



ANÁLISIS Y RECONFIGURACIÓN ÓPTIMA DE LÍNEAS DE EFLUENTES A UNA UNIDAD DE TRATAMIENTO MULTICONTAMINANTE

ANALYSIS AND OPTIMAL RETROFIT OF EFFLUENT LINES ENTERING A MULTICONTAMINANT TREATMENT UNIT

R. Hernández-Suárez^{1,*}, J.M. Zamora-Mata², F. Murrieta-Guevara¹ y R. Lugo-Leyte²

¹Programa de Investigación y Desarrollo Tecnológico de Procesos y Reactores, Instituto Mexicano del Petróleo, Cd. de México, 07730 México.

²Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Cd. de México, 09340 México.

Recibido 8 de Octubre 2007; Aceptado 6 de Junio 2008

Resumen

Este trabajo trata sobre el problema de optimización de sistemas multi-contaminantes de efluentes industriales que contienen una unidad de tratamiento. Los altos costos que representan la construcción de nuevas plantas de tratamiento de efluentes cuando se deben cumplir restricciones normativas más severas en las industrias, hace obligatorio la búsqueda de alternativas que sean atractivas para el reuso de los sistemas existentes. Se propone un procedimiento que enfatiza la re-evaluación y reconfiguración de instalaciones de tratamiento de contaminantes existentes, que tiene como base la solución sucesiva de un modelo de programación no lineal (PNL). En el método de programación matemática que se propone, se desarrolla un modelo matemático de programación no lineal y no convexo, que exhibe la presencia de bilinealidades que frecuentemente causan problemas de convergencia a soluciones óptimas globales. Para evitar tales dificultades, en el procedimiento de solución y análisis del problema que se presenta se introduce un modelo de programación lineal, donde se obtienen los menores costos de tratamiento, para ajustarse a tales cambios más estrictos en las regulaciones ambientales. Un problema ilustrativo es presentado para demostrar el método y conducir un análisis sistemático de la región factible de diseño.

Palabras clave: diseño de sistemas de tratamiento multi-contaminante de efluentes, análisis y reconfiguración de líneas de efluentes, optimización no convexa, regulaciones ambientales, región factible de diseño.

Abstract

The investment costs involved in the construction of a new treatment system, and the fact that standards for the discharge of contaminants to the environment may vary during the life of an industrial plant, foster the development of methodologies for the analysis, and development of cost effective retrofit designs for wastewater treatment systems. This paper presents an efficient methodology for the analysis and retrofit of multi-contaminant wastewater treatment systems which involve a single treatment unit. The developed methodology is based on a non linear programming model that captures the topological and operational features of a treatment superstructure, which contains all possible layouts for the treatment system, and incorporates a recycle stream that strengthens the system's contaminant removal capabilities. The developed nonconvex mathematical model is accompanied by a non deterministic, but very reliable solution strategy that conducts a systematical exploration of the search space, in the pursuit for global optimal solutions. A case study that includes both, the analysis, and the retrofit of an existing wastewater treatment system, under current and foreseeable contaminant concentration limits, is utilized to illustrate the proposed methodology.

Keywords: design of wastewater treatment system, analysis and retrofit design, nonconvex optimization, network superstructure, environmental regulations.

1. Introducción

Existe una clara necesidad de detener el avance de los procesos de degradación del entorno, que ha llevado en los últimos años a las instituciones

internacionales y a los países más desarrollados, a resaltar el papel de las relaciones entre el medio ambiente y el desarrollo industrial sustentable. Lo anterior obliga no sólo a la integración del concepto medio ambiental con el diseño de procesos, sino

* Autor para la correspondencia. E-mail: rhuarez@imp.mx.
Tel: (55) 91758206, Fax: (55) 9175 8429

también a la revisión del manejo y tratamiento de corrientes efluentes en los procesos industriales. La demanda del diseño óptimo de sistemas de tratamiento de efluentes obliga a reducir la concentración de los contaminantes tóxicos acuosos hasta límites ambientales permitidos para su descarga municipal, así como para satisfacer concentraciones de contaminantes que permitan la re-utilización de corrientes en operaciones que demandan agua de relativamente baja calidad dentro de un complejo industrial (Organization for Economic Co-operation and Development, OECD, 1999 y 2000; Sharatt, 1999).

El concepto de la prevención de la contaminación y el tratamiento de efluentes es adoptado con seriedad actualmente en las industrias de proceso, principalmente por la repercusión en las cantidades de recursos que requieren ser gastados anualmente por conceptos de adquisición de tecnologías avanzadas y mejores diseños de sistemas de tratamiento de efluentes. La alta demanda de agua fresca requerida en los procesos industriales aunado a la creciente escasez de agua fresca ha fomentado la búsqueda de diseños y soluciones óptimas para el tratamiento de efluentes y la re-utilización intensiva de agua en la industria de manufactura (Young y Cabezas, 1999; Bahy y El-Halwagi, 2000). Sin embargo, las complicaciones asociadas con el diseño sistemático de redes de tratamiento de efluentes han derivado no sólo en estudios e investigaciones con diferentes enfoques, metodologías y diversas herramientas computacionales, sino también en la revisión y actualización de las herramientas o procedimientos disponibles que permitan lograr re-diseños y alternativas atractivas, útiles para adecuar sistemas de tratamiento de efluentes acordes a las necesidades actuales de la prevención de la contaminación y reutilización del agua en la industria (Fig. 1). Por los altos costos que representan la construcción de nuevas plantas, los conceptos de análisis y reconfiguración de sistemas de tratamiento de efluentes emergen de manera importante cuando las condiciones de diseño originales no satisfacen los requerimientos de tratamiento actuales.

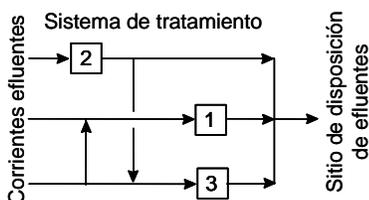


Fig. 1. Esquema de un sistema de tratamiento de efluentes.

Entre los trabajos iniciales reportados en la literatura se pueden citar a Wang y Smith (1994a), que presentaron una metodología conceptual de síntesis de re-uso de agua mediante representaciones gráficas y consideraciones de límites físicos que se identifican como puntos de pliegue, los cuales

resultan de las curvas compuestas que se elaboran, y que relacionan las concentraciones de las especies con la masa a remover de los componentes contaminantes provenientes de las operaciones usuarias de agua.

Wang y Smith (1994b) proponen, por otra parte, una metodología conceptual de síntesis para el tratamiento de efluentes, por un procedimiento gráfico similar al presentado para el problema de re-uso de corrientes efluentes. La elaboración de curvas compuestas en diagramas de concentración y carga máscica por remover de las corrientes efluentes de contaminantes constituyen la base del método de diseño de sistemas de tratamiento de efluentes de Wang y Smith. En los últimos años también se han reportado en la literatura otros procedimientos similares de tipo conceptual para la síntesis de tratamiento de efluentes y el re-uso de agua (Wang y Smith, 1995; Dhole y col., 1996; Olesen y Polley, 1996; Doyle y Smith, 1997; Olesen y Polley, 1997; Hallale y Fraser, 1998; Sorin y Bédard, 1999, Castro y col., 1999; Polley y Polley, 2000; Feng y Seider, 2001). Se puede destacar el trabajo realizado por Kuo y Smith (1997), que implementaron mediante el concepto de degradación de corrientes, un procedimiento gráfico de síntesis de redes conteniendo una unidad de tratamiento de efluentes, en donde se extienden las propuestas de Wang y Smith (1994a, 1994b, 1995). El concepto de pérdidas de exergía fue utilizado en la síntesis de redes de tratamiento de efluentes para evaluar la degradación de las corrientes efluentes, esto es debido al mezclado de corrientes con diferentes calidades y concentraciones de contaminantes (Kuo y Smith, 1997). La red seleccionada deberá exhibir las menores pérdidas de exergía. Sin embargo, se presentan serios problemas en la metodología conceptual de punto de pliegue durante el diseño, principalmente por: (1) El flujo mínimo se calcula con el análisis del enfoque conceptual de punto de pliegue para sistemas idealizados simples, pero es difícil identificar estos flujos mínimos en sistemas que involucran varios contaminantes en el sistema de tratamiento de efluentes; (2) La generación de una curva compuesta y estructura de red conteniendo una o varias unidades de tratamiento pueden resultar tediosos para sistemas multi-contaminante.

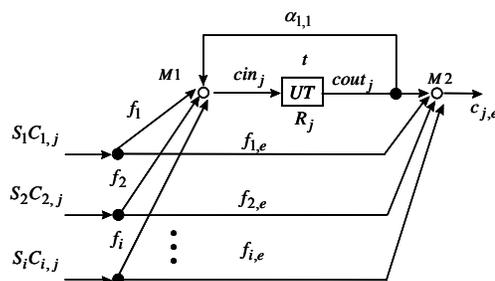


Fig. 2. Superestructura para diseño de un sistema de tratamiento de efluentes.

Por otra parte, la naturaleza no convexa de los modelos matemáticos que describen este tipo de problemas y la capacidad necesaria de manejar diferentes contaminantes en el sistema introducen complejidades en las posibilidades de configuraciones topológicas del sistema. Estas son algunas de las dificultades que se pueden presentar para el diseño de sistemas de tratamiento de efluentes (Takama y col., 1980; Alva-Argáez y col., 1998; Galan y Grossmann, 1998; Zamora y Grossmann, 1998, 1999; Zamora y col., 1999; Huang y col., 1999; Tsai y Chang, 2001; Lee y col. 2003; Wang y col., 2003; Al-Redhwan y col., 2005; Chang y Li, 2006; Li y Chang, 2006; Novak y Kravanja, 2006). El diseño de este tipo de problemas típicamente se lleva a cabo con base en conceptos de superestructura. En la Fig. 2 se muestra una configuración de un sistema con una operación de tratamiento de efluentes, en donde se representa la riqueza de inter-conectividad de líneas con los nodos divisores y mezcladores de corrientes. El problema representado en la Fig. 2 emerge como un problema de naturaleza no lineal no convexa para su solución. La linealización de restricciones no convexas de problemas de diseño factibles puede definir regiones no factibles que a menudo causan falla en técnicas de optimización local estándar. Además, el diseño óptimo de tales sistemas de tratamiento puede no garantizar una solución práctica, robusta y satisfactoria del problema, lo que representa otra dificultad asociada al diseño, misma que no ha sido atendida por la literatura.

En este trabajo se propone una metodología de diseño que permita determinar la mejor estructura y condiciones operacionales de sistemas que contienen una unidad de tratamiento de efluentes, para tomar en cuenta consideraciones operacionales inciertas previendo cambios más estrictos en concentraciones límite de descarga de contaminantes. También en este trabajo se busca explotar el concepto de análisis de la región factible de diseño para determinar la capacidad de tolerancia del sistema de tratamiento y ajustarse a tales cambios. El concepto principal detrás del procedimiento que se propone está basado en la solución sucesiva de un modelo de programación no lineal (Hernández-Suárez y col., 2004). La optimización del modelo de programación matemática propuesto se desarrolla mediante un procedimiento de solución paramétrica en el cual se busca el control sobre la complejidad de un modelo matemático no lineal y no convexo.

El trabajo está organizado de la siguiente manera: Se presentan de manera formal los problemas de evaluación y re-configuración de líneas efluentes en la sección 2, a continuación se propone la representación y el modelo de programación matemática, en la sección 3. Un mecanismo de análisis y la reconfiguración de líneas se presentan en la sección 4, que contiene una metodología de solución mediante una optimización paramétrica para

el análisis de diseños óptimos de tales sistemas de tratamiento. En la sección 5 un ejemplo ilustrativo de una red de tratamiento es presentado, seguido de la aplicación del análisis del espacio de la región factible y re-configuración de la red que se presenta, y finalmente las conclusiones del trabajo que se desarrolla, en la sección 6.

2. Problemas de evaluación y re-configuración de líneas de efluentes

En este trabajo se busca desarrollar una metodología que permita, bajo la consideración de normas ambientales en uso para la descarga de efluentes, evaluar la idoneidad de la operación y el diseño topológico actual que envuelve a una unidad de tratamiento multi-contaminante de efluentes. Se busca también que la metodología a desarrollar sea útil para la obtención de una posible re-configuración que modernice el trazado de las líneas de corrientes efluentes alrededor de la unidad de tratamiento, de tal manera que se satisfagan con el menor costo de operación, regulaciones de descarga de efluentes más estrictas que las que fueron originalmente utilizadas en la elaboración del diseño que se asume en operación. Los dos problemas que se asocian a este trabajo se definen a continuación de manera formal.

Se tiene en operación un sistema de tratamiento multi-contaminante para un conjunto de corrientes efluentes S_i , $i \in I$. Los costos del tratamiento son directamente proporcionales al flujo total de efluentes t , que es procesado en una unidad de tratamiento cuya capacidad máxima es t^U . Los contaminantes j , $j \in J$ contenidos en las corrientes efluentes se admiten al sistema con concentraciones $C_{i,j}$, $i \in I$, $j \in J$. La operación de tratamiento está caracterizada por relaciones de remoción constantes R_j , $j \in J$, que representan para cada contaminante en la unidad de tratamiento, el cociente de la diferencia entre concentraciones de entrada y salida, sobre la concentración de entrada. Las líneas de efluentes en el diseño del sistema de tratamiento, han sido trazadas para reducir las concentraciones globales de contaminantes en la descarga final a niveles por debajo de concentraciones límite ambiental vigentes $c_{j,eo}^U$, con $j \in J$. Con relación al sistema descrito, se deben atender fundamentalmente dos problemas. El primer problema define la tarea de determinar si, bajo el ambiente normativo ambiental actual, la operación se da con un costo mínimo, o si existe un diseño alternativo que permita realizar las tareas de tratamiento de una manera más económica. El segundo problema define la tarea de desarrollar una re-configuración de las líneas de efluentes alrededor de la unidad de tratamiento para actualizar el sistema, previendo la satisfacción futura de un conjunto más demandante de concentraciones límite ambiental $c_{j,en}^U$, con $j \in J$, con un costo de operación mínimo.

3. Representación y modelo de programación matemática

Para realizar las tareas de análisis y re-configuración de líneas de efluentes descritas, se propone la representación generalizada mostrada en la Fig. 2. En dicha figura se incluyen todos los posibles trazados de líneas de efluentes alrededor de la unidad de tratamiento. Con la representación propuesta, es conceptualmente posible tratar cualquiera de las corrientes efluentes de manera total o parcial. También es posible desviar fracciones de las corrientes efluentes sin tratar hacia el punto final de descarga, o recircular parte del efluente tratado para acondicionar la alimentación a la unidad de tratamiento y abrir la posibilidad para expandir las capacidades del sistema, logrando concentraciones de descarga de contaminantes por debajo de las que pueden ser alcanzadas con un sistema sin recirculación. Para el análisis y la re-configuración de líneas de efluentes, se propone el siguiente modelo de programación matemática.

Modelo RLE

Índices

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

Conjuntos

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

Parámetros

- $C_{i,j}$ = concentración de contaminante en una corriente efluente (ppm)
- $c_{j,e}^U$ = concentración máxima de contaminante permitida en el punto de descarga (ppm)
- CC = coeficiente de costo de capital
- CO = coeficiente de costo de operación
- R_j = relación de remoción de contaminante
- S_i = flujo de la corriente efluente (t/h)
- F_e = flujo total de efluentes $F_e = \sum_{i \in I} S_i$ (t/h)
- m_j^U = flujo total de contaminante en la entrada del sistema de tratamiento (Kg/h)
- $10^3 m_j^U = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j}$
- Δm_j^L = flujo másico mínimo de contaminante a remover en la unidad de tratamiento (Kg/h)
- $10^3 \Delta m_j^L = \sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - \sum_{i \in I} S_i c_{j,e}^U \quad j \in J$

Variables continuas positivas

- cin_j = concentración de contaminante en la entrada de la unidad de tratamiento (ppm)

- c_{out_j} = concentración de contaminante en la salida de la unidad de tratamiento (ppm)
- $c_{j,e}$ = concentración del contaminante en el punto de descarga (ppm)
- f_{ie} = flujo de efluente desviado al punto de descarga (t/h)
- f_i = flujo de efluente enviado a la unidad de tratamiento (t/h)
- t = flujo a través de una unidad de tratamiento (t/h)
- $t_{1,1}$ = flujo de reciclo de la unidad de tratamiento (t/h)
- $t_{1,e}$ = flujo de efluente tratado enviado al punto de descarga (t/h)
- $\alpha_{1,1}$ = fracción del flujo tratado que es reciclado en la unidad de tratamiento
- $\alpha_{1,e}$ = fracción del flujo tratado que es enviado al punto de descarga (t/h)

Función objetivo

$$\text{Minimizar } (CO)t \quad (1)$$

Restricciones

Balance de agua en los divisores iniciales de la representación generalizada.

$$f_i + f_{i,e} = S_i \quad i \in I \quad (2)$$

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

$$\sum_{i \in I} f_i + \alpha_{1,1} t = t \quad (3)$$

Balance de conservación de agua en el divisor posterior a la unidad de tratamiento.

$$\alpha_{1,1} + \alpha_{1,e} = 1 \quad (4)$$

Balance de agua en el mezclador final de la representación generalizada.

$$\sum_{i \in I} f_{i,e} + \alpha_{1,e} t = F_e \quad (5)$$

Balances para modelar el flujo y la remoción de contaminantes en la unidad de tratamiento

$$\sum_{i \in I} f_i C_{i,j} = [1 - \alpha_{1,1}(1 - R_j)] \frac{10^3 \Delta m_j}{R_j} \quad j \in J \quad (6)$$

Balance global para los contaminantes en el sistema de tratamiento.

$$\sum_{i \in I} S_i C_{i,j} - 10^3 \Delta m_j = F_e c_{j,e} \quad j \in J \quad (7)$$

Cotas

$$0 \leq f_i, f_{i,e} \leq S_i \quad i \in I \quad (8)$$

$$0 \leq c_{j,e} \leq c_{j,e}^U \quad j \in J \quad (9)$$

$$0 \leq \Delta m_j^L \leq \Delta m_j \leq m_j^U \quad j \in J \quad (10)$$

$$0 \leq t^L \leq t \leq t^U \quad (11)$$

Comentarios

1. El costo de operación del sistema se establece de manera proporcional al flujo de efluentes que es procesado por la unidad de tratamiento. El problema de optimización tiene entonces como objetivo, el minimizar dicho costo, tal como se indica en la Ec. (1).
2. En el modelo RLE, la conservación de agua en el divisor posterior a la unidad de tratamiento se expresa en la Ec. (4), en función de las variables fraccionales $\alpha_{1,1}$ y $\alpha_{1,e}$. Estas tienen un significado físico muy particular, siendo $\alpha_{1,1}$ la fracción del flujo tratado que se recircula en la unidad de tratamiento y $\alpha_{1,e}$ la fracción del flujo tratado que se envía al punto final de descarga.
3. Un caso límite para los valores de $\alpha_{1,1}$ se presenta en la remoción de contaminantes en la unidad de tratamiento cuando $\alpha_{1,1} = 0$. En este caso, el modelo RLE se reduce a un modelo de programación lineal, representando sistemas de tratamiento sin recirculación (ver Zamora y col., 2004). El otro caso límite se presenta cuando $\alpha_{1,1} = 1$, para una recirculación y acumulación total de efluentes, dicho caso es, por supuesto, impráctico y operacionalmente inviable.

Los costos del tratamiento de efluentes cuando se considera una reconfiguración de un sistema de tratamiento multi-contaminante, dependen principalmente de los estándares de descarga de los contaminantes. Estos estándares son el resultado de regulaciones basadas en la calidad del agua tratada con base en límites basados en toxicidad para reducir el impacto ambiental negativo. Dentro de los contaminantes típicos regulados de descarga en una refinería de petróleo se pueden mencionar la demanda biológica de oxígeno (DBO5), sólidos suspendidos totales (SST), Demanda química de oxígeno (DQO), aceite y grasa, fenoles, amonio como N, sulfuros, cromo total, cromo hexavalente, cianuro libre, pH, etc.

Para satisfacer los requerimientos de calidad del agua de descarga industrial se requiere del uso de la mejor tecnología disponible y que sea económicamente atractiva, en lo posible. El entendimiento, evaluación, selección y aplicación de una tecnología determinada para el reuso de agua o descarga municipal es un proceso complejo que considera diferentes aspectos como costos de capital y ciclo de vida del sistema de tratamiento, facilidad de operación, subproductos deseables o indeseables, etc. De las tecnologías disponibles utilizadas, dependiendo de la aplicabilidad para reuso de agua, fuente de contaminantes y tratamiento, se pueden mencionar: (a) Bio-oxidación y biotratamiento (anaeróbico, aeróbico, nitrificación, etc.), (b) Tratamiento con carbón (adsorción), (c) Separación centrífuga, (d) oxidación química (ozono, aire húmedo, peróxido, etc.), (e) Cristalización (f),

electrodiálisis, (g) evaporación (destilación, mecánica), (h) Filtración (cama granular, operación a vacío, etc.), (i) flotación, (j) asentamiento (coagulación, floculación, clarificación), (k) Separación con membranas (ósmosis inversa, ultrafiltración), (l) Tratamiento térmico (secado, incineración, etc.), (m) etc. El modelado matemático detallado de las tecnologías de tratamiento mencionadas constituye en si mismo un trabajo de investigación que debe desarrollarse para la solución de problemas particulares en los que exista un interés muy específico. Este tipo de tarea va más allá del alcance que se ha planteado para el trabajo que se desarrolla en este artículo, y en donde, por el momento se maneja la remoción de contaminantes a través de modelos simplificados, con base en una tasa de remoción establecida para cada contaminante involucrado.

4. Metodología

El modelo RLE es un modelo no convexo de programación no lineal que incluye bilinealidades de la forma $\alpha_{1,1}t$, $\alpha_{1,e}t$, $\alpha_{1,1}\Delta m_j$, en (3), (5) y (6), respectivamente. La solución de dicho modelo puede realizarse con varios de los algoritmos de optimización local que se disponen programados de manera comercial o en la literatura abierta, con el consecuente riesgo de no alcanzar una solución óptima global (ver, por ejemplo, Zamora y Grossmann, 1998). También es posible resolver el modelo RLE a optimalidad global, utilizando alguno de los algoritmos deterministas desarrollados en la literatura para la optimización global de modelos matemáticos que incluyen bilinealidades (Quesada y Grossmann, 1995; Androulakis y col. 1995; Ryoo y Sahinidis, 1996; Zamora y Grossmann, 1999). Para la optimización global del modelo RLE, aquí se propone una metodología multi-arranque que aprovecha la estructura matemática particular de dicho modelo, explorando de manera sistemática todo su espacio de solución. Para el desarrollo de dicha metodología se hace notar primero que todas las bilinealidades presentes en el modelo RLE pueden reducirse a términos lineales al asignar a la variable fracción de flujo $\alpha_{1,1}$ un valor fijo. En otras palabras, al fijar $\alpha_{1,1}$ en un cierto valor, la variable fracción de flujo $\alpha_{1,e}$ queda también con un valor fijo, el cual se determina a partir de (4), y el modelo RLE se reduce al modelo de programación lineal, RLE($\alpha_{1,1}$). De esta manera, es posible explorar de forma bastante cuidadosa el espacio de solución del modelo RLE, utilizando un enfoque en el que de manera iterativa y sistemática se hace un barrido sobre $\alpha_{1,1}$ y se resuelve el modelo RLE($\alpha_{1,1}$), generando con ello un buen punto de inicialización para la subsecuente solución del modelo RLE, en el que las variables fraccionales de flujo pueden moverse libremente buscando minimizar los costos totales del tratamiento. Siendo $\alpha_{1,1}$ una variable

fraccional de flujo, sus valores posibles quedan determinados entre cero y uno. Así, se puede iniciar la búsqueda de una solución óptima global asignando a $\alpha_{1,1}$ el valor de cero, dándole en iteraciones subsecuentes un valor mayor, digamos, $\alpha_{1,1} + \Delta\alpha_{1,1}$, en donde $\Delta\alpha_{1,1}$ define un tamaño de paso para el barrido que determina que tan exhaustivamente debe explorarse la región de búsqueda (Fig. 3). El procedimiento de solución se describe con más precisión a continuación.

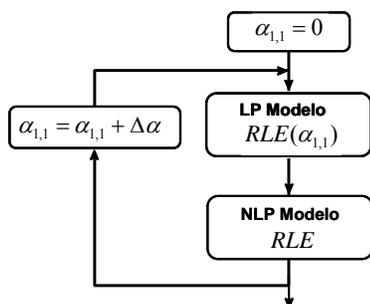


Fig. 3. Algoritmo de solución del modelo RLE.

4.1. Metodología para la Solución del Modelo RLE

1. Inicialice el valor óptimo para el flujo a tratamiento como $t^* = \infty$. Asigne el valor $\alpha_{1,1} = 0$ para la fracción de flujo a recirculación (Fig. 3). Seleccione un valor para el tamaño de paso del barrido $\Delta\alpha_{1,1}$. Establezca un valor máximo práctico y aceptable para $\alpha_{1,1}$, a través del parámetro $\alpha_{1,1}^U$.
2. Genere y resuelva el modelo $RLE(\alpha_{1,1})$.
3. Resuelva el modelo RLE a partir de la solución obtenida en el paso anterior. Si la solución obtenida es factible, con flujo a tratamiento $t < t^*$, entonces actualice $t^* = t$ y almacene la solución obtenida en el vector de solución x^* .
4. Si $\alpha_{1,1} < \alpha_{1,1}^U$, entonces haga $\alpha_{1,1} = \alpha_{1,1} + \Delta\alpha_{1,1}$ y vuelva al paso 2.

Si $\alpha_{1,1} \geq \alpha_{1,1}^U$, entonces pare. Si $t^* = \infty$, entonces no se logró encontrar una solución factible. En caso contrario, se tiene como solución para el problema de análisis o reconfiguración a x^* , con un flujo óptimo a tratamiento igual a t^* . Los modelos de optimización $RLE(\alpha_{1,1})$ y RLE son formulaciones lineal y no lineal, que para resolverlos se ha utilizado OSL y CONOPT3, respectivamente (GAMS, Brooke y col., 1998). Se tiene que hacer la observación que en la propuesta iterativa del algoritmo de solución que se muestra en la Fig. 3, el número de problemas LP y NLP que se tienen que resolver, dependen de manera importante del tamaño de paso de la variable fraccional $\Delta\alpha$. Así, el parámetro $\Delta\alpha$ va ligado a la intensidad y detalle con que se explora la región factible en el procedimiento de búsqueda desarrollado. En otras palabras, la exploración sistemática del espacio de solución mediante el

procedimiento multi-arranque demanda la solución de un mayor número de problemas a medida que se reduce el valor de $\Delta\alpha$, intensificando la búsqueda heurística de diseños óptimos globales.

La metodología que se presenta es aplicable a cualquier número de corrientes i , $i \in I$ y contaminantes j , $j \in J$ para el análisis y reconfiguración óptima de líneas de efluentes para una unidad de tratamiento. Para utilizar la metodología propuesta en sistemas de tratamiento que incluyeran dos o más unidades de tratamiento, podría definirse un conjunto de secuencias derivadas de un enfoque de descomposición de superestructura compleja en subredes de menor complejidad, en las cuales una solución secuencial para los modelos de PL y PNL en dos fases pueda conducir una búsqueda sistemática en el espacio de solución, que procede de la enumeración de las unidades de tratamiento. Por ejemplo, cuando existen dos unidades de tratamiento se tienen dos secuencias de superestructuras básicas con arreglo 1-2 y 2-1, del tipo desarrollado por Hernández-Suárez y col., 2004. El número de secuencias en el procedimiento de descomposición se ve reflejado en un aumento de recursos computacionales requeridos por la complejidad combinatorial del sistema multitratamiento para la optimización de superestructuras básicas; cuando se considera un valor de $\Delta\alpha = 1$ son 2 el número de problemas que se resuelven para cuando se tiene dos unidades de tratamiento. Sin embargo, cuando son considerados otros valores para $\Delta\alpha$, por ejemplo $\Delta\alpha = 0.5$, $\Delta\alpha = 0.25$, o $\Delta\alpha = 0.1$ el número de problemas que se tienen que resolver son 3, 5 y 11, respectivamente.

5. Problema ilustrativo

Considere el sistema base de tratamiento que se presenta en la Fig. 4, mismo que realiza el tratamiento de siete corrientes efluentes con cinco contaminantes, con los flujos y concentraciones de contaminantes que se indican en la Tabla 1. La unidad de tratamiento tiene una capacidad máxima de 180 t/h, con las relaciones de remoción mostradas en la Tabla 2. Se asume que el diseño mostrado en la Fig. 4 fue desarrollado con anterioridad para reducir las concentraciones de contaminantes en la descarga final por debajo de las concentraciones límite ambiental indicadas en la Tabla 3. Es fácil verificar que dicho diseño opera dentro de las normas establecidas procesando 166.6 t/h de efluentes, y descargando una corriente efluente final de 209 t/h con concentraciones de 1000, 500, 137.7, 386.4 y 600 ppm, para los contaminantes A, B, C, D y E, respectivamente. En este contexto, se plantean las siguientes dos tareas. En primer lugar, se debe analizar y evaluar la idoneidad del diseño y la operación del sistema base de tratamiento bajo la normativa ambiental actual. Como segunda tarea, debe plantearse una reconfiguración óptima del

Tabla 1. Datos de las corrientes efluentes del problema ilustrativo.

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

sistema base de tratamiento, con el objetivo de hacer frente en el futuro al conjunto de concentraciones ambientales límite que se presenta en la Tabla 4, en donde se anticipan ajustes de 1000 a 850 ppm para la concentración límite del contaminante A, de 500 a 420 ppm para la concentración límite del contaminante B, y de 600 a 575 ppm para la concentración del contaminante E.

Tabla 2. Relaciones de remoción (%) de la unidad de tratamiento.

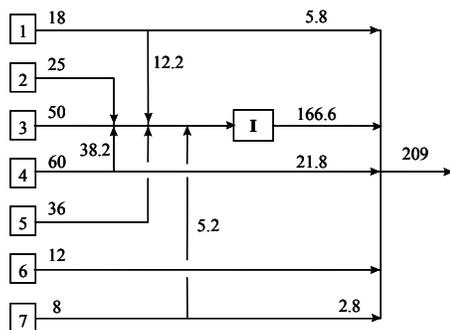
Proceso de tratamiento	Contaminante				
	A	B	C	D	E
UT	99	70	80	60	55

Tabla 3. Concentraciones límite ambiental utilizadas en el desarrollo del sistema base de tratamiento.

Contaminante	Límite ambiental (ppm)
A	1000
B	500
C	150
D	400
E	600

Tabla 4. Concentraciones límite ambiental para la reconfiguración del sistema de tratamiento.

Contaminante	Límite ambiental (ppm)
A	850
B	420
C	150
D	400
E	575



Flujo mínimo a tratar = 166.7 t/h

Fig. 4. Sistema base de tratamiento del problema ilustrativo.

5.1. Análisis y evaluación del sistema base de tratamiento bajo la normativa ambiental actual

Los modelos $RLE(\alpha_{1,1})$, RLE y la metodología de búsqueda propuesta son utilizados para desarrollar la curva de resultados que se incluye en la Fig. 5; cada punto sobre la curva corresponde a un diseño óptimo del sistema de tratamiento bajo la normativa ambiental actual. Dicho de otra manera, la curva en dicha figura liga la fracción de flujo a recircular en sistemas de tratamiento con el flujo mínimo a tratamiento que se requiere para satisfacer la norma ambiental de descarga de efluentes. El punto sobre la curva asociado a $\alpha_{1,1} = 0$ corresponde al diseño del sistema base de tratamiento, mostrado en la Fig. 4, con un flujo tratado de 166.6 t/h. Los resultados indican con claridad que el diseño base no constituye la mejor opción de tratamiento bajo la normativa ambiental actual. De hecho, la curva en la Fig. 5 muestra que existen diseños que pueden operar con menores costos, siendo el mejor diseño aquel que requiere un tratamiento de 161.88 t/h.

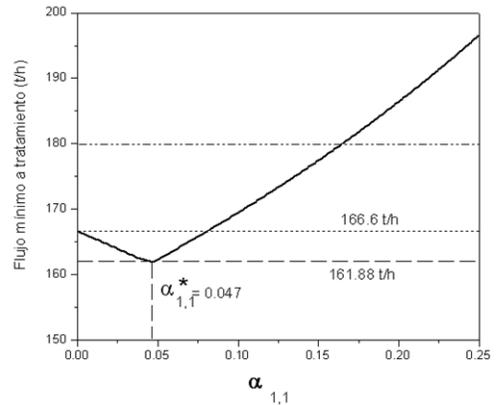
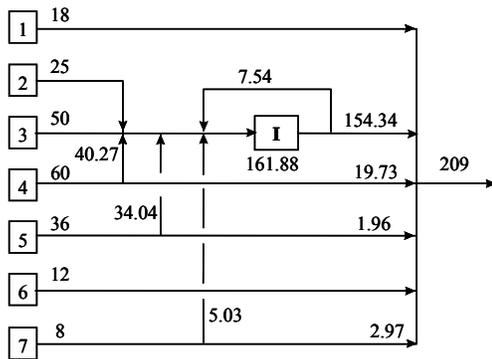


Fig. 5. Curva de flujo mínimo como función de la fracción de flujo a recircular.

De esta manera, este estudio revela que aún bajo el ambiente normativo actual, sería posible reducir los costos de operación en un 2.83%, reconfigurando el sistema de tratamiento de acuerdo al diseño mostrado en la Fig. 6, con una reducción en el tratamiento de 166.6 a 161.88 t/h. En la reconfiguración propuesta se descargarían los contaminantes A, B, C, D y E en la corriente efluente final con niveles de 1000, 500,

150, 386.17 y 600 ppm, respectivamente. En la reconfiguración planteada, el sistema de tratamiento requeriría la adecuación de la línea de reciclo, una línea de desvío para la corriente efluente número 5, y una línea para incrementar la capacidad del flujo de desvío de la corriente número 1, ver el comparativo incluido en las Tablas 5 y 6. Finalmente, lo que este estudio muestra es que técnicamente es viable reducir los costos de operación del sistema de tratamiento bajo la normativa ambiental actual. La conveniencia de llevar a cabo o no la posible reconfiguración depende de varios otros factores, entre los que se encuentran, por supuesto, los costos de capital involucrados y el tiempo de retorno de la inversión.



Flujo mínimo a tratar = 161.88 t/h

Fig. 6. Reconfiguración del sistema base de tratamiento.

5.2. Reconfiguración del sistema de tratamiento por cambio de normativa ambiental

Reconfigurar el sistema de tratamiento para cumplir con nuevas normas de descarga ambiental puede constituir un reto de diseño importante que involucra varios elementos en la toma de decisiones. Antes de plantear una posible reconfiguración, resulta interesante analizar si con el trazado actual de líneas de efluentes, y tomando en cuenta la capacidad máxima de la unidad de tratamiento, es posible alcanzar una operación factible que satisfaga los nuevos valores de las concentraciones límite ambiental. Para el problema de estudio, sin embargo, puede verificarse que no es posible alcanzar factibilidad bajo el trazado original de líneas del sistema base de tratamiento. Es decir, aunque se tratara totalmente a las corrientes efluentes 1, 2, 3, 4, 5 y 7, no sería posible satisfacer la nueva norma ambiental. El tendido de una nueva línea para incorporar totalmente a la corriente efluente número 6 al tratamiento sería también insuficiente, esto aún suponiendo que la unidad de tratamiento pudiera procesar las 209 t/h que constituyen el total del flujo de las corrientes efluentes del problema. Por ende, si se descarta por el momento la posible incorporación de una segunda unidad de tratamiento, se puede anticipar que la recirculación en la unidad de tratamiento disponible se torna imprescindible en el intento de determinar una solución viable que satisfaga la normativa ambiental propuesta.

Tabla 5. Comparación de flujos a tratamiento en el sistema base y en el mejor diseño.

número de corriente	flujo (t/h)	Flujo a tratamiento en sistema	
		base (t/h)	diseño (t/h)
1	18	12.20	0.00
2	25	25.00	25.00
3	50	50.00	50.00
4	60	38.20	40.27
5	36	36.00	34.04
6	12	0.00	0.00
7	8	5.20	5.03
Reciclo		0.00	7.54
Total		166.60	161.88

Tabla 6. Comparación de flujos a descarga en el sistema base y en el mejor diseño.

número de corriente	flujo (t/h)	Flujo a descarga en sistema	
		base (t/h)	diseño (t/h)
1	18	5.80	18.00
2	25	0.00	0.00
3	50	0.00	0.00
4	60	21.80	19.73
5	36	0.00	1.96
6	12	12.00	12.00
7	8	2.80	2.97
Total		42.40	54.66

El estudio para desarrollar una reconfiguración óptima del sistema de tratamiento que satisfaga las concentraciones límite ambiental especificadas en la Tabla 4 produce los resultados mostrados en la Fig. 7. Claramente, la normatividad ambiental más estricta produciría un aumento en los costos de tratamiento, requiriendo un flujo mínimo a tratamiento de 178.85 t/h, justo por debajo de la capacidad máxima de 180 t/h, y representando un aumento del 7.35% con relación a los costos de operación del sistema base de tratamiento. En la reconfiguración, mostrada en la Fig. 8, la unidad de tratamiento operaría reciclando 23.15 t/h, con una fracción de recirculación $\alpha_{1,1} = 0.129$. Los contaminantes A, B, C, D y E se descargarían al medio ambiente con concentraciones de 850, 420, 150, 367.33 y 575 ppm, respectivamente. Un comparativo de las distribuciones de flujo entre el sistema base y la propuesta incluida en la Fig. 8 se presenta en las Tablas 7 y 8. Las diferencias más significativas entre ambos diseños incluyen el flujo del reciclo, mismo que da flexibilidad al sistema y constituye en este caso el factor clave para alcanzar factibilidad, una línea para incrementar la capacidad del flujo del desvío de la corriente número 1 y una nueva línea de desvío para la corriente efluente número 5. Así, con costos de operación incrementados y ajustes no tan severos en el trazado de las líneas de efluentes en el sistema base de tratamiento, sería técnicamente posible reconfigurar

el sistema base de tratamiento de que se dispone para ceñirse a la normatividad ambiental futura sobre descarga de efluentes. Dado que de esta manera la unidad de tratamiento sería llevada a operar prácticamente en el límite de su capacidad, cualquier reducción adicional en los valores de las concentraciones límite plantearía probablemente la necesidad de incluir una segunda unidad de tratamiento.

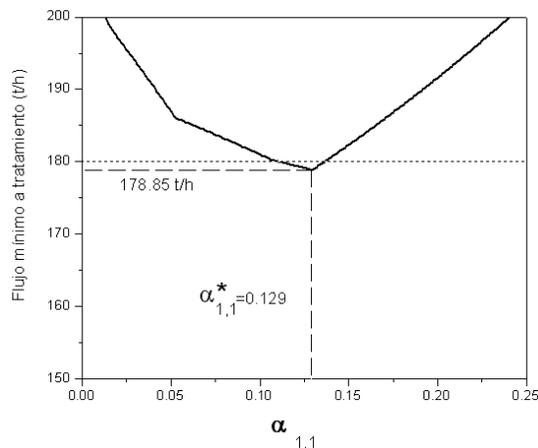


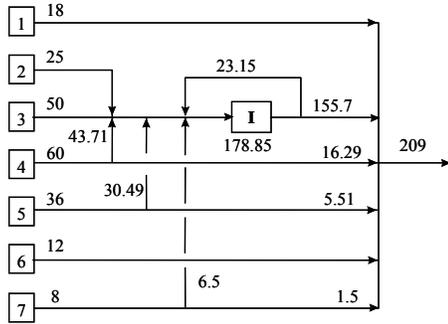
Fig. 7. Curva de flujo mínimo para la reconfiguración del sistema de tratamiento.

Tabla 7. Comparación de flujos a tratamiento en el sistema base y en la reconfiguración del sistema.

número de corriente	Flujo a tratamiento en sistema		Flujo a tratamiento en la reconfiguración (t/h)
	flujo (t/h)	base (t/h)	
1	18	12.20	0.00
2	25	25.00	25.00
3	50	50.00	50.00
4	60	38.20	43.71
5	36	36.00	30.49
6	12	0.00	0.00
7	8	5.20	6.50
Reciclo		0.00	23.15
Total		166.60	178.85

Tabla 8. Comparación de flujos a descarga en el sistema base y en la reconfiguración del sistema.

número de corriente	Flujo a descarga en sistema		Flujo a descarga en la reconfiguración (t/h)
	flujo (t/h)	base (t/h)	
1	18	5.80	18.00
2	25	0.00	0.00
3	50	0.00	0.00
4	60	21.80	16.29
5	36	0.00	5.51
6	12	12.00	12.00
7	8	2.80	1.50
Total		42.40	53.30



Flujo mínimo a tratar = 178.85 t/h

Fig. 8. Diseño óptimo que satisface la nueva normatividad ambiental.

Por otra parte, resulta también interesante investigar qué contaminante o contaminantes determinan de manera más significativa el incremento en los costos de operación. La Fig. 9 presenta un análisis de sensibilidad realizado variando la concentración límite de cada uno de los contaminantes del problema a la vez, a partir de las concentraciones límite especificadas en el caso base de la Tabla 3.

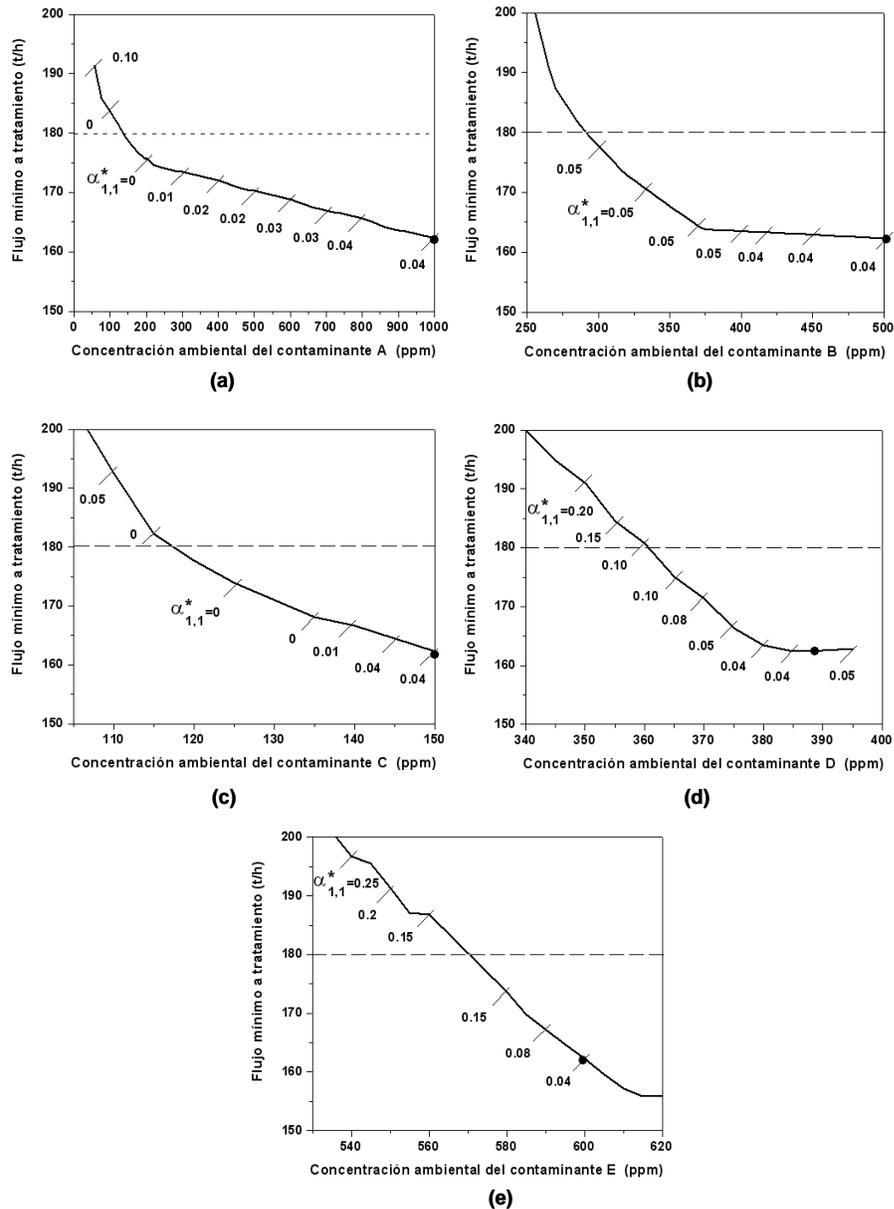


Fig. 9. Análisis de sensibilidad sobre la concentración límite ambiental de las especies.

De dicho estudio puede constatarse que las reducciones planteadas en la Tabla 4, para las concentraciones límite ambiental de los contaminantes A y B no producen por si mismas aumentos significativos en el volumen de efluentes requerido para tratamiento. No se tiene la misma situación para el caso del contaminante E, cuya curva de sensibilidad indica claramente que dicho contaminante es el responsable directo del incremento del flujo mínimo a tratamiento, llevando a la unidad de tratamiento casi hasta su máxima capacidad. Adicionalmente, la Fig. 9 muestra que, con ciertos ajustes topológicos y operacionales, también sería posible manejar reducciones moderadas en las concentraciones límite de los contaminantes C y D.

Conclusiones

Se ha presentado un procedimiento para la optimización de sistemas multi-contaminantes de efluentes industriales que contienen una unidad de tratamiento, que permite lograr re-diseños y alternativas atractivas del sistema acordes a las necesidades de regulaciones ambientales más severas o reutilización de agua en la industria. Un análisis exhaustivo y sistemático de la región factible de diseño constituye la base del procedimiento de re-valoración y reconfiguración del problema que se presenta. La idea básica del procedimiento es resolver un modelo de programación lineal derivado del modelo no convexo original y usar esta solución como punto de arranque del problema no lineal. La optimización del modelo propuesto produce una red de tratamiento de efluentes flexible que puede ser capaz de ajustarse a tales cambios en regulaciones ambientales más demandantes o bien marcar las pautas para la reconfiguración de un sistema para el tratamiento actual de efluentes, donde son obtenidos los menores costos del sistema de tratamiento. Un análisis detallado se ha aplicado a un problema de re-diseño para demostrar el método propuesto.

Referencias

Alva-Argáez, A., Kokossis, A., Smith, R. (1998). Wastewater Minimization of Industrial Systems Using an Integrated Approach. *Computers and Chemical Engineering* 22, S741-744.

Al-Redhwan, S.A., Crittenden, B. D., Labadidi, H. M. S. (2005). Wastewater Minimization under Uncertain Operational Conditions. *Computers and Chemical Engineering* 29, 1009-1021.

Androulakis, I. P., Maranas, C.D., Floudas, C. A. (1995). αBB : A Global Optimization Method of General Constrained Nonconvex Problems. *Journal of Global Optimization* 7, 337-363.

Bahy, M. N., El-Halwagi, M. M. (2000). Pollution Prevention Targets through Integrated Design and Operation. *Computers and Chemical Engineering* 24, 1445-1453.

Brooke, A., Kendrick, D., Meeraus, A., Raman, R. (1998). *GAMS: A User's Guide, release 2.50*. GAMS Development Corporation.

Castro, P., Fernandes, M. C., Nunes P. C. (1999). Improvements for Mass Exchange Networks Design. *Chemical Engineering Science* 54, 1649-1665.

Chang, C. T., Li, B. H. (2006). Optimal Design of Wastewater Equalization Systems in Batch Processes. *Computers and Chemical Engineering* 30, 797-806.

Dhole, V. R., Ramchandani, N., Tainsh, R. A. Wasilewski, M. (1996). Make Your Process Water Pay for Itself. *Chemical Engineering* 103, 100-103.

Doyle, S. J., Smith, R. (1997). Targeting Water Reuse with Multiple Contaminants. *Chemical Engineering Research and Design: Transactions of the Institution of Chemical Engineers B*. 75, 181-189.

Feng, X., Seider W. D. (2001). New Structure and Design Methodology for Water Networks. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 40, 6140-6146.

Galan, B., Grossmann, I. E. (1998). Optimal Design of Distributed Wastewater Treatment Networks. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 37, 4036-4048.

Hallale, N., Fraser, D. M. (1998). Capital Cost Targets for Mass Exchange Networks. A Special Case: Water Minimization. *Chemical Engineering Science* 53, 293-313.

Hernández-Suárez R, Castellanos-Fernández 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, 2175-2191.

Huang, Ch., Chang, Ch., Ling, H. (1999). A Mathematical Programming Model for Water Usage and Treatment Network Design. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 38, 2666-2679.

Li, B. H., Chang, C. T. (2006). A Mathematical Programming Model for Discontinuous Water-Reuse System Design. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 45, 5027-5036.

Kuo, W. C. J., Smith, R. (1997). Effluent Treatment System Design. *Chemical Engineering Science* 52, 4273-4290.

Lee, S., Grossmann, I. E. Global. (2003). Optimization of Nonlinear Generalized Disjunctive Programming with Bilinear Equality Constraints: Applications to Process

- Networks. *Computers and Chemical Engineering* 27, 1557-1575.
- Novak P. Z., Kravanja Z. (2006). Selection of the Economic Objective Function for the Optimization of Process Flow Sheets. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 45, 4222-4232.
- OECD, Organization for Economic Co-operation and Development. Codes of Corporate Conduct – (1999). An Expanded Review of Their Contents, TD/TC/.
- OECD, Organization for Economic Co-operation and Development. The OECD Guidelines for Multinational Enterprises - (2000) Revision. OECD, Paris. Presentation at the OECD Business and Industry Policy Forum on Environmental Management: Challenges for Industry.
- Olesen, S. G., Polley, G. T. (1996). Dealing with Plant Geography and Piping Constraints in Water Network Design. *Process Safety and Environment Protection* 74, 273-276.
- Olesen, S. G., Polley, G. T. (1997). A Simple Methodology for the Design of Water Networks Handling Single Contaminants. *Chemical Engineering Research and Design: Transactions of the Institution of Chemical Engineers A* 75, 420-426.
- Polley, G. T., Polley, H. L. Design Better Water Networks. (2000). *Chemical Engineering Progress* 96, 47-52.
- Quesada, I., Grossmann, I. E. (1995). Global Optimization of Bilinear Process Networks with Multicomponent Flows. *Computers and Chemical Engineering* 12, 1219-1242.
- Ryoo, H. S., Sahinidis, N.V. (1996). A Branch-and-Reduced Approach to Global Optimization. *Journal of Global Optimization* 8, 107-138.
- Sharatt, P. (1999). Environmental Criteria Design. *Computers and Chemical Engineering* 23, 1469-1475.
- Sorin, M., Bédard, S. (1999). The Global Pinch Point in Water Reuse Networks. *Chemical Engineering Research and Design: Transactions of the Institution of Chemical Engineers B* 77, 305-308.
- Takama, N., Kuriyama, T., Shiroko, K., Umeda, T. (1980). Optimal Water Allocation in a Petroleum Refinery. *Computers and Chemical Engineering* 4, 251-258.
- Tsai, M., Chang, Ch. (2001). Water Usage and Treatment Network Design Using Genetic Algorithms. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 40, 4874-4888.
- Wang, Y. P., Smith, R. (1994a). Wastewater Minimization. *Chemical Engineering Science* 49, 981-1000.
- Wang, Y. P., Smith, R. (1994b). Design of Distributed Effluent Treatment Systems. *Chemical Engineering Science* 49, 3127-3145.
- Wang, Y. P., Smith, R. (1995). Wastewater Minimization with Flowrate Constraints. *Chemical Engineering Research and Design: Transactions of the Institution of Chemical Engineers A* 73, 889-904.
- Wang, B. Feng, X. Zhang, Z. (2003). A Design Methodology for Multiple-Contaminant Water Networks with Single Internal Water Main. *Computers and Chemical Engineering* 27, 903-911.
- Young, D. M., Cabezas, H. (1999). Designing Sustainable Processes with Simulation: Waste Reduction (WAR) Algorithm. *Computers and Chemical Engineering* 23, 1477-1491.
- Zamora, J. M., Grossmann, I. E. (1998). Continuous Global Optimization of Structured Process System Models. *Computers and Chemical Engineering* 22, 1749-1790.
- Zamora, J. M., Grossmann, I. E. (1999). A Branch and Contract Algorithm for Problems with Concave Univariate, Bilinear and Linear Fractional Terms. *Journal of Global Optimization* 14, 217-219.
- Zamora, J. M., Castellanos, J., Hernández, R. (1999). Targeting and Design of Distributed Wastewater Treatment Systems through Linear Programming. Presented at the AIChE Annual Meeting, Dallas, TX.
- Zamora-Mata, J. M., Hernández-Suárez R., Castellanos-Fernández J. (2004). Modelo de Programación Lineal para Asistir en el Diseño de Sistemas Distribuidos de Tratamiento de Efluentes. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 3, 121-134.