

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



División de Estudios de Posgrado

Facultad de Ingeniería Química



**REAJUSTE ÓPTIMO DE PROCESOS PARA EL USO EFICIENTE DEL
AGUA EN LAS INDUSTRIAS**

TESIS presentada por:

César Sotelo Pichardo

**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: Dr. José María Ponce Ortega

Co-Asesor: Dr. Medardo Serna Gonzalez

Morelia, Michoacán

Octubre de 2015

RESUMEN

POR M.C. CESAR SOTELO PICHARDO

En el presente trabajo se proponen dos modelos de programación matemática para la síntesis óptima y la reconfiguración de redes de agua basada en las propiedades de las corrientes que impactan el procesamiento en las instalaciones de una planta y el ambiente. Una de las características principales de las aproximaciones propuestas es la consideración de cambios en la operación de la planta durante un horizonte de tiempo con demandas crecientes.

La optimización considera cambios en las demandas, además de variaciones en los flujos necesarios por los procesos en función del tiempo y modificaciones en las restricciones que tienen cada operación unitaria del proceso, así como también las ambientales que se vuelven más estrictas con el fin de proteger nuestro planeta.

Los modelos permiten la instalación de diferentes unidades de tratamiento y el reajuste de la red de agua en cada periodo del horizonte de tiempo. La función objetivo minimiza el costo total asociado a la vida productiva del proceso mientras toma en cuenta el valor del dinero a través del tiempo, asimismo los cambios en la demanda del proceso y ambiente durante la vida del proyecto.

Los modelos propuestos son formulaciones mixto-entero no lineales (MINLP), las cuales son aplicables a cualquier caso de estudio. Se resuelven varios casos de estudio para mostrar su aplicabilidad de los modelos propuestos donde se destacan las ventajas tanto económicas como ambientales.

Palabras clave: reajuste, redes de agua, optimización, MINLP, propiedades.

DIRIGIDO POR:

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

DR. MEDARDO SERNA GONZÁLEZ

ABSTRACT

BY M.S. CESAR SOTELO PICHARDO

This work presents two mathematical programming models for the optimal synthesis and retrofitting of water networks based on the properties of the streams that impact the processing in the plant and environment. One important feature of the proposed approaches is that they account for changes in the operation through a time horizon with growing demands.

The optimization formulations consider changes in the demands and account for time-based variations in the flowrates required for the process sinks and constraints for properties in the process sinks and in the environment, that become stricter over the time.

Furthermore, the proposed models allow the installation of different units and the retrofitting of the water network over the considered time horizon. The objective function minimizes the total cost associated with the entire life of the project while accounting for the time value of money through the time and the specific demands for the process and the environment that change through the life of the project.

The proposed models are Mixed Integer Non Linear Programming (MINLP) formulations, which are applicable to any case study. Several case studies are solved to show the applicability of the proposed approaches, where there are identified significant economic and environmental benefits.

Key words: retrofit, water networks, optimization, properties, MINLP.

DIRECTED BY:

PH.D. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

PH.D. MEDARDO SERNA GONZÁLEZ

DEDICATORIAS

A MIS PADRES

CARMELA PICHARDO PONCE

JOSÉ SOTELO RODRÍGUEZ

A MIS HERMANOS

OMAR SOTELO PICHARDO

OSCAR SOTELO PICHARDO

AGRADECIMIENTOS

A MIS ASESORES

D. C. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

D. C. MEDARDO SERNA GONZÁLEZ

A CONACYT

A MIS SINODALES

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

DR. MEDARDO SERNA GONZÁLEZ

DR. FABRICIO NÁPOLES RIVERA

DR. AGUSTÍN JAIME CASTRO MONTOYA

DRA. JANETT BETZABE GONZÁLEZ CAMPOS

A LA UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO

ÍNDICE

RESUMEN	II
ABSTRACT.....	III
ÍNDICE DE TABLAS.....	VIII
ÍNDICE DE FIGURAS.....	XI
NOMENCLATURA.....	XII
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1 JUSTIFICACIÓN.....	1
1.2 HIPÓTESIS.....	2
1.3 OBJETIVOS.....	2
A) OBJETIVO GENERAL.....	2
B) OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	3
CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO.....	4
2.1 ANTECEDENTES.....	4
CAPÍTULO 3. RECONFIGURACIÓN OPTIMA DE LAS REDES DE AGUA BASADA EN PROPIEDADES.....	8
3.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	8
3.2 FORMULACIÓN DEL MODELO.....	8
3.3 ESTRATEGIA DE SOLUCIÓN.....	23
3.4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	25
EJEMPLO 1 (PRODUCCIÓN DE FENOL A PARTIR DE CUMENO).....	25
EJEMPLO 2 (PRODUCCIÓN DE PAPEL).....	33
EJEMPLO 3.....	39
CAPÍTULO 4. SÍNTESIS ÓPTIMA DE REDES DE AGUA BASADAS EN PROPIEDADES CONSIDERANDO DEMANDAS CRECIENTES.....	50

4.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	50
4.2 FORMULACIÓN DEL MODELO.....	52
4.3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	63
CASO DE ESTUDIO 1.....	63
CASO DE ESTUDIO 2.....	69
CONCLUSIONES.....	78
BIBLIOGRAFÍA.....	80
APÉNDICES.....	88

ÍNDICE DE TABLAS

3.1	Datos de las corrientes para el Ejemplo 1.....	25
3.2	Restricciones de propiedades en los procesos del Ejemplo 1.....	26
3.3	Restricciones ambientales en la propiedades Ejemplo 1.....	26
3.4	Datos de las tuberías Ejemplo 1.....	26
3.5	Flujos antes y después de la ampliación de la planta Ejemplo 1.....	26
3.6	Unidades de tratamiento para el Ejemplo 1.....	27
3.7	Datos de las corrientes antes del reajuste.....	28
3.8	Propiedades de las corrientes en el reajuste de la red Ejemplo 1.....	29
3.9	Propiedades de las corrientes después del reajuste para el caso b del Ejemplo 1...	31
3.10	Comparación de casos Ejemplo 1: original, reajuste y reajuste con ampliación...	32
3.11	Propiedades de las corrientes Ejemplo 2.....	33
3.12	Restricciones para los procesos Ejemplo 2.....	33
3.13	Restricciones ambientales para el Ejemplo 2.....	33
3.14	Tuberías y bombeo para el Ejemplo 2.....	33
3.15	Datos para la ampliación.....	34
3.16	Unidades de tratamiento disponibles para el Ejemplo 2.....	34
3.17	Datos de las corrientes antes del reajuste.....	35
3.18	Datos de las corrientes después del reajuste para el Ejemplo 2.....	36
3.19	Propiedades de las corrientes después del reajuste amplificado ejemplo 2.....	37
3.20	Comparación de resultados Ejemplo 2.....	38
3.21	Datos para las fuentes de proceso y frescas.....	39
3.22	Restricciones en los procesos para el Ejemplo 3.....	39
3.23	Restricciones ambientales Ejemplo 3.....	40
3.24	Eficiencia y costo de las unidades de tratamiento disponibles para el Ejemplo 3..	41

3.25	Mejoras de la eficiencia en la unidad existente para el Ejemplo 3.....	41
3.26	Tuberías y bombeo para el Ejemplo 3.....	42
3.27	Propiedades de las corrientes antes del reajuste para el Ejemplo 3.....	42
3.28	Cambios en las corrientes en las ampliaciones.....	43
3.29	Propiedades de las corrientes después del reajuste para el Ejemplo 3.....	44
3.30	Corrientes después de la ampliación del Ejemplo 3.....	46
3.31	Comparación de resultados para el Ejemplo 3.....	47
3.32	Resultados computacionales.....	48
4.1	Operadores de propiedad reportados previamente.....	53
4.2	Flujos de las fuentes de proceso y los factores de anualización del Ejemplo 1.....	63
4.3	Restricciones en los flujos para los procesos a los cuales se descarga.....	63
4.4	Propiedades para las fuentes de proceso en cada tiempo t	63
4.5	Restricciones de las propiedades para las descargas.....	63
4.6	Eficiencia de las unidades de tratamiento.....	63
4.7	Costo de las unidades de tratamiento.....	64
4.8	Factores usados en la mejora de las unidades de tratamiento.....	64
4.9	Costo de las tuberías	64
4.10	Flujos de las fuentes de proceso a procesos en los cuales se descarga en la solución óptima.....	66
4.11	Flujos de las fuentes de proceso hacia las unidades de tratamiento.....	66
4.12	Flujos de las unidades de tratamiento a las descargas del proceso.....	66
4.13	Propiedades de las corrientes a la entrada de las unidades de tratamiento.....	67
4.14	Propiedades para las corrientes de salida de las unidades de tratamiento.....	67
4.15	Propiedades para las corrientes de entrada a las descargas.....	67
4.16	Resultados económicos.....	67

4.17	Flujos de las fuentes de proceso y factores de anualización.....	68
4.18	Restricciones de flujos para las descargas.....	69
4.19	Restricciones en las propiedades para las descargas.....	69
4.20	Propiedades para las descargas.....	69
4.21	Eficiencias para las unidades de tratamiento.....	70
4.22	Mejoras disponibles para las unidades de tratamiento.....	70
4.23	Costos para las unidades de tratamiento	70
4.24	Costos de las tuberías	71
4.25	Flujo de las fuentes de proceso a las descargas en la solución óptima	73
4.26	Flujos de fuentes de proceso a las unidades de tratamiento.....	73
4.27	Flujo entre las unidades de tratamiento.....	73
4.28	Flujo de las unidades de tratamiento a las descargas.....	74
4.29	Propiedades para las corrientes de entrada a las unidades de tratamiento.....	74
4.30	Propiedades de salida de las unidades de tratamiento.....	75
4.31	Propiedades de entrada para las descargas.....	75
4.32	Resultados económicos del Ejemplo 2	76
4.33	Datos computacionales para los casos de estudio.....	76

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Superestructura del problema de una reconfiguración basada en propiedades.....	8
3.2	Costo capital de las nuevas unidades de tratamiento.....	17
3.3	Algoritmo de solución para un problema de reajuste de redes.....	23
3.4	Red original del Ejemplo 1.....	25
3.5	Reajuste del Ejemplo 1, caso A.....	29
3.6	Red reajustada con ampliación para el Ejemplo 1.....	30
3.7	Red original de la producción de papel para el Ejemplo 2.....	35
3.8	Configuración del reajuste para el Ejemplo 2 (caso A).....	36
3.9	Red reajustada incluida la ampliación Ejemplo2 (caso B).....	37
3.10	Red existente para el Ejemplo 3.....	40
3.11	Red reajustada para el Ejemplo 3.....	43
3.12	Red reajustada con ampliación para el Ejemplo 3.....	45
4.1	Superestructura del problema de demandas crecientes.....	51
4.2	Solución al peor escenario Ejemplo 1.....	65
4.3	Solución de red óptima de agua para el problema de reajuste multiperiodo Ejemplo 1.....	65
4.4	Solución al peor escenario Ejemplo 2.....	71
4.5	Solución óptima para el Ejemplo 2 con demandas crecientes.....	72

NOMENCLATURA

Parámetros

$CT_{i,j}$	Costo unitario para las tuberías de las fuentes de proceso i a los procesos j .
$CT_{i,u}$	Costo unitario para las tuberías de las fuentes de proceso i a las unidades de tratamiento u .
$CT_{r,j}$	Costo unitario para las tuberías de las fuentes frescas r a los procesos j .
$CT_{u,j}$	Costo unitario para las tuberías de las unidades de tratamiento u a los procesos j .
$CT_{u,u'}$	Costo unitario para las tuberías de las unidades de tratamiento u a otra unidad de tratamiento u' .
CO_u	Costo operacional de la unidad de tratamiento u .
$Costo_{r,t}$	Costo de la fuente fresca durante el periodo t , \$/kg.
CF_u^I	Costo fijo de instalación de la unidad u , \$.
CV_u^I	Costo variable de instalación de la unidad u , \$/(kg/h).
CF_u^A	Costo fijo para el incremento de capacidad de la unidad u , \$.
CV_u^A	Costo variable para el incremento de la capacidad de la unidad u , \$/(kg/h).
CF_u^M	Costo fijo para la mejora del desempeño de la unidad u , \$.
CV_u^M	Costo variable para la mejora del desempeño de la unidad u , \$/(kg/h).
$G_{j,t}^{\min}$	Flujo mínimo permitido para el proceso j en el periodo t , kg/h.
$G_{j,t}^{\max}$	Flujo máximo permitido para el proceso j en el periodo t , kg/h.
H_Y	Horas al año que la planta está en operación, h/año.
K_{Ft}	Factor de anualización para los costos capitales durante el periodo t , 1/año.
$Me_{u,p}$	Factor de mejora de la eficiencia para la unidad u y la propiedad p .
$pip_{i,j}$	Costo de bombeo para el segmento i a j , \$/(kg/h).
$pip_{i,u}$	Costo de bombeo para el segmento i a u , \$/(kg/h).

$pip_{r,j}$	Costo de bombeo para el segmento r a j , \$(/kg/h).
$pip_{u,j}$	Costo de bombeo para el segmento u a j , \$(/kg/h).
$pip_{u',u}$	Costo de bombeo para el segmento u' a u , \$(/kg/h).
$W_{i,t}$	Flujo de la fuente de proceso i durante el periodo t , kg/h.
Y_{Rt}	Años en el periodo t , años.
δ	Límite inferior para el flujo permitido en las tuberías.
$\psi_{j,t,p}^{\min}$	Operador mínimo para la propiedad p en el proceso j en el periodo t .
$\psi_{j,t,p}^{\max}$	Operador máximo para la propiedad p en el proceso j en el periodo t .
$\psi_{i,t,p}$	Valor del operador de propiedad p en la fuente de proceso i en el periodo t .
$\psi_{r,t,p}$	Valor del operador de propiedad p en la fuente fresca r en el periodo t .

Variables

$Cost_{u,t}$	Costo total por el uso de la unidad de tratamiento u en el periodo t , \$.
$Costa_{u,t}$	Costo de incrementar la capacidad de la unidad de tratamiento u en el periodo t , \$.
$Costm_{u,t}$	Costo de mejorar el desempeño de la unidad de tratamiento u en el periodo de t , \$.
$Costtub_{i,j,t}$	Costo de las tuberías entre las fuentes de proceso i y los procesos j , en el periodo t , \$.
$Cost_r$	Costo total de las fuentes frescas r , \$/año
$Costo_u$	Costo total de las unidades de tratamiento u , \$/año.
$Costopip_{i,j}$	Costo total de las tuberías entre fuentes de proceso i y los procesos j , \$/año.
$Costopip_{i,u}$	Costo total de las tuberías entre fuentes de proceso i y las unidades de tratamiento u , \$/año.
$Costopip_{r,j}$	Costo total de las tuberías entre fuentes frescas r y los procesos j , \$/año.
$Costopip_{u,j}$	Costo total de las tuberías entre unidades de tratamiento u y los procesos j , \$/año.

$Costopip_{u',u}$	Costo total de las tuberías entre unidades de tratamiento u y u' , \$/año.
$Costopip$	Costo total de las tuberías y bombeo, \$/año.
$Ef_{u,t,p}^{use}$	Máxima eficiencia usada en la unidad de tratamiento u antes del periodo t .
$Ef_{u,t,p}^1$ $Ef_{u,t,p}^2$	VARIABLES disgregadas de la eficiencia usada en la unidad de tratamiento u en el periodo t .
$F_{r,t}$	Flujo usado de las fuentes frescas r en la planta en el periodo t , kg/h.
$f_{r,j,t}$	Flujo enviado de las fuentes frescas r a los procesos j en el periodo t , kg/h.
$G_{j,t}$	Flujo enviado a las procesos j en el periodo t , kg/h.
$H_{u,t}$	Flujo enviado a las unidades de tratamiento u en el periodo t , kg/h.
$h_{u,j,t}^1$	Flujo enviado de las unidades de tratamiento u a los procesos j en el periodo t , kg/h.
$h_{u,u',t}^2$	Flujo enviado de las unidades de tratamiento u a otra unidad de tratamiento u' en el periodo t , kg/h.
$H_{u,t}^{A1}$ $H_{u,t}^{A2}$	Flujo disgregado en las unidades de tratamiento u en el periodo t , kg/h.
$H_{u,t}^{use}$	Flujo máximo tratado en la unidad de tratamiento u antes del periodo t , kg/h.
$H_{u,t}^{AB1}$ $H_{u,t}^{AB2}$	Flujo disgregado de $H_{u,t}^{A1}$, kg/h.
TC	Costo total de la planta, \$/año.
$w_{i,j,t}^1$	Flujo enviado de la fuente de proceso i a los procesos j en el periodo t , kg/h.
$w_{i,u,t}^2$	Flujo enviado de la fuente de proceso i a las unidades de tratamiento u en el periodo t , kg/h.
$w_{i,j,t}^{1,use}$	Flujo máximo enviado de las fuentes de proceso i a los procesos j , kg/h.
$Y_{u,t}$	Variable booleana para la existencia de las unidades de tratamiento u en el periodo t .
$y_{u,t}$	Variable binaria para la existencia de las unidades de tratamiento u en el periodo t .

$Y_{u,t}^{A1} Y_{u,t}^{A2}$	Variables booleana para el previo uso de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$y_{u,t}^{A1} y_{u,t}^{A2}$	Variable binaria para el previo uso de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$Y_{u,t}^{B1} Y_{u,t}^{B2}$	Variable booleana para el incremento de capacidad de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$y_{u,t}^{B1} y_{u,t}^{B2}$	Variables binarias para el incremento de capacidad de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$Y_{u,t}^{C1} Y_{u,t}^{C2}$	Variable booleana para la mejora del desempeño de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$y_{u,t}^{C1} y_{u,t}^{C2}$	Variables binarias para la mejora del desempeño de la unidad u en el periodo t.
$Y_{i,j,t}^{pip}$	Variable booleana para el uso de tuberías entre fuentes de proceso i y los procesos j en el periodo t.
$y_{i,j,t}^{pip}$	Variable binaria para el uso de tuberías entre fuentes de proceso i y los procesos j en el periodo t.
$Y_{i,j,t}^{D1} Y_{i,j,t}^{D2}$	Variables booleanas para la instalación de tuberías entre fuentes de proceso i y los procesos j en el periodo t.
$y_{i,j,t}^{D1} y_{i,j,t}^{D2}$	Variables binarias para la instalación de tuberías entre fuentes de proceso i y los procesos j en el periodo t.
$\psi_{u,t,p}^{in}$	Valor del operador de propiedad p a la entrada de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$\psi_{u,t,p}^{out}$	Valor del operador de propiedad p a la salida de la unidad de tratamiento u en el periodo t.
$\psi_{j,t,p}$	Valor del operador de propiedad p en el proceso j en el periodo t.

Conjuntos

NFRESH Fuentes frescas ($r|r = 1, \dots, \text{NFRESH}$)

NPROP	Propiedades ($p p= 1, \dots, NPROP$)
NSINK	Procesos ($j j = 1, \dots, NSINKS$)
NSOURCES	Fuentes de proceso ($i i = 1, \dots, NSOURCES$)
NTIME	Periodos ($t t = 1, \dots, NTIME$)
NTREAT	Unidades de tratamiento ($u u = 1, \dots, NTREAT$)

Índices

D= disgregadas

i= fuentes de proceso

in= entrada

j= proceso

max= máximo

min= mínimo

out= condiciones de salida

p= propiedades

r= fuentes frescas

u= unidades de tratamiento

u'= unidades de tratamiento conectadas a otra unidad de tratamiento

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.

En la actualidad el uso apropiado de los recursos naturales en las industrias es de gran importancia para lograr la sustentabilidad. En este sentido, las redes de conservación de materia permiten el uso adecuado de estos recursos en las industrias por medio del reúso, reciclaje y regeneración de las corrientes de los procesos para reducir el consumo de materias primas y la descarga de los desechos al ambiente.

Una de las aplicaciones de la integración másica es la minimización del consumo de agua fresca en los procesos industriales a través de redes de reciclaje y reúso. A la fecha se han reportado un gran número de trabajos para la síntesis de redes de agua en la industria química y de procesos con excelentes resultados en términos de la reducción de agua fresca y el costo total para satisfacer las demandas de agua. De esta manera, actualmente existen una gran cantidad de redes de agua que operan, pero lo hacen bajo condiciones sub-óptima, ya que fueron diseñadas con metodologías inadecuadas, no tomaron en cuenta diversos factores en su diseño o por que las condiciones de los procesos han cambiado con el tiempo de operación. Por tal motivo, se requiere de metodologías que consideren el reajuste óptimo de redes de agua considerando la infraestructura existente así como de considerar nuevas unidades de proceso o modificar las ya existentes. De esta manera, el presente proyecto de Tesis contempla desarrollar metodologías que permitan el reajuste óptimo de redes de agua en la industria.

1.1 Justificación.

Todos los trabajos reportados para el reajuste de redes de agua hasta antes del presente proyecto de Tesis tienen al menos una de las siguientes limitaciones:

No han considerado las restricciones dadas por las regulaciones ambientales para la descarga de corrientes al ambiente.

Sólo se han enfocado en maximizar el intercambio másico a un menor costo sin tener en cuenta los tratamientos adicionales requeridos por las corrientes generadas para satisfacer las regulaciones ambientales.

Los modelos previos no consideran el diseño existente del proceso, por lo que no involucran los costos asociados al reajuste de tuberías.

No se considera la posibilidad de modificar las unidades de tratamiento ya existentes o la instalación de nuevas unidades para el reajuste de estas redes.

Otro aspecto importante es que se supone en la síntesis de redes de agua es considerar el peor de los escenarios, considerando desde un inicio el máximo tamaño que llegará a cubrir la producción, requiriendo grandes inversiones desde el comienzo a pesar de no ser utilizadas durante algún tiempo.

Por lo tanto, en el presente proyecto de Tesis se busca eliminar estas carencias en los modelos propuestos además de considerar trabajar con propiedades que nos permitan caracterizar mejor las corrientes, en el sentido de que la sinergia producida por la mezcla de una gran cantidad de componentes no puede ser caracterizada fácilmente, debido a la posibilidad de que trazas lleguen a modificar en gran medida las propiedades.

1.2 Hipótesis

En este trabajo se desarrollarán modelos matemáticos para la optimización, síntesis y reajuste de redes de intercambio de materia que permitirán minimizar los costos del proceso y al mismo tiempo produzcan un proceso que se ajuste a los requerimientos ambientales de las descargas evitando comprometer el medio ambiente.

1.3 Objetivos

A) OBJETIVO GENERAL.

Desarrollar metodologías para determinar el diseño y reajuste óptimo de redes de intercambio másico considerando el uso de las propiedades para caracterizar las corrientes de los procesos, además de considerar el reajuste de estos procesos cada cierto tiempo para evitar una gran inversión inicial.

B) OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

- Diseñar una metodología de optimización para el reajuste de redes de agua basada en propiedades.
- Considerar varios casos para ver la aplicabilidad de la metodología.
- Diseñar un modelo de programación disyuntiva basado en propiedades para la síntesis de un proceso considerando las demandas crecientes.
- Aplicar este modelo a varios casos para ver sus resultados.

CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO

Las estrategias de optimización para la integración másica se han desarrollado debido a los beneficios económicos y ambientales que proveen. La integración másica se puede usar para reducir el consumo de materia prima y al mismo tiempo reducir las descargas de desechos al medio ambiente. Los conceptos básicos de la integración másica pueden encontrarse en las siguientes referencias El-Halwagi, 2006, 1997. Una de las más interesantes aplicaciones de estas estrategias es la minimización de consumo de agua fresca en las industrias por medio del uso de redes de recicló y reúso, considerando unidades de regeneración.

2.1 Antecedentes

Algunos de los trabajos que han utilizado diseños conceptuales y gráficos para resolver algunos casos de integración másica son los siguientes. Wang y Smith (1994) presentan una aproximación gráfica para determinar el mínimo posible desecho descargado al ambiente. Dhole et al. (1996) presentan una aproximación gráfica basada en concentración contra el diagrama de flujos para la síntesis de redes de agua. Gomes et al. (2007), El-Halwagi y Spriggs (1996), Sorin y Bedard (1999), Kuo y Smith (1998), Polley y Polley (2000) y Hallale (2002) desarrollaron técnicas gráficas para las minimizar el consumo de agua fresca en las industria. El-Halwagi et al. (2003) presentaron un diagrama pinch para la recuperación de materia por medio de estrategias de segregación, recicló, reúso y mezclado. Dakwala et al. (2009), Kumaraprasad y Muthukumar (2009) Foo et al. (2005) Saw et al. (2011), Chen y Lee (2010), Tan et al. (2010) y Manan et al. (2009) propusieron métodos algebraicos para minimizar el consumo de agua en las industrias. Otras metodologías son las aproximaciones matemáticas. En este contexto, Takama et al. (1980) presentaron un modelo de optimización para minimizar el consumo de agua en la industria del petróleo. Doyle y Smith (1997), Alva-Argaez et al. (1998), Faria et al. (2009), y Quesada y Grossmann (1995) propusieron modelos de optimización para la síntesis de redes de agua. Galan y Grossmann (1998) extendieron un modelo anterior para incluir la selección de nuevas tecnologías de regeneración de agua. Lee y Grossmann (2003) desarrollaron un modelo de programación disyuntiva general basada en el modelo de Quesada y Grossmann (1995) tomando como decisión discreta la existencia de las unidades de tratamiento. Gabriel y El-Halwagi (2005) desarrollaron una aproximación de optimización global para la síntesis de redes de agua usando la representación de descargas-

interceptores-fuentes de proceso con un modelo lineal simplificado. Huang et al. (1999), Benko et al. (2000), Savelski y Bagajewicz (2000), Hernandez-Suarez et al. (2004), Gabriel y El-Halwagi (2005), Gunaratnam et al. (2005), Lavric et al. (2005), Erol y Thoming (2005), Karuppiah y Grossmann (2006), Tan et al. (2008), Feng et al. (2008), Oliver et al. (2008), Statyukha et al. (2008), Tokos y Pintaric (2009), Kim et al. (2009), Lancu y col. (2009), Castro et al. (2009), Chew et al. (2009), Bai et al. (2010), Handani et al. (2010), Aviso et al. (2010), Chen et al. (2010a,b), Kirthick et al. (2010), Nápoles-Rivera et al. (2010), Ng. et al. (2010), Ponce- Ortega et al. (2010), Poplewski et al. (2010), Chew et al. (2011), y Taskhiri et al. (2015). buscaron la solución para el problema de minimización del agua de desecho considerando problemas multi-componentes con corrientes de regeneración y propusieron el uso de la regeneración dentro de la planta para reducir la cantidad de agua fresca usada. Bai et al. (2010) proponen una aproximación para el diseño óptimo para redes de agua usando regeneración y reúso para un solo contaminante. Li y Chang (2011a) propusieron un modelo de optimización multi-objetivo para la síntesis de una red de agua con un sólo contaminante. Después, Li y Chang (2011b) extendieron este modelo a múltiples componentes. Lira-Barragán et al. (2011a; b; 2013) incorporan la sustentabilidad de la cuenca circundante en la síntesis de redes de agua, y Ponce-Ortega et al. (2012) propusieron una linealización del modelo para la síntesis de redes de agua. Todos estos trabajos previos han considerado la síntesis de redes de agua, pero debido al paso del tiempo muchas redes se encuentran operando de manera sub-óptima, debido a que fueron diseñadas con metodologías ineficientes o a que las condiciones de los procesos han cambiado o a que las restricciones ambientales se han vuelto más estrictas.

Es importante considerar que las metodologías de reajustes toman en cuenta las unidades existentes, la mejora en capacidad y eficiencia de las mismas, y suponer la posibilidad de agregar nuevas unidades de tratamiento por medio de una nueva configuración de las tuberías que satisfaga al último proceso y sus restricciones ambientales, y al mismo tiempo que reduzca el consumo de materia prima y en consecuencia la descarga de desechos al ambiente. Cabe mencionar que el costo que se asocia a un reajuste es por el cambio de la configuración de las tuberías, la modificación de las unidades de tratamiento y el costo de las nuevas unidades, el cual debe de ser menor a los ahorros asociados a la compra de materia prima para lograr que el reajuste sea económicamente atractivo. Conjuntamente, el reajuste de la

red nos produce simultáneamente una mejora importante desde los puntos de vista económico y ambiental.

En el contexto del reajuste de redes de intercambio másico, los trabajos de Fraser y Hallale (2000) presentaron una analogía con las redes de intercambio de calor y las redes de intercambio de masa basados en la tecnología del punto de pliegue. Liao et al. (2010) presentaron un modelo de programación matemática para el reajuste de las redes de hidrogeno. Alfadala et al. (2001) presentaron una metodología basada en un grupo de reglas heurísticas para el reajuste de redes de intercambio másico considerando como objetivo la minimización del costo total. Chen y Hung (2005) desarrollaron una formulación mixto-entero no lineal (MINLP) para el reajuste de una unidad de intercambio másico considerando el uso de agentes externos para facilitar la separación de componentes y la implementación de las nuevas unidades. Tan y Cruz (2004) desarrollaron modelos de programación lineal para la síntesis de una red robusta de reúso de agua para problemas de un sólo componente. Tan y Manan (2006) presentaron una metodología para el reajuste de redes de agua e introdujeron unidades de regeneración usando una aproximación secuencial. Tan et al. (2007) presentaron una técnica basada en el punto de pliegue para el reajuste de redes de agua con regeneración. Yin y Manan (2008) propusieron una técnica sistemática para el reajuste de redes de agua ya existentes basadas en el análisis del punto de pliegue, Faria y Bajajewcz (2009) presentaron un modelo matemático para el reajuste de redes de agua en plantas de proceso. Sujo-Nava et al. (2009) presentaron un caso de estudio para el reajuste del agua acida en una refinería de petróleo. Sotelo-Pichardo et al. (2011) propusieron un modelo matemático para el reajuste de redes de agua basado en restricciones dadas en términos de los límites para la composición de corrientes que se utilizaran en la red. Foo (2013) presentó una aproximación gráfica que provee una guía para cambios en los recursos del proceso en redes de conservación de recursos. Khor et al. (2012) presentaron una aproximación para la minimización del consumo de agua fresca en el reajuste de una refinería de petróleo, y Rubio-Castro et al. (2012) proponen un modelo matemático para la reconfiguración de redes de agua de múltiples plantas en un parque eco-industrial basado en las propiedades de las corrientes.

Algunas consideraciones no hechas en los trabajos previos es no considerar la calidad del agua que se desea enviar al ambiente, si este proceso se tiene planeado expandir y tomar las

restricciones en base a propiedades esto debido a la dificultad de cuantificar estas en base a la cantidad de componentes porque la mayoría de las corrientes en los procesos industriales contienen una gran cantidad de componentes o que alguna traza de éstos llega a modificar de manera importante alguna propiedad. Para resolver estas limitantes, Shelley y EL-Halwagi (2000) introdujeron el concepto de diseño sin componentes basado en propiedades usando el concepto de clusters. El-Halwagi et al. (2004) generalizaron el concepto de integración de propiedades como una aproximación holística basada en la funcionalidad para la localización y manipulación de corrientes y unidades de proceso, la cual se basa en la trazabilidad, ajuste, y asignación de funcionalidad a través del proceso. Esta aproximación basada en propiedades ha sido aplicada en el diseño de redes de agua por Kazantzi y El-Halwagi (2005), Foo et al. (2006), Ng et al. (2009;2010), Ponce-Ortega et al. (2009; 2010; 2011), Napoles-Rivera et al. (2010), Deng y Feng (2011), Saw et al. (2011), Kheireddine et al. (2011; 2013). Sin embargo, nadie lo considero para el reajuste de redes ya existentes.

Por lo tanto, para superar las carencias que se encontraron en los trabajos anteriores, en este trabajo se proponen estrategias para la síntesis, reajuste y optimización de redes de agua considerando demandas crecientes y/o basadas en composiciones. Logrando mantener un equilibrio entre las metas económicas y ambientales.

CAPÍTULO 3. RECONFIGURACIÓN ÓPTIMA DE LAS REDES DE AGUA BASADA EN PROPIEDADES.

3.1 Planteamiento del problema

Se propone un modelo de programación matemática para la reconfiguración de redes de agua existentes basadas en las propiedades de las corrientes que impactan el desempeño de las unidades de proceso y ambientales. Para desarrollar una configuración mejorada, el modelo evalúa simultáneamente la reconfiguración de las tuberías de una red existente por medio de la instalación y reasignación de las unidades de tratamiento existentes y la adición de nuevas unidades de tratamiento para lograr cumplir las restricciones ambientales. El modelo además toma en cuenta la opción de modificar e incrementar la capacidad de la planta. La función objetivo del modelo de optimización busca minimizar el costo anual total para el sistema que incorpora el capital invertido con el reajuste y el costo operacional que incluyen los costos de las fuentes frescas.

Trabajos previos han tenido una o varias de las siguientes limitaciones:

1. Se enfocan en las restricciones de los procesos sin tomar en cuenta las características del agua de descarga al medio ambiente o el impacto de la misma.
2. El diseño se basa en las condiciones del proceso actual sin tomar en cuenta que pueda haber algún cambio en el proceso.
3. Las restricciones de las corrientes están dadas en composiciones, no en propiedades. Lo que implica que el cálculo de las propiedades en base a las composiciones sea muy complejo, debido al gran número de componentes presentes en las corrientes de desecho que se necesitan en las ecuaciones, o debido a componentes que se encuentran en cantidades de trazas, y no se toman en cuenta en las ecuaciones pero sin embargo modifican significativamente las propiedades de las corrientes.

3.2 Formulación del modelo

El modelo se basa en la siguiente superestructura (ver Figura 3.1), en la cual las líneas solidas representan las tuberías y las unidades de tratamiento presentes antes del reajuste. Antes de

la renovación del proceso, las fuentes de proceso son enviadas a unidades de tratamiento o a las descargas, después de las unidades tratamiento, estas corrientes pueden ser enviadas de nuevo a las otras unidades de tratamiento o a las descargas. Las unidades de tratamiento ayudan a modificar las propiedades de las corrientes de proceso. Éstas se pueden usar para eliminar contaminantes (regenerando corrientes y reduciendo su toxicidad), aeración (reduciendo la demanda química de oxígeno), o agregando una base o ácido (para ajustar el pH). Las fuentes frescas deben ser enviadas exclusivamente a los procesos. Las líneas punteadas representan nuevas tuberías y nuevas unidades de tratamiento que pueden ser instaladas para el reajuste. Vale la pena mencionar que las tuberías y unidades de tratamiento pueden ser usadas en el reajuste, el modelo los tiene considerados, lo cual es un punto clave en la estrategia de reajuste.

Los índices usados en la formulación son: i para fuentes de proceso, r para fuentes frescas, j para procesos, p para propiedades y u para las unidades de tratamiento.

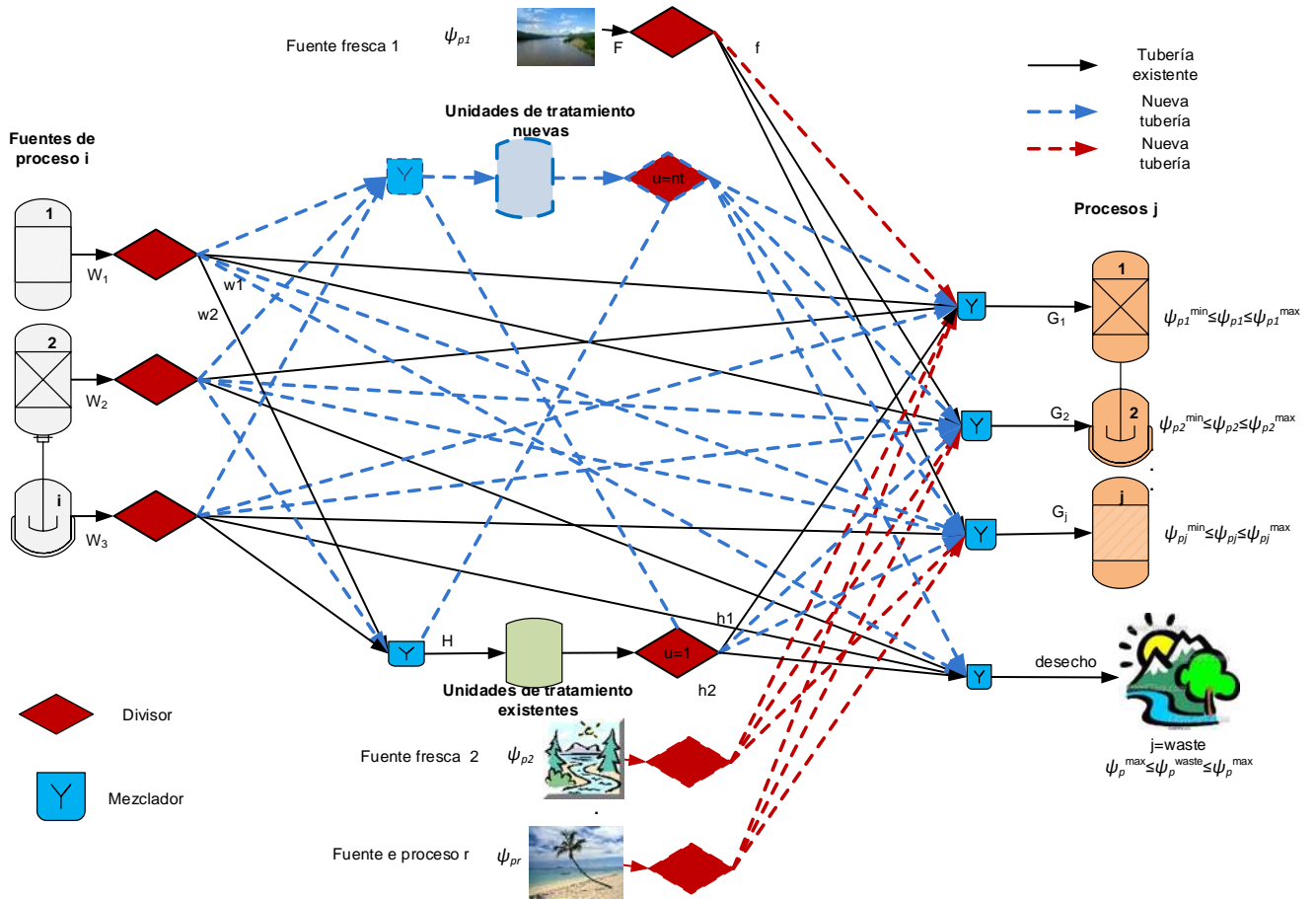


Figura 3.1 Superestructura del problema de una reconfiguración basada en propiedades.

El modelo asociado a la superestructura anterior se muestra a continuación.

DIVISIÓN DE LAS FUENTES DE PROCESO

Cualquier fuente de proceso W_i puede ser dividida y enviada a cualquier proceso (w_{1ij}) y/o a cualquier unidad de tratamiento (w_{2iu}) nueva o existente. Esto se modela por medio de la siguiente ecuación:

$$W_i = \sum_{j \in NSINKS} w_{1ij} + \sum_{u \in NTREAT} w_{2iu}, \forall i \in NSOURCES \quad (3.1)$$

DIVISIÓN DE LAS FUENTES FRESCAS

Cada fuente fresca Fr puede ser dividida y dirigida a cualquier proceso como sigue:

$$F_r = \sum_{\substack{j \in NSINKS \\ j \neq waste}} f_{rj}, \forall r \in NFRESH \quad (3.2)$$

Las fuentes frescas no deben ser enviadas al desecho lo que se modela a continuación:

$$f_{rj} = 0, \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS, j = waste \quad (3.3)$$

BALANCES EN LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

El balance global de masa para cada unidad de tratamiento a la entrada de la misma es:

$$H_u = \sum_{i \in NSOURCE} w_{2iu} + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{2u'u}, \forall u \in NTREAT \quad (3.4)$$

Donde, el flujo total de cualquier unidad H_u es la suma de los flujos provenientes de las fuentes de proceso w_{2iu} y los flujos de las demás unidades de tratamiento $h_{2u'u}$.

También se requiere de los balances por operadores de propiedad en los mezcladores antes de las unidades de tratamiento para determinar el valor de estos operadores en las corrientes alimentadas a las unidades:

$$H_u \psi_{p,u}^{in} = \sum_{i \in NSOURCE} w_{2iu} \psi_{p,i} + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{2u'u} \psi_{p,u'}^{out}, \forall u \in NTREAT, p \in NPROP \quad (3.5)$$

En las ecuaciones previas, H_u es el flujo de entrada a la unidad de tratamiento u , $h_{2u'u}$ es el flujo de entrada a la unidad u proveniente de la unidad u' , se requiere de una restricción que no permita enviar el flujo de salida a la misma unidad (i.e., $h_{2u'u}=0$, para $u=u'$). $\psi_{p,u}^{in}$, $\psi_{p,u'}^{out}$ y $\psi_{p,i}$ son las composiciones para el operador de propiedad p para las corrientes de entrada y salida de las unidades de tratamiento y la de las fuentes de proceso, respectivamente.

El uso de los operadores de propiedad ψ_p es para tener una trazabilidad de las propiedades con una sola función, al no tener un comportamiento lineal es necesario hacer una transformación al operador de propiedad que ya tiene un comportamiento lineal.

DESEMPEÑO DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

El desempeño de las unidades de tratamiento es modelado a través del factor de eficiencia $EF_{p,u}$, este factor de eficiencia es la capacidad de modificar cada una de las propiedades de las corrientes para cada unidad de tratamiento. Éste puede ser calculado usando modelos como la ecuación de Kremser (El-Halwagi, 2006) y depende del tipo y tamaño de la unidad usada. Las unidades son simuladas antes del proceso de optimización para determinar los valores de $EF_{p,u}$ y el proceso de optimización consiste en la selección de la unidad de tratamiento además del flujo tratado por la misma. El operador de propiedad de salida para todas las propiedades a la salida de la unidad se calcula usando la siguiente ecuación:

$$\psi_{p,u}^{out} = EF_{p,u} \psi_{p,u}^{in}, \forall u \in NTREAT, p \in NPROP \quad (3.6)$$

BALANCES DE SALIDA EN LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO.

Para los flujos de salida de las unidades, H_u es dividido y enviado a los procesos h_{1uj} y/o reciclado a otra unidad de tratamiento para una modificación adicional ($h_{2uu'}$):

$$H_u = \sum_{j \in NSINKS} h_{1uj} + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{2uu'}, \forall u \in NTREAT \quad (3.7)$$

El flujo de salida de la unidad u no puede ser reciclado a la misma unidad:

$$h_{2uu'} = 0, \forall u, u' \in NTREAT, u = u' \quad (3.8)$$

BALANCES EN LOS MEZCLADORES PREVIOS A LOS PROCESOS

El flujo total de entrada a cualquier proceso G_j es la suma de los flujos provenientes de las fuentes frescas (f_{rj}), los flujos reciclados directamente de las fuentes de proceso (w_{lij}) y de los flujos enviados de las unidades de tratamiento (h_{1uj}):

$$G_j = \sum_{r \in NFRESH} f_{rj} + \sum_{i \in NSOURCE} w_{lij} + \sum_{u \in NTREAT} h_{1uj}, \forall j \in NSINKS \quad (3.9)$$

Adicionalmente, se requiere de los balances por operador de propiedad para determinar sus valores j ($\psi_{p,j}$), tomando en cuenta el valor proveniente de las fuentes frescas

$(\psi_{p,r})$, las fuentes de proceso $(\psi_{p,i})$ y las provenientes de las unidades de tratamiento $(\psi_{p,u}^{out})$ como sigue:

$$G_j \psi_{p,j} = \sum_{r \in NFRESH} f_{r,j} \psi_{p,r} + \sum_{i \in NSOURCE} w_{i,j} \psi_{p,i} + \sum_{u \in NTREAT} h_{i,u,j} \psi_{p,u}^{out} \quad (3.10)$$

$$\forall j \in NSINKS, p \in NPROP$$

RESTRICCIONES DE LOS PROCESOS

Cada proceso requiere de cierto flujo determinado de manera previa (G_j), definido por el diseño del proceso:

$$G_j^{\min} \leq G_j \leq G_j^{\max}, \forall j \in NSINKS \quad (3.11)$$

Donde, G_j^{\min} and G_j^{\max} son los flujos minimos y maximos permitidos por el proceso.

Además se requieren límites específicos para las propiedades en todos los procesos variando en cada propiedad, estas restricciones son establecidas en los operadores de propiedades debido a que son las variables de optimización.

$$\psi_{p,j}^{\min} \leq \psi_{p,j} \leq \psi_{p,j}^{\max}, \forall j \in NSINKS, p \in NPROP \quad (3.12)$$

Donde $\psi_{p,j}^{\min}$ y $\psi_{p,j}^{\max}$ son los limites inferior y superior, respectivamente, para las propiedades de los procesos. Debe tomarse en cuenta que cada proceso tiene distintas restricciones debido a que son distintos los procesos que se están alimentando. Un ejemplo es la descarga al medio ambiente, en el cual los límites de las propiedades son impuestos por las regulaciones ambientales gubernamentales para ciertas propiedades como son pH, toxicidad, demanda química de oxígeno, etc. y en los procesos se necesita tomar en consideración otras propiedades como densidad, viscosidad, reactividad, presión de vapor, conductividad térmica, etc.

MODIFICACIÓN DE UNIDADES DE TRATAMIENTO EXISTENTES

Las unidades que originalmente existen en la red previa al reajuste son identificadas con el índice u' , y pueden ser reusadas en el reajuste de la red como originalmente existían o

pueden ser modificadas para mejorar su desempeño. Dos opciones son consideradas simultáneamente para mejorar el desempeño de las unidades existentes. La primera opción consiste en incrementar la capacidad (bajo límites factibles) y la segunda opción consiste en incrementar la eficiencia (bajo límites factibles). Estas dos opciones son explicadas a continuación.

MODIFICACIÓN DE LA CAPACIDAD DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

Cualquier unidad existente puede ser utilizada o no en el reajuste de la red. Cuando el flujo es cero, la unidad no es seleccionada y el costo asociado es cero. Por otro lado, si la unidad u' es seleccionada, dos casos son posibles. Primero, si el flujo de entrada a la unidad u' ($H_{u'}$) es menor que el flujo original ($H_{yu'}^e$), entonces no es requerida la modificación y el costo es cero. Segundo, si el flujo de entrada es mayor que el original y menor que el límite superior factible; entonces el costo de capital de construir la modificación será calculado de acuerdo al tamaño de la modificación. Esto se modela por medio de la siguiente disyunción:

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u'} \\ \left[\begin{array}{c} Y_{u'}^1 \\ \delta \leq H_{u'} \leq H_{yu'}^e \\ Costp = 0 \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} Y_{u'}^2 \\ H_{yu'}^e \leq H_{u'} \leq H_{yu'}^{\max} \\ Costp = CFA_{yu'} + CVA_{yu'} H_{u'} \end{array} \right] \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{u'} \\ H_{u'} = 0 \\ Costp = 0 \end{array} \right] \forall u' \in NTREAT$$

En la formulación previa, $Y_{u'}$ es una variable booleana que es verdadera cuando la unidad u' es reusada. Cuando la unidad no es reutilizada, la variable booleana es falsa. La disyunción previa es reformulada usando el método de la envoltura convexa (para detalles de la reformulación vea Raman y Grossmann (1994)) como sigue.

Primero las variables booleanas se transforman en variables binarias (minúsculas). Y se implica que cuando la variable booleana es verdadera su variable binaria asociada debe ser uno; en caso de que sea falsa se asocia con cero. Asimismo, cuando la unidad es seleccionada, una de las variables binarias $y_{u'}^1$ o $y_{u'}^2$ debe ser uno. Esto es modelado usando la siguiente ecuación:

$$y_{u'} = y_{u'}^1 + y_{u'}^2, \forall u' \in NTREAT \quad (3.13)$$

Después, las variables continuas se disgregan para cada término de la disyunción como sigue:

$$H_{u'} = H_{u'}^{dis1} + H_{u'}^{dis2}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.14)$$

$$Costp_{u'} = Costp_{u'}^{dis1} + Costp_{u'}^{dis2}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.15)$$

Las restricciones para la disyunción son dadas en términos de las variables disgregadas:

$$H_{u'}^{\min1} \cdot y_{u'}^1 \leq H_{u'}^{dis1}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.16)$$

$$H_{u'}^{\min2} \cdot y_{u'}^2 \leq H_{u'}^{dis2}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.17)$$

$$H_{u'}^{dis1} \leq H_{u'}^{\max1} \cdot y_{u'}^1, \forall u' \in NTREAT \quad (3.18)$$

$$H_{u'}^{dis2} \leq H_{u'}^{\max2} \cdot y_{u'}^2, \forall u' \in NTREAT \quad (3.19)$$

$$Costp_{u'}^{dis1} = CFA_{u'}^1 \cdot y_{u'}^1 + CVA_{u'}^1 H_{u'}^{dis1}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.20)$$

$$Costp_{u'}^{dis2} = CFA_{u'}^2 \cdot y_{u'}^2 + CVA_{u'}^2 H_{u'}^{dis2}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.21)$$

Finalmente, un grupo de límites superiores son necesarios para las variables continuas:

$$Costp_{u'}^{dis1} \leq Costp_{u'}^{\max1} \cdot y_{u'}^1, \forall u' \in NTREAT \quad (3.22)$$

$$Costp_{u'}^{dis2} \leq Costp_{u'}^{\max2} \cdot y_{u'}^2, \forall u' \in NTREAT \quad (3.23)$$

MODIFICACIÓN DE LAS EFICIENCIAS DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

La existencia original de la unidad de tratamiento puede ser mejorada al aumentar su eficiencia y desempeño. Esta modificación incluye el aumento de etapas en separadores o la instalación de una nueva unidad conectada en serie a la previa. Esta modificación implica la

suma del costo de capital que depende del nivel de la modificación. Varios casos son considerados para el reajuste de las unidades de tratamiento. Primero está el caso cuando no es mejorada la unidad y el costo de capital es cero; por otro lado, cuando la unidad mejora su eficiencia, se consideran varios casos en los cuales el costo de capital es calculado de acuerdo a la modificación. Lo cual se modela a través de la siguiente disyunción:

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u'} \\ \left[\begin{array}{c} Y_{u'}^1 \\ \psi_{p,u'}^{out} = EF_{p,u'} \cdot fac_{u',p,1} \psi_{p,u'}^{in} \\ \forall p \in NPROP \\ Costpla_{u'} = CFP_{yu'} + CVP_{yu'} H_{u'} \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} Y_{u'}^2 \\ \psi_{p,u'}^{out} = EF_{p,u'} \cdot fac_{u',p,2} \psi_{p,u'}^{in} \\ \forall p \in NPROP \\ Costpla_{u'} = CFP_{yu'} + CVP_{yu'} H_{u'} \end{array} \right] \vee \dots \left[\begin{array}{c} Y_{u'}^{pla} \\ \psi_{p,u'}^{out} = EF_{p,u'} \cdot fac_{u',p,pla} \psi_{p,u'}^{in} \\ \forall p \in NPROP \\ Costpla_{u'} = CFP_{yu'} + CVP_{yu'} H_{u'} \end{array} \right] \\ \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{u'} \\ H_{u'} = 0 \\ Costpla_{u'} = 0 \end{array} \right] \forall u' \in NTREAT \end{array} \right]$$

Donde $Y_{u'}$ es la variable booleana asociada al uso de la unidad u' . $EF_{p,u'}$ son las eficiencias obtenidas y usadas antes del reajuste, respectivamente. P es el número de etapas de equilibrio agregadas al interceptor. $fac_{u',p,pla}$ es el factor de modificación de la eficiencia para el interceptor de acuerdo al número de mejoras. $Costpla$ es el costo de capital asociado a la mejora. $CFP_{yu'}$ y $CVP_{yu'}$ son los costos fijos y variables de la mejora.

La disyunción previa es reformulada como un grupo de ecuaciones algebraicas usando la técnica de la envoltura convexa.

Primero, cuando la unidad de tratamiento es usada, una mejora de eficiencia debe ser usada. Esto es modelado usando variables binarias asociadas a las booleanas:

$$\sum_{pla \in NPLATES} y_{u'}^{pla} = y_{u'}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.24)$$

Después, las variables continuas son disgregadas de la siguiente manera.

$$\psi_{p,u',pla}^{out} = \sum_{pla \in NPLATES} d\psi_{p,u',pla}^{out}, \forall u' \in NTREAT, p \in NPROP \quad (3.25)$$

$$\psi_{p,u',pla}^{in} = \sum_{pla \in NPLATES} d\psi_{p,u',pla}^{in}, \forall u' \in NTREAT, p \in NPROP \quad (3.26)$$

$$H_{u'} = \sum_{pla \in NPLATES} dH_{u',pla}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.27)$$

$$Costpla_{u'} = \sum_{pla \in NPLATES} Costpla_{u',pla}^{dis}, \forall u' \in NTREAT \quad (3.28)$$

Las restricciones de las disyunciones son establecidas en términos de las variables disgregadas.

$$d\psi_{p,u',pla}^{out} = EF_{p,u',pla} fac_{u',p,pla} d\psi_{p,u',pla}^{in}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES, p \in NPROP \quad (3.29)$$

$$Costpla_{u',pla}^{dis} = CFP_{u',pla} y_{u'}^{pla} + CVP_{u',pla} dH_{u',pla}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES \quad (3.30)$$

Finalmente, se establecen los límites superiores para las variables disgregadas.

$$Costpla_{u',pla}^{dis} \leq Costpla_{u',pla}^{max} y_{u'}^{pla}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES \quad (3.31)$$

$$dH_{u',pla} \leq H_{u',pla}^{max} y_{u'}^{pla}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES \quad (3.32)$$

$$d\psi_{p,u',pla}^{out} \leq d\psi_{p,u',pla}^{out,max} y_{u'}^{pla}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES \quad (3.33)$$

$$d\psi_{p,u',pla}^{in} \leq d\psi_{p,u',pla}^{in,max} y_{u'}^{pla}, \forall u' \in NTREAT, pla \in NPLATES \quad (3.34)$$

NUEVAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

En estas nuevas unidades de tratamiento se requiere determinar el costo en la red reajustada como sigue:

$$Cost = CF + CV F^\alpha \quad (3.35)$$

En la ecuación anterior, CF y CV son los costos fijos y variables para las nuevas unidades, F es el flujo de entrada y α un exponente para la función del costo de capital (usualmente α toma valores entre 0.6 y 0.9 de acuerdo a Peters y Timmerhaus (1991)). Esta función introduce un grupo de no linealidades que dificultan la manipulación de la

optimización del proceso, así que para mejorar el desempeño de la función de costo de capital se segrega en n segmentos con comportamiento lineal como se muestra en la **Figura 3.2**. Y se modela con la siguiente disyunción:

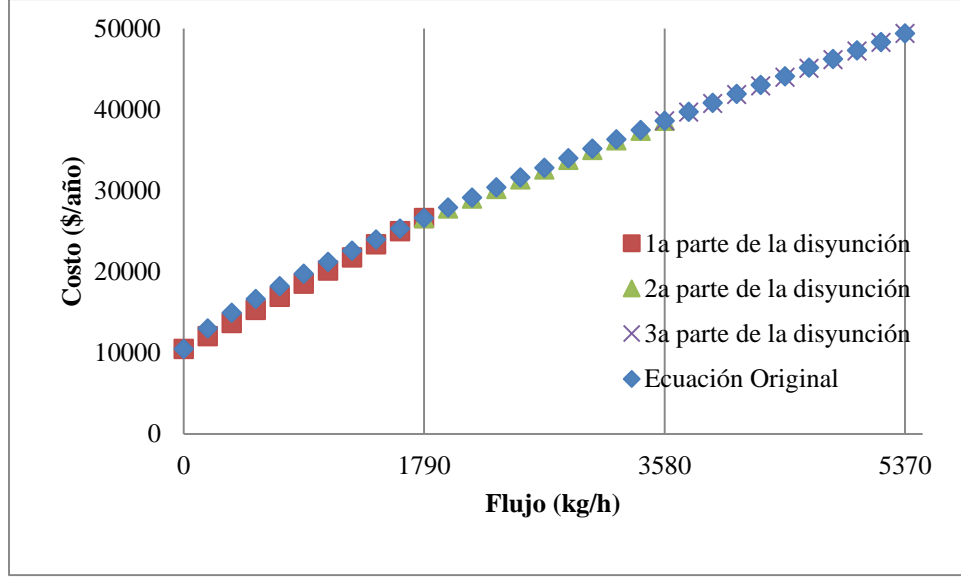


Figura 3.2 Costo de capital de las nuevas unidades de tratamiento.

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u''} \\ \left[\begin{array}{c} Y_{u''1} \\ H_{u''1}^{\min} \leq H_{u''} \leq H_{u''1}^{\max} \\ Costp = CF_{yu''1} + CV_{yu''1} H_{u''} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} Y_{u''2} \\ H_{u''2}^{\min} \leq H_{u''} \leq H_{u''2}^{\max} \\ Costp = CF_{yu''2} + CV_{yu''2} H_{u''} \end{array} \right] \vee \dots \left[\begin{array}{c} Y_{u''n} \\ H_{u''n}^{\min} \leq H_{u''} \leq H_{u''n}^{\max} \\ Costp = CF_{yu''n} + CV_{yu''n} H_{u''} \end{array} \right] \end{array} \right] \\ \vee \left[\begin{array}{c} -Y_{u''} \\ H_{u''} = 0 \\ Costp = 0 \end{array} \right], \forall u'' \in NTREAT$$

Donde $Y_{u''}$ es la variable booleana que indica la existencia de la nueva unidad u'' . $H_{yu''n}^{\min}$ y $H_{yu''n}^{\max}$ son los límites inferior y superior para el segmento n . $CF_{yu''n}$ y $CV_{yu''n}$ son los costos fijos y variables para el segmento n . La disyunción se modela de la siguiente manera:

$$\sum_{n \in NSECTION} y_{u''n} = y_{u''}, \forall u'' \in NTREAT \quad (3.36)$$

$$H_{u^n} = \sum_{n \in NSECTION} H_{u^n}^{dis}, \forall u^n \in NTREAT \quad (3.37)$$

$$Costp_{u^n} = \sum_{n \in NSECTION} Costp_{u^n}^{dis}, \forall u^n \in NTREAT \quad (3.38)$$

$$H_{u^n}^{\min} \cdot y_{u^n} \leq H_{u^n}^{dis}, \forall u^n \in NTREAT, n \in NSECTION \quad (3.39)$$

$$H_{u^n}^{dis} \leq H_{u^n}^{\max} \cdot y_{u^n}, \forall u^n \in NTREAT, n \in NSECTION \quad (3.40)$$

$$Costp_{u^n}^{dis} = CF_{u^n} \cdot y_{u^n} + VF_{u^n} H_{u^n}^{dis}, \forall u^n \in NTREAT, n \in NSECTION \quad (3.41)$$

$$Costp_{u^n}^{dis} \leq Costp_{u^n}^{\max} \cdot y_{u^n}, \forall u^n \in NTREAT, n \in NSECTION \quad (3.42)$$

COSTO DE LAS TUBERÍAS

El modelo propuesto considera el arreglo de la planta para determinar el costo de las nuevas tuberías en la red reajustada, también se considera el caso cuando la tubería existía previamente y no es requerido ningún costo adicional.

TUBERÍAS PARA LOS SEGMENTOS FUENTES DE PROCESO-PROCESOS

Para determinar el costo de las tuberías de las fuentes de proceso a las unidades de proceso se usa la siguiente disyunción:

$$\left[\begin{array}{c} Y_{ij}^{pip} \\ w_{1ij} \geq \delta \\ CF_{ij} = CF_{ij}^D (1 - \tau_{ij}) \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{ij}^{pip} \\ w_{1ij} = 0 \\ CF_{ij} = 0 \end{array} \right] \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS$$

Y_{ij}^{pip} es una variable booleana asociada a la existencia de la tubería, w_{1ij} es el flujo en la tubería, δ es el flujo mínimo permitido, CF_{ij} es el costo de la tubería, CF_{ij}^D es el dato por el costo de la tubería, y el parámetro binario τ_{ij} es introducido para modelar su existencia (i.e., $\tau_{ij} = 1$) o no (i.e., $\tau_{ij} = 0$) de la tubería antes del reajuste del proceso. Consecuentemente, cuando el segmento de tubería es utilizado, la variable booleana asociada Y_{ij}^{pip} es verdadera y correspondientemente la variable binaria y_{ij}^{pip} toma el valor de uno;

luego, si el segmento de tubería existe originalmente $\tau_{ij} = 1$ el costo asociado CF_{ij} es igual a cero. Pero, si el segmento de tubería no existe, $\tau_{ij} = 0$ el costo es $CF_{ij} = CF_{ij}^D$. En cambio, si el segmento de tubería no es requerido, la variable booleana Y_{ij}^{pip} debe ser falsa y la variable binaria correspondiente y_{ij}^{pip} es igual a cero, y el costo asociado CF_{ij} es cero. Esta disyunción se reformula de la siguiente manera:

$$w_{ij} \geq \delta \cdot y_{ij}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS \quad (3.43)$$

$$CF_{ij} = CF_{ij}^D (1 - \tau_{ij}) y_{ij}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS \quad (3.44)$$

$$w_{ij} \leq w_{ij}^{\max} \cdot y_{ij}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS \quad (3.45)$$

$$CF_{ij} \leq CF_{ij}^{\max} y_{ij}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS \quad (3.46)$$

TUBERÍAS PARA LOS SEGMENTOS FUENTES FRESCAS-PROCESO

Para las tuberías de las fuentes frescas-proceso, la disyunción es la siguiente:

$$\left[\begin{array}{c} Y_{rj}^{pip} \\ f_{rj} \geq \delta \\ CF_{rj} = CF_{rj}^D (1 - \tau_{rj}) \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{rj}^{pip} \\ f_{rj} = 0 \\ CF_{rj} = 0 \end{array} \right], \quad \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS$$

Y su reformulación es la siguiente:

$$f_{rj} \geq \delta y_{rj}^{pip}, \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS \quad (3.47)$$

$$CF_{rj} = CF_{rj}^D (1 - \tau_{rj}) y_{rj}^{pip}, \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS \quad (3.48)$$

$$f_{rj} \leq f_{rj}^{\max} y_{rj}^{pip}, \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS \quad (3.49)$$

$$CF_{rj} \leq CF_{rj}^{\max} y_{rj}^{pip}, \forall r \in NFRESH, j \in NSINKS \quad (3.50)$$

TUBERÍAS PARA LOS SEGMENTOS FUENTES DE PROCESO-PROCESO

El costo de las tuberías fuentes de proceso-proceso se determinan de la siguiente manera.

$$\left[\begin{array}{c} Y_{iu}^{pip} \\ w_{2iu} \geq \delta \\ CF_{iu} = CF_{iu}^D (1 - \tau_{iu}) \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{iu}^{pip} \\ w_{2iu} = 0 \\ CF_{iu} = 0 \end{array} \right], \quad \forall i \in NSOURCES, u \in NTREAT$$

Y su modelado es el siguiente:

$$w_{2iu} \geq \delta y_{iu}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, u \in NTREAT \quad (3.51)$$

$$CF_{iu} = CF_{iu}^D (1 - \tau_{iu}) y_{iu}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, u \in NTREAT \quad (3.52)$$

$$w_{2iu} \leq w_{2iu}^{\max} y_{iu}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, u \in NTREAT \quad (3.53)$$

$$CF_{iu} \leq CF_{iu}^{\max} y_{iu}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, u \in NTREAT \quad (3.54)$$

TUBERÍAS PARA LOS SEGMENTOS UNIDADES DE TRATAMIENTO-UNIDADES DE TRATAMIENTO

El costo de capital de las tuberías en el segmento unidad de tratamiento-unidad de tratamiento se determina con la siguiente disyunción.

$$\left[\begin{array}{c} Y_{uu'}^{pip} \\ h_{2uu'} \geq \delta \\ CF_{uu'} = CF_{uu'}^D (1 - \tau_{uu'}) \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{uu'}^{pip} \\ h_{2uu'} = 0 \\ CF_{uu'} = 0 \end{array} \right], \quad \forall u, u' \in NTREAT$$

De manera similar a descripciones previas, se reformula de la siguiente manera:

$$h_{2uu'} \geq \delta y_{uu'}^{pip}, \forall u, u' \in NTREAT \quad (3.55)$$

$$CF_{uu'} = CF_{uu'}^D (1 - \tau_{uu'}) y_{uu'}^{pip}, \forall u, u' \in NTREAT \quad (3.56)$$

$$h_{2uu'} \leq h_{2uu'}^{\max} y_{uu'}^{pip}, \forall u, u' \in NTREAT \quad (3.57)$$

$$CF_{uu'} \leq CF_{uu'}^{\max} y_{uu'}^{pip}, \forall u, u' \in NTREAT \quad (3.58)$$

TUBERÍAS PARA LOS SEGMENTOS UNIDADES DE TRATAMIENTO-PROCESOS

La siguiente disyunción determina el costo de capital para los segmentos unidades de tratamiento-procesos.

$$\begin{bmatrix} Y_{uj}^{pip} \\ h_{1uj} \geq \delta \\ CF_{uj} = CF_{uj}^D (1 - \tau_{uj}) \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} -Y_{uj}^{pip} \\ h_{1uj} = 0 \\ CF_{uj} = 0 \end{bmatrix}, \quad \forall u \in NTREAT, j \in NSINKS$$

La cual se reformula como sigue:

$$h_{1uj} \geq \delta y_{uj}^{pip}, \forall u \in NTREAT, j \in NSINKS \quad (3.59)$$

$$CF_{uj} = CF_{uj}^D (1 - \tau_{uj}) y_{uj}^{pip}, \forall u \in NTREAT, j \in NSINKS \quad (3.60)$$

$$h_{1uj} \leq h_{1uj}^{\max} y_{uj}^{pip}, \forall u \in NTREAT, j \in NSINKS \quad (3.61)$$

$$CF_{uj} \leq CF_{uj}^{\max} y_{uj}^{pip}, \forall u \in NTREAT, j \in NSINKS \quad (3.62)$$

FUNCIÓN OBJETIVO

La función objetivo consiste en minimizar el costo total anual considerando el costo de las fuentes frescas, costo de capital de las unidades de tratamiento (modificación de unidades existentes o instalación de nuevas unidades), costo de operación de las unidades y el costo de las tuberías en el reajuste de la red.

$$\begin{aligned} \min TAC = & H_Y \sum_{r \in NFRESH} Costo_r F_r + K_F \sum_{u \in NTREAT} Costp_u + K_F \sum_{u' \in NTREAT} Costpla_{u'} \\ & + H_Y \sum_{u \in NTREAT} CO_u H_u + \sum_{i \in NSOURCES} \sum_{j \in NSINKS} (H_Y pip_{ij} w_{1ij} + CF_{ij} K_F) \\ & + \sum_{i \in NSOURCES} \sum_{u \in NTREAT} (H_Y pip_{iu} w_{2iu} + CF_{iu} K_F) + \sum_{u \in NTREAT} \sum_{j \in NSINKS} (H_Y pip_{uj} h_{1uj} + CF_{uj} K_F) \quad (3.63) \\ & + \sum_{u \in NTREAT} \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} (H_Y pip_{uu'} h_{2uu'} + CF_{uu'} K_F) + \sum_{r \in NFRESH} \sum_{\substack{j \in NSINKS \\ j \neq waste}} (H_Y pip_{rj} f_{rj} + CF_{rj} K_F) \end{aligned}$$

Donde H_Y es el tiempo operacional anual y K_F el factor de anualización para los costos de capital (porcentaje del costo total pagado en un año).

3.3 Estrategia de Solución

El algoritmo de solución para el problema de reajuste de redes se presenta en la Figura 3.3, de la cual se puede observar el problema de programación disyuntiva se reformula como un modelo MINLP por medio de la estrategia de la envoltura convexa, en este punto se proporcionan valores iniciales para los flujos que se encuentran en las unidades de tratamiento (H_u). Se resuelve un modelo NLP relajado y se compara si sus variables binarias son enteras, si son enteras se coteja si es la primera solución encontrada, si no, se encontró una solución óptima. Pero si es la primera solución se regresa a buscar otros valores para H_u y se resuelve de nueva cuenta como un NLP relajado, si las variables binarias son enteras de nueva cuenta se toma como solución óptima. Si no se busca un punto entero cercano a los valores obtenidos por las variables binarias obtenidas, se fijan estas, y se encuentra otra solución del problema NLP. Se resuelve el problema MILP entre los dos casos pasados y si la solución es igual a la obtenida anteriormente es el óptimo. En caso contrario se repite el procedimiento.

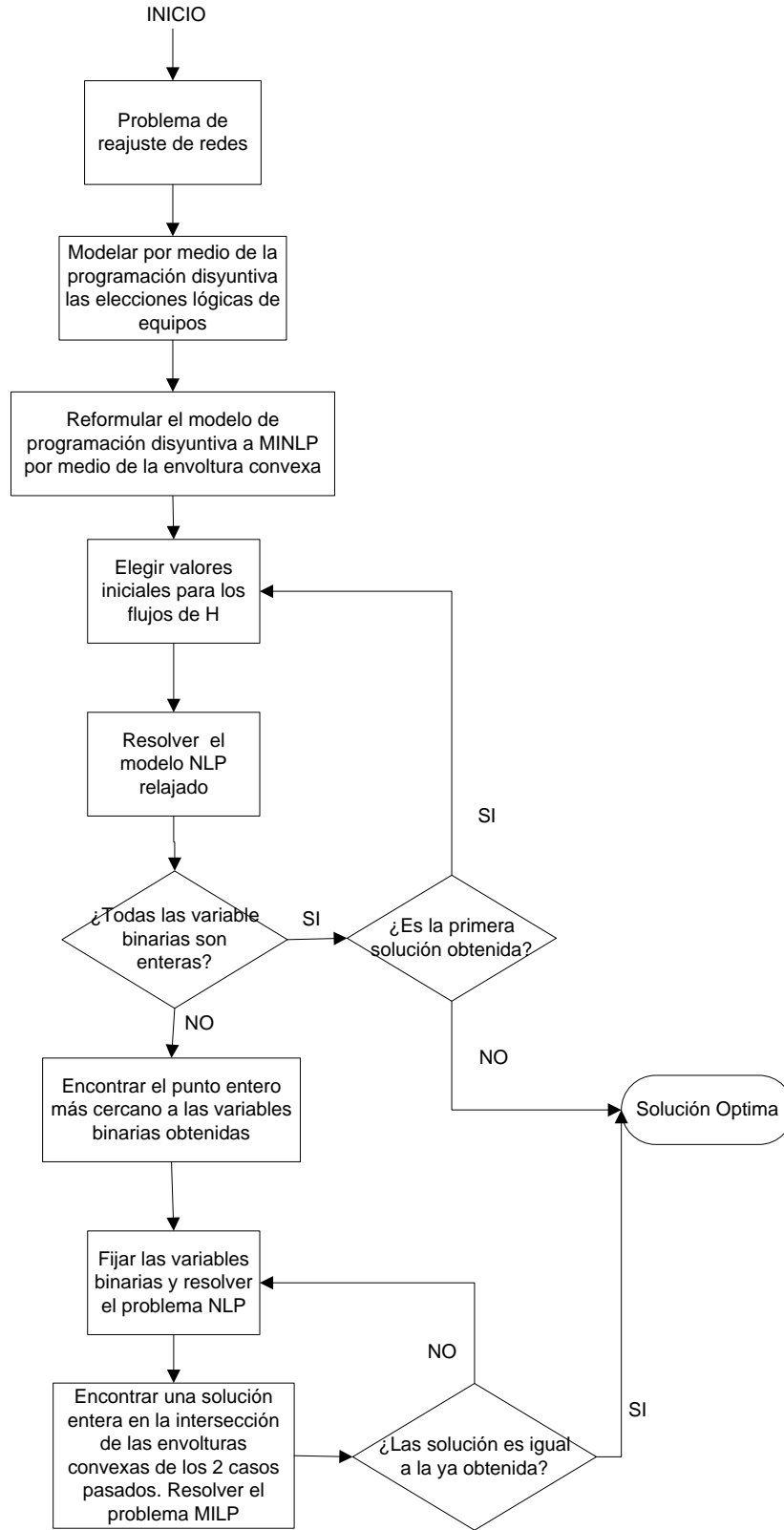


Figura 3.3 Algoritmo de solución para un problema de reajuste de redes.

3.4 Resultados y Discusión

El modelo propuesto fue implementado en el software GAMS (General Algebraic Modeling System) y el resolvidor DICOPT fue usado para resolver el problema MINLP resultante (Brooke et al., 2006). Para todos los casos de estudio los parámetros H_Y y K_F fueron fijados como 8000 h/año y 0.3333 año^{-1} , respectivamente, los flujos mínimos para cada corriente se establecieron como $d=100\text{kg/h}$.

EJEMPLO 1.(PRODUCCIÓN DE FENOL A PARTIR DE CUMENO)

La producción de fenol a partir de cumeno es el primer proceso a estudiar; la red original se muestra en la Figura 3.4, las corrientes de los desechos son tomadas como las fuentes de proceso para la integración másica. Obsérvese que las corrientes tienen un gran número de componentes (fenol, acetona, cumeno, isopropano, dimetileter, metileter, etc.); además de que las propiedades de las corrientes dependen de sus composiciones, presión y temperatura. De manera que componentes presentes en pequeñas cantidades pueden afectar de manera significativa algunas propiedades (toxicidad, pH, etc.); de este modo, para satisfacer las restricciones ambientales y de procesos el reajuste de redes de agua basadas en propiedades es el adecuado. Asimismo, el fenol es un componente peligroso para la vida acuática por lo que se consideran restricciones ambientales estrictas para esta sustancia. Este problema considera dos fuentes frescas (agua de diferente calidad), tres fuentes de procesos y tres procesos que alimentar, las propiedades consideradas son seis: composición de fenol, toxicidad, pH, COD, densidad y viscosidad. La Tabla 3.1 muestra las propiedades de las corrientes para el ejemplo tomadas de Ponce–Ortega et al. (2010). Los costos de las fuentes frescas son $\$0.02\text{kg}^{-1}$ y $\$0.013\text{kg}^{-1}$, respectivamente. La Tabla 3.2 muestra las restricciones de los procesos. Este trabajo considera el caso cuando las restricciones ambientales se vuelven más estrictas, por lo que la red existente de agua no es capaz de satisfacer estas restricciones, la Tabla 3.3 muestra las restricciones existentes y las nuevas, y la Tabla 3.4 muestra los datos de las tuberías. Este ejemplo toma en consideración el caso donde las corrientes cambian debido a expansiones en la capacidad de la planta, cambiando flujos en las fuentes de proceso, los datos de las corrientes para la expansión se muestran en la Tabla 3.5.

La Tabla 3.6 muestra las eficiencias y costos de siete unidades de tratamiento consideradas en el reajuste. Estas unidades son usadas para tratar específicamente alguna propiedad, la unidad de tratamiento uno trata la toxicidad, la unidad dos remueve fenol, la unidad tres introduce aire a la corriente para disminuir la demanda química de oxígeno, de la unidad cuatro a siete tratan el pH (4 y 5 para incrementar el pH, y la 6 y 7 disminuyen pH) con diferentes factores de conversión y costo de unidad. La Tabla 3.7 muestra las propiedades para las corrientes antes del reajuste.

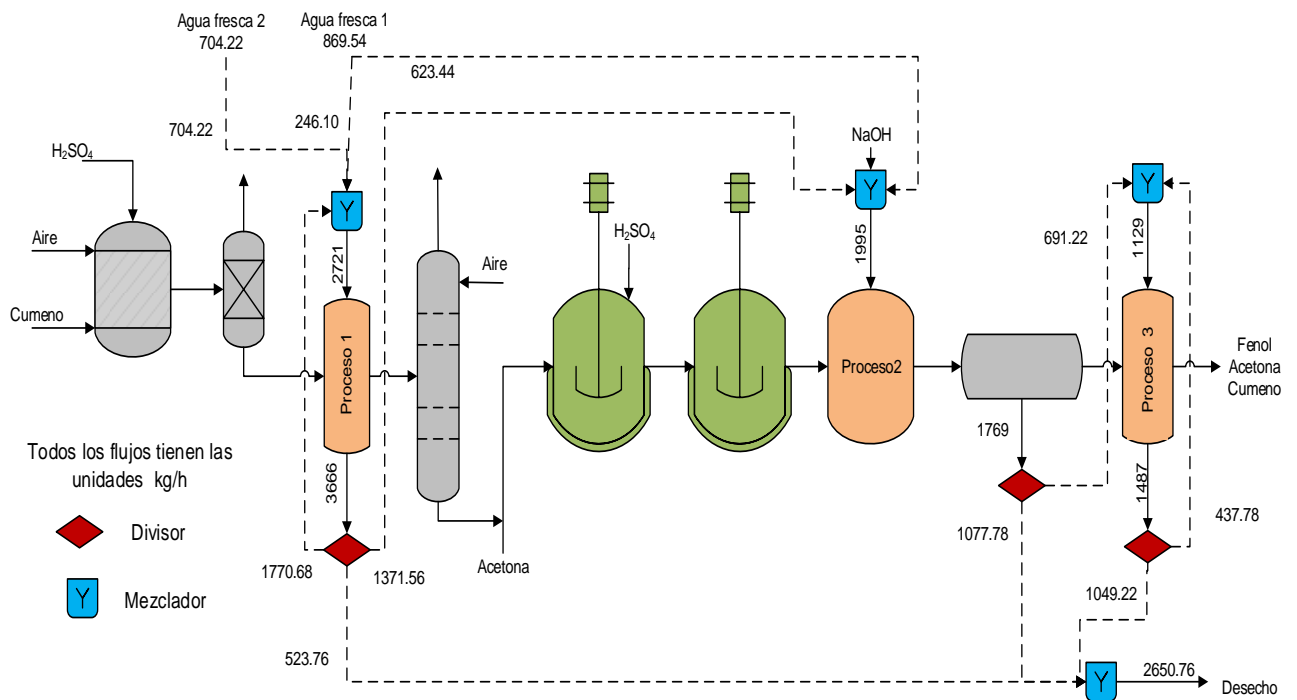


Figura 3.4 Red original del ejemplo 1.

Tabla 3.1 Datos de las corrientes para el Ejemplo 1

Fuentes	F (kg/h)	Z _{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD (kg O ₂ /m ³)X10 ³	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
Fuentes de proceso							
1	3666	0.016	0.3	5.4	0.187	907.19	1.256
2	1769	0.024	0.5	5.5	48.850	1001.53	1.220
3	1487	0.220	1.5	5.0	92.100	1065.94	1.201
Fuentes frescas							
1	-	0.000	0.0	7.0	0.000	999.72	1.002
2	-	0.010	0.1	7.1	0.010	1001.99	0.992

Tabla 3.2 Restricciones de propiedades en los procesos Ejemplo 1.

Proceso	G(kg/h)	z_{fenol} (ppm)	pH^{min}	pH^{max}	ρ^{min} (kg/m ³)	ρ^{max} (kg/m ³)	μ^{min} (cP)	μ^{max} (cP)
1	2721	0.013	5.3	8	816	1270	1.001	1.202
2	1995	0.011	5.4	7.8	771	1113	1.001	2.23
3	1129	0.1	5.2	8.2	839	1315	1.001	1.26

Tabla 3.3 Restricciones ambientales en las propiedades Ejemplo 1

Propiedad	Existentes		Nuevas	
	Mínimo	Máximo	Mínimo	Máximo
Z_{phenol} (ppm)	0.000	0.100	0.000	0.005
Tox(%)	0.0	1.0	0.0	0.0
pH	4.5	9.0	5.5	9.0
COD (kg O ₂ /m ³)X10 ³	0.0	75.0	0.0	75.0

Tabla 3.4 Datos de las tuberías del Ejemplo 1

Concepto	Valor (\$/kg)	Concepto	Valor (\$/año)	Concepto	Valor (\$/año)
$\rho_{ip_{iu}}$	0.88×10^{-4}	$CF\rho_{ip_{iu}}$	0.920	$CF\rho_{ip_{uj}}$	0.940
$\rho_{ip_{u'u}}$	0.57×10^{-4}	$CF\rho_{ip_{ij}}$	0.850	$CF\rho_{ip_{rj}}$	1.635
$\rho_{ip_{uj}}$	1.02×10^{-4}	$CF\rho_{ip_{u'u}}$	0.500		
$\rho_{ip_{ij}}$	0.93×10^{-4}				
$\rho_{ip_{rj}}$	1.65×10^{-4}				

Tabla 3.5 Flujos antes y después de la amplificación de la planta en el Ejemplo 1.

Corriente	Flujos kg/h		Corriente	Flujos kg/h	
	Original	Amplificación		Original	Amplificación
W ₁	3666	4766	G ₁	2721	3809
W ₂	1769	2654	G ₂	1995	2594
W ₃	1487	2082	G ₃	1129	1694

Tabla 3.6 Unidades de tratamiento para el Ejemplo 1.

Concepto	Unidad 1	Unidad 2	Unidad 3	Unidad 4	Unidad 5	Unidad 6	Unidad 7
	0.08	0.15	0.90	1.00	1.00	1.00	1.00
	0.00	0.03	0.95	1.00	1.00	1.00	1.00
Factor de eficiencia	1.00	1.00	1.00	10.00	100.00	0.10	0.01
ρ=1-6	0.90	0.97	0.10	1.00	1.00	1.00	1.00
	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
IFC* (N=1)							
0 ≤ F** ≤ 3187	11,456.78	8,762.83	9,753.64	6,589.94	13,782.61	7,163.76	14,592.58
IFC (N=2)							
3188 ≤ F ≤ 6374	18,188.30	13,793.70	15,978.68	11,091.46	18,558.05	11,358.01	19,581.01
IFC (N=3)							
6375 ≤ F ≤ INF	22,035.23	16,668.73	19,536.16	13,663.98	21,287.11	13,754.93	22,431.79
IVC*** (N=1)	8.66	6.47	8.01	5.79	6.14	5.40	6.42
IVC(N=2)	6.42	4.80	5.93	4.29	4.55	4.00	4.75
IVC(N=3)	5.78	4.32	5.34	3.86	4.10	3.60	4.28
OC^	1.0x10 ⁻³	0.4x10 ⁻³	0.6x10 ⁻³	0.7x10 ⁻³	1.1x10 ⁻³	0.8x10 ⁻³	1.2x10 ⁻³

* Costo fijo de instalación \$/año; **Flujos kg/h; ***Costo variable de instalación \$/kg; ^Costo operacional \$/kg.

Tabla 3.7 Datos de las corrientes antes del reajuste.

<i>Corriente/Propiedad</i>	Z_{fenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD		
				(kg O ₂ /m ³)	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
				X10 ³		
W_1	0.016	0.300	5.40	0.187	907.19	1.256
W_2	0.024	0.500	5.50	48.850	1001.53	1.220
W_3	0.220	1.500	5.00	92.100	1065.94	1.201
F_1	0.000	0.000	7.00	0.000	999.72	1.002
F_2	0.010	0.010	7.10	0.010	1001.99	1.001
G_1	0.013	0.198	6.63	0.124	1000.00	1.161
G_2	0.011	0.206	6.51	0.129	1000.00	1.169
G_3	0.100	0.888	5.36	65.620	1025.64	1.213
G_{waste}	0.100	0.856	5.33	56.354	1004.91	1.218

Caso A

Este caso considera que el reajuste exclusivamente cambios en las restricciones de los procesos, la solución considera la posibilidad de instalar una nueva unidad de tratamiento en la cual los flujos de salida pueden ser tratados o modificados para satisfacer las nuevas restricciones.

En el reajuste de la Figura 3.5 se observa que el consumo de la fuente fresca 1 se ha eliminado por completo, en la figura sólo se necesita la fuente fresca 2, debido a esto la cantidad de desecho enviado al ambiente se ve reducido, sin embargo, es necesaria la instalación de dos nuevas unidades de tratamiento para lograr que el desecho cumpla con las restricciones impuestas. Los valores para las propiedades de las corrientes del reajuste se muestran en la Tabla 3.8.

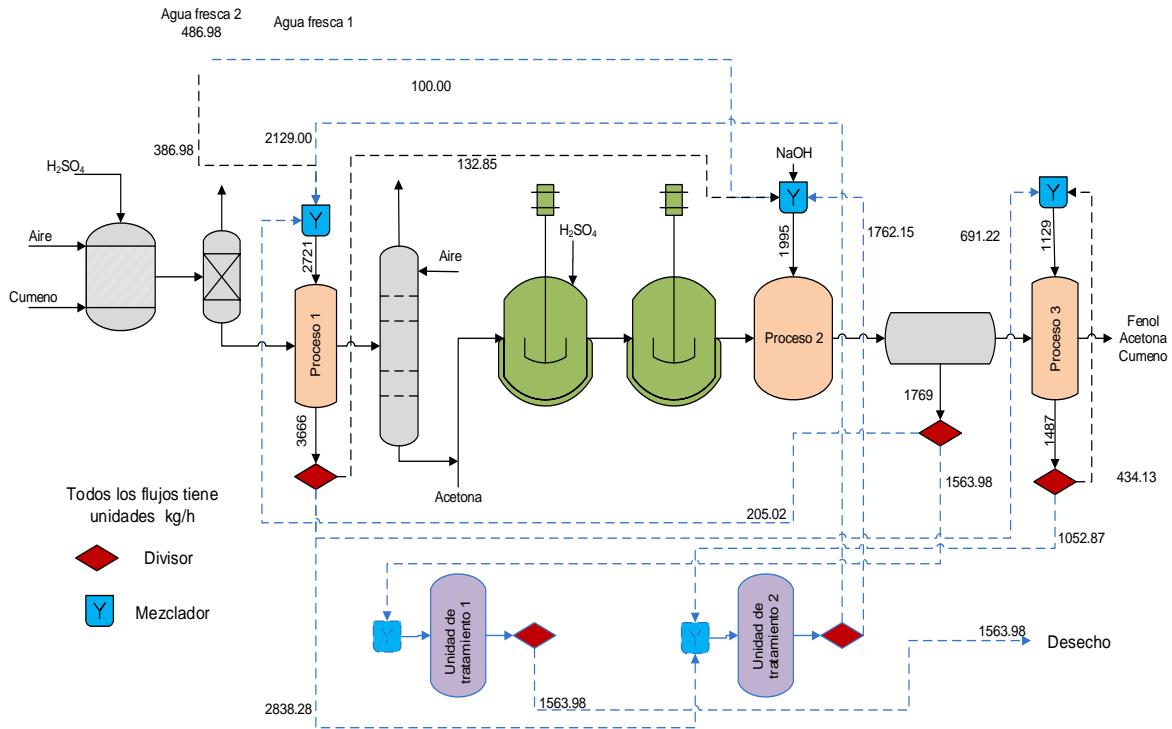


Figura 3.5 Reajuste del Ejemplo1, caso A.

Tabla 3.8. Propiedades de las corrientes en el reajuste de la red Ejemplo 1.

<i>Corriente/Propiedad</i>	$Z_{\text{phenol}}(\text{ppm})$	Tox(%)	pH	COD		
				($\text{kg O}_2/\text{m}^3$) $\times 10^3$	ρ (kg/m^3)	μ (cP)
W_1	0.016	0.300	5.40	0.187	907.19	1.256
W_2	0.024	0.500	5.50	48.850	1001.53	1.220
W_3	0.220	1.500	5.00	92.100	1065.94	1.201
F_1	0.000	0.000	7.00	0.000	999.72	1.002
F_2	0.010	0.010	7.10	0.010	1001.99	1.001
H_{1in}	0.024	0.500	5.50	48.85	1001.53	1.218
H_{2in}	0.071	0.625	5.32	25.05	1000.00	1.241
H_{1out}	0.002	0.000	5.50	43.96	1001.53	1.218
H_{2out}	0.011	0.019	5.32	24.30	1000.00	1.241
G_1	0.012	0.054	6.29	22.69	1000.00	1.202
G_2	0.011	0.037	5.92	21.48	1000.00	1.227
G_3	0.094	0.761	5.28	35.53	1000.00	1.235
G_{waste}	0.002	0.000	5.50	43.96	1001.63	1.218

Caso B.

Este caso considera cuando la planta incrementa su capacidad, además las fuentes de proceso aumentan, al mismo tiempo que los flujos requeridos por los procesos. La Figura 3.6 muestra la red reajustada para este caso, obsérvese que la red usa las mismas unidades de tratamiento que la red reajustada sin ampliación, sólo cambia la configuración de esta, también se observa que la cantidad de desecho que se produce es mayor, debido a la expansión de la planta, sin embargo, este nuevo desecho cumple con las estrictas restricciones dadas para las propiedades. La Tabla 3.9 muestra los valores para las propiedades en el reajuste ampliado.

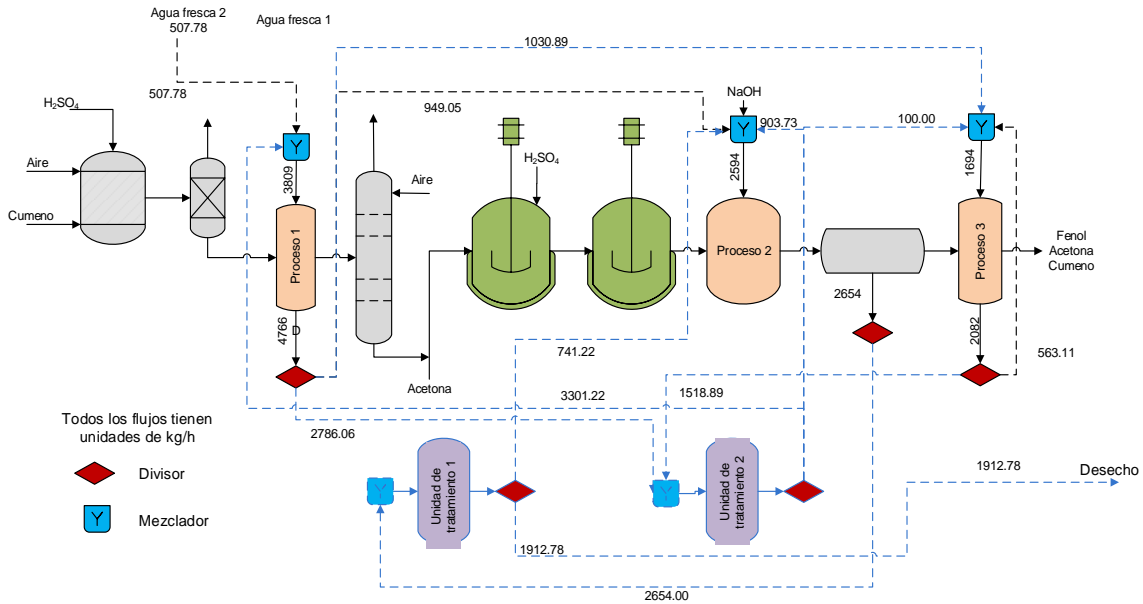


Figura 3.6 Red reajustada con ampliación para el Ejemplo 1.

En el reajuste de los procesos (Figura 3.6), el proceso dos no requiere fuentes frescas y necesita de la corriente de la unidad de tratamiento dos como en la red reajustada sin ampliación, en vez de eso en el reajuste la unidad usa una combinación de las fuentes de proceso uno y tres. Aparte de que la unidad de tratamiento uno disminuye la concentración de fenol antes de enviarlo al medioambiente. Debido a la disminución de gasto en fuentes frescas se disminuye el costo total, incluyendo el cumplir las restricciones ambientales.

Tabla 3.9 Propiedades de las corrientes después del reajuste para el caso B del Ejemplo 1.

<i>Corriente/Propiedad</i>	Z_{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD		
				(kg O ₂ /m ³) X10 ³	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
W_1	0.016	0.300	5.40	0.187	907.19	1.256
W_2	0.024	0.500	5.50	48.850	1001.53	1.220
W_3	0.220	1.500	5.00	92.100	1065.94	1.201
F_1	0.000	0.000	7.00	0.000	999.72	1.002
F_2	0.010	0.010	7.10	0.010	1001.99	1.001
H_{1in}	0.024	0.500	5.50	48.850	1001.53	1.219
H_{2in}	0.088	0.723	5.30	32.616	1000.00	1.236
H_{1out}	0.002	0.000	5.50	43.965	1001.53	1.219
H_{2out}	0.013	0.022	5.30	31.638	1000.00	1.236
G_1	0.013	0.020	6.27	27.421	1000.00	1.202
G_2	0.011	0.117	5.40	23.653	1000.00	1.239
G_3	0.084	0.682	5.30	32.597	1000.00	1.236
G_{waste}	0.002	0.000	5.50	43.965	1001.53	1.219

Tabla 3.10 Comparación de casos para el Ejemplo 1: original, reajuste y reajuste con amplificación.

Concepto	Original	Reajuste	Reajuste con amplificación.
Desecho, kg/h	2,650.76	1,563.98	1,912.78
Costo de las fuentes frescas, \$/año	212,365.64	50,645.64	52,809.54
Costo de capital de unidades de tratamiento, \$/año	-----	18,969.72	22,894.79
Costo operacional para unidades de tratamiento, \$/año	0.0	24,963.50	35,007.84
Costo de tuberías, \$/año	7,227.33	10,028.90	13,142.65
Costo de tratamiento adicional para nuevas restricciones ambientales, \$/año	32,568.16	-----	-----
Costo total anual, \$/año	252,161.13	104,607.76	123,854.82

En la Tabla 3.10 se observa que la metodología propuesta produce ahorros significativos en el costo total anual de \$147,553.37/año y \$128,306.31/año para los casos de la red del reajuste simple y la del reajuste con ampliación, respectivamente. La red reajustada incluye nuevos costos adicionales en las tuberías (debido a la reconfiguración), así como el costo de capital para las unidades de tratamiento nuevas o reajustadas. Considerando esto, aún logra reducciones en el costo total anual debido a las reducciones en el consumo de fuentes frescas, la reducción de costos son de 58.5% y 50.9%, respectivamente. Incluso la cantidad de desecho producido se ve disminuido en 41% para el reajuste simple y un 27.8% en el reajuste con ampliación.

EJEMPLO 2.(PRODUCCIÓN DE PAPEL)

Este ejemplo considera un proceso asociado a la producción de pulpa y papel, el cual ha sido previamente analizado en la síntesis de nuevas redes de intercambio másico (para detalles vea Ponce-Ortega et al., 2010; Halwagi et al., 2004). La Figura 3.7 muestra el proceso donde la madera es químicamente cocida en un digestor Kraft usando licor blanco, el licor negro es transformado después de nuevo en licor blanco, y la pulpa del digestor es blanqueada para producir la fibra I, una pulpa externa es la fibra II también disponible para el proceso. Dos maquinarias diferentes son usadas para producir dos distintos tipos de papel en los procesos I y II. Las propiedades consideradas en este ejemplo son (1) fracción de masa total, (2) reflectividad (R), y (3) coeficiente de absorción (k). La Tabla 3.11 muestra los datos para las fuentes de proceso y la Tabla 3.12 contiene los requerimientos de los procesos en términos de propiedades. Las nuevas restricciones ambientales se muestran en la Tabla 3.13, estas son modificadas debido a la necesidad de disminuir la contaminación generada y los datos de las tuberías se encuentran en la Tabla 3.14. Este ejemplo también considera expandir ambos procesos como se puede ver en la Tabla 3.15. Existe la posibilidad de instalar nuevas unidades de tratamiento, tres para este caso, la primera retira el material indeseado de la fibra, el segundo reduce la reflectividad y el tercero modifica el coeficiente de absorción. Los datos del costo de la instalación de nuevas unidades se muestran en la Tabla 3.16.

Tabla 3.11 Propiedades de las corrientes Ejemplo 2.

Fuentes	F (ton/h)	MO	k(m ² /g)	R _∞	Costo (\$/ton)
Fuentes de proceso					
1	30	0.08	0.00130	0.90	0
Fuentes frescas					
1	-	0.00	0.00120	0.82	21
2	-	0.00	0.00060	0.94	40

Tabla 3.12 Restricciones para los procesos del Ejemplo 2.

Proceso	G(ton/h)	MO ^{max}	k ^{min} (m ² /g)	k ^{max} (m ² /g)	R _∞ ^{min}	R _∞ ^{max}
1	105	0.02	0.00120	0.00150	0.80	0.90
2	40	0.00	0.00070	0.00125	0.85	0.90

Tabla 3.13 Restricciones ambientales para el Ejemplo 2.

Propiedad	Previas		Nuevas	
	Mínima	Máxima	Mínima	Máxima
MO	0.00	0.08	0.00	0.04
K	0.00000	0.00130	0.00000	0.00075
R _∞	0.80	0.90	0.80	0.90

Tabla 3.14 Tuberías y bombeo para el Ejemplo 2.

Concepto	Costo (\$/ton)	Concepto	Costo (\$/ton)	Concepto	Costo (\$/ton)
<i>pip_{iu}</i>	0.85	<i>CFpip_{iu}</i>	94	<i>CFpip_{uj}</i>	95
<i>pip_{u'u}</i>	0.54	<i>CFpip_{ij}</i>	81	<i>CFpip_{rj}</i>	163.5
<i>pip_{uj}</i>	1.08	<i>CFpip_{u'u}</i>	52		
<i>pip_{ij}</i>	0.91				
<i>pip_{rj}</i>	1.72				

Tabla 3.15 Datos para la ampliación del Ejemplo 2.

Corriente	Flujo ton/h	
	Original	Ampliación
W ₁	30	40
G ₁	105	120
G ₂	40	50

Tabla 3.16 Unidades de tratamiento disponibles para el Ejemplo 2.

Concepto	Unidad 1	Unidad 2	Unidad 3
	0.07	1.00	1.00
Factor de eficiencia	1.00	0.14	1.00
p= 1-3	1.00	1.00	0.17
IFC* (N=1) 0 ≤ F** ≤ 10	96,560.0	453,490.0	93,870.0
IFC (N=2) 10 ≤ F ≤ 20	105,443.2	464,998.3	102,289.2
IFC (N=3) 20 ≤ F ≤ 30	110,520.7	471,575.0	107,100.7
IVC*** (N=1)	3,431.1	4,445.1	3,252.9
IVC (N=2)	2,543.8	3,294.3	2,410.0
IVC (N=3)	2,288.9	2,965.4	2,169.4
OC [^] \$/ton	15	25	13

* Costo fijo de instalación \$/año

**Flujos kg/h

***Costo variable de instalación \$/kg

[^]Costo operacional \$/kg.

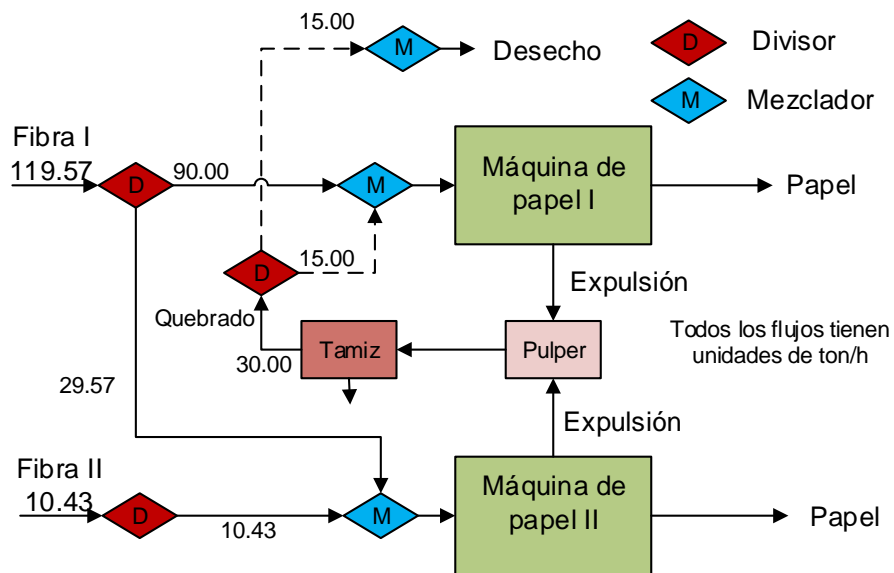


Figura 3.7 Red original de la producción de papel para el Ejemplo 2.

Las propiedades que tiene cada una de las corrientes en la red original se presentan en la Tabla 3.17.

Tabla 3.17 Datos de las corrientes antes del reajuste para el Ejemplo 2.

<i>Corriente/Propiedad</i>	MO	$k(m^2/g)$	R_∞
W_1	0.08	0.00130	0.90
F_1	0.00	0.00120	0.82
F_2	0.00	0.00060	0.94
G_1	0.01	0.00121	0.83
G_2	0.00	0.00104	0.85
G_{waste}	0.08	0.00130	0.90

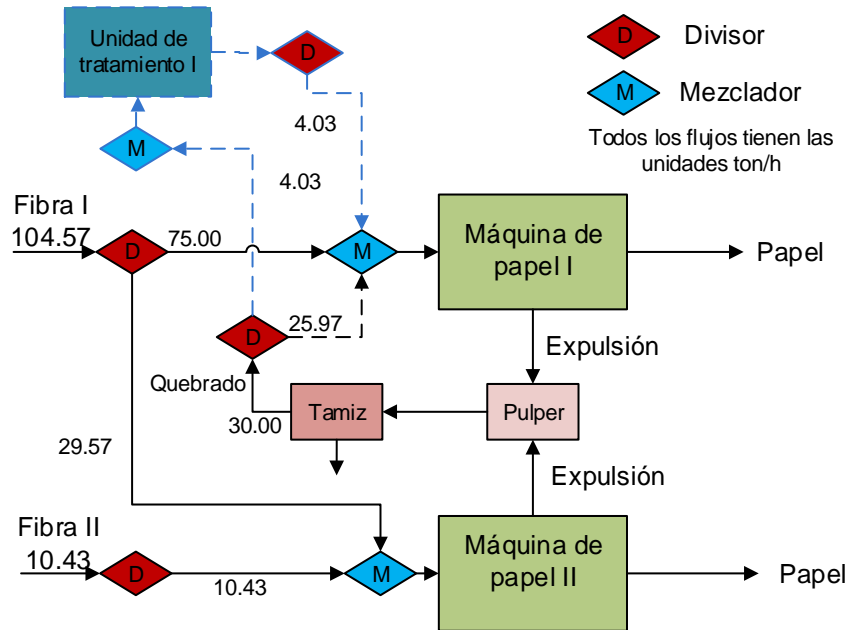


Figura 3.8 Configuración del reajuste para el Ejemplo 2 (caso A).

Caso A

En este Caso A, el reajuste considera exclusivamente cambios en las restricciones ambientales (siendo más estrictas). La reconfiguración incluye la instalación de una nueva unidad de tratamiento que trata 4.03 ton/h para reducir la concentración de material indeseado de las corrientes de proceso. Nótese que con esta modificación el proceso no produce corriente de desecho y al mismo tiempo el consumo de la fibra es reducido a 15 ton/h. En este ejemplo las fuentes de proceso se integran completamente y las fuentes frescas son minimizadas.

Tabla 3.18 Datos de las corrientes después del reajuste para el Ejemplo 2.

<i>Corriente/Propiedad</i>	MO	$k(m^2/g)$	R_{∞}
W_1	0.08	0.00130	0.90
F_1	0.00	0.00120	0.82
F_2	0.00	0.00060	0.94
H_{1in}	0.08	0.00130	0.90
H_{1out}	0.006	0.00130	0.90
G_1	0.02	0.00122	0.84
G_2	0.00	0.00104	0.85

Tabla 3.20 Comparación de resultados para el Ejemplo 2.

Concepto	Original	Reajuste	Reajuste con ampliación
Desecho, ton/h	15	0	0
Costo de fuentes frescas, \$/año	23,426,030.00	20,906,030.00	23,822,540.00
Costo de capital para unidades de tratamiento, \$/año	-----	36,582.41	439,334.74
Costo operacional de las unidades de tratamiento, \$/año	0.0	483,870.97	1,290,322.58
Costo de tuberías, \$/año	2,007,200.00	1,833,765.60	2,167,804.30
Costo adicional de tratamiento para nuevas restricciones, \$/año	5,019,332.66	-----	-----
Costo total anual, \$/año	30,452,562.66	23,260,248.98	27,720,001.62

La Tabla 3.20 muestra una comparación de los casos del Ejemplo 2, note que el flujo descargado como desecho se redujo de 15 ton/h en la red original a cero en la red reajustada. En este caso, la instalación de nuevas unidades de tratamiento involucra costos de capital adicionales, pero esta nueva unidad de tratamiento y la reconfiguración de las tuberías permiten satisfacer las restricciones ambientales más estrictas y al mismo tiempo proveen ahorros del 23.6% y 8.9% en el costo total anual para los casos de reajuste sin y con expansión de la planta, respectivamente.

EJEMPLO 3.

Este ejemplo es usado para ver la aplicación de la metodología a un caso más grande, este proceso tiene 6 fuentes de proceso, 5 procesos que alimentar y una descarga ambiental. Tiene 3 fuentes frescas y 6 restricciones de propiedades. Las propiedades consideradas son fracción másica, toxicidad, pH, COD, densidad y viscosidad.

El proceso previo ya posee una unidad de tratamiento que puede incrementar su capacidad de 2000 a 2300 kg/h. Existen siete nuevas unidades que pueden ser elegidas, dos para tratar la toxicidad, una para la COD y cuatro para el pH, dos usan ácidos y dos bases

con diferentes concentraciones. El costo de las fuentes frescas 1, 2, y 3 son 0.034, 0.022 y 0.018 \$/kg, respectivamente.

La Tabla 3.21 muestra los datos de las fuentes de proceso y frescas, la Tabla 3.22 contiene las restricciones para los procesos y las ambientales para los desechos están dadas en la Tabla 3.23. La Figura 3.10 representa la red existente.

Tabla 3.21 Datos para las fuentes de proceso y frescas para el Ejemplo 3.

Fuentes	F (kg/h)	Z _{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD (kg O ₂ /m ³)X10 ³	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
De Proceso							
1	2400	0.560	0.5	4.8	78.850	999.70	1.034
2	3800	0.970	0.9	4.7	89.210	1158.00	1.001
3	3500	0.590	0.7	5.2	105.408	563.00	1.241
4	1540	0.001	1.8	7.9	50.470	885.00	1.520
5	3950	0.045	5.4	8.2	20.587	932.00	1.001
6	2980	0.154	1.4	7.5	110.547	1062.00	1.201
Frescas							
1	-	0.000	0.0	7.0	0.000	999.72	1.002
2	-	0.010	0.1	6.8	0.010	1001.99	0.992
3	-	0.050	0.8	7.5	0.500	998.00	1.005

Tabla 3.22 Restricciones en los procesos para el Ejemplo 3.

Proceso	G(kg/h)	Z _{phenol} (ppm)	pH ^{min}	pH ^{max}	ρ ^{min} (kg/m ³)	ρ ^{max} (kg/m ³)	μ ^{min} (cP)	μ ^{max} (cP)
1	1200	0.050	4.3	9.5	792	1338	1.001	1.204
2	2450	0.150	5.8	8.4	860	1304	1.001	1.340
3	985	0.015	6.8	7.9	914	1290	1.001	1.300
4	1570	0.001	4.5	7.5	728	1385	1.001	1.100
5	1150	0.010	5.6	8.4	850	1429	1.001	1.250

Tabla 3.23 Restricciones ambientales para el Ejemplo 3.

Propiedad	Previas		Nuevas	
	Mínima	Máxima	Mínima	Máxima
$Z_{\text{phenol}}(\text{ppm})$	0.000	0.400	0.000	0.050
Tox(%)	0.0	1.5	0.0	0.5
pH	5.0	8.5	5.5	8.0
COD ($\text{kg O}_2/\text{m}^3$) $\times 10^3$	0.0	80.0	0.0	30.0

La eficiencia para las unidades de tratamiento existentes son $EF_{Z_{\text{phenol}},u'} = 0.18$, $EF_{\text{tox},u'} = 0.29$, $EF_{\text{pH},u'} = 1.0$, $EF_{\text{COD},u'} = 0.98$, $EF_{\rho,u'} = 1.0$ y $EF_{\mu,u'} = 1.0$; el costo operacional es 0.006 \$/kg. En este caso de estudio sólo los procesos son ampliados, las fuentes de proceso mantiene su tamaño y los valores están en la Tabla 3.28.

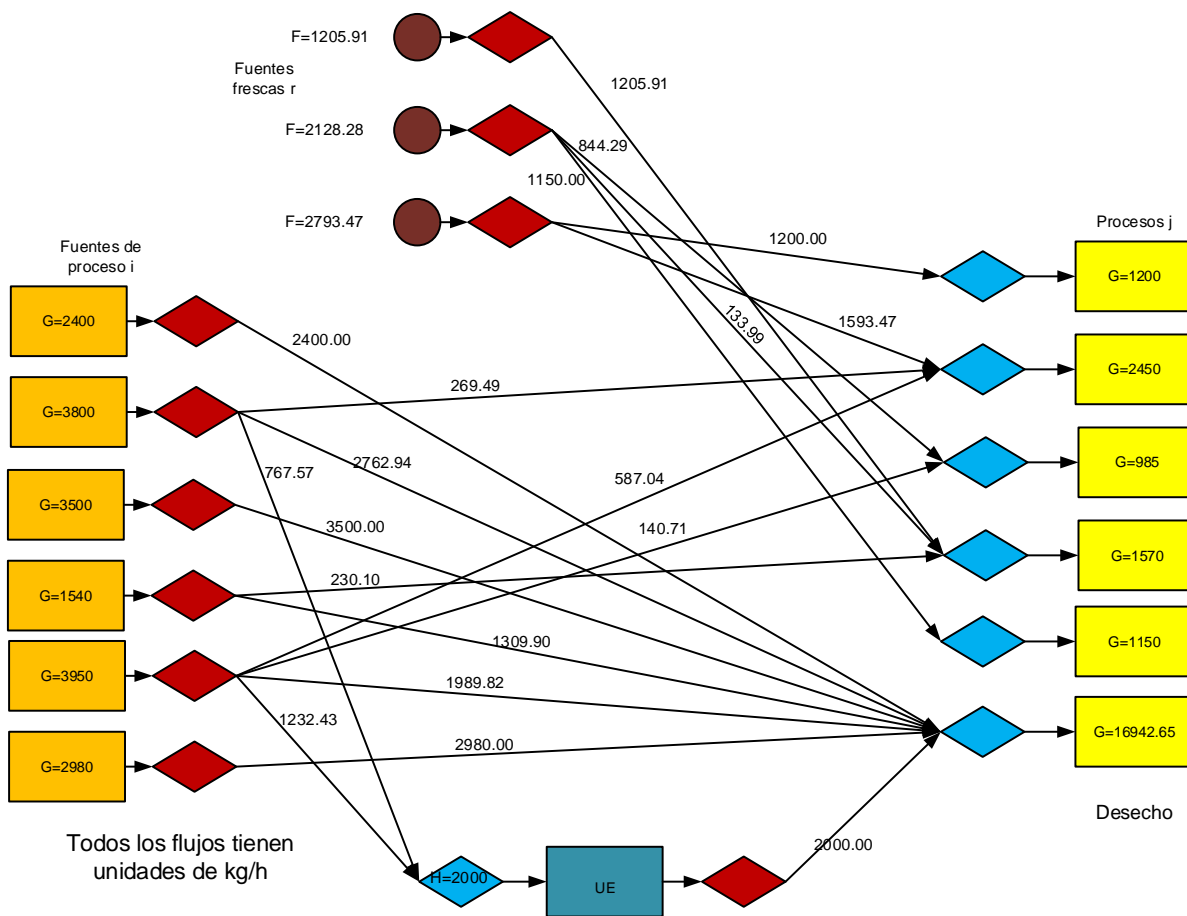


Figura 3.10 Red existente para el Ejemplo 3.

Tabla 3.24 Eficiencia y costo de las unidades de tratamiento disponibles para el Ejemplo 3.

Concepto	Unidad 1	Unidad 2	Unidad 3	Unidad 4	Unidad 5	Unidad 6	Unidad 7
	0.09	0.14	0.93	1.00	1.00	1.00	1.00
Factor de eficiencia	0.00	0.04	0.94	1.00	1.00	1.00	1.00
p= 1-6	1.00	1.00	1.00	10.00	100.00	0.01	0.001
	0.92	0.96	0.13	1.00	1.00	1.00	1.00
	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
IFC* (N=1)							
0 ≤ F** ≤ 3999	14,893.81	11,391.68	12,679.73	8,566.92	17,917.39	9,312.89	18,970.35
IFC (N=2)							
4000 ≤ F ≤ 7999	23,644.80	17,931.81	20,772.29	14,418.90	24,125.46	14,765.41	25,455.31
IFC (N=3)							
8000 ≤ F ≤ 12000	28,645.80	21,669.36	25,397.01	17,763.18	27,673.24	17,881.41	29,161.33
IVC*** (N=1)	11.27	8.42	10.42	7.53	7.99	7.02	8.34
IVC (N=2)	8.35	6.24	7.72	5.58	5.92	5.20	6.18
IVC (N=3)	7.52	4.78	6.95	5.02	5.33	4.68	5.57
OC^	1.3x10 ⁻³	0.3x10 ⁻³	0.5x10 ⁻³	0.8x10 ⁻³	0.9x10 ⁻³	0.9x10 ⁻³	1.4x10 ⁻³

* Costo fijo de instalación \$/año; **Flujos kg/h; ***Costo variable de instalación \$/kg; ^Costo operacional \$/kg.

Tabla 3.25 Mejoras de la eficiencia en la unidad existente para el Ejemplo 3.

Concepto \ Niveles	0	1	2	3	4	5
	1.0	0.96	0.93	0.91	0.87	0.83
	1.0	0.95	0.92	0.90	0.85	0.85
Factor de mejora de la eficiencia (c=1-6)	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Costo fijo de la mejora de la eficiencia \$/año	0	140.16	270.87	400.67	510.76	612.24
Costo variable de la mejora de la eficiencia \$/kg	0	1.02	0.87	0.70	0.64	0.56

Tabla 3.26 Costos de tuberías y bombeo para el Ejemplo 3.

Concepto	Valor (\$/kg)	Concepto	Valor (\$/año)	Concepto	Valor (\$/año)
pip_{iu}	0.97×10^{-4}	$CFpip_{iu}$	0.890	$CFpip_{uj}$	0.880
$pip_{u'u}$	0.63×10^{-4}	$CFpip_{ij}$	0.960	$CFpip_{rj}$	1.568
pip_{uj}	1.23×10^{-4}	$CFpip_{u'u}$	0.670		
pip_{ij}	0.84×10^{-4}				
pip_{rj}	1.58×10^{-4}				

Tabla 3.27 Propiedades de las corrientes antes del reajuste para el Ejemplo 3.

Corriente/Propiedad	Z_{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD			
				(kg O ₂ /m ³)	ρ (kg/m ³)	μ (cP)	
				x10 ³			
W_1	0.560	0.5	4.8	78.850	999.70	1.034	
W_2	0.970	0.9	4.7	89.210	1158.00	1.001	
W_3	0.590	0.7	5.2	105.408	563.00	1.241	
W_4	0.001	1.8	7.9	50.470	885.00	1.520	
W_5	0.045	5.4	8.2	20.587	932.00	1.001	
W_6	0.154	1.4	7.5	110.547	1062.00	1.201	
F_1	0.000	0.0	7.0	0.000	999.72	1.002	
F_2	0.010	0.1	6.8	0.010	1001.99	0.992	
F_3	0.050	0.8	7.5	0.500	998.00	1.005	
H_{ein}	0.400	3.7	8.0	46.923	1007.46	1.001	
H_{eout}	0.069	1.0	8.0	45.985	1007.46	1.001	
G_1	0.050	0.8	7.5	0.500	1000.00	1.005	
G_2	0.150	1.9	7.8	15.071	1000.00	1.005	
G_3	0.015	0.9	7.4	2.950	1000.00	1.001	
G_4	0.001	0.3	7.3	7.398	1000.00	1.064	
G_5	0.010	0.1	6.8	0.010	1002.00	1.001	
G_{waste}	0.400	1.5	7.6	78.685	1000.00	1.122	

Tabla 3.28 Cambios en las corrientes en las ampliaciones para el Ejemplo 3.

Corriente	Flujo kg/h		Corriente	Flujo kg/h	
	Original	Ampliación		Original	Ampliación
W ₁	2400	2400	G ₁	1200	3200
W ₂	3800	3800	G ₂	2450	2950
W ₃	3500	3500	G ₃	985	2200
W ₄	1540	1540	G ₄	1570	2670
W ₅	3950	3950	G ₅	1150	3150
W ₆	2980	2980			

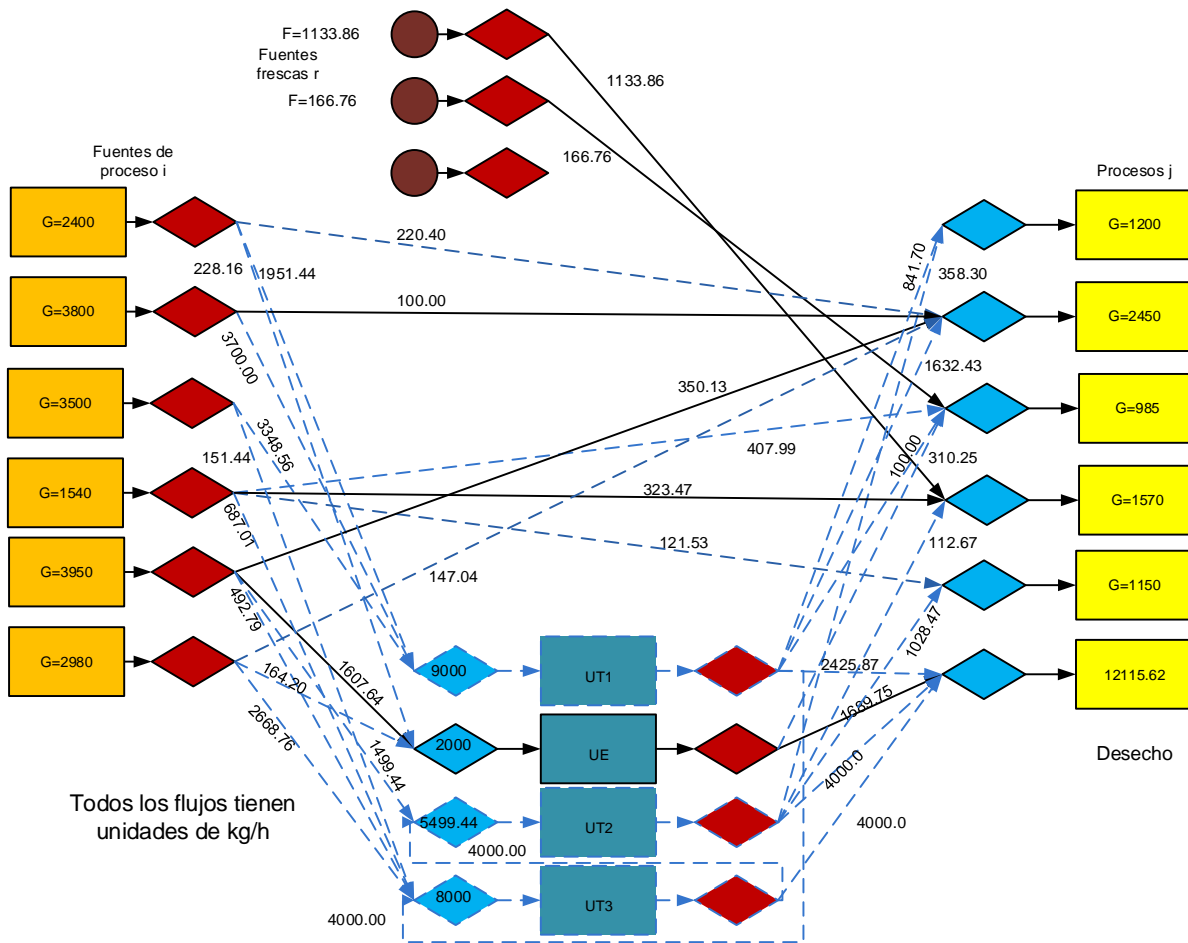


Figura 3.11 Red reajustada para el Ejemplo 3 (Caso A).

Caso A

La Figura 3.11 muestra la red reajustada sin expansión de la capacidad de la planta, donde tres unidades de tratamiento son elegidas igualmente de la que existía previamente que mantiene su flujo constante, en este ejemplo se interconectan unidades de tratamiento. En la red original, parte de las fuentes de proceso es enviado al desecho y en el reajuste nada es enviado al desecho.

Tabla 3.29 Propiedades de las corrientes después del reajuste para el Ejemplo 3.

<i>Corriente/Propiedad</i>	Z_{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD (kg O ₂ /m ³) x10 ³	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
W_1	0.560	0.5	4.8	78.850	999.70	1.034
W_2	0.970	0.9	4.7	89.210	1158.00	1.001
W_3	0.590	0.7	5.2	105.408	563.00	1.241
W_4	0.001	1.8	7.9	50.470	885.00	1.520
W_5	0.045	5.4	8.2	20.587	932.00	1.001
W_6	0.154	1.4	7.5	110.547	1062.00	1.201
F_1	0.000	0.0	7.0	0.000	999.72	1.002
F_2	0.010	0.1	6.8	0.010	1001.99	0.992
F_3	0.050	0.8	7.5	0.500	998.00	1.005
H_{ein}	0.113	4.5	8.1	34.619	1000.00	1.021
$H_{1\text{in}}$	0.740	0.7	5.0	92.990	1000.00	1.091
$H_{2\text{in}}$	0.079	2.1	7.8	13.863	1000.00	1.112
$H_{3\text{in}}$	0.099	1.0	7.4	87.251	1000.00	1.156
H_{eout}	0.019	1.2	8.1	33.927	1000.00	1.021
$H_{1\text{out}}$	0.067	0.0	5.0	85.551	1000.00	1.091
$H_{2\text{out}}$	0.011	0.1	7.8	13.309	1000.00	1.112
$H_{3\text{out}}$	0.092	0.9	7.4	11.343	1000.00	1.156
G_1	0.050	0.0	7.3	63.981	1000.00	1.099
G_2	0.150	0.9	7.4	77.314	1000.00	1.076
G_3	0.015	1.2	7.9	40.278	1000.00	1.208
G_4	0.001	0.4	7.4	11.354	1000.00	1.099
G_5	0.010	0.3	7.8	17.236	1000.00	1.148
G_{waste}	0.050	0.5	7.7	30.000	1000.00	1.109

Tabla 3.30 Corrientes después de la ampliación para el Ejemplo 3.

<i>Corriente/Propiedad</i>	Z_{phenol} (ppm)	Tox(%)	pH	COD		
				(kg O ₂ /m ³) x10 ³	ρ (kg/m ³)	μ (cP)
W_1	0.560	0.5	4.8	78.850	999.70	1.034
W_2	0.970	0.9	4.7	89.210	1158.00	1.001
W_3	0.590	0.7	5.2	105.408	563.00	1.241
W_4	0.001	1.8	7.9	50.470	885.00	1.520
W_5	0.045	5.4	8.2	20.587	932.00	1.001
W_6	0.154	1.4	7.5	110.547	1062.00	1.201
F_1	0.000	0.0	7.0	0.000	999.72	1.002
F_2	0.010	0.1	6.8	0.010	1001.99	0.992
F_3	0.050	0.8	7.5	0.500	998.00	1.005
H_{ein}	0.028	0.7	7.7	66.102	1000.00	1.084
$H_{1\text{in}}$	0.281	1.4	7.5	79.271	1000.00	1.096
$H_{2\text{in}}$	0.609	1.0	7.0	91.352	1000.00	1.099
$H_{3\text{in}}$	0.055	0.0	7.4	80.314	1000.00	1.096
$H_{4\text{in}}$	0.051	0.0	7.4	10.441	1000.00	1.096
$H_{6\text{in}}$	0.025	0.0	7.5	72.929	1000.00	1.096
H_{eout}	0.005	0.2	7.7	64.780	1000.00	1.084
$H_{1\text{out}}$	0.025	0.0	7.5	72.929	1000.00	1.096
$H_{2\text{out}}$	0.085	0.0	7.0	87.698	1000.00	1.099
$H_{3\text{out}}$	0.051	0.0	7.4	10.441	1000.00	1.096
$H_{4\text{out}}$	0.051	0.0	8.4	10.441	1000.00	1.096
$H_{6\text{out}}$	0.025	0.0	5.5	72.929	1000.00	1.096
G_1	0.050	0.0	7.4	79.012	1000.00	1.096
G_2	0.150	1.7	7.8	66.501	1000.00	1.069
G_3	0.015	0.1	7.5	52.931	1000.00	1.069
G_4	0.001	0.4	7.5	20.573	1000.00	1.099
G_5	0.010	0.7	7.7	62.674	1000.00	1.213
G_{waste}	0.050	0.5	8.0	30.000	1000.00	1.089

Tabla 3.31 Comparación de resultados para el Ejemplo 3.

Concepto	Original	Reajuste	Reajuste y ampliación
Desecho, kg/h	16,942.65	12,115.62	6,231.84
Costo de fuentes frescas, \$/año	1,104,843.09	337,758.48	556,821.10
Costo de capital de las unidades de tratamiento, \$/año	-----	74,774.30	90,909.38
Costo operacional para las unidades de tratamiento, \$/año	9,600.0	148,398.65	189,539.61
Costo de las tuberías, \$/año	22,131.59	35,845.15	38,275.29
Costo del tratamiento adicional para alcanzar las nuevas restricciones ambientales, \$/año	342,041.81	-----	-----
Costo total anual, \$/año	1,478,616.49	596,776.58	875,545.38

La Tabla 3.31 muestra los resultados del Ejemplo 3, en donde debido a la ampliación se necesita aumentar el tamaño de la unidad de tratamiento ya existente de los 2000kg/h a 2300kg/h, pero la eficiencia se mantiene con el mismo valor. La red reajustada para ambos casos (a y b) con y sin ampliación provee menores costos que la red original, el consumo de fuentes frescas es reducido y la descarga de desechos al ambiente también, la instalación e implementación de las nuevas unidades de tratamiento, y la reconfiguración de lo existente previamente permite reducir el costo total anual. El porcentaje de desecho arrojado al ambiente se redujo un 28.5% y un 63.2% en los reajustes con y sin ampliación, respectivamente, en consideración de la red existente original. El costo total anual se redujo un 61.5% en la red reajustada debido a una gran reducción en el consumo de fuentes frescas; la ampliación sólo reduce un 40.8% este consumo en consideración a los nuevos requerimientos en los procesos.

Finalmente, la Tabla 3.32 indica el tamaño de los problemas resueltos, también el tiempo computacional con un procesador i7 a 2.67 GHz y 9GB de RAM. En estos ejemplos, el reajuste con y sin ampliación tienen el mismo número de restricciones, porque la

ampliación sólo cambia valores de flujos en los procesos que alimentar y/o las fuentes de proceso. Obsérvese que los tiempos de CPU no son muy extensos, incluso considerando que el modelo en sí lo es.

Tabla 3.32 Resultados computacionales.

<i>Concepto</i>	<i>Ejemplo 1</i>	<i>Ejemplo 2</i>	<i>Ejemplo 3</i>
<i>Restricciones</i>	990	359	1,332
<i>Variables continuas</i>	731	262	968
<i>Variables binarias</i>	177	62	250
<i>Tiempo CPU (s)</i>	5.148	4.072	6.542

CAPÍTULO 4. SÍNTESIS ÓPTIMA DE REDES DE AGUA BASADAS EN PROPIEDADES CONSIDERANDO DEMANDAS CRECIENTES

4.1 Planteamiento del problema

Se propone un método sistemático para la síntesis y reajuste de redes de intercambio de agua en un contexto multianual que considere las proyecciones futuras. El modelo de optimización toma en cuenta la etapa de diseño, de proyecciones crecientes y expansiones además de la posibilidad de un reajuste cada cierto tiempo que evite el sobrediseño de la red permitiendo de esta manera disminuir el costo total del proceso durante todo el tiempo considerado en el modelo. La función objetivo es la minimización del costo total incluyendo el costo de instalación de las unidades de tratamiento así como de las tuberías, el costo de reconfigurar la red, como también el costo del agua fresca y el costo operacional de las unidades de tratamiento y el bombeo del agua.

Es importante destacar que las restricciones del proceso y las ambientales incluyen restricciones basadas en propiedades, que nos permiten considerar las corrientes constituidas por múltiples contaminantes presentes en la industria petroquímica.

El problema se puede definir como sigue: dado un conjunto de unidades de proceso que demandan cierta cantidad de agua, la cual puede cambiar en cada periodo de tiempo considerado ya sea en propiedades o flujo basado en la proyección de la producción. El crecimiento de las demandas de agua a través del tiempo nos obliga a realizar diversos reajustes, en vez de realizar un sobrediseño sobre la máxima cantidad de agua necesaria al final del proceso. Se consideran fuentes de proceso de los cuales conocemos los flujos, composiciones y propiedades que pueden variar pasando por los diferentes periodos de tiempo considerados en la proyección. Para satisfacer la demanda de agua de los procesos que debemos alimentar durante todo el tiempo que se considere, se debe de realizar la síntesis iniciando desde el primer periodo incluyendo tuberías y unidades de tratamiento que nos permitan el reúso, regeneración y reciclaje de ésta, en los periodos posteriores se realizan reajustes que involucran nuevas tuberías, nuevas unidades de tratamiento o modificación de las instaladas previamente usadas, además de cambios en la red. La estrategia de reajuste debe tratar de minimizar el costo durante toda la vida del proceso considerado, involucrando

los aspectos antes mencionados. El modelo debe de considerar además de manera correcta el cambio del valor del dinero a través del tiempo para poder determinar las acciones necesarias, ya sea la instalación de una nueva unidad de tratamiento o el modificar una existente.

Para lograr el objetivo del problema mencionado anteriormente, se propone la superestructura mostrada en la Figura 4.1. Las fuentes de proceso (corrientes de procesos que se reciclarán) son divididas y dirigidas hacia otros procesos o a las unidades de tratamiento, las corrientes divididas pueden ser mezcladas antes de los procesos y unidades de tratamiento. En el centro de la superestructura se encuentran las unidades de tratamiento que pueden ser instaladas en cualquier periodo del proceso, en etapas de reajuste se puede modificar la capacidad y eficiencia de las unidades previamente instaladas. Todas las unidades que se encuentran en la superestructura son conectadas mediante tuberías que pueden ser instaladas o reajustadas en los distintos periodos de tiempo. Esta representación permite simultáneamente la síntesis y los reajustes de la red de agua mientras se consideran las demandas futuras. La sección siguiente presenta la formulación del modelo que resuelve este problema.

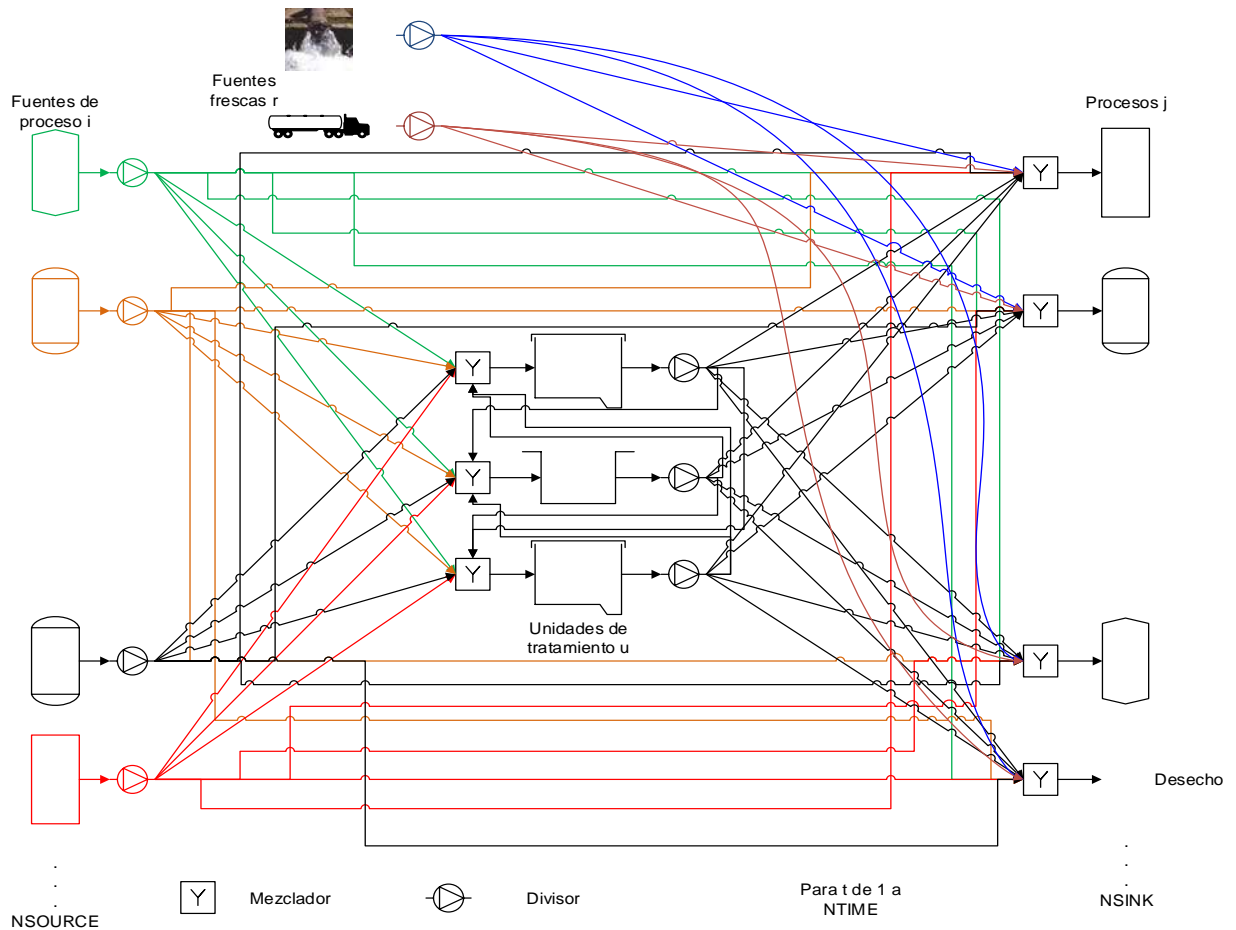


Figura 4.1 Superestructura del problema de demandas crecientes.

4.2 Formulación del modelo

El modelo propuesto está basado en balances de materia por periodo de tiempo, restricciones de propiedades, restricciones lógicas, y el diseño de las relaciones de las unidades involucradas en la superestructura. Antes del desarrollo de la formulación del proceso, se describen los siguientes índices: i representa las fuentes de proceso, j los procesos que se alimentan, u las unidades de tratamiento, t los periodos de tiempo y p las propiedades de las corrientes. El modelo se describe a continuación.

BALANCES PARA LAS FUENTES DE PROCESO.

El flujo de cada fuente de proceso $W_{i,t}$ puede ser dividido y enviado a los procesos o a las unidades de tratamiento en cualquier periodo de tiempo.

$$W_{i,t} = \sum_{j \in NSINKS} w_{i,j,t}^1 + \sum_{u \in NTREAT} w_{i,u,t}^2, \forall i \in NSOURCES, t \in NTIME \quad (4.1)$$

DISTRIBUCIÓN DE LAS FUENTES FRESCAS

La fuente fresca f puede ser dividida para ser distribuida a cualquier proceso como sigue:

$$F_{r,t} = \sum_{\substack{j \in NSINKS \\ j \neq waste}} f_{r,j,t}, \forall r \in NFRESH, t \in NTIME \quad (4.2)$$

Debe de observarse que las fuentes frescas no pueden ser enviadas al medio ambiente

$$f_{r,j,t} = 0, \forall r \in NFRESH, j = waste, t \in NTIME \quad (4.3)$$

BALANCES PARA CADA UNIDAD DE PROCESO

El flujo tratado por las unidades de tratamiento es la suma de los flujos provenientes de las fuentes de proceso y otras unidades de tratamiento en cualquier periodo de tiempo:

$$H_{u,t} = \sum_{i \in NSOURCE} w_{i,u,t}^2 + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{u',u,t}^2, \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.4)$$

Además se requiere un balance de propiedades para determinar el valor de estas mismas en las corrientes resultantes

$$H_{u,t} \psi_{u,t,p}^{in} = \sum_{i \in NSOURCE} w_{i,u,t}^2 \psi_{i,t,p} + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{u',u,t}^2 \psi_{u',t,p}^{out}, \quad (4.5)$$

$$\forall u \in NTREAT, p \in NPROP, t \in NTIME$$

Nótese que los balances de propiedades son realizados en términos de los operadores de propiedad, los cuales son distintos para cada propiedad que fueron determinadas experimentalmente o por medio de correlaciones como se reportó previamente en Shelley y El-Halwagi (2000), El-Halwagi et al. (2004), Ng et al. (2010), y Ponce-Ortega et al. (2010). La Tabla 1 muestra algunos ejemplos de estos operadores de propiedad previamente reportados.

Tabla 4.1 Operadores de propiedad reportados previamente.

(Rojas-Torres et al., 2013)

Propiedad	Operador
Composición	$\psi_z(z) = z$
Toxicidad	$\psi_{Tox}(Tox) = Tox$
COD	$\psi_{COD}(COD) = COD$
pH	$\psi_{pH}(pH) = 10^{pH}$
Densidad	$\psi_\rho(\rho) = \frac{1}{\rho}$
Viscosidad	$\psi_\mu(\mu) = \log(\mu)$
Presión de Vapor	$\psi_{RVP}(RVP) = RVP^{1.44}$
Resistividad eléctrica	$\psi_R(R) = \frac{1}{R}$
Reflectividad	$\psi_{R_\infty}(R_\infty) = R_\infty^{5.92}$
Color	$\psi_{color}(Color) = Color^{0.606}$
Olor	$\psi_{olor}(Odor) = Odor$

DESEMPEÑO DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

Cada unidad de tratamiento tiene un factor de eficiencia, el cual es independiente del tiempo y modifica las propiedades de las corrientes para satisfacer las necesidades de los procesos a alimentar. Depende del tipo y tamaño de las unidades de tratamiento, la optimización del proceso consiste en determinar las unidades de tratamiento seleccionadas y el flujo a tratar por la misma, para satisfacer las restricciones de todos los procesos a alimentar. El valor de los operadores de propiedad a la salida de las unidades de tratamiento es calculado como sigue:

$$\psi_{u,t,p}^{out} = Ef_{u,t,p} \psi_{u,t,p}^{in}, \forall u \in NTREAT, p \in NPROP, t \in NTIME \quad (4.6)$$

BALANCES A LA SALIDA DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO

El flujo saliente de las unidades de tratamiento es distribuido a los procesos o reciclado a otra unidad de tratamiento para modificar las propiedades de la corriente:

$$H_{u,t} = \sum_{j \in NSINKS} h_{u,j,t}^1 + \sum_{\substack{u' \in NTREAT \\ u' \neq u}} h_{u,u',t}^2, \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.7)$$

Observe que el flujo saliente de una unidad de tratamiento no puede ser enviado a la misma unidad de tratamiento, esto se modela de la siguiente manera:

$$h_{u,u',t}^2 = 0, \forall u, u' \in NTREAT, u = u', t \in NTIME \quad (4.8)$$

BALANCES EN LOS MEZCLADORES ANTES DE LOS PROCESOS

El flujo enviado a los procesos es la suma de los flujos provenientes de las fuentes de proceso, fuentes frescas y unidades de tratamiento:

$$G_{j,t} = \sum_{r \in NFRESH} f_{r,j,t} + \sum_{i \in NSOURCE} w_{i,j,t}^1 + \sum_{u \in NTREAT} h_{u,j,t}^1, \forall j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.9)$$

Además, se requiere un conjunto de balances de propiedad antes de cada proceso para calcular la propiedad resultante p a la entrada del proceso, estos balances requieren tomar en cuenta el operador de propiedad de las fuentes frescas, fuentes de proceso y unidades de tratamiento como sigue:

$$G_{j,t} \psi_{j,t,p} = \sum_{r \in NFRESH} f_{r,j,t} \psi_{r,t,p} + \sum_{i \in NSOURCE} w_{i,j,t}^1 \psi_{i,t,p} + \sum_{u \in NTREAT} h_{u,j,t}^1 \psi_{u,t,p}^{out} \quad (4.10)$$

$$\forall j \in NSINKS, p \in NPROP, t \in NTIME$$

Los operadores de propiedad son requeridos para considerar el comportamiento no lineal de algunas propiedades en los balances.

RESTRICCIONES EN LOS PROCESOS

Existen requerimientos específicos para los flujos de entrada en cada proceso que se modelan como sigue:

$$G_{j,t}^{\min} \leq G_{j,t} \leq G_{j,t}^{\max}, \forall j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.11)$$

Donde, g_{\min} y g_{\max} son el flujo mínimo y máximo permitido por el proceso. Nótese que estas restricciones pueden cambiar durante los distintos periodos de acuerdo con las demandas crecientes.

También se requiere especificar los límites para los operadores de propiedades en los procesos específicos, estas restricciones en las propiedades para cada proceso pueden ser establecidas en términos de los operadores de propiedad debido a que son variables de optimización en el modelo:

$$\psi_{j,t,p}^{\min} \leq \psi_{j,t,p} \leq \psi_{j,t,p}^{\max}, \forall j \in NSINKS, p \in NPROP, t \in NTIME \quad (4.12)$$

Donde w y w son dados como los límites inferiores y superiores, respectivamente, para las propiedades restringidas en los procesos. Cabe mencionar que cada descarga requiere de diferentes restricciones, por ejemplo las regulaciones ambientales tienen ciertos límites para propiedades como pH, toxicidad, demanda química de oxígeno, etc. Y algunos procesos tienen límites en algunas propiedades como densidad, viscosidad, reactividad, presión de vapor, conductividad térmica, etc. Observe que estas restricciones pueden cambiar a lo largo del proceso.

INSTALACIÓN Y MODIFICACIÓN DE LAS UNIDADES DE TRATAMIENTO.

Para el modelado de las unidades de tratamiento incluyendo la instalación y modificación de las unidades de tratamiento en diferentes periodos de tiempo, se utiliza la siguiente disyunción.

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u,t} \\ H_{u,t} \geq \delta \\ H_{u,t}^{use} \geq H_{u,t} \forall t' < t \\ Ef_{u,t,p}^{cuse} \geq Ef_{u,t',p} \forall t' < t \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} \neg Y_{u,t} \\ H_{u,t} = 0 \\ Cost_{u,t} = 0 \end{array} \right],$$

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{A1} \\ H_{u,t}^{use} \geq \delta \\ Cost_{u,t} = Cost_{u,t} + Costm_{u,t} \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{A2} \\ H_{u,t}^{use} = 0 \\ \delta \leq H_{u,t} \leq H_u^{max} \\ Cost_{u,t} = K_{Fi} [CF_u^I + CV_u^I H_{u,t}] \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{B1} \\ H_{u,t} \geq H_{u,t}^{use} \\ H_{u,t} \leq H_u^{max} \\ Cost_{u,t} = K_{Fi} [CF_u^A + CV_u^A (H_{u,t} - H_{u,t}^{use})] \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{B2} \\ H_{u,t}^{use} \geq H_{u,t} \\ Cost_{u,t} = 0 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{C1} \\ Ef_{u,t,p} \geq Ef_{u,t,p}^{cuse} \\ Ef_{u,t,p} = Ef_{u,t,p}^{cuse} Me_{u,p} \\ Costm_{u,t} = K_{Fi} [CF_u^M + CV_u^M H_{u,t}] \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c} Y_{u,t}^{C2} \\ Ef_{u,t,p} = Ef_{u,t,p}^{cuse} \\ Costm_{u,t} = 0 \end{array} \right]$$

$$\forall u \in NTREAT \\
t \in NTIME$$

En la disyunción previa se tienen las siguientes consideraciones; la unidad de tratamiento u puede ser usada (cuando $y_{u,t}$ es verdadera) o no (cuando $y_{u,t}$ es falsa). Cuando la unidad de tratamiento no es usada, el flujo de entrada ($h_{u,t}$) y costos ($Cost_{u,t}$) son cero. Por otro lado, cuando la unidad de tratamiento es usada en cierto periodo de tiempo, el flujo de entrada debe ser mayor a cero ($H_{u,t} > 0$). Después, se necesita definir dos nuevas variables para indicar el flujo máximo de entrada que considere todos los tiempos previos y la máxima eficiencia usada en los tiempos previos: en las cuales se tendrán dos opciones, uno (cuando la variable booleana es verdadera) establece que el flujo de entrada a las unidades de entrada en tiempos previos es igual a cero, esto significa que la unidad de tratamiento no existía hasta el periodo actual en el cual será instalada además de calcular el costo de instalación. Para tomar en cuenta el valor del dinero a través del tiempo se utiliza el parámetro K_{Fi} , que depende del periodo de tiempo en el cual la unidad de tratamiento es instalada. La segunda

opción, cuando la unidad existía de un periodo previo (cuando la variable booleana es verdadera) existen otras cuatro opciones. Si la capacidad previa de la unidad de tratamiento es suficiente para manejar el flujo requerido ($h^{use} \geq H_{u,t}$), el costo asociado será cero (asociado a la variable booleana $Y_{u,t}^{B2}$). Si la capacidad requerida es mayor que la existente en periodos previos ($H_{u,t} > h^{use}$) se activa la variable booleana y el costo de capital de la expansión es calculado. Esta ampliación debe ser menor al límite máximo (H^{max}) propuesto para cada unidad de tratamiento. Otra consideración que se debe toma en cuenta es la mejora en la eficiencia. Cuando la eficiencia requerida por la unidad de tratamiento en el periodo actual es igual a la existente de los tiempos previos ($ef_{u,t,p} = ef^{use}$) la variable booleana Yc es verdadera y el costo de capital de la mejora es cero ($Costm=0$). Si la eficiencia requerida es mayor que la existente previamente ($Ef_{u,t,p} \geq Ef_{u,t,p}^{use}$) la variable booleana $Yc1$ es verdadera, la eficiencia será mejorada por un factor $Me_{u,p}$ y su costo correspondiente será calculado. Obsérvese que en la disyunción previa el índice t' es usado para periodos de tiempo previos a t . Esta disyunción es la principal contribución de este trabajo. De la transformación de la disyunción previa a ecuaciones algebraicas se obtiene:

$$y_{u,t} \leq 1 \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.13)$$

$$H_{u,t} \geq \delta \cdot y_{u,t} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.14)$$

$$H_{u,t}^{use} \geq H_{u,t'} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, t' < t \quad (4.15)$$

$$Ef_{u,t,p}^{use} \geq Ef_{u,t',p} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, t' < t \quad (4.16)$$

$$y_{u,t}^{A1} + y_{u,t}^{A2} = y_{u,t} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.17)$$

$$H_{u,t} = H_{u,t}^{A1} + H_{u,t}^{A2} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.18)$$

$$Cost_{u,t} = Cost_{u,t}^{A1} + Cost_{u,t}^{A2} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.19)$$

$$H_{u,t}^{use} \geq \delta y_{u,t}^{A1} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.20)$$

$$H_{u,t}^{A2} \leq H_u^{\max} y_{u,t}^{A2} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.21)$$

$$H_{u,t}^{A2} \geq \delta y_{u,t}^{A2}, \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.22)$$

$$Cost_{u,t}^{A2} = K_{Ft} [CF_u^I y_{u,t}^{A2} + CV_u^I H_{u,t}^2], \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.23)$$

$$Cost_{u,t}^{A1} = Cost_{u,t}^A + Cost_{u,t}^M \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.24)$$

$$y_{u,t}^{B1} + y_{u,t}^{B2} = y_{u,t}^{A1}, \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.25)$$

$$H_{u,t}^{A1} = H_{u,t}^{AB1} + H_{u,t}^{AB2} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.26)$$

$$H_{u,t}^{AB1} \geq H_{u,t}^{use} \cdot y_{u,t}^{B1} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.27)$$

$$H_{u,t}^{AB1} \leq H_u^{\max} \cdot y_{u,t}^{B1} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.28)$$

$$Cost_{u,t}^A = K_{Ft} [CF_u^A y_{u,t}^{B1} + CV_u^A (H_{u,t}^{AB1} - H_{u,t}^{use} y_{u,t}^{B1})] \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.29)$$

$$H_{u,t}^{AB2} \leq H_{u,t}^{use} \cdot y_{u,t}^{B2}, \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.30)$$

$$y_{u,t}^{C1} + y_{u,t}^{C2} = y_{u,t}^A \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.31)$$

$$Ef_{u,t,p} = Ef_{u,t,p}^1 + Ef_{u,t,p}^2 \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, p \in NPROP \quad (4.32)$$

$$Ef_{u,t,p}^1 \geq Ef_{u,t,p}^{use} \cdot y_{u,t}^{C1} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, p \in NPROP \quad (4.33)$$

$$Ef_{u,t,p}^1 = Ef_{u,t,p}^{use} Me_{u,p} \cdot y_{u,t}^{C1} \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, p \in NPROP \quad (4.34)$$

$$Cost_{u,t}^M = K_{Ft} [CF_u^M y_{u,t}^{C1} + CV_u^M H_{u,t}^1] \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME \quad (4.35)$$

$$Ef_{u,t,p}^2 = Ef_{u,t,p}^{use} y_{u,t}^{C2}, \quad \forall u \in NTREAT, t \in NTIME, p \in NPROP \quad (4.36)$$

Estas ecuaciones algebraicas se obtuvieron de la reformulación de la disyunción usando la técnica de la envoltura convexa (Raman y Grossmann, 1994; Ponce-Ortega et al., 2008).

COSTO DE TUBERÍAS

En el reajuste de procesos, muchas de las tareas involucran la reconfiguración de la red de tuberías existentes en el proceso, por lo que el cálculo del costo de bombeo e instalación de las tuberías es una contribución importante, y se debe de lograr en cada periodo de tiempo a través del tiempo de vida del proceso. Para ejemplificar el modelo usado en cada distinto tipo de tuberías se usa la siguiente disyunción, la mostrada a continuación es de las fuentes de proceso a las descargas de proceso.

$$\begin{array}{c}
 \left[\begin{array}{c}
 Y_{i,j,t}^{pip} \\
 w_{i,j,t}^1 \geq \delta \\
 w_{i,j,t}^{1,use} \geq w_{i,j,t'}^1 \forall t' < t
 \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c}
 \neg Y_{i,j,t}^{pip} \\
 w_{i,j,t}^1 = 0 \\
 Costtub_{i,j,t} = 0
 \end{array} \right], \quad \forall i \in NSOURCE, \\
 \left[\begin{array}{c}
 Y_{i,j,t}^{D1} \\
 w_{i,j,t}^{1,use} \geq \delta \\
 w_{i,j,t}^1 \leq w_{i,j,t}^{1,max} \\
 Costtub_{i,j,t} = 0
 \end{array} \right] \vee \left[\begin{array}{c}
 Y_{i,j,t}^{D2} \\
 w_{i,j,t}^{1,use} = 0 \\
 \delta \leq w_{i,j,t}^1 \leq w_{i,j,t}^{1,max} \\
 Costtub_{i,j,t} = K_{Ft} CT_{i,j}
 \end{array} \right], \quad \begin{array}{l}
 t \in NTIME, \\
 j \in NSINKS
 \end{array}
 \end{array}$$

En la disyunción previa cuando un segmento de tubería no es requerida en un periodo t , la variable booleana $Y_{i,j,t}^{pip}$ es falsa, el flujo ($w_{i,j,t}^1$) y el costo ($Costtub_{i,j,t}$) es cero. Por otro lado, cuando la tubería es requerida en el tiempo t , la variable booleana $Y_{i,j,t}^{pip}$ es verdadera y el flujo debe ser mayor que cero. Además, el flujo máximo usado en previos periodos de tiempo es determinado para poder ser usado en dos opciones del reajuste. La primera involucra el caso cuando el flujo requerido en el periodo es menor que el máximo usado en periodos previos (modelado a través de la variable booleana), la cual implica que el segmento de tubería existente es suficiente para manejar el flujo requerido por lo que no implica ningún costo adicional. La segunda opción incluye el caso cuando no existía una tubería previa para

este segmento, debido a esto es necesario calcular el costo de instalar la nueva tubería; que debe tomar en cuenta el valor del dinero a través del tiempo en relación al periodo en el que se instalará (esto se realiza por el parámetro K_{Fi}) y la distancia entre las unidades que se unirán ($CT_{i,j}$). Esta formulación involucra la instalación y reajuste de las tuberías en diferentes periodos de tiempo que no se consideran en trabajos previos de redes de agua, esta es una contribución más de este trabajo. Para reformular la disyunción previa como un grupo de relaciones algebraicas, se utilizó la técnica de la envoltura convexa (ver Raman y Grossmann, 1994; Ponce-Ortega et al., 2008) y las relaciones resultantes se muestran a continuación.

$$w_{i,j,t}^1 \geq \delta \cdot y_{i,j,t}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.37)$$

$$w_{i,j,t}^{1,use} \geq w_{i,j,t'}^1, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad t' < t \quad (4.38)$$

$$y_{i,j,t}^{D1} + y_{i,j,t}^{D2} = y_{i,j,t}^{pip}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.39)$$

$$w_{i,j,t}^1 = w_{i,j,t}^{1D1} + w_{i,j,t}^{1D2}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.40)$$

$$w_{i,j,t}^{1,use} \geq \delta \cdot y_{i,j,t}^{D1}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.41)$$

$$w_{i,j,t}^{1D1} \leq w_{i,j,t}^{1,max} \cdot y_{i,j,t}^{D1}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.42)$$

$$w_{i,j,t}^{1D2} \geq \delta \cdot y_{i,j,t}^{D2}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.43)$$

$$w_{i,j,t}^{1D2} \leq w_{i,j,t}^{1,max} \cdot y_{i,j,t}^{D2}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.44)$$

$$Cost_{tub,i,j,t} = K_{Fi} CT_{i,j} y_{i,j,t}^{D2}, \forall i \in NSOURCES, j \in NSINKS, t \in NTIME \quad (4.45)$$

Disyunciones y reformulaciones similares son aplicadas a los diferentes segmentos de tuberías involucradas en la superestructura propuesta.

COSTOS INVOLUCRADOS.

El costo de las fuentes ($cost_r$) es determinado de acuerdo a la cantidad de fuente fresca usada durante todo el horizonte de tiempo ($F_{r,t}$) como el costo de las fuentes frescas, los años

que opera la planta (H_Y) y el factor que adecua el valor del dinero a través del tiempo dependiendo del periodo en el cual se instalan las tuberías ($Y_{R,t}$). Después, el costo de las fuentes frescas se determina de la siguiente manera:

$$Cost_r = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} Cost_{r,t} F_{r,t}, \forall r \in NFRESH \quad (4.46)$$

Para el costo de operación de las unidades de tratamiento ($costo_u$) se toma en cuenta el flujo tratado ($H_{u,t}$), el costo de operación los años que opera y el ajuste del valor del dinero.

$$Costo_u = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} CO_u H_{u,t}, \forall u \in NTREAT \quad (4.47)$$

En el costo asociado a los distintos segmentos de tuberías ($costopip$) se involucran los costos operacionales y de capital. El costo de capital ($costtub$) es determinado por medio de la disyunción previamente explicada, donde el costo operacional depende del flujo que se manipule, de la distancia que unan las tuberías, los años que trabaje el proceso y el factor que tenga en cuenta el cambio del valor del dinero a través del tiempo.

$$Costopip_{i,j} = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} pip_{i,j} w_{i,j,t}^1 + \sum_{t \in NTIME} Costtub_{i,j,t}, \forall i \in NSOURCE, j \in NSINK \quad (4.48)$$

$$Costopip_{i,u} = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} pip_{i,u} w_{i,u,t}^2 + \sum_{t \in NTIME} Costtub_{i,u,t}, \forall i \in NSOURCE, u \in NTREAT \quad (4.49)$$

$$Costopip_{r,j} = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} pip_{r,j} f_{r,j,t} + \sum_{t \in NTIME} Costtub_{r,j,t}, \forall r \in NFRESH, j \in NSINK \quad (4.50)$$

$$Costopip_{u',u} = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} pip_{u',u} h_{u',u,t}^2 + \sum_{t \in NTIME} Costtub_{u',u,t}, \forall u', u \in NTREAT \quad (4.51)$$

$$Costopip_{u,j} = H_Y \sum_{t \in NTIME} Y_{Rt} pip_{u,j} h_{u,j,t}^1 + \sum_{t \in NTIME} Costtub_{u,j,t}, \forall u \in NTREAT, j \in NSINK \quad (4.52)$$

Finalmente se suman todos los costos de las tuberías calculadas previamente y obtenemos:

$$Costopip = \sum_{i \in NSOURCE} \sum_{j \in NSINK} Costopip_{i,j} + \sum_{i \in NSOURCE} \sum_{u \in NTREAT} Costopip_{i,u} + \sum_{r \in NFRESH} \sum_{j \in NSINK} Costopip_{r,j} \\ + \sum_{u' \in NTREAT} \sum_{u \in NTREAT} Costopip_{u',u} + \sum_{u \in NTREAT} \sum_{j \in NSINK} Costopip_{u,j} \quad (4.53)$$

FUNCIÓN OBJETIVO

La función objetivo consiste en minimizar el costo total considerando el costo de las fuentes frescas, el costo de capital de las inversiones para las unidades de tratamiento (instalación y adaptación), el costo operacional de las mismas y el costo de las tuberías para la red reajustada.

$$\min TC = \sum_{r \in NFRESH} Cost_r + \sum_{u \in NTREAT} Costo_u + \sum_{t \in NTIME} \sum_{u \in NTREAT} Cost_{u,t} + Costopip \quad (4.54)$$

La formulación de esta optimización es un problema de programación mixta entera no lineal que se codificó usando el software GAMS. La siguiente sección muestra la aplicación del modelo propuesto.

4.3 Resultados y discusión.

Casos de estudio

Dos casos de estudio son presentados a continuación para mostrar la aplicación del modelo propuesto, los cuales se describen como sigue.

Caso de estudio 1

Este caso consiste en una refinería de petróleo con tres fuentes de proceso, tres procesos que alimentan además de una descarga correspondiente a la corriente de desecho que se enviará al ambiente. En este caso, se consideran dos contaminantes cuya concentración afecta los procesos a los que se descarga además del medio ambiente, para tratar esos contaminantes, se cuenta con dos posibles unidades de tratamiento, las cuales pueden ser instaladas o modificadas durante su operación de cuatro periodos (cada periodo corresponde a cinco años para alcanzar un tiempo horizonte de 20 años). Además, se cuenta con dos fuentes frescas, cada una con distintas características. El costo de estas fuentes frescas son $Costo_1=0.10$ con un incremento del 20% cada periodo y $Costo_2=0.09$ con un incremento del 25% cada periodo. Los datos de este problema se muestran en las Tablas 4.2-4.8.

Tabla 4.2 Flujos de las fuentes de proceso y los factores de anualización para el Ejemplo 1

Corriente/ Periodo de tiempo	<i>t</i>			
	1	2	3	4
$W_{i,t}$				
1	100	200	400	500
2	200	300	400	600
3	150	300	400	500
K_{Ft}	1	0.8	0.7	0.5

Tabla 4.3 Restricciones en los flujos para los procesos a los cuales se descarga.

Corriente/ Periodo de tiempo	<i>t</i>			
	1	2	3	4
$G_{j,t}^{\min}$				
1	200	300	600	900
2	300	500	600	700
3	0	0	0	0
$G_{j,t}^{\max}$				
1	200	300	600	900
2	300	500	600	700
3	450	800	1200	1600

Tabla 4.4 Propiedades para las fuentes de proceso en cada tiempo *t*

Propiedad <i>p</i>	Fuentes de proceso <i>i</i>			Fuentes frescas <i>r</i>	
	1	2	3	1	2
1	0.22	0.2	0.23	0.05	0.03
2	0.26	0.18	0.17	0.03	0.01

Tabla 4.5 Restricciones de las propiedades para las descargas.

Corriente/Periodo de tiempo $\psi_{j,t,p}^{\max}$	<i>t=1,2,3,4</i>	
	<i>p</i>	
<i>j</i>	1	2
1	0.2	0.18
2	0.15	0.23
3	0.15	0.15

Tabla 4.6 Eficiencia para las unidades de tratamiento

Propieda <i>d</i> <i>p</i>	Unidad de tratamiento <i>u</i>	
	1	2
1	0.45	1
2	1	0.35

Tabla 4.7 Costos de las unidades de tratamiento.

Factor	Unidad de tratamiento <i>u</i>	
	1	2
CFI	80000	95000
CVI	4.78	3.26
CFA	18652	16829
CVA	2.59	1.92
CFM	26531	23568
CVM	1.56	1.44
CO	0.008	0.012

Tabla 4.8 Factores usados en la mejora de las unidades de tratamiento.

Propieda <i>d</i> <i>p</i>	Unidad de tratamiento <i>u</i>	
	1	2
1	0.6	1
2	1	0.7

La **Tabla 4.9** muestra los costos de instalación de tuberías y bombeo para cada distinto tipo de segmentos considerados en el problema.

Tabla 4.9 Costo de las tuberías del Ejemplo 1.

Variable	Valor	Variable	Valor	Variable	Valor
pip_{iu}	1.24×10^{-3}	$CFpip_{iu}$	40.26	$CFpip_{ij}$	57.20
$pip_{u'u}$	0.76×10^{-3}	$CFpip_{ij}$	62.01	$CFpip_{rj}$	105.36
pip_{uj}	1.46×10^{-3}	$CFpip_{u'u}$	73.51		
pip_{ij}	0.68×10^{-3}				
pip_{rj}	1.37×10^{-3}				

Primeramente, se consideró que no existiría ningún reajuste para poder tener un valor con el cual poder comparar el obtenido con la metodología del reajuste cada periodo de tiempo, en el ejemplo se calculó el costo que tendría utilizando la metodología del peor escenario. En la cual se considera que se debe instalar toda la planta con la capacidad final que se desea, los resultados son mostrados en la Figura 4.2.

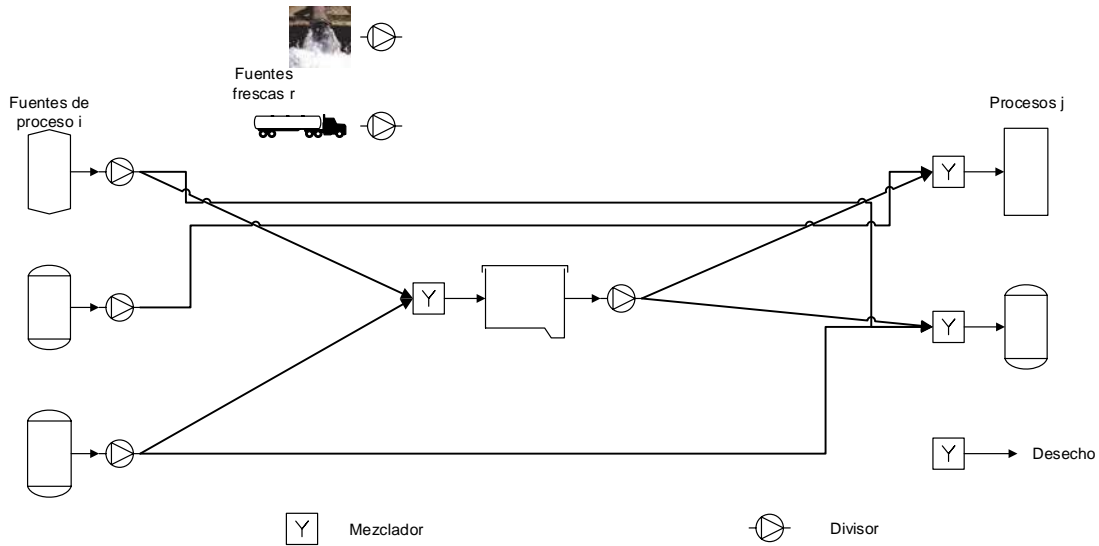


Figura 4.2 Solución al peor escenario Ejemplo 1

La Figura 4.3 muestra la red óptima para el caso cuando se considera un reajuste multi-periodo. Cabe destacar de esta figura que la unidad de tratamiento fue instalada durante el primer periodo de operación y que la reconfiguración se da en las tuberías a través de los distintos periodos considerados. Se debe notar que la unidad de tratamiento necesita ser reajustada en su desempeño durante los periodos que opera para satisfacer de manera adecuada la demanda de agua con las propiedades en los valores necesarios para cada proceso al que se descarga.

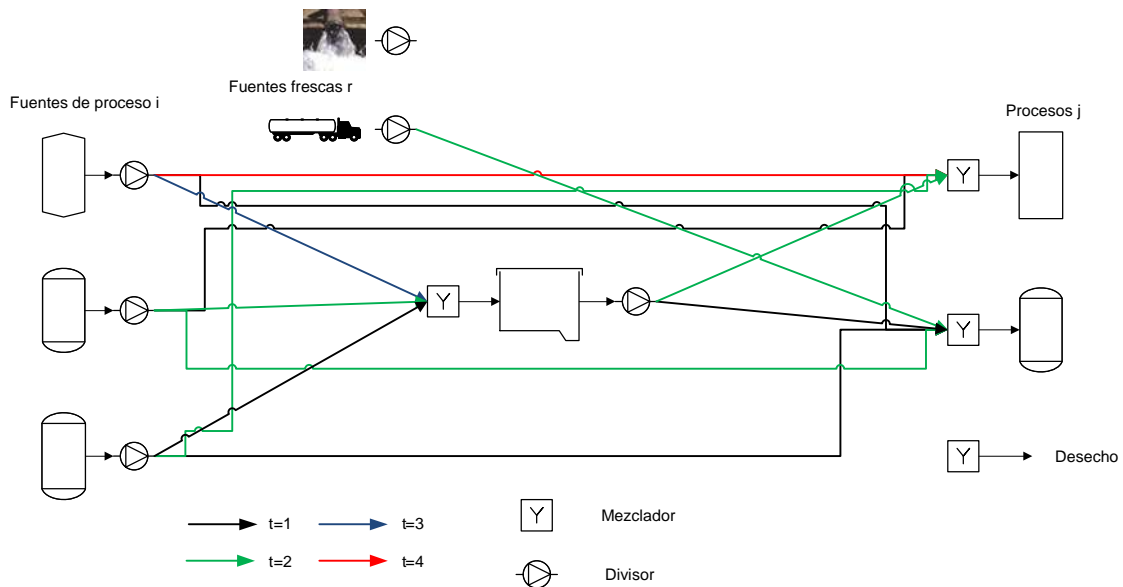


Figura 4.3 Solución para el problema de reajuste multi-periodo del Ejemplo 1.

Para mostrar cada aspecto de las corrientes envueltas en la red óptima de agua a través de los distintos periodos, las Tablas 4.10-4.12 contienen estos flujos en los distintos periodos a través de todo el horizonte de tiempo. Asimismo, las Tablas 4.13-4.16 muestran los valores para las propiedades de las corrientes en cada segmento de tubería utilizado en el reajuste.

Tabla 4.10 Flujos de las fuentes de proceso a procesos en los cuales se descarga en la solución óptima del Ejemplo 1.

$w_{i,j,t}^1$												
i	$t=1$			$t=2$			$t=3$			$t=4$		
	j			j			j			j		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	0.00	100.00	0.00	0.00	200.00	0.00	0.00	370.00	0.00	30.00	406.721	0.00
2	20.000.00	0.00	0.00	128.93	68.9	0.00	400.00	0.00	0.00	518.825	30.00	0.00
3	0.00	47.233	0.00	141.07	0.00	0.00	168.90	0.00	0.00	293.728	0.00	0.00

Tabla 4.11 Flujos de las fuentes de proceso hacia las unidades de tratamiento.

$w_{i,u,t}^2$				
i	$t=1$	$t=2$	$t=3$	$t=4$
	u	u	u	u
	1	1	1	1
1	0	0	30	63.279
2	0	102.17	0	51.175
3	102.767	158.93	231.1	206.272

Tabla 4.12 Flujos de las unidades de tratamiento a las descargas de proceso.

$h_{u,j,t}^1$				
j	$t=1$	$t=2$	$t=3$	$t=4$
	u	u	u	u
	1	1	1	1
1	0	30	31.1	57.447
2	102.767	231.1	230	263.279
3	0	0	0	0

Tabla 4.13 Propiedades de las corrientes a la entrada de las unidades de tratamiento. 1.

$\Psi_{u,t,p}^{in}$				
p	$t=1$	$t=2$	$t=3$	$t=4$
	u	u	u	u
	1	1	1	1
1	0.23	0.218	0.229	0.223
2	0.17	0.174	0.18	0.189

Tabla 4.14 Propiedades para las corrientes de salida de las unidades de tratamiento

$\Psi_{u,t,p}^{out}$				
p	$t=1$	$t=2$	$t=3$	$t=4$
	u	u	u	u
	1	1	1	1
1	0.104	0.059	0.037	0.036
2	0.17	0.174	0.18	0.189

Tabla 4.15 Propiedades para las corrientes de entrada a las descargas.

$\Psi_{j,t,p}$												
p	$t=1$			$t=2$			$t=3$			$t=4$		
	j			j			j			j		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	0.2	0.15	0	0.2	0.143	0	0.2	0.15	0	0.2	0.15	0
2	0.18	0.173	0	0.175	0.209	0	0.177	0.229	0	0.18	0.23	0

Tabla 4.16 Resultados económicos.

Objeto/ Escenario	Reajuste multi-periodo (\$ Total)	Peor escenario (\$ Total)
Fuentes frescas	144,000	0
Instalación de unidades de tratamiento	145,551	82,342
Operación de unidades de tratamiento	242,097	501,869
Instalación y operación de tuberías	151,838	267,509
Costo total	683,487	851,721

La Tabla 4.16 muestra los principales resultados económicos para el Ejemplo 1; ambos escenarios han sido reportados, el primer escenario es el reajuste multi-periodo y el segundo para el peor escenario. Nótese que el caso del peor escenario no requiere fuentes

frescas, esto es debido a las unidades de tratamiento instaladas en el primer periodo son capaces de regenerar el agua de desecho para satisfacer adecuadamente la demanda de las descargas de proceso en el horizonte de tiempo. Por el otro lado, el reajuste multi-periodo involucra fuentes frescas, pero un bajo costo de las unidades de tratamiento como de bombeo. De acuerdo a esto, el costo total para el reajuste multi-periodo es 19.75% menor que el peor escenario. Esto muestra la importancia de la propuesta de la optimización para este tipo de problemas.

Caso de estudio 2

Este problema consiste de tres fuentes de proceso, cuatro procesos a los que descargar y la ambiental, cuatro propiedades, dos fuentes frescas y tres posibles unidades de tratamiento. El problema involucra cuatro periodos de 5 años cada uno. En este caso de estudio, cuatro propiedades son restringidas, la primera corresponde a la composición de un material peligroso, la segunda corresponde a la toxicidad, la tercera es la demanda química del oxígeno, y la cuarta es la densidad. Los costos de las fuentes frescas son $Cost_1=0.02$ y $Cost_2=0.013$ con un incremento del 15% cada periodo. Las Tablas 4.17 y 4.18 muestran los datos de los flujos de las fuentes de proceso y los flujos requeridos para las descargas.

La Tabla 4.19 muestra las restricciones en términos de propiedades, y la Tabla 4.20 muestra las propiedades de las fuentes frescas. Además, la Tabla 4.21 presenta la eficiencia de las unidades y la Tabla 4.22 el factor usado para mejorar las eficiencias en distintos periodos de tiempo. El costo de las unidades de tratamiento se muestra en la Tabla 4.23 y las tuberías en la Tabla 4.24.

Tabla 4.17 Flujos de las fuentes de proceso y factores de anualización para el Ejemplo 2.

Corriente/ Periodo de tiempo	<i>t</i>			
	1	2	3	4
$W_{i,t}$				
1	1000	2000	3000	4000
2	450	900	1350	1700
3	400	800	1200	1600
K_{Ft}	1	0.8	0.6	0.4

Tabla 4.18 Restricciones de flujos para las descargas para el Ejemplo 2.

Corriente/ Periodo de tiempo	t			
	1	2	3	4
$G_{j,t}^{\min}$				
1	700	1400	2100	2800
2	500	1000	1500	2000
3	300	600	900	1200
4	0	0	0	0
$G_{j,t}^{\max}$				
1	700	1400	2100	2800
2	500	1000	1500	2000
3	300	600	900	1200
4	1850	3700	5550	7300

Tabla 4.19 Restricciones en las propiedades para las descargas par el Ejemplo 2.

Descarga/ Periodo de tiempo Propiedad j	$t=1,2,3,4$			
	p			
	1	2	3	4
1	0.013	100	100	-
2	0.011	100	100	-
3	0.1	100	100	-
4	0	0	20	-

Tabla 4.20 Propiedades para las corrientes para el Ejemplo 2.

Propiedad/ Corriente p	i			r	
	1	2	3	1	2
1	0.016	0.024	0.22	0	0
2	0.3	0.5	1.5	0	0.01
3	15.62	48.85	92.10	0	0.10
4	907.19	1001.53	1065.94	999.72	1001.99

Tabla 4.21 Eficiencias para las unidades de tratamiento para el Ejemplo 2.

Propiedad/ Unidad de tratamiento <i>p</i>	<i>u</i>		
	1	2	3
1	1	0.15	1
2	0	1	1
3	1	1	0.18
4	1	1	1

Tabla 4.22 Mejoras disponibles para las unidades de tratamiento para el Ejemplo 2.

Propiedades/Unidades de tratamiento <i>p</i>	<i>u</i>		
	1	2	3
1	1	0.8	1
2	1	1	1
3	1	1	0.85
4	1	1	1

Tabla 4.23 Costos para las unidades de tratamiento para el Ejemplo 2.

Concepto/ Unidad de tratamiento	<i>u</i>		
	1	2	3
CFI	11459.78	8762.83	13782.61
CVI	8.66	6.47	6.14
CFA	5168.12	3870.56	6914.26
CVA	2.59	1.75	1.63
CFM	-	9762.83	19782.61
CVM	-	8.62	9.46
CO	0.0010	0.0004	0.0011

Tabla 4.24 Costo de las tuberías para el Ejemplo 2.

Concepto	Valor	Concepto	Valor	Concepto	Valor
pip_{iu}	0.88×10^{-4}	$CFpip_{iu}$	60.20	$CFpip_{uj}$	88.34
$pip_{u'u}$	0.57×10^{-4}	$CFpip_{ij}$	75.23	$CFpip_{rj}$	115.63
pip_{uj}	1.02×10^{-4}	$CFpip_{u'u}$	95.36		
pip_{ij}	0.88×10^{-4}				
pip_{rj}	1.65×10^{-4}				

Primeramente, la Figura 4.4 muestra la solución del problema considerando el peor escenario que evita el uso del reajuste multi-periodo y utiliza el sobre-diseño al máximo del flujo necesitado desde el primer periodo.

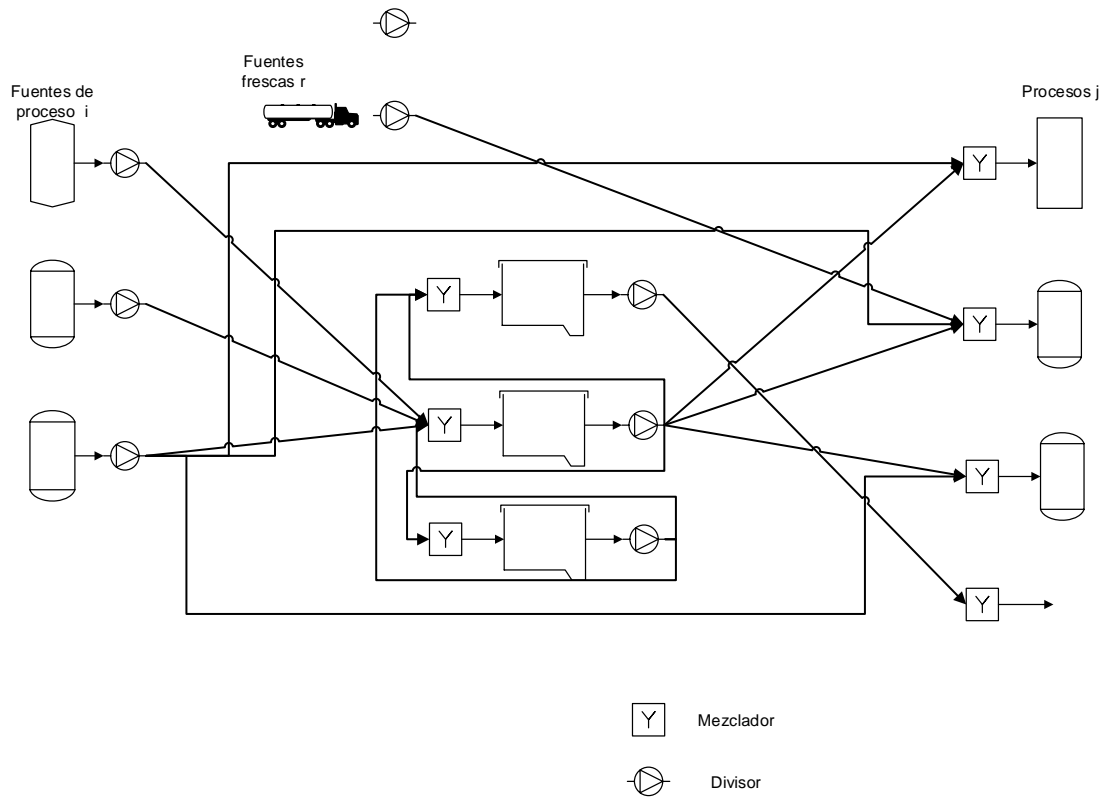


Figura 4.4 Solución al peor escenario del Ejemplo 2.

La Figura 4.5 muestra la configuración obtenida por el reajuste multi-periodo. En esta figura, la red es reconfigurada cada periodo para incrementar y mejorar la eficiencia y la capacidad. Para mostrar estas reconfiguraciones de la solución óptima se presenta la Figura 4.5, y la Tabla 4.25 muestra los flujos de las fuentes de proceso a las descargas en los distintos periodos. La Tabla 4.26 muestra los flujos de las fuentes de proceso a las unidades de tratamiento. Las Tablas 4.27-4.30 contienen las capacidades y eficiencias para las unidades de tratamiento consideradas durante todo el horizonte de tiempo así como los flujos que tratan y sus envíos a los procesos y entre ellas. Las propiedades a la entrada de las descargas se encuentran en la Tabla 4.31.

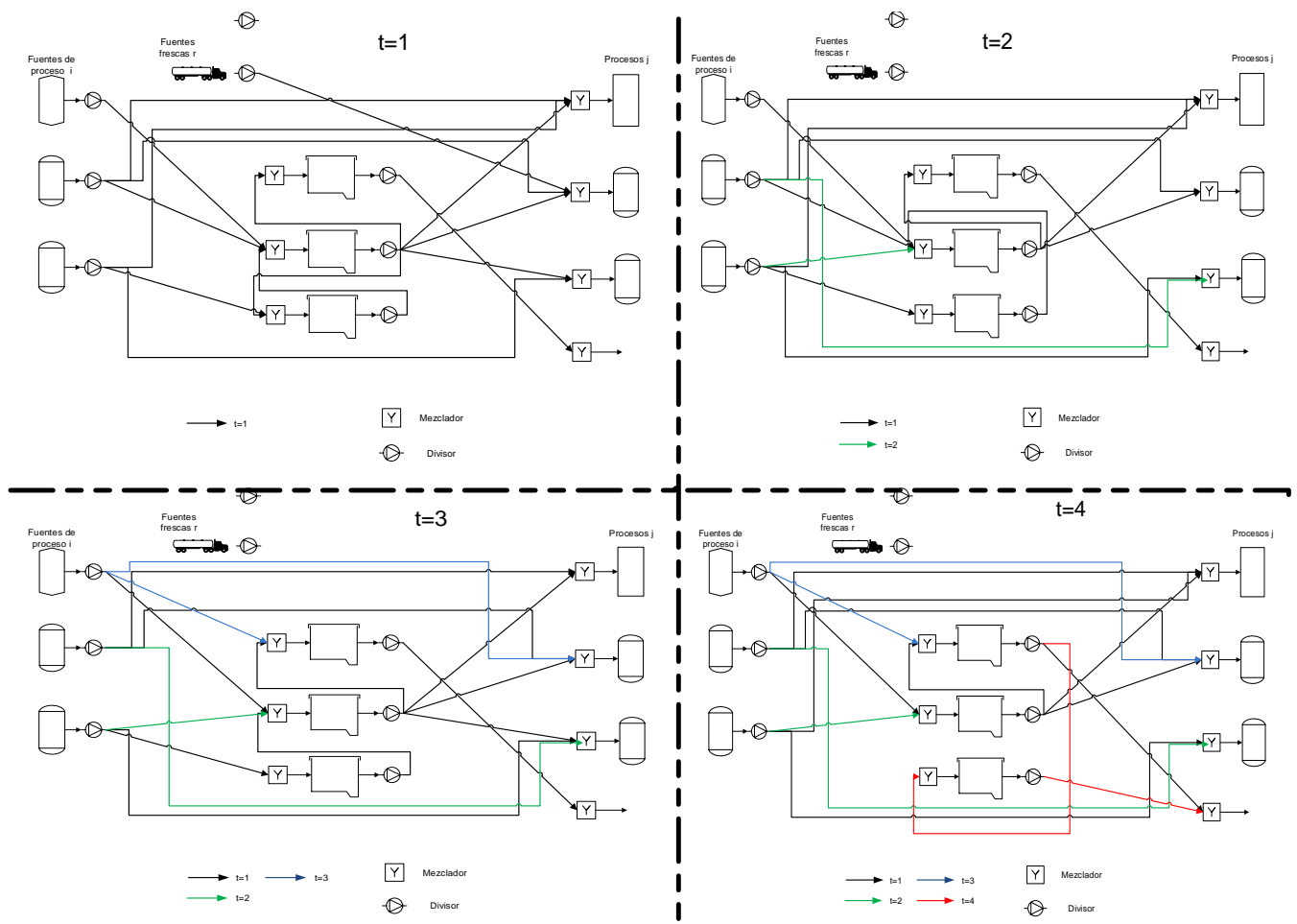


Figura 4.5 Solución óptima para el Ejemplo 2 con demandas crecientes.

Tabla 4.25 Flujo de las fuentes de proceso a las descargas en la solución óptima del Ejemplo 2.

<i>i</i>	$w_{i,j,t}^1$							
	<i>t=1</i>				<i>t=2</i>			
	<i>j</i>				<i>j</i>			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	48.09	121.77	0	0	201.76	235.29	367.35	0
3	15.88	0	130.99	0	23.33	0	32.65	0
<i>i</i>	$w_{i,j,t}^1$							
	<i>t=3</i>				<i>t=4</i>			
	<i>j</i>				<i>j</i>			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0	605.38	0	0	0	801.77	0	0
2	763.35	46.51	540.14	0	898.14	67.17	734.69	0
3	0	0	349.86	0	10	0	465.31	0

Tabla 4.26 Flujos de fuentes de proceso a las unidades de tratamiento del Ejemplo 2.

<i>i</i>	$w_{i,u,t}^2$											
	<i>t=1</i>			<i>t=2</i>			<i>t=3</i>			<i>t=4</i>		
	<i>u</i>			<i>u</i>			<i>u</i>			<i>u</i>		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	0	1000	0	0	2000	0	31.9	2362.72	0	44.14	3154.1	0
2	0	280.15	0	0	95.6	0	0	0	0	0	0	0
3	0	0	253.13	0	118.15	425.87	0	219.79	630.35	0	1124.69	0

Tabla 4.27 Flujo entre las unidades de tratamiento del Ejemplo 2.

<i>u'</i>	$h_{u',u,t}^2$											
	<i>t=1</i>			<i>t=2</i>			<i>t=3</i>			<i>t=4</i>		
	<i>u</i>			<i>u</i>			<i>u</i>			<i>u</i>		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	627.35
2	360	0	172.93	700	0	0	1018.102	0	0	1255.87	0	0
3	0	426.07	0	0	425.87	0	0	630.35	0	0	0	0

Tabla 4.28 Flujo de las unidades de tratamiento a las descargas del Ejemplo 2.

<i>u</i>	$h_{u,j,t}^1$							
	<i>t=1</i>				<i>t=2</i>			
	<i>j</i>				<i>j</i>			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0	0	0	360	0	0	0	700
2	636.04	368.24	169.01	0	1174.91	764.71	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0
<i>u</i>	<i>t=3</i>				<i>t=4</i>			
	<i>j</i>				<i>j</i>			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0	0	0	1050	0	0	0	672.65
2	1336.65	848.11	10	0	1891.86	1131.07	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	627.35

Tabla 4.29 Propiedades para las corrientes de entrada a las unidades de tratamiento del Ejemplo 2.

<i>p</i>	$\psi_{u,t,p}^{\text{in}}$					
	<i>t=1</i>			<i>t=2</i>		
	<i>u</i>			<i>u</i>		
	1	2	3	1	2	3
1	0.007	0.047	0.134	0.007	0.058	0.022
2	0.535	0.535	1.108	0.555	0.555	1.5
3	20	20	62.836	20	20	92.1
4 (x10 ⁻³)	1.0562307	1.0562307	0.9860703	1.0647102	1.0647102	0.9381391
<i>p</i>	<i>t=3</i>			<i>t=4</i>		
	<i>u</i>			<i>u</i>		
	1	2	3	1	2	3
1	0.007	0.07	0.22	0.007	0.07	0.007
2	0.608	0.618	1.5	0.605	0.615	0
3	20	20.137	92.1	35.041	35.723	35.041
4 (x10 ⁻³)	1.0601855	1.0588658	0.9381391	1.0606187	1.0591536	1.0606187

Tabla 4.30 Propiedades de salida de las unidades de tratamiento del Ejemplo 2.

p	$\Psi_{u,t,p}^{out}$					
	$t=1$			$t=2$		
	u			u		
	1	2	3	1	2	3
1	0.007	0.007	0.134	0.007	0.007	0.22
2	0	0.535	1.108	0	0.555	1.5
3	20	20	11.31	20	20	14.091
$4 (x10^{-3})$	1.0562307	1.0562307	0.9860703	1.0647102	1.0647102	0.9381391
p	$t=3$			$t=4$		
	u			u		
	1	2	3	1	2	3
1	0.007	0.007	0.22	0.007	0.007	0.007
2	0	0.618	1.5	0	0.618	0
3	20	20.137	11.978	35.04	35.723	3.873
$4 (x10^{-3})$	1.0601855	1.0588658	0.9381391	1.0606187	1.0591536	1.0606187

Tabla 4.31 Propiedades de entrada para las descargas del Ejemplo 2.

p	$\Psi_{j,t,p}$							
	$t=1$				$t=2$			
	j				j			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0.013	0.011	0.1	0.007	0.013	0.011	0.1	0.007
2	0.554	0.518	0.956	0	0.562	0.542	0.888	0
3	23.617	26.626	51.48	20	25.359	26.788	65.62	20
$4 (x10^{-3})$	1.0496	1.0410	1.0047	1.0562	1.0531	1.0491	0.9935	1.0647
p	$t=3$				$t=4$			
	j				j			
	1	2	3	4	1	2	3	4
1	0.013	0.011	0.1	0.007	0.013	0.011	0.1	0.007
2	0.575	0.486	0.89	0	0.582	0.485	0.888	0
3	30.574	19.204	65.344	20	40.183	28.105	65.62	20
$4 (x10^{-3})$	1.0369	1.0745	0.9757	1.0602	1.0393	1.0744	0.9751	1.0606

La Tabla 4.32 muestra los resultados económicos principales del Ejemplo 2 para la solución óptima del reajuste multi-periodo y para el caso del peor escenario. Nótese que el peor escenario consume 400% más agua que la solución del reajuste multi-periodo. El costo de instalación para el reajuste multi-periodo es 24% mayor que en el peor escenario, pero el costo de operación es 87% más grande en el peor escenario que en el reajuste multi-periodo. Además, la solución para el peor escenario tiene un 88% mayor gasto en las tuberías que el reajuste multi-periodo. Finalmente, el costo total del reajuste multi-periodo es 41% menor que el peor escenario, mostrando las bondades de esta nueva metodología.

Tabla 4.32 Resultados económicos del Ejemplo 2

Concepto	Reajuste multi-periodo (\$/año)	Costo del peor escenario (\$/año)
Fuentes frescas	5,200	25,965
Instalación de unidades de tratamiento	123,458	94,184
Operación de unidades de tratamiento	418,623	785,046
Instalación y operación de tuberías	127,823	236,165
Costo total	675,105	1,141,362

Finalmente, Tabla 4.33 muestra el tamaño de cada caso de estudio y el tiempo computacional usando una computadora con i7 a 2.2 GHZ y 6 GB de RAM.

Tabla 4.33 Datos computacionales para los casos de estudio.

Concepto	Caso de estudio 1	Caso de estudio 2
Restricciones	1,665	2,757
Variables continuas	424	672
Variables binarias	1,361	2,257
Tiempo CPU s	2.5	15.3

CONCLUSIONES

Este trabajo presenta dos metodologías de programación matemática para el reajuste y diseño óptimo de redes de agua considerando simultáneamente los aspectos económicos y ambientales, basados en propiedades debido a la trazabilidad de éstas y a la dificultad de conocer en corrientes con una gran cantidad de componentes, la composición y aportación exacta a características de la misma. La primera consiste en un modelo de integración másica para el reajuste de redes de agua basado en propiedades que considera al mismo tiempo la minimización del costo total anual y la modificación de propiedades en la corriente de desecho que cumpla con las restricciones más actuales para no comprometer el medio ambiente. Esta aproximación determina como se realizarán las nuevas conexiones del proceso, estos resultados se muestran en las distintas figuras de los diagramas de los procesos, teniendo en cuenta dos distintas opciones: realizar sólo el reajuste en los procesos sólo considerando cumplir con las restricciones y minimizar el costo; y además de lo anterior considerar una ampliación simultáneamente con el reajuste.

Para la segunda parte se propone diseñar desde un inicio el proceso considerando no iniciar con la planta de un gran tamaño, para mejorar el aprovechamiento de los recursos al momento de instalar el proceso. Se diseña el proceso y se realizan diversos reajustes cada cierto periodo de tiempo en los cuales la demanda del proceso se ha incrementado, además que ha sufrido cambios en algunas de las operaciones que contiene el proceso. En el sentido de no implementar un sobre-diseño de gran costo en el cual la planta tenga una gran capacidad desde un inicio sin que pueda ser explotada al 100%, generando gastos innecesarios.

Los resultados de ambas metodologías nos muestran un beneficio económico debido al minimizar el consumo de fuentes frescas, a pesar del costo mayor en el tratamiento de agua en consecuencia de la instalación o modificación de las unidades de tratamiento.

Además, la incorporación del uso de propiedades para caracterizar las corrientes nos facilita seguir las mismas durante todo el proceso y trabajar con las restricciones en base a estas con mayor confiabilidad que tener que calcularlas con la gran cantidad de componentes presentes en las corrientes industriales. Debido a la dificultad de saber si existe alguna sinergia entre estos componentes o alguna traza que nos modifique notablemente las propiedades.

En la primera parte el modelo nos produce ahorros significativos solamente considerando el reajuste de la planta, para los casos con ampliación el ahorro es mayor debido al aumento de la producción.

En la segunda parte, los resultados nos muestran un beneficio financiero al diseñar la planta en menor escala que para el peor escenario (instalar desde un inicio la planta como si fuese a trabajar a su máxima capacidad), y realizando reajustes periódicos que satisfagan las demandas crecientes, el valor que permite la comparación de estos casos es costo total durante la vida del proceso, con la modelación hay periodos en los cuales la inversión es mayor que para el peor escenario, pero los costos totales se ven reducidos al hacer instalaciones más pequeñas y el valor que el dinero tiene en ese periodo.

Todos los modelos son mixto entero no lineales, además estos son modelos generales aplicables a cualquier proceso de interés, cuya formulación no genere problemas numéricos para su solución.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alfadala, H. E., Sunol, A. K., & El-Halwagi, M. M. (2001). An integrated approach to the retrofitting of mass exchange networks. *Clean Products and Processes*, 2(4), 236-247.
2. Alva-Argaez, A., Kokossis, A.C., Smith, R., 1998. Wastewater minimization of industrial systems using an integrated approach. *Computer and Chemical Engineering* 22 (Suppl), S741-S744.
3. Bai, J., Feng, X., Deng, C., 2010. Optimal design of single-contaminant regeneration reuse water networks with process decomposition. *American Institute Chemical Engineering Journal* 56 (4), 915-929.
4. Benko, N., Rev, E., Fonyo, Z., 2000. The use of nonlinear programming to optimal water allocation. *Chemical Engineering Communications* 178, 67-101.
5. Brooke, A., Kendrick, D., Meeruas, A., and Raman, R. (2006). *GAMS-Language guide*. Washington, D.C.: GAMS Development Corporation.
6. Chen, C. L., & Hung, P. S. (2005). Retrofit of mass-exchange networks with superstructure-based MINLP formulation. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44(18), 7189-7199.
7. Chen, C.L., Lee, J.Y., (2010). On the use of graphical analysis for the design of batch water networks. *Clean Technologies and Environmental Policy* 12 (2), 117-123.
8. Chew, I.M.L., Tan, R.R., Foo, D.C.Y., Chiu, A.S.F., 2009. Game theory approach to the analysis of inter-plant water integration in an eco-industrial park. *Journal of Cleaner Production* 17 (18), 1611-1619.
9. Chew, I.M.L., Thillaivarne, S.L., Tan, R.R., Foo, D.C.Y., 2011. Analysis of inter-plant water integration with indirect schemes through game theory approach: Pareto optimal solution with interventions. *Clean Technologies and Environmental Policy* 13 (1), 49-62.
10. Dakwala, M., Mohanty, B., Bhargava, R., (2009). A process integration approach to industrial water conservation: a case study for an Indian starch industry. *Journal of Cleaner Production* 17 (18), 1654-1662.

11. Deng, C., Feng, X. (2011). Targeting for conventional and propertybased water networks with multiple resources. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 50(7), 3722–3737.
12. Dhole, V. R., Ramchandani, N., Tainsh, R. A. & Wasilewski, M. (1996). Make your process water pay for itself. *Chemical Engineering*, 103(1), 100-103.
13. Doyle, S.J., Smith, R., 1997. Targeting water reuse with multiple contaminants. *Process Safety and Environmental Protection* 75 (B3), 181-189.
14. El-Halwagi, M.M., Spriggs, H.D., (1996). An Integrated Approach to Cost and Energy Efficient Pollution Prevention, vol. 1. Proceedings of the Fifth World Congress of Chemical Engineering, San Diego, USA. 675-680.
15. El-Halwagi, M.M. Pollution Prevention Through Process Integration, Academic Press, San Diego, (1997).
16. El-Halwagi, M. M. Process Integration. New York: Academic Press, (2006).
17. El-Halwagi, M. M., Gabriel, F., & Harell, D. (2003). Rigorous graphical targeting for resource conservation via material recycle/reuse networks. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 42(19), 4319-4328.
18. El-Halwagi, M. M., Glasgow, I. M., Qin, X. Y., & Eden, M. R. (2004). Property integration: componentless design techniques and visualization tools. *American Institute Chemical Engineering Journal*, 50, 1854–1869.
19. Erol, P., Thoming, J., 2005. ECO-design of reuse and recycling networks by multiobjective optimization. *Journal of Cleaner Production* 13 (15), 1492-1503.
20. Faria, D.C., Bagajewicz, M.J., 2009. Profit-based grassroots design and retrofit of water networks in process plants. *Computers and Chemical Engineering* 33 (2), 436-453.
21. Faria, D.C., Ulson de Souza, A.A., Ulson de Souza, S.M.A.G., 2009. Optimization of water networks in industrial processes. *Journal of Cleaner Production* 17 (9), 857-862.
22. Feng, X., Bai, J., Wang, H., Zheng, X., 2008. Grass-roots design of regeneration recycling water networks. *Computers and Chemical Engineering* 32 (8), 1892-1907.
23. Foo, D.C.Y. (2013) A generalized guideline for process changes for resource conservation networks. *Clean Technologies And Environmental Policy* 15(1), 45–53.

24. Foo D.C.Y., Kazantzi V., El-Halwagi M.M., Manan Z.A. (2006) Surplus diagram and cascade analysis techniques for targeting propertybased material reuse network. *Chemical Engineering Science* 61(8), 2626–2642.
25. Foo, D.C.Y., Manan, Z.A., Tan, Y.L., (2005). Synthesis of maximum water recovery networks for batch process systems. *Journal of Cleaner Production*, 13 (15), 138-1394.
26. Fraser, D. M., & Hallale, N. (2000) Retrofit of mass exchange networks using pinch technology. *American Institute Chemical Engineering Journal*, 46(10), 2112-2117.
27. Gabriel, F., & 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.
28. Galan, B., & Grossmann, I. E. (1998). Optimal design of distributed wastewater treatment networks. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 37(10), 4036-4048.
29. Gomes, J.F.S., Queiroz, E.M., Pessoa, F.L.P., (2007). Design procedure for water/wastewater minimization: single contaminant. *Journal of Cleaner Production* 15 (5), 474-485.
30. 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 (3), 588-599.
31. Hallale, N. (2002). A new graphical targeting method for water minimization. *Advances in Environmental Research*, 6(3), 377-390.
32. Handani, Z.B., Alwi, S.R.W., Hashim, H., Manan, Z.A., 2010. Holistic approach for design of minimum water networks using the mixed integer linear programming (MILP) technique. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 49 (12), 5742-5751.
33. 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.

34. Huang, C.H., Chang, C.T., Ling, H.C., Chang, C.C., 1999. A mathematical programming model for water usage and treatment network design. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 38 (7), 2666-2679.
35. Karuppiah, R., Grossmann, I. E. (2006). Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. *Computers and Chemical Engineering*, 20(4), 650-673.
36. Kazantzi, V., & El-Halwagi, M.M. (2005) Targeting material reuse via property integration. *Chemical Engineering Progress*, 101(8), 28-37.
37. Kheireddine, H., Dadmohammadi, Y., Deng, C., Feng, X., El-Halwagi, M.M. (2011) Optimization of direct recycle networks with the simultaneous consideration of property, mass, and thermal effects. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 50(7), 3754–3762.
38. Kheireddine, H.A., El-Halwagi, M.M., Elbashir, N.O. (2013) A property integration approach to solve screening and conceptual design of solvent-extraction systems for recycling used lubricating oils. *Clean Technologies and Environmental Policy* 15(1), 35–44.
39. Khor C.S., Shah N., Mahadzir S., Elkamel A. (2012) Optimization of petroleum refinery water network systems retrofit incorporating reuse, regeneration and recycle strategies. *Canadian Journal of Chemical Engineering* 90(1), 137–143.
40. Kim, J., Kim, J., Kim, J., Yoo, C., Moon, I., 2009. A simultaneous optimization approach for the design of wastewater and heat exchange networks based on cost estimation. *Journal of Cleaner Production* 17 (2), 162-171.
41. Kumaraprasad, G., Muthukumar, K., (2009). Design of mass exchange network and effluent distribution system for effective water management. *Journal of Cleaner Production*. 17 (17), 1580-1593.
42. Kuo, W.C.J., Smith, R., (1998). Designing for the interactions between water use and effluent treatment. *Chemical Engineering Research and Design* 76 (A3), 287-301.
43. Lancu, P., Plesu, V., & Lavric, V. (2009). Regeneration of internal streams as an effective tool for wastewater network optimization. *Computer and Chemical Engineering*, 33(3), 731-742.

44. Lavric, V., Iancu, P., Plesu, V., 2005. Genetic algorithm optimization of water consumption and wastewater network topology. *Journal of Cleaner Production* 13 (15), 1405-1415.
45. Lee, S. & Grossmann, I. E. (2003). Global optimization of nonlinear generalized disjunctive programming with bilinear equality constraints: applications to process networks. *Computers and Chemical Engineering*, 27(11), 1557-1575.
46. Li BH, Chang CT (2011a) A model-based search strategy for exhaustive identification of alternative water networks design. *Industrial Chemical Engineering Research* 50(7), 3653–3659.
47. Li BH, Chang CT (2011b) Multiobjective optimization of water-using networks with multiple contaminants. *Industrial Chemical Engineering Research* 50(9), 5651–5660.
48. Liao, Z., Wang, J., Yang, Y., Rong, G., 2010. Integrating purifiers in refinery hydrogen networks: a retrofit case study. *Journal of Cleaner Production* 18 (3), 233-241.
49. Lira-Barragan L.F., Ponce-Ortega J.M., Serna-González M, El-Halwagi M. M. (2011a) Synthesis of water networks considering the sustainability of the surrounding watershed. *Computer Chemical Engineering* 35(12), 2837–2852
50. Lira-Barragan L.F., Ponce-Ortega J.M., Serna-González M., El-Halwagi M. M. (2011b) An MINLP model for the optimal location of a new industrial plant with simultaneous consideration of economic and environmental criteria. *Industrial Chemical Engineering Research* 52(2), 953–964
51. Lira-Barragan L. F., Ponce-Ortega J. M., Nápoles-Rivera F., Serna-González M., El-Halwagi M. M. (2013) Incorporating the property-based water networks and surrounding watersheds in site selection of industrial facilities. *Industrial Chemical Engineering Research* 52(1), 91–107.
52. Manan, Z.A., Tea, S.Y., Alwi, S.R.W., 2009. A new technique for simultaneous water and energy minimization in process plant. *Chemical Engineering Research and Design* 87 (11), 1509-1519.


53. Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M.M., Jiménez-Gutiérrez, A., (2010). Global optimization of mass and property integration networks with inplant property interceptors. *Chemical Engineering Science* 65 (15), 4363e4377.
54. Ng, D.K.S., Foo, D.C.Y., Tan, R.R., Pau, C.H., Tan, Y.L. (2009) Automated targeting for conventional and bilateral property-based resource conservation network. *Chemical Engineering Journal* 149(1–3), 87–101.
55. Ng, D.K.S., Foo, D.C.Y., Tan, R.R., El-Halwagi, M.M. (2010) Automated targeting technique for concentration and property-based total resource conservation networks. *Computers & Chemical Engineering* 34(5), 825–845.
56. Oliver, P., Rodríguez, S., Udaquiola, S., 2008. Water use optimization in batch process industries. Part 1: design of the water network. *Journal of Cleaner Production* 16 (12), 1275-1286.
57. Peters, M. S. & Timmerhaus, K. D. (1991). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, McGraw Hill, New York, 4th Edition. Polley, G. T., & Polley, H. L. (2000). Design better water networks. *Chemical Engineering Progress*, 96(2), 47-52.
58. Ponce-Ortega, J.M., Hortua, A.C., El-Halwagi, M.M., Jimenez-Gutierrez, A., (2009). A property-based optimization of direct recycle networks and wastewater treatment processes. *American Institute Chemical Engineering Journal*. 55 (9), 2329-2344.
59. Ponce-Ortega, J.M., El-Halwagi, M.M., Jimenez-Gutierrez, A. (2010) Global optimization for the synthesis of property-based recycle and reuse networks including environmental constraints. *Computers & Chemical Engineering* 34(3), 318–330.
60. Ponce-Ortega, J.M., Mosqueda-Jimenez, F.W., Serna-Gonzalez, M., Jimenez-Gutierrez, A., El-Halwagi, M.M. (2011) A property-based approach to the synthesis of material conservation networks with economic and environmental objectives. *American Institute Chemical Engineering Journal* 57(9), 2369–2387.
61. Ponce-Ortega J. M., Nápoles-Rivera F., El-Halwagi M. M., Jiménez-Gutiérrez A. (2012) An optimization approach for the synthesis of recycle and reuse water integration networks. *Clean Technologies and Environmental Policy* 14(1), 133–151
62. Quesada, I. & Grossmann, I. E. (1995). Global Optimization of bilinear process networks with multicomponent flows. *Computer and Chemical Engineering*, 19(12), 1219-1242.

63. Raman, R., Grossmann, I. E. (1994). Modeling and computational techniques for logic based integer programming. *Computer and Chemical Engineering*, 18(7), 563–578.
64. Rubio-Castro E., Ponce-Ortega J.M., Serna-González M., El-Halwagi M.M. (2012) Optimal reconfiguration of multi-plant water networks into an eco-industrial park. *Computers & Chemical Engineering* 44, 58–83.
65. 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.
66. Saw, S.Y., Lee, L., Lim, M.H., Foo, D.C.Y., Chew, I.M.L., Tan, R.R., Klemes, J.J. (2011). An extended graphical targeting technique for direct reuse/recycle in concentration and property-based resource conservation networks. *Clean Technologies and Environmental Policy*. (13) 347–357.
67. Shelley, M. D., & El-Halwagi, M. M. (2000). Componentless design of recovery and allocation systems: a functionality-based clustering approach. *Computer and Chemical Engineering*, 24, 2081–2091.
68. Sorin, M., Bedard, S., (1999). The global pinch point in water reuse networks. *Process Safety and Environmental Protection* 77 (B5), 305-308.
69. Sotelo-Pichardo C., Ponce-Ortega J.M., El-Halwagi M.M., Frausto-Hernandez S. (2011) Optimal retrofit of water conservation networks. *Journal Of Cleaner Production* 19(14), 1560–1581.
70. Statyukha, G., Kvitka, O., Dzhygyrey, I., Jezowski, J., 2008. A simple sequential approach for designing industrial wastewater treatment networks. *Journal of Cleaner Production* 16 (2), 215-224.
71. Sujo-Nava, D., Scodari, L. A., Slater, C. S., Dahm, K., & Savelski, M. J. (2009). Retrofit of sour water networks in oil refineries: A case study. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48(4), 892-901.
72. Takama, N., Kuriyama, T., Shoroko, K., & Umeda, T. (1980). Optimal water allocation in a petroleum refinery. *Computers and Chemical Engineering*, 4(4), 251-258.

73. Tan, R.R., Col-long, K.J., Foo, D.C.Y., Hul, S., Ng, D.K.S., (2008). A methodology for the design of efficient resource conservation networks using adaptive swarm intelligence. *Journal of Cleaner Production* 16 (7), 822-832.
74. Tan, R. R., & Cruz, D. E. (2004). Synthesis of robust water networks for single-component retrofit problems using symmetric fuzzy linear programming. *Computers and Chemical Engineering*, 28(12), 2547-2551.
75. Tan, R.R., Ng, D.K.S., Foo, D.C.Y., 2010. Graphical approach o minimum flowrate targeting for partitioning water pretreatment units. *Chemical Engineering Research and Design* 88 (4), 393-402.
76. Tan, Y. L., & Manan, Z. A. (2006). Retrofit of water networks with optimization of existing regeneration units. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(22), 7592-7602.
77. Tan, Y.L., Manan, Z.A., Foo, D.C.Y. (2007) Retrofit of water network with regeneration using water pinch analysis. *Process Safety and Environmental Protection* 85(4), 305–317.
78. Tokos, H., Pintaric, Z.N., 2009. Synthesis of batch water network for a brewery plant. *Journal of Cleaner Production* 17 (16), 1465-1479.
79. Wang, Y. P., & Smith, R. (1994) Wastewater minimization. *Chemical Engineering Science*, 49(7), 981-1006.
80. Yin LT, Manan ZA (2008) A new systematic technique for retrofit of water network. *International Journal of Environment and Pollution* 32(4), 519–526.

A. PORTADA DE LOS ARTÍCULOS PUBLICADOS DURANTE EL DOCTORADO

4001ACSCA1JCAI00146/W/Unicade1 wwwdx3f3LW05SR054321304jha38 2014/10/10 09:37:00 JCA1101_000001 11/10/1041520271131JCA-DIRASLT



I&EC
research
Institute for Engineering Chemistry Research

Article

pubs.acs.org/IECR

Optimal Synthesis of Property-Based Water Networks Considering Growing Demand Projections

César Sotelo-Pichardo,¹ Hisham S. Bamufleh,² José M. Ponce-Ortega,^{3*} and Mahmoud M. El-Halwag^{2,3}

¹Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58000, México
²Chemical and Materials Engineering Department, King Abdulaziz University, Jeddah 21580, Saudi Arabia
³Chemical Engineering Department, Texas A&M University, College Station, Texas 77843, United States

* Supporting Information

ABSTRACT: This paper presents a mathematical programming model for the optimal synthesis and retrofitting of water networks based on the properties of the streams that impact the processing in the plant and the environment. One important feature of the proposed approach is that it accounts for changes in the operation through a time horizon with growing demands. The optimization formulation considers changes in the demands and accounts for time-based variations in the flow rates required for the process sinks and constraints for properties in the process sinks and in the environment. Furthermore, the proposed model allows the installation of different units and the retrofitting of the water network over the considered time horizon. The objective function minimizes the total cost associated with the entire life of the project while accounting for the time value of money and the specific demands for the process and the environment that change through the life of the project. Two case studies are solved to show the applicability of the proposed approach.

INTRODUCTION

The refining and process industries are characterized by the enormous usage of fresh water and discharge of wastewater. Because of the continued retrofitting projects to increase the capacities of refineries and process industries, usage and discharge of water are growing. With the scarcity of fresh water resources, there is a critical need for effective water conservation strategies. Water recycle approaches are among the most effective water conservation strategies. The substitution of fresh water with recycled process- and wastewater streams may be carried out through direct recycle or following treatment of the recycled streams to meet the requirements of process units (sinks) that use fresh water. These process sinks require that the recycled water streams meet specific constraints on flow rate, concentration of impurities, and properties. Various tools have been proposed for the synthesis of water-recycle networks. Foo¹ has reviewed many of these tools. An interesting problem associated with water networks is the retrofitting of existing networks that were not properly designed or when the process and/or environmental constraints have changed. In this context, Frazer and Hallale² presented a retrofitting approach based on the pinch point technology. Aladala et al.³ presented a methodology based on a set of heuristic rules with the goal of minimizing the total annual cost. Cheng and Hung⁴ developed an mixed-integer nonlinear programming (MINLP) formulation for retrofitting single units of mass exchange considering the use of external agents to facilitate the separation. Tan and Cruz⁵ developed a linear programming model to retrofit a water network with one component. Tan and Manan⁶ presented a systematic methodology to retrofit water networks and introduced regeneration units using a sequential approximation, and Sotelo-Pichardo et al.⁷ proposed a mathematical programming model for the retrofitting of water networks based on the constraints given in terms of limits for the composition of the manipulated streams. This approach was later improved to incorporate property constraints by Sotelo-Pichardo et al.⁸ Bohra et al.⁹ developed a multiperiod synthesis approach for water networks involving multiple industrial processes with seasonal variations. Fata and Hajajewski¹⁰ presented a mathematical programming approach for retrofitting water networks to maximize net present value. A common limitation in these foregoing research efforts is that retrofitting was carried out for a specific current requirement. In many cases, retrofitting is needed over a time horizon to meet future demand increases that are associated with capacity increase projects. A simplistic approach to satisfy the future requirements and increasing demands for water is to oversize the water network to meet the maximum future demand through a single retrofit. A better approach is to develop a time-based strategy for retrofitting that considers the future projections for increase in water demand over multiple periods and the possibility of stage-wise retrofitting over multiple periods while accounting for the existing infrastructure. This is the focus of this paper which is aimed at developing a systematic method for synthesizing and simultaneously retrofitting a multiyear water network that accounts for future projections. The proposed optimization formulation takes into account from the design stage future projections and expansions and the possibility of multiannual retrofitting that avoids an oversized network. The objective function is the minimization of the total cost in the entire horizon time including capital costs for units, pipes, reconfiguration, and expansions and the operating costs. It should be noted that the

Received: August 5, 2014
 Revised: October 24, 2014
 Accepted: November 4, 2014

ACS Publications © 2005 American Chemical Society

Optimal reconfiguration of water networks based on properties

César Sotelo-Pichardo · José María Ponce-Ortega ·
Fabrício Nápoles-Rivera · Medardo Serma-González ·
Mahmoud M. El-Halwagi · Sergio Frausto-Hernández

Received: 12 June 2012 / Accepted: 3 May 2013 / Published online: 18 May 2013
© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2013

Abstract This paper presents a mathematical programming model for the reconfiguration of existing water networks based on the stream properties that impact the performance of the process units and the environment. To develop an improved configuration, the model simultaneously evaluates the repiping of the existing network through the placement/reassignment of the existing treatment units, and the addition of new treatment units while addressing environmental constraints. The model also accounts for the options of process modification and increased capacity of the plant. The objective function of the optimization model seeks to minimize the total annualized cost of the system which incorporates the capital investment associated with process retrofitting and the operating cost which includes the cost of fresh resources.

C. Sotelo-Pichardo · J. M. Ponce-Ortega (✉) ·
F. Nápoles-Rivera · M. Serma-González
Chemical Engineering Department, Universidad Michoacana de
San Nicolás de Hidalgo, 58060 Morelia, Michoacán, México
e-mail: jponceo@umich.mx

M. M. El-Halwagi
Chemical Engineering Department, Texas A&M University,
College Station, TX 77843, USA

M. M. El-Halwagi
Adjunct Faculty at the Chemical and Materials Engineering
Department, King Abdulaziz University, Jeddah, Saudi Arabia

S. Frausto-Hernández
Biochemical and Chemical Engineering Department, Instituto
Tecnológico de Aguascalientes, 20256 Aguascalientes,
Aguascalientes, México

The applicability of the proposed model is illustrated through several case studies.

Keywords Property-based · Retrofit · Reconfiguration ·
Water integration · Recycle and reuse · Optimization ·
Environmental constraints

List of symbols

Indexes

i Process sources
 i_n Inlet
 j Sinks
 \max Maximum
 \min Minimum
 n Sections for the capital cost for the treatment units
 out Outlier condition
 p Properties
 pla Stages
 r Fresh sources
 u Treatment units
 u^* Treatment units existing prior to the retrofit process
 u^{**} New treatment units required after the retrofit process

Sets

$NPROP$ Set for the properties ($p/p = 1, \dots, NPROP$)
 $NFRESH$ Set for the fresh sources ($r/r = 1, \dots, NFRESH$)
 $NPLATES$ Number of stages for the treatment units
($pla/pla = 1, \dots, NPLATES$)
 $NSECTION$ Set for the disjunctions for the capital costs
($nb/nb = 1, \dots, NSECTION$)
 $NSINKS$ Set for the sinks ($j/j = 1, \dots, NSINKS$)
 $NSOURCES$ Set for the process sources ($i/i = 1, \dots,$
 $NSOURCES$)
 $NTREAT$ Set for the treatment units ($u/u = 1, \dots,$
 $NTREAT$)