



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

CAMPUS D'ALCOI

Diseño de un sistema de adsorción para la eliminación de colorantes presentes en disolución acuosa

MEMORIA PRESENTADA POR:

Lirios Castelló Torre

GRADO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Tutor del trabajo: Salvador Cayetano Navarrete

Cotutor del trabajo: César Quijada Tomás

Convocatoria de defensa: *Julio del 2017*

RESUMEN

En este trabajo se va a hablar de la adsorción del carbón activo para la eliminación de colorantes que estén presentes en aguas residuales, tenemos que tener en cuenta de que los procesos de adsorción suelen ser muy comunes en la depuración de aguas, sobre todo como parte del tratamiento terciario y del tratamiento final. Se ha trabajado con carbón activo que es uno de los mejores con los que se trabaja para este tipo de operación unitaria. Para ello en este trabajo se propone caracterizar experimentalmente y modelar una columna empacada de carbón activo granular, para la eliminación del colorante orgánico que está presente en una disolución acuosa.

Se va a obtener un equilibrio y una cinética para poder realizar este proyecto ya que sin estos dos nos sería imposible poder realizar el proyecto. Para ello emplearemos dos modelos matemáticos para el equilibrio (Freundlich y Langmuir) y tres modelados cinéticos diferentes con el fin de hallar el óptimo (teniendo en cuenta la transferencia de materia interna, teniendo en cuenta la transferencia de materia interna y teniendo en cuenta ambos). Una vez se obtengan los parámetros necesarios se procederá al modelado, simulación y diseño de la columna, el objetivo principal.

Palabras clave: Colorantes, adsorción, isothermas de equilibrio, cinética de adsorción, transferencia de materia externa, transferencia de materia interna, columna de lecho fijo, Matlab, diseño, estimación económica

ABSTRACT

The adsorption of the activated carbon to eliminate the dyes present in wastewater is a common process in wastewater processes treatments, especially on tertiary treatment and in the final one. We have worked with activated carbon, one of the best for this unitary process. For this reason, it is proposed to characterize by experimental ways and to model a granulated activated carbon packed column for the removal of the organic dye in the aqueous solution.

It is going to get an equilibrium and the kinetic to realize this project, because without one of them it would be impossible to do. To do that we will use two mathematic models for the equilibrium (Freundlich and Langmuir) and three kinetic models to try to find the best one. Once the parameters are obtained we will model, simulate and design the column, which is the first goal.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi familia por todo el apoyo moral y financiero proporcionado para poder llegar a realizar este trabajo de fin de grado y poder haber logrado mi meta de estudios. Al profesor y tutor de este trabajo, Salvador Cardona Cayetano Navarrete por la paciencia, el esfuerzo y todo el material que ha proporcionado para poder realizar este trabajo de fin de grado. A todos los departamentos pertenecientes o que hayan colaborado con la carrera de ingeniería química, por todos sus conocimientos impartidos. A todas las personas que no dejaron nunca de creer en mí, ya que gracias a ellos he conseguido llegar hasta aquí.

Índice de contenido

RESUMEN.....	1
ABSTRACT.....	1
AGRADECIMIENTOS	1
Índice de contenido	2
Índice de figuras.....	4
Nomenclatura	6
1. INTRODUCCIÓN.....	8
1.1. La adsorción	9
1.2. Equilibrio de adsorción	10
1.2.1. Isotermas de Freundlich.....	12
1.2.2. Isotermas de Langmuir	13
1.2.3. Otras isotermas.....	14
1.3. Cinética de adsorción.....	14
1.3.1. Modelo de difusión de película.....	16
1.3.2. Modelo de difusión homogénea (HSDM)	16
1.3.3. Modelo de difusión en los poros	17
1.3.4. Modelo de difusión intraparticular (LDF).....	17
1.4. La desorción	18
2. PROBLEMA A RESOLVER	19
2.1. Adsorbato: colorante Acid Blue 80	19
2.2. Adsorbente: carbón activado, FILTRASORB 400 GAC.	20
3. OBJETIVOS DEL TRABAJO	21
4. METODOLOGÍA A SEGUIR	22
5. MODELADO MATEMÁTICO	23
5.1. Modelado cinético que considera la transferencia de masa externa como la transferencia de masa interna.	24
5.2. Modelado cinético que considera la transferencia de masa externa.....	27
5.3. Modelado cinético que considera la transferencia de masa interna.	27
5.4. Comprobación del modelado de la cinética de adsorción.....	28
5.4.1. Modelos que tienen en cuenta tanto transferencia de materia externa como interna... 28	
5.4.1.1. Variación de la transferencia de materia externa	28
5.4.1.2. Variación de la transferencia de materia interna	30
5.4.2. Modelos que tienen en cuenta solamente transferencia de materia externa.....	31
5.4.3. Modelos que tienen en cuenta solamente transferencia de materia interna.....	32

5.5.	Modelado de la columna	34
6.	EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN.....	40
7.	CINÉTICA DE ADSORCIÓN.....	43
7.1.	Experimentos a concentración inicial variable	44
7.2.	Experimentos a masa de carbón activo variable	46
7.3.	Obtención del coeficiente de materia interna.....	48
8.	DISEÑO DE LA COLUMNA DE ADSORCIÓN.....	49
9.	DISEÑO DE LA INSTALACIÓN HIDRÁULICA.....	55
10.	ESTIMACIÓN DE COSTES	61
11.	CONCLUSIONES.....	62
12.	BIBLIOGRAFÍA.....	63

Índice de figuras

Figura 1 Dibujo del mecanismo de adsorción ^[1]	9
Figura 2 Determinación de las isotermas de adsorción ^[1]	11
Figura 3 Influencia de la K en la forma de la isoterma de Freundlich ^[1]	13
Figura 4 Influencia de la n en la forma de la isoterma de Freundlich ^[1]	13
Figura 6 Perfiles de concentración en el caso de difusión externa e interna ^[1]	15
Figura 6 Perfil de concentración en el modelo de difusión externa ^[1]	16
Figura 7 Perfil de concentración en el modelo HSDM ^[1]	16
Figura 8 Perfil de concentración en el modelo de difusión en los poros ^[1]	17
Figura 9 Perfil de concentración en el modelo LDF ^[1]	17
Figura 10 Curva de elución en un proceso de desorción ^[1]	18
Figura 11 Molécula del AB80	19
Figura 12 Definición de las variables normalizadas	25
Figura 14 Variación de la constante de transferencia de materia externa manteniendo la interna constante (Freundlich)	28
Figura 15 Variación de la constante de transferencia de materia externa manteniendo la interna constante (Langmuir)	29
Figura 15 Variación de la constante de transferencia de materia interna manteniendo la externa constante (Freundlich)	30
Figura 16 Variación de la constante de transferencia de materia interna manteniendo la externa constante (Langmuir)	30
Figura 17 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia externa (Freundlich)	31
Figura 18 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia externa (Langmuir)	32
Figura 20 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia interna (Freundlich)	32
Figura 21 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia interna (Langmuir)	33
Figura 22 Balance de materia en el líquido de la columna	34
Figura 23 Discretización de la columna	36
Figura 23 Gráfica experimental de Langmuir para tres colorantes estudiados	40
Figura 24 Comparación de las isotermas de Langmuir y Freundlich	41
Figura 25 Gráfica experimental de cinética para el colorante AB80 variando el efecto de su concentración inicial	43
Figura 26 Gráfica experimental de cinética para el colorante AB80 variando el efecto de la masa de carbón activo	43
Figura 27 Datos experimentales extraídos de la Figura 25	44
Figura 28 Optimización de experimentos a diferentes concentraciones iniciales	45
Figura 29 Datos experimentales extraídos de la Figura 26	46
Figura 30 Optimización de experimentos a diferentes masas de carbón	47
Figura 31 Gráfica experimental de diseño de la columna variando el tamaño de la partícula	49
Figura 32 Curva de ruptura simulada para los datos experimentales de bibliografía ^[9]	50
Figura 33 Evolución de la concentración a lo largo del tiempo	52
Figura 34 Evolución de la carga a lo largo del tiempo	52
Figura 35 Curva de ruptura	53

Figura 36 Evolución de la concentración y de la carga a lo largo de la longitud de la columna..... 54
Figura 38 Diseño de la instalación hidráulica del proyecto 55

Nomenclatura

A_s	Área externa total entre adsorbente y partícula (m^2)
b	Parámetro de la isoterma de Langmuir (m^3/g)
C	Concentración fase-líquida en un tiempo t (g/m^3)
C_0	Concentración inicial de solución (g/m^3)
C_e	Concentración de entrada en la columna (g/m^3)
C_{eq}	Concentración de solución en el equilibrio (g/m^3)
C_n	C normalizada (adimensional)
C_s	Concentración en la superficie externa de la partícula adsorbente (g/m^3)
C_{sn}	C_s normalizada (adimensional)
D	Diámetro de la columna (m)
D_L	Coefficiente de difusión acuosa (m^2/min)
d_p	Diámetro de partícula (m)
g	Valor de la gravedad en la tierra (m/s^2)
h_m	Pérdida de cargas menores (m)
h_t	Pérdida de cargas en tuberías (m)
K	Coefficiente de adsorción de Freundlich ($g/g)/(g/m^3)^n$)
k_F	Coefficiente de transferencia de materia externa (m/min)
k_F^*	Coefficiente de transferencia de materia externa simplificado ($m^3/(min \cdot g)$)
k_s	Coefficiente de transferencia de materia interna (m/min)
k_s^*	Coefficiente de transferencia de materia interna simplificado (1/min)
L	Longitud de la columna (m)
m_A	Masa de adsorbente (g)
n	Parámetro de la isoterma de Freundlich (adimensional)
P_A	Potencia de la bomba (W)
Q	Caudal de entrada a la columna (m^3/min)
\bar{q}	Carga del adsorbente en un tiempo t (g/g)
q_{eq}	Carga de adsorbente en el equilibrio (g/g)
q_{eq0}	Carga de adsorbente en equilibrio directo con la concentración inicial C_0 (g/g)
q_{eqe}	Carga de adsorbente en equilibrio directo con la concentración de entrada en la columna (g/g)
q_m	Parámetro de la isoterma de Langmuir (g/g)
\bar{q}_n	\bar{q} normalizada (adimensional)
q_s	Carga en la superficie externa de la partícula adsorbente (g/g)
q_{sn}	q_s normalizada (adimensional)
Re	Número de Reynolds (adimensional)
S	Área transversal del diferencial de columna (m^2)
Sc	Número de Schmidt (adimensional)
r_p	Radio de partícula (m)
Sh	Número de Sherwood (adimensional)
V_A	Volumen del adsorbente (m^3)
V_L	Volumen de la solución (m^3)

V_R	Volumen del reactor (m^3)
α_{vr}	Área superficial externa de la partícula adsorbida respecto al volumen del reactor (m^2/m^3)
ε_B	Porosidad del lecho (adimensional)
ε_M	Eficiencia de la bomba (adimensional)
ε	Rugosidad de la tubería (adimensional)
μ_L	Viscosidad del fluido ($g/(m \cdot min)$)
v_F	Velocidad superficial del fluido (Q/S) (m/min)
ρ_L	Densidad del fluido (g/m^3)
ρ_p	Densidad de la partícula (g/m^3)
ΔP	Caída de presión (Pa)

1. INTRODUCCIÓN

El agua es un componente esencial para la vida de los seres vivos, es necesaria tanto para vivir como para utilizarla en algunos procesos industriales, es por esto por lo que se emplean grandes cantidades y en diferentes estados. Muchas veces lo más interesante del agua no es la cantidad que nosotros utilizamos tanto de agua limpia como de agua regenerada, sino la calidad del agua que utilizamos, es por esto que se plantea este trabajo. Cabe mencionar que en el ámbito del tratamiento de aguas la rigurosidad de la calidad depende del uso que se le quiera dar posteriormente al agua, por ello, se establecerá un límite de porcentaje de colorante en agua que podrá ser modificado posteriormente.

En este trabajo nos vamos a centrar más específicamente en el problema medioambiental que sucede actualmente debido a la contaminación de aguas mediante tintes. Para plantear el problema deberemos hablar de las industrias, más concretamente de la textil. En la actualidad la industria textil es una de las mayores industrias que emplean el agua en sus procesos productivos, con ello van a ser unas de las grandes influencias en la contaminación de las aguas.

Las aguas residuales de estas industrias contienen una gran variedad de colorantes en diferentes concentraciones y diferentes puntos de toxicidad (como podemos observar en la **Tabla 1**) por ello el agua debe ser tratada eliminando los colorantes de manera que se pueda mantener una seguridad medioambiental. Concretamente en este trabajo vamos a estudiar mediante el empleo de carbón activo como adsorbente la posibilidad de poder hacer un modelo para que sea utilizado en las Estaciones de Tratamiento de Aguas (ETAP) municipales o en estaciones de depuración de aguas en las plantas industriales.

Tipo de Colorante	Nombre comercial	Tóxico	Alergénico
Colorantes Ácidos	Ácido Naranja 156 y 165	X	
	Ácido Violeta 17		X
Colorantes Catiónicos	Básico Azul 3, 7 y 81	X	
	Básico Rojo 12	X	
	Básico Violeta 16	X	
	Básico Amarillo 21	X	
Colorantes Directos	Directo Naranja 62	X	
Colorantes Dispersos	Disperso Rojo 1, 11, 15 y 17		X
	Disperso Azul 1, 3, 7, 26, 35, 102 y 124		X
	Disperso Naranja 1, 3 y 76		X
	Disperso Amarillo 1, 9, 39, 49, 54 y 64		X

Tabla 1 Colorantes tóxicos y alergénicos en la industria textil ^[16]

Existen muchos métodos para la eliminación de estos colorantes en aguas residuales mediante procesos químicos como por ejemplo empleando coagulantes inorgánicos u orgánicos, mediante el uso de la mineralización (proceso Fenton), mediante la ozonización, técnicas electroquímicas, procesos biotecnológicos, mediante el uso de membranas, etc. En nuestro caso nos centraremos en la adsorción.

1.1. La adsorción

La adsorción es un fenómeno de transferencia de materia entre fases, el cual se utiliza ampliamente en los tratamientos para eliminar sustancias de las fases fluidas. Este se puede definir como: “el enriquecimiento de especies químicas de una fase fluida en la superficie de un sólido” [1]. Este enriquecimiento crea una fase intermedia llamada interfase, donde tiene lugar la adsorción entre la fase líquida que tiene el componente que deseamos eliminar y el otro componente que es el adsorbente. En la fase fluida debe estar el componente a adsorber disuelto en el líquido. En resumen, estos procesos de adsorción necesitan 2 fases: la fase sólida o adsorbente y la fase líquida que es donde se encuentra el adsorbato.

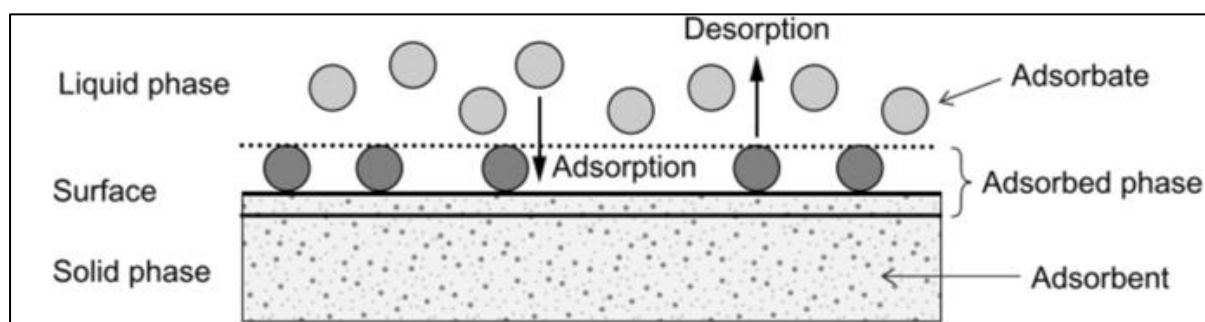


Figura 1 Dibujo del mecanismo de adsorción^[1]

La eficacia del proceso de adsorción está influenciada por una gran variedad de parámetros, entre ellos la interacción entre el colorante y el adsorbente, la superficie específica de éste, el tamaño de la molécula de colorante, la temperatura, el pH y el tiempo de contacto. Así pues, es fundamental el tipo de adsorbente elegido. Un adsorbente muy utilizado es el carbón activo, aunque también se emplean otros adsorbentes inorgánicos como las zeolitas, la vermiculita o el vidrio volcánico.

La principal característica de la adsorción es la capacidad que tiene de retener al adsorbato en sus paredes, es decir, en la superficie. Por ello, los adsorbentes deben presentar una alta superficie por unidad de masa. El carbón activo presenta una alta superficie por unidad, es decir, tiene una alta capacidad de adsorción por lo cual cumpliría los requisitos que necesitamos para nuestro trabajo. Además, si seleccionamos el carbón activo como adsorbente, tendremos acceso a una amplia variedad de selección. Esto se debe al hecho de que el carbón activo puede ser producido a partir de diferentes materiales que contengan mayoritariamente carbono en su estructura molecular. Los materiales más comunes son: la madera, el carbón de leña, el lignito, la turba, el serrín, residuos plásticos, etc.

Existen dos formas de producir la adsorción: física o química. En nuestro caso, nos interesa el primer tipo de adsorción, ya que lo que queremos es poder emplear una adsorción reversible que nos permita poder regenerar el adsorbente y poder seguir empleándolo de nuevo. Esta adsorción será realmente eficiente si se trata de adsorber componentes orgánicos, por lo tanto, cuanto más se parezca el adsorbente en cuanto a propiedades a un compuesto orgánico mejor adsorción tendrá.

1.2. Equilibrio de adsorción

En cualquier ámbito que incluya la adsorción, un dato muy importante a conocer es su equilibrio y su descripción matemática. La información y el conocimiento de los datos que podemos recoger sobre el equilibrio en un sistema de adsorbato-adsorbente es necesaria para poder caracterizar la capacidad de adsorción de los contaminantes del agua, para seleccionar el adsorbente óptimo para el proceso y su cantidad necesaria y en particular, para poder diseñar la columna del proceso correctamente.

En el caso del tratamiento de aguas, la adsorción más común que tiene lugar es de un solo soluto y, por lo tanto, un solo adsorbente. Ya que, si se desea comparar las capacidades de adsorción de solutos, con caracterizar cada uno de los solutos por individuales nos bastaría. Además, cabe destacar que la predicción matemática de equilibrios de adsorción en una multisolución se basan en isotermas de adsorción de un solo soluto.

Cada estado de equilibrio de adsorción se define de forma única por las variables de concentración de adsorbato en la fase líquida (C), la carga del adsorbente en la fase sólida (q) y la temperatura (T). La forma general de expresarlo es:

$$q_{eq} = f(C_{eq}, T)$$

Donde:

- q_{eq} será la carga del adsorbente en el equilibrio (g/g)
- C_{eq} será la concentración de solución en el equilibrio (g/m³)
- T será la temperatura de nuestro experimento (K)

Para calcular el equilibrio, trabajaremos con isotermas con lo que implica que la temperatura va a ser constante y pasaremos a tener:

$$q_{eq} = f(C_{eq}); \quad T = \text{constante}$$

Esto se debe a que la dependencia de la cantidad absorbida en la concentración de equilibrio se determina experimentalmente a temperatura constante, y los datos medidos se describen posteriormente mediante una ecuación de isoterma apropiada. En estas ecuaciones existen parámetros propios de cada uno de los métodos (Freundlich y Langmuir) y además de éstos hay que tener en cuenta: la carga del adsorbente (q) que corresponde a la masa de soluto adherido en la fase sólida y la concentración del soluto en el solvente (C).

A la hora de medir experimentalmente el equilibrio, debemos tener en cuenta la ecuación del balance de materia en el cual se establece el hecho de que la cantidad de soluto adsorbido en el sólido debe ser igual a la cantidad de soluto eliminado de la solución. Para esto tenemos en cuenta la expresión general. Si tenemos en cuenta el equilibrio que va a tener lugar en la solución, obtendremos la siguiente expresión:

$$q_{eq} = \frac{V_L}{m_A} \cdot [C_0 - C_{eq}] \quad (1)$$

Donde:

- V_L es el volumen de la solución (m³)
- m_A es la masa total de adsorbente (g)
- C_0 es la concentración inicial de solución (g/m³)

Esta ecuación no solo es cierta en el equilibrio, sino que además tiene que ser válida para cada uno de los pasos del proceso. Esta sería la ecuación general del balance de materia:

$$q(t) = \frac{V_L}{m_A} \cdot [C_0 - C(t)] \quad (2)$$

En el proceso para calcular el equilibrio hay que tener en consideración las condiciones iniciales y las condiciones finales del proceso:

$$\begin{aligned} C(0) &= C_0 & q(0) &= 0 \\ C(\infty) &= C_{eq} & q(\infty) &= q_{eq} \end{aligned}$$

Por último, cabe mencionar que la pendiente de la línea de operación vendrá dada por el valor recíproco negativo de la dosis del adsorbente:

$$\text{pendiente} = -\frac{V_L}{m_A}$$

Con esto, los diagramas que obtenemos y que se encuentran reflejados en las siguientes figuras son:

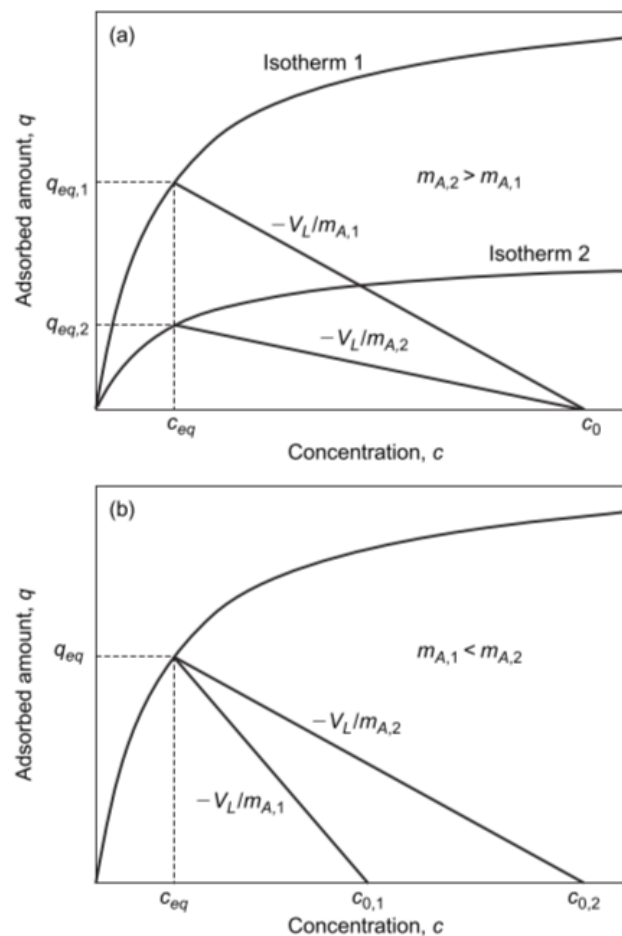


Figura 2 Determinación de las isothermas de adsorción [1]

En estos (**Figura 2**), encontramos varios puntos isotérmicos variando la dosis del adsorbente con la concentración inicial constante o variando la concentración inicial con la dosis del adsorbente constante.

Para reducir los errores experimentales en la determinación de las isothermas, se debe tener en cuenta ciertas recomendaciones ^[1]:

- Se debe tomar una muestra representativa de adsorbente.
- Se debe lavar el adsorbente previamente con agua ultrapura.
- Posteriormente, se debe secar a aproximadamente 110°C.
- El adsorbente seco debe almacenarse en un desecador o un recipiente cerrado.
- La dosis de adsorbente debe elegirse de manera que la diferencia de las concentraciones iniciales y las de equilibrio no sea demasiado pequeñas.
- La masa del adsorbente aplicada no debe ser demasiado pequeña para reducir los errores de pérdida de partículas.
- Después del equilibrio, las partículas adsorbentes deben ser eliminadas mediante filtración o centrifugación.
- Además, se debe tener en cuenta el problema de la elección del tiempo adecuado para que tenga lugar el equilibrio.

1.2.1. Isothermas de Freundlich

La isoterma de Freundlich (1906) se utiliza ampliamente para describir la adsorción de soluciones acuosas, en concreto sobre carbón activo. Ésta no puede definir el intervalo lineal en concentraciones muy bajas o el efecto de saturación a concentraciones muy altas, por ello se debe emplear en concentraciones intermedias. La ecuación de esta isoterma es:

$$q_{eq} = K \cdot C_{eq}^n \quad (3)$$

Donde:

- K = el coeficiente de adsorción. Caracteriza la fuerza de adsorción, cuanto mayor es el valor de K, mayor es la carga adsorbente que se puede lograr.
- n = se encuentra relacionado con la heterogeneidad energética de la superficie adsorbente y determina la curvatura de la isoterma. Cuanto menor sea el valor de n, más cóncava es la forma isotérmica y si la n=1, la gráfica se vuelve lineal. Las isothermas con un n<1 se consideran favorables, ya que muestran las altas cargas adsorbentes en concentraciones bajas. Si n>1 se considera desfavorable.

La influencia de los parámetros característicos de la ecuación de Freundlich la podemos observar en la siguiente figura mostrada. En ella se variará primero el valor de K (**Figura 3**) y posteriormente el valor de n (**Figura 4**).

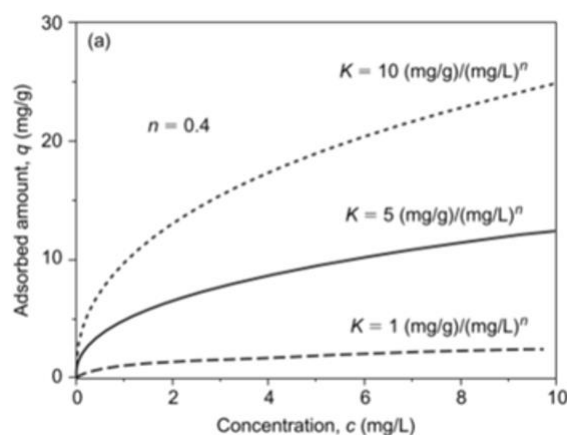


Figura 3 Influencia de la K en la forma de la isoterma de Freundlich ^[1]

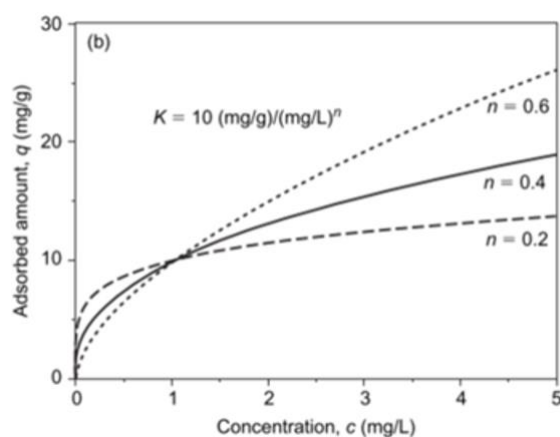


Figura 4 Influencia de la n en la forma de la isoterma de Freundlich ^[1]

1.2.2. Isotermas de Langmuir

La isoterma de Langmuir (1918) a menudo no es el método adecuado para describir los datos de isotermas experimentales para soluciones acuosas. Este hecho se debe a que la derivación teórica de esta isoterma se basa en suposiciones que a menudo no se cumplen, como la cobertura de la monocapa de la superficie del adsorbente y la homogeneidad energética de los sitios donde tienen lugar la adsorción.

De cualquier modo, se empleará este modelo matemático para comparar con los resultados obtenidos de las isotermas de Freundlich.

La ecuación de Langmuir viene dada por:

$$q_{eq} = \frac{q_m \cdot b \cdot C_{eq}}{1 + b \cdot C_{eq}} \quad (4)$$

Donde:

- q_m = es el valor máximo al que tiende q_{eq} . Representa la concentración del adsorbato sobre el adsorbente cuando se completa una capa monomolecular en la superficie del mismo.
- b = se trata de un parámetro de la ecuación.

1.2.3. Otras isotermas

Existe otra isoterma de dos parámetros: la isoterma de Henry. Este tipo de isotermas son siempre lineales, con lo que no se ajustan correctamente en soluciones no lineales. En el caso en el que tuviéramos concentraciones muy bajas, la ecuación de Langmuir derivaría a la ecuación de Henry, de forma que:

$$q_{eq} = q_m \cdot b \cdot C_{eq} = K_H \cdot C_{eq} \quad (5)$$

Mientras que, en concentraciones elevadas, $q = q_m = \text{constante}$.

Además de las isotermas planteadas de dos parámetros, existen muchas más isotermas las cuales emplean tres o más parámetros en sus ecuaciones matemáticas. Estas ecuaciones de más parámetros derivan de las ecuaciones de Langmuir y de Freundlich, como por ejemplo las isotermas de Sips (1948):

$$q_{eq} = \frac{q_m \cdot (b \cdot C_{eq})^n}{1 + q_m \cdot (b \cdot C_{eq})^n} \quad (6)$$

1.3. Cinética de adsorción

En los casos generales, el equilibrio de adsorción no se establece instantáneamente. Esta afirmación es correcta en adsorbentes porosos ya que la transferencia de masa de la disolución a los sitios donde tiene lugar la adsorción (dentro de las partículas adsorbentes) está limitada por resistencias de transferencia de masa que determinan el tiempo requerido para alcanzar el estado de equilibrio. Este progreso temporal donde tiene lugar la adsorción se denomina cinética de adsorción. La velocidad de adsorción se limita generalmente mediante procesos de difusión hacia la superficie adsorbente externa (difusión externa) y dentro de las partículas adsorbentes porosas (difusión interna). Las investigaciones realizadas sobre la cinética de adsorción son necesarias para aclarar los límites de los mecanismos de transferencia de masa y para evaluar los parámetros característicos de transferencia de masa. Los parámetros de transferencia de masa, al igual que los de equilibrio, son datos de entrada esenciales para la determinación de los tiempos de contacto requeridos en reactores de suspensión, así como para el diseño de adsorbedores de lecho fijo.

El progreso del proceso de adsorción puede caracterizarse en cuatro etapas:

1. El transporte del adsorbato desde la fase líquida a la capa límite hidrodinámica localizada alrededor de la partícula adsorbente.
2. El transporte a través de la capa límite a la superficie externa del adsorbente, denominada difusión de película o difusión externa.
3. El transporte al interior de la partícula adsorbente por difusión porosa y/o por difusión superficial.
4. La interacción energética entre las moléculas de adsorbato y los sitios donde tiene lugar la adsorción final.

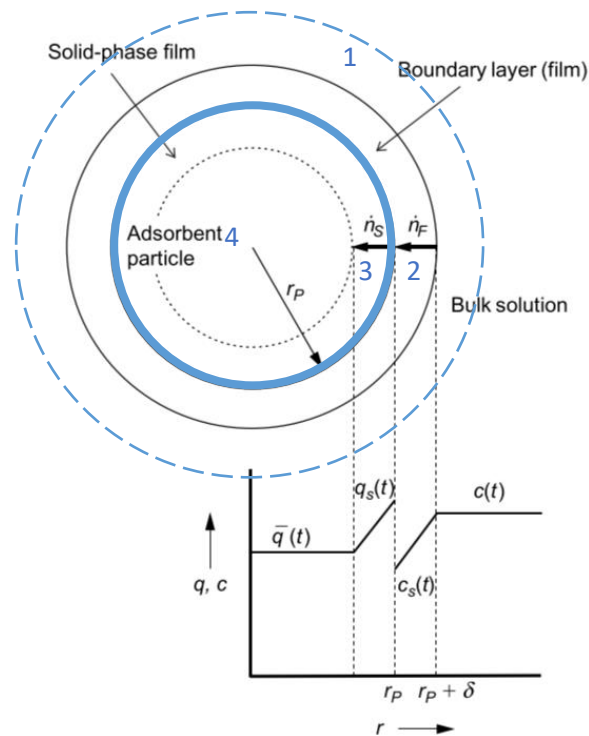


Figura 5 Perfiles de concentración en el caso de difusión externa e interna [1]

Generalmente, la primera y la cuarta etapa son muy rápidas con lo que la velocidad total del proceso de adsorción no se ve afectado. Por ello, la velocidad total del proceso de adsorción se determina mediante procesos por difusión de película (difusión externa) y/o intraparticular (difusión interna).

También es importante conocer las diferentes formas de tener en cuenta la transferencia de materia interna y externa que tiene lugar. Para ello, existen varios modelos matemáticos que se explicarán a continuación.

1.3.1. Modelo de difusión de película

Este modelo también se denomina difusión externa, ya que se considerará que la transferencia de materia interna puede ser menospreciada. Este modelo comprende el transporte del adsorbato desde el líquido hasta la superficie externa de la partícula adsorbente. Mientras no se alcance el equilibrio, la concentración en la superficie externa del adsorbente siempre será menor que en el líquido debido al proceso de adsorción continuo. La diferencia de estas dos concentraciones, será la fuerza motriz que facilite la transferencia de materia a través de la capa limitante (la externa).

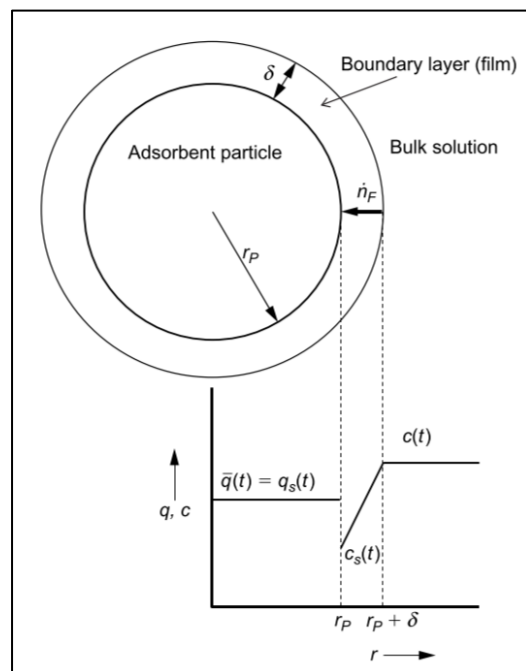


Figura 6 Perfil de concentración en el modelo de difusión externa [1]

1.3.2. Modelo de difusión homogénea (HSDM)

En este modelo se asume que la transferencia de masa ocurre en el estado adsorbido a lo largo de la superficie interna de la partícula adsorbente. Se menosprecia la transferencia de materia externa. Como se puede observar en la siguiente figura, el gradiente de concentración de la fase sólida dentro de la partícula actúa como fuerza motriz para el transporte. El adsorbente se considerará como un medio homogéneo, de ahí viene su nombre.

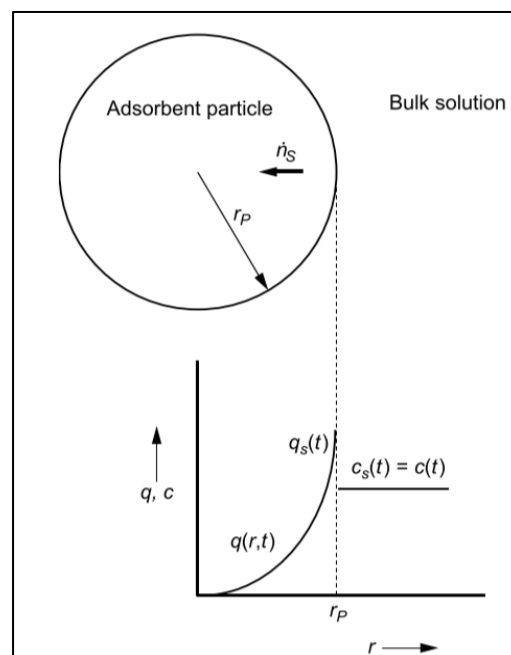


Figura 7 Perfil de concentración en el modelo HSDM [1]

1.3.3. Modelo de difusión en los poros

Este modelo es muy parecido al modelo del HSDM, la diferencia es que este modelo considera que el equilibrio de adsorción debe considerarse en cada punto del sistema de poros, no solamente en la superficie exterior de la partícula. En general, se supone que existe un equilibrio local entre la concentración del fluido poroso y la concentración en fase sólida. Esto implica que el balance de materia tendrá en cuenta tanto la concentración como la carga del adsorbente.

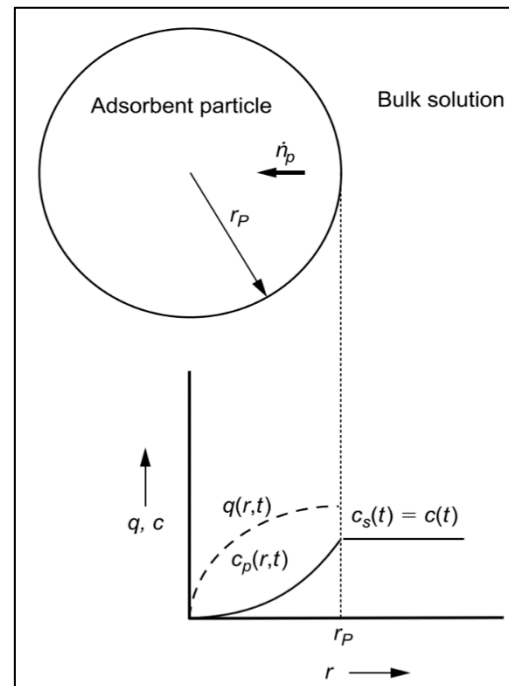


Figura 8 Perfil de concentración en el modelo de difusión en los poros [1]

1.3.4. Modelo de difusión intraparticular (LDF)

Este modelo es una simplificación del modelo de difusión superficial (HSDM). El gradiente de concentración empleado en el HSDM se reemplaza por una diferencia de concentración lineal. Se asume formalmente que la disminución de la carga tiene lugar dentro de una película sólida ficticia comparable a la película del lado de la solución en el modelo de HSDM. Este hecho nos simplifica las ecuaciones, ya que todo será lineal.

En nuestro trabajo, emplearemos este modelo, ya que podemos simplificar de forma notable nuestro modelado matemático.

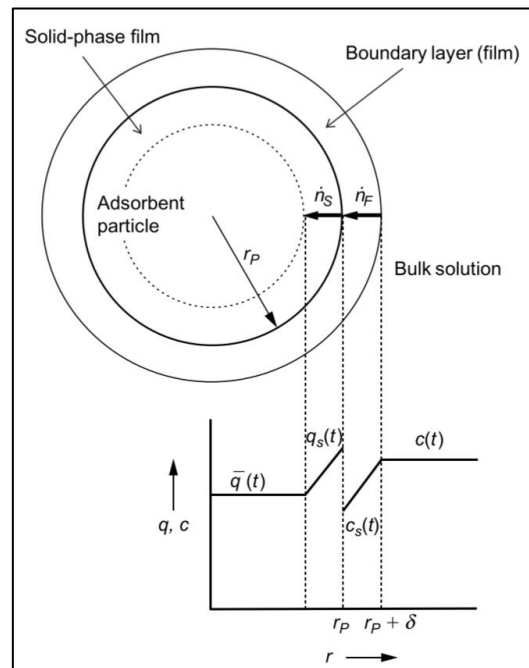


Figura 9 Perfil de concentración en el modelo LDF [1]

1.4. La desorción

El tiempo de operación de la adsorción se encuentra limitado por la capacidad que presenta el adsorbente. Cuando la capacidad de adsorber llega a su límite, el adsorbente debe ser eliminado o sustituido para que el proceso no se llegue a detener. La desorción es el proceso inverso a la adsorción, en esta conseguimos extraer del carbón activado nuestro colorante adsorbido para poder volver a utilizar nuestra columna de nuevo. Durante la regeneración, el adsorbato se desorbe desde la superficie hacia otra fase. Dependiendo de la fase elegida (líquida o gas) se puede clasificar el proceso como desorción en fase gas o desorción en fase líquida.

La desorción en fase gas se puede realizar mediante la capacidad térmica del material: desorción térmica o desorción mediante vapor. En ambos casos se emplea para adsorbatos volátiles.

La desorción en fase líquida tiene lugar cuando la adsorción del nuevo líquido es más débil a la adsorción que había tenido con el líquido anterior (el de la disolución original). Este líquido nuevo puede ser un nuevo disolvente en el cual nuestro adsorbato es más soluble que en el agua (disolución original) o también puede ser un líquido acuoso en el cual se ha modificado previamente una propiedad influyente en la adsorción como la temperatura, el PH, la concentración, etc.

Una gráfica modelo de lo que sería la curva de elución en un proceso de desorción en lecho fijo sería la siguiente figura:

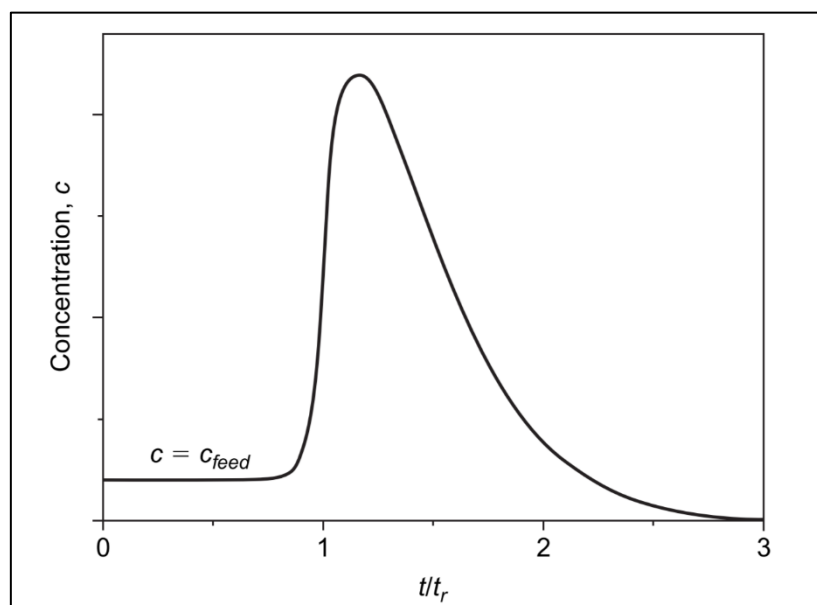


Figura 10 Curva de elución en un proceso de desorción ^[1]

Este es un proceso el cual no se va a estudiar con detalle en este trabajo, pero que será importante conocer para determinar el tiempo de regeneración de la columna diseñada. Este valor es muy importante, ya que con él podremos saber el número exacto de columnas que deberemos introducir en nuestra instalación para que el proceso de adsorción no se detenga.

2. PROBLEMA A RESOLVER

Para el diseño de la columna de adsorción se ha planteado el siguiente problema:

Una empresa de producción de ropa infantil emplea el tinte AB80 como producto principal a la hora de tintar sus prendas. Al final del día, la empresa ha producido un total de 200 prendas, empleando un uso de agua de 170 L por cada kilo de prenda tintada. Se conoce que el agua contaminada que emite la empresa sale con una concentración de 80 g/m³ de tinte en agua. La empresa de textil trabaja durante las 24 h al día, sin detener las máquinas.

Aproximadamente se emplean 10 g de tinte por cada 500 g de tejido. Además, sabemos que cada prenda pesa sobre 120 g. Con estos datos podemos calcular el peso total de tejido que produce la empresa y con ello, el peso total de tinte empleado para teñir las 200 prendas.

También sabemos que se emplean 170 L de agua por cada kilo de prenda tintada, esto nos permite calcular la cantidad de agua total empleada en las 200 prendas. Los datos quedan recogidos en la siguiente tabla:

Masa total de tejido (por día) (g)	24000
Masa total de tinte (por día) (g)	480
Litros de agua (por día) (L)	4080 (4.08 m ³)
Concentración de entrada (g/m³)	2.4
Caudal de agua a tratar (L/min)	4.2

Tabla 2 Características del problema planteado para diseñar la columna de adsorción

A la hora de diseñar la columna emplearemos un carbón activo Filtrasorb 400, cuyas características se mencionarán a continuación.

2.1. Adsorbato: colorante Acid Blue 80

El ácido azul 80 (AB80) va a ser nuestro adsorbato en el trabajo, va a ser nuestro colorante contaminante que deseamos eliminar. Su estructura molecular se puede apreciar en la siguiente imagen:

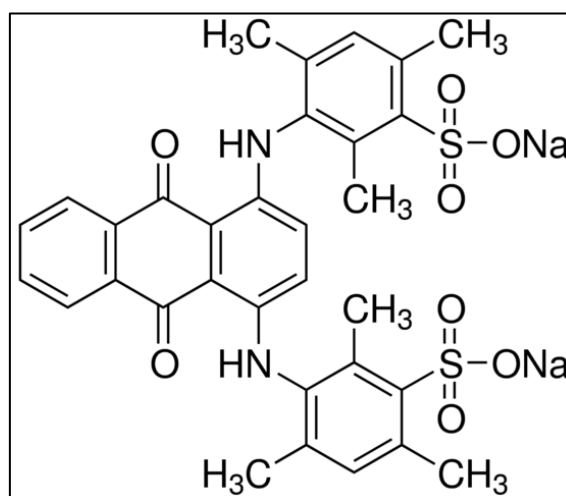


Figura 11 Molécula del AB80

Este colorante se trata de una sustancia orgánica cuya masa molecular es de 676.108 g/mol y presenta un contenido en colorante del 60%. Para su posible tratamiento se ha estudiado a una longitud de onda de 626 nm. Como datos moleculares, presenta 10 enlaces de hidrógeno y 4 enlaces rotatorios.

Se trata de un colorante o tinte empleado en la industria de color azul soluble en agua. Al reaccionar presenta diferentes colores secundarios, por ejemplo, en ácido nítrico se torna marrón y en ácido sulfúrico se vuelve un azul rojizo. Se emplea en industrias textiles para la lana, seda, tinte del cuero, fibra de poliamida, etc.

Su número característico de color es 61585.^[4]

2.2. Adsorbente: carbón activado, FILTRASORB 400 GAC.

El carbón activado FILTRASORB 400 se puede utilizar en una variedad de aplicaciones en fase líquida para la eliminación de compuestos orgánicos disueltos. FILTRASORB 400 se aplica con éxito desde hace más de 40 años en aplicaciones como la depuración de agua potable y de procesos, el tratamiento de aguas residuales y la purificación de alimentos, productos farmacéuticos e industriales. Este carbón activado se elabora a partir de grados selectos de carbón bituminoso a través de un proceso conocido como reaglomeración para producir un producto granular, duradero y de alta actividad, capaz de soportar la abrasión asociada al repetido lavado a contracorriente, transporte hidráulico y reactivación para su reutilización. La activación se controla cuidadosamente para producir un volumen significativo de poros de energía baja y alta para la adsorción eficaz de una amplia gama de contaminantes orgánicos de alto y bajo peso molecular.

Algunas características y beneficios de este carbón activado son:^[6]

- Se produce a partir de una mezcla pulverizada de carbones bituminosos de alta calidad resultando en un producto consistente y de alta calidad.
- Los gránulos de carbón se activan uniformemente a través de todo el gránulo, no sólo el exterior, lo que resulta en excelentes propiedades de adsorción y cinética de adsorción constante.
- La estructura reaglomerada asegura una humectación adecuada al tiempo que elimina el material flotante.
- Alta resistencia mecánica respecto a otras materias primas, reduciendo así la generación de finos durante el lavado a contracorriente y el transporte hidráulico.
- La segregación del lecho de carbón se mantiene después de repetidos lavados a contracorriente, asegurando que el perfil de adsorción permanece inalterado y, por lo tanto, maximiza la vida del lecho.
- El reaglomerado presenta una alta resistencia a la abrasión, que proporciona un excelente rendimiento de reactivación.
- Es un tipo de carbón de alta densidad que resulta en una mayor capacidad de adsorción por unidad de volumen.

Las características específicas empleadas en este trabajo vienen recogidas por la siguiente tabla:

Densidad del material (g/cm³)	1.3
Densidad de partícula (g/cm³)	0.54
Diámetro medio de partícula (µm)	605

Tabla 3 Características del carbón activo ^[6]

3. OBJETIVOS DEL TRABAJO

El principal objetivo de este trabajo es diseñar una columna de adsorción para una concentración de entrada de 2.4 g/m^3 y un caudal de 4.2 L/min . Para ello deberemos obtener un modelado matemático el cual se encuentre directamente relacionado con la determinación de las isothermas de equilibrio, centrándose sobre todo en el uso del carbón activo (Filtrisorb 400) como adsorbente y un colorante (AB80) que se encuentra en el agua como adsorbato (o soluto). Así podremos determinar un modelado matemático el cual este asociado a unas isothermas de adsorción, se emplearán las isothermas de Langmuir y las isothermas de Freundlich. De donde tendremos que cumplir una serie de objetivos, que se enumeraran a continuación:

- Estudiar los modelos matemáticos que describan los experimentos para la obtención de isothermas de equilibrio, los experimentos cinéticos de adsorción en tanques discontinuos.
- Establecer el funcionamiento de una columna de adsorción en continuo.
- Ajustar los parámetros necesarios en los modelados matemáticos anteriores correspondientes al equilibrio y la cinética.
- Diseñar la columna de adsorción característica.
- Diseñar la instalación hidráulica necesaria para la columna de adsorción.
- Estimar un coste económico de toda la instalación.

4. METODOLOGÍA A SEGUIR

Para poder cumplir todos los objetivos planteados en el apartado anterior, deberemos establecer una metodología práctica que nos permita lograrlos fácilmente.

En primer lugar, para poder conseguir diseñar la instalación de la columna de adsorción deberemos conocer que es lo que ocurre entre el carbón activo y nuestro colorante. Para ello, estudiaremos varias isothermas de equilibrio a partir de datos experimentales con el fin de obtener las respectivas ecuaciones y sus parámetros característicos. En el caso específico de este trabajo, se estudiarán las isothermas de Langmuir y de Freundlich.

En segundo lugar, se estudiará la cinética de adsorción, con los parámetros obtenidos del equilibrio podremos simular el comportamiento de los datos experimentales (en discontinuo). Para ello, podremos un algoritmo de cinco pasos:

- 1) Cálculo de q_{eq0} dependiendo de su equilibrio: Freundlich o Langmuir.
- 2) Cálculo de C_n .
- 3) Cálculo de C_{sn} (en transferencia de materia interna solamente, este paso se omite)
- 4) Cálculo de q_{sn} (en transferencia de materia externa solamente, este paso se omite)
- 5) Cálculo de la ecuación diferencial: $\frac{d\bar{q}_n}{dt}$.

Tras obtener la simulación, podremos obtener los parámetros de transferencia de materia interna y externa. De ambos coeficientes, emplearemos el de transferencia interna para el diseño de la columna de adsorción.

En tercer lugar, se validará el modelo matemático de la columna para unos datos experimentales y se diseñará finalmente la columna de adsorción. Para ello necesitaremos los parámetros obtenidos del equilibrio y el coeficiente de transferencia de materia interna obtenido en los experimentos de la cinética. Se planteará el problema, se calculará el coeficiente de transferencia de materia externa mediante correlaciones y finalmente obtendremos las dimensiones de la columna de adsorción deseada. Además, se observará el comportamiento que presenta la concentración y la carga a lo largo de la columna en sí.

En cuarto lugar, se diseñará la instalación hidráulica. Estableciendo unas dimensiones de los elementos de la instalación y calculando las pérdidas de carga del circuito dimensionado previamente podremos caracterizar la bomba necesaria para nuestra instalación final.

En quinto y último lugar, se calculará una estimación económica real del proceso. Esto nos permitirá conocer si la propuesta del trabajo es interesante desde el punto técnico-económico.

5. MODELADO MATEMÁTICO

Respecto a la parte de modelado, cabe mencionar que todo el apartado de la cinética de adsorción se ha realizado en experimentos de tanque agitado en discontinuo, es decir, en tanques con un continuo agitamiento y tomando muestras cada cierto tiempo. En apartado vamos a realizar el modelado y simulación teniendo en cuenta varios modelos matemáticos. Las ecuaciones generales del modelado el cual se va a tratar posteriormente en los subapartados son:

- El balance de materia global que tiene lugar en la adsorción:

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = -\frac{V_L}{m_A} \cdot \frac{dC}{dt} \quad (7)$$

$$\bar{q} = \frac{V_L}{m_A} \cdot [C_0 - C(t)] \quad (8)$$

$$C = C_0 - \frac{m_A}{V_L} \cdot \bar{q} \quad (9)$$

- Las ecuaciones de equilibrio que tienen lugar, ya sea Freundlich o Langmuir:

$$q_s = K \cdot C_s^n \quad (10)$$

$$q_s = \frac{q_m \cdot b \cdot C_s}{1 + b \cdot C_s} \quad (11)$$

Donde:

- q_s es la carga en la superficie externa de la partícula adsorbente (g/g)
- C_s es la concentración en la superficie externa de la partícula adsorbente (g/m³)

- La ecuación de transferencia de materia interna:

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = k_s \cdot \frac{A_s}{V_A} \cdot (q_s - \bar{q}); \quad \bar{q}(0) = 0 \quad (12)$$

Donde:

- A_s es el área externa total entre adsorbente y partícula (m²)
- V_A es el volumen del adsorbente (m³)
- k_s es el coeficiente de transferencia de materia interna (m/min)

En esta ecuación podemos observar claramente el efecto de nuestro modelo elegido de LDF, ya que nuestra carga pasa de q a llamarse \bar{q} (carga media). Esto es debido a la simplificación tomada.

- La ecuación de transferencia de materia externa:

$$\frac{dC}{dt} = -k_F \cdot \frac{A_s}{m_A} \cdot \frac{m_A}{V_L} \cdot (C - C_s); \quad C(0) = C_0 \quad (13)$$

Donde:

- k_F es el coeficiente de transferencia de materia externa (m/min)

Para evitar una complejidad matemática, vamos a tener en cuenta estas dos simplificaciones:

$$k_F \cdot \frac{A_S}{m_A} = k_F^* \quad (14)$$

$$k_S \cdot \frac{A_S}{V_A} = k_S^* \quad (15)$$

Que finalmente sustituyéndolas en las ecuaciones (12) y (13) queda de la forma:

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = k_S^* \cdot (q_s - \bar{q}); \quad \bar{q}(0) = 0 \quad (16)$$

$$\frac{dC}{dt} = -k_F^* \cdot \frac{m_A}{V_L} \cdot (C - C_s); \quad C(0) = C_0 \quad (17)$$

5.1. Modelado cinético que considera la transferencia de masa externa como la transferencia de masa interna.

A partir de la ecuación general (7) y combinando las ecuaciones que hemos planteado anteriormente: (16) y (17), podemos obtener la ecuación:

$$k_S^* \cdot (q_s - \bar{q}) = -\frac{V_L}{m_A} \cdot [-k_F^* \cdot \frac{m_A}{V_L} \cdot (C - C_s)] \quad (18)$$

$$k_S^* \cdot (q_s - \bar{q}) = k_F^* \cdot (C - C_s) \quad (19)$$

Donde sustituyendo q_s por sus respectiva isoterma seleccionada: (10) o (11) , obtendremos:

- Freundlich:

$$k_S^* \cdot (K \cdot C_s^n - \bar{q}) = k_F^* \cdot (C - C_s) \quad (20)$$

- Langmuir:

$$k_S^* \cdot \left(\frac{q_m \cdot b \cdot C_s}{1 + b \cdot C_s} - \bar{q} \right) = k_F^* \cdot (C - C_s) \quad (21)$$

Para poder simplificar estas ecuaciones, el modelo cinético se va a reformular utilizando cantidades adimensionales, es decir, que los valores solamente puedan variar en un rango de cero a la unidad. Para ello debemos dividir la concentración entre la concentración máxima (que coincide con la que tenemos inicialmente (C_0)) y dividir la carga del colorante entre el valor de la carga que se encuentra en equilibrio con la concentración inicial (q_{eq0}).

Una vez tenemos todas las ecuaciones, las cargas y las concentraciones adimensionales se van a dar de forma que:

$$\frac{\bar{q}}{q_{eq0}} = \bar{q}_n \quad (22) \qquad \frac{q_s}{q_{eq0}} = q_{sn} \quad (23)$$

$$\frac{C}{C_0} = C_n \quad (25) \qquad \frac{C_s}{C_0} = C_{sn} \quad (24)$$

Donde quedan definidas en la siguiente imagen:

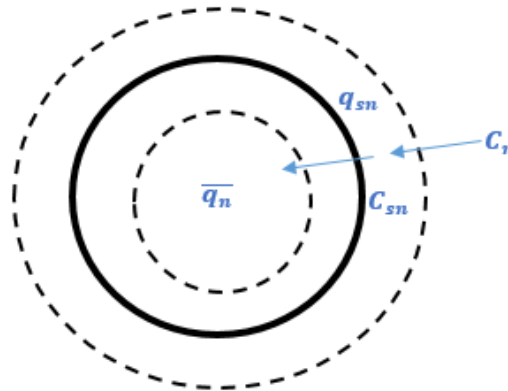


Figura 12 Definición de las variables normalizadas

Para poder obtener el valor de q_{eq0} deberemos sustituir en las ecuaciones (10) u (11) para un valor de $C_s = C_0$, es decir, sustituiremos el valor de C_0 en las ecuaciones de equilibrio para poder obtener su respectiva q_0 :

- Freundlich:

$$q_{eq0} = K \cdot C_0^n \quad (26)$$

- Langmuir:

$$q_{eq0} = \frac{q_m \cdot b \cdot C_0}{1 + b \cdot C_0} \quad (27)$$

Para normalizar las ecuaciones que necesitamos para sustituir en la principal (18) y (19), debemos normalizar previamente la ecuación (7) y las respectivas ecuaciones de equilibrio: (10) y (11). Estas quedan de la forma:

$$C = C_0 - \frac{m_A}{V_L} \cdot \bar{q} \rightarrow C_n \cdot C_0 = C_0 - \frac{m_A}{V_L} \cdot \bar{q}_n \cdot q_{eq0} \quad (28)$$

$$q_s = K \cdot C_s^n \rightarrow q_{sn} \cdot q_{eq0} = K \cdot (C_{sn} \cdot C_0)^n \quad (29)$$

$$q_s = \frac{q_m \cdot b \cdot C_s}{1 + b \cdot C_s} \rightarrow q_{sn} \cdot q_{eq0} = \frac{q_m \cdot b \cdot C_{sn} \cdot C_0}{1 + b \cdot C_{sn} \cdot C_0} \quad (30)$$

Una vez pasamos a la normalización empleando (22), (25), (24) y (28) de la ecuación principal: (18) y (19), observamos que queda de la siguiente forma:

- Freundlich:

$$k_s^* \cdot (K \cdot (C_{sn} \cdot C_0)^n - q_{eq0} \cdot \bar{q}_n) = k_F^* \cdot C_0 \cdot (C_n - C_{sn}) \quad (31)$$

Donde:

$$C_n = 1 - \frac{m_A \cdot \bar{q}_n \cdot q_{eq0}}{V_L \cdot C_0} \quad (32)$$

La ecuación (32) es la simplificación de la ecuación (28).

Para su completa resolución se ha empleado la ecuación (26) para definir q_{eq0} , la ecuación (29) para definir q_{sn} y la ecuación (12) normalizada.

- Langmuir:

$$k_s^* \cdot \left(\frac{q_m \cdot b \cdot C_{sn} \cdot C_0}{1 + b \cdot C_{sn} \cdot C_0} - q_{eq0} \cdot \bar{q}_n \right) = k_F^* \cdot C_0 \cdot (C_n - C_{sn}) \quad (33)$$

Para su completa resolución se ha empleado la ecuación (27) para definir q_{eq0} , la ecuación (30) para definir q_{sn} , la ecuación (12) normalizada y la ecuación (32) para definir la C_n .

Finalmente se procede a la resolución de la ecuación diferencial en este caso que sería:

$$\frac{d\bar{q}_n}{dt} = k_s^* \cdot (q_{sn} - \bar{q}_n); \quad \bar{q}_n(0) = 0 \quad (34)$$

5.2. Modelado cinético que considera la transferencia de masa externa.

En el caso en el cual solamente tenemos en cuenta la transferencia de materia externa, podemos emplear una aproximación en la cual el coeficiente de transferencia de materia interna lo aproximamos al infinito, obtendremos que: $\bar{q} \approx \bar{q}_s$

Si despejamos la ecuación (13) de forma que obtengamos un $d\bar{q}$, obtendremos la siguiente expresión:

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = k_F^* \cdot (C - C_s); \quad \bar{q}(0) = 0 \quad (35)$$

Una vez normalizada la ecuación (35) empleando (25) y (24) observamos que queda de la forma:

$$\frac{d\bar{q}_n}{dt} = \frac{k_F^* \cdot C_0 \cdot (C_n - C_{sn})}{q_{eq0}}; \quad \bar{q}_n(0) = 0 \quad (36)$$

Mediante la ecuación (32) para el despeje de C_n y las ecuaciones (28) o (29), dependiendo que método se escoja del equilibrio para despejar C_{sn} , conseguiremos resolver la ecuación diferencial.

5.3. Modelado cinético que considera la transferencia de masa interna.

En el caso en el cual solamente tenemos en cuenta la transferencia de materia interna, podemos emplear una aproximación en la cual el coeficiente de transferencia de materia externa lo aproximamos al infinito, obtendremos que: $C \approx C_s$

A partir del balance de transferencia interna (12) y el balance de materia (7), podemos obtener la siguiente ecuación:

$$\frac{d\bar{q}}{dt} = k_s^* \cdot (q_s - \bar{q}); \quad \bar{q}(0) = 0 \quad (37)$$

Si normalizamos esta ecuación empleando (22) y (24) obtendremos:

$$\frac{d\bar{q}_n}{dt} = k_s^* \cdot (q_{sn} - \bar{q}_n); \quad \bar{q}_n(0) = 0 \quad (38)$$

Donde el valor de q_{sn} lo podremos obtener de las ecuaciones (29) o (30), dependiendo del equilibrio seleccionado.

5.4. Comprobación del modelado de la cinética de adsorción

Para este apartado, se han empleado los siguientes valores de simulación:

C_0 (g/L)	0.15
m_A (g)	1.7
V_L (L)	1.7
Isoterma de Langmuir: q_m (g/g)	0.17
Isoterma de Langmuir: b (m ³ /g)	0.16
Isoterma de Freundlich: K ((g·m ³)/(g·g)) ⁿ	0.056
Isoterma de Freundlich: n	0.25
k_F^* (L/min·g)	0.08
k_s^* (1/min)	0.001

Cabe mencionar, que el coeficiente de transferencia de materia interna y el coeficiente de transferencia de materia externa variarán sus valores dependiendo del modelado matemático que estemos empleando, estos valores se verán reflejados en las leyendas de las mismas figuras.

5.4.1. Modelos que tienen en cuenta tanto transferencia de materia externa como interna

5.4.1.1. Variación de la transferencia de materia externa

- Freundlich:

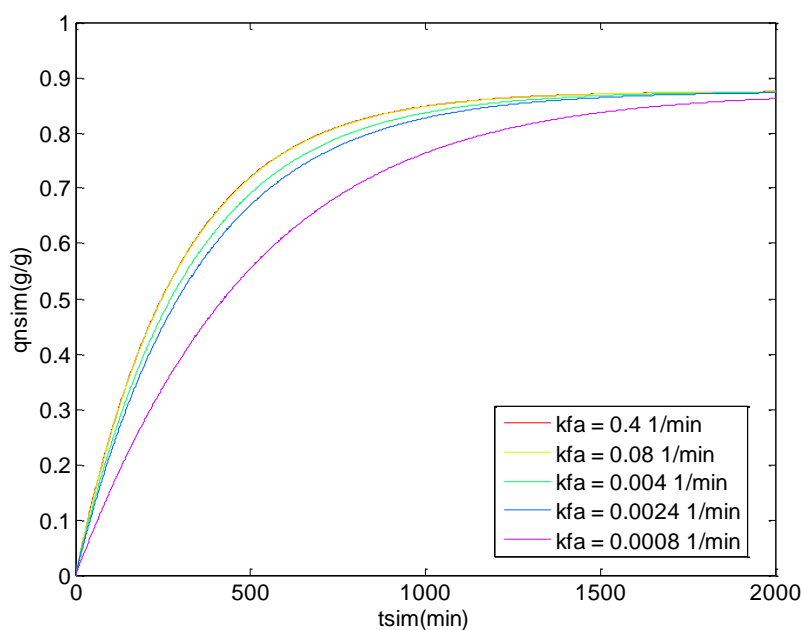


Figura 13 Variación de la constante de transferencia de materia externa manteniendo la interna constante (Freundlich)

- Langmuir:

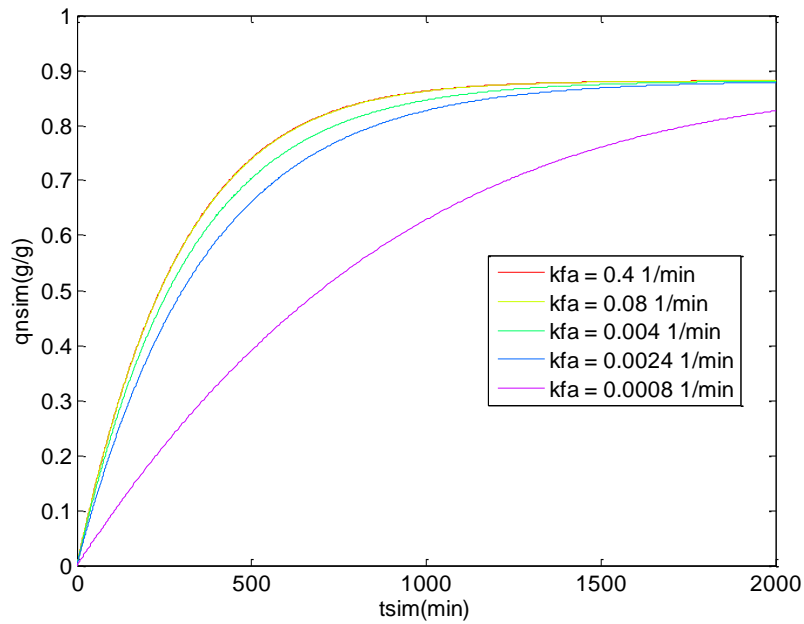


Figura 14 Variación de la constante de transferencia de materia externa manteniendo la interna constante (Langmuir)

Tal y como se puede apreciar en las **Figura 13** y **Figura 14**, si mantenemos el coeficiente de transferencia de materia interna constante y variamos el valor numérico del coeficiente de transferencia externa, a medida que aumentamos dicho coeficiente se estabiliza antes. Esto significa que para que el coeficiente de materia externa pueda ser menospreciado deberemos aumentar mucho su valor, para ello podemos variar la velocidad de agitación (a mayor velocidad, mayor k_F^*).

Tal y como se puede apreciar en las **Figura 13**, **Figura 14** y en las posteriores de este apartado 5.4, tenemos una k_S y una k_F en las leyendas. Estos parámetros coinciden con k_S^* y k_F^* respectivamente. Se ha denominado de esta forma en el programa matemático porque así se requería.

5.4.1.2. Variación de la transferencia de materia interna

- Freundlich:

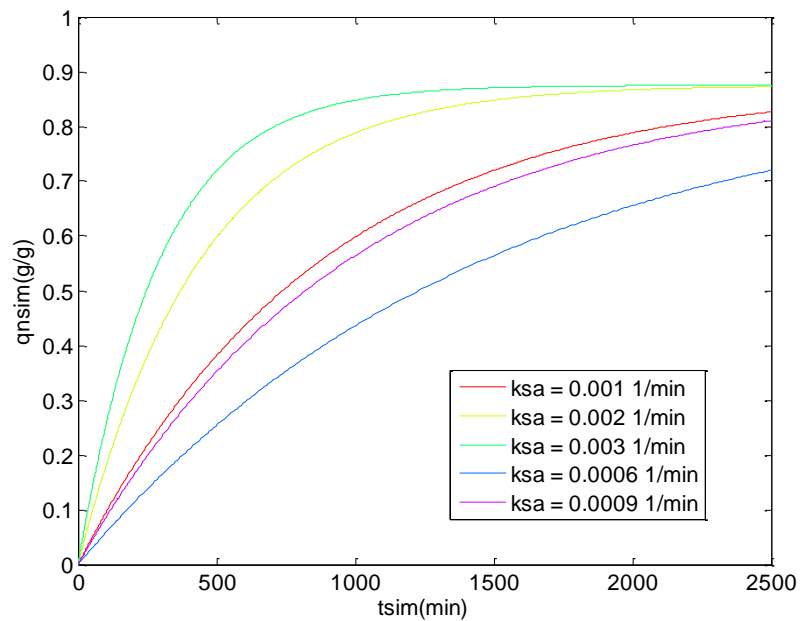


Figura 15 Variación de la constante de transferencia de materia interna manteniendo la externa constante (Freundlich)

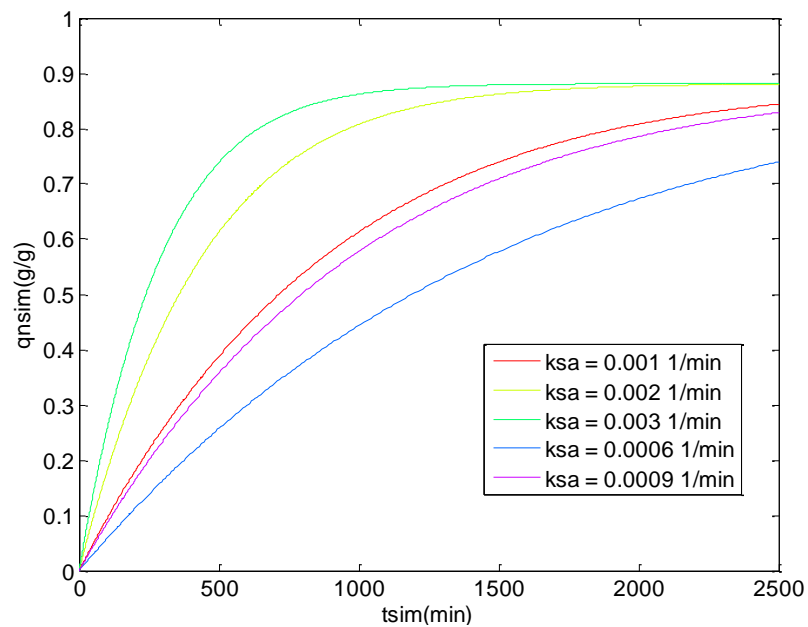


Figura 16 Variación de la constante de transferencia de materia interna manteniendo la externa constante (Langmuir)

Tal y como se puede apreciar en las figuras **Figura 15** y **Figura 16**, si mantenemos el coeficiente de transferencia de materia externa constante y variamos el valor numérico del coeficiente de transferencia interna, a medida que aumentamos dicho coeficiente se estabiliza antes. Esto significa que para que el coeficiente de materia interna pueda ser menospreciado deberemos aumentar mucho su valor, para ello deberemos ir modificando (aumentando) la temperatura de trabajo, el tamaño de partícula y su radio.

5.4.2. Modelos que tienen en cuenta solamente transferencia de materia externa

En este apartado se va a mostrar como al aumentar el coeficiente de transferencia de materia interna (menospreciándolo) la tendencia que va a obtener equivale a la misma que en el caso de tener solamente transferencia de materia externa.

- Freundlich:

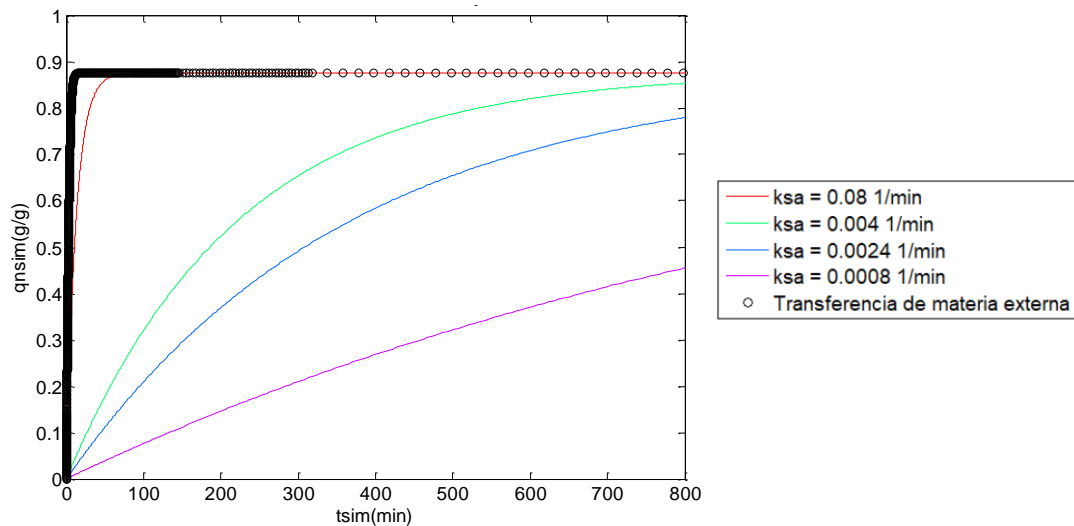


Figura 17 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia externa (Freundlich)

- Langmuir:

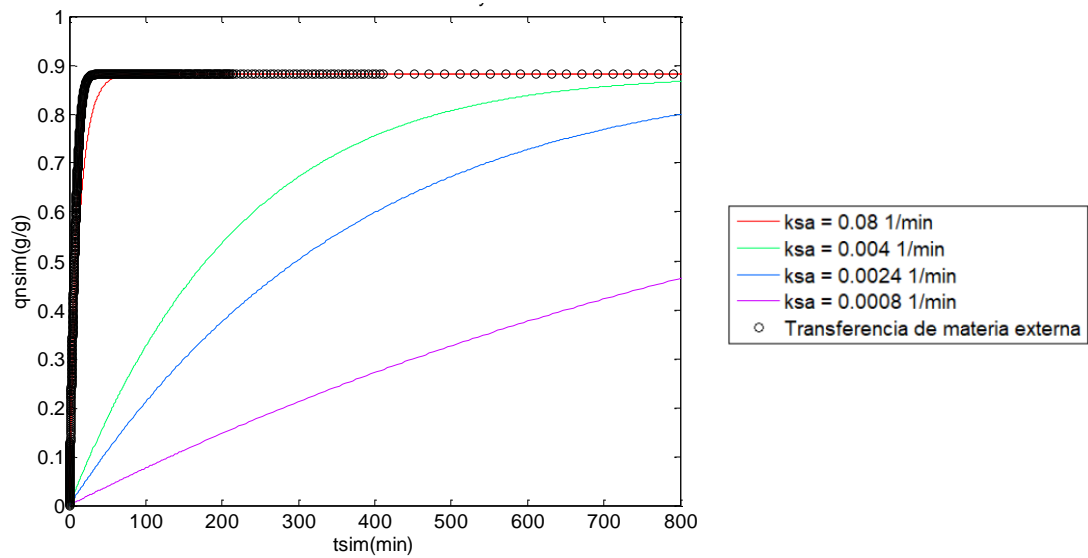


Figura 18 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia externa (Langmuir)

5.4.3. Modelos que tienen en cuenta solamente transferencia de materia interna

En este apartado se va a mostrar como al aumentar el coeficiente de transferencia de materia externa (menospreciándolo) la tendencia que va a obtener equivale a la misma que en el caso de tener solamente transferencia de materia interna.

- Freundlich:

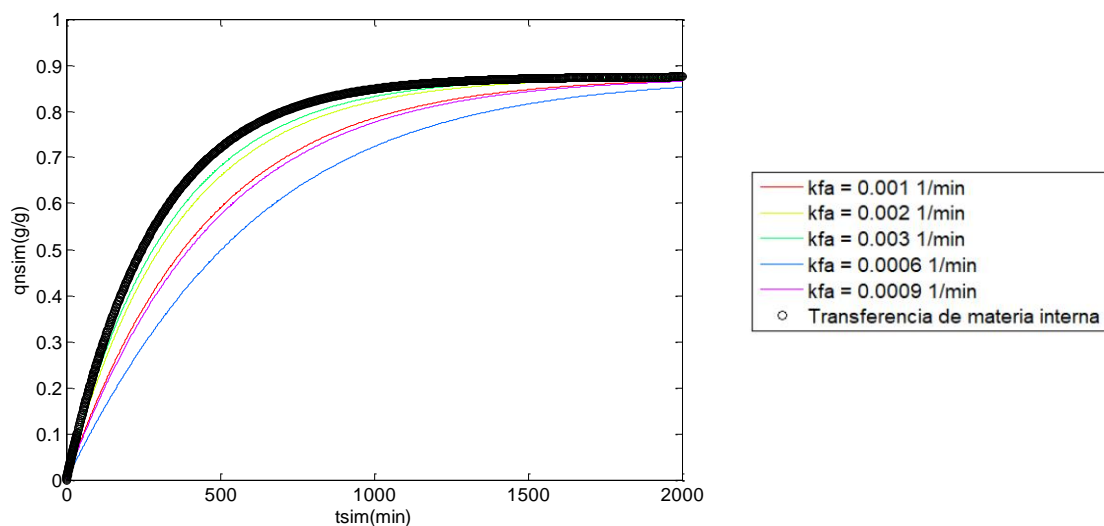


Figura 19 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia interna (Freundlich)

- Langmuir:

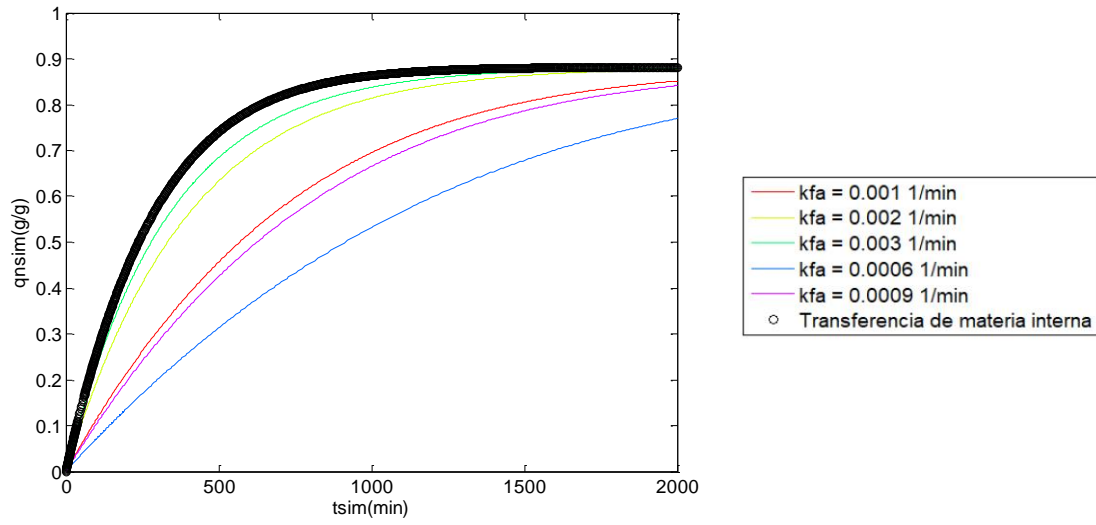


Figura 20 Comparación entre transferencia de materia interna y transferencia de materia externa con transferencia de materia interna (Langmuir)

5.5. Modelado de la columna

En este apartado se va a modelar el comportamiento de una columna de adsorción y simular su funcionamiento. La ecuación general para la fase líquida de diseño de una columna de adsorción dada en bibliografía ^[1] viene representada de la forma:

$$v_F \cdot \frac{\partial c}{\partial z} + \varepsilon_B \cdot \frac{\partial c}{\partial t} + k_F \cdot dA_s \cdot (C - C_s) = 0 \quad (39)$$

Donde:

- v_F es la velocidad superficial del fluido (m/min)
- ε_B es la porosidad del lecho (adimensional)
- ρ_B es la densidad del lecho (g/m³)

Para este trabajo se ha decidido obtener la propia ecuación de balance de materia y comprobarla con la de la bibliografía (39). Para ello, podemos observar en la siguiente figura mostrada el balance de materia:

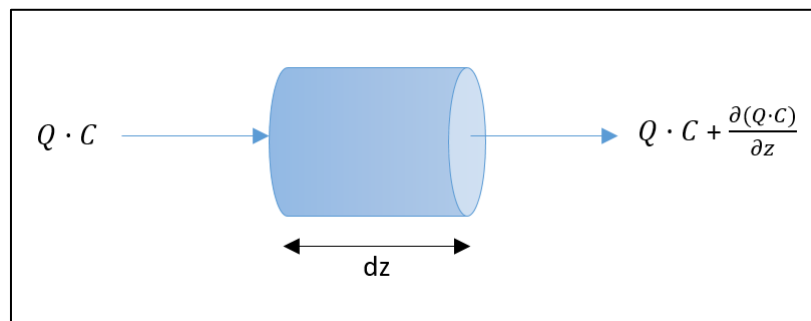


Figura 21 Balance de materia en el líquido de la columna

Pero como se conoce, dentro de la columna también tenemos partículas, con lo que, al término de salida del balance de materia, deberemos añadir lo que desaparece en el carbón activo. Este término viene condicionado por el coeficiente de transferencia de materia externa, el gradiente de concentraciones y el área transversal de las esferas.

Teniendo en cuenta el balance de materia presentado en la **Figura 21**, lo que desaparece en la partícula y el término de acumulación, obtenemos la siguiente ecuación:

$$Q \cdot C - Q \cdot C - \frac{\partial(Q \cdot C)}{\partial z} - k_F \cdot dA_s \cdot (C - C_s) = \frac{dC}{dt} \cdot \varepsilon_B \cdot dz \cdot S \quad (40)$$

Donde:

- Q es el caudal de entrada a la columna (m³/min)
- S es el área transversal del diferencial de columna (m²)

Para su correcta resolución, deberemos definir previamente el dA_s .

$$dA_s = \frac{A_{esfera}}{V_{esfera}} \cdot S \cdot dz \cdot (1 - \varepsilon_B) = \frac{3 \cdot S \cdot dz \cdot (1 - \varepsilon_B)}{r_p} \quad (41)$$

Donde:

- r_p es el radio de la partícula (m)
- A_{esfera} es el área de una esfera por definición ($4 \cdot \pi \cdot r_p^2$) (m²)
- V_{esfera} es el volumen de una esfera por definición ($\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_p^3$) (m³)

Una vez definido el término del área superficial, si lo sustituimos y despejamos la ecuación (40), obtendremos el balance de materia en el fluido de nuestra columna:

$$-\frac{Q}{S} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{3 \cdot (1 - \varepsilon_B) \cdot k_F}{r_p} \cdot (C - C_s) = \frac{dC}{dt} \cdot \varepsilon_B \quad (42)$$

Una vez definido el balance de materia en el líquido, podemos proceder a la resolución del balance de materia en la partícula. Para ello, no tendremos salida, solamente tendremos un término de entrada y otro de acumulación. Si planteamos el balance de materia como tal, obtendremos la siguiente ecuación:

$$k_s \cdot \rho_p \cdot (q_s - \bar{q}) \cdot dA_s = \frac{d(\bar{q} \cdot \rho_p \cdot (1 - \varepsilon_B))}{dt} \cdot S \cdot dz \quad (43)$$

Donde:

- ρ_p es la densidad de la partícula (g/m³)

A su vez, si sustituimos (41) en nuestro nuevo balance de materia y despejamos, obtendremos la ecuación deseada:

$$k_s \cdot \frac{3}{r_p} \cdot (q_s - \bar{q}) = \frac{d\bar{q}}{dt} \quad (44)$$

Para una mejor resolución matemática, al igual que ya mencionado en la cinética, se ha recurrido a dos simplificaciones, estas han sido:

$$k_s \cdot \frac{A_s}{V_A} = k_s \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r_p^2}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_p^3} = k_s \cdot \frac{3}{r_p} = k_s^* \quad (45)$$

$$k_F \cdot \frac{A_s}{m_A} = k_F \cdot \frac{4 \cdot \pi \cdot r_p^2}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_p^3 \cdot \rho_p} = \frac{3 \cdot (1 - \varepsilon_B) \cdot k_F}{r_p \cdot \rho_p} = k_F^* \quad (46)$$

El siguiente paso, es establecer la relación directa entre la transferencia de materia en el líquido y la transferencia de materia en el sólido. Para ello, deberemos igualar los términos de transferencia empleados en los balances de materia entre el líquido (42) y la partícula (44). Esta relación la podemos observar en la siguiente ecuación:

$$\frac{3 \cdot (1 - \varepsilon_B) \cdot k_F}{r_P \cdot \rho_p} \cdot (C - C_s) = k_S \cdot \frac{3}{r_P} \cdot (q_s - \bar{q}) \quad (47)$$

Que, además, haciendo uso de las recientes simplificaciones matemáticas quedaría de la forma:

$$k_S^* \cdot (q_s - \bar{q}) = k_F^* \cdot (C - C_s) \quad (48)$$

Donde las condiciones que vienen definidas por las ecuaciones diferenciales trabajadas son:

- Condición inicial:

$$C(0, z) = C_0(z) \quad (49)$$

$$\bar{q}(0, z) = \bar{q}_0(z) \quad (50)$$

- Condición de contorno:

$$C(t, 0) = C_e(t) \quad (51)$$

Una vez se han definido las ecuaciones y sus condiciones inicial y de contorno, deberemos normalizarlas y discretizarlas en capas. Para un mejor conocimiento de lo que ocurre internamente en las capas, en la siguiente figura se mostrará la discretización empleada:

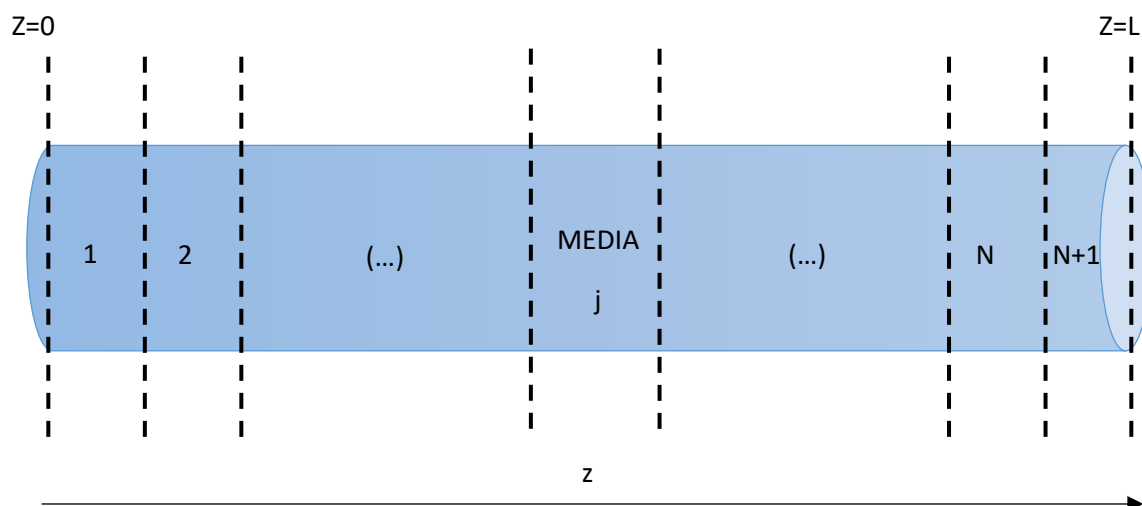


Figura 22 Discretización de la columna

Donde:

- $Z=0$ nos indica el inicio de la columna, por donde entrará nuestra agua contaminada que deberemos adsorber.
- $Z=L$ nos indica el final de nuestra columna, por donde saldrá nuestra agua ya depurada.
- L es la longitud de la columna (m)

Donde normalizando las ecuaciones empleando: (22), (23), (24) y (25), y discretizándolas según la figura mostrada obtendremos:

$$-\frac{Q}{S} \cdot \frac{C_n(j) - C_n(j-1)}{L/N} - \frac{3 \cdot (1 - \varepsilon_B) \cdot k_F}{r_P} \cdot (C_n(j) - C_{sn}(j)) = \varepsilon_B \cdot \frac{dC_n(j)}{dt} \quad j=2 \dots N+1 \quad (52)$$

$$\frac{d\bar{q}_n(j)}{dt} = k_s^* \cdot (q_{sn}(j) - \bar{q}_n(j)) \quad j=1 \dots N+1 \quad (53)$$

$$k_s^* \cdot q_{eqe} \cdot (q_{sn}(j) - \bar{q}_n(j)) = \frac{3 \cdot k_F}{r_P \cdot \rho_p} \cdot C_e \cdot (C_n(j) - C_{sn}(j)) \quad j=1 \dots N+1 \quad (54)$$

Donde las condiciones que vienen definidas por la ecuación (52) y (53) son:

- Condición inicial:

$$C_{nj}(0, z) = C_{0n}(z_j) \quad j=2 \dots N+1 \quad (55)$$

$$\bar{q}_{nj}(0, z) = \bar{q}_{0n}(z_j) \quad j=2 \dots N+1 \quad (56)$$

- Condición de contorno:

$$C_n(t, 0) = C_{en}(t) \quad (57)$$

Las variables de relación como q_{eqe} , C_{sn} y q_{sn} vienen definidas por las ecuaciones ya mostradas previamente para la cinética:

$$q_{eqe} = \frac{q_m \cdot b \cdot C_e}{1 + b \cdot C_e} \quad (58)$$

$$q_s = \frac{q_m \cdot b \cdot C_s}{1 + b \cdot C_s} \rightarrow q_{sn} \cdot q_{eqe} = \frac{q_m \cdot b \cdot C_{sn} \cdot C_e}{1 + b \cdot C_{sn} \cdot C_e} \quad (59)$$

Uno de los objetivos principales a hallar para un diseño de una columna de adsorción es la curva de ruptura. Esta la obtendremos cuando representemos el perfil de concentraciones a la salida de la columna, desde el instante inicial hasta que se sature. El punto medio de esta curva nos indicará el tiempo medio de la curva de ruptura de adsorción.

Una vez ya conocidas las tres ecuaciones primordiales para el correcto diseño de una columna de adsorción: (42), (44) y (48), deberemos calcular de forma empírica el valor de nuestro coeficiente de transferencia de materia externo, ya que el valor numérico del coeficiente de materia interno, será el único dato que podamos emplear de nuestros experimentos ya realizados en batch.

Para el cálculo del coeficiente de materia externo, necesitaremos calcular previamente algunos números adimensionales característicos de nuestro líquido. En la siguiente **Tabla 4** podemos observar las diferentes correlaciones que existen para el cálculo del número de Sherwood:

Authors	Correlation	Validity range
Williamson et al. (1963)	$Sh = 2.4 \varepsilon_B Re^{0.34} Sc^{0.42}$	$0.08 < Re < 125;$ $150 < Sc < 1,300$
Wilson and Geankoplis (1966)	$Sh = 1.09 \varepsilon_B^{-2/3} Re^{1/3} Sc^{1/3}$	$0.0016 < \varepsilon_B Re < 55;$ $950 < Sc < 70,000$
Kataoka et al. (1972)	$Sh = 1.85[(1 - \varepsilon_B)/\varepsilon_B]^{1/3} Re^{1/3} Sc^{1/3}$	$Re (\varepsilon_B/[1 - \varepsilon_B]) < 100$
Dwivedi and Upadhyay (1977)	$Sh = (1/\varepsilon_B) [0.765(\varepsilon_B Re)^{0.18} + 0.365(\varepsilon_B Re)^{0.614}] Sc^{1/3}$	$0.01 < Re < 15,000$
Gnielinski (1978)	$Sh = [2 + (Sh_L^2 + Sh_T^2)^{0.5}] [1 + 1.5(1 - \varepsilon_B)]$ $Sh_L = 0.644 Re^{1/2} Sc^{1/3}$ $Sh_T = \frac{0.037 Re^{0.8} Sc}{1 + 2.443 Re^{-0.1} (Sc^{2/3} - 1)}$	$Re Sc > 500;$ $Sc < 12,000$
Ohashi et al. (1981)	$Sh = 2 + 1.58 Re^{0.4} Sc^{1/3}$ $Sh = 2 + 1.21 Re^{0.5} Sc^{1/3}$ $Sh = 2 + 0.59 Re^{0.6} Sc^{1/3}$	$0.001 < Re < 5.8$ $5.8 < Re < 500$ $Re > 500$
Vermeulen et al. (1973)	$k_F a_{VR} = \frac{2.62(D_L v_F)^{0.5}}{d_p^{1.5}}$	$\varepsilon_B \approx 0.4$

Tabla 4 Correlaciones para el cálculo del número adimensional de Sherwood ^[1]

Tal y como observamos, para poder obtener el valor del número de Sherwood, deberemos conocer previamente el valor del número de Reynolds y de Schmidt. Estos dos valores los obtendremos a partir de las siguientes ecuaciones:

$$Re = \frac{v_F \cdot d_p \cdot \rho_L}{\mu_L} \quad (60)$$

$$Sc = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_L} \quad (61)$$

Donde:

- μ_L es la viscosidad del líquido (g/(m·min))
- ρ_L es la densidad del líquido (g/m³)

Dependiendo del rango de valores en el cual se encuentren el número de Reynolds y el número de Schmidt se empleará una u otra correlación de la **Tabla 4**.

Por último, también deberemos conocer el valor del coeficiente de difusión acuosa (D_L). Para ello también existen tablas de correlaciones donde depende del rango del peso molecular del soluto se elige la indicada. Tal y como podemos observar en la **Tabla 5**:

Authors	Correlation	Nomenclature and units
Worch (1993)	$D_L = \frac{3.595 \cdot 10^{-14} T}{\eta M^{0.53}}$	T – temperature, K η – dynamic viscosity (solvent), Pa·s M – molecular weight (solute), g/mol
Hayduk and Laudie (1974)	$D_L = \frac{5.04 \cdot 10^{-12}}{\eta^{1.14} V_b^{0.589}}$	η – dynamic viscosity (solvent), Pa·s V_b – molar volume at boiling point (solute), cm ³ /mol
Wilke and Chang (1955)	$D_L = 7.4 \cdot 10^{-15} \frac{(\Phi M_{solv})^{0.5} T}{\eta V_b^{0.6}}$	M_{solv} – molecular weight (solvent), g/mol Φ – association factor (2.6 for water) T – temperature, K η – dynamic viscosity (solvent), Pa·s V_b – molar volume at boiling point (solute), cm ³ /mol
Polson (1950)	$D_L = 2.74 \cdot 10^{-9} M^{-1/3}$ for $M > 1,000$ g/mol	M – molecular weight (solute), g/mol

Tabla 5 Correlaciones para estimar el valor numérico del coeficiente de difusión acuosa ^[1]

Una vez obtenemos el valor de todos los parámetros adimensionales necesarios y el valor del coeficiente de difusión acuosa, ya podemos proceder a la obtención del coeficiente de transferencia de materia externa mediante la ecuación:

$$k_F = \frac{Sh \cdot D_L}{d_p} \quad (62)$$

Una vez obtenemos el valor del coeficiente de materia externo, finalmente podemos empezar con diseño de la columna.

6. EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN

Los datos experimentales de equilibrio presentes en este documento se han obtenido de unos artículos científicos ya realizado por Keith K.H. Choy, John F. Porter y Gordon McKay pertenecientes al departamento de ingeniería química, perteneciente a la Universidad de ciencias y tecnología localizada en Hong Kong. Ambos artículos se encuentran en la bibliografía de este trabajo: [7] y [8].

Los datos experimentales referentes al equilibrio para su estudio se han podido obtener gracias al primer artículo ^[7], concretamente a partir de la siguiente gráfica:

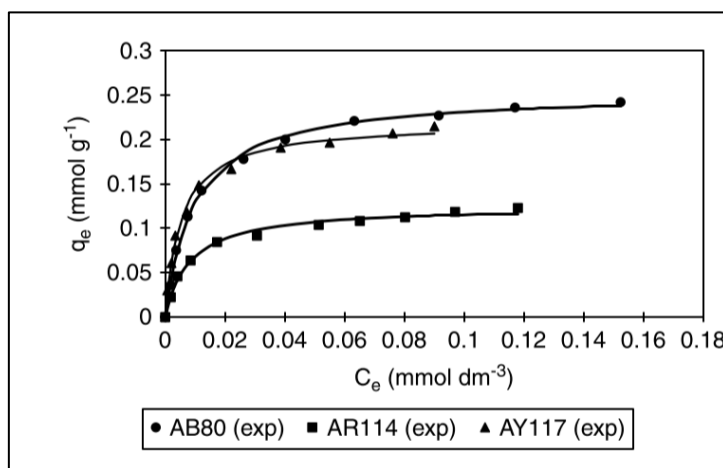


Figura 23 Gráfica experimental de Langmuir para tres colorantes estudiados

Donde nuestro colorante estudiado se trata del AB80, con lo que se han extraído los datos de la serie de datos de puntos circulares.

Las condiciones de trabajo que se han empleado para obtener los datos de equilibrio han sido los mismo extraídos del artículo ya mencionado, estos vienen recogidos en la siguiente tabla:

m_A (g)	1.7
V_L (L)	1.7
T (°C)	20 ± 2
Agitación (rpm)	400

Tabla 6 Características de los experimentos realizados

Para hacer el ajuste del equilibrio, se extrajeron esos mismos datos experimentales y se recalcularon a las unidades en las que se ha decidido trabajar en este proyecto. En el caso del equilibrio en gramos, metros cúbicos y moles. Para ello, los datos extraídos se tuvieron que multiplicar por el peso molecular del colorante AB80: 676g/mol y realizar la respectiva conversión a metros cúbicos.

Los datos obtenidos se han conseguido extraer gracias al programa: *Graph Data Extractor*.

El ajuste obtenido se muestra en la siguiente **Figura 24**. Este se ha obtenido gracias a una serie de algoritmos de ajuste programados mediante la herramienta matemática Matlab. Los resultados obtenidos han sido:

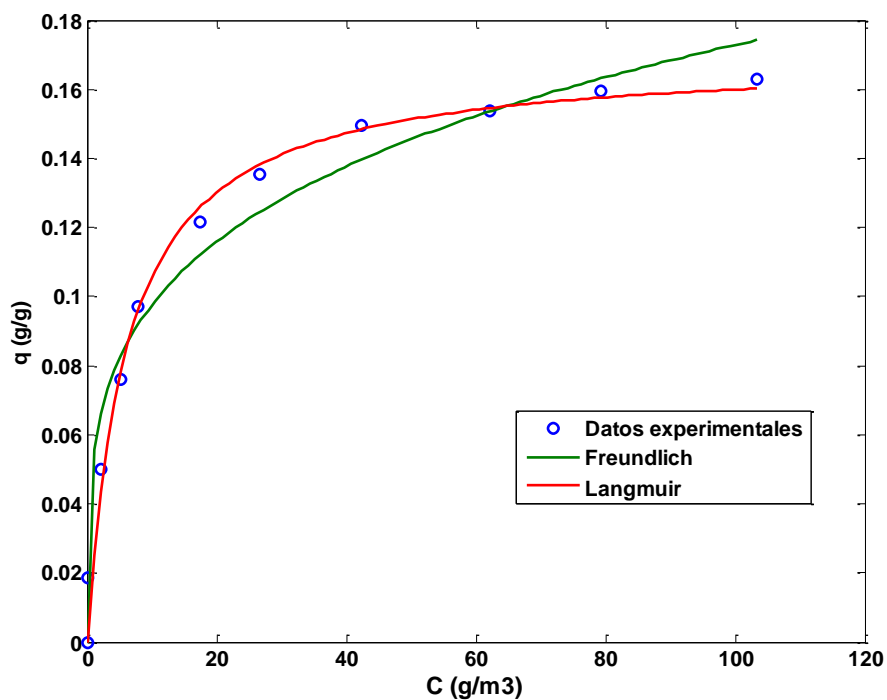


Figura 24 Comparación de las isotermas de Langmuir y Freundlich

En la figura mostrada podemos observar cómo se ajustan los diferentes modelos matemáticos de las respectivas isotermas estudiadas. Para cada una de las isotermas se han obtenido los valores numéricos de sus respectivas variables, estas han sido:

- Freundlich:
 - $K = 0.055 (\text{g} \cdot \text{m}^3 / \text{g} \cdot \text{g})^n$
 - $n = 0.25$
- Langmuir:
 - $q_m = 0.17 \text{ g/g}$
 - $b = 0.16 \text{ m}^3/\text{g}$

Como comprobación, en la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos en los datos bibliográficos y en las optimizaciones propias de la isoterma de Langmuir:

	Datos bibliográficos [7]	Datos obtenidos (Figura 24)
qm (g/g)	0.171	0.170
b (m³/g)	0.150	0.164

Tabla 7 Comparación de los valores de la isoterma de Langmuir de datos bibliográficos y datos obtenidos

Visualmente es complicado saber cuál de las dos es la óptima para la resolución del apartado del modelado. Por ello, se ha calculado la función objetivo que nos proporciona el programa optimizador Matlab, en el cual podemos observar el valor exacto de la suma de la diferencia de cuadrados entre el modelo simulado y los valores reales del algoritmo. El que tenga menor valor, significará que es más preciso. Los valores hallados han sido:

	Langmuir	Freundlich
Función objetivo	0.00042	0.0011

Tabla 8 Valores de la función objetivo de las isothermas estudiadas

A pesar de ello, se ha realizado todo el apartado de comprobación entre diferentes modelados cinéticos para ambas isothermas. Aunque para el desarrollo del trabajo en columna y optimización se ha elegido la isoterma de Langmuir por simplicidad matemática y por mejor función objetivo.

7. CINÉTICA DE ADSORCIÓN

Los datos experimentales referentes a la cinética para la posible obtención del parámetro cinético de transferencia de materia interna se han obtenido también del mismo artículo ^[7] gracias a las siguientes gráficas:

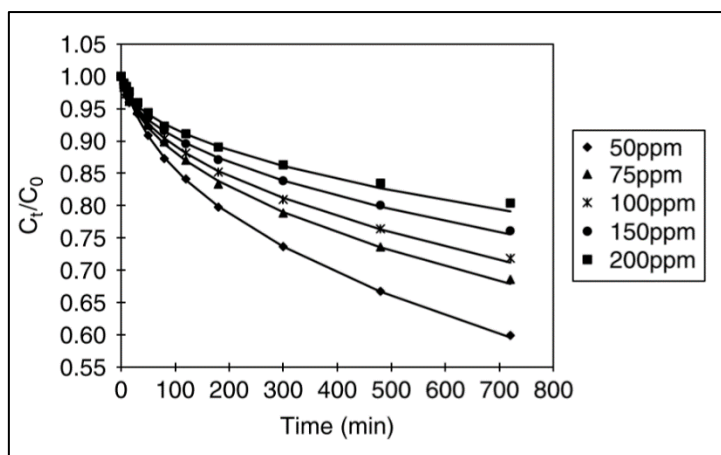


Figura 25 Gráfica experimental de cinética para el colorante AB80 variando el efecto de su concentración inicial

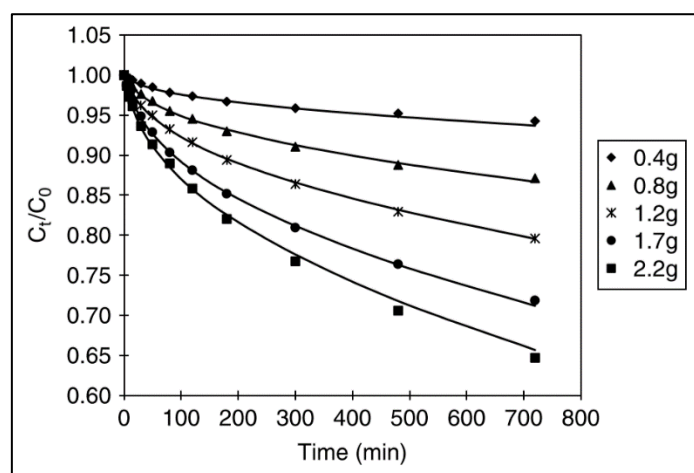


Figura 26 Gráfica experimental de cinética para el colorante AB80 variando el efecto de la masa de carbón activo

Los datos experimentales cinéticos se han obtenido a las mismas condiciones tabuladas en el equilibrio: **Tabla 6**.

Para estimar el valor del coeficiente de transferencia de materia interna mediante simulación se ha empleado el modelado matemático del LDF que tiene en cuenta la transferencia de materia interna y externa, concretamente las ecuaciones: (33) y (34)

Empleando las ecuaciones mencionadas (desarrolladas en el apartado del modelado), se ha podido estimar el coeficiente de transferencia de materia interna. Para ello se ha trabajado con dos tipos de datos experimentales diferentes: a concentración inicial variable y a masa de carbón variable.

7.1. Experimentos a concentración inicial variable

Se trata de cinco experimentos, todos ellos a volumen y masa constante, variando el valor numérico de la concentración de inicial. Estos datos quedan recogidos en la siguiente tabla:

m_A (g)	1.7
V_L (L)	1.7
q_0 (g/g)	0
C_0 (g/m ³)	[50,75,100,150,200]

Tabla 9 Datos físicos de la simulación para obtener el coeficiente de transferencia de materia interna a concentración inicial variable

Los datos experimentales se han extraídos de la **Figura 25** quedando de la forma:

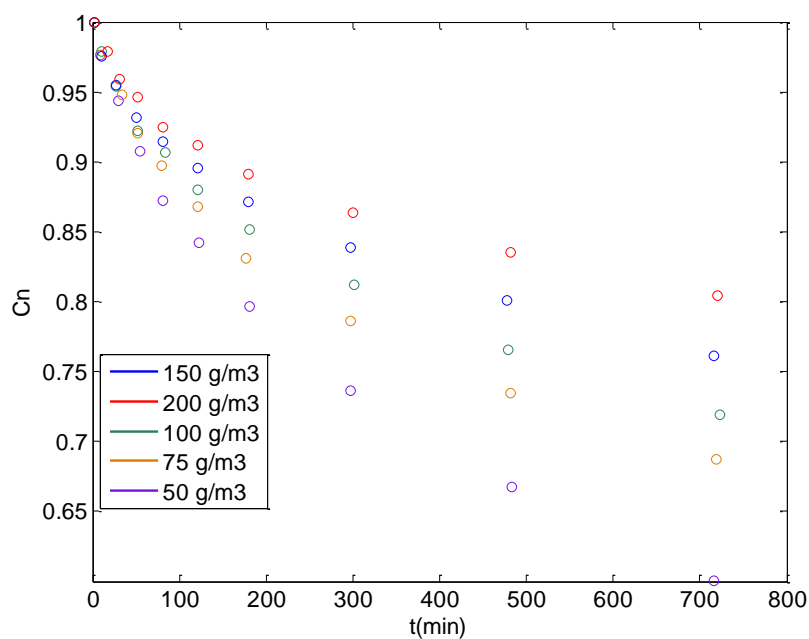


Figura 27 Datos experimentales extraídos de la **Figura 25**

Tras emplear el código programado para la optimización de los parámetros, se ha obtenido la siguiente figura ajustada:

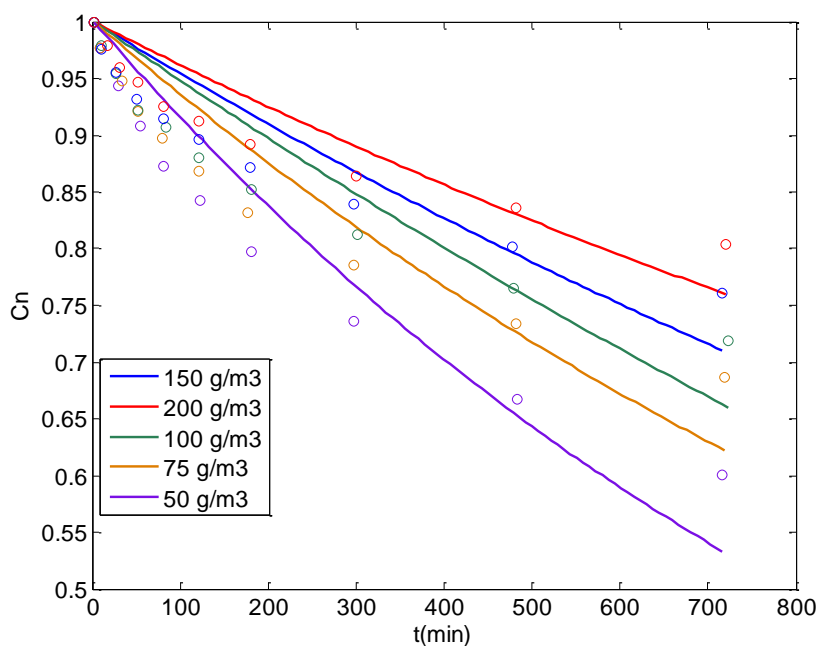


Figura 28 Optimización de experimentos a diferentes concentraciones iniciales

Donde los valores obtenidos de los diferentes coeficientes de transferencia se recogen en la siguiente tabla:

C_0 (g/m ³)	k_s^* (1/min)	$k_F^* \cdot 10^{-7}$ (m ³ /(min·g))
200	0.00053	5.4
150	0.00057	5.7
100	0.00062	6.3
75	0.00073	7.1
50	0.00093	9.4

Tabla 10 Coeficientes de transferencia de materia obtenidos mediante optimización a concentración inicial variable

Como podemos observar, la optimización obtenida de los datos experimentales no es muy precisa, por ello, habiendo obtenido un valor numérico del coeficiente de transferencia de materia interna medio de 0.00068 1/min, se recurrirá a la obtención de dicho parámetro mediante ecuaciones empíricas para poder comparar el valor.

7.2. Experimentos a masa de carbón activo variable

Se trata de cinco experimentos a volumen y a concentración inicial de colorante constante. En este caso se variará la masa de carbón activo para observar el efecto del coeficiente de transferencia de materia interna. Los datos de operación quedan recogidos en la siguiente tabla:

m_A (g)	[0.4, 0.8, 1.2, 1.7, 2.2]
V_L (L)	1.7
q_0 (g/g)	0
C_0 (g/m ³)	100

Tabla 11 Datos físicos de la simulación para obtener el coeficiente de transferencia de materia interna a masa de carbón activo variable

Los datos experimentales se han extraído de la **Figura 26** quedando de la forma:

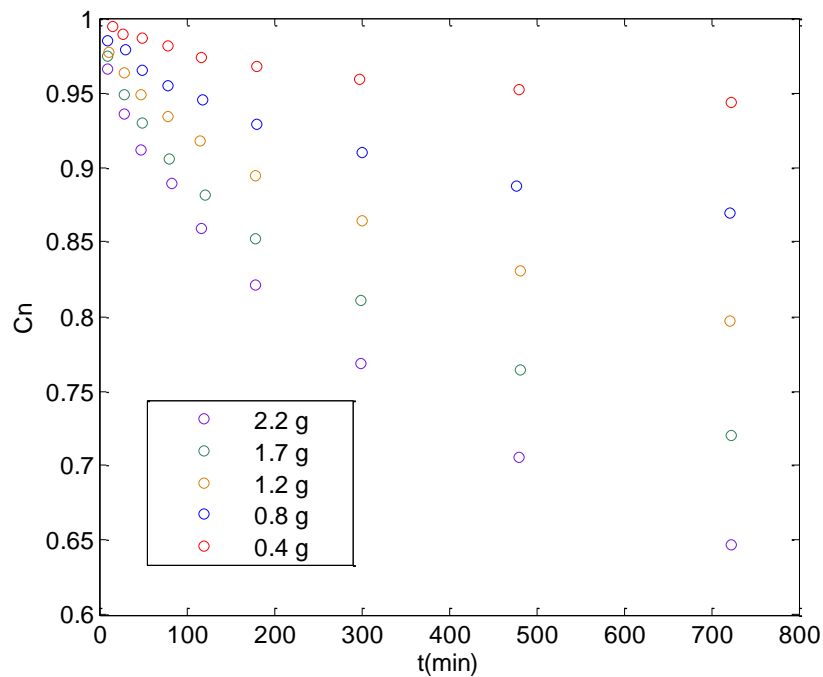


Figura 29 Datos experimentales extraídos de la **Figura 26**

Tras emplear el código programado para la optimización de los parámetros, se ha obtenido la siguiente figura ajustada:

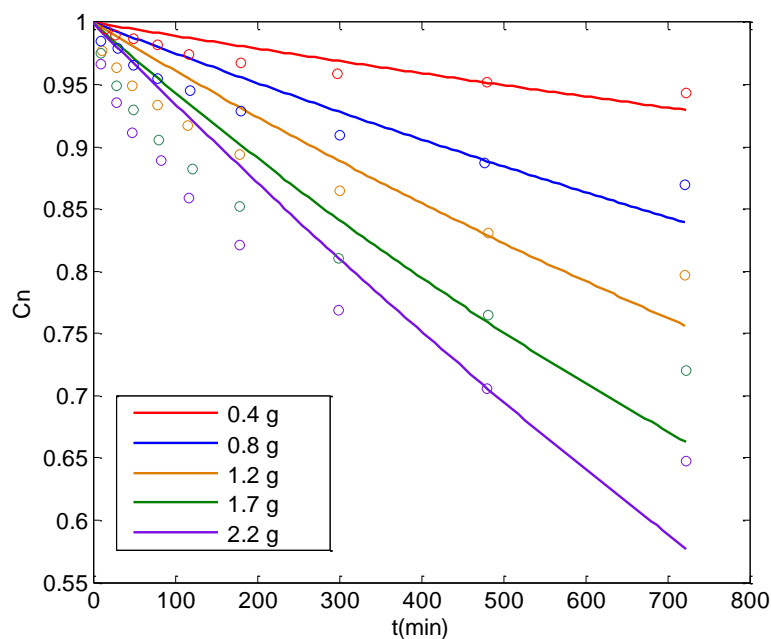


Figura 30 Optimización de experimentos a diferentes masas de carbón

Donde los valores obtenidos de los diferentes coeficientes de transferencia se recogen en la siguiente tabla:

m_A (g)	k_s^* (1/min)	$k_F^* \cdot 10^{-07}$ (m ³ /(min·g))
0.4	0.00029	0.019
0.8	0.00033	0.011
1.2	0.00047	6.6
1.7	0.00062	6.3
2.2	0.00081	6.1

Tabla 12 Coeficientes de transferencia de materia obtenidos mediante optimización a masa de carbón variable

Como podemos observar, la optimización obtenida de los datos experimentales tampoco es muy precisa, al igual que ocurre con la optimización de datos a concentración inicial variable. En este caso se ha obtenido un valor numérico del coeficiente de transferencia de materia interna medio de 0.00050 1/min.

También cabe destacar que los valores del coeficiente de transferencia de materia externa difieren mucho los unos con los otros. Esto nos indica que posiblemente el modelado matemático elegido para ajustar no sea el más adecuado para nuestros datos experimentales.

7.3. Obtención del coeficiente de materia interna

Tal y como se ha observado, los ajustes de la optimización de los datos experimentales no parecen ser muy precisos, por ello se ha recurrido al cálculo del valor mediante una ecuación empírica con la finalidad de contrarrestar el resultado. Se ha empleado la ecuación obtenida del libro de Worch ^[1]:

$$k_s^* = 0.00129 \cdot \sqrt{\frac{D_L \cdot C_0}{q_{eq0} \cdot r_P^2}} \quad (63)$$

Donde las unidades deben estar en:

- D_L en mg/L
- C_0 en mg/L
- q_{eq0} en mg/g
- r_P en m

Mediante la resolución de dicha ecuación, se ha obtenido finalmente un valor de 0.0065 1/min.

Los tres valores del coeficiente de transferencia de materia interna vienen recogidos en la siguiente tabla:

	k_s^* (1/min)
Experimento a C_0 variable	0.00068
Experimento a m_A variable	0.00050
Ecuación empírica	0.0065

Tabla 13 Valores de los coeficientes de transferencia de materia interna obtenidos

Como el valor calculado mediante ecuación empírica difiere mucho del optimizado, la realización de la columna se hará con el valor optimizado mediante experimentos, ya que la ecuación empírica podría no ser válida en nuestro rango de operación.

El valor exacto del coeficiente de transferencia de materia interno empleado, para la simulación y el diseño de la columna, ha sido el obtenido por los experimentos a concentración inicial de colorante variable. Se ha elegido este valor entre los dos experimentos optimizados debido a que los valores no difieren tanto como lo hacen en los experimentos a masa de carbón activo variable.

8. DISEÑO DE LA COLUMNA DE ADSORCIÓN

En primer lugar, deberemos comparar los datos experimentales reales con la simulación recreada. Para ello, se han obtenido los valores de los datos experimentales de la columna del artículo [9]:

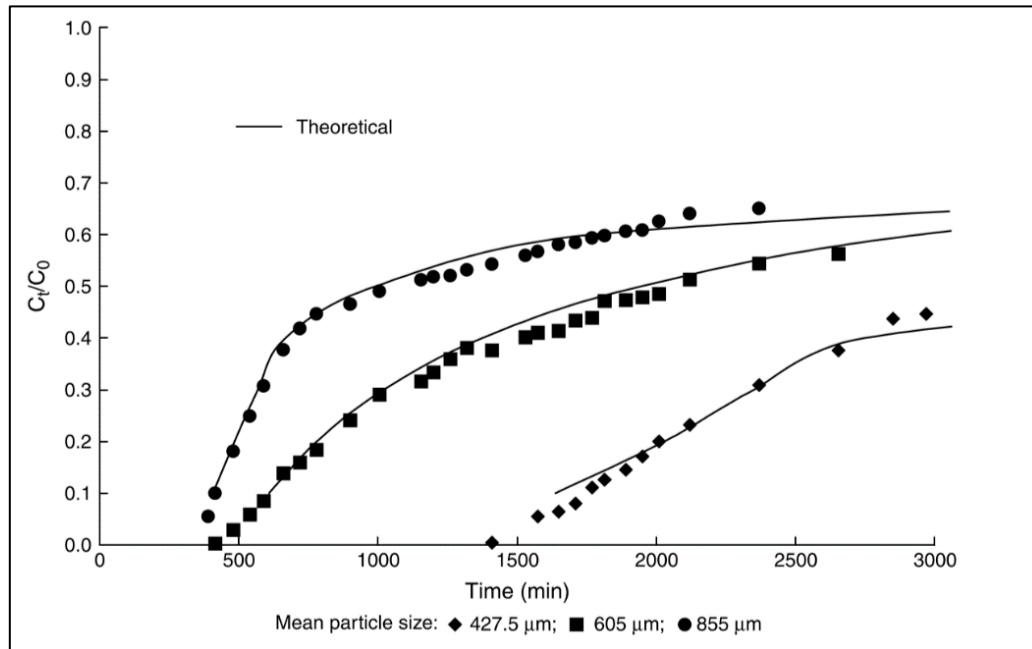


Figura 31 Gráfica experimental de diseño de la columna variando el tamaño de la partícula

Los datos de operación se recogen la siguiente tabla:

Concentración de entrada (g/m ³)	50
Caudal de entrada (cm ³ /min)	30
Longitud de la columna (m)	0.25
Diámetro de la columna (m)	0.045
Porosidad del lecho (adimensional)	0.25
Isoterma de Langmuir: q _m (g/g)	0.17
Isoterma de Langmuir: b (m ³ /g)	0.16
Densidad de partícula (g/cm ³)	0.54

Tabla 14 Datos físicos de la simulación de la columna

Con estos datos experimentales **Figura 32** y los datos de operación mencionados anteriormente en la **Tabla 14** se ha obtenido la siguiente simulación:

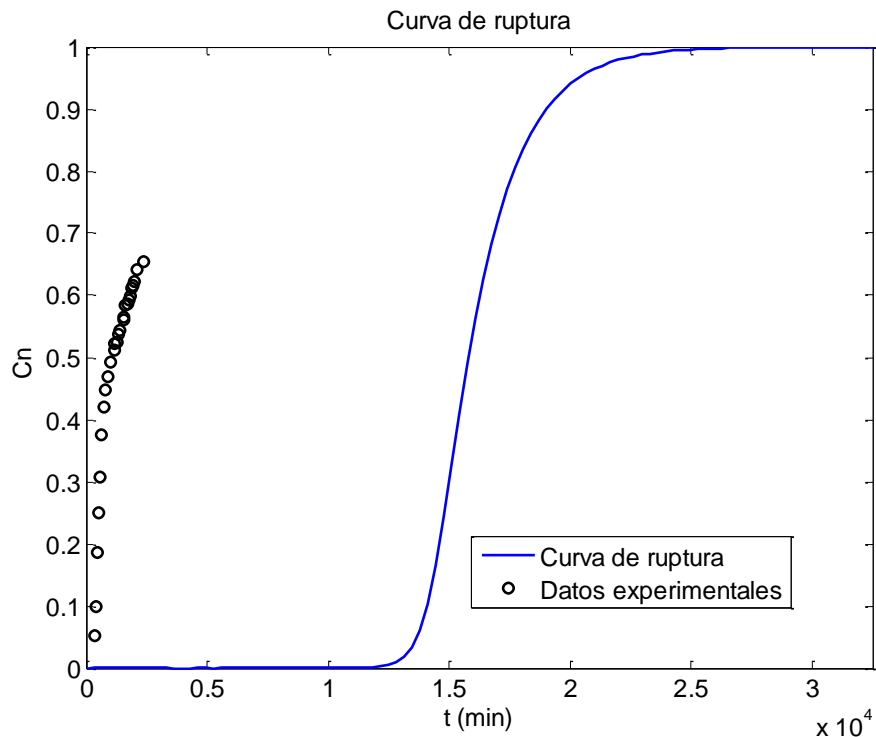


Figura 32 Curva de ruptura simulada para los datos experimentales de bibliografía [9]

Como se puede apreciar, el ajuste de los datos simulados y la tendencia de los datos experimentales extraídos del artículo no coinciden. Esto puede deberse a una errata en los valores de operación insertados en la simulación. Tras haber comprobado minuciosamente que los datos de operación mostrados en la **Tabla 14** coinciden íntegramente con los datos colocados en el artículo científico [9], podemos concluir en que ha habido algún fallo a la hora del traspaso de datos que no podemos controlar.

Una vez se ha intentado verificar los datos experimentales, se asumirá que no existe un fallo en el modelado matemático implementado y se procederá al diseño de la instalación de la columna de adsorción para nuestro problema en concreto.

Sabiendo las condiciones a las que trabaja nuestra empresa problema, deberemos calcular el caudal que emite para conocer el caudal que debemos introducir a la columna. Para ello, si conocemos que la empresa produce una cantidad de 480g de tinte diarios a una concentración de 117.6 g/m³, podremos calcular el caudal al que sale nuestra agua contaminada. Un total de 4.2 L/min.

Para poder calcular el valor de la k_F mediante las correlaciones, se han seleccionado las propiedades del agua a una temperatura de 20°C y las siguientes ecuaciones de las **Tabla 4** y **Tabla 5**:

- Tal y como se menciona en el artículo^[9], se ha seleccionado la ecuación de Wilson and Greankoplis (1966) para la obtención del número adimensional de Sherwood.
- Tal y como se menciona en el artículo^[9], se ha seleccionado la ecuación de Wilke and Chang (1955) para la obtención del coeficiente de difusión.

En la siguiente tabla se recogen todos los otros valores de operación de la columna:

Concentración de entrada (g/m³)	80
Concentración de salida deseada (g/m³)	10
Caudal (m³/min)	0.0042
Diámetro de partícula (μm)	605
Porosidad	0.25
Densidad de partícula (g/cm³)	0.54
Isoterma de Langmuir: qm (g/g)	0.17
Isoterma de Langmuir: b (m³/g)	0.16
k_s^* (1/min)	0.0006
k_F (m/min)	0.0015

Tabla 15 Datos de operación de la columna de adsorción

Una vez planteado el problema, se procede al dimensionamiento de la columna para dicha concentración de entrada y dicho caudal. Los resultados obtenidos mediante la simulación han sido los siguientes:

Altura de la columna (m)	1
Diámetro de la columna (mm)	240
Tiempo de utilización de la columna	3.5 días (5150 min)

Tabla 16 Características de la columna diseñada

- Evolución frente al tiempo:

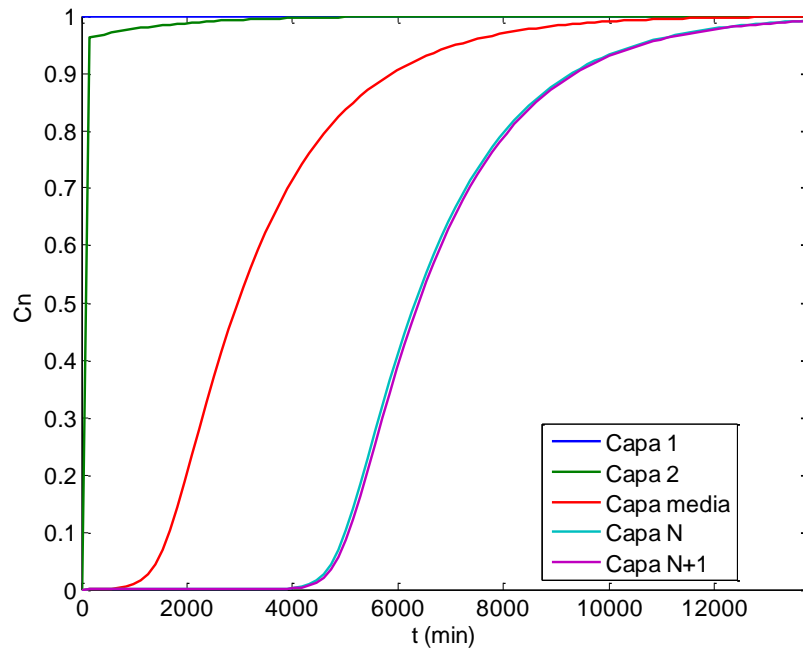


Figura 33 Evolución de la concentración a lo largo del tiempo

Como se puede observar en la figura mostrada, si nos fijamos en las distintas capas representadas, podemos ver como la primera capa de la discretización coincide directamente con la entrada del agua con colorante en la columna. Si avanzamos por las capas vemos que cada vez le cuesta más llegar a saturarse de colorante. La última capa (N+1) coincide con la curva de ruptura que se explicará posteriormente.

La evolución de la carga frente al tiempo también se ha representado:

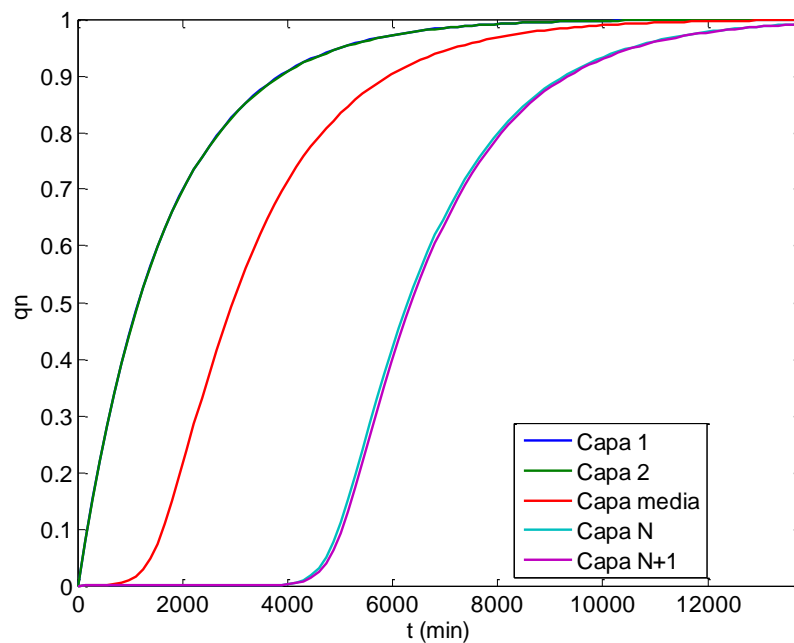


Figura 34 Evolución de la carga a lo largo del tiempo

Como podemos apreciar, la carga que existe entre líquido y adsorbente, va aumentando a lo largo del tiempo en cada una de las capas hasta llegar a su máximo, que coincide a su vez con la tendencia máxima de la concentración: **Figura 34**. En las primeras capas, al contrario que sucede con las últimas, la carga alcanza su máximo valor rápidamente, esto es debido a que se satura más rápidamente las capas iniciales que las capas más lejanas.

Además de todas las ecuaciones planteadas en el apartado del modelado, también se ha obtenido el valor numérico del tiempo ideal de ruptura como modo de comprobación de que los resultados estén dando correctamente. La fórmula empleada obtenida del Worch ^[1] ha sido:

$$t_{id} = \frac{q_{eq} \cdot m_A}{C_e \cdot Q} + \frac{V_R \cdot \varepsilon_B}{Q} \quad (64)$$

Donde el V_R es el volumen de la columna (cilindro) y la m_A se calcula con la relación siguiente:

$$m_A = V_R \cdot \rho_p \cdot (1 - \varepsilon_B) \quad (65)$$

El valor de la masa de carbón activo de la columna calculado ha sido de 14kg

Donde el primer término corresponde al tiempo estequiométrico y el segundo término al tiempo de retención. En la simulación, este tiempo se representará junto a la curva de ruptura para poder observar si la curva se encuentra situada correctamente en su intervalo definido. En la siguiente figura podremos ver el comportamiento de la curva de ruptura de nuestra columna de adsorción:

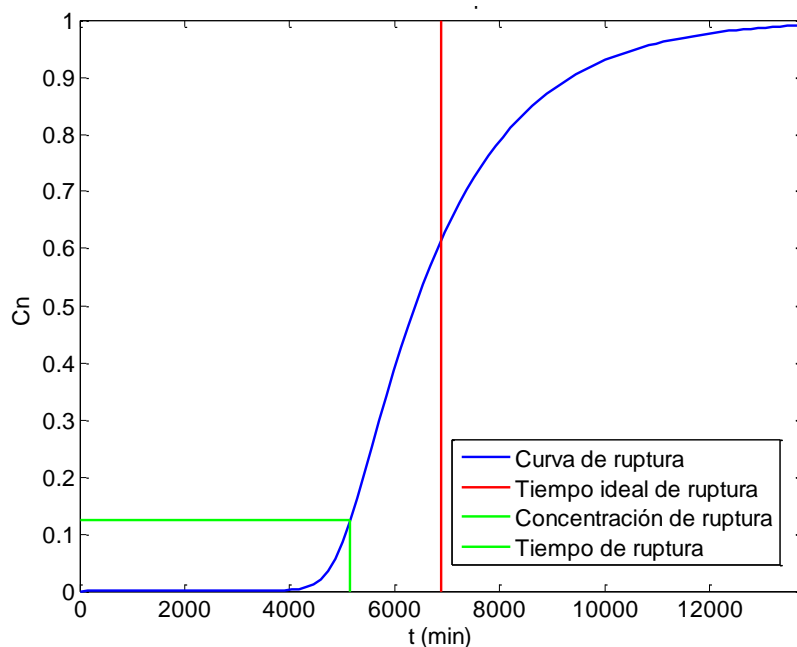


Figura 35 Curva de ruptura

Como se puede apreciar en la figura, en la línea azul observamos la tendencia de la curva de ruptura de nuestras condiciones de trabajo en la columna diseñada. La línea roja nos muestra el tiempo de ruptura, esto coincide con el baricentro de la curva de ruptura real (línea azul).

Inicialmente observamos como al hacer pasar el agua contaminada por la columna, los contaminantes se van separando gradualmente, consiguiendo así purificar el agua. Conforme avanza el tiempo de operación de la columna, podemos ir observando como la columna se va saturando de colorante. Esto nos indica que debemos parar el proceso y cambiar de columna para poder seguir adsorbiendo el colorante.

En la realidad, la operación de una columna de adsorción no se prolonga hasta su agotamiento, ya que, si actuamos así, volveremos a contaminar el agua ya purificada. Por ello, se establece un valor de concentración de rotura (línea verde). Este valor nos indicará hasta cuando nuestra columna puede seguir funcionando, una vez sobrepasado este valor deberemos cambiar de columna. El valor de dicha concentración viene especificado por los reglamentos medioambientales, ya que no podemos verter al medioambiente un agua contaminada a más de un cierto valor de concentración. El valor establecido por la legislación española (Real decreto 817/2015) ^[12] es de: 10 g/m^3

En conclusión, para los datos de operación establecidos, se ha podido diseñar una columna con las siguientes características:

- Evolución frente la longitud de la columna:

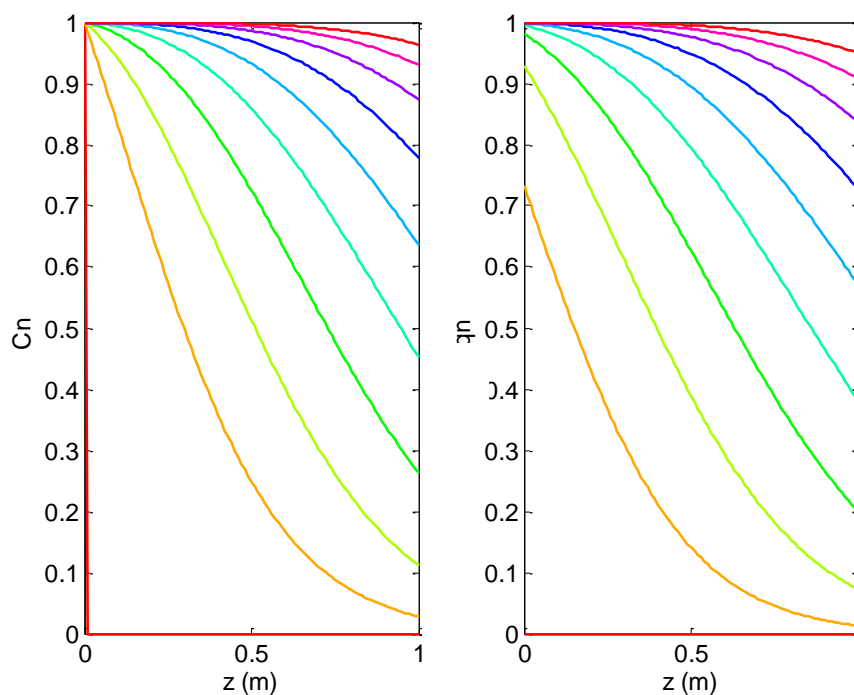


Figura 36 Evolución de la concentración y de la carga a lo largo de la longitud de la columna

Si analizamos ambos comportamientos, el de la concentración y el de la carga frente a la longitud observamos comportamientos similares. Inicialmente si nos fijamos en los perfiles observamos cómo no tenemos ni carga ni concentración a lo largo de la columna, conforme pasa el tiempo, a lo largo de la columna cada vez vamos pasando de más a menos concentración y carga. Si continuáramos la simulación, observaríamos que llegaríamos a un punto en el que prácticamente obtenemos la misma concentración y la misma carga en toda la columna. Esto nos indica, que la columna está saturada y necesita limpiarla o reemplazarla por otra para poder seguir con el proceso de adsorción. En nuestro caso, una vez llegamos a la concentración máxima de salida establecida, deberemos cambiar de columna.

También cabe tener en cuenta para el diseño de la columna, hay que colocar dos mallas con la finalidad de impedir que el carbón activo se cuele a las tuberías. Las dimensiones de las mallas vendrán caracterizadas según las dimensiones de las partículas.

Finalmente, para concluir nuestro diseño de la columna, deberemos calcular el número de columnas de adsorción necesarias para el proceso (tal y como se ha mencionado previamente en el apartado de la desorción). Para ello supondremos que el tiempo de desorción es el mismo que el tiempo medio de adsorción obtenido. En nuestra columna, el tiempo de saturación (línea verde) llega a los 5150 min (3.5 días), pero el tiempo medio de adsorción (línea roja) es de 6882 min (4.7 días). Esto nos da como conclusión que necesitaríamos 3 columnas en nuestra instalación para que el proceso de adsorción no parase nunca. En primer lugar, habría una funcionando y dos esperando, cuando pasasen 3.5 días se cambia de la primera columna a la segunda y la tercera espera. Tras otros 3.5 días la primera columna estaría casi renovada y se pasaría de la segunda a la tercera. Por último, tras otros 3.5 días pasaría de la tercera a la primera mientras la segunda sigue limpiándose. Y así en un ciclo continuo.

9. DISEÑO DE LA INSTALACIÓN HIDRÁULICA

La instalación hidráulica que se va a diseñar se encuentra esquematizada en la siguiente figura:

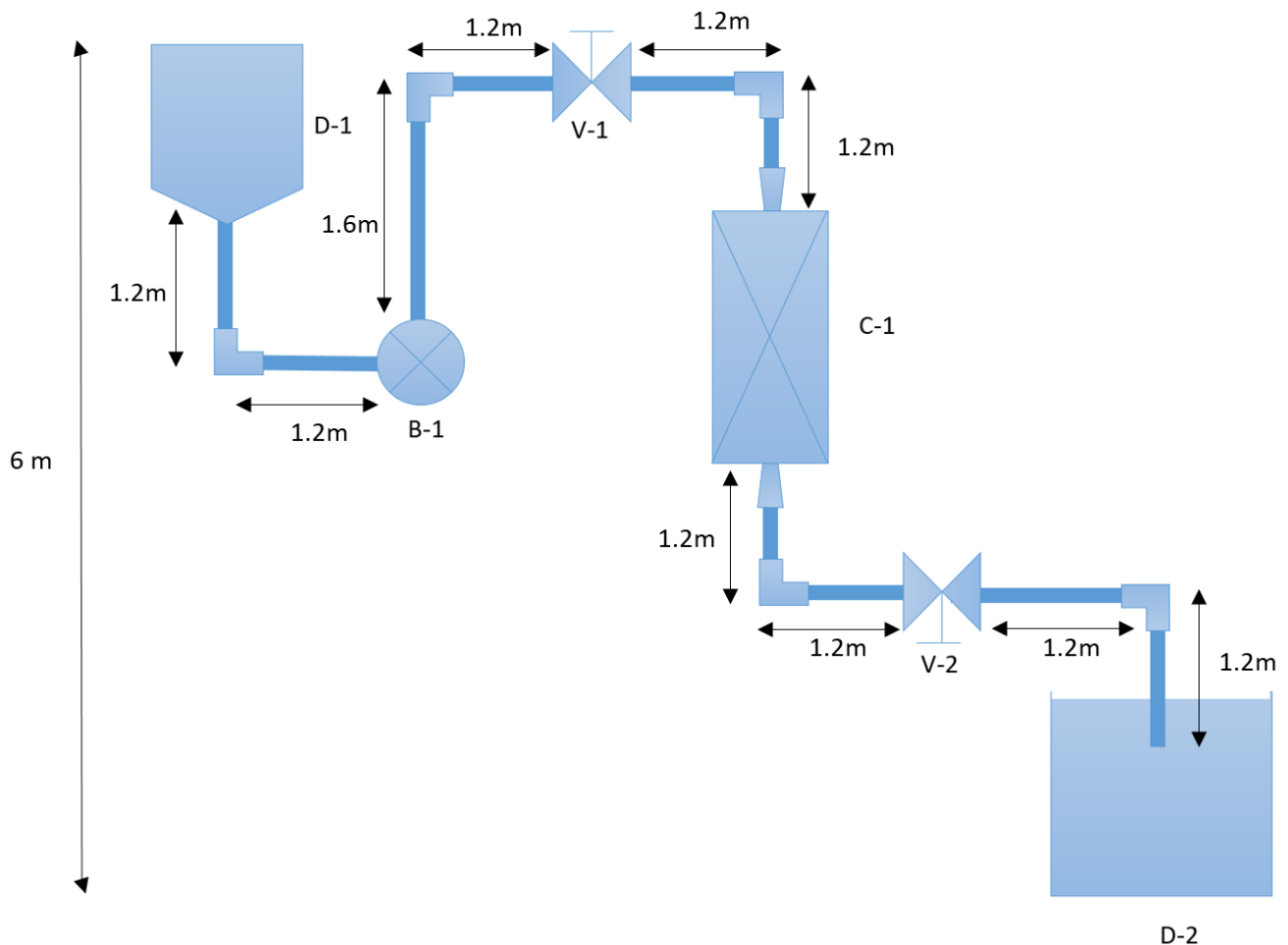


Figura 37 Diseño de la instalación hidráulica del proyecto





Identificación	Nombre del elemento	Número de unidades
	Tuberías totales (diferentes longitudes)	10
	Codos de 90° para tuberías	5
	Estrechamiento a la columna	1
	Ensanchamiento desde la columna	1
V-1 y V-2	Válvulas de seguridad	2
C-1	Columna de adsorción	1
B-1	Bomba	1
D-1	Depósito de agua contaminada	1
D-2	Depósito de agua depurada	1

Tabla 17 Elementos necesarios para la instalación hidráulica de la columna

En cuanto a los depósitos diseñados, normalmente las industrias recogen los residuos líquidos en tanques elevados, por ello se ha diseñado la instalación de forma que una tubería recoja directamente desde lo alto el agua contaminada, la adsorba y la lleve a otro depósito más bajo para su posible reutilización.

Para la elección de las tuberías de nuestro diseño, se ha seleccionado la empresa *Durman* ^[15]. Por ello, se han seleccionado las tuberías ofrecidas que mejor se ajustan a nuestro diseño y a partir de ahí se han recalculado los caudales a los cuales debería ir por ellas, con la finalidad de que a la columna entre el caudal especificado.

Las características de las tuberías vienen resumidas en la siguiente tabla:

Diámetro interno de las tuberías (mm)	203.2
Longitud total de tuberías (m)	12.4
Rugosidad de la tubería (PVC) (mm)^[13]	0.015

Tabla 18 Características de las tuberías

Una vez se conoce el diámetro de las tuberías, deberemos calcular la pérdida de carga en las mismas. Para ello, se seguirá la ecuación de Darcy-Weisbach ^[3]:

$$ht = f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{v_F^2}{2 \cdot g} \quad (66)$$

Donde la f es el coeficiente de fricción que depende del número adimensional de Reynolds y de la rugosidad del material empleado en la tubería. El valor de la rugosidad se ha extraído de bibliografía ^[13] mostrada en la **Tabla 18** y necesitaremos calcular el valor del número de Reynolds mediante la siguiente ecuación:

$$Re = \frac{D \cdot v_F \cdot \rho_L}{\mu_L} \quad (67)$$

Una vez conocido ambos parámetros, emplearemos la ecuación de Colebrook-White ^[3]:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2.0 \cdot \log \left[\frac{\varepsilon}{3.7 \cdot D} + \frac{2.51}{Re \cdot \sqrt{f}} \right] \quad (68)$$

Además de la ecuación de Colebrook-White empleada, existen otros modos de conocer el coeficiente de fricción: mediante gráficas bibliográficas como el diagrama de Moody o mediante fórmulas directas que dependen del número de Reynolds calculado. Una vez obtenemos el valor de f ya podremos proceder al cálculo de la pérdida de carga en las tuberías.

Los resultados obtenidos de las pérdidas de carga en tuberías han sido:

Número de Reynolds	23838
Coficiente de fricción	0.3293
Pérdida de carga tuberías 1.2m (m)	0.0153
Pérdida de carga tubería 1.6m (m)	0.0022
Pérdida de carga total en tuberías(m)	0.0175

Tabla 19 Pérdida de cargas en las tuberías

Una vez conocido el diámetro de las tuberías principales de nuestra instalación, también podremos calcular las pérdidas de carga en el estrechamiento de la entrada de la tubería en la columna y del ensanchamiento a la salida de la columna. Para ello, deberemos emplear la siguiente ecuación:

$$hm = K_a \cdot \frac{v_F^2}{2 \cdot g} \quad (69)$$

Donde el valor de v_F tiene diferente definición si se trata de un estrechamiento o un ensanchamiento. En un estrechamiento será el valor de la velocidad media del flujo en la entrada de la tubería más pequeña antes de la expansión, mientras que en el ensanchamiento será el valor de la velocidad media del flujo en la salida de la tubería más ancha. En conclusión, siempre será el valor medio de la velocidad en la tubería más estrecha. El valor de la K_a es una relación entre áreas de ambas tuberías que se puede encontrar en bibliografía ^[3]. En este caso, como el valor numérico del número de Reynolds supera el valor de 10000, emplearemos la siguiente ecuación:

$$K_a = \left(1 - \frac{A_1}{A_2}\right)^2 \quad (70)$$

Donde A_1 y A_2 son los valores respectivos de las áreas de las tuberías desde donde viene el fluido hacia dónde va. En el estrechamiento A_1 será el área de la tubería más ancha, mientras que en el ensanchamiento será el valor de la tubería más estrecha. Los valores obtenidos de las pérdidas de carga en estrechamiento y en ensanchamiento ha sido:

Valor de K en el estrechamiento	0.19
Valor de K en el ensanchamiento	0.093
Pérdida de carga en el estrechamiento (m)	0.00016
Pérdida de carga en el ensanchamiento (m)	0.00008

Tabla 20 Pérdida de carga en el estrechamiento y en el ensanchamiento de la columna

También deberemos tener en cuenta las pérdidas de carga en la salida del depósito de agua contaminada y en la entrada al depósito de agua adsorbida. Para ello, deberemos encontrar el valor de su respectiva K_a . En la salida supondremos que el valor será la unidad porque no importa la forma de la salida en el lugar donde el tubo se conecta con la pared del depósito. En la entrada supondremos que es 0.25 debido a que presenta una entrada achaflanada. Los valores de las pérdidas obtenidos han sido:

Valor de K en la salida	1
Valor de K en la entrada (achaflanada)	0.25
Pérdida de carga en la salida (m)	0.00085
Pérdida de carga en la entrada (m)	0.00021

Tabla 21 Pérdida de carga en entrada y salida de la tubería en los depósitos: D-1 y D-2

Una vez hemos calculado todas las pérdidas en las tuberías, se procederá al cálculo de las pérdidas de carga de los elementos. Para las pérdidas de carga en los codos y en válvulas se tendrá en cuenta los valores tabulados siguientes^[13]:

Valores del coeficiente K en pérdidas singulares		
Accidente	K	L/D
Válvula esférica (totalmente abierta)	10	350
Válvula en ángulo recto (totalmente abierta)	5	175
Válvula de seguridad (totalmente abierta)	2,5	-
Válvula de retención (totalmente abierta)	2	135
Válvula de compuerta (totalmente abierta)	0,2	13
Válvula de compuerta (abierta 3/4)	1,15	35
Válvula de compuerta (abierta 1/2)	5,6	160
Válvula de compuerta (abierta 1/4)	24	900
Válvula de mariposa (totalmente abierta)	-	40
T por salida lateral	1,80	67
Codo a 90° de radio corto (con bridas)	0,90	32
Codo a 90° de radio normal (con bridas)	0,75	27
Codo a 90° de radio grande (con bridas)	0,60	20
Codo a 45° de radio corto (con bridas)	0,45	-
Codo a 45° de radio normal (con bridas)	0,40	-
Codo a 45° de radio grande (con bridas)	0,35	-

Tabla 22 Valores del coeficiente de pérdidas en accesorios [13]

De forma que con los valores elegidos podamos obtener el valor de nuestra K, la cual la sustituiremos en la ecuación (69) por la K_a y así podremos obtener el valor de nuestra pérdida de carga en los codos y en las válvulas. El valor de la columna de L/D es la longitud equivalente, este es otro modo de calcular las pérdidas de carga si no se emplean las ecuaciones ya explicadas.

Se ha seleccionado cinco codos de 90° de radio normal (con bridas) y dos válvulas de seguridad (totalmente abierta). Con estas especificaciones, las pérdidas encontradas son:

Valor de K en codos	0.75
Valor de K en válvulas	10
Pérdida de carga en codos (m)	0.0032
Pérdida de carga en válvulas (m)	0.0171

Tabla 23 Pérdida de carga en accesorios

Para el diseño de la instalación hidráulica, deberemos conocer la caída de presión que tiene lugar dentro de la columna. Para ello, recurriremos a la ecuación de Ergun^[2] mostrada a continuación:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{150 \cdot \mu_L \cdot v_F \cdot (1 - \varepsilon_B)}{d_p^2 \cdot \varepsilon_B^3} + \frac{1.75 \cdot \rho_L \cdot v_F^2 \cdot (1 - \varepsilon_B)}{d_p \cdot \varepsilon_B^3} \quad (71)$$

Donde:

- ΔP es la pérdida de presión que hay en la columna (Pa)

El valor de la pérdida de presión en la columna ha sido de: 2.2MPa

Por último, una vez obtengamos los valores de todas las pérdidas de carga podremos calcular la potencia necesaria para la bomba de nuestra instalación. Para ello recurriremos a la ecuación general de la energía:

$$\frac{P_1}{\gamma} + z_1 + \frac{v_1^2}{2 \cdot g} + h_A - h_R - h_L = \frac{P_2}{\gamma} + z_2 + \frac{v_2^2}{2 \cdot g} \quad (72)$$

Donde:

- v_1 y v_2 son las velocidades del fluido en los diferentes puntos del problema: D-1 y D-2
- P_1 y P_2 son las presiones en los diferentes puntos del problema: D-1 y D-2
- z_1 y z_2 son las alturas de los diferentes puntos del problema: D-1 y D-2
- γ es el peso específico del fluido.
- h_L son las pérdidas totales por fricción.
- h_A es la energía aportada al fluido (bomba).
- h_R es la energía que tiene el fluido (turbina).

Una vez calculadas todas las pérdidas de carga, se va a resolver la ecuación general de energía despreciando términos:

- $\frac{P_1}{\gamma}$ y $\frac{P_2}{\gamma}$ se eliminan debido a que ambos depósitos se encuentran abiertos a la atmósfera, por lo que su presión será la misma en ambos.
- h_R se elimina debido a la ausencia de una turbina en nuestra instalación.
- $\frac{v_1^2}{2 \cdot g}$ y $\frac{v_2^2}{2 \cdot g}$ se menosprecian, ya que los depósitos en el cual se encuentra el agua contaminada son suficientemente grandes como para hacerlo.

En conclusión, la ecuación general se nos queda de forma:

$$h_A = z_2 + h_L - z_1 \quad (73)$$

Finalmente se obtienen los siguientes valores:

h_L (m)	0.026
$z_1 - z_2$ (m)	6
h_A (m)	6.04

Tabla 24 Valores obtenidos de la ecuación general de la energía

Una vez hemos definido la ecuación general de la energía, obtendremos el valor de la energía aportada al fluido (h_A), para finalmente poder calcular la potencia necesaria de la bomba. La ecuación de dicha potencia será:

$$P_A = h_A \cdot \gamma \cdot Q \quad (74)$$

Una vez ya obtenido el valor de la energía aportada por la bomba, se calcula la potencia empleada por esta, empleando la ecuación (74).

P_A (W)	248.9
-----------	-------

Tabla 25 Potencia de la bomba diseñada

10. ESTIMACIÓN DE COSTES

Para la estimación de costes de nuestra instalación, se ha recurrido a una base de datos ^[14] proporcionada por el editorial Mc Grall Hill Education y a catálogos industriales reales pertenecientes a la empresa Durman ^[15] (tuberías, codos y válvulas) y Rexroth Bosch ^[17] (bombas).

Para la estimación del coste de la columna, se ha elegido una columna de acero inoxidable, ya que es compatible con el agua y nuestro colorante. Especificando las dimensiones correctamente en la base de datos, se ha obtenido finalmente un precio de 1974.1€ por columna. Como en nuestra instalación necesitaríamos un total de tres columnas en funcionamiento, el precio ascendería a: 5922.3€

Para la estimación del coste de las tuberías, se ha seleccionado el modelo: TUBERIA PVC AWWA C900-UL / FM, con un coste de 1135€ cada 6.2m de tubo. Como nuestra instalación necesita 12.4m, será el doble del precio marcado.

Para la estimación del coste de los cinco codos de PVC, la empresa los vende por unidad al precio de 142.9€, el precio final sería cinco veces.

Para la estimación del coste de las válvulas, la empresa vende válvulas de bola a 1363.8€ para nuestra instalación necesitaremos dos.

Para la estimación del coste de la bomba necesaria para nuestra instalación, se ha seleccionado la bomba REXROTH (modelo A4VSO180) es capaz de ejercer la potencia necesaria para nuestra instalación. El precio final de la bomba seleccionada ha sido de: 2104.7€. Además, la bomba necesita un aporte energético de 18kW·h para funcionar. Actualmente, el precio de la luz en España es de 0.11436€/kWh ^[18], operando llegamos a la conclusión de que necesitaríamos un total de 2.1€ para que la bomba funcionara por hora. Si nuestra planta funciona las 24h del día, ascendería a un total de 49.4€/día.

Dejando de lado el equipamiento técnico, deberemos tener en cuenta también la cantidad de masa de carbón activo FILTRASORB 400 que se va a emplear en la columna. Tal y como se ha calculado anteriormente, se necesitará un total de 14kg de masa de carbón activo por columna. En total tenemos tres columnas, necesitaremos 42kg. Si los sacos de 25kg se venden a 17.6€, deberemos comprar dos sacos a un precio total de 35.2€ (el carbón sobrante, nos servirá a la hora de reponer el carbón cuando no se pueda desorber más).

El resumen de todos los costes viene mostrado en la siguiente tabla:

Precio de las 10 tuberías (€)	2270
Precio de los 5 codos (€)	714.5
Precio de las 2 válvulas (€)	2727.7
Precio de la bomba (€)	2104.7
Precio de las tres columnas de adsorción (€)	5922.3
Precio de la masa total de carbón activo (€)	35.2
Precio de la energía necesaria para la bomba (€)	49.4
PRECIO TOTAL (€)	13824

Tabla 26 Estimación de costes de la instalación técnica

11. CONCLUSIONES

Se ha estudiado el mecanismo de adsorción entre un fluido y un sólido desde el equilibrio entre ellos hasta la propia cinética característica. Con ello se ha podido estudiar el planteamiento y modelado matemático de todas las ecuaciones cinéticas involucradas en el proceso.

Se ha podido comprobar cómo afectan los distintos parámetros de los diferentes modelos matemáticos de las isothermas de equilibrio. Con ello, se han hallado los valores óptimos mediante simulaciones y optimizaciones.

Se ha trabajado con el modelado cinético de los experimentos reales en discontinuo con la finalidad de observar las tendencias de los parámetros de transferencia tanto interno como externo. Exactamente se ha trabajado con tres modelos cinéticos diferentes, uno despreciando la transferencia de materia interna, otro despreciando la transferencia de materia externa y otro teniendo en cuenta ambos. Observando las diferentes gráficas se puede afirmar que las comprobaciones han sido satisfactorias.

Mediante la simulación de varios experimentos reales extraídos de los artículos se ha podido obtener, con el modelo matemático en el cual influyen ambas transferencias de materia, el coeficiente de transferencia de materia interna que posteriormente se empleará en el diseño de la columna de adsorción. Respecto el valor obtenido y el valor calculado mediante estimaciones, existe una gran diferencia, esto nos indica que posiblemente se deberían volver a realizar los experimentos de forma más precisa o cambiar el modelo matemático empleado para optimizar el valor del coeficiente de transferencia interna.

Se ha podido trabajar en base a un artículo ya redactado e ir comprobando fase por fase las similitudes y las diferencias, entre el artículo científico y el modelado implementado. En este punto se han encontrado una serie de diferencias notables en el apartado de la simulación de una columna de adsorción, ya que las tendencias de los datos experimentales y simulados parecían coincidir, pero el intervalo de tiempo en el cual ocurrían no. No se ha podido determinar el porque esto ha sucedido, para poder encontrar la diferencia se podría poner en contacto con el propio autor del artículo científico e intentar encontrarla.

Se ha podido estudiar desde el modelado hasta la propia simulación el comportamiento de una columna de adsorción ante un problema real. Se ha logrado dimensionar la columna para dicho problema y se ha podido obtener el tiempo de utilización de esta. Se puede concluir que la simulación ha sido exitosa, ya que todas las gráficas obtenidas, al ser estudiadas confirman los fundamentos teóricos del diseño.

Se ha logrado diseñar una instalación hidráulica para la columna diseñada y con ella se ha podido obtener el valor de la potencia de la bomba. Respecto a este apartado, la potencia obtenida ha sido muy pequeña, con lo que sería recomendable plantear otras dimensiones de las tuberías más acorde con el entorno en el que se situara la columna en el caso en que nuestra instalación llegase a ser instalada.

Por último, se ha logrado realizar una estimación de costes una vez se ha logrado diseñar la instalación hidráulica, de forma que se pueda conocer en carácter real lo que costaría la instalación de una planta hidráulica similar a la diseñada por este trabajo.

12. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Eckhard Worch (2012). *Adsorption Technology in Water Treatment. Fundamentals, Processes, and Modeling*. Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin/Boston.
- [2] Don W. Green, Robert H. Perry (1934). *Perry's chemical engineer's handbook*. The McGraw-Hill Companies, Inc. 8th edition (2008).
- [3] Bruce R. Munson, Theodore H. Okiishi, Wade W. Huebsch, Alric P. Rothmayer (1990). *Fundamentals of fluid mechanics*. John Wiley & Sons, Inc.
- [4] Zhejiang NetSun Co., Ltd (2017). Colour Index Database: ChemNet. Consultado el 14 de junio de 2017, en: <http://www.chemnet.com/resource/colour/supplier.cgi?exact=dict&f=plist&l=en&terms=4474-24-2&id=336>
- [5] National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine (2017). Open chemistry database: PubChem. Consultado el 27 de junio del 2017, en: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acid_blue_80#section=GHS-Classification
- [6] Calgon Carbon Corporation (2015). Filtrasorb 400, Granular Activated Carbon. Consultada el 16 de junio de 2017, en: <http://www.calgoncarbon.com/wp-content/uploads/2015/08/DS-FILTRA40015-EIN-E1.pdf>
- [7] Keith K.H. Choy, John F. Porter, Gordon McKay (2004). *Film-surface diffusion during the adsorption of acid dyes onto activated carbon*. Journal of Chemical Technology and Biotechnology 79:1181–1188 (online: 2004).
- [8] Keith K.H. Choy, John F. Porter, Gordon McKay (2004). *Film-pore diffusion models – analytical and numerical solutions*. Chemical Engineering Science 59 (2004) 501-512.
- [9] Vinci K.C. Lee, John F. Porter, Gordon McKay (2003). *Fixed bed modelling for acid dye adsorption onto activated carbon*. Journal of Chemical Technology and Biotechnology 78:1281–1289 (online: 2003).
- [10] Xiao-Yan Yang, Bushra Al-Duri (2000). *Application of branched pore diffusion model in the adsorption of reactive dyes on activated carbon*. Chemical Engineering Journal 83 (2001) 15-23.
- [11] Xiao-Yan Yang, Bushra Al-Duri (2005). *Kinetic modelling of liquid-phase adsorption of reactive dyes on activated carbon*. Journal of Colloid and Interface Science 287 (2005) 25-34.
- [12] Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente (2017). Gobierno de España. Consultado el 27 de junio de 2017, en: <http://www.mapama.gob.es/es/agua/legislacion/>
- [13] Miliarium (2001). Ingeniería Civil y Medioambiente. Consultado el 28 de junio de 2017, en: <http://www.miliarium.com/Prontuario/MedioAmbiente/Aguas/PerdidaCarga.asp>
- [14] MC Grall Hill Education (2017). Consultado el 29 de junio de 2017, en: <http://www.mhhe.com/engcs/chemical/peters/data/ce.html>
- [15] Durman Company (2016). Catálogo de precios de tuberías y accesorio Durman. Consultado el 03 de julio de 2017, en: <http://durman.com.co/pdf/LDP%20Durman.pdf>
- [16] Ministerio de Medio Ambiente (2004). Guía de Mejores Técnicas Disponibles en España del sector textil.

[17] Box Rexroth USA (2017). Rexroth Bosch Group, The drive and control company. Consultado el 04 de julio de 2017, en: <https://www.boschrexroth.com/en/us/products/product-groups/goto-products/goto-hydraulics/pumps/aa4vso-series-10-and-30/index#>

[18] Tarifaluzhora (2017). Calculador de la electricidad a tiempo real en España. Consultado el 04 de julio de 2017, en: <http://tarifaluzhora.es/>