



Universidad de San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería Química

**MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR
ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**

Barbara Lucía Martínez Ruíz

Asesorado por el Ing. Renato Giovanni Ponciano Sandoval

Guatemala, junio de 2013

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA
POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

BARBARA LUCÍA MARTÍNEZ RUÍZ

ASESORADO POR EL ING. RENATO GIOVANNI PONCIANO SANDOVAL

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA

GUATEMALA, JUNIO DE 2013

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANO	Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos
VOCAL I	Ing. Alfredo Enrique Beber Aceituno
VOCAL II	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
VOCAL III	Inga. Elvia Miriam Ruballos Samayoa
VOCAL IV	Br. Walter Rafael Véliz Muñoz
VOCAL V	Br. Sergio Alejandro Donis Soto
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

DECANO	Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos
EXAMINADOR	Ing. Carlos Salvador Wong Davi
EXAMINADOR	Ing. Jaime Domingo Carranza González
EXAMINADOR	Ing. Orlando Posadas Valdéz
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

**MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA
POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha febrero de 2012.


Barbara Lucia Martínez Ruíz



UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA.

Guatemala, 9 de mayo de 2013

Ingeniero

Víctor Manuel Monzón Valdez

Director de la Escuela de Ingeniería Química

Universidad de San Carlos de Guatemala

Estimado Ing. Monzón:

Reciba por medio de la presente un cordial saludo de mi parte. El motivo por el que me dirijo a usted es para hacer de su conocimiento que he revisado y corregido el Informe Final del trabajo de graduación de la estudiante **BARBARA LUCÍA MARTÍNEZ RUÍZ**, carné universitario No. 200112755, denominado "**MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**". Es mi opinión que el trabajo está listo para ser sometido a la revisión y escrutinio de los revisores nombrados por la Escuela de Ingeniería Química, por lo que por este medio le comunico mi **APROBACIÓN** del mismo y solicito que se le dé el trámite correspondiente.

Agradeciendo la atención a la presente, me suscribo de usted con todo respeto.

Atentamente,

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

Renato Giovanni Ponciano Sandoval
INGENIERO QUÍMICO

Ing. Renato Giovanni Ponciano Sandoval

Profesor Titular V

Colegiado No. 826



UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Guatemala, 27 de mayo de 2013
Ref. EI.Q.TG-IF.032.2013

Ingeniero
Víctor Manuel Monzón Valdez
DIRECTOR
Escuela Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Monzón:

Como consta en el Acta TG-265-2011-IF le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN

Solicitado por la estudiante universitaria: **Barbara Lucía Martínez Ruíz.**

Identificada con número de carné: **2001-12755.**

Previo a optar al título de **INGENIERA QUÍMICA.**

Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por el Ingeniero Químico: **Renato Giovanni Ponciano Sandoval.**

Habiendo encontrado el referido informe final del trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

Ing. Federico Salazar
COORDINADOR DE TERNA
Tribunal de Revisión
Trabajo de Graduación



C.c.: archivo

PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
ACREDITADO POR
Agencia Centroamericana de Acreditación de
Programas de Arquitectura y de Ingeniería
Período 2013 - 2015



ACAAI

Agencia Centroamericana de Acreditación de
Programas de Arquitectura y de Ingeniería



UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
 FACULTAD DE INGENIERÍA
 ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Guatemala, 27 de mayo de 2013
 Ref. EI.Q.TG.149.2013

Señores
 Área de Lingüística
 Facultad de Ingeniería
 Presente,

Estimados Señores

Como consta en el Acta TG-265-2011-IF le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN

Solicitado por la estudiante universitaria: **Barbara Lucía Martínez Ruíz.**

Identificada con número de carné: **2001-12755.**

Previo a optar al título de **INGENIERA QUÍMICA.**

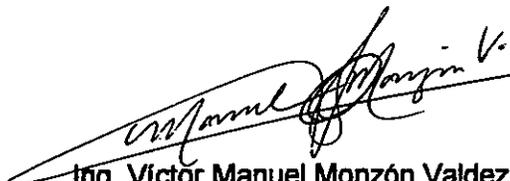
Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por el Ingeniero Químico: **Renato Giovanni Ponciano Sandoval.**

Habiendo encontrado el referido informe final del trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"


 Ing. Víctor Manuel Monzón Valdez
 DIRECTOR
 Escuela de Ingeniería Química



C.c.: archivo

PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
 ACREDITADO POR
 Agencia Centroamericana de Acreditación de
 Programas de Arquitectura y de Ingeniería
 Periodo 2013 - 2015





UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Ref.EIQ.TG.173.2013

El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación de la estudiante, **BARBARA LUCÍA MARTÍNEZ RUÍZ** titulado: "**MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**". Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.



Ing. Víctor Manuel Monzón Valdez
DIRECTOR
Escuela de Ingeniería Química

Guatemala, junio 2013

Cc: Archivo
VMMV/ale

Universidad de San Carlos
de Guatemala

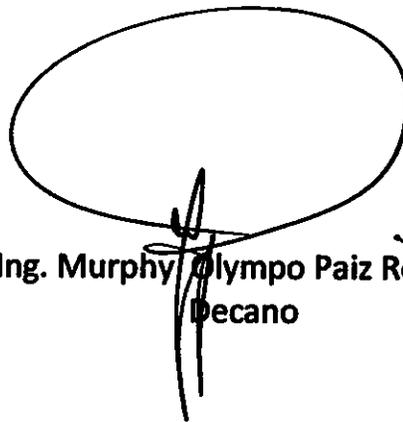


Facultad de Ingeniería
Decanato

DTG. 450 .2013

El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al Trabajo de Graduación titulado: **MODELADO MATEMÁTICO PARA UNA PLANTA DE TRATAMIENTO DE AGUA POR ÓSMOSIS INVERSA EN LA INDUSTRIA DE BEBIDAS CARBONATADAS**, presentado por la estudiante universitaria **Bárbara Lucía Martínez Ruíz**, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE:



Ing. Murphy Olympo Paiz Recinos
Decano



Guatemala, 26 de junio de 2013

/gdech

ACTO QUE DEDICO A:

Dios

Por darme fuerza en los momentos de flaqueza, valor en medio de la angustia, resistencia cuando me debilitaba, paciencia cuando no había esperanza, determinación para conquistar mis sueños, amor para compartir, pasión para hacer todas las cosas, perseverancia para llegar a la meta, vida para disfrutar, ayuda en cada momento, visión para emprender nuevos proyectos, respaldo en los momentos más difíciles, confianza de que él hace posible lo imposible, luz en la oscuridad, paz en medio de las grandes tormentas y un futuro para ser parte de la generación que bendiga a Guatemala.

AGRADECIMIENTOS A:

La Universidad de San Carlos de Guatemala	Por permitirme alcanzar un sueño.
Facultad de Ingeniería	Por enriquecerme de conocimiento.
Mis padres	Eduardo Martínez y Liliana de Martínez por ser ejemplo de responsabilidad y honestidad, por brindarme su apoyo incondicional, amor y paciencia.
Mis hermanos	Richard y Eduardo Martínez por su apoyo y amistad.
Mi tía	Ana María Martínez por su ejemplo y cariño.
Mis abuelos	Julia Escobar y Eduardo Martínez por siempre creer en mí.
Ing. Renato Ponciano	Por su excelente y valioso apoyo, por compartir su conocimiento para la elaboración de este trabajo de graduación.

Ing. Mauricio Rodríguez

Por su ejemplo, confianza y apoyo
brindado.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	V
LISTA DE SÍMBOLOS.....	VII
GLOSARIO.....	IX
RESUMEN.....	XIX
OBJETIVOS / HIPÓTESIS.....	XXI
INTRODUCCIÓN.....	XXIII
1. ANTECEDENTES TEÓRICOS.....	1
1.1. <i>Mathematical model of nanofiltration systems</i> (W.G.J. Van der Meer, C.W. Aeiijelts Averink, J.C. Van Dijk) Editor: Elsevier Scientific Pub. Co., (1995).....	1
1.2. <i>Can nanofiltration be fully predicted by a model?</i> (J. Straatsma, G. Bargemana, H.C. Van der Horst, J.A. Wesselingh) Editor: Elsevier Scientific Pub. Co., (2002)	2
2. MARCO TEÓRICO.....	3
2.1. Membranas.....	3
2.1.1. Características de los procesos de separación con membranas	3
2.1.2. Tipos de membranas	4
2.1.2.1. Membranas anisótropas o microporosas.....	4
2.1.2.2. Membranas densas.....	4
2.1.2.3. Membranas cargadas eléctricamente.....	4
2.1.3. Configuraciones	5

2.1.3.1.	Cartuchos de membranas.....	5
2.1.3.2.	Módulos tipo placa-bastidor	6
2.1.3.3.	Módulos de membranas tubulares	6
2.1.3.4.	Módulos de membranas enrolladas en espiral	7
2.1.3.5.	Módulos de membranas tipo fibra hueca.....	8
2.1.4.	Factores que reducen las prestaciones de las membranas.	9
2.1.5.	Polarización de la concentración	9
2.1.6.	Ensuciamiento.....	10
2.2.	Ósmosis inversa (RO)	10
2.2.1.	Características del proceso	11
2.2.2.	Membranas	12
2.2.3.	Problemas específicos de ensuciamiento.....	13
2.2.4.	Aplicaciones	14
2.2.4.1.	Tratamiento de aguas residuales	14
2.3.	Modelado matemático para sistemas de filtración por membranas	15
2.4.	Modelados de sistemas de ósmosis inversa (RO)	19
2.5.	Regresión multivariable	22
3.	DISEÑO METODOLÓGICO	25
3.1.	Variables	25
3.1.1.	Variables cuantificables	25
3.1.2.	Variables no cuantificables	26
3.2.	Delimitación de campo de estudio	26
3.3.	Recursos humanos disponibles	27

3.4.	Recursos materiales disponibles (equipo, cristalería, reactivos)	27
3.5.	Técnica cualitativa o cuantitativa	27
3.6.	Recolección y ordenamiento de la información.....	28
3.7.	Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información ..	28
3.8.	Análisis estadístico	31
3.8.1.	Medidas de bondad del ajuste	31
3.8.2.	Significación estadística.....	33
4.	RESULTADOS	35
5.	INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS	39
	CONCLUSIONES	45
	RECOMENDACIONES.....	47
	BIBLIOGRAFÍA.....	49
	APÉNDICES.....	53
	ANEXOS	55

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

1.	Cartuchos de membranas	5
2.	Esquema de un módulo tipo placa-bastidor	6
3.	Membrana enrollada en espiral	7
4.	Ósmosis inversa (RO)	12
5.	Dirección del flujo a través de las membranas	20

TABLAS

I.	Características más significativas de las configuraciones de membranas	8
II.	Materiales y el tipo de membranas utilizadas en los procesos de ósmosis inversa (RO).....	13
III.	Características exigidas al agua de consumo y al agua ultrapura.	15
IV.	Formato para recopilación de datos de la bitácora de la planta de ósmosis inversa (RO).....	29
V.	Formato para ordenamiento de datos y definición de las variables dependientes (Y) e independientes (X).	29

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
Å	Angstrom ($1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm}$)
ΔC	Cambio de concentración
ΔP	Cambio de presión
cm	Centímetro
A	Coefficiente de proporcionalidad
R_i	Coefficiente de rechazo
β	Coefficiente de regresión multivariable
C_{ip}	Componente i en el permeado
C_{if}	Componente i en la alimentación
d	Condiciones dinámicas del fluido
K_W	Constante de flujo de agua
K_S	Constante de flujo de sal
R	Constante de los gases ideales
D_p	Diferencia de presión osmótica transmembrana
ε	Error variable
F_W	Flujo de agua
J_W	Flujo de permeado
F_S	Flujo de sales
F_E	Flujo en la entrada
L/s	Litros por segundo
\bar{X}	Media aritmética
m	Metro
MF	Microfiltración

mm	Milímetro
mg/l	Miligramos por litro
NF	Nanofiltración
nm	Nanómetro
#	Número
RO	Ósmosis inversa <i>del inglés reverse osmosis.</i>
ppb	Partes por billón
CP	Polarización de la concentración
%	Porcentaje
pH	Potencial de hidrógeno
pH_E	Potencial de hidrógeno en la entrada
pH_S	Potencial de hidrógeno en la salida
$\Delta\pi$	Presión osmótica
p	Prueba <i>t-student</i>
R²	Regresión
SCR	Sumatoria de cuadrados residuales
T	Temperatura (°C)
TDSD	Total de sólidos disueltos
TDSDE	Total de sólidos disueltos en la entrada
TDSDC	Total de sólidos disueltos en el concentrado
TSDP	Total de sólidos disueltos en el permeado
UF	Ultrafiltración
Y_i	Variable dependiente
X_n	Variable independiente
σ^2	Varianza
V_w	Volumen molar del agua

GLOSARIO

Adsorción	Proceso mediante el cual un sólido poroso (a nivel microscópico) es capaz de retener partículas de un fluido en su superficie tras entrar en contacto con éste.
Agua residual	Tipo de agua que está contaminada con sustancias fecales y orina, procedentes de desechos orgánicos humanos o animales.
Agua salobre	Agua que tiene más sal disuelta que el agua dulce, pero menos que el agua de mar.
Aniónico	Es un ión con carga eléctrica negativa, es decir, que ha ganado electrones.
Bitácora	Registro de datos o información según fecha.
Catiónico	Es un ión con carga eléctrica positiva, es decir, que ha perdido electrones.
Coefficiente de rechazo	Es una forma de estimar el grado de separación conseguido por la membrana. Se denota como R_i .

Coloide	Sistema físico formado por una fase continua que normalmente es un líquido y una fase dispersa que se encuentra en menor proporción, es decir, partículas sólidas.
Convectivo	Es una de las 3 formas de transferencia de calor y se caracteriza porque se produce por medio de un fluido que transporta calor entre zonas de diferente temperatura.
Desalinización	Es un proceso mediante el cual se elimina la sal de agua de mar o salobre.
Difusión	Mezcla gradual de las moléculas de un gas con las moléculas de otro, en virtud de sus propiedades cinéticas.
Econométrico	Análisis cuantitativo de fenómenos económicos actuales, basado en el desarrollo congruente de teorías y observaciones.
Eficiente	Capacidad de disponer de algo para conseguir un efecto determinado.
Endógena	En modelación matemática, variables endógenas son aquellas que se explican dentro del modelo en el cual aparecen.

Ensuciamiento	Cambios químicos en el fluido causan que se deposite una capa de producto no deseado sobre la superficie (interna o externa) de los tubos.
Estandarización	Responde también al factor calidad.
Exclusión	Quitar a alguien algo o algo de un lugar, descartar, rechazar, negar posibilidades.
Fibras huecas	Estructuras tubulares con 0,1 – 1,0 mm de diámetro externo y 50 mm de diámetro interno.
Filtro	Dispositivo que discrimina uno o varios elementos determinados de algo que fluye a través de él.
Flujo de permeado	Es el flujo de la solución que atraviesa la membrana.
Fuerza iónica	Función de la concentración de todos los iones presentes en ella.
<i>In situ</i>	Expresión que tiene como significado en el sitio, generalmente se utiliza para designar un fenómeno observado en cierto lugar.
Ión	Partícula cargada que se forma cuando un átomo o un grupo de átomos neutros ganan o pierden uno o más electrones.
Ión divalente	Contiene dos átomos.

Ión monovalente	Contiene sólo un átomo.
Ión multivalente	Contiene más de dos átomos.
Irradiación	Despedir a un cuerpo rayos de luz, calor u otra energía.
Irreversible	Se aplica a aquellos procesos que, como la entropía, no son reversibles en el tiempo.
Laminar	Movimiento de un fluido cuando éste es ordenado, estratificado, suave.
Membrana anisótropa	Son estructuras laminares o tubulares donde el tamaño de poro, la porosidad o la composición de la membrana cambia a lo largo de su espesor.
Membrana isotrópica	Filtros profundos, actúan reteniendo en su interior, bien, por adsorción en las paredes de los poros o por su captura en los estrechamiento de los canales de los poros, las sustancias contaminantes que se quieren excluir del agua.
Membrana microporosa	Estructura porosa con una estrecha distribución de tamaño de poros. Las membranas que se encuadran en este grupo tienen una distribución de diámetros de poro de 0,001-10 mm.

Membrana permeable	Es una membrana que permitirá que ciertas moléculas o iones pasen a través de ella por difusión.
Microfiltración	Permite realizar una filtración altamente eficiente, ya que la membrana utilizada, presenta un tamaño de poro de entre 0,1 y 1,0 mm.
Microorganismo	También llamado microbio, es un ser vivo que sólo puede visualizarse con el microscopio.
Modelado matemático	Es uno de los tipos de modelos científicos que emplea algún tipo de formulismo matemático para expresar relaciones, proposiciones sustantivas de hechos, variables, parámetros, entidades y relaciones entre variables, entidades u operaciones, para estudiar comportamientos de sistemas complejos ante situaciones difíciles de observar en la realidad.
Molécula	Formación de por lo menos 2 átomos con una distribución definida que se mantienen unidos por fuerzas especiales.
Nanofiltración	Es un proceso de filtración basado en la presión, que permite la retención de solutos de bajo peso molecular.
Nitratos	Son sales o ésteres del ácido nítrico HNO_3 .

Ósmosis inversa (RO) Los 2 lados de la membrana están a la misma presión; si se aumenta la presión del lado de mayor concentración, puede lograrse que el agua pase desde el lado de alta concentración de sales al de baja concentración. Se puede decir que se está haciendo lo contrario de la ósmosis, por eso se llama ósmosis inversa (*RO del inglés Reverse Osmosis*).

Ozono Es una sustancia cuya molécula está compuesta por 3 átomos de oxígeno, formada al disociarse los 2 átomos que componen el gas de oxígeno. El ozono tiene uso industrial como precursor en la síntesis de algunos compuestos orgánicos, pero principalmente, como desinfectante (depurador y purificador).

Partículas Es la menor porción de materia de ese cuerpo que conserva sus propiedades químicas. Pueden ser átomos, iones o moléculas.

Patógeno También conocido como agente biológico patógeno, es aquel elemento o medio capaz de producir algún tipo de enfermedad o daño en el cuerpo de un animal, un ser humano o un vegetal.

pH Logaritmo negativo de la concentración de iones hidrógeno.

Planta piloto Es una planta de proceso a escala reducida. El fin que se persigue al diseñar, construir y operar una planta piloto, es obtener información sobre un

determinado proceso físico o químico, que permita determinar si el proceso es técnica y económicamente viable, así como establecer los parámetros de operación óptimos de dicho proceso para el posterior diseño y construcción de la planta a escala industrial.

Polarización

Proceso por el cual, se reduce la fuerza electromotriz alterando sus partes que lo constituyen como los electrodos y electrolitos.

Polímeros

Materiales que pueden ser de origen natural o sintético formados por moléculas de gran tamaño en forma de cadenas.

Poros

Es un intersticio entre las partículas o moléculas que constituyen un cuerpo.

Potabilización

Proceso de conversión de agua común en agua potable.

Presión hidrostática

Fuerza por unidad de área que ejerce un líquido en reposo sobre las paredes del recipiente que lo contiene y sobre cualquier cuerpo que se encuentre sumergido.

Presión osmótica

Presión que se debe aplicar a una solución para detener el flujo neto de disolvente a través de una membrana semipermeable.

Rayos ultravioleta (UV)	Radiación electromagnética cuya longitud de onda está comprendida aproximadamente entre los 400 y los 15 nm.
Recirculación	Reciclar el agua después de ser utilizada.
Regresión multivariable	Relación de 2 o más variables que permitirá relacionar mediante ecuaciones, una variable en relación a otras variables.
Salmuera	Agua con una alta concentración de sal (NaCl) disuelta.
Semipermeable	Un medio que permite al agua pasar a través de él, pero, rechaza el paso de sólidos suspendidos, así que esto puede ser usado para la separación de sólidos del agua.
Tamiz	Consiste en una rejilla con gran cantidad de hilos metálicos sujetos a un marco que permite separar partes finas de partes más gruesas, por ejemplo, arena y roca.
Ultrafiltración	Es el tipo de filtración que utiliza membranas para separar diferentes tipos de sólidos y líquidos. El tamaño de poro no es tan fino como en la nanofiltración y tampoco requiere tanta energía para efectuar la separación, y es más pequeño que el de las membranas de microfiltración.

Variable aleatoria	Variable estadística cuyos valores se obtienen de mediciones en algún tipo de experimento aleatorio.
Variable fija	Cuando el tamaño de la misma no variará a lo largo de la ejecución del programa. Todas las variables, sean del tipo que sean tienen longitud fija.
Viscosidad	Medida de la resistencia de un líquido a fluir.

RESUMEN

En el presente trabajo se plantea utilizar un modelado matemático para obtener las constantes de flujo y la eficiencia de una membrana permeable, en un sistema de ósmosis inversa para el tratamiento de agua en la industria de bebidas carbonatadas, disminuyendo costos en pruebas físicas.

Las variables medidas son las siguientes: concentración de sólidos, flujos de agua en la entrada y la salida del sistema, presiones y pH.

Por medio del modelado matemático obtenido, utilizando una regresión multivariable es posible predecir el comportamiento de un sistema de ósmosis inversa (RO), mostrando un porcentaje de error lo suficientemente pequeño respaldando así, su aplicación debido a su alta confiabilidad. Para el modelado se tomaron en cuenta; tanto la bitácora de la planta de ósmosis inversa (RO), como los datos técnicos del sistema.

Por lo que, las regresiones obtenidas describen con razonable exactitud el comportamiento del sistema, permitiendo así, cambiar parámetros y observar si el sistema puede seguir produciendo la cantidad requerida de agua para la elaboración de la bebida, así como la calidad de la misma.

OBJETIVOS

General

Obtener un modelado matemático para la operación de una membrana permeable en un sistema de ósmosis inversa, utilizado en el tratamiento de agua de pozo para la elaboración de bebidas carbonatadas.

Específicos

1. Modelar por regresión multivariable el comportamiento de una membrana permeable en la planta de ósmosis inversa.
2. Predecir con un margen de error razonable (aproximadamente 5-10 %), usando el modelado matemático, y las características del agua en salida de la planta al modificar una o varias de las condiciones de proceso.
3. Proporcionar una herramienta que permita realizar simulaciones de condiciones reales de proceso, reduciendo así, costos de pruebas experimentales *in situ*.

HIPÓTESIS

Es posible construir un modelado matemático para la operación de la planta de ósmosis inversa (RO), basado en los datos de operación de la planta que permita predecir con una exactitud razonable, las características del agua en salida.

INTRODUCCIÓN

En la industria de bebidas carbonatadas se utilizan grandes cantidades de agua para la elaboración de sus productos. Por lo general, esta agua procede de fuentes naturales como pozos, por lo que, contiene altos niveles de minerales e impurezas que deberán ser eliminadas para su potabilización.

El agua que se utiliza en la fabricación de la bebida, debe cumplir los estándares de calidad establecidos por esta industria, ya que el agua en su estado natural presenta variaciones en su composición. Esto suele ser a causa de la región en donde se encuentre el pozo.

Es necesario que las bebidas carbonatadas tengan el mismo sabor y apariencia, independientemente del lugar o país en el cual se produzca; es por esta razón que el proceso se inicia con la estandarización de la calidad del agua y de cada una de sus características fisicoquímicas.

Los procesos para la purificación del agua, actualmente son muy variados, existen métodos como la desinfección por medio de la adición de cloro, irradiación de rayos ultravioleta (UV), aplicación de ozono y ósmosis inversa.

Una de las nuevas tecnologías para la purificación del agua, no importando su procedencia, es el uso de membranas, específicamente en el proceso de ósmosis inversa. Este método es utilizado en la actualidad por grandes industrias productoras de bebidas carbonatadas.

En el presente trabajo de investigación se encontró un modelado matemático que permite predecir el comportamiento de una membrana permeable, para la separación de solutos en disolución, y así poder elegir los parámetros de proceso que permitan una mejor eficiencia en la eliminación de la mayor cantidad de minerales en exceso, residuos y microorganismos contaminantes del agua que será utilizada en la elaboración de la bebida.

Por medio de este modelado se podrán predecir los resultados del flujo de salida de la planta de ósmosis inversa al momento en que se modifiquen las variables de entrada reduciendo así, el número de pruebas experimentales.

1. ANTECEDENTES TEÓRICOS

- 1.1. ***Mathematical Model of nanofiltration systems*** (W.G.J. Van der Meer, C.W. Aeijselts Averink, J.C. Van Dijk)
Editor: Elsevier Scientific Pub. Co., (1995)

Para poder mejorar el rendimiento del sistema de ósmosis inversa, se puede desarrollar un modelado matemático, por el cual, se describe la transferencia de masa a través de las membranas a utilizar, por lo que, es necesario tomar en cuenta factores como la recirculación, rechazo y producción de permeado al igual que la cantidad de energía necesaria para el proceso.

Es necesario hacer uso de herramientas que permitan diseñar nuevos procesos por medio de modelados matemáticos para las diferentes aplicaciones industriales o para optimizar los procesos existentes, en este caso, optimizar el uso de ciertas membranas en el proceso de ósmosis inversa en la industria de bebidas carbonatadas. El uso de estas herramientas, permite que los costos disminuyan por medio de la reducción del número de experimentos o pruebas.

El uso de programas de computadora, puede ser utilizado para desarrollar los modelados matemáticos con los resultados obtenidos en pruebas físicas, como plantas piloto o plantas a nivel industrial de ósmosis inversa, para así poder encontrar un modelado matemático que permita predecir el funcionamiento a largo plazo de la filtración por medio del uso de membranas.

**1.2. *Can nanofiltration be fully predicted by a model?* (J. Straatsma, G. Bargemana, H.C. Van der Horst, J.A. Wesselingh)
Editor: Elsevier Scientific Pub. Co., (2002)**

Se continúa con la investigación de posibles configuraciones para un modelo utilizando la literatura que se tiene al alcance y ciertos conocimientos sobre la aplicación de estos modelos. Se han obtenido modelos de filtración por medio de membranas, por medio de los flujos de permeado.

Con un modelo experimental de curvas para rechazo de flujo se puede adaptar razonablemente bien el comportamiento del sistema, sin embargo, según las características del flujo de alimentación y la membrana a utilizar se deberá de ajustar el modelo para las isotermas de membrana de carga, ya que no todos los flujos se comportarán de la misma forma, sin embargo, si los resultados experimentales están disponibles para líquidos industriales o líquidos comparables con la misma composición de iones, el modelo puede ser aplicado con éxito.

Se necesita investigación adicional para cumplir con todos los requisitos para la amplia gama de aplicaciones industriales.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Membranas

Se pueden definir como láminas delgadas con estructura flexible y blanda que permiten cubrir, aislar, o separar diferentes medios, espacios o ambientes. Consisten en barreras semipermeables permitiendo la separación de dos fases, impide un contacto directo por lo que se restringe el paso de ciertas moléculas a través de la membrana, esto selectivamente obteniendo la separación de los contaminantes presentes en el agua, lo que se conocerá como flujo permeado.

2.1.1. Características de los procesos de separación con membranas

Entre las nuevas tecnologías de separación, se puede encontrar el uso de membranas permeables que permiten, en este caso en particular, la separación de los contaminantes presentes en el agua de pozo para la industria de bebidas carbonatadas. Entre las ventajas que presenta este tipo de proceso es el uso de baja energía, lo que produce resultados positivos en el tema de costos, también es importante mencionar que no se adicionan químicos durante el proceso.

El uso de membranas permeables es un proceso bastante simple, en el cual, la membrana actúa como un filtro que permite separar los sólidos disueltos presentes en el agua de entrada. La membrana es una pared selectiva, es decir, que impide el paso de ciertas sustancias y deja que otras la atraviesen.

2.1.2. Tipos de membranas

Es posible fabricar membranas con materiales poliméricos, cerámicos o metálicos, permitiendo cierta diversidad según el proceso en donde se vayan a utilizar. Según su estructura física se pueden clasificar en:

2.1.2.1. Membranas anisótropas o microporosas

Estas membranas consisten en láminas uniformes de material polimérico poroso con un espesor de entre 100 y 200 micras, con aspecto de cavidades, altamente poroso, con grado de porosidad y tamaño de poro optimizado, en el cual el volumen vacío representa un del 70 al 80 por ciento del volumen de la membrana. Posee una eficiencia de retención absoluta (Molina Ubeda, 2000).

2.1.2.2. Membranas densas

Lo que caracteriza a una membrana densa es que sus poros no pueden ser observados por microscopía electrónica, es decir, que se asume que no presenta cavidades aunque se ha determinado que estas membranas puedan contener huecos con diámetros entre 10 y 20 Angstrom (Hernández A., 1990).

2.1.2.3. Membranas cargadas eléctricamente

Este tipo de membranas trabajan seleccionando cierto tipo de iones en el flujo a tratar, por lo que se clasifica como membrana selectiva, ya que produce un cierto efecto sobre las diferentes permeabilidades de los iones presentes (Hernández A., 1989).

2.1.3. Configuraciones

Existen diferentes formas de membranas como láminas planas, tubulares o de fibra hueca (*hollow fiber*).

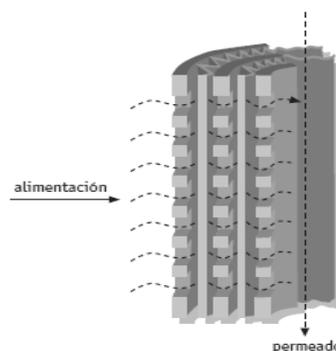
Los módulos de láminas planas y tubulares no son tan eficientes, al contrario de los módulos compactos de fibras huecas, ya que presentan una mayor superficie filtrante (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

En la actualidad las configuraciones en las que se presentan las membranas se denominan:

2.1.3.1. Cartuchos de membranas

Consisten en membranas plegadas que se enrollan alrededor del colector de permeado, empaquetándose para que el flujo a tratar elimine los contaminantes por medio de retención al pasar por la membrana, esta configuración se puede observar en la figura 1. Los cartuchos de membranas son desechables (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

Figura 1. **Cartuchos de membranas**

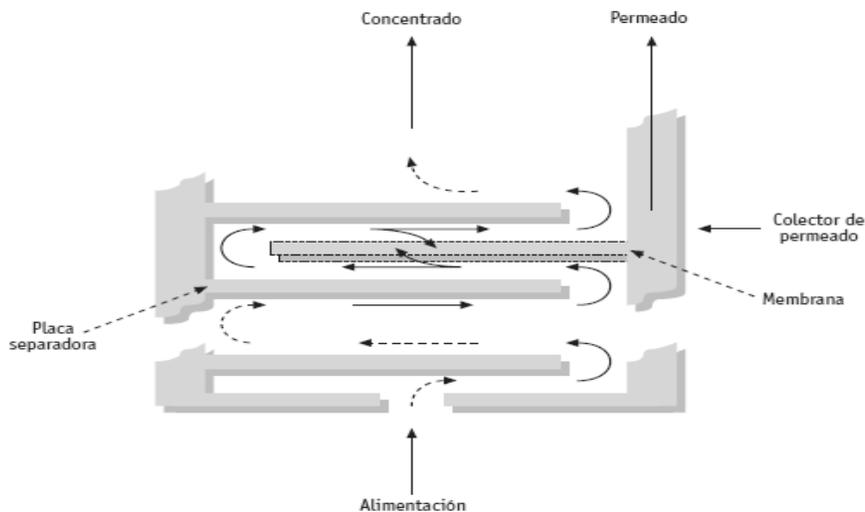


Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.1.3.2. Módulos tipo placa-bastidor

Estos módulos son muy parecidos a los filtros – prensa, en donde las membranas se colocan en bastidores separados por placas (figura 2) (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

Figura 2. Esquema de un módulo tipo placa-bastidor



Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.1.3.3. Módulos de membranas tubulares

Se componen de carcasas cilíndricas conteniendo un cierto número de membranas tubulares, la cantidad de éstas puede variar según se requiera.

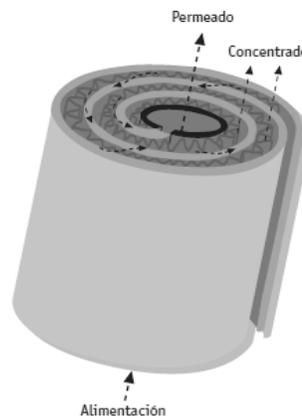
Lo peculiar de estos módulos es que la carcasa permite recolectar los flujos de permeado y concentrado. Las membranas tubulares están constituidas por un soporte poroso de papel o fibra de vidrio en el cual se

deposita la superficie filtrante, también se pueden fabricar con materiales cerámicos (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

2.1.3.4. Módulos de membranas enrolladas en espiral

Los módulos de membranas enrolladas en espiral presentan una estructura compleja en donde una membrana en forma de bolsa plana con un separador interno de las paredes, se enrolla en espiral alrededor del tubo colector de permeado uniéndose así, la parte abierta de la bolsa. Es posible la alimentación del módulo de membranas, debido a que las paredes exteriores de la membrana se encuentran separadas por estructuras huecas, el permeado fluye lateralmente (figura 3) (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

Figura 3. **Membrana enrollada en espiral**



Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.1.3.5. Módulos de membranas tipo fibra hueca

Estos son semejantes a los intercambiadores de calor de tubos múltiples, las membranas son de tipo fibra hueca (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

Según las configuraciones de membranas se puede realizar una comparación con relación a su tipo como se muestra a continuación:

Tabla I. **Características más significativas de las configuraciones membranas**

Parámetros	Fibra hueca	Fibras capilares	Enrollado espiral	Placa-marco	Tubular
Costes producción (US\$ / m ²)	5 – 20	10 – 50	5 – 100	50 – 200	50 – 200
Control concentración polarización-ensuciamiento	Pobre	Bueno	Moderado	Bueno	Muy bueno
Caída presión en zona de permeado	Alta	Moderada	Moderada	Baja	Baja
Prestaciones altas presiones trabajo	Sí	No	Sí	Sí	Marginal
Materiales específicos membrana	Sí	Sí	No	No	No

Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.1.4. Factores que reducen las prestaciones de las membranas

Para que un sistema de membranas funcione y trabaje eficientemente es necesario que el flujo de permeado (J_w) y el coeficiente de rechazo (R_i) se encuentren dentro de las condiciones del diseño de la operación según se requiera para la producción, evitando realizar grandes modificaciones en parámetros como presión y potencial eléctrico.

El coeficiente de rechazo (R_i), de un componente i que se desea excluir del permeado, es una forma de estimar el grado de separación conseguido por la membrana (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

Se define como la diferencia respecto a la unidad de la razón entre las concentraciones del componente i en el permeado (C_{ip}) y en la alimentación (C_{if}).

$$R_i = 1 - \frac{C_{ip}}{C_{if}}$$

El flujo de permeado (J_w) es el flujo de la solución que pasa la membrana.

Se expresa en:

$$J_w = \frac{\text{Volumen permeado}}{\text{Unidad superficie membrana} \cdot \text{Unidad de tiempo}}$$

2.1.5. Polarización de la concentración

En los procesos que se operan por filtración tangencial como en ósmosis inversa (RO) y ultrafiltración se presenta una polarización de la concentración, esto debido a que es inevitable que los componentes rechazados por la

membrana, provenientes de la alimentación no se acumulen en la superficie, por lo que es necesario producir un gradiente de concentración por medio de polarización en el punto de la alimentación, aumentando la eficiencia de la membrana y por lo tanto un flujo de permeado de mejor calidad (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

2.1.6. Ensuciamiento

Uno de los mayores problemas en el tratamiento de agua es el ensuciamiento de la membrana, debido a la presencia de ciertas sustancias en la alimentación que pudieran interaccionar con el agua. Se produce una reducción en el tamaño de los poros y pueden penetrar el interior de la membrana, como consecuencia se tendrá un flujo de permeado menor debido a la alta resistencia presente en la membrana. El ensuciamiento puede ser mayor si aumenta la diferencia de presión transmembrana, al final se tendrá un taponamiento de la membrana siendo necesaria su sustitución (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

2.2. Ósmosis inversa (RO)

Cuando las moléculas a separar son muy pequeñas, de peso molecular menor que 2 o 3, la presión osmótica de la disolución es significativa y no puede despreciarse frente a la aplicada, el fenómeno de separación se conoce como ósmosis inversa (RO).

Los tamaños de las partículas a separar pueden ser del mismo orden de magnitud, debiendo la presión aplicada superar la osmótica, por lo que suelen emplearse presiones de 20 a 100 bar (Hernández A., 1990).

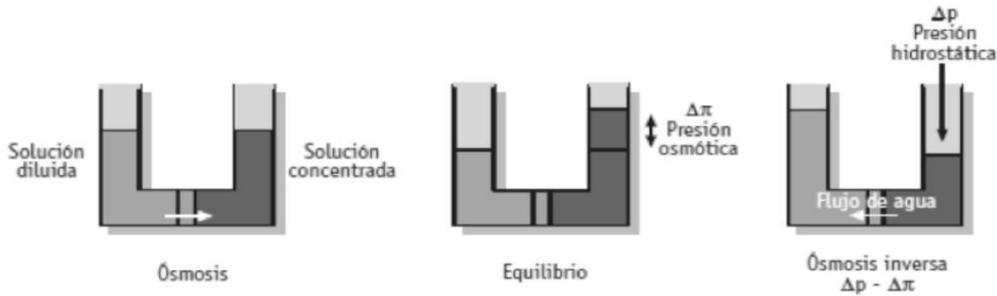
2.2.1. Características del proceso

La ósmosis se define como el transporte espontáneo de un disolvente desde disolución diluida a una disolución concentrada a través de una membrana semipermeable ideal, que impida el paso del soluto pero al mismo tiempo deje pasar el disolvente. Este flujo de disolvente puede reducirse si se aplica una presión en el lado de la membrana. Para una cierta presión llamada presión osmótica, se alcanza el equilibrio y la cantidad de disolvente que pasa en ambas direcciones es la misma. Si la membrana es idealmente semipermeable, la presión osmótica es una propiedad de la solución solamente (Hernández A., 1990).

Si la presión en el lado de la solución se incrementa por encima de la presión osmótica, la dirección del flujo se invierte. Entonces el disolvente puro pasará desde la solución hacia el solvente.

Este proceso constituye la base de la ósmosis inversa (RO) aplicada en el tratamiento de agua. La energía útil por unidad de volumen suministrada a este proceso lo es en forma de presión que es superior a la presión osmótica de equilibrio, lo que permitirá obtener un ahorro representativo en costos energéticos.

Figura 4. Ósmosis inversa (RO)



Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.2.2. Membranas

El proceso de ósmosis inversa (RO) es uno de los campos más activos dentro de la separación de componentes utilizando membranas permeables, especialmente por su aplicación en la desalinización del agua de mar y el tratamiento de aguas residuales, así como en las industrias alimentaria y farmacéutica en donde los estándares de la calidad del agua son bastante altos.

Se utilizan también membranas asimétricas, las cuales, se conforman de una capa muy delgada y densa sobre un soporte poroso de tamaño de poro grande. La separación consiste en que la disolución atraviese la capa densa, por lo que se tiene como resultado un flujo alto sin sacrificar el alto grado de rechazo del componente no deseado (Hernández A., 1990).

Tabla II. **Materiales y el tipo de membranas utilizadas en los procesos de ósmosis inversa (RO)**

Material	Tipo membrana	Coefficiente de rechazo (%)	Presiones de trabajo (bar)	Flujo agua tratada (l/m ² ·h)
CA Acetato de celulosa (40 % de acetato)	Loeb-Sourirajan	95 – 98	50 – 90	15 – 30
Poliamidas aromáticas	Loeb-Sourirajan	>99,5		0,5 – 1,34
NTR (nanofiltración) Polisulfonas / alcohol polivinílico	Loeb-Sourirajan	20 – 80	3,5 – 14	Aceptables
NS100 Polietilenamina / tolueno	Composite	>99	100	8
FT-30/SW-30	Composite	99,3 – 99,5	55	
Fenilendiamina / cloruro de trimesolil		>99	15	11

Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

Las membranas utilizadas en el proceso de ósmosis inversa (RO), actúan como un tamiz, siendo éstas, permeoselectivas en caso exista una diferencia notable en el tamaño molecular, tanto del soluto como del disolvente y el tamaño de poro que presente la membrana sea intermedio a los componentes (Weber, 2003).

2.2.3. Problemas específicos de ensuciamiento

El principal factor que causa una baja en la eficiencia del proceso de ósmosis inversa (RO) es el ensuciamiento. Las causas más frecuentes de ensuciamiento son las deposiciones de carbonatos, sulfatos, silicatos, fluoruros, etc., en la superficie de la membrana; también los sedimentos de partículas como coloides, crecimiento de microorganismos, aceites y grasas.

Para realizar una limpieza del módulo de membranas se utilizan componentes como ácidos, agentes quelantes, álcalis, compuestos orgánicos y se hace una esterilización de membranas por medio de una solución de cloro lo que permite eliminar microorganismos (Rodríguez Fernández-Alba, y otros, 2006).

2.2.4. Aplicaciones

Las plantas de ósmosis inversa (RO) por lo general, pueden utilizarse para desalinización de agua de mar y agua salobre; para la producción de agua ultrapura en las industrias electrónica, farmacéutica y producción de energía; como sistemas de descontaminación de aguas urbanas e industriales (Straatsma, y otros, 2002).

2.2.4.1. Tratamiento de aguas residuales

El proceso de ósmosis inversa (RO) se limita por los altos costos de operación por el ensuciamiento de las membranas, en el tratamiento de aguas residuales industriales este proceso se utiliza para mejorar los costos por medio de la recuperación de componentes que tengan valor para así, volver a reciclarse en el proceso de producción. En el tema de aguas urbanas, la ósmosis inversa (RO) es un tratamiento clasificado como terciario, obteniendo agua con una alta calidad para consumo (Van der Meet, y otros, 1995).

Tabla III. **Características exigidas al agua de consumo y al agua ultrapura**

	Agua ultrapura	Agua de consumo
Resistividad (25°C megaohm·cm)	18,2	-
TOC (ppb)	<5	5 000
Partículas/L (Laser <0,1mm)	<100	-
Bacterias/100ml	<0,1	<30
Especies disueltas en ppb		
Sílice	<3	3 000
Boro	<1	40
Na ⁺	<0,01	3 000
K ⁺	<0,02	2 000
Cl ⁻	<0,02	10 000
Br ⁻	<0,02	-
NO ₃ ⁻	<0,02	-
SO ₄ ⁻²	<0,02	15 000
Iones totales	<0,1	<10 000

Fuente: Rodríguez Fernández-Alba, Antonio. Tratamientos Avanzados de Aguas Residuales Industriales, Informe de Vigilancia Tecnológica, España 2006; p.63-85.

2.3. Modelado matemático para sistemas de filtración por membranas

El diseño actual de los sistemas de separación por membranas se basa principalmente en el diseño de sistemas de ósmosis inversa incluyendo aspectos tales como las configuraciones de árbol de Navidad, seis módulos en espiral por cada recipiente a presión, y no recirculación de la salmuera. Sin embargo, la presión osmótica de la alimentación y los sistemas de nanofiltración son mucho más bajos en comparación con ósmosis inversa debido a la baja concentración de sal de la alimentación y el rechazo más bajo para los iones de sistemas monovalentes (Straatsma, y otros, 2002).

Por lo tanto, las pérdidas de presión hidráulica en los sistemas de nanofiltración ya no son insignificantes, ya que se encuentran en sistemas de ósmosis inversa. Así, la configuración de los sistemas de nanofiltración podría ser diferente de los sistemas de ósmosis inversa.

Para mejorar el rendimiento de los sistemas de nanofiltración mediante la optimización de las condiciones de configuración y funcionamiento, un modelado matemático ha sido desarrollado (Van der Meet, y otros, 1995).

El modelado describe la transferencia de masa a través de las membranas mediante el flujo de solución homogénea, que se mejora mediante la inclusión de la polarización de concentración.

Con el fin de optimizar el rendimiento de los sistemas de nanofiltración, la influencia de la recirculación de recuperación, el rechazo, la producción de permeado por elemento, y el consumo de energía ha sido estudiada.

Los primeros resultados de este estudio demostraron que para una recuperación dada, una instalación de una etapa con recirculación produce más permeado por elemento que una instalación de dos etapas sin recirculación. Sin embargo, la aplicación de la recirculación conduce a un ligero aumento del consumo de energía y la concentración de permeado.

Debido a la disminución de los costos y la mejora en el rendimiento de la membrana, la utilización de la membrana para la filtración se ha convertido en una opción realista en el sector del suministro de agua potable. Problemas tales como altas concentraciones de contaminantes (nitratos, sulfatos, plaguicidas), y el grado de dureza de el agua se puede reducir en gran medida.

Para profundizar en el proceso de la membrana de filtración, varias empresas de suministro de agua han iniciado proyectos de investigación a escala de planta piloto.

La principal razón por la que es aplicada la ósmosis inversa es el alto contenido de NaCl en las fuentes de agua (agua de superficie, procedente de río). La mayoría de las empresas de suministro de agua dependen del agua subterránea como fuente de agua potable. Debido a las concentraciones bajas en sal en el agua subterránea, el interés de estas empresas se encuentra en el campo de la membrana de filtración de baja presión (nanofiltración), si fuera necesario en el proceso de tratamiento. Las razones principales para la aplicación de nanofiltración es ablandar, remover el color, plaguicidas y otros microcontaminantes orgánicos.

En la actualidad los procesos de filtración de membrana, tales como microfiltración, la ultrafiltración, nanofiltración y ósmosis inversa son ampliamente utilizados para las separaciones industriales.

Hay una necesidad cada vez mayor para obtener un modelado basado en herramientas que permita diseñar nuevos sistemas de membrana para una variedad de separaciones de productos o para optimizar la membrana en instalaciones existentes.

La ventaja de estas herramientas es que los costos pueden ser salvados por la reducción del número de experimentos.

El modelado de filtración por membrana para satisfacer las necesidades depende de tres requisitos:

- Dadas las propiedades de la membrana (tamaño medio de poro, porosidad, el grosor, las características de la carga) y dada la composición de materia prima el modelado debe predecir el flujo a través de la membrana y las concentraciones de todos los componentes en el permeado y el retenido en función de la presión aplicada. Los componentes pueden ser cargados eléctricamente (por ejemplo, los iones) y / o permanecer en estado neutral.
- El modelado debe ser capaz de determinar qué propiedades debe tener la membrana para lograr la retención deseada de varios componentes en la materia prima dada la composición.
- Las propiedades de la membrana se deben obtener de un número limitado de experimentos con el modelado. Se investiga si es posible configurar un modelado que cumpla con todos estos requisitos con los conocimientos disponibles en la actualidad.

Basados en las ecuaciones para el flujo de agua y de sales, se tiene que:

$$\text{Flujo de agua } F_W = K_W(\Delta P - \Delta \pi)$$

$$\text{Flujo de sales } F_s = K_s \Delta C$$

Donde:

F_W = Flujo de agua

K_W = Constante de flujo de agua

ΔP = Cambio de presión

$\Delta \pi$ = Presión osmótica

F_s = Flujo de sales

K_s = Constante de flujo de sal

ΔC = Cambio de concentración

Una gran parte de la fiabilidad del modelado depende del valor de las características de la membrana o parámetros K_W y K_s . En el modelado matemático, estas constantes se determinarán por medio de los datos del fabricante de la membrana utilizada en el sistema de ósmosis inversa analizado, las cuales se obtienen en condiciones normales de operación, lo que significa que estas constantes, tanto K_s y K_W pueden ser corregidas durante el proceso.

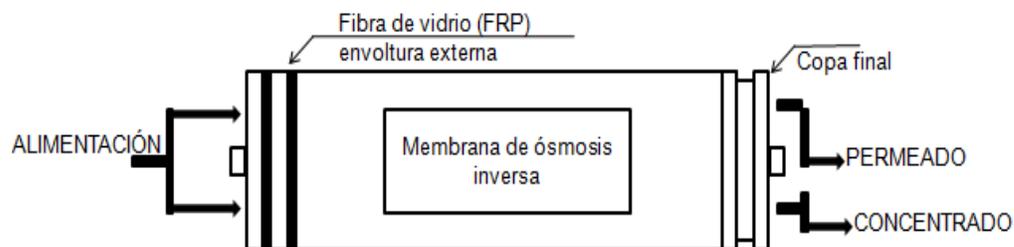
2.4. Modelado de sistemas de ósmosis inversa (RO)

El proceso de ósmosis inversa (RO) se utiliza de forma amplia para la separación de sales disueltas y sustancias en solución por medio de la aplicación de presión sobre el flujo en la entrada del sistema.

Este proceso consiste en pasar a través de una membrana porosa el flujo y retirar el permeado obtenido utilizando la presión atmosférica y temperatura ambiente.

El producto obtenido, se encuentra enriquecido con uno o más componentes de la mezcla, dejando así, una solución de mayor concentración en el lado de alta presión de la membrana (Kadhim, y otros, 2003).

Figura 5. **Dirección del flujo a través de las membranas**



Fuente: Kahdim, Abdul Sattar; Ismail, Saleh; Jassim, Abdulrazaq. *Modeling of Reverse Osmosis Systems, Desalination*, Elsevier Scientific Pub. Co. 2003. p.324

El proceso no requiere calentamiento de las membranas ni cambio de fase para la recuperación de producto, en comparación con otros procesos de producción de agua desalada, por ejemplo, multi-efecto y de múltiples etapas flash (MSF) sistemas de evaporación o procesos de congelación.

El factor de contribución principal para el crecimiento rápido de RO es su eficiencia inherente y simplicidad, en comparación con otros procesos como la evaporación MSF como se lleva a cabo a temperatura ambiente, no implica ningún cambio de fase y tiene pocos problemas de corrosión.

El tipo de agua es considerado como factor principal en el diseño de un sistema de ósmosis inversa. Las aguas naturales se agrupan generalmente en dos tipos: de agua salobre, que tiene un contenido de sal de 1 000 – 15 000 miligramos por litro, y el agua de mar > 15 000 miligramos por litro, en base a su salinidad total.

En general, la selección de una membrana de RO es críticamente dependiente de dos factores principales: la primera es tipo de agua y la segunda es la recuperación deseada. Cuando el agua fluye a través de la membrana y las sales son rechazadas, una capa límite se forma cerca de la superficie de la membrana en la que la concentración de sal superior a su valor en la solución a granel que conduce a una mayor presión osmótica.

Esto se conoce como polarización de la concentración (CP). Los efectos de la CP son: aumento de la presión osmótica, la reducción de la presión diferencial neta de conducción a través de la membrana reduciendo la tasa de flujo del producto, y el aumento de la formación de incrustaciones. Con el fin de obtener la misma recuperación con el tiempo, una mayor presión debe aplicarse.

El ensuciamiento es otro factor que afecta el rendimiento de las membranas, el rendimiento de los sistemas de ósmosis inversa está limitado por las incrustaciones y la CP. Varios métodos han sido propuestos para minimizar o reducir el efecto de estos dos fenómenos.

Estos incluyen el tratamiento de alimentación, la modificación química de la superficie de la membrana y el uso de las inestabilidades del fluido y la turbulencia.

Muchos de los modelos teóricos para las membranas de ósmosis inversa se han desarrollado en las últimas décadas. En el desarrollo de un modelo teórico para predecir el rendimiento de membranas de ósmosis inversa, una de las primeras cosas a considerar es la elección del modelo de transferencia que describe el flujo de agua y sal a través de la membrana (Jamal, 2003).

2.5. Regresión multivariable

Para este estudio se realizará una regresión lineal con múltiples variables, por la presencia de varios factores que influyen dentro del comportamiento de la planta de ósmosis inversa. Por esta razón, se utilizará este método, para tomar en cuenta todo factor o parámetro que pueda indicar si la membrana permeable a utilizar será eficiente o no para el proceso y así obtener el producto deseado.

Se tienen dos tipos de variables que son básicas, las variables fijas y las variables aleatorias, se utilizará la variable X como variable aleatoria y no estará bajo el control del investigador.

Para el modelado de regresión de una variable fija de X, se expresará cada Y en una muestra de n observaciones como una función lineal de las X's más un error variable, ϵ :

$$Y_1 = \beta_0 + \beta_1 X_{11} + \beta_2 X_{12} \dots$$

El valor de X será denotado por q. Los valores de β 's son conocidos como coeficientes de regresión.

Adicionalmente existen factores que se deberán de asumir como las siguientes ecuaciones que acompañarán el modelado:

- $E(\varepsilon_i)=0$ para todas las $i=1,2,\dots,n$.
- $\text{var}(\varepsilon_i)=\sigma^2$ para todas las $i=1,2,\dots,n$.
- $\text{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j)=0$ para todas las $i \neq j$.

Asumiendo el estado 1 el modelado sería lineal y no se necesitarían términos adicionales para la predicción de Y ; todas las variaciones restantes en Y serán impredecibles y aleatorias. Así, si $E(\varepsilon_i)=0$ y el valor de las X es fijo, entonces para $E(Y_i)=\beta_0+\beta_1X_{i1}+\beta_2X_{i2}+\dots+\beta_qX_{iq}$, el significado de Y se podrá expresar en términos de qX 's.

En el estado 2, la varianza en cada ε_i es el mismo, lo cual también implica que $\text{var}(Y_i)=\sigma^2$, desde que se fijó el valor de las X .

En el estado 3 se impone la condición que el error será correlacionado, de donde se siguen los valores de las Y también correlacionadas, $\text{cov}(Y_i, Y_j)=0$.

Así, lo asumido puede ser reiterado en términos de Y como lo siguiente:

- $E(Y_i)=\beta_0+\beta_1X_{i1}+\beta_2X_{i2}+\dots+\beta_qX_{iq}$, $i=1,2,\dots,n$.
- $\text{var}(Y_i)=\sigma^2$, $i=1,2,\dots,n$.
- $\text{cov}(Y_i, Y_j)=0$ para todas las $i \neq j$.

Utilizando una matriz, el modelado para n observaciones podrán expresarse concisamente así:

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1q} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{nq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

$$Y = X\beta + \varepsilon$$

Con esta notación, la predicción podrá ser asumida de la siguiente forma:

- $E(\varepsilon) = 0$
- $\text{Cov}(\varepsilon) = \sigma^2 I$

Éstas pueden ser reescritas en términos de Y como:

- $E(Y) = X\beta$
- $\text{Cov}(Y) = \sigma^2 I$

Tomar en cuenta que el segundo supuesto en forma de matriz incluye tanto los supuestos segundo y tercero en forma univariada, es decir, $\text{Cov}(Y) = \sigma^2 I$ implica $\text{var}(Y_i) = \sigma^2$ y $\text{cov}(Y_i, Y_j) = 0$ (Rencher, 2002).

3. DISEÑO METODOLÓGICO

3.1. Variables

Consiste en algunas características, valores, cantidades o mediciones que varían durante el proceso, es decir, que pueden tomar diferentes valores numéricos o presentar cambios físicos. Las variables son el centro de la investigación.

3.1.1. Variables cuantificables

Se le denomina variable a toda característica que puede ser cuantificada, es decir, se puede hacer uso de algún instrumento de medición, otorgando un valor numérico correspondiente, de acuerdo a la escala utilizada (Pola Maseda, 1998).

- Flujos en la entrada y en la salida del sistema: las condiciones del flujo en la entrada (agua de pozo) y del permeado obtenido en la salida permiten verificar la validez del modelado al obtener las características deseadas en el flujo de salida, según lo requerido en la calidad del agua para la elaboración de la bebida. Las unidades de medida para los flujos de entrada y salida son [l/s].
- pH: indica si el permeado obtenido se encuentra dentro de los parámetros de acidez o alcalinidad aceptables para su uso y también si la membrana utilizada es la adecuada para el proceso de ósmosis inversa.

- Cantidad de sólidos: la cantidad de sólidos tanto en la entrada como en la salida determinan si el proceso es eficiente y si se obtiene el agua deseada, así como si la membrana utilizada es la adecuada para realizar la retención de los sólidos disueltos en el flujo de entrada. Las unidades de medida para la cantidad de sólidos en el flujo de entrada y de salida son [mg/l].

3.1.2. Variables no cuantificables

Son otro tipo de características, cuya variación no es posible cuantificar, pero su estudio es importante al igual que las variables cuantificables (Pola Maseda, 1998).

- Tipo de membrana (tamaño de poro, material): el modelado matemático para esta planta de ósmosis inversa es aplicable para un tipo de membrana en específico, ya que el modelado obtenido no podría aplicarse si esta llegara a cambiar. Las unidades de medida para el tamaño de poro son [mm].

3.2. Delimitación del campo de estudio

La investigación debe ubicarse en un espacio y tiempo suficientes para obtener los resultados esperados o alcanzar los objetivos planteados por medio de una base de datos sólida.

- Planta de ósmosis inversa de una empresa dedicada a la producción de bebidas carbonatadas.

3.3. Recursos humanos disponibles

Personas que trabajan en conjunto para realizar la investigación, y así, alcanzar los objetivos planteados.

- Investigador: Br. Barbara Lucía Martínez Ruíz
- Asesor: Ing. Qco. Renato Giovanni Ponciano Sandoval

3.4. Recursos materiales disponibles (equipo, cristalería, reactivos)

Todo material, instrumentación, maquinaria o información técnica disponible para realizar la investigación.

- Información técnica y/o especificaciones de las membranas utilizadas en la planta de ósmosis inversa.
- Bitácora de puntos de control.

3.5. Técnica cualitativa o cuantitativa

Al momento de establecer las diferencias entre las variables cuantificables y no cuantificables, se procede a recopilar los datos necesarios para dar inicio al estudio (Pola Maseda, 1998).

- Recopilar información y realizar un análisis de los datos por medio de herramientas estadísticas de regresión multivariable y obtención del modelado matemático para la operación de la planta de ósmosis inversa.

3.6. Recolección y ordenamiento de la información

Por medio de un muestreo, se obtienen los datos necesarios para realizar los cálculos dentro de la investigación, para poder hacer lo anterior, los valores tomados en los puntos críticos deberán de clasificarse.

- Tomar datos en los puntos de control.
- Realizar mediciones en un tiempo de 16 días, esto por medio de un muestreo aleatorio, eligiendo el tamaño de la muestra según las reglas del azar, en donde todos los permeados obtenidos presentan igual oportunidad de ser elegidos para formar parte de la muestra (Pola Maseda, 1998).

3.7. Tabulación, ordenamiento y procesamiento de la información

Es necesario ordenar y tabular los valores recopilados para observar con mayor facilidad el comportamiento de los datos y poder utilizarlos en los cálculos para la obtención de los modelados matemáticos.

- Tomar información en los puntos de control de la planta de ósmosis inversa (RO) por un tiempo de 16 días según lo establecido por el muestreo aleatorio, esto por medio de una bitácora. (Pola Maseda, 1998)

- Elaboración de una tabla con la siguiente información y de la siguiente forma:

Tabla IV. **Formato para recopilación de datos de la bitácora de la planta de ósmosis inversa (RO)**

No. Día	F _E	TDSE	pH _E	F _P	TDSP	pH _S	F _C	TDSC
1	#	#	#	#	#	#	#	#

Fuente: muestra de cálculo.

Donde:

F_E = Flujo en la entrada (l/s)

TDSE= Total de sólidos en la entrada (mg/l)

pH_E = pH en la entrada

F_P = Flujo permeado en la salida (l/s)

TDSP= Total de sólidos en el permeado (mg/l)

pH_S = pH en la salida

F_C = Flujo de concentrado (l/s)

TDSC= Total de sólidos en el concentrado (mg/l)

- Para generar la matriz la tabla de información se dividirá de la siguiente forma:

Tabla V. **Formato para ordenamiento de datos y definición de las variables dependientes (Y) e independientes (X)**

No. Día	X			Y				
	F _E	TDSE	pH _E	F _P	TDSP	pH _S	F _C	TDSC
1	#	#	#	#	#	#	#	#

Fuente: muestra de cálculo.

- A partir del modelo teórico $Y=X\beta+\varepsilon$ (Rencher, 2002), la matriz se denota como se muestra a continuación:

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1q} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

- Al resolver la matriz, se tendrá como resultado la ecuación deseada.

$$Y_1 = \beta_0 + \beta_1 X_{11} + \beta_2 X_{12} \dots + \beta_q X_{1q} + \varepsilon_1$$

Donde:

Y= variable dependiente (unidades según parámetro utilizado)

X= variable independiente (unidades según parámetro utilizado)

β = coeficiente (adimensional)

ε = error (adimensional)

- Para conocer si el modelado obtenido es confiable, se calcula la regresión de la ecuación obtenida (Rencher, 2002).

$$R^2 = \frac{\text{Regresión de la suma de cuadrados}}{\text{Sumatoria total de cuadrados}}$$

$R^2=0$ el modelo no es adecuado para la estimación

$R^2=1$ el modelo presenta un ajuste perfecto para la estimación

3.8. Análisis estadístico

Es la descripción e interpretación de los resultados obtenidos a través de una muestra de cálculo, permite concluir si los objetivos planteados en la investigación fueron alcanzados.

- Analizar la confiabilidad del modelado a través de la regresión y una distribución *t-student* (Rencher, 2002).

3.8.1. Medidas de bondad de ajuste

Es la comparación entre las variables cuantificables y no cuantificables medidas en una muestra, el propósito principal es encontrar si existen diferencias estadísticas significativas, para determinar si la hipótesis es rechazada o no.

- Para evaluar la calidad de ajuste del modelado obtenido, se toma como referencia las medidas de bondad de ajuste, como lo es la regresión de la ecuación obtenida (Kizys, y otros, 2013).
- Por medio de la suma de los cuadrados de errores, SCE, que puede expresarse de la siguiente forma:

$$e' \cdot e = \sum_{i=1}^n e_i^2 = Y' \cdot Y - \hat{B} \cdot X' \cdot Y = Y' \cdot Y - \hat{Y}' \cdot \hat{Y} = \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \sum_{i=1}^n \hat{Y}_i^2$$

Despejando la suma de cuadrados de la variable endógena:

$$Y'Y = \hat{Y}'\hat{Y} + e'e, \text{ o bien, } \sum_{i=1}^n Y_i^2 = \sum_{i=1}^n \hat{Y}_i^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2$$

Restando ambos lados la cantidad $n \cdot \bar{Y}^2$, se obtiene:

$$Y'Y - n \cdot \bar{Y}^2 = \hat{Y}'\hat{Y} - n \cdot \bar{Y}^2 + e'e, \text{ o bien,}$$

$$\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2$$

El lado izquierdo de la ecuación, representa la suma de cuadrados totales (SCT) y no es sino la suma de cuadrados de las desviaciones respecto a su media aritmética.

A partir de lo anterior, se define el coeficiente de regresión R^2 el cual, será la medida de bondad de ajuste:

$$R^2 = 1 - \frac{SCE}{SCT}$$

Si el coeficiente de regresión se encuentra entre 0 y 1 significa que existe un término independiente en el modelado.

- En la práctica, el uso de R^2 presenta algunas complicaciones al momento de comparar varios modelos desde la perspectiva de bondad de ajuste, por consiguiente, cuando se desea realizar un análisis comparativo entre varios modelos se utiliza R^2 corregido:

$$\bar{R}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-k} (1-R^2)$$

3.8.2. Significación estadística

Calcula la probabilidad de que el modelo sea o no confiable para su aplicación en procesos industriales, ayuda a confirmar la veracidad de la hipótesis.

- El análisis econométrico pretende analizar, por medio de una serie de contrastes la significación estadística individual y conjunta de los parámetros del modelado (Kizys, y otros, 2013).

Para contrastar las hipótesis de significancia individual se tiene lo siguiente:

$$H_0: \beta_j = 0$$

$$H_A: \beta_j \neq 0$$

- El estadístico *t-student* que se utiliza para realizar el análisis es el siguiente:

$$t_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{\hat{\sigma}_u^2 \cdot a_{jj}}} \sim t_{n-k}$$

Donde:

$$\sqrt{\hat{\sigma}_u^2 \cdot a_{jj}} = \text{error estándar estimado de } \hat{\beta}_j$$

a_{jj} = j-ésimo elemento de la diagonal principal de la matriz $(X'X)^{-1}$

- Dado un nivel de significancia α , las tablas de distribución estadística proporcionan el valor de $t_{n-k,\alpha/2}$, el cual, es el valor asociado a una *t-student* con $n-k$ grados de libertad que deja a su derecha un área de $\frac{\alpha}{2}$. La regla de decisión que se utiliza para determinar si el parámetro asociado a la variable X_j es individualmente significativo o no es la siguiente:
 - Si $|t_j| \geq t_{n-k,\alpha/2}$, el estadístico quedará fuera de la región de aceptación, por lo que se rechaza la hipótesis nula, concluyendo así, que el parámetro es significativamente diferente de cero.
 - Si $|t_j| < t_{n-k,\alpha/2}$, el estadístico quedará dentro de la región de aceptación, por lo que no se rechaza la hipótesis nula, concluyendo así, que el parámetro no es individualmente significativo.
- Al encontrar el valor de t , es posible determinar un valor p asociado, utilizando para esto una tabla de valores de distribución *t-student*. El valor de p se encuentra definido como la probabilidad de obtener un resultado extremo como el que realmente se ha obtenido.

4. RESULTADOS

Modelados obtenidos a través de una regresión multivariable para una planta de ósmosis inversa (RO) utilizada en el tratamiento de agua para la elaboración de bebidas carbonatadas.

Ecuación 1: modelado matemático utilizando como variable dependiente el total de sólidos en el concentrado (mg/l)

$$Y = -121,47 + 4,63x_1 + 0,7928x_2 + 0,2026x_3$$
$$R^2 = 0,9241 \quad p < 0,00001$$

Donde:

Y = Total de sólidos en el concentrado (mg/l)

X₁ = Flujo en la entrada (l/s)

X₂ = Total de sólidos en la entrada (mg/l)

X₃ = pH en la entrada

R² = Regresión multivariable

p = Prueba *t-student*

Ecuación 2: modelado matemático utilizando como variable dependiente el flujo de concentrado (l/s)

$$Y = -4,44 + 0,4674x_1 + 0,0125x_2 - 0,0775x_3$$
$$R^2 = 0,8028 \quad p = 0,000157$$

Donde:

Y = Flujo de concentrado (l/s)

X₁ = Flujo en la entrada (l/s)

X₂ = Total de sólidos en la entrada (mg/l)

X₃ = pH en la entrada

R² = Regresión multivariable

p = Prueba *t-student*

Ecuación 3: modelado matemático utilizando como variable dependiente el pH en la salida del permeado

$$Y = 7,72 - 0,0314x_1 - 0,0974x_2$$
$$R^2 = 0,8581 \quad p < 0,00001$$

Donde:

Y = pH en la salida del permeado

X₁ = Flujo en la entrada (l/s)

X₂ = pH en la entrada

R² = Regresión multivariable

p = Prueba *t-student*

Ecuación 4: modelado matemático utilizando como variable dependiente el total de sólidos en el permeado (mg/l)

$$Y = 4,61E-09 + x_1 - 2,51E-01x_2 - x_3 + 2,44E-01x_4$$

$$R^2 = 1 \quad p < 0,00001$$

Donde:

Y = Total de sólidos en el permeado (mg/l)

X₁ = Total de sólidos en la entrada (mg/l)

X₂ = Flujo en la entrada (l/s)

X₃ = Total de sólidos en el concentrado (mg/l)

X₄ = Flujo de concentrado (l/s)

R² = Regresión multivariable

p = Prueba *t-student*

Ecuación 5: modelado matemático utilizando como variable dependiente el flujo de permeado (l/s)

$$Y = 4,44 + 0,5322x_1 - 0,0125x_2 + 0,0776x_3$$

$$R^2 = 0,7855 \quad p = 0,000258$$

Donde:

Y = Flujo de permeado (l/s)

X₁ = Flujo en la entrada (l/s)

X₂ = Total de sólidos en la entrada (mg/l)

X₃ = pH en la entrada

R² = Regresión multivariable

p = Prueba *t-student*

5. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

El método de regresión multivariable consiste en la relación entre un conjunto de variables diferentes, pero que se pueden combinar para obtener un modelado matemático bastante preciso para mostrar el comportamiento de una serie de valores en un proceso.

Como objeto de estudio se tiene una planta de tratamiento de agua de pozo por el proceso de ósmosis inversa (RO), este método permite obtener agua de mejor calidad, es decir, que se elimina un alto contenido de contaminantes, como bacterias, microorganismos y sólidos disueltos como sales. Para la eliminación de este tipo de contaminantes se hace uso de una membrana permeable que permita retener un alto porcentaje de los contaminantes presentes en el agua.

Por ser una industria de bebidas carbonatadas, se tienen altos estándares de calidad, principalmente en el agua que se utilizará en la elaboración de la bebida, la cual, es proveniente de un pozo, es por esta razón que presenta altos niveles de sales minerales disueltas que deberán ser eliminadas para así, obtener agua ultrapura después de pasar por todos los procesos de tratamiento de agua, pero este estudio únicamente se centrará en el proceso de ósmosis inversa (RO).

El proceso de ósmosis inversa (RO) consiste no en la eliminación, pero sí en la separación de la mayor parte de contaminantes presentes en el agua de pozo. Este proceso básicamente consiste en pasar un flujo de entrada a través de una membrana permeable, la cual, según el tamaño de poro, composición

química y estructura retendrá la mayor parte de los contaminantes llamados sólidos disueltos, estos son eliminados del sistema por medio de otro flujo llamado concentrado, el agua que pasa a través de la membrana permeable es el flujo de permeado, este tendrá mejores características que el agua en la entrada del sistema.

En la industria no pueden detenerse los procesos de producción debido a la alta demanda del producto en el mercado, es necesario buscar alternativas que permitan hacer más eficientes nuestros sistemas de proceso, sin correr riesgos de paros en la operación, lo cual, provocaría pérdidas económicas debido a la disminución de la producción de la bebida. Al mencionar procesos más eficientes se refiere a una mejor configuración del sistema, una membrana con diferentes características o un diferente manejo de los flujos en la entrada dependiendo de las características que presente el agua del pozo a utilizar.

Se ha encontrado un método para predecir el comportamiento de un conjunto de datos, que permite obtener un modelado matemático que describa el comportamiento de un sistema y a la vez que permita determinar el comportamiento del proceso si alguna de las variables cambia. El método de regresión multivariable permite obtener estos resultados con una regresión aceptable, este método también permite realizar ajustes por medio de la relación de ciertas variables y así, obtener el modelado deseado.

Se realizó una regresión multivariable para obtener un modelado matemático para una planta de ósmosis inversa en la industria de bebidas carbonatadas. Se tomaron los valores de una bitácora de 16 días de proceso de una planta que se encuentra en funcionamiento, las variables utilizadas son las siguientes: flujo de entrada (l/s), total de sólidos disueltos en la entrada (mg/l), flujo de permeado en la salida (l/s), total de sólidos disueltos en el

permeado (mg/l), flujo de concentrado (l/s), total de sólidos disueltos en el concentrado (mg/l), pH del flujo de entrada y pH del flujo de salida.

En total es un número de ocho variables, de las cuales, se tomaron como variables independientes o dependientes según lo requiera el modelado, ya que lo deseado es obtener una regresión lo más cercana a 1, lo que indicaría que el modelado es lo suficientemente preciso para poder hacer uso de él en una predicción del comportamiento de los flujos.

Por medio de un conjunto de matrices es posible obtener una ecuación que permita describir el comportamiento de el sistema minimizando los errores, lo que se espera realmente, se utilizó un modelado que presenta la siguiente forma: $Y = X\beta + \epsilon$, en donde Y será la variable dependiente, X la variable independiente, β el coeficiente y ϵ el error. $X\beta$ es el vector de las estimaciones de la variable dependiente Y , ϵ es el vector de los residuos y la ecuación completa es el modelo de ajuste.

Modelado número 1: se obtuvo en base a la variable total de sólidos disueltos en el concentrado (mg/l), es decir, utilizando esta como variable dependiente, y como variables independientes flujo en la entrada (l/s), total de sólidos disueltos en la entrada (mg/l) y pH_E (pH en la entrada). El modelado obtenido por regresión multivariable muestra una regresión de 0,9241, lo que indica que es aceptable para la predicción debido a que la dispersión de los valores es mínima. Entonces, por medio de una prueba *t-student* se determina que el valor de la regresión es estadísticamente significativo, lo que muestra la existencia de una buena correlación entre las variables.

Modelado número 2: se obtuvo en base a la variable flujo de concentrado (l/s), esta como variable dependiente y como variables independientes flujo en

la entrada (l/s), total de sólidos disueltos en la entrada (mg/l) y pH_E (pH en la entrada). El modelado obtenido por regresión multivariable muestra una regresión de 0,8028, lo que indica una dispersión aceptable para la predicción. Por medio de una prueba de *t-student* se determina que el valor de la regresión es estadísticamente significativo, por lo que, existe una buena correlación entre las variables.

Modelado número 3: se obtuvo en base a la variable pH_S (pH en la salida), esta como variable dependiente y como variables independientes se utilizaron flujo en la entrada (l/s) y pH_E (pH en la entrada). El modelado obtenido por regresión multivariable muestra una regresión de 0,8581, lo que indica que es aceptable para la predicción, ya que la dispersión de los valores se encuentra entre los rangos cercanos a 1. Por medio de la prueba de *t-student* se determinó que la regresión obtenida es estadísticamente significativa, por lo que existe una buena correlación entre las variables.

Modelado número 4: se obtuvo en base a la variable total de sólidos disueltos en el permeado (mg/l), esta como variable dependiente y como variables independientes total de sólidos disueltos en la entrada (mg/l), flujo en la entrada (l/s), total de sólidos disueltos en el concentrado (mg/l) y flujo de concentrado (l/s). El modelado obtenido por regresión multivariable muestra una regresión de 1,0, esto indica que no existe dispersión de valores o que la dispersión es no significativa, por lo que es un modelo con una alta precisión para la predicción, siempre y cuando, se analice si esto no cambia al momento de introducir mayor cantidad de valores para obtener el modelado con una mayor confiabilidad. Realizando la prueba *t-student* se determinó que el valor de la regresión es estadísticamente significativo, por lo que existe una buena correlación entre las variables.

Modelado número 5: se obtuvo en base a la variable flujo de permeado (l/s), esta como variable dependiente y como variables independientes flujo en la entrada (l/s), total de sólidos disueltos en la entrada (mg/l) y pH_E (pH en la entrada). El modelado obtenido por regresión multivariable muestra una regresión de 0,7855, este valor es el más alejado a 1 en comparación a los cuatro modelados anteriores, lo que no lo hace menos importante, ya que aún se encuentra dentro de un rango aceptable de dispersión. Esto se verifica por medio de la prueba *t-student*, la cual, muestra que el valor de la regresión es estadísticamente significativo, por lo que se tiene una buena correlación entre las variables.

Según los resultados obtenidos, se puede decir, que el método de regresión multivariable para la obtención de un modelado matemático sí es una opción válida, ya que permite la predicción de la o las variables deseadas de un sistema, en este caso, un proceso de ósmosis inversa (RO) para el tratamiento de agua de pozo en la industria de las bebidas carbonatadas. Esta afirmación puede ser respaldada a través del valor p, ya que en los cinco modelados este valor es mucho menor a 1, por lo que, existe una alta probabilidad de que el comportamiento de la planta de ósmosis inversa (RO) no cambie, esto únicamente si el tipo de membrana utilizada en el proceso es el mismo.

La regresión multivariable permitirá obtener resultados previos a los cambios que se realicen en un sistema, es decir, que la importancia de este método radica en que no sería necesario realizar pruebas físicas cuando se requiera realizar algún cambio en el sistema. Ya sea en la cantidad de flujo, tanto en la entrada como en las salidas, se podría tener algún valor de flujo que pueda resistir la membrana o valores de pH que pueda soportar, estos pueden incluirse en las ecuaciones obtenidas y así conocer si es posible o no realizar el cambio deseado.

Los modelados obtenidos muestran el comportamiento deseado de una planta de ósmosis inversa (RO), es por esta razón que es factible utilizarlos para predecir el comportamiento del sistema si fuera necesario realizar algún cambio. Los modelados que se presentan en este informe, son los que mostraron una mejor correlación para el comportamiento de la planta. Lo que se desea al utilizar estos métodos matemáticos y estadísticos es aumentar la eficiencia de los sistemas de proceso, así como minimizar los costos en pruebas, materiales y tiempo perdido.

Se hace la observación que en el presente informe se utilizó un número pequeño de datos provenientes de la bitácora de la planta de ósmosis inversa (RO), tomar en cuenta que para un modelado con mayor grado de confiabilidad, es necesario utilizar una base de datos más extensa, entre mayor sea la cantidad de valores, mayor será la confiabilidad de la predicción del modelado para utilizarlo como herramienta en la industria de bebidas carbonatadas.

En la actualidad, con el surgimiento de nuevas tecnologías, se han desarrollado programas de computadora que permiten calcular una regresión multivariable de forma más sencilla, sin necesidad de desarrollar todas las matrices involucradas, programas estadísticos como SPSS (*software* propiedad de IBM) y Gretl (*software* econométrico desarrollador comunidad Gretl) permiten obtener este tipo de modelados con bastante exactitud.

CONCLUSIONES

1. Por medio de un modelado matemático obtenido a través de una regresión multivariable se puede predecir el comportamiento de un sistema de ósmosis inversa (RO) para la purificación del agua de pozo.
2. Los errores obtenidos a través del modelado matemático no son lo suficientemente significativos, lo cual indica, que el modelado por medio de una regresión multivariable tiene un alto grado de confiabilidad para ser utilizado.
3. Los valores de regresión obtenidos se encuentran dentro del rango aceptable, es decir, que los modelados describen con una exactitud razonable el comportamiento del sistema, lo que permitirá el uso de las ecuaciones para la predicción de resultados cambiando alguno de los parámetros de medición.
4. El método de regresión multivariable se puede utilizar para la predicción del comportamiento y rendimiento de una planta de ósmosis inversa (RO), obteniendo resultados prometedores que reducirían costos y tiempo en pruebas físicas, tomando decisiones más certeras en las membranas permeables a utilizar y en la configuración del sistema en el proceso de purificación de agua de pozo.

RECOMENDACIONES

1. Las ecuaciones obtenidas pueden ser utilizadas para realizar una simulación por computadora de la operación de la planta de ósmosis inversa (RO) utilizada en el tratamiento de agua de pozo para la elaboración de bebidas carbonatadas.
2. Para obtener un mejor rendimiento en el tratamiento de agua de pozo se puede hacer uso de un método matemático como la regresión multivariable utilizando todas las variables que se crean necesarias en el análisis del proceso, para predecir resultados con una exactitud razonable.
3. Hacer uso de un modelado matemático por regresión multivariable para determinar si el sistema de ósmosis inversa (RO) podría funcionar de mejor forma con diferentes tipos de flujos y calidad de membrana permeable sin necesidad de pruebas físicas.
4. Para lograr un mejor análisis por medio de un modelado matemático es necesario obtener una sólida base de datos sobre todos los flujos presentes en el proceso, tanto en entrada como en salida, lo que permitirá obtener un modelado con mayor confiabilidad.

BIBLIOGRAFÍA

1. CHANG, Raymond. *Química*. México, D.F. : McGraw-Hill, 1999. p.995. ISBN: 970-10-1946-6.
2. GIBAJA, Juan José. You Tube. *Estimación por mínimos cuadrados en regresión lineal múltiple*. [en línea] <http://www.youtube.com/watch?v=JxEBvT2vmlk> [Consulta: 08 de junio de 2012].
3. ———.You Tube. *Contraste sobre la calidad del modelo*. [en línea] <http://www.youtube.com/watch?v=nKIB2Xjyl24> [Consulta: 08 de junio de 2012].
4. ———.You Tube. *Modelo teórico de regresión lineal múltiple. Expresión matricial*. [en línea] <http://www.youtube.com/watch?v=5-kQWu7Uag8> [Consulta: 15 de junio de 2012] .
5. ———.You Tube. *Ejemplo de estimación por mínimos cuadrados con hoja de cálculo*. [en línea] <http://www.youtube.com/watch?v=pMvbjgdrT4> [Consulta: 15 de junio de 2012].
6. ———. You Tube. *Ejemplo de estimación por mínimos cuadrados con hoja de cálculo (y II)*. [en línea] <http://www.youtube.com/watch?v=EoUOSKcN1I8> [Consulta: 15 de junio de 2012].

7. HERNÁNDEZ, A.; TEJERINA, F.; ARRIBAS, J. I.; MARTÍNEZ, L.; MARTÍNEZ, F. *Microfiltración, ultrafiltración y ósmosis inversa*. Madrid : Artes Gráficas Suárez Barcala. 1989. p.171. Vol. 1. ISBN: 84-7684-161-2.
8. ———. *Microfiltración, ultrafiltración y ósmosis inversa*. Madrid : Lerko Print, 1990. p.140. Vol. 4. ISBN: 84-7684-945-1.
9. JAMAL, K.; KHAN, M.A.; KAMIL, M. *Mathematical modeling of reverse osmosis systems*. Netherlands : Elsevier Scientific Pub., 2003. p.101.
10. KADHIM, Abdul Sattar; ISMAIL, Saleh; JASSIM, Alaa' Abdulrazaq. *Modeling of reverse osmosis systems*. Iraq : Elsevier Scientific Pub., 2003. p.343.
11. KIZYS, Renata; JUAN, Ángel A. *Modelo de regresión lineal múltiple*. Universitat Oberta de Catalunya (UOC), 2013. p.20. [en línea] http://www.uoc.edu/in3/emath/docs/T01_Reg_Lineal_Multiple.pdf. [Consulta: 06 de febrero de 2013].
12. MOLINA UBEDA, Rafael. *Teoría de la clarificación de mostos y vinos y sus aplicaciones prácticas*. Madrid : Mundi Prensa, 2000. p.317. ISBN: 84-7114-846-3.
13. POLA MASEDA, Ángel. *Aplicación de la estadística al control de calidad*. Barcelona : Marcombo Boixareu Editores, 1998. p.115. ISBN: 84-267-0691-6.

14. RENCHER, Alvin C. *Methods of multivariate analysis*. United States of America : Wiley-Interscience, 2002. p.708. ISBN: 0-471-41889-7.
15. RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ-ALBA, Antonio; LETÓN GARCÍA, Pedro; ROSAL GARCÍA, Roberto. *Tratamientos avanzados de aguas residuales industriales. Informe de vigilancia tecnológica. CEIM*. Madrid : Elecé Industria Gráfica, 2006. p.136.
16. STRAATSMA, J.; BARGEMANA, G.; VAN DER HORST, H.C.; WESSELINGH, J.A. *Can nanofiltration be fully predicted by a model?* Netherlands : Elsevier Scientific Pub., 2002. p.165.
17. VAN DER MEET, W.G.J.; AEIJELTS AVERINK, C.W.; VAN DIJK, J.C. *Mathematical model of nanofiltration systems*. Netherlands : Elsevier Scientific Pub., 1995. p.190.
18. WEBER, Walter J. *Control de la calidad del agua. Procesos fisicoquímicos*. Barcelona : Reverté, 2003. p.654. ISBN: 84-291-7522-9.

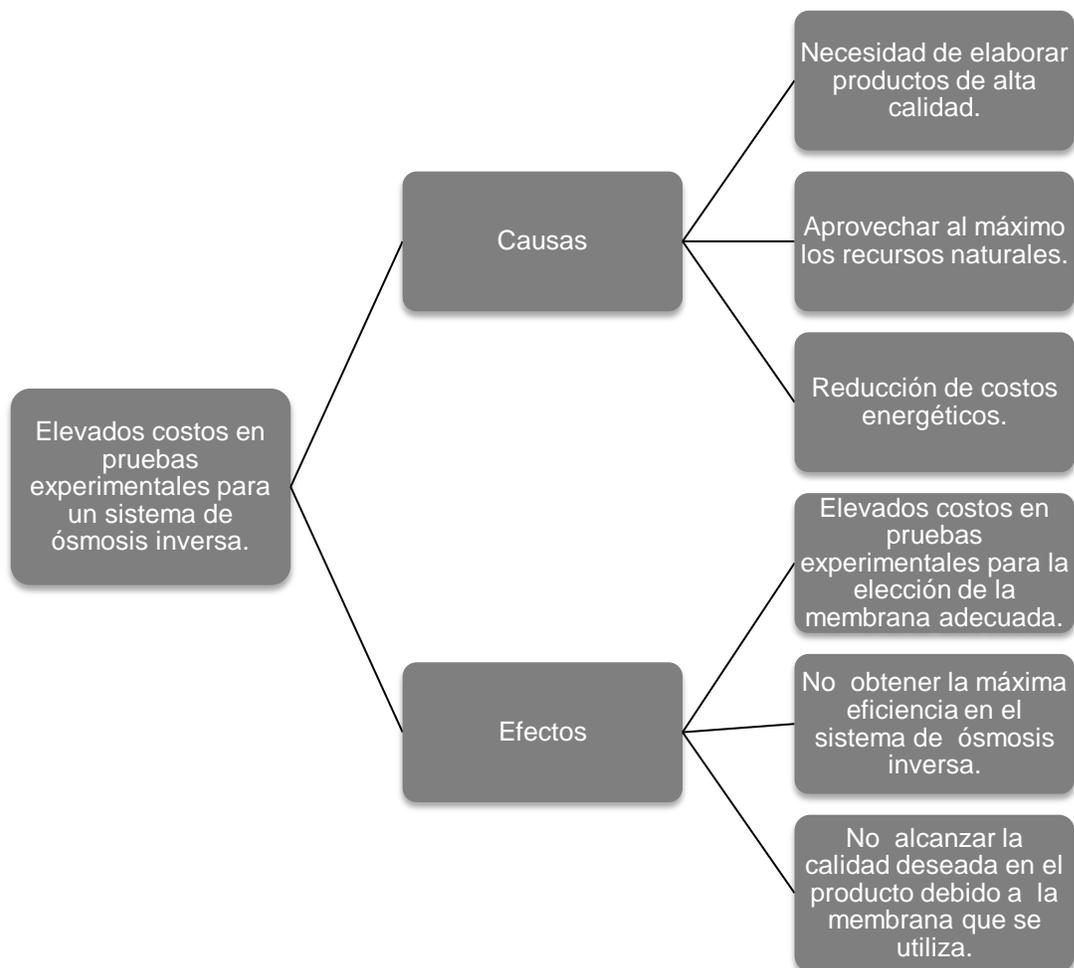
APÉNDICES

1. Tabla de requisitos académicos

1er. Paso	2do. Paso	3er. Paso	4to. Paso	5to. Paso	6to. Paso	7mo. Paso	8vo. Paso
Carrera	Área	Tema genérico	Tema específico	Especificación	Problema a resolver	Hipótesis	Temario tentativo
Licenciatura en Ingeniería Química	Química	Análisis Cualitativo	Equilibrio de Solubilidad Simple	Disolución de Calcio y Magnesio en Aguas Subterráneas.	Por medio de la bitácora de una planta de tratamiento de agua por ósmosis inversa, obtener un modelado matemático para la predicción del comportamiento de una membrana permeable.	Es posible construir un modelado matemático para la operación de la planta de ósmosis inversa basado en los datos de operación de la planta que permita predecir con una exactitud razonable, las características del agua en salida utilizando membranas permeables.	Índice de ilustraciones Lista de símbolos Resumen Hipótesis Objetivos Introducción 1. Membranas de microfiltración. 2. Configuraciones de las membranas. 3. Ósmosis inversa. 4. Producción de agua ultrapura. 5. Modelado matemático en un sistema de ósmosis inversa. 6. Regresión multivariable. Metodología Resultados Interpretación de resultados Conclusiones Recomendaciones Bibliografía Anexos y/o Apéndice
		Análisis Cuantitativo	Métodos Analíticos	Gravimetría			
	Operaciones Unitarias	Flujo de Fluidos (IQ-2)	Flujo Potencial	Capa Límite Fluido-Dinámica y Campo de Velocidad.			
		Separaciones por Medio de Membranas Selectivas	Procesos de Filtración y Separación	Microfiltración y Ósmosis Inversa.			
	Fisicoquímica	Fisicoquímica 1	Propiedades Coligativas	Presión Osmótica			
	Ciencias Básicas y Complementarias	Matemática Básica 1	Funciones Polinomiales y Racionales	Funciones Polinomiales y sus Gráficas.			
		Matemática Básica 2	Aplicaciones de la Derivada	Valores Máximos y Mínimos, las Derivadas y la Forma de una Gráfica.			
		Matemática Intermedia 1	Solución de Sistemas Lineales de Ecuaciones Diferenciales	Matrices y Sistemas Lineales.			
		Estadística 1	Variabes Aleatorias	Varianza, Coeficiente de Correlación y Regresión.			
	Especialización	Procesos Químicos Industriales	Procesos en la Industria	Proceso de Tratamiento de Agua.			

Fuente: pensum de la carrera de Ingeniería Química.

2. Árbol de problemas



Fuente: Objetivos e hipótesis.

ANEXOS

Datos originales

Tabla VI. **Bitácora de puntos de control de una planta de ósmosis inversa utilizada en la industria de bebidas carbonatadas**

Día	F_E	TDSE	pH_E	F_P	TDSP	pH_S	F_C	TDSC
1	25,23	108	7,1	17,03	26	6,20	8,20	82
2	25,42	107	6,9	17,22	24	6,30	8,20	83
3	25,48	106	6,8	17,16	24	6,27	8,32	82
4	25,74	106	6,9	17,34	23	6,25	8,39	83
5	25,74	108	6,9	17,34	25	6,24	8,39	83
6	25,55	104	6,9	17,34	23	6,25	8,20	81
7	25,74	105	7,0	17,34	22	6,20	8,39	83
8	25,74	109	6,9	17,34	24	6,21	8,39	85
9	25,74	105	6,2	17,34	23	6,31	8,39	82
10	25,61	107	6,2	17,16	23	6,31	8,45	84
11	25,80	108	7,0	17,34	22	6,22	8,45	86
12	25,80	109	7,0	17,34	23	6,21	8,45	86
13	25,48	105	6,9	17,28	23	6,21	8,20	82
14	25,74	115	7,0	17,28	24	6,30	8,45	91
15	25,67	109	7,0	17,22	23	6,29	8,45	86
16	25,74	104	7,0	17,34	22	6,24	8,39	82
F_E: Flujo en la entrada (l/s)			F_P: Flujo permeado (l/s)			F_C: Flujo de concentrado (l/s)		
TDSE: Total de sólidos en la entrada (mg/l)			TDSP: Total de sólidos en el permeado (mg/l)			TDSC: Total de sólidos en el concentrado (mg/l)		
pH_E: pH en la entrada			pH_S: pH en la salida					

Fuente: datos obtenidos de planta de ósmosis inversa activa.

Muestra de cálculo

- Estimación por medio de mínimos cuadrados en regresión multivariable

El modelo teórico de regresión lineal multivariable puede expresarse utilizando matrices de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1q} \\ 1 & X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}$$

$$Y = X\beta + \varepsilon$$

En donde, partiendo del modelo teórico de regresión lineal en el que se tiene una única variable explicativa, lo que se pretende es crear una ecuación lineal que a partir de una variable explicativa X se pueda estimar o predecir una variable dependiente Y .

En este vector se tiene la variable dependiente Y , los n valores, en la matriz X se incluyen por columnas las variables explicativas y una primera columna con n unos, en el vector β se incluyen todas las betas y el término independiente α y en ε se guardan los n términos de error, de modo que, a partir de esto, el modelo se expresará de esta forma. Este sistema es de tipo compatible indeterminado, es decir, con infinitas soluciones y lo que se desea es encontrar aquella solución que haga que los errores reciban los valores más pequeños que sea posible, es decir, que una vez sea encontrada la solución, el valor que tome la incógnita $[\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2]$ sea tan pequeño como sea posible,

minimizar la suma de los cuadrados asociados a los errores, los cuales se denominan residuos (Gibaja, 2012).

Tomando en cuenta la expresión matricial que se tiene en la expresión anterior, se escribirán los residuos de una mejor forma.

$$[\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \dots + \varepsilon_n^2] \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} = \varepsilon^T \varepsilon \quad (\text{EC.1})$$

Lo que significa que la expresión se minimiza obteniendo ε transpuesto por ε .

Ahora bien, para expresar $\varepsilon^T \varepsilon$ en función de β , el valor de β más adecuado se tiene por medio de la ecuación original $Y = X\beta + \varepsilon$, se realiza un despeje de ε por lo que se obtiene la siguiente expresión:

$$\varepsilon^T \varepsilon = [Y - X\beta]^T [Y - X\beta] \quad (\text{EC.2})$$

Esta ecuación permitirá encontrar el valor de β más adecuado, obteniendo el producto de esta matriz se tendrá lo siguiente:

$$F(\beta) = \varepsilon^T \varepsilon = [Y^T Y - 2Y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta] \quad (\text{EC.3})$$

Para encontrar el óptimo de esta función, se procede a derivar el gradiente:

$$VF = \frac{dF}{d\beta} = -2X^T Y + 2Y^T X\beta = 0$$

A continuación se despeja β :

$$\begin{aligned}(X^T X)\beta &= X^T Y \\(X^T X)^{-1}(X^T X)\beta &= (X^T X)^{-1} X^T Y \\ \beta &:= B = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (\text{EC.4})\end{aligned}$$

La ecuación obtenida se denomina del mínimo absoluto.

Para asegurarse que la expresión de β es un mínimo absoluto, se debe de calcular la segunda derivada del gradiente VF:

$$HF = \frac{d^2 F}{d\beta^2} = 2X^T X \quad (\text{EC.5})$$

La cual puede definirse positiva, ya que $X^T X > 0$.

El valor que se debe de asignar a beta es el resultado de realizar la siguiente operación:

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y \text{ entonces } \varepsilon = e = Y - X\beta \quad (\text{EC.6})$$

En conclusión, se expresará la suma de los cuadrados de los valores asignados a los errores en función del vector β , después de obtener el gradiente de la función e igualarlo a cero, así, se comprobará que el valor asignado a β constituye un mínimo, porque la matriz de la función se definirá como positiva (Gibaja, 2012).

Ejemplo para la obtención del modelado matemático (Gibaja, 2012) utilizando el total de sólidos en el concentrado (TDSC) como variable dependiente:

- Se realiza la elección de las variables explicativas X 's, que en este caso para realizar la ilustración son flujo en la entrada (l/s), total de sólidos en la entrada (mg/l) y pH_E y para Y se tomarán los valores del total de sólidos en el concentrado (mg/l).

No. de corridas	Y	X		
	TDSC (mg/l)	F_E (l/s)	TDSE (mg/l)	pH_E
1	82	25,2361	108	7,1
2	83	25,4253	107	6,9
3	82	25,4884	106	6,8
4	83	25,7408	106	6,9
5	83	25,7408	108	6,9
6	81	25,5515	104	6,9
7	83	25,7408	105	7,0
8	85	25,7408	109	6,9
9	82	25,7408	105	6,2
10	84	25,6146	107	6,2
11	86	25,8039	108	7,0
12	86	25,8039	109	7,0
13	82	25,4884	105	6,9
14	91	25,7408	115	7,0
15	86	25,6777	109	7,0
16	82	25,7408	104	7,0

Fuente: datos obtenidos de planta de ósmosis inversa activa.

- Se coloca la primera columna de 1's siguiendo las variables explicativas, obteniendo así, el vector β estimado.

Y	X			
TDSC (mg/l)	Columna de valor 1	F_E (l/s)	TDSE (mg/l)	PH_E
82	1	25,2361	108	7,1
83	1	25,4253	107	6,9
82	1	25,4884	106	6,8
83	1	25,7408	106	6,9
83	1	25,7408	108	6,9
81	1	25,5515	104	6,9
83	1	25,7408	105	7,0
85	1	25,7408	109	6,9
82	1	25,7408	105	6,2
84	1	25,6146	107	6,2
86	1	25,8039	108	7,0
86	1	25,8039	109	7,0
82	1	25,4884	105	6,9
91	1	25,7408	115	7,0
86	1	25,6777	109	7,0
82	1	25,7408	104	7,0

- Transponer la matriz X, la cual por tener 16 filas y 4 columnas da como resultado una matriz transpuesta denotada por X^T de 4 filas y 16 columnas.

X^T	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	25	25	25	26	26	26	26	26	26	26	26	26	25	26	26	26
	108	107	106	106	108	104	105	109	105	107	108	109	105	115	109	104
	7,1	6,9	6,8	6,9	6,9	6,9	7,0	6,9	6,2	6,2	7,0	7,0	6,9	7,0	7,0	7,0

- Obtener el producto de X^T por la matriz X , el resultado es una matriz de 4 filas por 4 columnas.

$X^T X$	16	410,2755	1 715	109,7
	410,2755	10 520,7665	43 977,5894	2 812,9017
	1 715	43 977,5894	183 937	11 761,1
	109,7	2 812,9017	11 761,1	753,19

- Calcular la inversa de la matriz obtenida en el paso anterior $(X^T X)^{-1}$, teniendo como resultado una matriz de 4 filas por 4 columnas.

$(X^T X)^{-1}$	1 784,6926	-66,9217	-0,0282	-9,5653
	-66,9217	2,6946	-0,0338	0,2113
	-0,0282	-0,0338	0,0100	-0,0266
	-9,5653	0,2113	-0,0266	1,0199

- Se obtiene el producto $X^T Y$ dando como resultado un vector de 4 filas por 1 columna.

$X^T Y$	1 341
	34 388,9520
	143 832
	9 196,3

- La estimación de β se realiza por medio del producto de $(X^T X)^{-1}(X^T Y)$, dando como resultado una matriz de 4 filas por 1 columna.

β_0	-121,4874
β_1	4,6379
β_2	0,7929
β_3	0,2028

- La obtención del vector de los errores $\epsilon = e = Y - X\beta$, es decir, vector de residuos por medio del vector de las estimaciones de la variable dependiente Y , por lo que de esta forma se tiene como resultado la ecuación deseada.

ϵ_0	-0,6225
ϵ_1	0,3331
ϵ_2	-0,1464
ϵ_3	-0,3371

- Para verificar si el modelado obtenido es el deseado se procede al cálculo de los residuos ϵ , dando como resultado una matriz 16 por 1, los residuos se calculan por medio de la resta del valor real – valor estimado, comprobando que la sumatoria de éstos sea igual a 0.

Estimaciones	Residuos
83	-1
83	0
82	0
83	0
85	-2
81	0
83	0
86	-1
82	0
83	1
85	1
86	0
81	1
90	1
85	1
82	0
SUMA	0
SCR	7,1631

- Se calcula la media aritmética (\bar{X}) de los valores de Y, la cual, presenta un valor de 83,8125, este valor se obtiene de la sumatoria de los valores de Y dividida dentro del número total de corridas, después se calcula la sumatoria de $(Y_i - \bar{X})^2$.

$(Y_i - \bar{X})^2$
3,2852
0,6602
3,2852
0,6602
0,6602
7,9102
0,6602
1,4102
3,2852
0,0352
4,7852
4,7852
3,2852
51,6602
4,7852
3,2852
$\Sigma = 94,4375$

- La resta entre la sumatoria anterior y el valor de SCR se dividen dentro de el valor de SCR dando como resultado la regresión multivariable (R^2). Para la confiabilidad de los resultados se utiliza la prueba *t-student* denotada por p, este cálculo se obtuvo por medio del programa de computadora Gretl.

$$R^2 = 0,9241 \quad p < 0,00001$$

- Al realizar todos los cálculos se obtiene el modelado deseado como se muestra a continuación:

$$Y = -121,47 + 4,63x_1 + 0,7928x_2 + 0,2026x_3$$

Datos calculados

Tabla VII. **Modelado matemático utilizando como variable dependiente el total de sólidos en el concentrado (mg/l)** (Gibaja, 2012)

Variable	Coficiente β	Desviación típica	Estadístico t	Valor p	Regresión R^2
Constante	-121,476	32,6388	-3,722	0,00292	0,9241
F_E : flujo en la entrada (l/s)	4,63749	1,26825	3,657	0,00329	
TDSE: total de sólidos en la entrada (mg/l)	0,792850	0,0774514	10,237	<0,00001	
pH_E : pH en la entrada	0,202687	0,780288	0,260	0,79945	

Fuente: muestra de cálculo.

Tabla VIII. **Modelado matemático utilizando como variable dependiente el flujo de concentrado (l/s)** (Gibaja, 2012)

Variable	Coficiente β	Desviación típica	Estadístico t	Valor p	Regresión R^2
Constante	-4,44247	2,10535	-2,110	0,05652	0,802825
F_E : flujo en la entrada (l/s)	0,467475	0,0818076	5,714	0,0001	
TDSE: total de sólidos en la entrada (mg/l)	0,0125639	0,0049959	2,515	0,02717	
pH_E : pH en la entrada	-0,0775829	0,0503320	-1,541	0,14916	

Fuente: muestra de cálculo.

Tabla IX. **Modelado matemático utilizando como variable dependiente el pH en la salida del permeado** ^(Gibaja, 2012)

Variable	Coefficiente β	Desviación típica	Estadístico t	Valor p	Regresión R ²
Constante	7,72137	0,911177	8,474	<0,00001	0,858159
F _E : flujo en la entrada (l/s)	-0,0314008	0,0350319	-0,896	0,38636	
pH _E : pH en la entrada	-0,0974579	0,0109911	-8,867	<0,00001	

Fuente: muestra de cálculo.

Tabla X. **Modelado matemático utilizando como variable dependiente el total de sólidos en el permeado (mg/l)** ^(Gibaja, 2012)

Variable	Coefficiente β	Desviación típica	Estadístico t	Valor p	Regresión R ²
Constante	4,61939E-09	1,42727E-09	3,237	0,00792	1,0000
TDSE: total de sólidos en la entrada (mg/l)	1,0000	4,04803E-012	2,5E+011	<0,00001	
F _E : flujo en la entrada (l/s)	-2,51210E-10	8,83119E-011	-2,845	0,01595	
TDSE: total de sólidos en el concentrado (mg/l)	-1,0000	4,90262E-012	-2,0E+011	<0,00001	
F _C : flujo de concentrado (l/s)	2,44853E-010	1,45234E-010	1,686	0,1193	

Fuente: muestra de cálculo.

Tabla XI. **Modelado matemático utilizando como variable dependiente el flujo de permeado (l/s)** (Gibaja, 2012)

Variable	Coefficiente β	Desviación típica	Estadístico t	Valor p	Regresión R^2
Constante	4,44895	2,10595	2,113	0,05627	0,785529
F_E : flujo en la entrada (l/s)	0,532277	0,0818311	6,505	0,00003	
TDSE: total de sólidos en la entrada (mg/l)	-0,0125672	0,00499739	-2,515	0,02717	
pH_E : pH en la entrada	0,0776096	0,0503464	1,542	0,14914	

Fuente: muestra de cálculo.