

27



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE QUIMICA



**EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA**

**DESARROLLO DE UN PROGRAMA PARA EL
DISEÑO DE ADSORBEDORES DE CARBON
ACTIVADO PARA EL TRATAMIENTO DE
AGUA**

**TESIS MANCOMUNADA
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A N
JORGE ALFREDO CALDERON DE ANDA
RAUL VELAZQUEZ CUEVAS**



MEXICO, D.F.

2001

295626



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO

PRESIDENTE	Prof. Rodolfo Torres Barrera
VOCAL	Prof. José Sabino Sámano Castillo
SECRETARIO	Prof. Rosa Maria Ramírez Zamora
1er. SUPLENTE	Prof. Baldomero Pérez Gabriel
2do. SUPLENTE	Prof. Alfonso Durán Moreno

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA


Departamento de Ingeniería Ambiental
Edificio 5, Instituto de Ingeniería. UNAM.

ASESOR

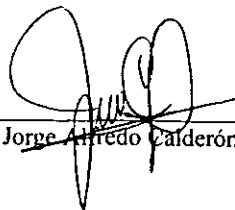


Dr. Rosa Maria Ramírez Zamora

SUSTENTANTES



Raúl Velázquez Cuevas



Jorge Alfredo Calderón De Anda

INDICE

Lista de tablas	i
Lista de figuras	ii
Nomenclatura	iv
Resumen	1
Introducción	3
Capítulo 1 Antecedentes	5
1.1 Generalidades sobre el proceso de adsorción	5
1.1.1 Definición	5
1.1.2 Factores que influyen en la adsorción	6
1.1.2.1 Características del adsorbato	6
1.1.2.2 Características del adsorbente	6
1.1.2.3 Características del medio	7
1.1.3 Modelos del proceso de adsorción	8
1.1.4 Isotermas de Adsorción.	9
1.1.4.1 Isoterma de Langmuir	9
1.1.4.2 Isoterma de Freundlich	10
1.1.4.3 La Teoría de la Solución Ideal Adsorbida (IAST)	11
1.2 Carbón activado	16
1.2.1 Definición	16
1.2.2 Métodos de activación	16
1.2.3 Clasificación de los carbones activados	17
1.2.3.1 En términos de granulometría	17
1.2.3.2 Respecto al tipo de materia prima	19
1.2.4 Características del carbón activado	21
1.2.4.1 Características físicas	21
1.2.4.2 Características químicas	22
1.2.5 Aplicaciones del carbón activado	24
1.3 Adsorbedor de lecho fijo	29
Capítulo 2. Algoritmo de cálculo de un programa de diseño de columnas de carbón activado para el tratamiento de aguas	34
2.1 Descripción del procedimiento	34
2.1.1 Metodología de cálculo de columnas de adsorción	36

2.2 Planteamiento de las ecuaciones de diseño	39
2.2.1 Determinación de la dosis de carbón activado	39
2.2.1.1 Método numérico y resolución	40
2.2.2 Determinación de los parámetros de diseño	47
Capítulo 3. Resultados y Discusión	49
3.1 Primer caso	49
3.2 Segundo caso	55
3.3 Resumen de resultados	60
Conclusiones	63
Bibliografía	66
Apéndice A	70
Apéndice B	74
Apéndice C	76

LISTA DE TABLAS

- TABLA 1.1 Clasificación de las funciones ácidas propuesta por Boehm.
- TABLA 2.1 Principales aplicaciones del carbón activado.
- TABLA 2.2 Datos requeridos por el programa para el cálculo de diseño de la columna de adsorción.
- TABLA 2.3 Resultados generados por el programa.
- TABLA 3.1 Valores experimentales obtenidos de isothermas de DIURON[®] sobre carbón PICAZINE.
- TABLA 3.2 Valores experimentales obtenidos de isothermas de fenol sobre carbón PICANC60.
- TABLA 3.3 Resultados obtenidos en los dos casos y valores de referencia.

LISTA DE FIGURAS

- FIGURA 1.1 Representación esquemática de la estructura cristalina del grafito y de la estructura de un carbón activado.
- FIGURA 1.2 Columna de carbón activado de lecho fijo.
- FIGURA 1.3 Frente de adsorción en fase líquida.
- FIGURA 1.4 Curva de ruptura.
- FIGURA 2.1 Diagrama de flujo del procedimiento para el cálculo del diseño.
- FIGURA 3.1 Determinación de parámetros con concentraciones superiores a los valores límites para agua potable (NOM-127-SSA1-1994, Primer caso).
- FIGURA 3.2 Alimentación de datos al programa para efectuar el cálculo de diseño (Primer caso).
- FIGURA 3.3 Resultados del cálculo de diseño de una columna de adsorción para eliminar un plaguicida.
- FIGURA 3.4 Determinación de parámetros con concentraciones superiores a los valores límites para agua potable (NOM-127-SSA1-1994, Segundo Caso).
- FIGURA 3.5 Alimentación de datos al programa para efectuar el cálculo de diseño (Segundo caso).
- FIGURA 3.6 Resultados del cálculo de diseño de una columna de adsorción para eliminar fenol.

Nomenclatura

CAG	Carbón Activado Granular
CAP	Carbón Activado en Polvo
CEE	Comunidad Económica Europea
EPA	Environmental Protection Agency
IAST	Teoría de la Solución Ideal Adsorbida
MON	Materia Orgánica Natural
SOC	Compuestos Orgánicos Sintéticos
A	Área transversal de lecho de carbón
C_c	Dosis de carbón activado
C_c^a	Dosis de carbón activado en el punto a de la isoterma
C_c^b	Dosis de carbón activado en el punto b de la isoterma
C_c^c	Dosis de carbón activado en el punto c de la isoterma
C_h	Carga hidráulica
C_i^0, C_c	Concentración del componente i al equilibrio en la fase líquida
C_s	Concentración de soluto en el efluente
$C_{1,0}$	Concentración inicial del componente por remover
$C_{2,0}$	Concentración inicial del componente global
E	Función error
EBCT	Tiempo de contacto de lecho vacío
F	Vector de funciones
H	Altura de lecho de carbón
H_c	Altura de la columna de adsorción
J	Matriz Jacobiana
k	Número de iteración
K_1	Constante de Freundlich del componente uno
K_2	Constante de Freundlich del componente dos
M_c	Masa de carbón activado
M_g	Consumo de carbón
n_1	Constante de Freundlich del componente uno
n_2	Constante de Freundlich del componente uno
Q	Flujo del agua a tratar
q_c	Concentración al equilibrio de soluto en fase sólida
q_i^a	Capacidad de adsorción del componente i en el punto a de su isoterma
q_i^b	Capacidad de adsorción del componente i en el punto b de su isoterma
q_i^c	Capacidad de adsorción del componente i en el punto c de su isoterma

q_m	Capacidad máxima de adsorción
q_T	Capacidad total de adsorción
q_1	Capacidad de adsorción del componente uno (componente por remover)
q_2	Capacidad de adsorción del componente dos (componente global)
T_{op}	Tiempo de operación
V_1	Volumen de lecho de carbón
V_T	Volumen total de líquido por tratar
z_i	Fracción mol del componente i sobre la superficie del sólido
Z_s	Zona de transferencia de masa
Δ	Vector de incremento de las variables
ρ_s	Densidad del carbón activado

RESUMEN

Este trabajo presenta un programa de cómputo "amigable" para dimensionar columnas de adsorción empacadas con carbón activado en granos. La metodología o algoritmo de cálculo se basa en la aplicación de criterios recomendados por normas o por experiencias con sistemas de adsorción instalados (calidad del efluente, tipo de carbón activado, cargas hidráulicas y tiempos de contacto) y en datos experimentales (isotermas de adsorción) aplicados a modelos de adsorción (teoría IAS Ideal Adsorbed Solution) para determinar las principales características de operación y diseño de una columna de adsorción con carbón activado para el tratamiento de aguas.

El primer capítulo de este trabajo de tesis presenta un resumen bibliográfico de los aspectos más importantes del proceso de adsorción con carbón activado (definición, mecanismo, factores de influencia, modelos de equilibrio de adsorción, etc.). En este capítulo se hace énfasis en las ecuaciones de diseño que permiten calcular las concentraciones residuales al equilibrio, tanto en la fase acuosa como en la líquida, de un contaminante clave. Además, se listan las diferentes aplicaciones del proceso de adsorción.

El Capítulo 2 desarrolla de manera detallada la metodología de cálculo propuesta para el dimensionamiento, con un programa de cómputo, de columnas de adsorción con carbón activado para el tratamiento de aguas.

El Capítulo 3 presenta los resultados obtenidos en el dimensionamiento de columnas de adsorción para dos casos de estudio. El primer caso, se trata de un agua superficial clarificada, en la que la concentración de un plaguicida (DIURON) es superior al límite propuesto para agua potable (NOM-127-SSA1-1994), por lo que se propone aplicar el proceso de adsorción para remover este contaminante. El segundo caso es un agua residual que ha sido sometida previamente a procesos de clarificación y de intercambio iónico, pero cuya concentración residual de fenol excede el límite máximo propuesto para un agua de

recarga artificial de acuíferos (EPA, 1994; NOM-127-SSA1-1994). En este último caso, también se propone y evalúa la remoción de fenol con el proceso de adsorción.

Finalmente, el Capítulo 4 resume las principales conclusiones y recomendaciones de este estudio.

INTRODUCCION

El deterioro de la calidad de fuentes de abastecimiento de agua por compuestos tóxicos y recalcitrantes es cada día más importante, por lo que es necesario aplicar procesos de tratamiento más sofisticados para que la remoción de esos contaminantes a niveles aceptables sea satisfactoria. Dentro de los procesos más eficientes para eliminar compuestos recalcitrantes se encuentra la adsorción con carbón activado.

El proceso de adsorción con carbón activado es ampliamente utilizado en plantas de tratamiento de aguas residuales y naturales para reúso y potabilización respectivamente. El carbón activado en granos, empleado cada vez más con respecto al de tipo polvo debido a la posibilidad de regenerarlo por métodos químicos o térmicos, se aplica en columnas de adsorción. Las columnas de adsorción para el tratamiento de aguas pueden funcionar con flujo descendente o ascendente, siendo éste último el que permite mayor versatilidad en la operación de estos equipos debido a que ofrece la posibilidad de trabajar de manera continua incluso para extraer el carbón saturado.

El diseño de columnas de adsorción con carbón activado en granos se realizaba inicialmente en los años 70 de manera similar a los filtros de arena, por lo que el carbón activado tenía principalmente una función de medio filtrante, lo que disminuía significativamente la capacidad de adsorción de este material adsorbente. A fin de diseñar de una manera más adecuada y óptima la remoción de contaminantes por el proceso de adsorción se desarrollaron una serie de modelos que describen la influencia del tamaño de partícula, del tiempo de contacto y de la hidráulica del sistema sobre la eficiencia de este tratamiento. Además, la experiencia adquirida con las unidades de adsorción instaladas en los años 70 en Estados Unidos, Francia y Alemania permitió desarrollar un gran número de criterios para realizar una mejor operación y diseño de estos sistemas.

El diseño de columnas de adsorción con carbón activado debe considerar también criterios de calidad deseada del efluente o normas, así como datos experimentales para determinar la capacidad de adsorción del carbón activado. Todos los aspectos involucrados para el dimensionamiento y operación adecuados de estos equipos son muy diversos y, algunos complejos, por lo que no es muy sencillo diseñar adecuadamente estos sistemas, sobretodo cuando no se tiene mucha experiencia.

Con base en lo expuesto, este trabajo de tesis propone un algoritmo y programa de cálculo "amigable" que permita a un usuario determinar las principales características de operación y diseño de una columna de adsorción con carbón activado en granos para el tratamiento de aguas. Las bases consideradas en este algoritmo se agrupan en tres categorías: 1) Normas de calidad de agua, 2) Criterios recomendados para la operación y diseño según el caso (tipos de flujo y de carbón activado, tiempos de contacto, cargas hidráulicas) y 3) Datos experimentales aplicados en modelos de adsorción para multi-componentes (teoría IAS, Ideal Adsorbed Solution).

CAPITULO I

ANTECEDENTES

1.1 GENERALIDADES DEL PROCESO DE ADSORCIÓN

1.1.1 Definición

La adsorción es una operación unitaria en la que un compuesto llamado adsorbato contenido en una fase líquida o gaseosa se transfiere a la superficie de una fase sólida llamada adsorbente.

La adsorción de las moléculas de adsorbato sobre la superficie del adsorbente puede ser física o química. En la adsorción física o fisisorción intervienen esencialmente fuerzas de van der Waals; las moléculas adsorbidas están ligadas débilmente a la superficie y los calores de adsorción son bajos (menores de 40 kJ). El equilibrio se alcanza rápidamente, siendo fácilmente reversible debido a que la energía involucrada es muy baja.

En la adsorción química o quimisorción las moléculas adsorbidas reaccionan químicamente con la superficie del adsorbente. Como en este caso se rompen y forman enlaces, el calor de adsorción tiene valores comparables a los de una reacción química (mayor de 40 kJ), lo que hace irreversible al proceso. En la quimisorción la cantidad máxima que puede ser adsorbida es una capa monomolecular sobre la superficie del sólido, a diferencia de la adsorción física, en que las moléculas pueden incluso adherirse por encima de la monocapa.

En el caso del tratamiento de aguas residuales con carbón activado el tipo de adsorción que se verifica es del tipo físico.

1.1.2 Factores que influyen en la adsorción.

Existe un número importante de factores que influyen sobre la velocidad y las capacidades de adsorción, tomando en cuenta que en el proceso participan no sólo el adsorbente y el soluto por adsorber, sino también el medio y todo lo que éste contiene.

1.1.2.1 Características del Adsorbato.

Solubilidad. Cuanto más soluble sea el soluto más difícil será la atracción hacia la superficie del adsorbente. De esta manera, cualquier factor que favorezca la solubilidad de los compuestos desfavorecerá su adsorción.

Estructura Molecular. En general, los compuestos orgánicos de cadena lineal son adsorbidos más fácilmente que aquellos que poseen ramificaciones.

Grupos funcionales. Se ha observado que en los compuestos aromáticos los grupos funcionales de la molécula tienen influencia sobre su facilidad para ser adsorbido.

Ionización. Generalmente, la ionización no favorece el proceso de adsorción. Las especies fuertemente ionizadas presentan una adsorción ligera. Sin embargo, existen excepciones como el caso de los iones hidrógeno.

Tamaño de la molécula de adsorbato. Entre moléculas de naturaleza química similar, se ha observado que las moléculas más grandes se adsorben mejor que las pequeñas debido a que las uniones soluto-soporte son menos numerosas.

1.1.2.2 Características del Adsorbente.

Área superficial y estructura porosa. Cuanto mayor sea el área específica, mayor será la capacidad de adsorción, debido a que se dispondrá de una mayor superficie de contacto, es

decir, un mayor número de sitios activos disponibles. Lo anterior, sólo es válido para áreas específicas de hasta 1500 m²/g aproximadamente. Para valores más altos, un aumento en el área superficial se deberá a la presencia de microporos de diámetro inferior a 1 nm, en los cuales sólo pueden fijarse las moléculas orgánicas más pequeñas.

Funciones oxigenadas de superficie. La presencia de grupos funcionales de superficie que contienen oxígeno aumenta la velocidad de adsorción pero reduce la capacidad de adsorción de compuestos orgánicos.

Granulometría. El tamaño de partícula es un factor importante para la cinética de adsorción, pues determina el tiempo necesario para la transferencia de los solutos hacia los sitios activos. La reducción del tamaño de la partícula aumenta la velocidad de adsorción, de acuerdo a una relación inversamente proporcional al cuadrado del diámetro de la partícula.

Dureza de partícula. Partículas con un espesor de pared delgado entre los poros tienen mayor área específica, pero es importante que el material cuente con un espesor de pared lo suficientemente ancho para que su resistencia mecánica sea adecuada para su uso, es decir, que el material soporte sin que se dañe su estructura porosa.

1.1.2.3 Características del medio.

pH. El pH tiene un efecto directo sobre la ionización de compuestos orgánicos. Para valores bajos de pH la adsorción de ácidos orgánicos se ve favorecida, mientras que para valores de pH elevados se verá incrementada la adsorción de bases.

Temperatura. La adsorción es un fenómeno de superficie de carácter generalmente exotérmico. En consecuencia, se ve favorecido cuando la temperatura disminuye. Zhou^[12] constató que las capacidades de adsorción para el fenol disminuyen de manera lineal con un aumento de la temperatura. Sin embargo, es conveniente evaluar el efecto de la temperatura

para cada sistema en particular.

Oxígeno disuelto. La presencia de oxígeno molecular disuelto en el agua a tratar aumenta las capacidades de adsorción de compuestos como el fenol con respecto a sistemas con ausencia total de oxígeno. Esto se debe a la polimerización que sufren esas sustancias sobre la superficie del adsorbente.

Materia orgánica natural de aguas (MON). Las aguas naturales utilizadas para la producción de agua potable en función de su origen, contienen una matriz orgánica más o menos importante. La MON puede actuar de varias maneras sobre la eliminación de microcontaminantes. Smith^[9] propone que los efectos de la MON sobre la adsorción se pueden atribuir a las interacciones soluto-MON, soluto-adsorbente y MON-adsorbente. Por un lado, puede ser que se produzca un complejo entre el soluto y la MON, disminuyendo entonces las velocidades y las capacidades de adsorción debido a un efecto estérico. Por otro lado, el complejo formado puede en ciertos casos favorecer la adsorción por una disminución de la solubilidad y un aumento de hidrofobicidad del compuesto ^[10].

También puede ser que los compuestos de la MON entren en competición con los solutos que se desea eliminar sobre los sitios de adsorción, o bien bloqueen el acceso a los poros del material adsorbente y, por tanto, se disminuya la eficiencia del proceso ^[11].

1.1.3 Modelos del proceso de adsorción.

Para establecer ecuaciones que permitan describir el proceso de la adsorción, varios autores han propuesto mecanismos^[37, 38, 39]. Weber y Smith^[37] hacen una distinción del proceso en cuatro etapas, que nos permite conocer las etapas determinantes de acuerdo a la velocidad con que se efectúan.

De acuerdo a su propuesta, existe primero una transferencia del adsorbato desde el seno del líquido hasta una película líquida situada en la proximidad de la superficie del

sólido. Posteriormente, el soluto se transfiere hasta el sólido a través de la película.

El tercer paso del proceso es la difusión del adsorbato al interior de los poros del adsorbente por una diferencia de concentración; la difusión puede ser porosa si el soluto llega a un sitio de adsorción en el interior del grano, o bien superficial, si se difunde de un sitio de adsorción a otro.

El cuarto paso corresponde a la adsorción propiamente dicha.

Debido a que esas cuatro etapas se efectúan en serie, la velocidad de la adsorción se ve limitada por la etapa más lenta. La última etapa es extremadamente rápida en comparación con las otras tres, por lo que su contribución a la cinética del proceso es despreciable. Normalmente, las condiciones hidrodinámicas se controlan de manera que se tenga un mayor tiempo de contacto de soluto y adsorbente. Por esta razón la primera etapa es también rápida en relación con la segunda y la tercera. Por lo anterior se puede afirmar que las etapas que controlan la velocidad de todo el mecanismo son la segunda y/o la tercera.

1.1.4 Isotermas de Adsorción.

1.1.4.1 Isoterma de Langmuir.

El modelo de Langmuir (1916) es obtenido a partir de un equilibrio dinámico de moléculas adsorbidas y desorbidas.

$$\frac{q_e}{q_m} = \frac{KC_e}{1 + KC_e}$$

donde K = Constante de equilibrio de adsorción, determinada por la relación de las

constantes de velocidad de adsorción y desorción.

C_e = Concentración al equilibrio de soluto en la fase líquida.

q_e = Concentración al equilibrio de soluto en la fase sólida.

q_m = Concentración de soluto equivalente a una monocapa.

Este modelo supone que la superficie del sólido es homogénea, es decir, que todos los sitios de adsorción tienen la misma actividad. Supone también que la máxima cantidad que puede ser adsorbida es la equivalente a una capa monomolecular de adsorbato, y que no hay interacción entre las moléculas adsorbidas.

En esta isoterma se distinguen dos zonas:

Cuando la solución es muy diluida, el valor de KC_e es pequeño y la dependencia es prácticamente lineal, $q_e/q_m \approx KC_e$;

Y cuando la solución es de elevada concentración, $q_e/q_m \approx 1$, lo que indica que la cantidad adsorbida, q_e , se aproxima a la monocapa.

Debido a que la superficie de carbón activado es altamente heterogénea, en muchas ocasiones la ecuación de Langmuir no permite obtener resultados aceptables^[29].

1.1.4.2 Isoterma de Freundlich.

La isoterma de Freundlich (1906) se desarrolló originalmente sobre bases empíricas.

$$q_e = KC_e^{1/n}$$

Donde C_e y q_e son las concentraciones al equilibrio de soluto en las fases líquida y sólida, respectivamente; K y n son parámetros empíricos de la ecuación.

Las hipótesis de este modelo establecen que la adsorción es de tipo físico, que no hay interacción entre las moléculas adsorbidas y que la superficie del adsorbente es heterogénea.

De acuerdo a la ecuación, la cantidad de soluto adsorbido aumentaría al infinito en relación directa con un aumento de la concentración en el líquido. Esto es, por consecuencia, una limitante del modelo.

Varios autores^[25, 28, 30] han combinado estos dos modelos para una aplicación más extensa. Estas ecuaciones tipo Langmuir-Freundlich involucran un mayor número de parámetros, lo que vuelve más complicada su resolución.

De igual manera existen otros modelos^[5, 27, 29] de tres o más parámetros con aplicación más amplia que los modelos de Langmuir y Freundlich.

1.1.4.3 La Teoría de la Solución Ideal Adsorbida (IAST).

Un modelo multicomponente a partir de la ecuación de Langmuir fue desarrollado en 1930 por Butler y Ockren. Este modelo fue utilizado con éxito por algunos autores^[7, 8] para describir la adsorción de compuestos fenólicos en mezclas binarias. Sin embargo, el modelo presentó inconvenientes; Singer y Yen^[13] observaron que no describe de manera correcta la adsorción de ciertas mezclas de fenol y de alquilfenol estudiadas, pues el modelo sólo puede aplicarse a mezclas de compuestos que obedezcan individualmente a la isoterma de Langmuir.

Puesto que el comportamiento de un gran número de compuestos obedece bien el modelo de Freundlich, varios autores^[24, 25, 26] han propuesto algunas modificaciones a esta isoterma para describir el equilibrio de mezclas multicomponentes. Sheindorf y col.^[26] desarrollaron un modelo de adsorción para mezclas binarias y ternarias cuyas predicciones fueron satisfactorias al ser utilizado en la adsorción de una mezcla de fenol, 4-bromofenol y

bencensulfonato de sodio. Sin embargo, este modelo requiere de muchos experimentos para determinar unos coeficientes a_{ij} , que describen la inhibición de un compuesto i debida al compuesto j .

La *Teoría de la Solución Ideal Adsorbida, IAST*, fue desarrollada por Myers y Prausnitz^[6] para describir la adsorción de mezclas de gases sobre superficies sólidas basándose en principios termodinámicos. Posteriormente, Radke y Prausnitz^[5] hicieron una extensión de la teoría para modelar la adsorción a partir de una mezcla multicomponente en fase líquida.

Esta teoría presenta dos hipótesis principales y utiliza cinco ecuaciones para predecir el comportamiento de mezclas a partir de las isothermas de cada uno de los componentes:

- 1) La fase adsorbida se comporta como una solución ideal, es decir, que la cantidad de moléculas del compuesto i adsorbables presentes en el disolvente, C_i , debe ser proporcional a la cantidad adsorbable como si el constituyente i estuviera sólo, C_i^o .
- 2) La superficie disponible es equivalente para todos los adsorbatos.

$$q_T = \sum_{i=1}^N q_i \quad \text{Ec. 1.1}$$

$$z_i = \frac{q_i}{q_T} \quad i = 1 \text{ a } N \quad \text{Ec. 1.2}$$

$$C_i = z_i C_i^o \quad i = 1 \text{ a } N \quad \text{Ec. 1.3}$$

$$\frac{1}{q_T} = \sum_{i=1}^N \frac{z_i}{q_i^o} \quad \text{Ec. 1.4}$$

$$\int_0^{q_i^o} \frac{dLnC_i}{dLnq_i^o} dq_i^o = \int_0^{q_i^o} \frac{dLnC_i^o}{dLnq_i^o} dq_i^o \quad j = 2 \text{ a } N \quad \text{Ec. 1.5}$$

Donde

q_T = Capacidad total de adsorción.

z_i = Fracción mol del componente i sobre la superficie del sólido.

q_i = Concentración del componente i en la fase sólida.

C_i^o = Concentración del componente i al equilibrio en la fase líquida.

q_i^o = Concentración del componente i al equilibrio en la fase sólida.

Crittenden^[1] y Najm^[4] muestran que la teoría IAS desarrollada con la isoterma de Freundlich es suficientemente satisfactoria para representar los datos de mezclas multicomponentes de los compuestos orgánicos comúnmente hallados en aguas a tratar.

Cuando es utilizada para describir la capacidad al equilibrio del carbón activado para adsorber compuestos orgánicos a partir de sistemas multicomponentes, la teoría IAS requiere el conocimiento de parámetros de cada una de las especies presentes, así como de sus concentraciones iniciales. Sin embargo, en la realidad la composición de los efluentes de aguas contaminadas es en la mayor parte de los casos desconocida.

Una manera de resolver este problema es como lo describe Najm^[4], considerando una mezcla binaria en la que el *componente uno* es el soluto que se desea remover y el resto de las especies presentes son consideradas como un segundo componente global, *componente dos*.

Para un sistema bisoluto, las ecuaciones para determinar las concentraciones al equilibrio de los dos solutos sobre la superficie del sólido, son las siguientes ^[2]

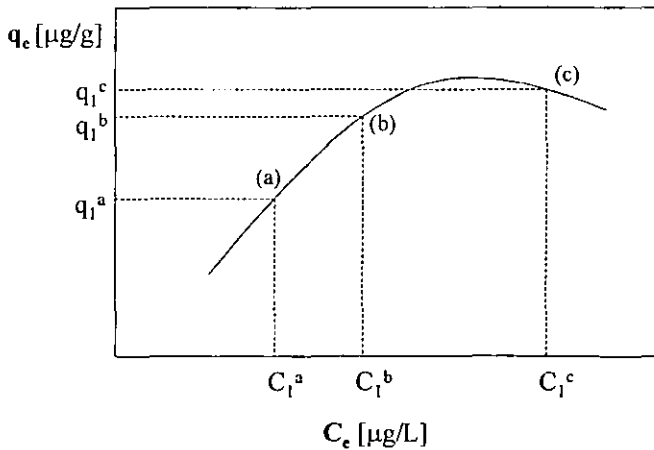
$$F_1 = C_{1,0} - C_e q_1 - \left(\frac{q_1}{q_1 + q_2} \right) \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_1 K_1} \right)^n = 0 \quad \text{Ec. 1.6}$$

$$F_2 = C_{2,0} - C_e q_2 - \left(\frac{q_2}{q_1 + q_2} \right) \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_2 K_2} \right)^{n_2} = 0 \quad \text{Ec. 1.7}$$

Donde K_1 , n_1 y K_2 , n_2 son los parámetros de la isoterma de Freundlich de los componentes 1 y 2, respectivamente, y $C_{1,0}$ y $C_{2,0}$, sus concentraciones iniciales.

Sin embargo, los valores de K_2 , n_2 y $C_{2,0}$ no pueden ser determinados directamente. El procedimiento propuesto por Najm ^[4] para conocer estos valores es el siguiente:

1. Construir una isoterma de Freundlich en agua destilada para el soluto 1 y así conocer los parámetros K_1 y n_1 .
2. Construir la isoterma de adsorción del soluto 1 en el agua a tratar, con una concentración conocida $C_{1,0}$.
3. De esta última isoterma, seleccionar tres puntos, a , b y c , representativos y determinar los valores C_1^a , C_1^b , C_1^c , q_1^a , q_1^b y q_1^c indicados en la siguiente figura:



Donde q_e es la concentración al equilibrio de compuesto 1 adsorbido, con unidades de microgramos de compuesto por gramo de sólido; y C_e es la concentración al equilibrio del

compuesto 1 en la fase líquida, y tiene unidades de microgramos de compuesto por litro.

Usando $C_{1,0}$, las dosis de carbón activado en cada punto, C_c^a , C_c^b y C_c^c , se pueden calcular por

$$C_c^a = \frac{C_{1,0} - C_1^a}{q_1^a} \quad \text{Ec. 1.8}$$

$$C_c^b = \frac{C_{1,0} - C_1^b}{q_1^b} \quad \text{Ec. 1.9}$$

$$C_c^c = \frac{C_{1,0} - C_1^c}{q_1^c} \quad \text{Ec. 1.10}$$

Cada par, dosis de carbón y capacidad de adsorción, se sustituyen en las ecuaciones 6 y 7, quedando un sistema de seis ecuaciones con seis incógnitas.

$$F_1 = C_{1,0} - C_c^a q_1^a - \left(\frac{q_1^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_1 K_1} \right)^{n_1} = 0 \quad \text{Ec. 1.11}$$

$$F_2 = C_{2,0} - C_c^a q_2^a - \left(\frac{q_2^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right)^{n_2} = 0 \quad \text{Ec. 1.12}$$

$$F_3 = C_{1,0} - C_c^b q_1^b - \left(\frac{q_1^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_1 K_1} \right)^{n_1} = 0 \quad \text{Ec. 1.13}$$

$$F_4 = C_{2,0} - C_c^b q_2^b - \left(\frac{q_2^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right)^{n_2} = 0 \quad \text{Ec. 1.14}$$

$$F_5 = C_{1,0} - C_c^c q_1^c - \left(\frac{q_1^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_1 K_1} \right)^{n_1} = 0 \quad \text{Ec. 1.15}$$

$$F_6 = C_{2,0} - C_c^c q_2^c - \left(\frac{q_2^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right)^{n_2} = 0 \quad \text{Ec. 1.16}$$

Los valores $C_{1,0}$, K_1 , n_1 , C_c^a , C_c^b , C_c^c , q_1^a , q_1^b y q_1^c son conocidos. La solución simultánea del sistema conduce a los valores de $C_{2,0}$, K_2 , n_2 , q_2^a , q_2^b y q_2^c .

1.2 CARBÓN ACTIVADO

1.2.1 Definición.

El término carbón activado define a un grupo de especies con elevada superficie y porosidad interna. El carbón activado es un producto que se obtiene como resultado de un proceso de carbonización de materiales de desecho. Por ser muy versátil, es el adsorbente de mayor significancia en la industria. Su principal utilidad es en la remoción de especies por adsorción en gases y líquidos con el objeto de purificar o recuperar algunas sustancias.

1.2.2 Métodos de activación.

Durante la carbonización se realiza una activación de su superficie. Las materias primas utilizadas para la fabricación del carbón activado son de origen mineral, como la hulla y el coque; vegetal, como madera, cáscara de coco, turba; sintético; ó de origen animal, como huesos y sangre. En la carbonización los compuestos volátiles son liberados y los átomos del carbón se alinean para desarrollar una estructura porosa durante la etapa de activación. De manera general existen dos métodos de activación: *el físico y el químico*.

La fabricación de carbón activado por *método físico* comprende tres etapas principales:

- 1) Secado de la materia prima.
- 2) Carbonización lenta entre 160°C y 600°C en ausencia de oxígeno, seguida de una eliminación con vapor de agua de los productos de carbonización (750°C a 900°C).
- 3) Activación por aplicación en continuo de vapor de agua a 950°C, desarrollo de la estructura compleja del carbón.

El carbón puede fabricarse también por *activación química*. Este proceso involucra la carbonización de las materias primas después de ser impregnadas con productos químicos como ácido fosfórico, cloruro de zinc, ácido sulfúrico, sulfato de potasio, cal y cloruros de otros metales. La característica común de estos compuestos es su capacidad para actuar como agentes deshidratantes. El intervalo de temperaturas para la activación química es entre 400 y 800°C. Después de realizar la carbonización, el carbón es separado de la sustancia inorgánica activante por disolución de esta última con un lavado apropiado. Este tipo de activación presenta desventajas, pues los agentes químicos utilizados son considerados de riesgo y los reglamentos de contaminación son evitados en la mayor medida posible.

1.2.3 Clasificación de los carbones activados.

1.2.3.1 En términos de granulometría.

El carbón activado puede ser utilizado en polvo (CAP) o en granos (GAC) en función de varios criterios técnicos y económicos. Las instalaciones de CAP requieren una inversión inicial menor que la de GAC, pero este último puede ser regenerado a diferencia del CAP que no es reutilizado.

Carbón Activado Granular (CAG)

El carbón activado granular (CAG) se utilizó en un principio para el control de olores y sabores en aguas superficiales. Este tipo de carbón se aplica actualmente para la remoción de compuestos orgánicos sintéticos (SOC) tanto en aguas superficiales como en subterráneas. Debido a que el CAG es caro, es necesario utilizarlo tanto tiempo como su capacidad de adsorción lo permita.

Uno de los más frecuentes usos del CAG en el tratamiento de agua potable es la remoción de microcontaminantes presentes en aguas superficiales y subterráneas. En la mayoría de los casos, las concentraciones de estas sustancias son de 0.5 a 5% de las concentraciones de la materia orgánica natural (MON) la cual compite con los microcontaminantes para ocupar los sitios de adsorción en el carbón activado. Además de la MON actúan también como competidores los SOC.

Carbón Activado en Polvo (CAP)

Típicamente, del 65 al 95% de las partículas del carbón activado en polvo pasan a través de mallas de 325 mesh (44 μm). Una de las ventajas de la utilización de CAP es la flexibilidad que permite en la operación de plantas, ya que puede ser aplicado solamente cuando se detecten picos de contaminación importante o la llegada de contaminantes específicos.

La aplicación del CAP involucra el contacto entre el adsorbente con la solución que será tratada y la separación después de un tiempo de contacto determinado. Para la separación se utilizan los procesos de coagulación-floculación y la sedimentación o la filtración, ó la combinación de ellos. El uso de CAP presenta dos desventajas principales:

1. Problemas durante la etapa de separación del agua y el carbón activado saturado.
2. Un consumo importante de carbón para poder obtener la misma eficiencia de

adsorción que con el CAG.

Sin embargo, existen muchas variaciones del proceso, cuya optimización puede ayudar a reducir significativamente la cantidad de CAP.

El CAP se aplica normalmente con cualquier variación de estos tres procesos:

- 1) Flujo concurrente en una sola etapa.
- 2) Flujo concurrente multietapas.
- 3) Flujo contracorriente multietapas.

En la práctica de tratamiento de aguas, solamente los procesos de flujo a contracorriente son aplicados, aunque algunos métodos han sido desarrollados para utilizar el CAP en reactores de lecho fijo. El CAP también ha sido utilizado para el tratamiento de aguas residuales en plantas de lodos activados.

Las cinéticas de adsorción con CAP son rápidas, debido a que el tamaño de partícula es muy pequeño y las condiciones son de mezclado intenso. La rapidez de adsorción es una función de las características de la partícula, las características del adsorbato, las condiciones de mezclado, incluyendo velocidad de mezclado, recirculaciones y la incorporación de CAP en los flóculos.

1.2.3.2 Respecto al tipo de materia prima utilizada en su producción.

El carbón activado se puede clasificar de acuerdo a su procedencia en: carbones de origen animal también llamado carbón de hueso, carbones de origen vegetal y carbones de origen mineral.

- **Carbón de Hueso:** Consiste aproximadamente de un 90% de materia mineral, principalmente fosfato de calcio y 10% de carbón. Es de estructura granular. Se usa en la

remoción de fluoruros en agua.

- **Carbón Vegetal:** Este tipo de carbones se obtienen a partir de madera, cáscara de coco, etc.. se aplican generalmente con baja agitación al líquido que se va a tratar, es un periodo de 10 a 30 minutos y posteriormente se remueve por filtración.

Las principales aplicaciones en las fases vapor y gas son para el carbón granular. Los compuestos de azufre se remueven durante el proceso de purificación de corrientes de hidrógeno y de acetileno. La piridina se puede adsorber de la purificación del amoniaco. A partir del dióxido de carbono se puede obtener hielo seco y bebidas carbonatadas.

El carbón granular de origen vegetal se utiliza para la recuperación de solventes orgánicos, para purificar el aire de los cuartos por recirculación a través de un lecho de carbón.

En tratamiento de aguas, el carbón vegetal de madera se emplea para eliminar olores intensos y cantidades importantes de grasas, aceites y otros compuestos de elevado peso molecular. El carbón de cáscara de coco, se emplea eliminar compuestos volátiles y solventes de bajo peso molecular.

- **Carbón Mineral:** Los nombres de carbón de piedra o carbón mineral se suelen utilizar para designar todos los carbones fósiles. Es un material suave con lustre sedoso.

Los combustibles minerales sólidos se hallan parcialmente carbonizados; son lignitos con más de 40% de materias volátiles, excesivamente húmedos y ricos en oxígeno, cuyo poder calorífico es inferior al de la hulla. Más reciente aún, puesto que su fabricación se prosigue actualmente, es la turba, que contiene, al estado seco, 35% de oxígeno y recién extraída, cuatro quintas partes de agua.

Este tipo de carbón es empleado para aguas residuales en las que predominen compuestos de peso molecular intermedio o se presente una diversidad de compuestos; así

como en la potabilización de agua con color producido por algas.

1.2.4 Características del carbón activado.

1.2.4.1 Características físicas.

Se ha demostrado que los carbones activados fabricados poseen una estructura cristalina cercana a la del grafito. Dicha estructura ha sido descrita como compuesta de capas de planos hexagonales constituidas por carbono. El enlace C-C es de 1.42 \AA y la distancia entre dos capas es de 3.35 \AA .

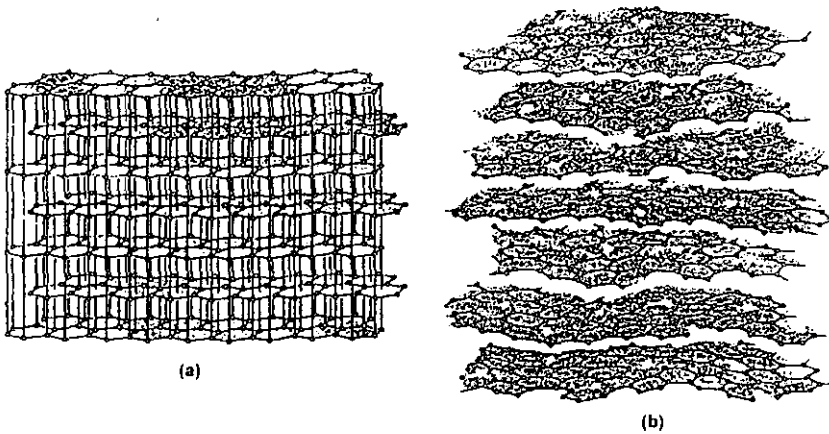


FIGURA 1.1 Representación esquemática de la estructura cristalina del grafito (a),
y de la estructura de un carbón activado (b).

Las propiedades adsorbentes del carbón activado se caracterizan por parámetros como la superficie total, el volumen total de poros y la distribución del volumen de poro.

Un ejemplo clásico de la clasificación porosa del carbón activado es la que presenta

Dubinin^[15] y la EPA (Environmental Protection Agency). Dubinin señala tres categorías de poros en un carbón activado en función de sus diámetros: los micro, los meso y los macroporos. Los macroporos pueden considerarse fisuras y no juegan un papel importante en la adsorción. Los mesoporos, también llamados poros de transición, tienen importancia sobre todo en la cinética de adsorción. En efecto, los mesoporos representan las vías de acceso de los solutos hacia los microporos, donde la adsorción se lleva a cabo principalmente.

La IUPAC también clasifica los poros del carbón en función de su diámetro en microporos ($<20\text{Å}$), mesoporos ($20 - 500\text{Å}$) y macroporos (500Å).

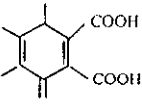
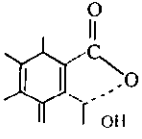
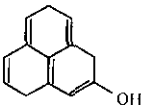
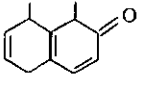
1.2.4.2 Características químicas.

Funciones de superficie. El carbón activado se compone de una pureza que varía entre 80 y 95%. Su esqueleto molecular se asemeja a las mallas de grafito que contienen además del carbón otros elementos tales como hidrógeno y oxígeno. Esos elementos se encuentran combinados formando radicales carboxilos e hidroxilos, a los que se les llama *funciones oxigenadas de superficie*^[16].

Las funciones de superficie pueden presentar propiedades ácidas o básicas en función de las materias primas y de las técnicas de activación utilizadas para fabricar el carbón activado. Las funciones más comúnmente presentes en la superficie de los carbones activados son aquellas que poseen un carácter ácido.

Entre las clasificaciones de las funciones ácidas, la más aceptada es la que propone Boehm^[17]. Esta clasificación divide en cuatro grupos las funciones ácidas que se muestran en la siguiente tabla.

TABLA 1.1 Clasificación de las funciones ácidas propuesta por Boehm.

Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4
			
Acidos Carboxílicos	Lactonas	Fenoles	Carbonilos

Puri ^[18, 19] propone otra clasificación que divide las funciones de superficie ácidas en dos grupos que se identifican después de calentar el carbón a altas temperaturas:

- 1) Las funciones que liberan CO (650°C)
- 2) Las funciones que liberan CO₂ (1000°C)

Si se relacionan las clasificaciones propuestas por Boehm y Puri, las funciones que liberan CO corresponden a los grupos 1 y 2, mientras que aquellas que liberan CO₂ corresponden a las de los grupos 3 y 4. Por otro lado, Cookson ^[20] adicionó a las lista propuesta por Boehm, el grupo de las lactonas de tipo fluoresceína, el grupo de los anhídridos carboxílicos y el grupo de peróxidos cíclicos.

En el caso de las funciones básicas, se han propuesto dos grupos: la función cromera y la función pirona.

Las técnicas de identificación de los diferentes grupos ácidos y básicos son diversas, entre las que se incluyen la polarografía, la espectroscopía infrarroja, la electroquímica, las reacciones químicas específicas, la descomposición térmica, entre otras.

Las funciones de superficie contribuyen a impartir un carácter hidrófilo al carbón.

Estos grupos promocionan también sitios de adsorción para los compuestos polares.

Compuestos minerales. Además de las funciones oxigenadas de superficie de los carbones activados, se pueden encontrar presentes compuestos minerales. Se han encontrado iones tales como calcio, cobre, fierro, níquel, sodio, magnesio, silicio y aluminio.

Los compuestos minerales presentes en los carbones activados dependen de la materia prima y del proceso empleados para su fabricación. Algunas de esas especies químicas, como es el caso del PO_4^{3-} son esenciales para el desarrollo bacteriano en filtros de carbón activado que se utilizan en el tratamiento de aguas. En estas instalaciones, la eliminación fisicoquímica de compuestos orgánicos se combina a una eliminación por vía biológica.

Poder reductor. El carbón activado presenta tres propiedades esenciales en el tratamiento de aguas: un poder adsorbente, el papel de soporte bacteriano y un poder reductor ligado a la deslocalización de electrones en el seno de su estructura.

Este adsorbente descompone por reacción química (y no por adsorción) las sustancias fuertemente oxidantes como el cloro libre, el ozono y el permanganato de potasio. Esta propiedad permite sobreoxidar las aguas tratadas antes del filtro de carbón activado, ya que la concentración residual de oxidante desciende de manera muy importante después de la filtración. Estas características reductoras del carbón activado, permiten explicar la proliferación bacteriana dentro de los filtros de carbón, incluso cuando son alimentados con aguas altamente cloradas u ozonadas.

1.2.5 Aplicaciones del carbón activado

Potabilización

Se lleva a cabo en las purificadoras, refresqueras, en los filtros de agua industriales y caseros. En los municipios que tienen servicios de agua potable.

Purificación de agua para proceso

Existen ciertos ramos industriales en los que requieren el agua de proceso con grado característico de pureza, como el farmacéutico, el de semiconductores y el químico.

Un ejemplo típico de aplicación de carbón granular es la remoción de cloro libre, ya que este compuesto ataca las membranas de ósmosis inversa y las resinas de intercambio iónico. El agua de uso industrial puede proceder de un sistema de distribución municipal o directamente de un cuerpo de agua. En el primer caso, el agua normalmente llega clorada al usuario, que en este caso es la industria, en el segundo caso el usuario suele clorarla con fines de desinfección o para prevenir el crecimiento de algas o bacterias en los tanques de almacenamiento. El cloro residual libre debe eliminarse antes de dar uso al agua, ya que afecta a diversos procesos y equipos industriales.

Algunas otras utilidades del carbón activado en el tratamiento de agua de servicios y procesos son la eliminación de:

- Aceites y grasas disueltos en los condensados de retorno a las calderas, para evitar que éstas se ensucien.
- Cloro y orgánicos en agua de lavado de semiconductores.
- Orgánicos en agua bidestilada para análisis químico y clínico.
- Orgánicos en agua para preparar medicamentos y soluciones intravenosas.

Eliminación de compuestos carcinogénicos con carbón activado

Los compuestos carcinogénicos no tienen una característica en particular, sino que pueden ser de muy diversos tipos como proteínas, aminoácidos, algas y sus compuestos de descomposición, algunos ácidos y muchos otros más.

Estos compuestos llegan a los depósitos y corrientes naturales de agua, desde

diferentes fuentes, por ejemplo las descargas industriales, los efluentes de las plantas de tratamiento de aguas municipales, las sustancias químicas utilizadas en la agricultura y los lixiviados de desechos sólidos tanto domésticos como industriales.

El uso de cloro como desinfectante para el agua elimina virus y bacterias, pero produce un efecto secundario sumamente dañino a largo plazo. Este efecto se debe a que el cloro reacciona con las sustancias orgánicas que transporta el agua, formando compuestos carcinógenos.

También pueden originarse estos compuestos a lo largo de las líneas de distribución de agua potable o en los depósitos de almacenamiento. Causas de ellos son:

- El cloro residual del agua, que no ha reaccionado ni se ha evaporado, continúa reaccionando con compuestos orgánicos.
- El crecimiento microbiológico dentro de las tuberías y depósitos y la conversión de compuestos inactivos en carcinógenos.
- Las infiltraciones de compuestos, como algunos hidrocarburos provenientes de los recubrimientos de los tanques y tuberías.

Para resolver este problema, se ha encontrado que el CAG tiene una mayor selectividad por los compuestos carcinógenos entre los distintos compuestos que transporta el agua. Es tan fuerte esta selectividad que aun cuando el CAG se ha saturado, sigue reteniendo compuestos carcinógenos a la vez que deja escapar otros compuestos menos peligrosos.

Otras aplicaciones

El carbón activado se utiliza desde hace mucho tiempo en la potabilización de agua. Hasta la década de los ochenta su objetivo era la adsorción de olor y sabor, o la eliminación

de cloro residual que permanece después de la etapa de desinfección e imparte un mal sabor al agua.

Actualmente, no sólo se aplica con los fines anteriores, sino también para retener contaminantes orgánicos y sintéticos muy dañinos que se han encontrado en la mayor parte de las fuentes de agua potable incluyendo los pozos profundos. El carbón activado se considera como la mejor tecnología disponible para cumplir con estas tareas y, por lo tanto, es uno de los procesos básicos de potabilización que forman parte de las plantas potabilizadoras.

Aunque existe mucha experiencia en la utilización del carbón activado, es muy poca la información publicada al respecto, sobre todo en países de habla hispana. Además, su estudio no se incluye en las carreras profesionales que tiene relación con el tratamiento de aguas. Por lo tanto, en la mayoría de los casos, los técnicos desconocen los principios básicos que rigen su funcionamiento y es común encontrar que los adsorbedores operan en condiciones que distan de ser óptimas, y que existe mucha dificultad en la solución de sus problemas operativos.

Purificación de Líquidos

La adsorción en sistemas líquidos puede mejorarse con los siguientes factores:

- Selección del carbón óptimo, en términos de su área superficial y del diámetro promedio de los poros. El diámetro de poro más adecuado es aquel cuyo tamaño es de 1.5 a 2.0 veces la segunda magnitud mayor de las moléculas a adsorber. Esto se debe a que la molécula es retenida no sólo por una pared del poro, sino por todo el perímetro que la rodea. Es importante resaltar que el carbón activado no adsorbe moléculas extremadamente grandes, como las de los polímeros, ya que éstas no caben en los poros.

- Aplicar el carbón a la temperatura correcta.

- Utilizar la mayor concentración posible de soluto.

Decoloración.

Normalmente el carbón activado retiene pequeñas cantidades de materia colorida. El ejemplo más común de esta aplicación es la producción de glucosa y azúcar blanca. El carbón se utiliza también para mejorar la claridad y el sabor del vino, la cereza, vinagres, vodka, ron y otras bebidas alcohólicas; en la purificación de compuestos farmacéuticos intermedios y de productos químicos como ésteres, tensoactivos y alcoholes.

Purificación de gases o vapores.

La adsorción física en sistemas en fase vapor es más eficiente a menor temperatura y a mayor presión. Dentro de una serie homóloga, la eficiencia de la adsorción es directamente proporcional al peso molecular. Por ejemplo, el pentano se adsorbe más fácilmente que el propano.

En sistemas con varios componentes, existe un efecto de adsorción preferencial que consiste en que los compuestos de mayor peso molecular desplazan a los de menor peso molecular que ya habían sido adsorbidos.

También existe un efecto de adsorción preferencial en sistemas que contienen compuestos tanto polares como no polares. Un ejemplo de esto es la recuperación de solventes, en la que un solvente no polar se retiene con mayor eficiencia y más rápidamente que el vapor de agua presente en la corriente de aire. Algunas especies sólo se adsorben en bajo nivel independientemente de las condiciones. Un método para mejorar la adsorción de estos compuestos consiste en seleccionar un material que reaccione químicamente con el compuesto e impregnarlo en la superficie del carbón (quimisorción).

Recuperación de solventes.

Muchas industrias utilizan solventes en sus procesos, por ejemplo las industrias de pinturas, adhesivos, hules y plásticos. En muchos casos no es aceptable, desde el punto de vista económico ni ecológico, permitir descargas sustanciales de solventes a la atmósfera.

El carbón activado es muy efectivo en la adsorción de la mayoría de los solventes industriales, y es factible lograr su recuperación por medio del proceso de adsorción para cualquier concentración inferior a 1000 ppm.

El aire que contiene al solvente se pasa por el lecho de carbón durante un ciclo, o hasta que se satura el carbón y el solvente empieza a escapar con el aire. La cantidad de solvente adsorbido está entre 20% y 50% del peso del carbón. Ejemplos de solventes recuperados por este método son: xileno, cloruro de metilo, pentano, metil-etil-cetona, tetrahidrofurano, benceno, tolueno, éter de petróleo.

1.3 ADSORBEDOR DE LECHO FIJO

Las columnas convencionales son de lecho fijo o de lecho móvil a contracorriente debido a sus bajos costos de operación y al buen aprovechamiento de la capacidad del adsorbente.

Los sistemas de lecho fijo pueden emplear flujo ascendente o descendente del líquido; sin embargo, los de flujo descendente son más comunes puesto que el adsorbente puede también funcionar como filtro para sólidos suspendidos.

Los sistemas de lecho móvil a contracorriente emplean flujo ascendente de líquido y flujo descendente del adsorbente ya que éste último puede ser movido por la fuerza de gravedad.

Ambos sistemas pueden emplear gravedad o flujo a presión del líquido. La figura

1.2 muestra una columna de carbón de lecho fijo utilizada en tratamiento de agua, empleando flujo descendente.

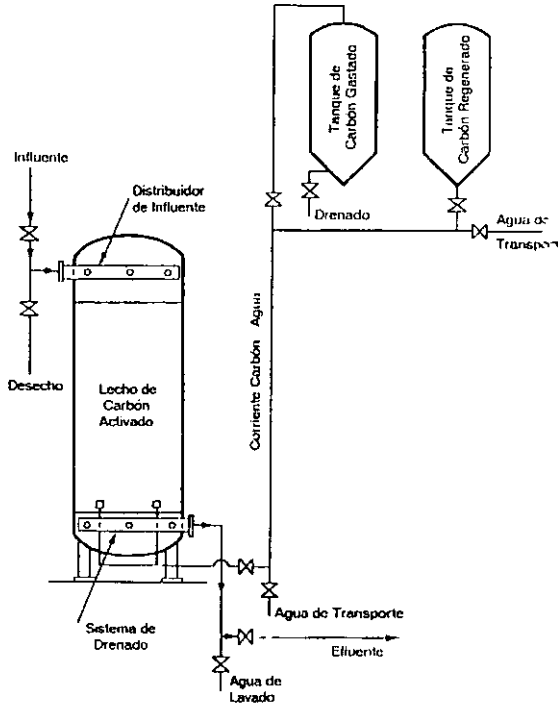


FIGURA 1.2 Columna de carbón activado de lecho fijo.

La columna contiene un distribuidor de influente y un sistema de drenado. Cuando se llega a una alta acumulación de sólidos suspendidos, la operación es detenida para realizar un retrolavado. Por otro lado, para remover el carbón activado y someterlo a regeneración, la operación es detenida y se utiliza agua en retrolavado para después retirar la mezcla agua-carbón por el fondo de la columna. La mezcla es conducida a tanques de carbón saturado mediante agua de transporte; este carbón es drenado y se regenera utilizando un horno. El carbón así regenerado es almacenado. Nuevamente se utiliza agua de transporte para arrastrar el carbón regenerado y rellenar la columna. La mezcla carbón-

agua se introduce por la parte inferior de la columna hasta alcanzar el nivel requerido.

Conforme se introduce al adsorbedor, el adsorbato contenido en el agua comienza a ser removido por el carbón activado, hasta que éste se satura a una concentración que corresponde a la del influente.

La zona donde la concentración del líquido disminuye del valor del influente a un valor casi nulo se conoce como *zona de adsorción* o *zona de transferencia de masa*, Z_s , y esta zona va desplazándose hacia abajo de la columna conforme transcurre el tiempo en que es operada. Arriba de esta zona, el soluto en la fase líquida está en equilibrio con el que se encuentra en la fase sólida, y su concentración es C_o .

El frente de adsorción para la fase líquida se muestra en la figura 1.3 a dos diferentes tiempos, t_1 y t_2 . Ambos frentes presentan la misma forma geométrica; sin embargo, se ha desplazado junto con la zona de adsorción.

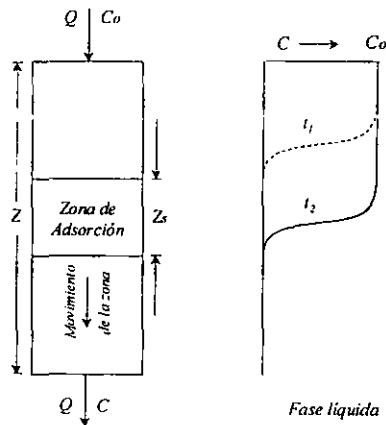


FIGURA 1.3 Frente de adsorción en fase líquida.

Conforme la zona de adsorción desciende por la columna, la concentración de

soluto en el efluente es teóricamente de cero aunque esto no es completamente cierto puesto que una pequeña cantidad de soluto logra pasar hasta el efluente, pero resulta ser despreciable.

Una vez que la zona de adsorción llega al fondo de la columna, la concentración en el efluente se incrementa comenzando lo que se conoce como *curva de ruptura*.

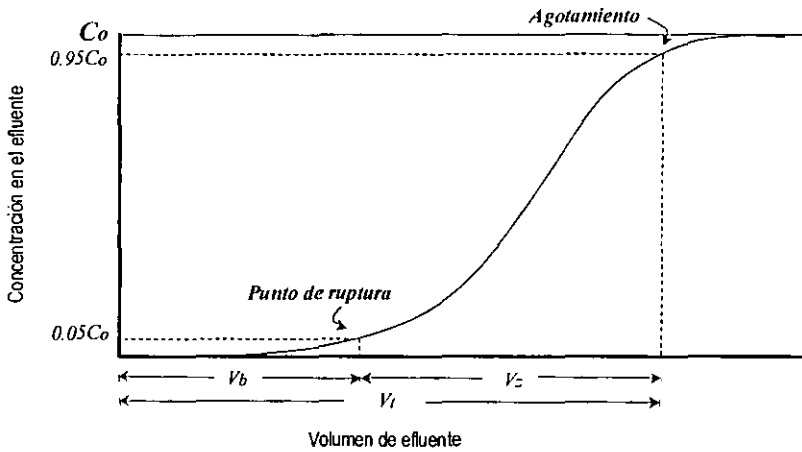


FIGURA 1.4 Curva de Ruptura.

La curva de ruptura para una columna, muestra la concentración de soluto en el efluente contra el volumen de efluente recibido. Conforme la zona de adsorción va desapareciendo, la concentración se incrementa hasta llegar a C_0 ; se dice entonces que la columna está agotada.

Dependiendo del criterio, se establece una concentración límite permisible de efluente, C_a , que normalmente es considerada como $0.05C_0$, y para esta concentración se

tiene un volumen correspondiente de efluente, V_b .

Asimismo, el agotamiento se considera que ocurre a $0.95 C_0$ y su correspondiente volumen de efluente, como se ve en la Figura 1.4 es V_r .

CAPITULO 2

ALGORITMO DE CALCULO DE UN PROGRAMA DE DISEÑO DE COLUMNAS DE CARBON ACTIVADO PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS

El diseño de columnas de carbón activado para el tratamiento de aguas implica cálculos, manejo de criterios, conocimiento de límites en normatividad y hasta desarrollos experimentales. Todos estos factores pueden a veces hacer compleja y confusa la tarea de llegar a un adecuado dimensionamiento del equipo.

Con una secuencia clara de todo el procedimiento que hay que aplicar y un programa de cómputo para efectuar los cálculos, es posible ahorrar tiempo y llegar a un resultado satisfactorio de las características del equipo.

Con base en lo expuesto, este trabajo de tesis presenta una metodología y un programa de cálculo de columnas de carbón activado. Este programa pretende facilitar al usuario la tarea de diseñar un equipo de adsorción, presentándole una secuencia de los pasos a seguir, desde la determinación del componente que más excede la normatividad en su agua, hasta obtener las dimensiones del equipo.

2.1 DESCRIPCION DEL PROCEDIMIENTO

El procedimiento para llevar a cabo el dimensionamiento de columnas de carbón, empleando el programa desarrollado, consta de una serie de pasos que se describen a continuación de manera secuencial y que se encuentran representados de manera gráfica en el siguiente diagrama de flujo (Fig 2.1).

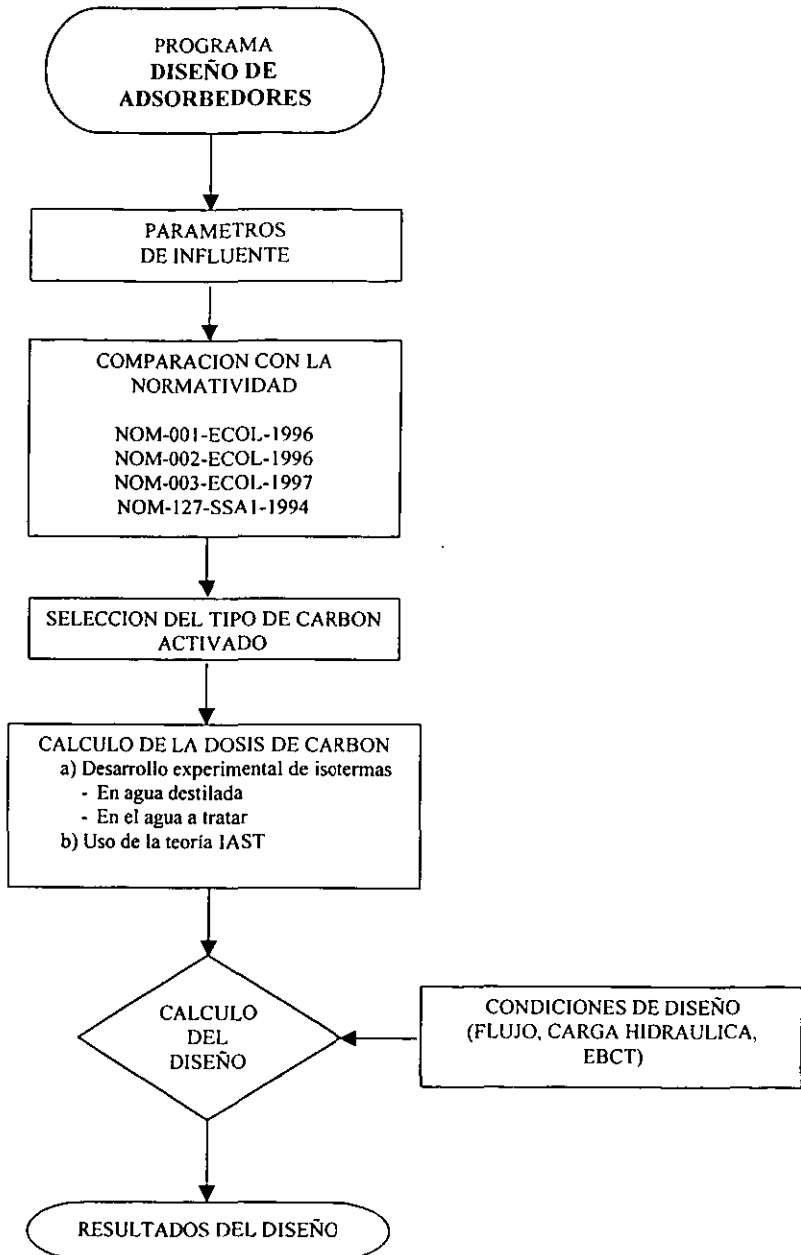


FIGURA 2.1 Diagrama de flujo del cálculo de diseño.

2.1.1 Metodología de cálculo de columnas de adsorción

1. Comparación de parámetros del agua a tratar con respecto a la normatividad existente.

Las normas incluidas en el programa, contra las cuales se puede hacer comparación, son la NOM-127-SSA1-1994, la NOM-001-ECOL-1996, la NOM-002-ECOL-1996 y la NOM-003-ECOL-1996. Se incluyeron solamente los parámetros que pueden ser removidos por tratamiento con carbón activado. El programa indica el o los parámetros que más exceden el límite máximo permisible.

2. Selección del tipo de carbón activado a utilizar.

La selección del tipo de carbón dependerá de la naturaleza del compuesto que se desea remover, así como también del tipo de agua por tratar. Es de gran ayuda saber si los compuestos que se encuentran en mayor presencia son de alto, medio o bajo peso molecular, o si se trata de una gran variedad en cuanto al tamaño de sus moléculas.

La Tabla 2.1 resume las principales aplicaciones de los carbones según el origen de la materia prima. Asimismo, presenta algunos ejemplos de carbones activados comerciales y sus características principales.

3. Cálculo de la dosis de carbón activado

Una vez seleccionado el carbón activado, se construyen las isotermas de adsorción para el componente que se desea remover, tanto en agua destilada como en el agua a tratar, con el propósito de obtener los parámetros experimentales que requiere el programa. El procedimiento para construir estas isotermas se describe de manera detallada en el Apéndice A (Norma ASTM). Con los valores obtenidos, se efectúa el cálculo de la dosis de carbón

TABLA 2.1 Principales aplicaciones del carbón activado

TIPO DE CARBÓN	PRINCIPAL APLICACIÓN	OBSERVACIONES	ADSORBENTES COMERCIALES	FABRICANTES	CARACTERISTICAS
Vegetal (Madera de pino)	Agua residual con colores intensos y/o con cantidades sustanciales de grasas, aceites y otros compuestos de alto peso molecular.	Se requiere un carbón activado macroporoso debido a que las moléculas mencionadas son de gran tamaño. Se utiliza también en la industria textil y del petróleo. Por su poca dureza, normalmente se aplica en polvo.	PICAZINE	PICA (Francia)	Densidad = 0.25 g/cm ³ Ind. azul de metileno = 250 g/g Ind. de I ₂ = 770 mg/g
	Potabilización de agua residual con alto contenido de MON.		VG_8X30	CLARIMEX (México)	
Mineral Lignítico	Agua residual cuyos contaminantes sean muy diversos, como ocurre en aguas municipales.	Este carbón activado tiene poros de diversos tamaños, por lo que es el adecuado para adsorber moléculas en un gran intervalo de tamaño	F 400	CALGON (USA)	Densidad 0.5 g/cm ³ Indice de I ₂ = 1050 mg/g Area específica = 1100 m ² /g
			CAGR 12X40	CLARIMEX (México)	
Mineral bituminoso	Aguas residuales en las que predominen contaminantes de peso molecular intermedio. Potabilización de agua superficial o con un ligero olor producido por algas.	Se trata de un carbón mesoporoso. Es menos duro que el de coco, pero más adecuado cuando hay una alta proporción de contaminantes volátiles.	LQ 1000	CARBOCHEM (USA)	Densidad = 0.47 g/cm ³ Indice de I ₂ = 1000 mg/g Area específica = 1100 m ² /g
Cáscara de coco	Potabilización de agua de pozo.	Es el carbón con más proporción de microporos, por lo tanto es el más adecuado para retener moléculas pequeñas. Es el carbón activado utilizado cuando solamente se requiere decolorar, ya que es el más duro y resiste la abrasión	PICANC 60	PICA (Francia)	Densidad = 0.55 g/cm ³ Indice de I ₂ = 1000 mg/g Area específica = 800 m ² /g
	Eliminación de sabor y compuestos volátiles en agua superficial. Agua residual contaminada con solventes volátiles u otras moléculas de bajo peso molecular. Decoloración.		GC 700	NOBRAC (México)	

mediante la teoría IAS; este algoritmo de cálculo se detalla en la sección 2.2.1

4. Cálculo de los parámetros de diseño del equipo.

Finalmente, una vez que se tienen los datos de las isotermas, es posible efectuar el cálculo del diseño con el programa. Los datos necesarios para efectuar la corrida en el programa se muestran en siguiente tabla, en las unidades indicadas.

TABLA 2.2 Datos requeridos por el programa para el cálculo de diseño de la columna de adsorción

Parámetro	Unidades	Descripción
$C_{1,0}$	$\mu\text{g/L}$	Concentración inicial del componente por remover
K_1	$(\mu\text{g/g})(\mu\text{g/L})^{-1/n}$	Constante de Freundlich componente uno (agua destilada)
n_1	Adim	Constante de Freundlich componente uno (agua destilada)
q_1^a	$\mu\text{g/g}$	Capacidades en los tres puntos de la isoterma del componente uno (agua a tratar)
q_1^b	$\mu\text{g/g}$	
q_1^c	$\mu\text{g/g}$	
C_1^a	$\mu\text{g/L}$	Concentraciones en los tres puntos de la isoterma del componente uno (agua a tratar)
C_1^b	$\mu\text{g/L}$	
C_1^c	$\mu\text{g/L}$	
Q	m^3/s	Flujo de diseño del líquido
ρ_s	ton/m^3	Densidad del carbón activado
C_s	$\mu\text{g/L}$	Concentración de salida deseada

El usuario deberá indicar si desea operar la columna con flujo ascendente o descendente, y, de acuerdo a esta selección, tendrá un intervalo de valores de carga hidráulica recomendados. Para un flujo descendente, el intervalo de valores recomendado^[51] es entre 25 y 34 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$; mientras que para un flujo ascendente, el intervalo recomendado se encuentra entre 35 y 45 $\text{m}^3/\text{m}^2\text{h}$. El valor de la carga hidráulica podrá ser modificado mediante un objeto de control una vez que se presenten los resultados. De esta manera, el usuario podrá observar la variación de las especificaciones de la columna de adsorción cuando cambian los valores de la carga hidráulica.

De la misma manera que para la carga hidráulica, el usuario podrá modificar el valor de tiempo de contacto de lecho vacío (EBCT), que se da en minutos, una vez que se obtengan los resultados del diseño. El objeto de control en este caso, permite mover el valor en un intervalo de 1 hasta 30. Los valores más comunes de tiempo de contacto se encuentran entre 10 y 20 minutos, es posible considerar este intervalo como un criterio para indicar un tiempo de contacto y efectuar un diseño; sin embargo, se recomienda obtener el valor real mediante pruebas con columnas piloto.

La hoja de resultados que genera el programa, muestra los siguientes parámetros.

TABLA 2.3 Resultados generados por el programa.

Parámetro	Unidades	Descripción
A	m ²	Area transversal de la columna
D	m	Diámetro de la columna
H	m	Altura de lecho
H _c	m	Altura de la columna
V _L	m ³	Volumen de lecho
C _c	mg/L	Dosis de carbón activado
M _c	ton	Masa de carbón activado
EBCT	min	Tiempo de contacto de lecho vacío
C _h	m ³ /m ² h	Carga hidráulica
M _g	kg/día	Consumo de carbón
T _{op}	años	Tiempo de operación
V _T	m ³	Volumen total de liquido por tratar
C _{2,0}	µg/L	Concentración inicial del componente dos
K ₂	(µg/g)(µg/L) ^{-1/n}	Constante de Freundlich componente dos
n ₂	Adim	Constante de Freundlich componente dos

2.2 PLANTEAMIENTO DE LAS ECUACIONES EN EL DISEÑO

2.2.1 Determinación de la dosis de carbón activado.

El algoritmo propuesto por Najm^[4] permite calcular los valores de las capacidades q_1 y q_2 . Sin embargo, nuestro problema no es el cálculo de estas capacidades sino la dosis

de carbón activado, C_1 , requerida para remover cierto compuesto clave (compuesto 1) y llegar hasta una concentración de dicho compuesto en el efluente de acuerdo a la normatividad.

Planteando el mismo sistema de seis ecuaciones descrito en el capítulo uno, es posible calcular los parámetros del componente dos (componente global), $C_{2,0}$, K_2 , n_2 , q_2^a , q_2^b y q_2^c , mediante el suministro de los valores experimentales $C_{1,0}$, K_1 , n_1 , C_c^a , C_c^b , C_c^c , q_1^a , q_1^b y q_1^c , que proporciona el usuario.

La diferencia, en nuestro caso, es que podemos conocer de inicio el valor de q_1 que es posible calcular con la ecuación de Freundlich.

$$q_1 = K_1 C_1^{1/n_1}$$

puesto que tenemos los valores experimentales de K_1 y n_1 , y sabemos la concentración, C_1 , que deberá tener la fase líquida al finalizar el proceso.

Una vez que se conocen los parámetros del componente global, se resuelven las ecuaciones 1.6 y 1.7 (Capítulo 1), teniendo como incógnitas a C_c y q_2 .

2.2.1.1 Método numérico y resolución.

El sistema de seis ecuaciones es no lineal. El método que se utilizó para su resolución es el Newton-Raphson multivariable debido a su rapidez de convergencia y la obtención de resultados satisfactorios, además de que los cálculos involucrados no son tan complejos como sucede con otros métodos.

De acuerdo al planteamiento del método^[40], el sistema de ecuaciones por resolver tiene la siguiente forma matricial

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \vdots \\ \Delta x_n \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Que en forma vectorial se expresa como

$$J \Delta X = -F$$

Donde

J = Matriz de derivadas parciales (Jacobiano)

ΔX = Vector de incrementos por encontrar

F = Vector de funciones

Nuestro sistema queda entonces de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_1}{\partial K_2} & \frac{\partial f_1}{\partial n_2} & \frac{\partial f_1}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_1}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_1}{\partial q_2^c} \\ \frac{\partial f_2}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_2}{\partial K_2} & \frac{\partial f_2}{\partial n_2} & \frac{\partial f_2}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_2}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_2}{\partial q_2^c} \\ \frac{\partial f_3}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_3}{\partial K_2} & \frac{\partial f_3}{\partial n_2} & \frac{\partial f_3}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_3}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_3}{\partial q_2^c} \\ \frac{\partial f_4}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_4}{\partial K_2} & \frac{\partial f_4}{\partial n_2} & \frac{\partial f_4}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_4}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_4}{\partial q_2^c} \\ \frac{\partial f_5}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_5}{\partial K_2} & \frac{\partial f_5}{\partial n_2} & \frac{\partial f_5}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_5}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_5}{\partial q_2^c} \\ \frac{\partial f_6}{\partial C_{2,0}} & \frac{\partial f_6}{\partial K_2} & \frac{\partial f_6}{\partial n_2} & \frac{\partial f_6}{\partial q_2^a} & \frac{\partial f_6}{\partial q_2^b} & \frac{\partial f_6}{\partial q_2^c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta C_{2,0} \\ \Delta K_2 \\ \Delta n_2 \\ \Delta q_2^a \\ \Delta q_2^b \\ \Delta q_2^c \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{pmatrix}$$

Las derivadas parciales involucradas son las siguientes:

Con respecto a $C_{2,0}$

$$\frac{\partial f_1}{\partial C_{2,0}} = \frac{\partial f_3}{\partial C_{2,0}} = \frac{\partial f_5}{\partial C_{2,0}} = 0 \quad \text{Ec. 2.1}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial C_{2,0}} = \frac{\partial f_4}{\partial C_{2,0}} = \frac{\partial f_6}{\partial C_{2,0}} = 1 \quad \text{Ec. 2.2}$$

Con respecto a K_2

$$\frac{\partial f_1}{\partial K_2} = \frac{\partial f_3}{\partial K_2} = \frac{\partial f_5}{\partial K_2} = 0 \quad \text{Ec. 2.3}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial K_2} = \left(\frac{q_2^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{K_2^2} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \quad \text{Ec. 2.4}$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial K_2} = \left(\frac{q_2^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{K_2^2} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \quad \text{Ec. 2.5}$$

$$\frac{\partial f_6}{\partial K_2} = \left(\frac{q_2^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{K_2^2} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \quad \text{Ec. 2.6}$$

Con respecto a n_2

$$\frac{\partial f_1}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_1^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{q_2^a}{K_1} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_1 K_1} \right)^{n_1 - 1} \quad \text{Ec. 2.7}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_2^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left[\text{Ln} \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right) - \left(\frac{n_1 q_1^a}{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.8}$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_1^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{q_2^b}{K_1} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_1 K_1} \right)^{n_1-1} \quad \text{Ec. 2.9}$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_2^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left[\text{Ln} \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right) - \left(\frac{n_1 q_1^b}{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.10}$$

$$\frac{\partial f_5}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_1^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{q_2^c}{K_1} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_1 K_1} \right)^{n_1-1} \quad \text{Ec. 2.11}$$

$$\frac{\partial f_6}{\partial n_2} = \left(-\frac{q_2^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left[\text{Ln} \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right) - \left(\frac{n_1 q_1^c}{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.12}$$

Con respecto a q_2^a

$$\frac{\partial f_1}{\partial q_2^a} = \left(-\frac{q_1^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_1 K_1} \right)^{n_1-1} \left(\frac{n_2}{K_1} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_1 K_1} \right)^{n_1} \left(\frac{q_1^a}{(q_1^a + q_2^a)^2} \right) \quad \text{Ec. 2.13}$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial q_2^a} = -C_c^a - \left[\left(\frac{q_2^a}{q_1^a + q_2^a} \right) \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right)^{n_2-1} \left(\frac{n_2}{K_2} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^a + n_2 q_2^a}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left(\frac{q_1^a}{(q_1^a + q_2^a)^2} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.14}$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial q_2^a} = \frac{\partial f_4}{\partial q_2^a} = \frac{\partial f_5}{\partial q_2^a} = \frac{\partial f_6}{\partial q_2^a} = 0 \quad \text{Ec. 2.15}$$

Con respecto a q_2^b

$$\frac{\partial f_1}{\partial q_2^b} = \frac{\partial f_2}{\partial q_2^b} = \frac{\partial f_5}{\partial q_2^b} = \frac{\partial f_6}{\partial q_2^b} = 0 \quad \text{Ec. 2.16}$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial q_2^b} = \left(-\frac{q_1^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_1 K_1} \right)^{n_1 - 1} \left(\frac{n_2}{K_1} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_1 K_1} \right)^{n_1} \left(\frac{q_1^b}{(q_1^b + q_2^b)^2} \right) \quad \text{Ec. 2.17}$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial q_2^b} = -C_c^b - \left[\left(\frac{q_2^b}{q_1^b + q_2^b} \right) \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \left(\frac{n_2}{K_2} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^b + n_2 q_2^b}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left(\frac{q_1^b}{(q_1^b + q_2^b)^2} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.18}$$

Con respecto a q_2^c

$$\frac{\partial f_1}{\partial q_2^c} = \frac{\partial f_2}{\partial q_2^c} = \frac{\partial f_3}{\partial q_2^c} = \frac{\partial f_4}{\partial q_2^c} = 0 \quad \text{Ec. 2.19}$$

$$\frac{\partial f_5}{\partial q_2^c} = \left(-\frac{q_1^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_1 K_1} \right)^{n_1 - 1} \left(\frac{n_2}{K_1} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_1 K_1} \right)^{n_1} \left(\frac{q_1^c}{(q_1^c + q_2^c)^2} \right) \quad \text{Ec. 2.20}$$

$$\frac{\partial f_6}{\partial q_2^c} = -C_c^c - \left[\left(\frac{q_2^c}{q_1^c + q_2^c} \right) \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \left(\frac{n_2}{K_2} \right) + \left(\frac{n_1 q_1^c + n_2 q_2^c}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left(\frac{q_1^c}{(q_1^c + q_2^c)^2} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.21}$$

El vector de incrementos se calcula entonces por

$$[\Delta] = [J^{-1}] [-F] \quad \text{Ec. 2.22}$$

Los valores para la nueva iteración se calculan adicionando su respectivo incremento a cada variable

$$\begin{pmatrix} C_{2,0} \\ K_2 \\ n_2 \\ q_2^a \\ q_2^b \\ q_2^c \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} C_{2,0} \\ K_2 \\ n_2 \\ q_2^a \\ q_2^b \\ q_2^c \end{pmatrix}^k + \begin{pmatrix} \Delta C_{2,0} \\ \Delta K_2 \\ \Delta n_2 \\ \Delta q_2^a \\ \Delta q_2^b \\ \Delta q_2^c \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 2.23}$$

La función error, E , que nos indica si hemos llegado a la solución, fue planteada de la siguiente forma.

$$E = \sum (x^{k+1} - x^k)^2 \quad \text{Ec. 2.24}$$

donde x es cada una de las seis variables del sistema y k es el número de iteración.

La dosis de carbón puede conocerse entonces, planteando nuevamente el método Newton-Raphson para las ecuaciones 1.6 y 1.7

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial C_c} & \frac{\partial F_1}{\partial q_2} \\ \frac{\partial F_2}{\partial C_c} & \frac{\partial F_2}{\partial q_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta C_c \\ \Delta q_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$$

Y las derivadas son las siguientes

$$\frac{\partial F_1}{\partial C_c} = -q_1 \quad \text{Ec. 2.25}$$

$$\frac{\partial F_1}{\partial q_2} = \left(-\frac{q_1}{q_1 + q_2} \right) \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_1 K_1} \right)^{n_1 - 1} \left(\frac{n_2}{K_1} \right) + \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_1 K_1} \right)^{n_1} \left(\frac{-q_1}{(q_1 + q_2)^2} \right) \quad \text{Ec. 2.26}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial C_c} = -q_2 \quad \text{Ec. 2.27}$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial q_2} = -C_c - \left[\left(\frac{q_2}{q_1 + q_2} \right) \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_2 K_2} \right)^{n_2 - 1} \left(\frac{n_2}{K_2} \right) + \left(\frac{n_1 q_1 + n_2 q_2}{n_2 K_2} \right)^{n_2} \left(\frac{q_1}{(q_1 + q_2)^2} \right) \right] \quad \text{Ec. 2.28}$$

Empleando la función error

$$E = \sqrt{\left(C_c^{k+1} - C_c^k \right)^2 + \left(q_2^{k+1} - q_2^k \right)^2} \quad \text{Ec. 2.29}$$

Se determina la solución del sistema con la siguiente ecuación de recurrencia

$$\begin{pmatrix} C_c \\ q_2 \end{pmatrix}^{k+1} = \begin{pmatrix} C_c \\ q_2 \end{pmatrix}^k - \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial C_c} & \frac{\partial F_1}{\partial q_2} \\ \frac{\partial F_2}{\partial C_c} & \frac{\partial F_2}{\partial q_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 2.30}$$

2.2.2 Determinación de los parámetros de diseño.

El método que emplea el programa, está basado en un manual^[42] desarrollado por la EPA (Environmental Protection Agency).

Puesto que, comúnmente se cuenta con un valor del flujo, Q , al que se desea operar la columna, es posible calcular el volumen de lecho conociendo el EBCT.

$$V_L = Q \cdot EBCT \quad \text{Ec. 2.31}$$

Con este volumen de líquido y la densidad del carbón, se calcula la masa de carbón que tendrá la columna.

$$M_c = \rho_s \cdot V \quad \text{Ec. 2.32}$$

Utilizando la dosis de carbón activado determinada con la teoría IAS, se determina el volumen total de líquido que se puede tratar hasta que la concentración de salida de la columna es superior a la concentración límite establecida por las normas.

$$V_T = \frac{M_c}{C_c} \quad \text{Ec. 2.33}$$

Este volumen nos permite hacer el cálculo del tiempo de operación de la columna hasta el punto de saturación del carbón.

$$T_{op} = \frac{V_T}{Q} \quad \text{Ec. 2.34}$$

Con el tiempo de operación de la columna y la masa de carbón, se obtiene el consumo de carbón activado por día.

$$M_k = \frac{M_c}{T_{op}} \quad \text{Ec. 2.35}$$

Como se indicó en la sección 2.1.1, dependiendo del tipo de flujo que se indique, se tendrán valores recomendados de carga hidráulica (Descendente: 25-34 m³/m²h; Ascendente: 35-45 m³/m²h) que nos permiten calcular el área transversal de la columna.

$$A = \frac{Q}{C_h} \quad \text{Ec. 2.36}$$

La altura de lecho se calcula con la relación del volumen y el área transversal.

$$H = \frac{V_L}{A} \quad \text{Ec. 2.37}$$

Finalmente, la altura de la columna corresponde a un valor entre 30 y 50% más de la altura de lecho, considerando que el carbón activado se expande en flujo ascendente y en retrolavados, y considerando además un espacio de bordo libre que debe tener la columna.

$$H_c = 1.5 \cdot H \quad \text{Ec. 2.38}$$

CAPITULO 3

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados del diseño para dos casos de estudio diferentes para el tratamiento de aguas con carbón activado. El primer caso se refiere al diseño de una columna para un agua que se desea potabilizar, siendo el compuesto que sobrepasa la norma un plaguicida. En el segundo caso tenemos un agua residual clarificada que se destina para reuso. Para ambos casos, los resultados se presentarán en la misma secuencia descrita en el capítulo anterior.

3.1 PRIMER CASO

En este primer caso, se tomaron los datos de un agua superficial que ha sido clarificada y que debe tener una calidad final de agua potable^[35]. A continuación, se presenta cada uno de los pasos de la secuencia para el diseño de la columna de adsorción para tratar esta agua.

1. Comparación de parámetros del agua a tratar con respecto la normatividad existente.

Puesto que el agua en cuestión se pretende potabilizar, se efectuó la comparación contra la norma mexicana NOM-127-SSA1-1994 utilizando el programa de cómputo desarrollado. Entre los distintos parámetros, se encuentra presente un plaguicida que no se encuentra en la norma mexicana mencionada, se trata del N-(3,4-diclorofenil)-N',N'-dimetilurea conocido como DIURON. Para este caso en particular, se tomó como referencia el valor indicado por la normatividad de la Comunidad Económica Europea (CEE) para el parámetro *Plaguicidas totales*.

La siguiente imagen, muestra la pantalla de resultados de la comparación.

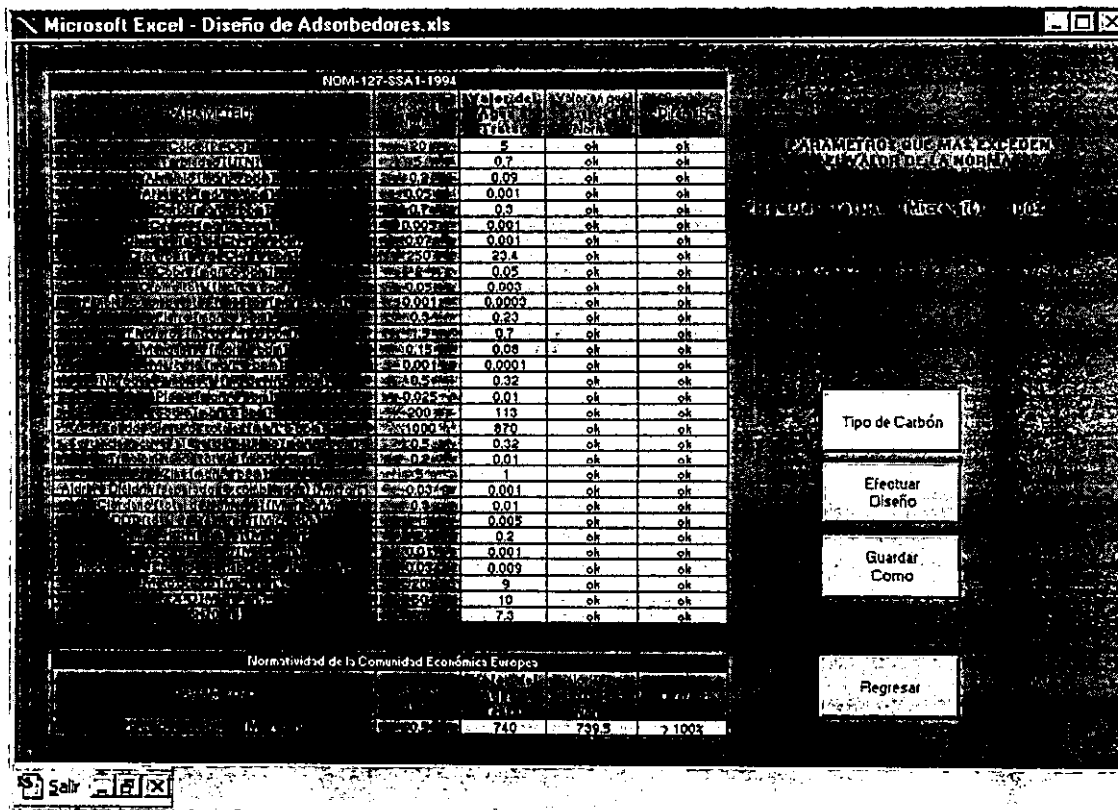


FIGURA 3.1 Determinación de parámetros con concentraciones superiores a los valores límites para agua potable (NOM-127-SSA1-1994, Primer Caso).

No se presenta algún parámetro fuera de la norma mexicana; sin embargo, el plaguicida DIURON se encuentra excedido acuerdo a la norma de la CEE. Este plaguicida es entonces nuestro compuesto clave para efectuar el diseño del equipo.

2. Selección del tipo de carbón activado por utilizar.

El carbón activado PICAZINE desarrollado por la empresa francesa PICA, es altamente recomendado para la remoción de plaguicidas en el proceso de potabilización. Por esta razón se tomó este carbón activado para efectuar el diseño de la columna de adsorción.

3. Cálculo de la dosis de carbón activado

Siguiendo el procedimiento descrito en el apéndice A, Ramírez Zamora (1996) desarrolló las isotermas de adsorción para DIURON, tanto en agua destilada como en el agua a tratar, utilizando el carbón PICAZINE. Los valores obtenidos de dichas isotermas y que son indispensables para nuestro diseño, se alimentaron al programa (Fig 3.2).

El programa obtiene los valores $C_{2,0}$, K_2 y n_2 (Fig 3.3) para calcular la dosis de carbón activado, necesaria para alcanzar la concentración límite permisible. La Tabla 3.1 resume los valores experimentales de las isotermas.

TABLA 3.1 Valores experimentales de isotermas de DIURON sobre carbón PICAZINE.

Agua destilada			Agua por tratar					
$C_{1,0}$	K_1	n_1	q_1^a	q_1^b	q_1^c	C_1^a	C_1^b	C_1^c
470	10.38	2.128	14880	29300	70100	3.67	13.46	99.48

C en ($\mu\text{g/L}$), K en ($\mu\text{g/g})(\mu\text{g/L})^{-1/n}$, q en ($\mu\text{g/g}$)

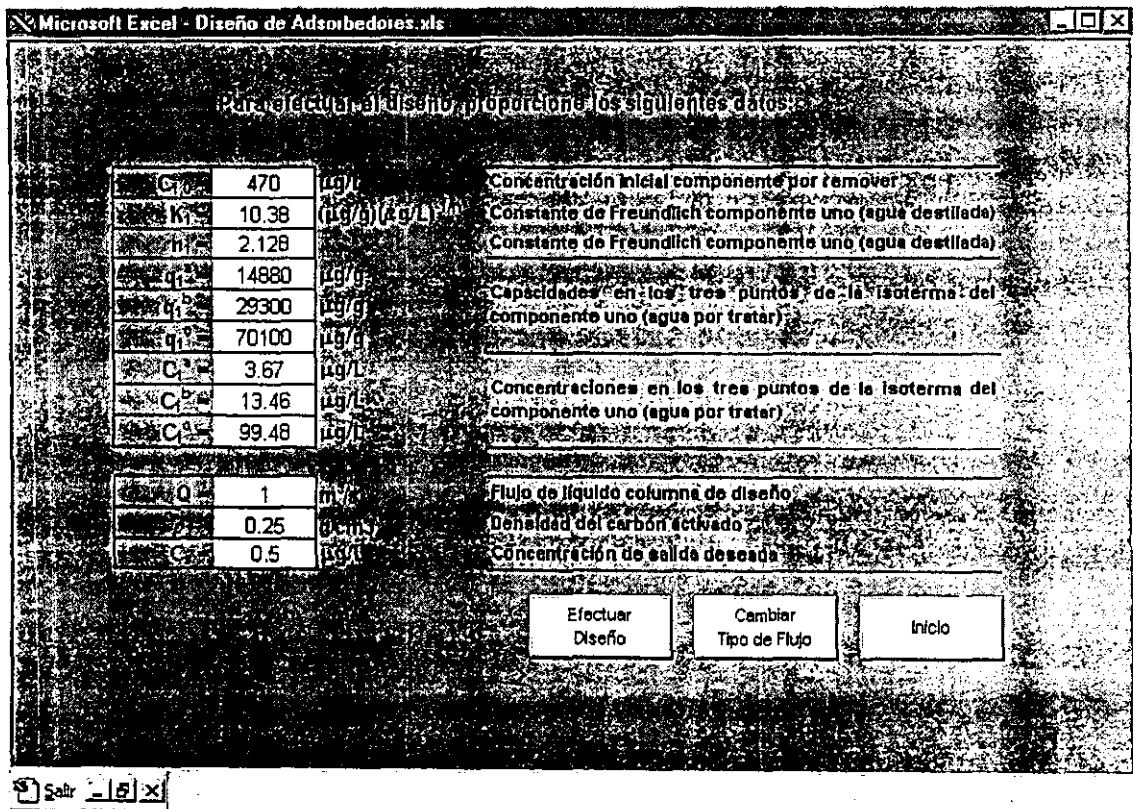


FIGURA 3.2 Alimentación de datos al programa para efectuar el cálculo de diseño (Primer Caso).

4. Cálculo de los parámetros de diseño del equipo

Los datos obtenidos en el punto anterior fueron introducidos al programa, junto con los valores del flujo de diseño y la concentración de DIURON deseada en el efluente de la columna. El flujo que se empleó para esta corrida fue de $1 \text{ m}^3/\text{s}$ y la concentración de salida, la indicada por la norma de la CEE ($0.5 \text{ } \mu\text{g}/\text{L}$). El diseño se efectuó para una columna con flujo ascendente, con un valor para la carga hidráulica de $40 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ y con un EBCT de 15 minutos, siguiendo el criterio de que los valores de tiempo de contacto más comunes se encuentran entre 10 y 20 minutos.

Los resultados obtenidos por el programa se muestran en la Figura 3.3.

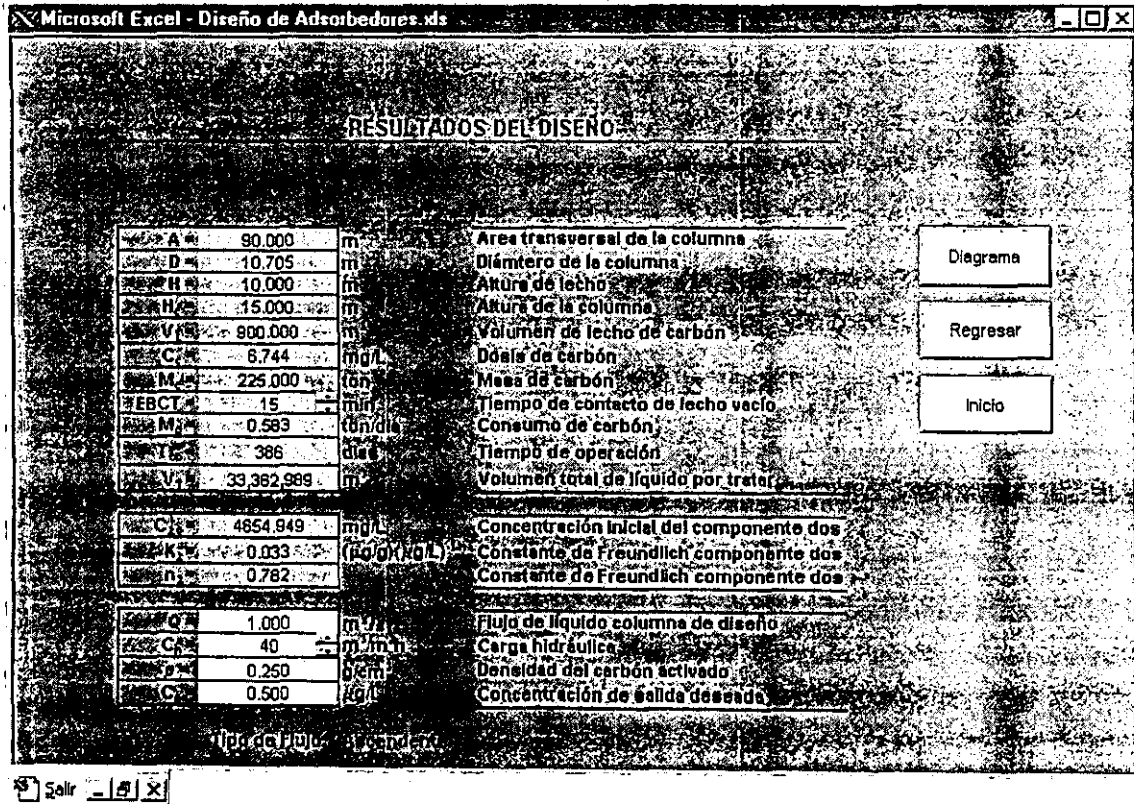


FIGURA 3.3 Resultados del cálculo de diseño de una columna de adsorción para eliminar un plaguicida.

3.2 SEGUNDO CASO

En este segundo caso, se manejaron los datos de un agua residual que se desea utilizar para recarga artificial de acuíferos. Esta agua fue tratada previamente mediante coagulación-floculación y resinas de intercambio iónico. Los valores de los parámetros corresponden al influente de la columna de carbón activado.

1. Comparación de parámetros del agua a tratar la normatividad.

Para recarga de acuíferos, es necesario que la calidad del agua sea la misma que para una agua potable^[53]. Por esta razón, la norma para comparar los parámetros fue nuevamente la NOM-127-SSA1-1994.

Alimentando las características fisicoquímicas al programa, se llegó al resultado que se muestra en la Figura 3.4.

Como podemos observar, el Fenol está excedido de la norma por más del 100%, lo que nos indica que éste es el compuesto clave para efectuar el diseño.

2. Selección del tipo de carbón activado por utilizar.

El carbón activado PICANC 60 desarrollado por la empresa francesa PICA, fue el utilizado para este caso.

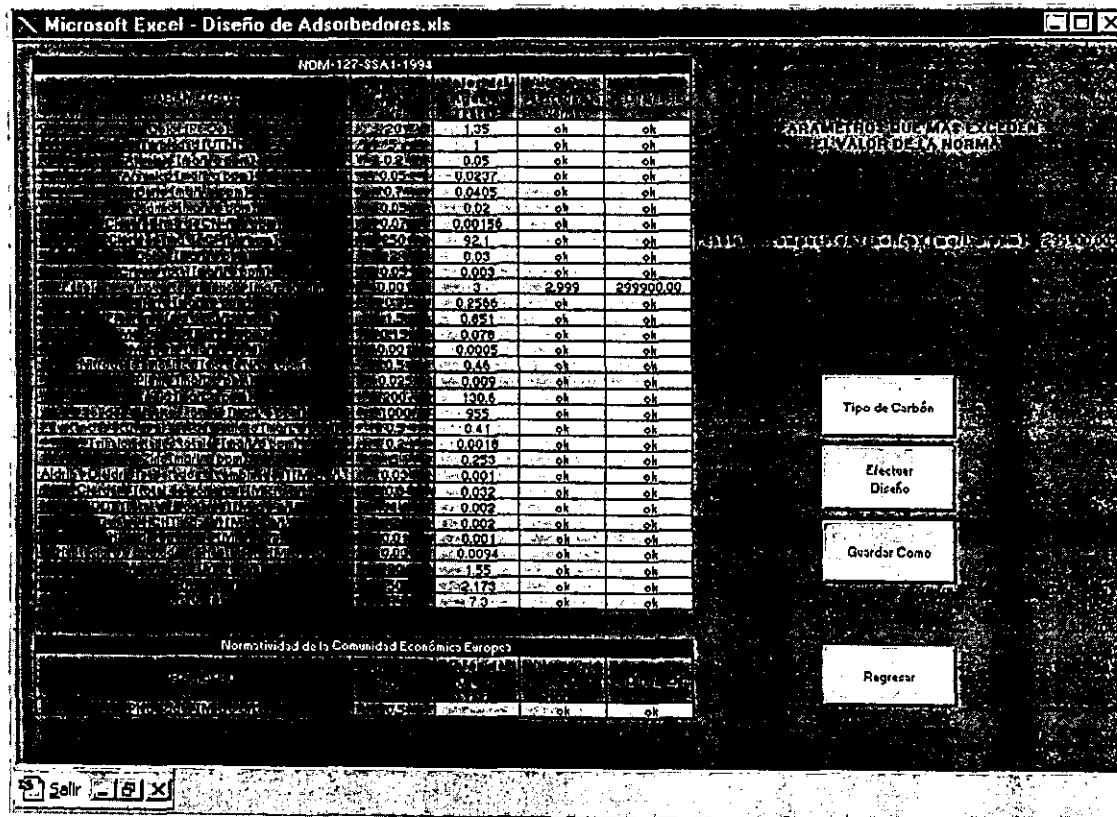


FIGURA 3.4 Determinación de parámetros con concentraciones superiores a los valores límites para agua potable (NOM-127-SSA1-1994, Segundo Caso).

3. Cálculo de la dosis de carbón activado

Los valores alimentados de las isotermas, corresponden a los valores experimentales reportados por Durán Moreno^[36] y se resumen en la Tabla 3.2. Estos valores experimentales se alimentaron al programa (Fig 3.5).

TABLA 3.2 Valores experimentales de isotermas de fenol sobre carbón PICANC60.

Agua destilada			Agua por tratar					
C1.0	K1	n1	q_1^a	q_1^b	q_1^c	C_1^a	C_1^b	C_1^c
30000	62.12	3.906	42.3	47	23.5	4700	11280	26320

C en ($\mu\text{g/L}$), K en $(\mu\text{g/g})(\mu\text{g/L})^{-1/n}$, q en ($\mu\text{g/g}$)

Los valores de $C_{2,0}$, K_2 y n_2 que se obtuvieron mediante el programa, se muestran en la Figura 3.6.

4. Cálculo de los parámetros de diseño del equipo

Utilizando un flujo de diseño de $1 \text{ m}^3/\text{s}$, una concentración en el efluente de $1 \mu\text{g/L}$ de acuerdo a la norma mexicana, y con los valores leídos de las isotermas de adsorción, se efectuó el cálculo del diseño.

Nuevamente se especificó un flujo de tipo ascendente con una carga hidráulica de $40 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ y un tiempo de contacto de 15 minutos, siguiendo el mismo criterio que en el caso uno.

Los resultados se muestran en la Figura 3.6.

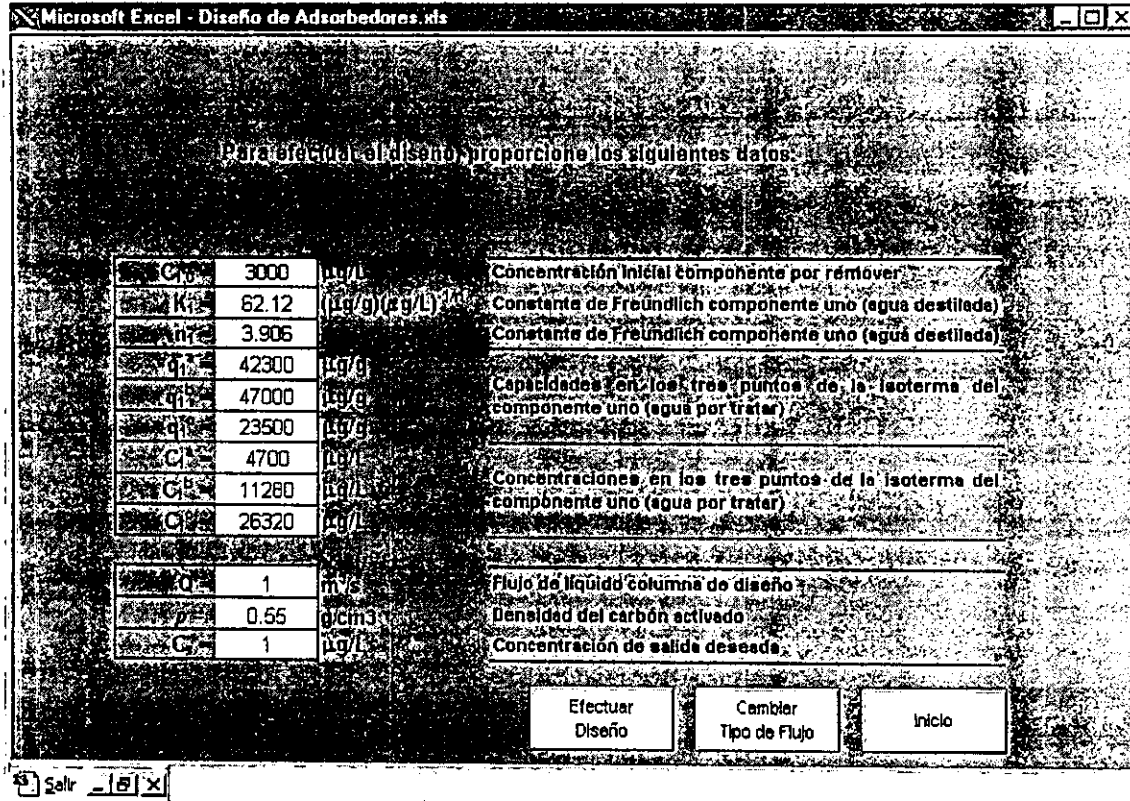


FIGURA 3.5 Alimentación de datos al programa para efectuar el cálculo de diseño (Segundo Caso).

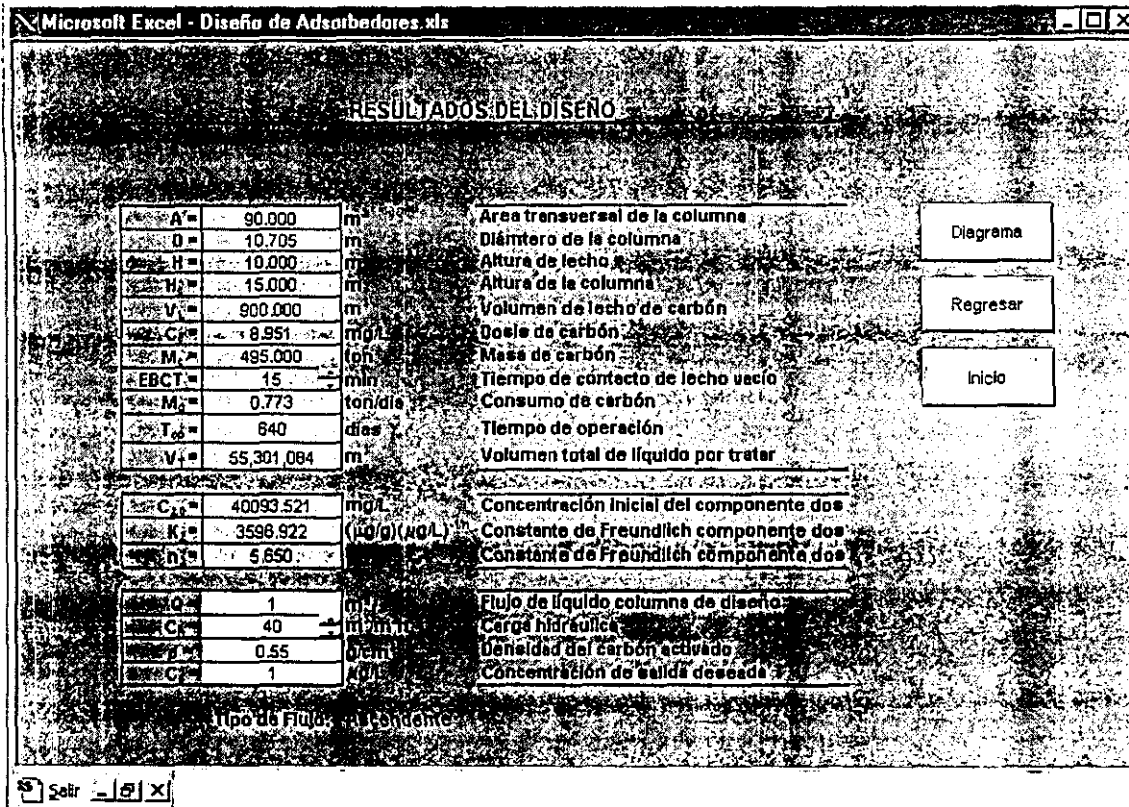


FIGURA 3.6 Resultados del cálculo de diseño de una columna de adsorción para eliminar fenol.

3.3 RESUMEN DE RESULTADOS

Con el objeto de hacer una comparación más ilustrada, se muestra a continuación una tabla con los resultados obtenidos por el programa en los dos casos efectuados, y junto con ellos, se muestran los resultados de un diseño efectuado por una empresa para un tratamiento de potabilización.

TABLA 3.3 Resultados obtenidos en los dos casos y valores de referencia.

Parámetro	Caso 1	Caso 2	Referencia
Tipo de Flujo	Ascendente	Ascendente	Ascendente
Carga hidráulica (m^3/m^2h)	40	40	37.80
Flujo de diseño (m^3/s)	1	1	1
Concentración de Influyente ($\mu g/L$)	470	3000	1000
Concentración de Efluente ($\mu g/L$)	0.5	1	100
Densidad del carbón (g/cm^3)	0.25	0.55	0.49
Tiempo de contacto (min)	15	15	15
Área transversal (m^2)	90	90	95.24
Altura de lecho (m)	10	10	6.3
Altura de la columna (m)	15	15	11
Volumen de lecho (m^3)	900	900	600
Tipo de carbón	Vegetal	Cáscara de coco	----
Dosis de carbón (mg/L)	6.744	8.951	6.743
Masa de carbón (ton)	225	495	293.45
Consumo de carbón ($ton/día$)	0.615	0.773	0.582
Tiempo de operación (días)	386	640	504

Volumen total a tratar (m ³)	33,362,989	55.301.084	43.519,680
--	------------	------------	------------

Debido a que se cuenta con distintas concentraciones de entrada y diferentes valores de densidad de carbón, no es posible hacer una comparación precisa con los valores obtenidos por la empresa; sin embargo, estos datos nos dan una idea de la magnitud de los parámetros de diseño. Es importante hacer notar que el algoritmo de cálculo efectuada por la empresa fue distinto al que utiliza el programa desarrollado en este trabajo.

Para el cálculo de los dos casos efectuados, se introdujo un valor de 15 minutos para el tiempo de contacto por el criterio señalado en la sección 2.1.1, además de que con este valor es posible una mejor comparación con los datos de la referencia, pues en sus cálculos se utilizó ese mismo valor para el tiempo de contacto. Sin embargo, es necesario efectuar pruebas con columnas piloto para saber el tiempo de contacto real.

Debido a que el tiempo de contacto (EBCT), el flujo de diseño y la carga hidráulica son los mismos para ambos casos, se obtuvieron las mismas dimensiones físicas de la columna. Se debe considerar que para distinto flujo se tendrá distinto tiempo de contacto y con ello el volumen de lecho y el resto de las dimensiones cambiarán.

Puesto que la densidad de cada carbón es diferente, se obtienen distintas masas de carbón para las columnas. El consumo en cada caso es también distinto ya que, debido a la naturaleza de cada agua, se obtuvieron valores diferentes en la dosis de carbón. Es decir que con la misma cantidad de carbón, el volumen total que se puede tratar en cada columna de adsorción es diferente y, por lo tanto, el tiempo de operación en cada columna también lo es.

En los dos casos estudiados, el diseño nos condujo a valores de área transversal de 90 m². En algunas ocasiones, el área disponible puede ser una limitante para el diseño, de forma que quizás resulte conveniente utilizar más de una columna de adsorción y efectuar

el diseño con el flujo correspondiente para cada columna, pues una disminución en el flujo de diseño, nos conduce a una área menor del equipo.

En los casos en que se desee operar con más de una columna de adsorción, es recomendable que la sección transversal sea cuadrada, pues de esta manera, una columna puede compartir una pared y se tendrá un ahorro de material.

CONCLUSIONES

Las actividades realizadas en este trabajo de tesis permiten elaborar las siguientes conclusiones:

- En el capítulo 1, el resumen bibliográfico permitió establecer que el proceso de adsorción es un tratamiento terciario ampliamente utilizado y altamente eficiente para la depuración de aguas. Es un proceso muy complejo, por lo que su diseño debe considerar aspectos cinéticos, termodinámicos y de transferencia de masa. Los principales factores que lo influyen se dividen en cuatro grupos principales: 1) Características del adsorbente (tipo de carbón, tamaño de partícula, porosidad, área específica, etc.). 2) Características del adsorbato (solubilidad, polaridad), 3) Características del medio (pH, temperatura, fuerza iónica, etc.) y 4) Hidrodinámica del sistema de adsorción. La teoría IAS (Ideal Adsorbed Solution) es un modelo que describe adecuadamente la adsorción de compuestos en soluciones de multi-componentes, lo que permite predecir la dosis de carbón necesaria para remover a concentraciones límite, marcadas por la normatividad correspondiente, un contaminante presente en aguas.
- En el Capítulo 2, el algoritmo de dimensionamiento de columnas de adsorción con carbón activado permitió desarrollar un programa de cómputo "amigable". Este programa de cómputo necesita un conocimiento mínimo del proceso de adsorción, pero en el caso de no poseerlo, el programa indica paso a paso la manera de obtener cierta información experimental y de criterio necesaria para el dimensionamiento. Las bases consideradas en este algoritmo se agrupan en tres categorías: 1) Normas de calidad de agua, 2) Criterios recomendados para la operación y diseño según el caso (tipos de flujo y de carbón activado, tiempos de contacto, cargas hidráulicas) y 3) Datos experimentales aplicados a modelos de adsorción para multi-componentes (teoría IAS, Ideal Adsorbed Solution). Existen ciertos aspectos que el programa no considera, como es la cuestión económica, la disponibilidad de espacio para la columna, los aspectos estructural y mecánico de la columna y la contribución del

proceso de bio-adsorción, que se puede verificar después de un cierto tiempo de funcionamiento de las columnas; sin embargo, esos puntos son parte de un estudio que se realizará posteriormente dentro del marco de este primer trabajo.

- El Capítulo 3, ejemplifica dos casos de estudio en los que se realiza el diseño de columnas de adsorción con carbón activado. El primer caso, se trata de un agua superficial clarificada, en la que la concentración de un plaguicida (DIURON) es superior al límite propuesto para agua potable (EPA, 1994; NOM-127-SSA1-1994). El segundo caso es un agua residual que ha sido sometida previamente a procesos de clarificación y de intercambio iónico, pero cuya concentración residual de fenol excede el límite máximo propuesto para un agua de recarga artificial de acuíferos (NOM-127-SSA1-1994). En ambos casos se recomendó aplicar el proceso de adsorción debido a que los contaminantes son moléculas recalcitrantes que se adsorben de manera muy eficiente por carbón activado.

Utilizando en ambos casos bases de cálculo idénticas: flujos idénticos ($1 \text{ m}^3/\text{s}$), tiempos de contacto de lecho vacío (EBCT = 15 minutos), cargas hidráulicas ($C_h = 40 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$) y flujo ascendente, las dimensiones calculadas de las columnas son comparables. Los parámetros de operación y diseño diferentes entre ambos casos fueron el tipo de carbón y, sobretodo, la dosis o tiempo de funcionamiento de las columnas. Los resultados obtenidos para la operación y diseño de estas columnas son comparables a los valores reportados para sistemas de adsorción instalados en plantas de tratamiento de aguas.

En los casos de estudio presentados se pudo observar la importancia de conocer la capacidad de adsorción del carbón activado seleccionado para realizar el dimensionamiento de la columna. Este programa propone pruebas de adsorción en reactor discontinuo para calcular la capacidad, sin embargo, los datos obtenidos en cinéticas y pruebas de adsorción en reactor continuo pueden permitir una mayor precisión en el cálculo de esta capacidad, debido a que se tendría la posibilidad de aplicar modelos más complejos que además permitirían considerar los fenómenos de competición entre moléculas en reactor de régimen continuo, desorción y bio-

adsorción que pueden modificar, dependiendo el caso, de manera significativa los cálculos. Además, estas pruebas permitirían optimizar los parámetros base de dimensionamiento, lo que repercutiría también en el aspecto económico del proceso.

BIBLIOGRAFIA

1. Crittenden J. C., Luft P., Hand D. W., et al. (1985). Prediction of multicomponent adsorption equilibria using Ideal Adsorbed Solution Theory. *Env. Sci. Tech.*, 19 (11), 1037 – 1043.
2. Crittenden J. C., Luft P., Hand D. W. (1985). Prediction of multicomponent adsorption equilibria in background mixtures of unknown composition. *Wat. Res.*, 19 (12), 1537 – 1548.
3. Sheintuch M., Rebhun M. (1988). Adsorption isotherms for multisolute systems with known and unknown composition. *Wat. Res.*, 22 (4), 421 – 430.
4. Najm I. N., Snoeyink V. L., Richard Y. (1991). Effect of initial concentration of a SOC in natural water on its adsorption by activated carbon. *JAWWA*, August, 57 – 63.
5. Radke C.J., Prausnitz J. M. (1972). Thermodynamics of multisolute adsorption from dilute liquid solutions. *AIChE J.*, 18 (4), 761 – 768.
6. Myers A. L., Prausnitz J. M. (1965) Thermodynamics of mixed gas adsorption. *AIChE J.*, 11 (1), 121 – 127.
7. Weber W. J. Jr. (1964). Competitive interactions in adsorption from dilute aqueous bisolute solution. *J. Appl. Chem.*, 14, 565.
8. Murin W. J., Snoeyink V. L. (1979). Competitive adsorption of 2,4-dichlorophenol and 2,4,6-trichlorophenol in the nanomolar to micromolar concentration range. *Env. Sci. Tech.*, 13 (3), 305 – 311.
9. Smith E. H. (1991). Evaluation of multicomponent adsorption equilibria for organic mixtures onto activated carbon. *Wat. Res.*, 25 (2), 125.
10. Fabrel B. (1990). Influence de la nature des sols et de la matière organique sur l'adsorption des pesticides. Consequences pour la pollution des nappes souterraines. Thèse de Doctorat, Université de Poitiers.
11. Carter M. C., Weber W. J., Olmstead K. P. (1992). Effects of background dissolved organic matter on TCE adsorption by GAC. *JAWWA*, 84 (8), 81 – 91.
12. Zhou M.L. (1992). Modélisation de l'adsorption sur charbon actif. Thèse de Doctorat, Université de Rennes 1, N° d'ordre 724.

13. Singer P. C., Yen C. (1980). Adsorption of alkyl phenols by activated carbon in "Activated Carbon Adsorption from Aqueous Phase". Ed. By Suffet I. H. And McGuire M. J., Ann Arbor, Michigan 1980, Vol. 1.8, 167.
14. Sheindorf Ch., Rebhun M., Sheintuch M. (1982). Organic pollutants adsorption. *Wat. Res.*, 16, 357.
15. Dubinin M. M. (1966). Porous structure and adsorption properties on active carbon. Dans "Chemistry and Physics Carbon". Walter P. L. Jr. Ed. New York.
16. Jelly M. (1977). Le charbon actif en grain dans le traitement des eaux résiduaires et des eaux potables et sa régénération. *Informations Chimie* 166, Mai, 157 – 167.
17. Boehm H. P. (1966). Functional groups on the surfaces of solids. *Angewandte Chemie (International Edition)*, 5 (6), 533 – 539.
18. Puri B. R., Bhardwaj S. S., Kumar B., Mahajan O. P. (1975). Adsorption of phenol from aqueous solution by carbons as influenced by oxygen complexes. *J. Indian Chem. Soc.*, 52 (1), 26 – 29.
19. Puri B. R., Kaistha B. C., Vardhan Y. (1973). Studies in surface chemistry of carbon blacks-VI. Adsorption isotherms of benzene on carbons associated with different surface oxygen complexes. *Carbon*, 11, 329 – 336.
20. Cookson J. T. (1978). Adsorption mechanisms: The chemistry of organic adsorption on activated carbon. In "Carbon Adsorption Handbook", Edited by Cheremisinoff P. N. and Ellebursch F., Ann Arbor Science, Ann Arbor, Mich. Chap. 7, 250.
21. Jain J. S., Snoeyink V. L. (1973). Adsorption from bisolute system on active carbon. *JWPCF*, 45 (12), 2463 - 2478.
22. Murali V., Aylmore A. G. (1983). Competitive adsorption during solute transport in soils. *Soils Sci.*, 35 (5), 279.
23. Ruthven D. M. (1984). *Principles of adsorption and adsorption process*. John Wiley and Sons, New York.
24. Weber W. J. Jr., Wang C. K. (1987) *Env. Sci. Tech.*, 21, 1096.
25. Fritz W., Schlunder E. V. (1974) Simultaneous adsorption equilibria of organic solutes in dilute aqueous solutions on activated carbon. *Chem. Eng. Sci.*, 29, 1279.
26. Sheindorf C. M., Rebhun M., Sheintch M. J. (1981) A Freundlich-type multicomponent isotherm. *Coll. & Int. Sci.*, 79, 136.
27. Toth J., *Acta Chim. Acad. Sci. Hung*, 1971, 69, 311.

-
28. Redlich O., Peterson D. L. (1959) A useful adsorption isotherm. *J. Phys. Chem.*, 63, 1024.
 29. Jossens L., Prausnitz J. M., et al. (1978) Thermodynamics of multisolute adsorption from dilute aqueous solutions. *Chem. Eng. Sci.*, 33, 1097.
 30. Mathews A., Weber W. J., *68th annual meeting, Am. Inst. Chem. Eng.*, nov. 1975, Los Angeles.
 31. Ronald L. Droste. *Theory and Practice of Water and Wastewater Treatment*. 1997, USA. John Wiley and Sons.
 32. Reynolds Tom D. and Paul A. Richards. *Unit Operations and Processes in Environmental Engineering*. 2^a ed., 1996, USA. PWS Publishing Company.
 33. Michaelis, A.S. Simplified Method of Interpreting Kinetics Data in Fixed-Bed Ion Exchange. *Ind. and Eng. Chem.* 1952, 44: 1922-1930.
 34. Fornwalt J.J. and Hutchins, (1996) R.A. Purifying Liquids with Activated Carbon. *Chem. Eng.* (11 Abril): 1979; (9 Mayo): 155.
 35. Ramírez Zamora, R. M. (1996). *Contribution à l'étude de l'oxydation et de l'adsorption sur charbon actif de quelques phénylurées et de leurs métabolites*. Thèse de Doctorat, Université de Rennes I, No. d'ordre: 1686.
 36. Durán Moreno, Alfonso. *Contribution a l'étude de l'adsorption et de la biodegradation de composés organiques sur charbon actif: cas de phenol et de dérivés phenoliques*. Thèse de Doctorat, Université de Rennes I, No. d'ordre: 1807.
 37. Weber W. J., Smith E.H. (1987) Simulation and design models for adsorption process. *Env. Sci. Tech.*, 21(11), 1040.
 38. Crittenden J. C., Hand D. W., Arora H. Lykins B. W. Jr (1987) Design considerations for GAC treatment of organic chemicals. *JAWWA*, 79(1), 74.
 39. Zarrouki M. *Etude de l'adsorption dans un système liquide-solide: solution d'ion dicyanoaurate-charbon actif*. Thèse de Doctorat. No. d'ordre 49 CD. Institut National Polytechnique de Grenoble, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Sante Etienne.
 40. Lorenz B., Westerberg A. *Systematic Methods of Chemical Process Design*. 1997, USA. Prentice Hall.
 41. Research Report. Subjucct Area: *Water Treatment and operations. GAC filter adsorbers*. AWWA Research Foundation, 1987.

42. Environmental Protection Agency. *Process Design Manual for Carbon Adsorption*. 1973.
43. Norma Oficial Mexicana NOM-001-ECOL-1996. Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales.
44. Norma Oficial Mexicana NOM-002-ECOL-1996. Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales a los sistemas de alcantarillado urbano o municipal.
45. Norma Oficial Mexicana NOM-003-ECOL-1997. Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes para las aguas residuales tratadas que se reúsen en servicios al público.
46. Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental, agua para uso y consumo humano-límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización.
47. Hernández Muñoz, Aurelio. *Depuración de aguas residuales*. España, 1990. Ed. por la Escuela de Ingenieros de Caminos de Madrid.
48. Cheremisinoff, Nicholas P. *Water Treatment and Waste Recovery. Advanced Technology and Applications*. USA, 1993. Prentice Hall, Inc.
49. Bohart, G. S.; Adams, E. Q. (1920) Some aspects of the behavior charcoal with respect to chlorine. *J. Am. Chem. Soc.* 42, 523.
50. Ramalho, Rubens S. *Tratamiento de aguas residuales*. España, 1983.
51. *Manual Técnico del Agua*. 4a ed. 1979. Empresa Degremont.
52. Metcalf & Eddy. *Wastewater treatment*. 3a ed. USA. McGraw-Hill.
53. Environmental Protection Agency. *Guidelines*. 1992.
54. *Expert development strategies for Microsoft Excel/Visual Basic*. USA, 1998. Microsoft Press.
55. *Microsoft Office 97/Visual Basic*. USA, 1998. Microsoft Press.
56. *Microsoft Visual Basic 6.0, Programmer's Guide*. USA, 1998. Microsoft Press.

**ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA**

APENDICE A

Determinación de la capacidad de adsorción en carbón activado mediante isotermas. ASTM Method D3860-79.

Preparación del carbón pulverizado.

El carbón se reduce de tamaño de manera que un 95% pase por una malla *U.S. 325-sieve* o equivalente y, posteriormente, se seca en horno por tres horas a 150 °C o toda la noche a 105 °C.

Práctica A – Aguas con concentración de soluto mayor a 10 mg/L.

Procedimiento.

Si la concentración se encuentra entre 10 y 100 mg/L, medir diez alícuotas de 500 mL de muestra representativa del agua y transferirlas a matraces Erlenmeyer de 1000 mL. Si la concentración es mayor a 100 mg/L, medir 10 alícuotas de 100 mL de muestra del agua y transferirlos a matraces Erlenmeyer de 500 mL.

Por separado, pesar las siguientes cantidades de carbón activado, pulverizado y secado al horno: 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0 y 20.0 g pesados con cuatro cifras significativas. Agregar la cantidad menor a una de las muestras de agua y etiquetarla. Agitar el matraz para humedecer el carbón, taponarlo y colocarlo en el agitador anotando la hora. Repetir este procedimiento a intervalos de 5 minutos, con cada dosis y su respectiva muestra. El matraz restante se utiliza como muestra de control.

Agitar las muestras por dos horas e inmediatamente después filtrar las diez muestras utilizando una membrana de 0.40 a 0.45 μm . Si la muestra contiene sustancias volátiles, la filtración se realiza en atmósfera de nitrógeno para evitar pérdidas.

Analizar el filtrado para detectar el soluto en cuestión, anotar los resultados junto con su respectivo peso.

Práctica B – Aguas con concentración de soluto de 10 mg/L o menos.

Preparación de la suspensión de carbón.

Pesar exactamente 1.0000 g de carbón pulverizado y secado. Colocarlo en un matraz volumétrico de 1 L y diluirlo hasta el aforo con agua Tipo II (especificación D1193) grado reactivo (1 mL de suspensión contendrá 1 mg de carbón).

Procedimiento

Medir ocho alícuotas de 500 mL de muestra representativa del agua y transferirlas a matraces Erlenmeyer de 1000 mL.

Con una pipeta, agregar 1 mL de la suspensión de carbón a una de las muestras de agua. Mezclar vigorosamente durante el agregado. Etiquetar el matraz, taparlo y chocarlo en el agitador anotando la hora. Etiquetar el resto de los matraces con las siguientes cantidades y pipetear de manera respectiva la suspensión de carbón a intervalos regulares de tiempo, sin olvidar que la mezcla debe ser bien agitada: 2.5, 5, 7.5, 10, 25 y 50 mL. Tapar y colocar cada matraz en el agitador después de cada adición. Generalmente un intervalo de 5 minutos es adecuado. Usar el último matraz como muestra de control. La cantidades adicionadas de suspensión de carbón corresponden a 1, 2.5, 5, 7.5, 10, 25 y 50 mg de carbón.

Agitar cada matraz durante dos horas. Después de este tiempo, filtrar inmediatamente cada muestra y la muestra de control en filtros (cada muestra en un filtro distinto) de membrana nuevos que pueden ser de 0.40 a 0.45 μm .

NOTA. Generalmente los filtros de membrana contienen una ligera cantidad de tensoactivos y agentes humectantes que podrían originar error en este método. Se recomienda que cada filtro de membrana sea enjuagado con agua Tipo II (especificación D1193) grado reactivo.

Analizar el filtrado para detectar el soluto en cuestión, anotar los resultados junto con su respectivo peso.

Cálculos.

Estos cálculos aplican a los dos métodos descritos.

Determinar la cantidad de soluto adsorbido en miligramos, X , por la siguiente relación:

$$X = C_oV - CV$$

Donde:

C_o = Concentración de constituyentes antes del tratamiento con carbón. (mg/L)

C = Concentración de constituyentes después del tratamiento con carbón (mg/L)

V = Volumen de muestra (L)

Determinar la cantidad de soluto adsorbido por unidad de masa de carbón, X/M , en miligramos por gramo de la siguiente manera:

$$X/M = (C_oV - CV)/M$$

Donde M = Masa de carbón (g)

Construcción de la isoterma

Usar papel logarítmico de tres ciclos y graficar la concentración que permanece en la solución en el eje de las abscisas contra los valores de X/M en el eje de las ordenadas.

La forma lineal de la isoterma de Freundlich es

$$\ln q_e = \ln k + 1/n \ln C_e$$

Si utilizamos la gráfica construida para determinar las constantes del modelo de Freundlich, sabiendo que C_e es la concentración en fase líquida y q_e es X/M , la pendiente de la gráfica corresponde al valor de $1/n$, y la ordenada al origen nos da el valor de $Ln k$.

APENDICE B

Método Newton-Raphson

Consideremos un problema de la forma $F(x)=0$, donde x es un vector de n variables y F es un vector de n funciones. Para un valor dado x' , podemos escribir la serie de Taylor alrededor de este punto para extrapolar al valor de la solución, x^* .

$$f_i(x^*) \cong 0 = f_i(x') + \nabla f_i(x')^T (x^* - x') + \frac{1}{2} (x^* - x')^T \nabla^2 f_i(x') (x^* - x') + \dots \quad i = 1, \dots, n \quad \text{Ec. B.1}$$

Siendo $\nabla f_i(x)$ y $\nabla^2 f_i(x)$ el vector gradiente y el Hessiano de la función $f_i(x)$, respectivamente.

Sea $\Delta = (x^* - x')$, si truncamos la serie en los dos primeros términos, tenemos la siguiente expresión

$$F(x' + \Delta) \cong 0 = F(x') + J(x')\Delta \quad \text{Ec. B.2}$$

Donde la matriz J tiene los elementos $J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$ y se le da el nombre de Jacobiano.

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_3}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \vdots \\ \Delta x_n \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Podemos entonces resolver para Δ de la siguiente forma

$$\Delta = -J(x')^{-1} F(x') \quad \text{Ec. B.3}$$

Esta relación permite desarrollar una estrategia de recurrencia para encontrar el vector solución, x^* .

$$\Delta = -(J^k)^{-1} F(x^k) \quad x^{k+1} = x^k + \Delta^k \quad \text{Ecs. B.4 y B.5}$$

$$E = \sqrt{\sum (x^{k+1} - x^k)^2} \quad \text{Ec. B.6}$$

siendo $J^k = J(x^k)$ y k el número de iteración.

Una vez que el valor de la función error, E , es igual o menor que una tolerancia establecida, el vector solución, x^* , es igual al vector x^{k+j} .

APENDICE C

Listados del Programa

El programa de cómputo fue desarrollado en lenguaje Visual Basic dentro del editor de Microsoft Excel 97.

El conjunto de listados se organizó en 5 módulos. En algunas hojas se incluyeron instrucciones necesarias para tareas particulares. Además, al abrir el programa se ejecutan instrucciones automáticas que ajustan la pantalla al texto y modifican la barra de menús de Excel.

El usuario puede incorporar o retirar en cualquier momento las barras de herramientas mediante dos instrucciones que fueron incorporadas. Para agregar herramientas debe accionar las teclas Ctrl + p, y se remueven al oprimir Ctrl + q.

A continuación se muestra todo el listado de la codificación.

frmFlujo - 1

```
'Diseño de Adsorbedores  
'Instituto de Ingenieria. UNAM  
'ACD 2001
```

```
Private Sub CommandButton1_Click()  
Sheets("Calculos").Select  
  
    If Sheets("Datos").Range("F110") = 1 Then  
        Sheets("Datos").Range("F111") = 40  
    Else  
        Sheets("Datos").Range("F111") = 30  
    End If  
  
Unload Me  
End Sub
```

```
Private Sub CommandButton2_Click()  
Call mdlAyudante.MostrarAyudanteOffice  
End Sub
```

```
Private Sub CommandButton3_Click()  
Unload Me  
End Sub
```

```
Private Sub OptionButton1_Click()  
Sheets("Datos").Range("F110") = 1  
CommandButton1.Enabled = True  
End Sub
```

```
Private Sub OptionButton2_Click()  
Sheets("Datos").Range("F110") = 2  
CommandButton1.Enabled = True  
End Sub
```

```
'Diseño de Adsorbedores  
'Instituto de Ingenieria. UNAM
```

```
Private Sub Workbook_Open()  
Application.ScreenUpdating = False  
mdlQyP.quitar  
    Sheets("Norma").Select  
    Range("A1:J16").Select  
    ActiveWindow.Zoom = True  
    Range("F8").Select  
Load frmFlujo  
Application.ScreenUpdating = False  
End Sub
```

```
Private Sub Workbook_WindowDeactivate(ByVal Wn As Excel.Window)  
Application.ScreenUpdating = False  
mdlQyP.poner  
Application.ScreenUpdating = False  
End Sub
```

```
Private Sub Worksheet_Activate()  
  
    Range("A1:L35").Select  
    ActiveWindow.Zoom = True  
    Range("J27").Select  
  
End Sub
```

```
Private Sub Worksheet_SelectionChange(ByVal Target As Excel.Range)  
  
    Range("G12:M25") = ""  
    j = 1  
    For i = 1 To 31
```

trnFlujo - 2

```
j = j - 1  
End If  
Next
```

End Sub

Private Sub Worksheet_Activate()

```
Range("B2:M30").Select  
ActiveWindow.Zoom = True  
Range("B2").Select
```

End Sub

Private Sub Worksheet_SelectionChange(ByVal Target As Excel.Range)

```
Range("C21:J30") = ""
```

```
j = 1  
For i = 1 To 12  
If Cells(4 + i, 6) = Range("F17") Then  
Cells(20 + j, 3) = Cells(4 + i, 2)  
Cells(20 + j, 6) = Cells(4 + i, 6)  
j = j + 2  
End If  
Next
```

```
j = 1  
For i = 1 To 12  
If Cells(4 + i, 10) = Range("J17") Then  
Cells(20 + j, 7) = Cells(4 + i, 2)  
Cells(20 + j, 10) = Cells(4 + i, 10)  
j = j + 2  
End If  
Next
```

End Sub

Private Sub Worksheet_Activate()

```
Range("B2:N32").Select  
ActiveWindow.Zoom = True  
Range("B2").Select
```

End Sub

Private Sub Worksheet_SelectionChange(ByVal Target As Excel.Range)

```
Range("C19:N30") = ""
```

```
j = 1  
For i = 1 To 10  
If Cells(4 + i, 6) = Range("F15") Then  
Cells(18 + j, 3) = Cells(4 + i, 2)  
Cells(18 + j, 6) = Cells(4 + i, 6)  
j = j + 1  
End If  
Next
```

End Sub

Private Sub Worksheet_Activate()

```
Range("A1:I18").Select  
ActiveWindow.Zoom = True  
Range("A1").Select
```

End Sub

Private Sub Worksheet_SelectionChange(ByVal Target As Excel.Range)

```
Range("C9:F10") = ""  
j = 1  
For i = 1 To 2  
If Cells(4 + i, 6) = Range("F7") Then  
Cells(8 + j, 3) = Cells(4 + i, 2)  
Cells(8 + j, 6) = Cells(4 + i, 6)
```

frmFlujo - 3

End Sub

Private Sub Worksheet_Activate()

Range("C2:K15").Select
ActiveWindow.Zoom = True
Range("C2").Select

End Sub

Private Sub Worksheet_Activate()

Range("B2:I19").Select
ActiveWindow.Zoom = True
Range("B2").Select

End Sub

mdlMenu - 1

'Diseño de Adsorbedores
'Instituto de Ingenieria. UNAM
'ACE 2001

```
Sub OcultarMenu()  
On Error Resume Next  
CommandBars("SIE").Delete  
End Sub
```

```
Sub SalirSIE()  
OcultarMenu  
ActiveWorkbook.Close  
End Sub
```

```
Sub VolverAPrincipal()  
Workbooks("principal").Select  
End Sub
```

'Macro a ejecutar

```
Sub CrearMenu()  
Dim mibarra As CommandBar  
Dim miboton As CommandBarButton  
  
OcultarMenu  
Set mibarra = CommandBars.Add(Name:="SIE", _  
    Position:=msoBarBottom, _  
    MenuBar:=True)  
  
Set miboton = mibarra.Controls.Add(msoControlButton)  
miboton.Style = msoButtonCaption  
miboton.Caption = "&Salir"  
miboton.OnAction = "SalirSIE"  
  
Set miboton = mibarra.Controls.Add(msoControlButton)  
miboton.Style = msoButtonCaption  
miboton.Caption = "&Volver a Principal"  
miboton.OnAction = "Volverapincipal"  
miboton.Visible = False  
  
mibarra.Protection = msoBarNoMove + msoBarNoCustomize  
mibarra.Visible = True  
  
End Sub
```

mdl.Ayudante - 1

'Diseño de Adsorbedores
'Instituto de Ingeniería. UNAM
'ACD 2001

Sub MostrarAyudanteOffice()

Dim sArchivoMapaBits As String
Dim oGlobo As Office.Balloon
Set oGlobo = Assistant.NewBalloon

With oGlobo

.Heading = "Tipo de Flujo"

.Text = "Para seleccionar el tipo de " & _
"flujo debe considerarse " & _
"lo siguiente:"

.Button = msoButtonSetOK

.Mode = msoModeModal

.Icon = msoIconTip

.BalloonType = msoBalloonTypeBullets

.Labels(1).Text = "El flujo ascendente implica un proceso " & _
"continuo y una carga hidráulica mayor que " & _
"para un flujo descendente."

.Labels(2).Text = "En flujo descendente deberán operarse dos " & _
"columnas en paralelo de las mismas características " & _
"para no interrumpir el proceso durante los " & _
"retrolavados. Las cargas hidráulicas son menores."

.Show

End With
End Sub

mdlQyP - 1

'Diseño de Adsorbedores
'Instituto de Ingenieria. UNAM
'ACD 2001

Sub. quitar()

' Keyboard Shortcut: Ctrl+q

```
Application.ScreenUpdating = False
Application.CommandBars("Standard").Visible = False
Application.CommandBars("Formatting").Visible = False
Application.CommandBars("Drawing").Visible = False
Application.CommandBars("Forms").Visible = False
Application.CutCopyMode = False
With ActiveWindow
    .DisplayGridlines = False
    .DisplayHeadings = False
    .DisplayOutline = False
    .DisplayZeros = False
    .DisplayHorizontalScrollBar = False
    .DisplayVerticalScrollBar = False
    .DisplayWorkbookTabs = False
End With
With Application
    .DisplayFormulaBar = False
    .DisplayStatusBar = False
End With
mdlMenu.CrearMenu
Application.ScreenUpdating = False
```

End Sub

Sub poner()

' Keyboard Shortcut: Ctrl+p

```
Application.ScreenUpdating = False
Application.CommandBars("Standard").Visible = True
Application.CommandBars("Formatting").Visible = True
Application.CommandBars("Forms").Visible = True
Application.CommandBars("Drawing").Visible = True
With ActiveWindow
    .DisplayGridlines = True
    .DisplayHeadings = True
    .DisplayOutline = True
    .DisplayZeros = True
    .DisplayHorizontalScrollBar = True
    .DisplayVerticalScrollBar = True
    .DisplayWorkbookTabs = True
End With
With Application
    .DisplayFormulaBar = True
    .DisplayStatusBar = True
End With
mdlMenu.OcultarMenu
Application.ScreenUpdating = False
```

End Sub

'Diseño de Absorbedores
'Instituto de Ingeniería, UNAM

```

Sub Norma()
Application.ScreenUpdating = False
If Sheets("Registro").Range("E100") = 1 Then
Sheets("Nom127").Select
End If
If Sheets("Registro").Range("E100") = 2 Then
Sheets("Nom1").Select
End If
If Sheets("Registro").Range("E100") = 3 Then
Sheets("Nom02").Select
End If
If Sheets("Registro").Range("E100") = 4 Then
Sheets("Nom3").Select
End If
Application.ScreenUpdating = False
End Sub

Sub Nom1
    Sheets("Nom1").DrawingObjects("DrD_Nom1_1").ListFillRange = "Datos!" & Sheets("Datos")
).Range("C96")
    Sheets("Nom1").DrawingObjects("DrD_Nom1_1").DropDownLines = Sheets("Datos").Range("E9
6")
    Sheets("Nom1").DrawingObjects("DrD_Nom1_1").Display3DShading = True
End Sub
Sub nom1()

Application.ScreenUpdating = False
Sheets("Datos").Select
Range(Range("D97").Text).Select
Selection.Copy
Sheets("Nom001").Select
Range("C5").Select
ActiveSheet.Paste

Sheets("Datos").Select
Range(Range("F97").Text).Select
Selection.Ccopy
Sheets("Nom001").Select
Range("G5").Select
ActiveSheet.Paste
Range("B1").Select
Application.ScreenUpdating = True
End Sub

Sub Nom3()

Application.ScreenUpdating = False
Sheets("Datos").Select
Range(Range("C124").Text).Select
Selection.Copy
Sheets("Nom003").Select
Range("C5").Select
ActiveSheet.Paste
Range("B1").Select
Application.ScreenUpdating = True

End Sub

Sub Guardar()

Application.Dialogs(xlDialogSaveAs).Show

End Sub

```

```

End Sub
Sub calculo()

Application.ScreenUpdating = False
Do While Abs(Sheets("Templ").Range("E20")) <= 0.0001

For i = 1 To 2
If i = 2 Then
Sheets("Templ").Range("I11:I16").Select
Selection.Copy
Sheets("Templ").Range("B3").Select
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
False, Transpose:=False
End If
Next

Loop

Sheets("Templ").Range("B3:B5").Select
Selection.Copy
Sheets("Resultados").Range("B15").Select
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
False, Transpose:=False

Do While Abs(Sheets("Templ").Range("B34")) <= 0.0001

For i = 1 To 2
If i = 2 Then
Sheets("Templ").Range("C30:C31").Select
Selection.Copy
Sheets("Templ").Range("B30").Select
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
False, Transpose:=False
End If
Next

Loop

Sheets("Templ").Range("B30").Select
Selection.Copy
Sheets("Resultados").Range("C8").Select
Selection.PasteSpecial Paste:=xlValues, Operation:=xlNone, SkipBlanks:= _
False, Transpose:=False

If Sheets("Datos").Range("F110") = 1 Then
Sheets("Datos").Range("F11") = 50
Else
Sheets("Datos").Range("F11") = 25
End If

Range("C19").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=Calculos!R[-4]C"

Range("C21").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=Calculos!R[-5]C"
Range("C22").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=Calculos!R[-5]C"

Range("C3").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=(R[16]C*3600)/Datos!R[108]C[3]"
Range("C4").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=SORT((4*R[-1]C)/3.14159)"
Range("C5").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=R[2]C/R[-2]C"
Range("C6").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=R[-1]C*1.5"
Range("C7").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=R[12]C*R[3]C*60"
Range("C8").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=Templ!R[22]C[-1]*1000"

```

mdlTesis - 3

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=R[-2]C/R[1]C"  
Range("C12").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=Datos!R[94]C[3]"  
Range("C13").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=R[6]C*R[-1]C*24*3600"  
  
Sheets("Resultados").Range("A1").Select  
Application.ScreenUpdating = False  
  
End Sub  
Sub Proporcionar_Datos()  
  
Sheets("Calculos").Select  
Range("A1").Select  
ActiveWindow.Zoom = 100  
  
End Sub  
  
Sub Ir_a_Resultados()  
Sheets("Resultados").Select  
Range("J10").Select  
End Sub  
  
Sub Ir_a_diagrama()  
If Sheets("Datos").Range("F110") = 1 Then  
    Sheets("AdsAsc").Select  
    Range("I14").Select  
  
Else  
    Sheets("Adsorbedor").Select  
    Range("I14").Select  
End If  
End Sub  
  
Sub Tipo_de_Flujo()  
frmFlujo.Show  
End Sub
```