., Persson L., Ekberg A., 2001, "Assessment of the impact of point source pollution from the Keiskammahoek Sewage Treatment Plant on the Keiskamma River–pH, electrical conductivity, oxygen demanding substance (COD) and nutrients", Water SA, 27, 475-480.

Nápoles-Rivera F., Ponce-Ortega J. M., El-Halwagi M. M., Jiménez-Gutiérrez A., 2010, "Global optimization of mass and property integration networks with in-plant property interceptors", Chemical Engineering Science**,** 65 (15), 4363-4377.

Ng D. K. S., Foo D. C. Y., Tan R., 2009, "Automated targeting technique for single-impurity resource conservation networks. Part 2: Single-pass and partition waste-interception systems", Industrial and Engineering Chemistry Research, 48 (16), 7647–7661.

Papalexandri K. P., Pistikopoulos E. N., 1994, "A Multiperiod MINLP model for the synthesis of flexible heat and mass exchange networks", Computers and Chemical Engineering, 18 (11-12), 1125–1139.

Paules G. E. IV., Floudas C. A., 1992, "Stochastic programming in process synthesis: a two-stage model with MINLP recourse for multiperiod heat-integrated distillation Sequences" Computers and Chemical Engineering, 16 (3), 189–210.

Phiri O., Mumba P., Moyo B. H. Z., Kadewa W., 2005, "Assessment of the impact of industrial effluents on water quality of receiving rivers in urban areas of Malawi", International Journal Environmental Science Technology, 2, 237244.

Ponce-Ortega J. M., Serna-González M., Jiménez-Gutiérrez A., 2009, "A disjunctive programming model for simultaneous synthesis and detailed design of cooling networks", Industrial and Engineering Chemistry Research, 48 (6), 2991-3003.

Ponce-Ortega J. M., Hortua A. C., El-Halwagi M. M., Jiménez-Gutiérrez A., 2009, "A property-based optimization of direct recycle networks and wastewater treatment processes", AIChE Journal**,** 55 (9), 2329-2344.

Ponce-Ortega J. M., El-Halwagi M. M., Jiménez-Gutiérrez A., 2010, "Global optimization of property-based recycle and reuse networks including environmental constraints", Computers and Chemical Engineering, 34 (3), 318-330.

Ponce-Ortega J. M., Mosqueda-Jiménez F. W., Serna-González M., Jiménez-Gutiérrez A., El-Halwagi M. M., 2011, "A property-based approach to the synthesis of material conservation networks with economic an environmental objectives", AIChE Journal**,** 57 (9), 2369-2387.

Putra Z. A., Amminudin K. A., 2008, "Two-step optimization approach for design a total water system", Industrial and Engineering Chemistry Research, 47 (16), 6045-6057.

Raman R., Grossmann I. E., 1994, "Modeling and computational techniques for logic based integer programming", Computers and Chemical Engineering, 18, 563-578.

Sahinidis N. V., Grossmann I. E., Fornari R. E., Chathrathi M., 1989, "Optimization model for long range planning in the chemical industry", Computers and Chemical Engineering**,** 13 (9), 1049–1063.

Sahinidis N. V., Liu M., 1996, "Long range planning in the process industries: a projection approach", Computers and Operations Research, 23 (3), 237–253.

Savelski M. J., Bagajewicz M. J., 2000, "On the optimality conditions of water utilization systems in process plants with single contaminants", Chemical Engineering Science**,** 55 (21), 5035-5048.

Savelski M. J., Bagajewicz M. J.. 2001. "Algorithmic procedure to design water utilization systems featuring a single contaminant in process plants", Chemical Engineering Science, 56 (5), 1897-1911.

Savelski M. J., Bagajewicz M. J., 2003, "On the necessary conditions of optimality of water utilization systems in process plants with multiple contaminants", Chemical Engineering Science, 58 (23-24), 5349-5362.

Schuyler R. O., 1997, "On/off aeration saves money and improves effluent quality", Fuel and Energy Abstracts, 38, 443-443.

SEMARNAT, 2011, "Secretary of Environment and Natural Resources", http://app1.semarnat.gob.mx/dgeia/informe_resumen/07_agua/cap7.html. (accessed 2012).

Teles J., Castro P. M., Novals A. Q., 2008, "LP-based solution strategies for the optimal design of industrial water networks with multiple contaminants", Chemical Engineering Science, 63 (2), 376-394.

Ugochukwu C.N.C., 2004, "Effluent monitoring of an oil servicing company and its impact on environment", Ajeam-Ragee, 8, 27-30.

Varvarezos D. K., Grossmnann I. E., Biegler L. T., 1992, "An outer-approximation method for multiperiod design optimization", Industrial and Engineering Chemical Research, 31 (6), 1466-1477.

Viswanathan J., Grossmann I. E., "A combined penalty function and outer approximation method for MINLP optimization", Computers and Chemical Engineering, 14, 769-782.

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

Journal of Loss Prevention in the Process Industries

September 2013, Pages 908–923

Special Issue: Process Safety and Globalization

On the environmental, economic and safety optimization of distributed treatment systems for industrial effluents discharged to watersheds

Juan Martinez-Gomez[a], Oscar Burgara-Montero[a], José M. Ponce-Ortega[a], Fabricio Nápoles-Rivera[a], Medardo Serna-González[a], Mahmoud M. El-Halwagi[b, ,]

[a] Chemical Engineering Department, Universidad Michocana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58060, Mexico.

[b] Chemical Engineering Department, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA.

[c] Adjunct Faculty at the Chemical and Materials Engineering Department, Faculty of Engineering, King Abdulaziz University, Jeddah 21589, P.O. Box 80204, Saudi Arabia.