

INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AGUASCALIENTES

MAESTRÍA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA AMBIENTAL



“Diseño óptimo de un intercambiador de masa para la adsorción de metales pesados en soluciones acuosas empleando tecnología de microondas”

Tesis para obtener el grado de:

Maestro en Ciencias en Ingeniería Ambiental

Presenta:

Ing. Alain Yael Villa Arredondo

Director de tesis:

Dr. Sergio Frausto Hernández

Aguascalientes, Ags., enero de 2026



Educación
Secretaría de Educación Pública



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



Instituto Tecnológico de Aguascalientes
División de Estudios de Posgrado e Investigación

Aguascalientes, Ags., **22/enero/2026**

Oficio No. DEPI 065/2026

Asunto: Autorización impresión tesis

C. ALAIN Yael VILLA ARREDONDO
PRESENTE

Los abajo firmantes, Miembros del Jurado para Examen de Grado de Maestría, hacemos **constar** que, habiendo revisado el Trabajo de Tesis desarrollado por Usted, bajo el título: **"Diseño óptimo de un intercambiador de masa para la adsorción de metales pesados en soluciones acuosas empleando tecnología de microondas"**, hemos dictaminado que éste es de aceptarse, por lo que se autoriza su impresión.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica®
Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia®

PRESIDENTE

DR. SERGIO FRAUSTO HERNÁNDEZ

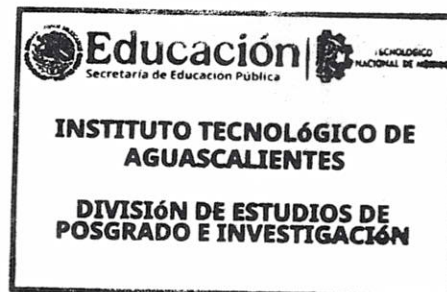
SECRETARIO

DRA. VIRGINIA HERNÁNDEZ MONTOYA

VOCAL

DR. JAVIER GERSON ZAPIAIN SALINAS

ccp. Archivo
JFLH/yevo



2026
año de
**Margarita
Maza**



Av. Adolfo López Mateos # 1801, Fracc. Bona Gens. C.P. 20256 Aguascalientes, Ags.

Tel. : 449 9105002 ext. 127 y 196

Email: jefatura.depi@aguascalientes.tecnm.mx

Página web: www.tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx



Instituto Tecnológico de Aguascalientes
«Departamento»

Aguascalientes, Ags., 22/enero/2026
Asunto: Autorización de uso de derechos

ALAIN Yael Villa Arredondo, mayor de edad, con domicilio ubicado en Fátima #112, Residencial Del Valle 1 en mi calidad de titular y autor de la tesis denominada **"DISEÑO ÓPTIMO DE UN INTERCAMBIADOR DE MASA PARA LA ADSORCIÓN DE METALES PESADOS EN SOLUCIONES ACUOSAS EMPLEANDO TECNOLOGÍA DE MICROONDAS"** quien para todos los fines del presente documento se denominará **EL AUTOR Y/O TITULAR**, suscribo el presente documento de autorización de uso de derechos patrimoniales de autor a favor del Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes el cual se regirá por las cláusulas siguientes:

PRIMERA - AUTORIZACIÓN: **EL AUTOR Y/O TITULAR**, mediante el presente documento autoriza la utilización de los derechos patrimoniales de autor al Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, de la tesis denominada **"MÁQUINA DE APRENDIZAJE EN PARALELO PARA OPTIMIZAR EL TIEMPO DE PROCESAMIENTO EN LA DETECCIÓN DE PATRONES RELACIONADOS CON EL SUICIDIO EN REDES SOCIALES"**, a través del Repositorio Institucional del Tecnológico Nacional de México (en lo sucesivo TecNM) y en el Repositorio Nacional, que puede ser consultado en la liga electrónica: (www.repositorionacionalcti.mx/).

SEGUNDA - OBJETO: Por medio del presente escrito, **EL AUTOR Y/O TITULAR** autoriza al Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, a través del Repositorio Institucional del TecNM y en el Repositorio Nacional para que de conformidad con la Ley Federal del Derecho de Autor y la Ley de la Propiedad Industrial, use los derechos del documento antes referido, con fines exclusivamente académicos.

TERCERA - TERRITORIO: Los derechos aquí autorizados se dan sin limitación geográfica o territorial alguna.

CUARTA - ALCANCE: La presente autorización se da tanto para formato o soporte material, y se extiende a la utilización en medio óptico, magnético, electrónico, en red, mensajes de datos o similar conocido o por conocer, del ejemplar o número respectivo de la publicación.

QUINTA - EXCLUSIVIDAD: La autorización de uso aquí establecida no implica exclusividad en favor del Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes. Por lo tanto, **EL AUTOR Y/O TITULAR** en su carácter de autor de la obra objeto del presente documento se reserva el derecho de publicar directamente, u otorgar a cualquier tercero, autorizaciones de uso similares o en los mismos términos aquí acordados.





Instituto Tecnológico de Aguascalientes
«Departamento»

SEXTA - DERECHOS MORALES (Créditos y mención): La Autorización de los derechos antes mencionados no implica la cesión de los derechos morales sobre los mismos por cuanto en conformidad con lo establecido en los artículos 18, 19, 20, 21, 22 y 23 de la Ley Federal de Derechos de Autor, dada la cuenta que estos derechos son inalienables, imprescriptibles, irrenunciables e inembargables. Por lo tanto, los mencionados derechos seguirán radicados en cabeza de EL AUTOR Y/O TITULAR, y siempre deberá mencionarse su nombre cuando se utilice la obra.

SÉPTIMA - AUTORÍA: EL AUTOR Y/O TITULAR, declara y ratifica que el material objeto de la presente fue realizada por él o por ella sin violar o usurpar derechos de Propiedad Intelectual de terceros.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica»

Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia

ALAIN Yael VILLA ARREDONDO
AUTOR DE LA TESIS

Vo.Bo.

SERGIO FRAUSTO HERNANDEZ
DIRECTOR DE LA TESIS

ccp. Archivo



2026
año de
**Margarita
Maza**





Educación
Secretaría de Educación Pública



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



Instituto Tecnológico de Aguascalientes
«Departamento»

Aguascalientes, Ags., 22/enero/2026
Asunto: Oficio de originalidad

**CONSEJO DE POSGRADO
MAESTRÍA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA AMBIENTAL
PRESENTE**

El director de tesis de el/la **Alain Yael Villa Arredondo**, estudiante de **Maestría en Ciencias en Ingeniería Ambiental** con número de control **G24153065**, hace constar que, después de haber realizado la revisión del informe de originalidad generado con la herramienta Turnitin, el trabajo **"Diseño óptimo de un intercambiador de masa para la adsorción de metales pesados en soluciones acuosas empleando tecnología de microondas"** es original conforme a los criterios establecidos. El porcentaje de similitud es **23 %** y se adjunta resumen del reporte.

ATENTAMENTE

*Excelencia en Educación Tecnológica
Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia®*

**DR. SERGIO FRAUSTO HERNANDEZ
COORDINADOR DE LA MAESTRÍA
EN CIENCIAS EN INGENIERÍA AMBIENTAL**

Vo.Bo.

**DR. JOSÉ FRANCISCO LOUVIER HERNANDEZ
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN**

ccp. Archivo



2026
año de
**Margarita
Maza**



Av. Adolfo López Mateos # 1801, Fracc. Bona Gens. C.P. 20256 Aguascalientes, Ags.
Tel. : 449 910500 ext. «Teléfono» Email: «Email»
Página web: www.tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx

Dedicatorias

Agradezco de manera especial al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por el apoyo económico otorgado durante la realización de mis estudios de maestría, el cual hizo posible el desarrollo de este trabajo de investigación.

Expreso mi sincero agradecimiento a mi director(a) de tesis el Dr. Sergio Frausto Hernández, por su orientación, apoyo académico y valiosas observaciones a lo largo del desarrollo de este trabajo, así como al comité tutorial Dra. Virginia Hernández Montoya y Dr. Javier Gerson Zapiain Salinas, cuyas recomendaciones y comentarios contribuyeron de manera significativa al fortalecimiento y mejora del presente estudio.

Asimismo, agradezco al Instituto Tecnológico de Aguascalientes donde se realizó este trabajo por brindar las facilidades, infraestructura y recursos necesarios para llevar a cabo la investigación. De igual forma, reconozco el apoyo de los profesores y de mis compañeros y amigos del programa de posgrado, Raymundo, Karla y Carlos, quienes con su conocimiento, colaboración y disposición enriquecieron mi formación académica y profesional.

Finalmente, agradezco profundamente a mi madre Silamn, a mi abuela Esther y a mi tía Georgina por su apoyo incondicional, comprensión y motivación constante a lo largo de esta etapa, así como a todas aquellas personas que, de manera directa o indirecta, contribuyeron a la culminación de este proyecto.

Resumen

Este proyecto presenta una investigación enfocada en el diseño de redes de intercambio de masa mediante la metodología de Integración de Masa (IM), aplicada a la remoción de metales pesados (Cd, Cu y Zn) en soluciones acuosas. En donde se emplearon Agentes Másicos de Separación (MSA's) sintetizados mediante Tecnología de Microondas (TM), con el fin de cumplir los límites establecidos por la NOM-001-SEMARNAT-2021 sobre descargas en cuerpos de agua.

Se utilizaron datos de equilibrio experimentales reportados por Durán-Jiménez et al. [4] para modelar las funciones de equilibrio y aplicar la implementación desarrollada por De Lara-Ramos et al. [28], que permite construir diagramas de intercambio de masa y seleccionar el MSA más adecuado, considerando costo y rango operativo. Los resultados mostraron que los materiales sintetizados por microondas presentan mayor eficiencia y capacidad de adsorción, destacando el carbón activado oxigenado O-Cd, O-Cu y O-Zn como los más eficaces para cadmio, cobre y zinc, respectivamente.

El análisis económico incluyó el costo energético de producción de los MSA's, mostrando que, aunque los materiales obtenidos por microondas implican una inversión inicial mayor, ofrecen ventajas en eficiencia y reducción de equipos necesarios. Finalmente, se concluye que la IM combinada con TM es una herramienta viable para diseñar equipos de intercambio de masa y conseguir procesos sostenibles de tratamiento de aguas contaminadas con metales pesados; además se presentan áreas de oportunidad para continuar con el diseño detallado del equipo de intercambio de masa en futuras investigaciones.

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO 1:	1
1.1 Planteamiento del problema	1
1.2 Alcances y limitaciones	2
1.2.1 Alcances	2
1.2.2 Limitaciones	3
1.3 Justificación	4
1.4 Objetivos.....	5
1.4.1 Objetivo General.....	5
1.4.2 Objetivos específicos.....	5
CAPÍTULO 2:	6
CAPÍTULO 3:	8
3.1 Transferencia de masa	8
3.1.1 Intercambiadores de masa	8
3.1.1.1 Columnas de adsorción.....	9
3.2 Alcances del diseño	10
3.2.1 Tipos de diseño.....	11
3.2.2 Diseño estimado de una columna de adsorción.....	11
3.3 Adsorción	14

3.3.1 Materiales adsorbentes	15
3.3.2 Isoterma de adsorción.....	15
3.3.2.1 Isoterma de Langmuir vs Freundlich.....	16
3.4 Síntesis de materiales con técnica de microondas	17
3.5 Síntesis de redes de intercambio de masa.....	19
3.5.1 Función de equilibrio.....	19
3.5.2 Balance de materia.....	21
3.6 Minimización del costo de intercambio de masa.....	21
3.7 Diagrama de intercambio de masa.....	25
3.8 Modelo matemático	26
CAPÍTULO 4:	30
4.1 Determinación de Agentes másicos de separación.....	30
4.2 Determinación de las funciones de equilibrio	30
4.3 Estimación del costo de los materiales adsorbentes	31
4.4 Costo de remoción de la especie objetivo	32
4.5 Construcción del diagrama de intercambio de masa	32
4.6 Optimización del equipo de intercambio de masa.....	33
CAPÍTULO 5:	37
5.1 Caso de estudio.....	37

5.2 Selección de los MSA's.....	38
5.3 Determinación de la función de equilibrio de los MSA's	38
5.4 Determinación del costo de los MSA's	41
5.5 Construcción del diagrama de intercambio de masa	41
5.6 Optimización del equipo de intercambio de masa.....	45
CAPÍTULO 6:	48
6.1 Conclusiones.....	48
6.2 Trabajo futuro	49
BIBLIOGRAFÍA	51
Anexo I	55

CAPÍTULO 1:

INTRODUCCIÓN

1.1 Planteamiento del problema

En los últimos años, la adsorción asistida por microondas ha sido un tema de interés ya que sugiere varias ventajas en comparación con otros métodos de adsorción convencionales; tal como lo reportan Yuen & Hameed [1] y Edwis & Hameed [2], donde nos explican que el uso o aplicación de los efectos de microondas sobre los procesos de adsorción tiene mayores ventajas que algunos métodos convencionales, como puede ser mayor ahorro energético o rapidez de calentamiento del material adsorbente. Por esta razón, se busca diseñar un intercambiador de masa donde tenga cabida un fluido contaminado con metales pesados y un MSA, en el que el fluido pierde la mayoría de sus contaminantes y en el que la adsorción mejore gracias al efecto de microondas.

1.2 Alcances y limitaciones

1.2.1 Alcances

El presente estudio aplica la metodología de Integración de Masa (IM) en el diseño conceptual de una red de intercambiadores orientada a la remoción de metales pesados (Cd^{2+} , Cu^{2+} y Zn^{2+}) en soluciones acuosas. A partir de datos de equilibrio experimentales que han sido reportados por Durán-Jiménez et al. [4] y del enfoque metodológico propuesto por De Lara-Ramos [28], se identificaron y evaluaron diversos Agentes Másicos de Separación (MSA's), incluyendo materiales sintetizados mediante Tecnología de Microondas (TM).

El alcance principal del trabajo radica en la integración teórica y metodológica de dos enfoques:

1. La síntesis de materiales adsorbentes por microondas como alternativa energética eficiente, y
2. El diseño sistemático del equipo de intercambio mediante IM para seleccionar el MSA más adecuado según su capacidad de adsorción, rango de operación y costo de producción.

El estudio permite determinar qué materiales resultan más viables para la remoción de contaminantes específicos, destacando que los MSA's sintetizados por microondas muestran un mejor desempeño para los tres metales evaluados. Además, la aplicación de la IM permite reducir el número de equipos requeridos, lo cual representa un aporte relevante en términos de optimización de procesos y sostenibilidad ambiental.

Finalmente, este trabajo sienta las bases para la posterior implementación experimental e industrial de la metodología, ya que identifica las condiciones y materiales más prometedores para futuras etapas de diseño y operación de sistemas de tratamiento de aguas contaminadas.

1.2.2 Limitaciones

Entre las principales limitaciones del estudio se encuentran las siguientes:

1. **Etapas conceptual:** El trabajo se desarrolló principalmente a nivel teórico y de modelación de un problema de programación matemática. Por lo que no se realizó la construcción física ni la validación experimental de la red de intercambio de masa propuesta, lo cual limita la verificación de su desempeño bajo condiciones reales de operación.
2. **Datos secundarios:** Los valores de equilibrio y capacidad de adsorción se obtuvieron de fuentes bibliográficas [4] y no de experimentación directa; por lo que los resultados dependen de la precisión y condiciones originales de esos estudios.
3. **Escalamiento y operación:** Solo se abordó el escalamiento industrial del proceso y la dinámica de operación del sistema de intercambio de masa; por lo que la aplicabilidad práctica de la metodología requiere validación en planta piloto o a nivel industrial.
4. **Aspectos energéticos y económicos:** Aunque se estimaron los costos de síntesis de los MSA's mediante la ecuación de consumo energético, el análisis económico fue estimado y no considera otros factores asociados a la instalación y mantenimiento del sistema.
5. **Regeneración de los materiales:** No se consideró la regeneración ni la estabilidad de los MSA's tras varios ciclos de adsorción-desorción, aspecto esencial para determinar la viabilidad a largo plazo del proceso.

1.3 Justificación

De acuerdo con la OMS (Organización Mundial de la Salud), el agua contaminada y el saneamiento deficiente contribuyen a la transmisión de enfermedades tales como cólera, disentería, hepatitis A, poliomielitis, entre otras, y esto es gracias a que las aguas residuales urbanas, industriales, agrícolas y del subsuelo contienen contaminantes tanto biológicos como químicos, sobre todo en este último que puede tener más contaminantes químicos, como arsénico y fluoruros, y cantidades elevadas de otros productos químicos, como plomo, a causa de la lixiviación de las tuberías de conducción [3].

Los metales pesados han sido designados por la Agencia de Protección Ambiental (EPA) como perjudiciales para los seres vivos y tóxicos al medio ambiente. El principal inconveniente es que no son biodegradables y tienden a acumularse en los organismos de los seres vivos. [4]. Debido a esto, la NOM (Norma Oficial Mexicana) estableció estándares para las concentraciones de metales pesados en el agua [5], en donde se puede observar que algunos metales como el Arsénico, Cadmio, Plomo, Mercurio o Níquel no deben sobrepasar el 0.01 mg/L. Esta restricción, la obliga a cumplir con una mejor calidad del agua por lo que es de gran importancia diseñar nuevas tecnologías que sean eficientes en la eliminación de metales pesados.

Dentro de los procesos convencionales para llevar a cabo la reducción de metales pesados se encuentra la adsorción [6], la cual presenta grandes ventajas de eficiencia energética, al requerir de menor energía al calentar el material objetivo con la rapidez que sucede reduce tiempos de procesamiento. Por lo tanto, gracias a estas ventajas, se esperaría reducir costos operativos, aunque la inversión inicial sea costosa por el equipo especializado requerido; pero que a largo plazo se convertiría en una excelente opción [7].

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo General

Analizar MSA's o materiales adsorbentes que han sido sintetizados usando tecnología de microondas.

1.4.2 Objetivos específicos

- I. Aplicando técnicas de integración de masa, estimar el costo y rango de operación del material adsorbente.
- II. Comparar económica y operativamente materiales adsorbentes convencionales y sintetizados con tecnología de microondas.
- III. Diseñar un intercambiador de masa con un enfoque de proceso intensificado.
- IV. Presentar los resultados en un congreso nacional y en uno internacional.
- V. Publicar los resultados en una revista JCR.

CAPÍTULO 2:

ESTADO DEL ARTE

La contaminación por metales pesados constituye una de las principales problemáticas ambientales debido a su toxicidad, persistencia y capacidad de bioacumulación en los organismos vivos. Desde la década de 1970, organismos internacionales como la Environmental Protection Agency (EPA) han establecido lineamientos para controlar la presencia de estos contaminantes en los cuerpos de agua. En México, la NOM-001-SEMARNAT-2021 fija límites máximos permisibles para elementos como cadmio, cobre y zinc, los cuales no deben exceder concentraciones de 0.2, 2 y 2 mg/L respectivamente. Esta regulación ha impulsado el desarrollo de tecnologías más eficientes para su eliminación.

Entre los métodos de tratamiento, la adsorción se ha consolidado como una técnica efectiva y de bajo costo, aunque su desempeño depende de las propiedades fisicoquímicas del material adsorbente. En este sentido, la tecnología de microondas (TM) ha emergido como una alternativa innovadora para la síntesis de materiales adsorbentes, ya que permite una activación rápida, control térmico uniforme y una notable reducción en el consumo energético [4]. Los materiales sintetizados mediante TM, denominados Agentes Másicos de Separación (MSA), han mostrado capacidades superiores de adsorción de iones metálicos como Cu^{2+} , Cd^{2+} y Zn^{2+} en comparación con los materiales obtenidos por métodos convencionales.

Paralelamente, la Integración de Masa (IM) desarrollada por El-Halwagi y Manousiouthakis [20] ha demostrado ser una herramienta sistemática para el diseño de redes de intercambio de masa orientadas a la minimización de contaminantes en corrientes de proceso. Esta metodología permite identificar, mediante diagramas de intercambio, las mejores combinaciones de agentes de separación considerando criterios operativos y económicos. De

Lara-Ramos [28] amplió su aplicación a la remoción de fosfatos, confirmando su utilidad en el análisis y selección óptima de MSA's.

Diversas investigaciones han combinado ambas aproximaciones —la síntesis de MSA's por TM y la aplicación de la IM— con el propósito de diseñar redes de intercambio de masa para la remoción de metales pesados. Los resultados reportan que los materiales preparados por microondas presentan ventajas competitivas en términos de capacidad de adsorción, eficiencia energética y costo operativo. Asimismo, el empleo de la IM facilita la selección del MSA más adecuado según su rango de operación, capacidad y costo de producción (Villa-Arredondo y col. 2025).

En conjunto, los avances actuales evidencian que la síntesis de MSA's mediante tecnología de microondas, en combinación con la metodología de integración de masa, ofrece una alternativa sustentable y eficiente para el tratamiento de aguas contaminadas con metales pesados. No obstante, se identifican áreas de oportunidad en la implementación in situ de la activación por microondas, la construcción industrial de los procesos y la regeneración de los materiales bajo condiciones reales de operación, los cuales representan líneas prometedoras para futuras investigaciones.

CAPÍTULO 3:

MARCO TEÓRICO

3.1 Transferencia de masa

La transferencia de masa es un proceso fundamental en la ingeniería y la ciencia que se refiere al movimiento de especies químicas desde una región de alta concentración hacia una de concentración menor; en otras palabras, implica la transferencia de materia de una región a otra debido a gradientes de concentración, temperatura, presión u otras propiedades relevantes. Por ejemplo, la difusión es un proceso común de intercambio de masa donde las moléculas se mueven desde una región de alta concentración a una de baja concentración [8]. Dentro de un marco de integración de masa, las operaciones de intercambio de masas se emplean para interceptar fuentes mediante la transferencia selectiva de ciertas especies indeseables de una serie de flujos de desecho a una serie de Agentes Másicos de Separación (MSA). El MSA debe ser parcial o completamente inmiscible en la fase rica. Cuando las dos fases están en contacto íntimo, los solutos se redistribuyen entre las dos fases, lo que conduce a un agotamiento de la fase rica y un enriquecimiento de la fase pobre. Los ejemplos de operaciones de intercambio de masa se incluyen la absorción, adsorción, extracción, intercambio iónico, extracción con solvente y lixiviación [9] [10].

3.1.1 Intercambiadores de masa

Un intercambiador de masa es un dispositivo diseñado para facilitar el intercambio de masa entre dos corrientes de fluido que tienen diferentes composiciones químicas o concentraciones de una o más sustancias. Estos intercambiadores son comunes en una amplia gama de aplicaciones industriales y de ingeniería, incluidas la destilación, la absorción, la adsorción, la extracción y la separación de componentes en mezclas.

El objetivo principal de un intercambiador de masa es garantizar un adecuado contacto entre las fases rica y pobre. Esto se logra mediante diversos tipos de dispositivos de intercambio de masa, que se dividen principalmente en dos categorías: los contactores multietapa y los diferenciales o continuos.

En los intercambiadores multietapa, cada etapa facilita un contacto íntimo entre las fases rica y pobre, seguido de una separación de las mismas. Debido a la mezcla completa, los contaminantes se redistribuyen entre las dos fases, alcanzando un equilibrio en la salida de cada etapa. Ejemplos de estos intercambiadores son las columnas de platos y los mezcladores sedimentadores.

Por otro lado, en los intercambiadores de tipo contactor diferencial, las dos fases fluyen a través del dispositivo en contacto continuo, sin fases de separación intermedias. Ejemplos de estos incluyen columnas empacadas, torres de aspersión y unidades agitadas mecánicamente. [10].

En este sentido, se optó por utilizar columnas de adsorción ya que son capaces de proporcionar una alta selectividad en la separación de componentes específicos de una mezcla, también se pueden operar bajo diferentes condiciones de temperatura y presión, pueden diseñarse para operar en ciclos de adsorción-desorción e incluso tener un proceso cíclico o continuo donde se pueden conectar varias columnas ya sea en serie o paralelo y mientras una está en fase de adsorción, otra puede estar en fase de desorción y regeneración. [29][30].

3.1.1.1 Columnas de adsorción

Las columnas de adsorción son dispositivos utilizados en procesos de tratamiento de aguas contaminadas para eliminar sustancias no deseadas, como metales pesados, compuestos orgánicos, colorantes, entre otros. Estas columnas están llenas de un MSA, como el carbón activado, que retiene selectivamente los contaminantes presentes en el agua [11].

Las columnas de adsorción, especialmente las torres de lecho fijo son dispositivos diseñados para llevar a cabo la separación de componentes mediante el proceso de adsorción. Estas columnas contienen partículas de un adsorbente específico en su interior. Al ingresar un fluido a tratar en la torre, este entra en contacto con las partículas sólidas del adsorbente. Los componentes solubles que tienen afinidad con el adsorbente son retenidos por él, permitiendo así que el fluido que sale de la columna esté purificado de dicho compuesto [12].

Uno de los aspectos más destacados de las columnas de adsorción es su capacidad para separar componentes en función de sus propiedades físicas y químicas, como el tamaño, la polaridad y la afinidad por el adsorbente. Esto permite una purificación eficiente de una amplia gama de sustancias, desde compuestos orgánicos e inorgánicos hasta contaminantes presentes en el aire o el agua.

La eficiencia de una columna de adsorción depende de varios factores, como el tamaño de partícula del adsorbente, la velocidad de flujo del fluido, la temperatura y la concentración de los contaminantes. Un diseño óptimo debe tener en cuenta estos parámetros para lograr una eliminación efectiva de impurezas con el menor consumo de energía posible.

Además de su papel en la purificación de líquidos y gases, las columnas de adsorción también se utilizan en procesos de separación y recuperación de productos químicos en la industria química y farmacéutica.

3.2 Alcances del diseño

El diseño se refiere al proceso de concebir, planificar y crear algo con un propósito específico. Puede aplicarse a una amplia gama de disciplinas, desde la arquitectura y el diseño industrial hasta el diseño gráfico, la ingeniería y más. En términos generales, el diseño implica la creación de soluciones que satisfagan necesidades específicas, ya sea estéticas, funcionales, ergonómicas, tecnológicas o de otro tipo [13]. Este proceso puede involucrar la generación de ideas, la exploración de conceptos, la iteración de prototipos y la evaluación de soluciones para llegar a un resultado final que cumpla con los requisitos y objetivos establecidos.

3.2.1 Tipos de diseño

Max. & Klaus [14] clasifican los métodos para llevar a cabo el diseño en función de la precisión y detalle requeridos y los dividen en la siguiente clasificación: diseños preliminares, diseños estimados y diseños detallados.

Los diseños preliminares se utilizan normalmente como base para determinar si se debe seguir trabajando en el proceso propuesto. El diseño se basa en métodos de proceso y costos aproximados. Incluyen pocos detalles y reduce el tiempo de cálculo. Si el diseño preliminar se justifica, puede continuarse con un diseño estimado. En este tipo de diseño, los costos y el proceso preestablecido se determinan mediante análisis detallados. Sin embargo, no se dan especificaciones exactas del equipo.

Cuando el diseño estimado indica que el proyecto debería ser un éxito comercial, el paso final antes de desarrollar los planes de construcción de la planta es la preparación del diseño detallado. El diseño incluiría planos e información suficiente para permitir la construcción del equipo.

En este sentido, al proceso que se debería de llegar es al estimado debido a que tendríamos los cálculos, costos y análisis detallados, pero no toda la información necesaria para llevar a cabo la construcción del equipo.

3.2.2 Diseño estimado de una columna de adsorción

El-Halwagi [15] establece que la altura de la columna, H , de un intercambiador de masa se puede estimar de la siguiente manera:

$$H = HTU_y NTU_y \quad \text{Ec. 3.1}$$

$$= HTU_x NTU_x \quad \text{Ec. 3.2}$$

donde HTU_y y HTU_x son la altura total de las unidades de transferencia con base en las fases rica y pobre, respectivamente, mientras que NTU_y y NTU_x son el número total de unidades de transferencia imaginarias con base en las fases rica y pobre, respectivamente [15]. La altura total de una unidad de transferencia puede ser estimada usando correlaciones empíricas, típicamente dividiendo la velocidad superficial de una fase, v , por su coeficiente global de transferencia de masa, k_c , y el área interfacial efectiva, a , de la siguiente manera:

$$HTU_y = \frac{v}{k_c a} \quad \text{Ec. 3.3}$$

El área interfacial efectiva se define como m^2 de área superficial/ m^3 del lecho, en un lecho empacado con partículas esféricas con un diámetro D_p . Para determinar el valor de a , [23] establece la siguiente ecuación:

$$a = \frac{6(1-e)}{D_p} \quad \text{Ec. 3.4}$$

donde e es la porosidad del material adsorbente y D_p es el diámetro medio de partícula.

Sin embargo, como se puede observar en la Ecuación 3.3, se requiere de un coeficiente de transferencia de masa; para lo cual, Geankoplis [23] establece un procedimiento que consiste en primero obtener J_D . Si el número de Reynolds (Re) se encuentra en el intervalo de 0.0016 a 55 y el número de Schmidt (Sc) entre 165 y 70600, la ecuación idónea es:

$$J_D = \frac{1.09}{\varepsilon} * Re^{-\frac{2}{3}} \quad \text{Ec. 3.5}$$

Donde:

$$Re = \frac{D_p * v * \rho}{\mu} \quad \text{Ec. 3.6}$$

y

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad \text{Ec. 3.7}$$

Una correlación ampliamente usada para la difusividad de pequeñas moléculas en líquidos es la ecuación empírica de Wilke & Chang [34].

$$D_{AB} = 7.4 \times 10^{-8} \frac{(\Psi_B M_B)^{1/2} T}{\mu V_A^{0.6}} \quad \text{Ec. 3.8}$$

Donde

D_{AB} = difusividad, cm^2/s

T = temperatura absoluta, K

μ = viscosidad de la solución, cP

V_A = volumen molar del soluto como líquido en su punto de ebullición normal, $\text{cm}^3/\text{g mol}$

Ψ_B = parámetro de asociación para el disolvente

M_B = peso molecular del disolvente.

Posteriormente se calcula k_c con base en el valor obtenido de J_D [23].

$$J_D = \frac{k_c}{v} S_c^{\frac{2}{3}} \quad \text{Ec. 3.9}$$

Por otro lado, El-Halwagi [15] establece que el número de unidades de transferencia imaginarias se puede estimar teóricamente para el caso de intercambiadores isotérmicos de masa con equilibrio lineal de la siguiente manera:

$$NTU_y = \frac{y_i^{in} - y_i^{out}}{(y_i - y_i^*)_{\log mean}} \quad \text{Ec. 3.10}$$

Donde

$$(y_i - y_i^*)_{\log mean} = \frac{(y_i^{in} - m_j x_j^{out}) - (y_i^{out} - m_j x_j^{in})}{\ln \left(\frac{y_i^{in} - m_j x_j^{out}}{y_i^{out} - m_j x_j^{in}} \right)} \quad \text{Ec. 3.11}$$

El diámetro de la columna normalmente se determina seleccionando una velocidad superficial para una o ambas fases. Esta velocidad está destinada a asegurar una mezcla adecuada mientras se evitan problemas hidrodinámicos tales como inundación, goteo o arrastre. Una vez que se determina la velocidad superficial, el área de la sección transversal de la columna se obtiene dividiendo el caudal volumétrico por la velocidad [10].

$$\frac{\pi D^2}{4} = \frac{G}{v} \quad \text{Ec. 3.12}$$

Despejando el diámetro de la ecuación anterior se obtiene que:

$$D = \sqrt{\frac{4G}{\pi v}} \quad \text{Ec. 3.13}$$

3.3 Adsorción

La adsorción es un proceso en el cual los contaminantes presentes en el agua (metales pesados en este caso) son retenidos en la superficie de un adsorbente sólido. Este proceso puede ocurrir a través de varios mecanismos, como la adsorción química, donde se forman enlaces químicos entre el contaminante y el adsorbente, y la adsorción física, donde los contaminantes son retenidos mediante fuerzas de Van der Waals.

El proceso de adsorción global consta de una serie de etapas. Cuando el fluido pasa alrededor de la partícula en un lecho fijo, el soluto primero se difunde desde el volumen del fluido hacia toda la superficie exterior de la partícula. Luego, el soluto se difunde desde el interior del poro hasta la superficie de este. Por último, el soluto se adsorbe sobre la superficie.

El nivel de actividad de la adsorción se basa en la concentración de la sustancia en el agua, la temperatura y la polaridad de la sustancia. Una sustancia polar (sustancia que es soluble

en agua) no puede ser adsorbida por el adsorbente, por el contrario, una sustancia no polar es posible ser adsorbida por el adsorbente.

3.3.1 Materiales adsorbentes

Los materiales adsorbentes pueden ser llamados Agentes Másicos de Separación (o MSA's por sus siglas en inglés) y tienen la capacidad o propiedad de retener sustancias tóxicas o contaminantes mediante el proceso de adsorción [10]. Los adsorbentes utilizados para el tratamiento del agua son productos naturales o sintéticos. Por ejemplo, los adsorbentes naturales típicos son minerales arcillosos, zeolitas naturales, óxidos o biopolímeros. Por otro lado, los adsorbentes sintéticos pueden clasificarse en adsorbentes carbonosos, poliméricos, óxidos y tamices moleculares como las zeolitas. Específicamente, los carbones activados producidos a partir de material carbonoso por activación química o activación por gas son los adsorbentes más utilizados en el tratamiento de aguas. Los adsorbentes poliméricos fabricados por copolimerización de monómeros no polares o débilmente polares muestran propiedades de adsorción comparables a las de los carbones activados; pero hasta la fecha, los altos costos de los materiales y los costos de regeneración han impedido una aplicación más amplia. Los óxidos y las zeolitas son adsorbentes con propiedades superficiales hidrofílicas más fuertes. Por lo tanto, la eliminación de compuestos polares, en particular iónicos, es su campo de aplicación preferido [35][36].

3.3.2 Isoterma de adsorción

Las isotermas de adsorción son ecuaciones matemáticas que describen la relación entre la cantidad de adsorbato adsorbido sobre un adsorbente y la concentración del adsorbato en solución cuando se ha alcanzado el equilibrio a temperatura constante [17].

Las isotermas de adsorción se realizan al colocar una cantidad específica de una solución que contiene una cantidad conocida de adsorbato, junto con diferentes dosis de adsorbente. Esta mezcla se mantiene a una temperatura constante y se agita hasta que alcanza el equilibrio. En ese punto, se mide la concentración del adsorbato en la fase acuosa, y se calcula la capacidad de adsorción en equilibrio para cada experimento utilizando un balance de masa determinado.

3.3.2.1 Isoterma de Langmuir vs Freundlich

Los más utilizados debido a la versatilidad son el isoterma de Langmuir y Freundlich. Ambas isotermas describen la relación entre la concentración de soluto en la fase líquida y la cantidad de soluto adsorbido en la superficie del adsorbente, pero difieren en su formulación matemática y su consideración.

La isoterma de Langmuir es una relación matemática que describe la adsorción química en una monocapa sobre una superficie sólida homogénea. Propuesta por Irving Langmuir en 1916, esta isoterma asume que la adsorción ocurre en sitios específicos y limitados en la superficie del adsorbente, y que la adsorción de una molécula en un sitio afecta la probabilidad de adsorción de moléculas en los sitios adyacentes [23]. La ecuación de la isoterma de Langmuir se expresa como:

$$\frac{q}{C} = \frac{q_{max}}{K} + \frac{1}{K * C} \quad Ec. 3.14$$

Donde, q es la cantidad de soluto adsorbido por unidad de masa de adsorbente (generalmente en mg/g o mmol/g), C es la concentración del soluto en la fase líquida en equilibrio (generalmente en mg/L o mmol/L), q_{max} es la capacidad máxima de adsorción en la monocapa (en mg/g o mmol/g), y K es la constante de equilibrio de adsorción (en L/mg o L/mmol).

Por otro lado, la isoterma de Freundlich describe la adsorción en múltiples capas sobre una superficie heterogénea del adsorbente. Fue propuesta por Herbert Freundlich en 1906 y es una expresión empírica que no se basa en consideraciones cinéticas o termodinámicas específicas [23]. La ecuación de la isoterma de Freundlich se expresa como:

$$q = K * C^n \quad Ec. 3.15$$

Donde q es la cantidad de soluto adsorbido por unidad de masa de adsorbente, C es la concentración del soluto en la fase líquida en equilibrio, K es una constante relacionada con

la capacidad de adsorción del adsorbente, y n es un parámetro que indica la intensidad de la adsorción o la no linealidad de la isoterma.

En la práctica, ambas isothermas se utilizan para caracterizar y entender mejor los procesos de adsorción en diferentes sistemas y condiciones (ver Figura 1).

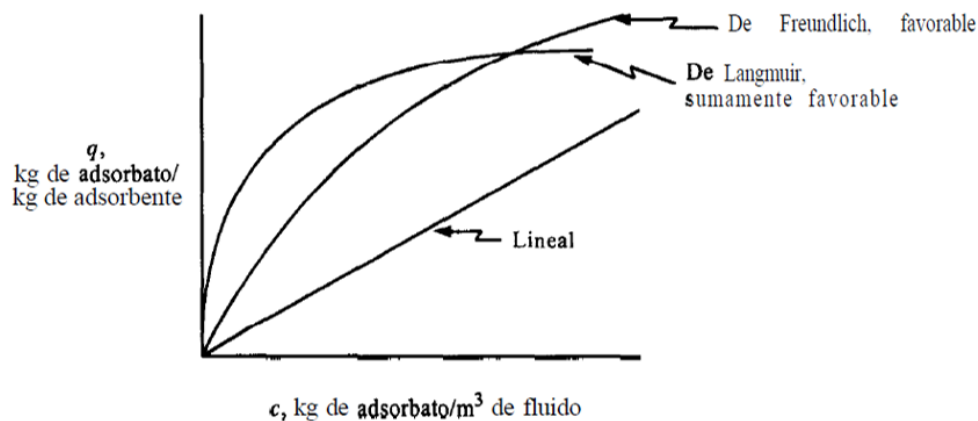


Figura 3.1. Diferencia entre isothermas de Langmuir y Freundlich [37].

3.4 Síntesis de materiales con técnica de microondas

Los efectos de las microondas se refieren a los cambios o fenómenos que ocurren en los materiales cuando se exponen a radiación electromagnética de frecuencia microondas. Estos efectos pueden ser variados y dependen de diversos factores, como la naturaleza del material irradiado, la intensidad de la radiación de microondas y la duración de la exposición.

Los equipos industriales de microondas utilizan una frecuencia de 2450 MHz, dicha frecuencia quiere decir que la polaridad en un campo de microondas cambia rápidamente el equivalente a 2.45 billones de veces por segundo, y también significa que presenta una longitud de onda de 12.24 cm, lo cual le permite tener cierto grado de penetración, y en consecuencia esta longitud hace que salte objetos más pequeños y que no estén directamente en su trayectoria y esto se observe en ocasiones como un calentamiento desigual. La energía de microondas posee un bajo contenido energético en sus fotones, la cual, al ser comparada

con la energía de los enlaces químicos, que va de un intervalo de 20 a 80 kcal/mol se considera relativamente baja, en consecuencia, las microondas no podrían afectar directamente la estructura molecular. Por lo tanto, el efecto de la excitación de las moléculas por las microondas es puramente incremento de la energía cinética [18].

A diferencia de los métodos convencionales de calentamiento que utilizan conducción y convección, en el calentamiento por microondas la energía se transfiere directamente al material a través de la interacción a nivel molecular con el campo electromagnético (Figura 2). Esta forma de transferencia de energía es crucial en la síntesis de materiales [19].

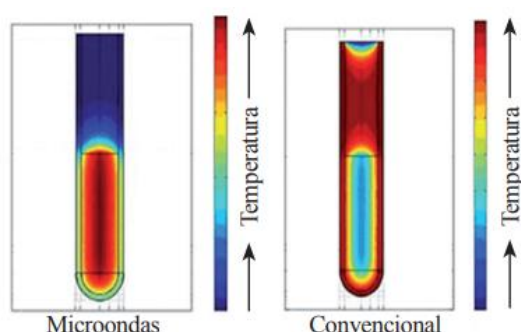


Figura 3.2. Comparación de la distribución de la temperatura mediante microondas y método convencional [38].

El uso de microondas permite un calentamiento significativamente más rápido en comparación con las síntesis convencionales. Algunos estudios indican que las reacciones pueden acelerarse entre 10 y 1,000 veces cuando se utilizan microondas.

Las microondas pueden calentar selectivamente ciertos materiales en función de sus propiedades dieléctricas, tamaño y estructura molecular. Esto permite localizar el calentamiento en regiones específicas, lo que no es posible con los tratamientos convencionales.

3.5 Síntesis de redes de intercambio de masa

En muchas instalaciones de procesos, los intercambiadores de masa se utilizan para separar las especies objetivo de una serie de corrientes ricas. Se puede considerar más de una tecnología de intercambio de masa y más de un MSA. En tales situaciones, es necesario integrar las decisiones y el diseño de los múltiples intercambiadores de masa. El-Halwagi & Manousiouthakis [20] introdujeron el problema de sintetizar la red de intercambio de masa "MENs" y desarrollaron técnicas sistemáticas para su diseño óptimo. La Figura 3.3 es una representación esquemática de una MEN (por sus siglas en inglés).

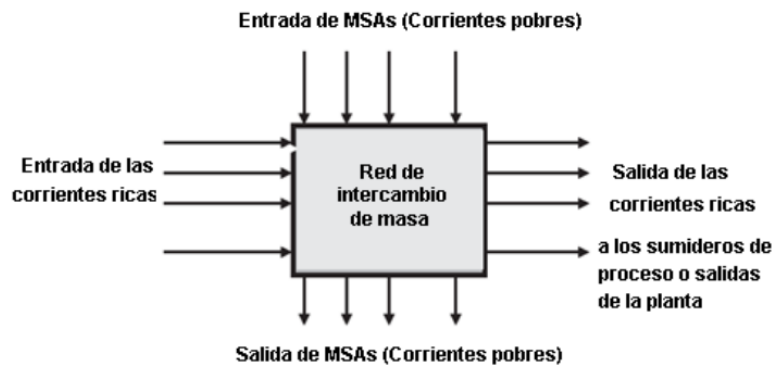


Figura 3.3 Red de intercambio de masa, MEN [15].

3.5.1 Función de equilibrio

Considere el intercambiador de masa que se muestra en la Figura 3.4. Un determinado componente se transfiere de la corriente rica, i , a la corriente pobre, j . La corriente rica tiene un flujo, G_i , una composición de entrada, y_i^{in} , y una composición de salida, y_i^{out} . La corriente pobre tiene un caudal, L_j , una composición de entrada, x_j^{in} , y una composición de salida, x_j^{out} [15].



Figura 3.4. Intercambiador de masa genérico [15].

El equilibrio se refiere al estado en el que no hay transferencia neta en la interfase de la especie objetivo (soluto). Esta situación corresponde al estado en el que ambas fases tienen el mismo valor de potencial químico para el soluto. Matemáticamente, la composición del soluto en la fase rica, y_i , puede relacionarse con su composición en la fase pobre, x_j , mediante una función de distribución de equilibrio, f_j^* . Por tanto, para una composición de corriente rica dada, y_i , la composición máxima alcanzable del soluto en la fase pobre, x_j^* , viene dada por:

$$y_i = f_j^*(x_j^*) \quad \text{Ec. 3.16}$$

En muchos casos, la función de equilibrio se puede linealizar en un rango específico de operación. Como se muestra en la Figura 3.5, la forma linealizada tiene una pendiente de m_j y una intersección de b_j , es decir:

$$y_i = m_j x_j^* + b_j \quad \text{Ec. 3.17}$$

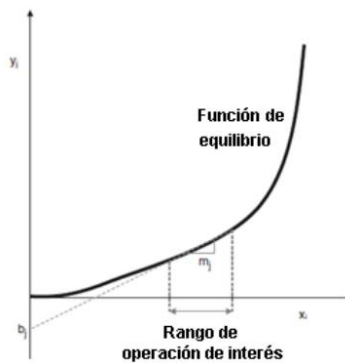


Figura 3.5. Segmento linealizado de la función de equilibrio [15].

3.5.2 Balance de materia

El balance de materia en el soluto transferible explica el hecho de que la masa de soluto perdida de la corriente rica es igual a la masa de soluto ganada por la corriente pobre, es decir:

$$G_i(y_i^{in} - y_i^{out}) = L_j(x_i^{out} - x_i^{in}) \quad \text{Ec. 3.18}$$

La ecuación de balance de materia proporciona la descripción matemática de la línea de operación. La línea de operación se puede representar gráficamente en un diagrama x-y (McCabe-Thiele), esta ecuación representa la línea de operación que se extiende entre los puntos (x_j^{in}, y_i^{out}) , (x_j^{out}, y_i^{in}) y tiene una pendiente de L_j/G_i , como se muestra en la Figura 3.6 [15].

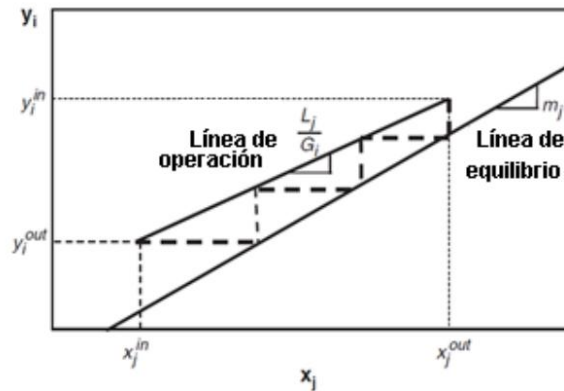


Figura 3.6. Diagrama McCabe-Thiele para un intercambiador de masa [15].

3.6 Minimización del costo de intercambio de masa

Al evaluar la economía de un intercambiador de masa, se deben considerar dos tipos de costos: fijos y de operación. El costo fijo o de inversión se refiere al costo del intercambiador de masa, de los dispositivos auxiliares y costos de instalación e instrumentación. Estas inversiones se caracterizan porque se recuperan después de un cierto número de años comúnmente denominado vida útil o período de vida útil, por desgaste, por obsolescencia o

ineficiencia. Por lo tanto, para evaluar un costo anual asociado con la inversión de capital del intercambiador de masa, se denomina Costo Fijo Anualizado (AFC) por sus siglas en inglés. Un método simplificado para evaluar AFC es considerar el costo fijo inicial del equipo (FC₀) y su valor de salvamento (FC_s) después de n años de vida útil. Usando un esquema de depreciación anual, obtenemos:

$$AFC = \frac{FC_0 - FC_s}{n} \quad \text{Ec. 3.19}$$

Además de la inversión de capital necesaria, existe un gasto continuo denominado costo de operación que se necesita para poner en funcionamiento el intercambiador de masa. En este sentido, el costo de operación incluiría los agentes de separación de masa (por reposición y regeneración) y los servicios auxiliares (calefacción, refrigeración, etc.).

De esta manera, el costo total anualizado (TAC) por sus siglas en inglés, de un sistema de intercambio de masa se obtiene de la siguiente manera:

$$TAC = AFC + AOC \quad \text{Ec. 3.20}$$

Para minimizar el TAC, es necesario compensar el costo fijo versus el costo de operación. Tales compensaciones pueden establecerse identificando la función de la fuerza motriz del intercambio de masa entre la operación real y los límites de equilibrio. Para alcanzar composiciones de equilibrio, se requiere un intercambiador de masa infinitamente grande. Por tanto, la línea de operación debe tener una fuerza motriz positiva con respecto a la línea de equilibrio. La fuerza impulsora mínima entre la línea de operación y la línea de equilibrio se conoce como la diferencia de composición mínima permisible y se designa por ε_j como se muestra en la Figura 3.7.

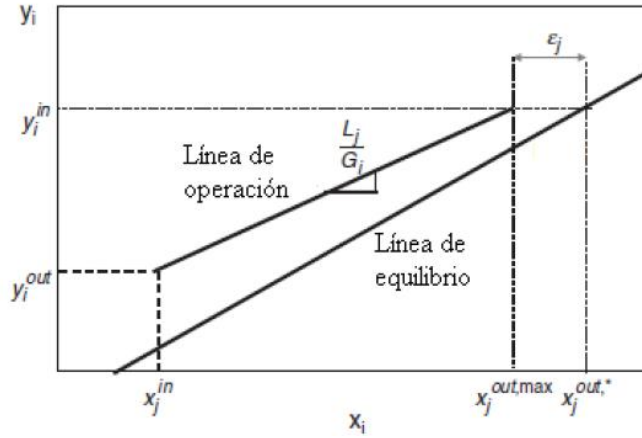


Figura 3.7. Diagrama x-y [15].

La diferencia de composición mínima permisible se puede utilizar para equilibrar el costo de capital frente al costo de operación. Para demostrar este concepto, consideremos el intercambiador de masa representado en el diagrama x-y de la Figura 3.7. Para la corriente rica, se dan las composiciones de entrada y salida, así como el caudal. Para la corriente pobre, se proporciona la composición de entrada, mientras que se desconocen el caudal y las composiciones de salida. Por lo tanto, la Ecuación 3.18 tiene dos variables: x_j^{out} y L_j . La composición de salida máxima teóricamente alcanzable en la fase pobre, $(x_j^{out,*}, *)$, es el valor de equilibrio correspondiente a la composición de entrada de la corriente rica (ver Figura 3.7). Como se mencionó anteriormente, lograr este valor de equilibrio requiere un intercambiador de masa infinitamente grande. Una vez que se selecciona la diferencia de composición mínima permisible, la composición de salida máxima factible en la práctica en la corriente pobre, $(x_j^{out,max})$, se puede determinar:

$$x_j^{out,max} = x_j^{out,*} - \varepsilon_j \quad \text{Ec. 3.21}$$

pero

$$y_i^{in} = m_j x_j^{out,*} \quad \text{Ec. 3.22}$$

Combinando las Ecuaciones 3.21 y 3.22, se obtiene:

$$x_j^{out,max} = \frac{y_i^{in}}{m_j} - \varepsilon_j \quad \text{Ec. 3.23}$$

Por lo tanto, la ecuación lineal que toma en consideración ε_j se expresa como:

$$y_i^{in} = m_j(x_j^{out,max} + \varepsilon_j) \quad \text{Ec. 3.24}$$

De esta forma, para un y_i dado, el valor de x_j corresponde a la composición máxima que es prácticamente alcanzable en la corriente pobre. Asimismo, para un x_j , el valor de y_i corresponde a la composición mínima del contaminante en la corriente rica. Para examinar el efecto de ε_j sobre el costo del intercambiador de masa, se evalúa el efecto de seleccionar dos valores de la diferencia de composición mínima permisible: ε_1 y ε_2 (ver Figura 3.8). A medida que ε_j aumenta, la pendiente de la línea de operación aumenta y el caudal del MSA aumenta también, lo que conduce a un aumento en el costo de operación del intercambiador de masa. Mientras tanto, a medida que aumenta ε_j , el número de placas teóricas disminuye, lo que lleva a una reducción en el costo fijo.

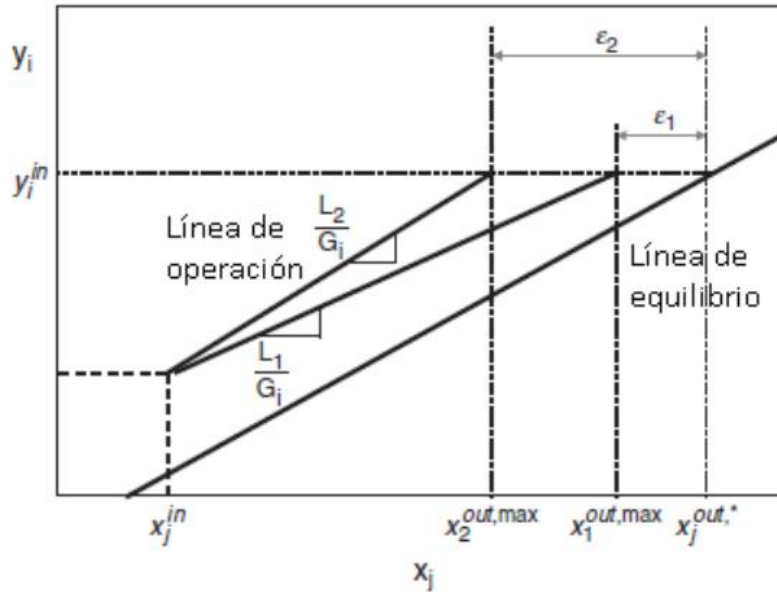


Figura 3.8. Cambio de la diferencia de composición mínima permisible [15].

Variando ε_j y evaluando el costo fijo anualizado correspondiente, el costo de operación anual y el costo total anualizado, podemos determinar el valor óptimo de diferencia de composición mínima permisible, $\varepsilon_j^{óptimo}$, que corresponde al costo total anualizado mínimo (ver Figura 3.9). También vale la pena señalar que cuando ε_j se establece en cero, el costo fijo anualizado es infinito mientras que el costo de operación anual está en su valor [15].

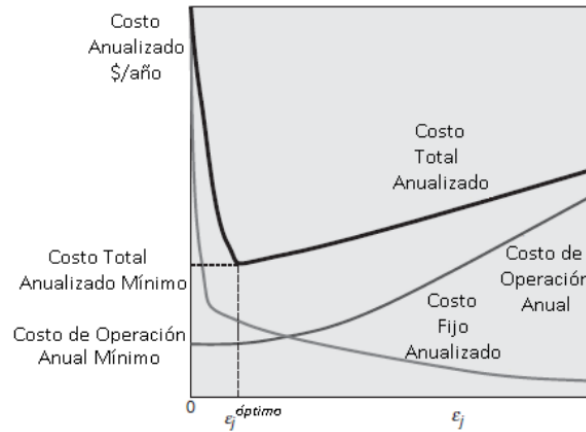


Figura 3.9. Selección de la diferencia de composición mínima permisible óptima [15].

3.7 Diagrama de intercambio de masa

Para construir el diagrama de intercambio de masa, primero se traza la línea de la corriente rica, la cual se representa con una flecha en el eje x, cuya cola corresponde a su composición de suministro y su punta a su composición objetivo del contaminante. La pendiente de la flecha es igual al caudal de la corriente. La distancia vertical entre la cola y la punta de la flecha se grafica en el eje y, y representa la masa de la especie objetivo que se desea eliminar de la corriente rica cuya y se determina de la siguiente manera:

$$M_R = G(y^s - y^t) \quad \text{Ec. 3.25}$$

Posteriormente, se emplea la Ecuación 3.24 para generar la correspondencia entre la escala de composición rica y las escalas de composición pobre para todos los MSA en el eje x. Para minimizar el costo de operación de la red, se debe utilizar el MSA más económico cuando sea factible, para ello, los MSA's se disponen en orden de menor a mayor costo de

eliminación de contaminante (c_j^r). Cada MSA se representa frente a su escala de composición con una flecha horizontal que representa el rango de operación, el cual se extiende desde la composición de entrada del contaminante en el MSA (x^s), hasta la capacidad máxima de adsorción de contaminantes del MSA (x^t) tal como se muestra en la Figura 3.10, en la cual se consideran tres MSA: S1, S2 y S3. S1 no se puede utilizar para remover la carga del contaminante debido a que su rango de operación se encuentra fuera de la línea de corriente rica a pesar de que es el MSA con menor costo de remoción. S2 puede eliminar toda la carga rica a la derecha. Sin embargo, debe emplearse también S3 para llevar la corriente rica a su composición objetivo debido a que S2 no puede integrar la carga de contaminantes a su derecha [15].

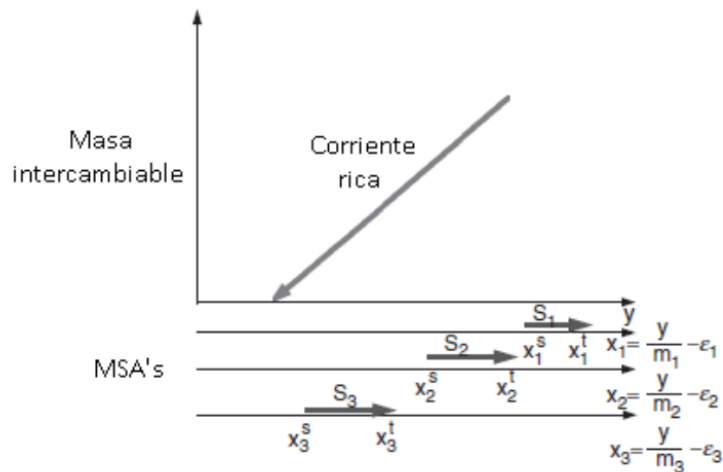


Figura 3.10. Diagrama de intercambio de masa [15].

3.8 Modelo matemático

Este modelo matemático fue propuesto por Chen et al. [24] y reformulado posteriormente por De Lara-Ramos y col., [28], en el que se consideran intercambiadores de masa de tipo multietapa, en donde para encontrar la relación de composición entre la corriente rica y pobre se establece una relación de equilibrio entre el componente transferible de la i -ésima corriente rica y la j -ésima corriente de MSA, que a menudo se considera lineal, de esta manera, la diferencia de composición mínima se expresa como:

$$y_i = m_j(x_j + \varepsilon_j) \quad \text{Ec. 3.26}$$

La carga de intercambio de masa en el intervalo k-ésimo para la corriente rica se calcula usando la siguiente expresión:

$$W_{i,k}^R = G_i(y_{i,k} - y_{i,k+1}) \quad \text{Ec. 3.27}$$

De manera similar, la carga de intercambio de masa en el intervalo k-ésimo para la corriente del MSA se calcula manera partir de:

$$W_{i,k}^S = L_j(x_{j,k+1} - x_{j,k}) \quad \text{Ec. 3.28}$$

En el k-ésimo intervalo, las restricciones de igualdad que representan el balance de materia sucesivo se obtienen mediante la Ecuación 3.29.

$$\delta_{i,k} - \delta_{i,k-1} + \Sigma_j W_{j,k}^S = \Sigma_i W_{i,k}^R \quad \text{Ec. 3.29}$$

donde $\delta_{i,k}$ denota la carga de intercambio de masa residual en el k-ésimo intervalo.

El costo de capital de las columnas de platos está relacionado con el número de platos y el tamaño de la columna. El número de platos se puede calcular mediante la Ecuación 3.31:

$$NTU_{i,j} = \frac{\ln \left(\frac{y_{i,j}^{in} - m_{i,j} x_{i,j}^{in}}{y_{i,j}^{out} - m_{i,j} x_{i,j}^{in}} \left(1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A} \right)}{\ln A} \quad \text{Ec. 3.30}$$

Donde $A = L_j/m_j G_i$

La altura total de la columna se obtiene de:

$$H_{i,j} = HTU_{i,j} NTU_{i,j} \quad \text{Ec. 3.31}$$

donde H_{ij} es la altura de las unidades de transferencia.

Las restricciones de composición de salida del componente en cada corriente rica y de MSA se determinan a partir de las Ecuaciones 3.32 y 3.33.

$$y_{i,n}^{out} \leq Y_i^{out} \quad \text{Ec. 3.32}$$

$$x_{j,n}^{out} \leq X_j^{out} \quad \text{Ec. 3.33}$$

Además, se establece que el flujo de la corriente de los MSA's debe ser menor o igual al flujo disponible:

$$L_j \leq L_j^{max} \quad \text{Ec. 3.34}$$

El Costo Total Anualizado (TAC, por sus siglas en inglés) de una red consiste principalmente de los costos de operación y de capital. El costo de la corriente de MSA, c_j , es conocido, y se considera que el costo de operación de la MEN depende principalmente del costo de los MSA's utilizados. Por otro lado, para el costo de capital se requiere el número de unidades de transferencia y su altura. En este sentido, el TAC se formula de la siguiente manera:

$$[costo]_{operacion} + [costo]_{capital} = \sum_j c_j L_j + \sum_i \sum_j c'_{i,j} N_{i,j} + \sum_i \sum_j c''_{i,j} H_{i,j} \quad \text{Ec. 3.35}$$

donde c'_j es el costo de los platos de la columna y c''_j es el costo de la altura de las unidades de transferencia.

El modelo matemático tiene como objetivo minimizar el TAC de la red de intercambio de masa y el cual se expresa a continuación:

$$[costo]_{operacion} + [costo]_{capital} = \sum_j c_j L_j + \sum_i \sum_j c'_{i,j} N_{i,j} + \sum_i \sum_j c''_{i,j} H_{i,j} \quad \text{Ec. 3.35}$$

Sujeto a:

$$y_i = m_j(x_j + \varepsilon_j) \quad \text{Ec. 3.26}$$

$$W_{i,k}^R = G_i(y_{i,k} - y_{i,k+1}) \quad \text{Ec. 3.27}$$

$$W_{i,k}^S = L_j(x_{j,k+1} - x_{j,k}) \quad \text{Ec. 3.28}$$

$$\delta_{i,k} - \delta_{i,k-1} + \sum_j W_{j,k}^S = \sum_i W_{i,k}^R \quad \text{Ec. 3.29}$$

$$NTU_{i,j} = \frac{\ln \left(\frac{y_{i,j}^{in} - m_{i,j} x_{i,j}^{in}}{y_{i,j}^{out} - m_{i,j} x_{i,j}^{in}} \left(1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A} \right)}{\ln A} \quad \text{Ec. 3.30}$$

$$H_{i,j} = HTU_{i,j} NTU_{i,j} \quad \text{Ec. 3.31}$$

$$y_{i,n}^{out} \leq Y_i^{out} \quad \text{Ec. 3.32}$$

$$x_{j,n}^{out} \leq X_i^{out} \quad \text{Ec. 3.33}$$

$$L_j \leq L_j^{max} \quad \text{Ec. 3.34}$$

El modelo de las Ecuaciones 3.26 – 3.35 es un problema de tipo NLP y su solución proporciona información de intervalos de composición, de la cantidad de masa a intercambiar, del TAC mínimo de la MEN y la aproximación mínima de concentración, ε .

CAPÍTULO 4:

METODOLOGÍA

4.1 Determinación de Agentes másicos de separación

Para la determinación de los Agentes Másicos de Separación (MSA's) se realizó una revisión bibliográfica exhaustiva de artículos científicos en los que se reporta la remoción de metales pesados (Cd^{2+} , Cu^{2+} y Zn^{2+}) presentes en soluciones acuosas mediante procesos de adsorción. La búsqueda se llevó a cabo en bases de datos especializadas como *ScienceDirect*, *ACS Publications* y *SpringerLink*, seleccionando materiales con información experimental disponible sobre isotermas de adsorción.

De manera particular, se consideraron materiales adsorbentes sintetizados mediante Tecnología de Microondas (TM), cuyos datos de equilibrio obtenidos experimentalmente fueron reportados por Durán-Jiménez et al. [4], así como adsorbentes convencionales y de bajo costo utilizados como referencia comparativa. Esta selección permitió evaluar el desempeño de los MSA's tanto desde el punto de vista técnico como económico dentro del marco de la metodología de Integración de Masa (IM).

4.2 Determinación de las funciones de equilibrio

Los datos de equilibrio de adsorción de los MSA's seleccionados se obtuvieron de la literatura especializada y se presentan en forma de isotermas de adsorción, donde se relaciona la concentración del metal pesado en solución (mg/L) con la capacidad de adsorción del material (mg/g) bajo condiciones de equilibrio.

De acuerdo con la metodología de Integración de Masa propuesta por El-Halwagi [15], es necesario expresar los datos de equilibrio en términos de una función que relacione la

composición del contaminante en la corriente rica (solución acuosa) con la composición del contaminante en la corriente pobre (MSA). Para ello, se realizó una regresión lineal de las isothermas experimentales, obteniendo funciones de equilibrio de la forma:

$$y = mx + b \quad \text{Ec 4.1}$$

donde y representa la concentración del metal pesado en la corriente rica (mg/L), x la concentración del metal adsorbido en el MSA (mg/g), m la pendiente y b la ordenada al origen.

4.3 Estimación del costo de los materiales adsorbentes

El costo de los MSA's comerciales se obtuvo directamente de proveedores especializados. En el caso de los materiales sintetizados de forma convencional, el costo se estimó considerando los precios de los precursores, reactivos químicos, condiciones de preparación y gastos generales asociados al proceso [25][26].

Para los MSA's sintetizados mediante TM, además de los costos anteriores, se incluyó el consumo energético del proceso, el cual se estimó mediante la ecuación propuesta por Giambattista et al. [33]:

$$Ce = P * t * tarifa \quad \text{Ec. 4.2}$$

donde Ce representa el costo energético en unidades monetarias, P la potencia del equipo (kW), t el tiempo de operación (h) y $tarifa$ el costo unitario de la energía eléctrica.

La información de cantidades y concentraciones de los productos químicos necesarios para producir los materiales adsorbentes, así como también el procedimiento y los equipos empleados generalmente se describen en la metodología de los artículos de investigación.

4.4 Costo de remoción de la especie objetivo

El costo del MSA, expresado en \$/kg, se relacionó con la cantidad de metal pesado removido por unidad de masa de adsorbente. La masa de metal removida por unidad de masa de MSA se calculó a partir de un balance de materia, considerando que la concentración inicial del metal en el MSA es nula. Así, el costo de remoción del metal pesado queda expresado como:

$$M_e = x_j^t - x_j^s \quad \text{Ec. 4.3}$$

Por lo tanto

$$C_j^r = \frac{c_j (\$/Kg \text{ masa})}{x_j^{out} - x_j^{in} (Kg \text{ de especie} / Kg \text{ de MSA})} \quad \text{donde } j = 1, 2, 3, \dots, MSA's \quad \text{Ec. 4.4}$$

Donde C_j^r es el costo de eliminación de la masa unitaria de la especie objetivo utilizando el j-ésimo MSA. El término x_j^{out} representa la capacidad máxima de adsorción de los MSA's y el término x_j^{in} se establece en cero debido a que el contaminante no es parte de la composición elemental de los materiales adsorbentes reportado en kg de contaminante por kilogramo de material adsorbente y de esta manera, se puede obtener el costo de eliminación de metales pesados para los MSA's seleccionados [15].

4.5 Construcción del diagrama de intercambio de masa

Con base en las funciones de equilibrio y los costos de remoción calculados, se construyó el diagrama de intercambio de masa para cada metal pesado objeto de estudio (Cd^{2+} , Cu^{2+} y Zn^{2+}). Para ello, se consideró inicialmente una diferencia de composición mínima permisible de 0.1 mg/L y que posteriormente será optimizada durante el proceso de diseño del equipo de intercambio de masa.

4.6 Optimización del equipo de intercambio de masa

Cada MSA del diagrama de intercambio de masa requiere de un equipo de intercambio. Para el diseño y optimización de la red de se tomó como base el modelo matemático propuesto por Chen et al. [24]. Sin embargo, como se puede observar, este modelo matemático está diseñado para la optimización de intercambiadores multietapa; por lo que en este trabajo se ha reformulado para que se tomen en cuenta intercambiadores diferenciales (o continuos). En este sentido, se considera la Ecuación 3.24 para obtener las relaciones de composición entre las corrientes rica y pobre:

$$y^{in} = (x^{out} + \varepsilon) * m \quad Ec. 4.4$$

Como se diseñará cada intercambiador por separado, se incorpora la Ecuación 3.18 la cual representa un balance de materia en el soluto transferible.

$$L * (x^{out} - x^{in}) = G * (y^{in} - y^{out}) \quad Ec. 4.5$$

También se incorporará la Ecuación 3.10 que determina el número de unidades imaginarias con base en la fase rica para intercambiadores en modo continuo.

$$NTU_y = \frac{y_i^{in} - y_i^{out}}{\frac{(y_i^{in} - m_j x_j^{out}) - (y_i^{out} - m_j x_j^{in})}{\ln \left(\frac{y_i^{in} - m_j x_j^{out}}{y_i^{out} - m_j x_j^{in}} \right)}} \quad Ec. 4.6$$

Además, en este modelo la Ecuación 3.13 calcula el diámetro de la columna.

$$D = \sqrt{\frac{4G}{\pi v}} \quad Ec. 4.7$$

Para calcular el coeficiente global de transferencia de masa (Kc), se incorporaron en el modelo las Ecuaciones 3.5, 3.6 y 3.9, donde Dp es el diámetro medio de la partícula, v es la velocidad superficial de una fase y μ es la viscosidad.

$$Re = \frac{D_p * v * \rho}{\mu} \quad Ec. 4.8$$

$$J_D = \frac{1.09}{\varepsilon} * Re^{-\frac{2}{3}} \quad Ec. 4.9$$

$$J_D = \frac{k_c}{v} S_c^{\frac{2}{3}} \quad Ec. 4.10$$

La altura de las unidades de transferencia (HTU) se determinará con base en la fase rica a partir de la Ecuación 3.3 y la altura total de la columna, H_c , con la Ecuación 3.1, donde NTU es el número total de unidades de transferencia.

$$HTU_y = \frac{v}{k_c a} \quad Ec. 4.11$$

$$H_c = HTU_y NTU_y \quad Ec. 4.12$$

Además, se considerarían algunas restricciones adicionales, como: la relación de aspecto (L/D) del lecho el cual debe ser de al menos 3 para garantizar que el adsorbente se use de manera eficiente (Ecuación 4.13) y 20 % del volumen del recipiente, debe ser rellenado con material inerte (bolas de cerámica, grava o antracita) para asegurar que se establezca un perfil de flujo uniforme a la entrada y salida del lecho (Ecuación 4.14) [27].

$$D = H/3 \quad Ec. 4.13$$

$$H_c = 1.25 * H \quad Ec. 4.14$$

Se considerará una restricción más, el hecho de que el volumen del material adsorbente debe de ser igual al volumen de la columna que se ha destinado para el material adsorbente.

$$L * hr / \rho_{MSA} = (\pi/4) * D^2 * H \quad Ec. 4.15$$

Finalmente, en la Ecuación 3.33 se establece la concentración de salida del contaminante en el material adsorbente que debe ser menor o igual a la capacidad máxima de adsorción, quedando de esta manera:

$$x^{out} \leq x^{out,max} \quad Ec. 4.16$$

En la función objetivo del modelo no solo se consideraron los costos de operación y de capital, sino que también los costos de regeneración del material adsorbente. Por tal motivo, los costos de operación se obtuvieron a partir de la Ecuación 4.17.

$$[costo]_{operación} = fL * L * hr * ciMSAn/ciMSA * cMSA + fL * L * hr * ciMSAr / ciMSA * ciY/DMSA * DNaOH * pNaOH * cNaOH \quad Ec. 4.17$$

Para los costos de capital se obtuvieron como en El-Halwagi [15]:

$$[costo]_{capital} = 46000/n * H^{0.85} * D^{0.95} \quad Ec. 4.18$$

Finalmente, el modelo matemático que se ha reformulado para diseñar intercambiadores de masa de tipo diferencial o en continuo, la función objetivo consiste en minimizar el Costo Total Anualizado, es descrito por las Ecuaciones de la 4.4 – 4.16 y la 4.19.

$$\min costo = fL * L * hr * ciMSAn/ciMSA * cMSA + fL * L * hr * ciMSAr/ciMSA * ciY/DMSA * DNaOH * pNaOH * cNaOH + 46000/n * H^{0.85} * D^{0.95} \quad Ec. 4.19$$

Sujeto a:

$$y^{in} = (x^{out} + \varepsilon) * m \quad Ec. 4.4$$

$$L * (x^{out} - x^{in}) = G * (y^{in} - y^{out}) \quad Ec. 4.5$$

$$NTU_y = \frac{y_i^{in} - y_i^{out}}{\frac{(y_i^{in} - m_j x_j^{out}) - (y_i^{out} - m_j x_j^{in})}{\ln \left(\frac{y_i^{in} - m_j x_j^{out}}{y_i^{out} - m_j x_j^{in}} \right)}} \quad Ec. 4.6$$

$$fG * G = v * (\pi/4) * D^2 \quad Ec. 4.7$$

$$NRe = (DpMSA * v * DB)/VB \quad Ec. 4.8$$

$$J_D = (1.09/pMSA) * NRe^{-\frac{2}{3}} \quad Ec. 4.9$$

$$k_c = (J_D * v)/NS_c^{2/3} \quad Ec. 4.10$$

$$HTU_y = v/(k_c * a) \quad Ec. 4.11$$

$$H = HTU_y * NTU_y \quad Ec. 4.12$$

$$D = H/3 \quad Ec. 4.13$$

$$H_c = 1.25 * H \quad Ec. 4.14$$

$$fL * L * hr/DMSA = (\pi/4) * D^2 * H \quad Ec. 4.15$$

$$x^{out} \leq x^{out,max} \quad Ec. 4.16$$

CAPÍTULO 5:

RESULTADOS

5.1 Caso de estudio

Se consideraron corrientes de agua con caudales de 10, 20 y 20 kg/s y concentraciones iniciales de metales pesados de 10, 50 y 100 mg/L, respectivamente. Se desea llevar la concentración de los metales pesados hasta los límites máximos permisibles establecidos por la NOM-001-SEMARNAT-2021; es decir, 0.2 mg/L para Cd^{2+} y 2 mg/L para Cu^{2+} y Zn^{2+} .

El problema consiste en seleccionar los MSA's adecuados y diseñar una red de intercambio de masa (Figura 5.1) que minimice el Costo Total Anualizado (TAC) del proceso.

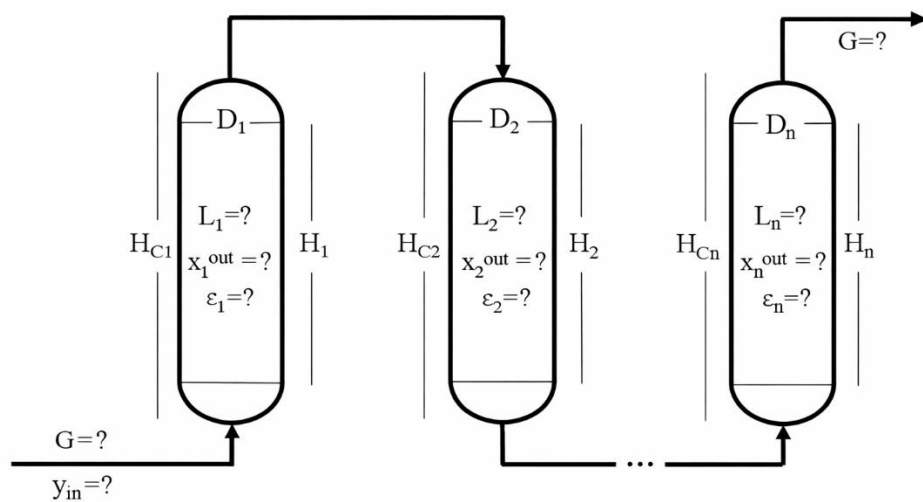


Figura 5.1 Red de intercambio de masa

5.2 Selección de los MSA's

En la Tabla 5.1 se presentan una lista de materiales adsorbentes que se identificaron para este trabajo, y que por cuestiones prácticas se han renombrado, además se reportan los coeficientes de regresión que fueron obtenidos en el ajuste lineal.

Tabla 5.1. Materiales adsorbentes identificados y modelación matemática.

<i>MSA</i>	<i>Propiedad, origen o naturaleza del adsorbente</i>	<i>Capacidad máxima de adsorción (mg/g)</i>	<i>m</i>	<i>R²</i>
<i>O-Cd</i>	TM [4]	26	0.0146	0.7349
<i>AC-T</i>	Carbón activado modificado con oxígeno	19.52	0.0047	0.7021
<i>UCG</i>	Granos de café sin tratar	13	0.0036	0.7431
<i>O-Cu</i>	TM [4]	67	0.0052	0.9836
<i>ZnO</i>	Nano varillas de ZnO	81.81	0.0002	0.9635
<i>NA</i>	Nanoarcilla	6.88	0.0003	0.8806
<i>O-Zn</i>	TM [4]	24	0.0405	0.9195
<i>MACANB</i>	Corteza de Acacia Nilótica	28.57	0.0003	0.8421
<i>MA</i>	Macro Alga Caulerpa	71.42	0.0002	0.7307

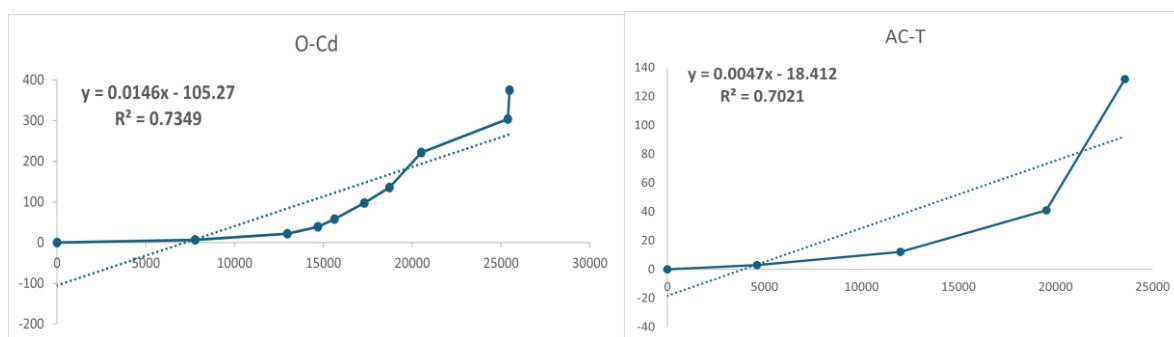
5.3 Determinación de la función de equilibrio de los MSA's

En la Tabla 5.2 se presentan los parámetros que se han obtenido de aplicar la regresión lineal a los datos de equilibrio, acorde con la metodología de intercambio de masa. En esta tabla se muestran la pendiente, el intercepto y el coeficiente de correlación de cada regresión.

Tabla 5.2. Pendiente, intercepto y coeficiente de correlación de los materiales adsorbentes

CONTAMINANTE	MSA	<i>m</i>	<i>b</i>	<i>R</i> ²
Cd ²⁺	O-Cd	0.0146	-105.27	0.7349
	AC-T	0.0047	-18.412	0.7021
	UCG	0.0036	-7.7164	0.7431
Cu ²⁺	O-Cu	0.0052	-9.1636	0.9836
	ZnO	0.0002	-1.0264	0.9635
	NA	0.0003	-0.3025	0.8806
Zn ²⁺	O-Zn	0.0405	-227.13	0.9195
	MACANB	0.0003	-0.2632	0.8421
	MA	0.0002	-2.2608	0.7307

En la Figuras 5.1 se muestran los datos de equilibrio reportados junto con su respectiva regresión lineal aplicada.



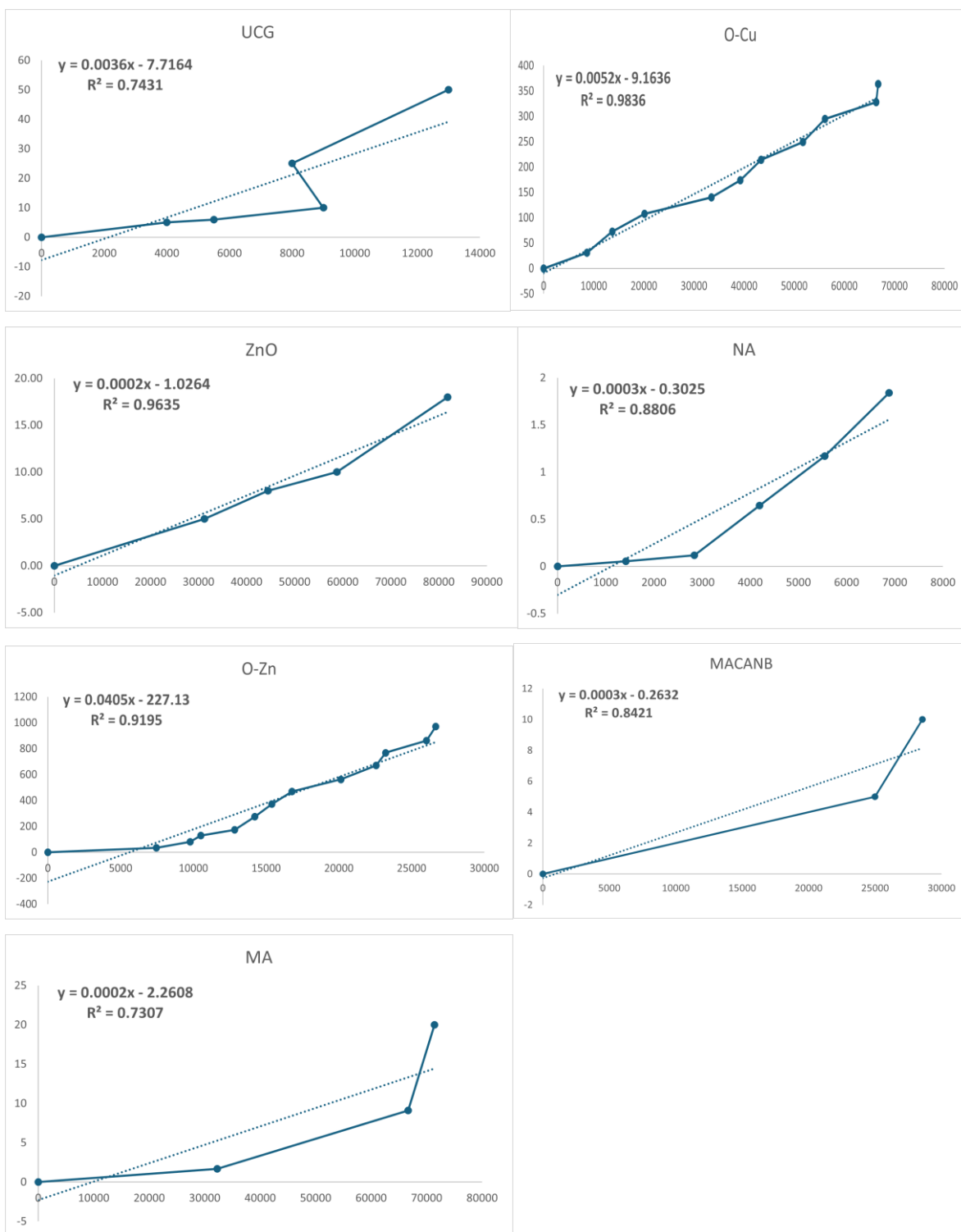


Figura5.1. Datos de equilibrio con su respectiva regresión lineal.

5.4 Determinación del costo de los MSA's

En la Tabla 5.3 se presentan los costos estimados para producir 1 kilogramo de material adsorbente. Los costos fueron estimados considerando costos de materias primas y costo de energía de los equipos involucrados en el proceso.

Tabla 5.3. Costos por Kg de MSA

MSA	COSTO ESTIMADO
O-CD*	MXN 190.00 /KG
AC-T	MXN 150.00 / KG
UCG	MXN 210.00 / KG
O-CU*	MXN 190.00 /KG
ZNO*	MXN 1021.00 / KG
NA*	MXN 61.04 / KG
O-ZN*	MXN 190.00 /KG
MACANB*	MXN \$545.53 / KG
MA	MXN 8000.00 / KG

5.5 Construcción del diagrama de intercambio de masa

En las Figuras 5.2-5,4 se presentan los diagramas de intercambio de masa contruidos para cada uno de los contaminantes. La flecha en color verde representa la corriente rica, indicando de arriba hacia abajo la concentración de entrada del contaminante y hasta donde se desea llevar acorde con la NOM. En la parte inferior de la gráfica se encuentran ordenados los MSA's con respecto al menor costo de remoción de contaminante.

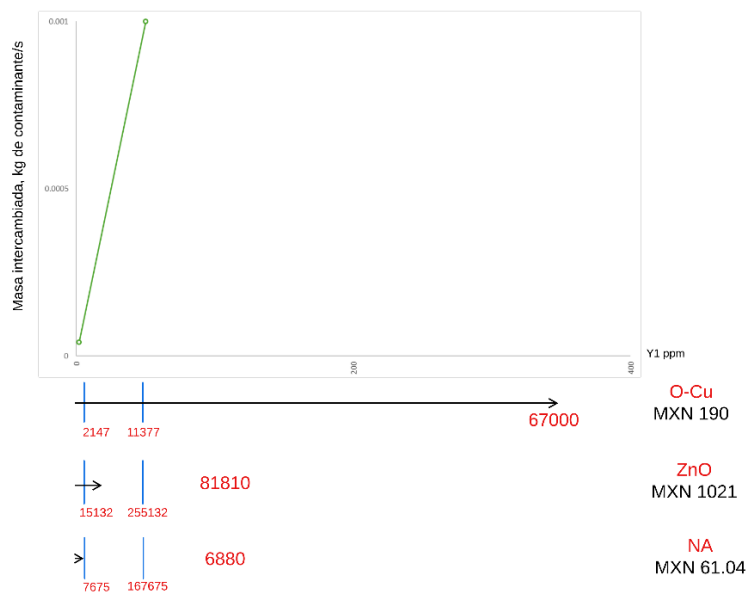


Figura 5.2. Diagrama de intercambio de masa para Cu.

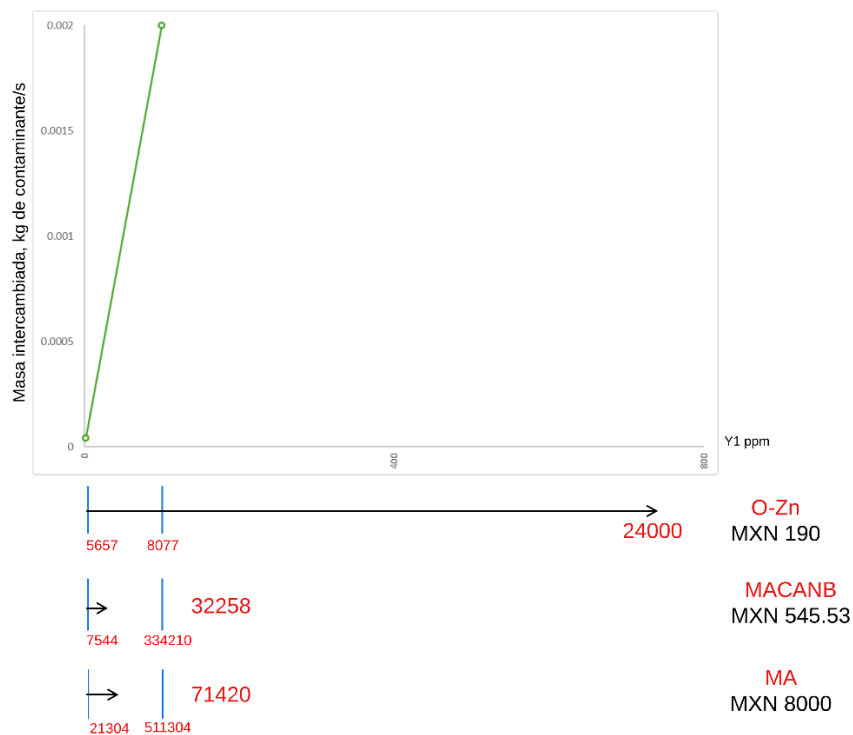


Figura 5.3. Diagrama de intercambio de masa para Zn.

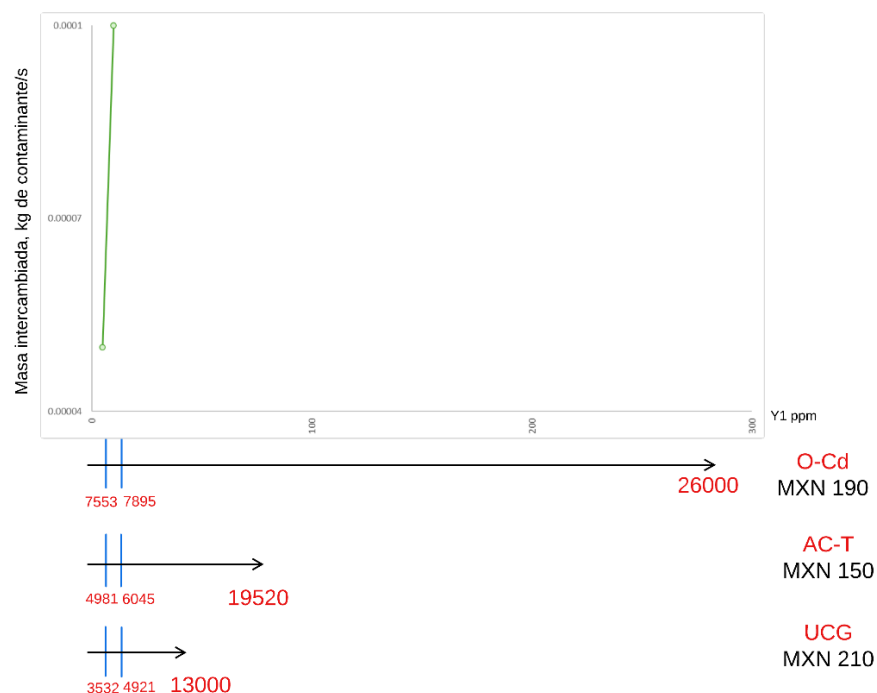


Figura 5.4. Diagrama de intercambio de masa para Cd.

Las flechas horizontales (ver Figuras 5.2-5.4) representan el rango de operación de los MSA's. En la Tabla 5.4 se muestran los valores de los rangos de operación y su correspondencia entre las escalas de cada uno de los MSA's. El rango de operación va desde la concentración de contaminante antes de la adsorción (x_{in}) hasta la composición máxima de contaminantes (x_{out}), en mg/g. Las composiciones correspondientes de x_{in} en la corriente rica (y_{out}) y de x_{out} en la corriente rica (y_{in}) se obtuvieron utilizando la Ecuación 4.4, considerando una diferencia de composición mínima de 0.1 mg/L.

Tabla 5.4. Rangos de operación y correspondencia entre escalas de los MSA's

MSA	RANGO DE OPERACIÓN		COMPOSICIONES DE LA CORRIENTE RICA	
	X _{in}	X _{out}	Y _{in}	Y _{out}
O-Cd	0	26000	0	274.33
AC-T	0	19520	0	73.33
UCG	0	13000	0	39.08
O-Cu	0	67000	0	339.23
ZnO		81810	0	15.33
NA	0	6880	0	1.76
O-Zn	0	24000	0	744.87
MACANB	0	32258	0	9.41
MA	0	71420	0	12.02

En las Figuras 5.2-5.4 se puede observar que los MSA's sintetizados por TM propuestos por Durán Jimenez [4] son los más adecuados para remover los metales pesados de la corriente rica; ya que la x_{in} está dentro del rango de operación de dicha corriente. Sin embargo, los MSA's como el ZnO, NA, MACANB y MA no podrían llevar la corriente rica en contaminante a la concentración deseada de 50 y 100 mg/L respectivamente; por lo que se requeriría de un MSA adicional. Los otros MSA's también podrían llevar a la concentración

deseada, pero los sintetizados con TM [4] son los más económicos por disponer de un gran rango de operación.

5.6 Optimización del equipo de intercambio de masa

Como ya se ha determinado se requiere de solo un equipo de intercambio de masa para llevar a cabo la remoción de metales pesados de la corriente rica, utilizando para ello O-Cd, O-Cu y O-Zn como material adsorbente. El diseño del equipo de intercambio de masa se obtiene resolviendo el modelo matemático que se ha presentado en la Sección 4.5 y en la Tabla 5.5 se presentan los parámetros que se utilizaron para su resolución. Dicho modelo fue codificado en el lenguaje de programación GAMS y resuelto utilizando el solucionador CONOPT. Este código se presenta en el ANEXO I.

Los resultados de los diseños óptimos de las columnas se presentan en las Figuras 5.5-5.7, en donde se puede observar que, para llevar a cabo las remociones de contaminantes de 10, 50 y 100 a 0.2, 2 y 2 mg/L se requieren columnas de 0.225, 0.26 y 0.337 m de diámetro y 0.845, 0.973 y 1.265 m de altura respectivamente y las cuales deben ser empacadas con 17.23, 26.39 y 57.88 kg de O-Cd, O-Cu y O-Zn respectivamente. A su vez, las concentraciones de contaminante en el MSA a la salida son de 245.36, 339.23 y 744.87 mg/g.

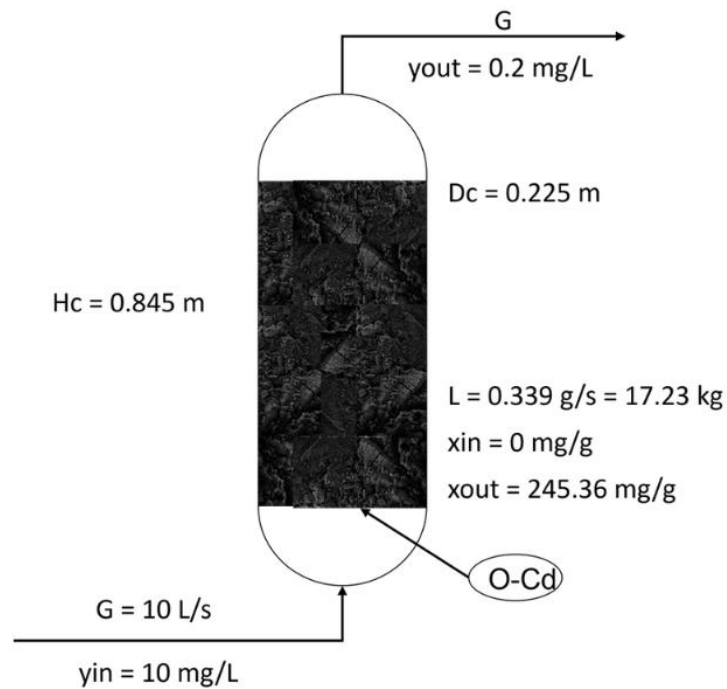


Figura 5.5. Dimensiones de la columna de adsorción para Cd.

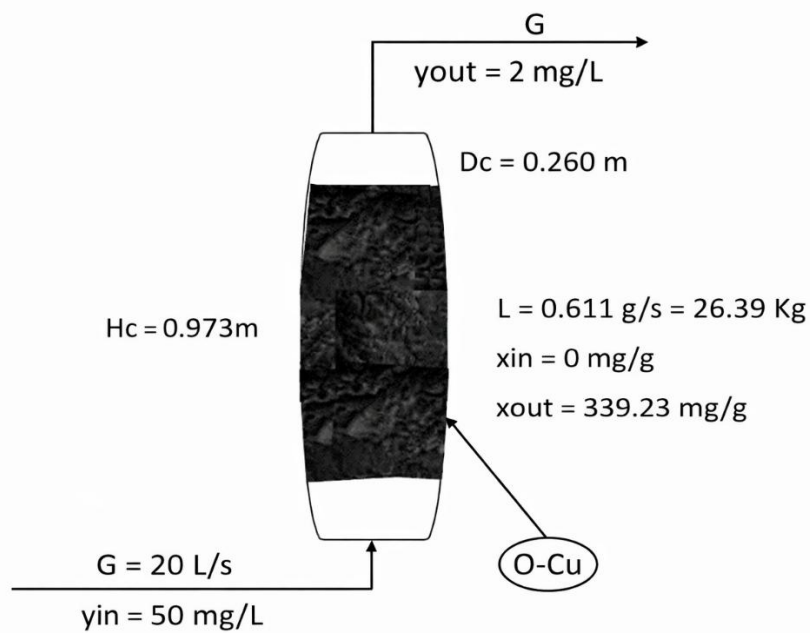


Figura 5.6. Dimensiones de la columna de adsorción para Cu.

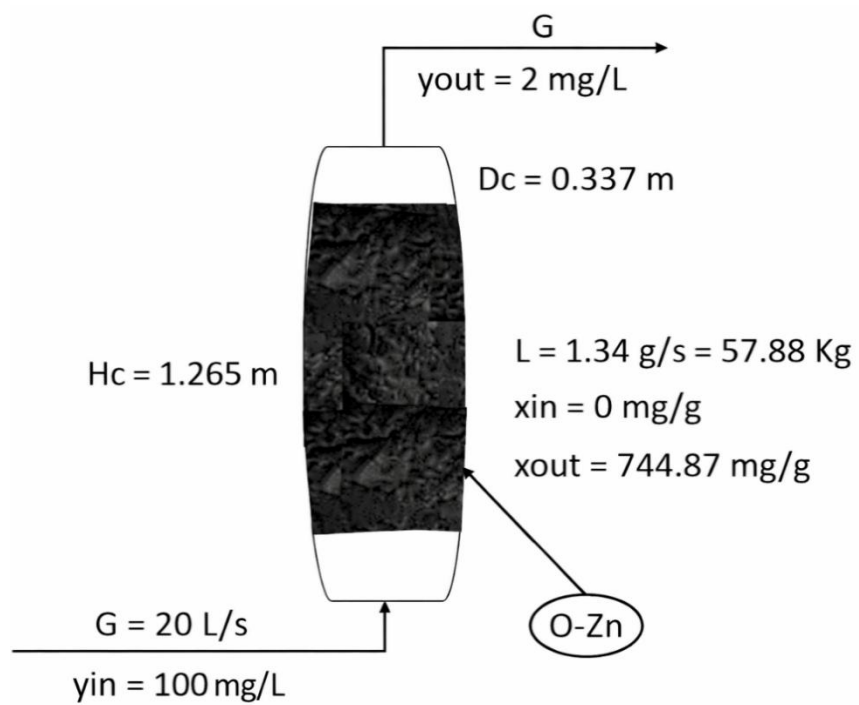


Figura 5.7. Dimensiones de la columna de adsorción para Zn.

CAPÍTULO 6:

CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

6.1 Conclusiones

1. La metodología de Integración de Masa (IM) demostró ser una herramienta robusta y sistemática para el diseño conceptual de redes de intercambio de masa orientadas a la remoción de metales pesados en soluciones acuosas. Su aplicación permitió evaluar simultáneamente criterios técnicos, operativos y económicos, facilitando la selección óptima de Agentes Másicos de Separación (MSA's) para los contaminantes Cd^{2+} , Cu^{2+} y Zn^{2+} .
2. Los MSA's sintetizados mediante tecnología de microondas (TM) mostraron un desempeño superior frente a materiales adsorbentes convencionales, al presentar mayores capacidades de adsorción, rangos de operación más amplios y una mejor adecuación a las concentraciones objetivo que han sido establecidas en la NOM-001-SEMARNAT-2021. En particular, los materiales O-Cd, O-Cu y O-Zn resultaron ser los más eficientes para la remoción selectiva de cada metal evaluado.
3. La construcción de los diagramas de intercambio de masa permitió visualizar claramente el rango operativo de cada MSA, así como su compatibilidad con las corrientes ricas a tratar. Este enfoque gráfico facilitó la identificación de configuraciones en las que es posible emplear un solo MSA y, por ende, un solo equipo de intercambio de masa, lo que representa una ventaja significativa en términos de simplificación del proceso, de reducción de infraestructura y de menor costo.

4. El análisis económico refleja que, aunque la síntesis de MSA's por microondas implica una mayor inversión inicial, principalmente asociada al consumo energético y al equipo especializado, estos costos se ven compensados por una mayor eficiencia de adsorción, una reducción en la cantidad de material requerido y un menor número de equipos en la red de intercambio de masa. Esto posiciona a la TM como una alternativa competitiva desde una perspectiva de costos globales del proceso.
5. La integración de la IM con técnicas de optimización matemática permitió avanzar hacia el diseño óptimo del intercambiador de masa, incorporando variables geométricas, hidrodinámicas y de transferencia de masa. El uso de herramientas computacionales para minimizar el costo total anualizado constituye un paso clave hacia la implementación industrial del sistema propuesto.

6.2 Trabajo futuro

El presente trabajo se desarrolló a nivel conceptual y de modelación, por lo que existen diversas líneas de investigación que pueden abordarse para fortalecer y ampliar los alcances del proyecto. En primer lugar, se propone la validación experimental del sistema de intercambio de masa diseñado, mediante la construcción y operación de una columna de adsorción a escala piloto que permita corroborar los resultados obtenidos por la metodología de Integración de Masa (IM) y los modelos de optimización empleados. Esta etapa permitiría evaluar el desempeño real de los Agentes Másicos de Separación (MSA's) sintetizados mediante tecnología de microondas bajo condiciones de operación controladas. Adicionalmente, se propone ampliar el análisis económico incorporando un estudio de costos más detallado, que incluya gastos de capital, operación, mantenimiento y regeneración del material adsorbente, así como un análisis de sensibilidad ante variaciones en el costo energético y en las concentraciones de contaminante. De esta manera, se podría realizar una comparación más exhaustiva entre los MSA's convencionales y los sintetizados mediante tecnología de microondas.

Asimismo, se propone evaluar experimentalmente el desempeño de los agentes másicos de separación sintetizados mediante tecnología de microondas en sistemas dinámicos de

adsorción, tales como columnas de lecho fijo, con el objetivo de validar los resultados obtenidos bajo condiciones de operación continua. Este tipo de estudios permitiría analizar fenómenos cinéticos y de transferencia de masa que no pueden ser completamente descritos a partir de sistemas por lotes o modelos de equilibrio.

Otra línea relevante de trabajo futuro consiste en el estudio de la regeneración y reutilización de los MSA's, particularmente de aquellos sintetizados por microondas, evaluando su estabilidad estructural y su capacidad de adsorción a lo largo de múltiples ciclos de adsorción–desorción. Este análisis es fundamental para determinar la viabilidad técnica y económica del proceso a largo plazo, así como su impacto ambiental global.

Finalmente, se plantea como línea de investigación futura la exploración de configuraciones híbridas en las que la tecnología de microondas sea empleada exclusivamente en etapas auxiliares del proceso, tales como la síntesis o regeneración del adsorbente, manteniendo la etapa de adsorción como un proceso continuo convencional. Asimismo, se sugiere ampliar el alcance del estudio a sistemas multicomponente más complejos y evaluar el efecto de la presencia simultánea de distintos contaminantes sobre el desempeño del proceso de adsorción.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Yuen, F. K., & Hameed, B. H. (2009). Recent developments in the preparation and regeneration of activated carbons by microwaves. *Advances in Colloid and Interface Science*, 149(1), 19–27. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cis.2008.12.005>
- [2] Ewis, D., & Hameed, B. H. (2021). A review on microwave-assisted synthesis of adsorbents and its application in the removal of water pollutants. *Journal of Water Process Engineering*, 41, 102006. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102006>
- [3] Agua para consumo humano. (2023, 13 de septiembre). *World Health Organization (WHO)*. <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/drinking-water#:~:text=El%20agua%20contaminada%20y%20el,fiebre%20tifoidea%20y%20la%20poliomielitis.>
- [4] Durán-Jiménez, G., Hernández-Montoya, V., Montes-Morán, M. A., Rangel-Méndez, J. R., & Tovar-Gómez, R. (2016). *Study of the adsorption-desorption of Cu²⁺, Cd²⁺ and Zn²⁺ in single and binary aqueous solutions using oxygenated carbons prepared by Microwave Technology*. *Journal of Molecular Liquids*, 220, 855–864. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.05.027>
- [5] NOM-127-SSA1-1994. (2000, 22 de noviembre). *Secretaría de Salud*. <http://www.salud.gob.mx/unidades/cdi/nom/127ssa14.html>
- [6] Pabón, S. E., Benítez, R., Sarria, R. A., & Gallo, J. A. (2020). *Contaminación del agua por metales pesados, métodos de análisis y tecnologías de remoción*. Una revisión. *Entre Ciencia e Ingeniería*, 14(27), 9-18. Epub March 20, 2021. <https://doi.org/10.31908/19098367.0001>
- [7] Valladares-Cisneros, M. G., Valerio Cárdenas, C., de la Cruz Burelo, P., & Melgoza Alemán, R. M. (2017). Adsorbentes no-convencionales, alternativas sustentables para el tratamiento de aguas residuales. *Revista Ingenierías Universidad de Medellín*, 16(31), 55–73. <https://doi.org/10.22395/rium.v16n31a3>

- [8] McGraw Hill, Ed., *Transferencia de calor y masa: Un enfoque práctico*, 3.^a ed., vol. 1. Yunus A. Çengel. [En línea]. Disponible en: <https://pavisva.wordpress.com/wp-content/uploads/2016/01/transferencia-de-calor-y-masa-yunus-cengel.pdf>
- [9] El-Halwagi, M. M. (1997). *Modeling of Mass-Exchange Units for Environmental Applications*. En *Pollution Prevention through Process Integration* (pp. 16–43). Academic Press. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-012236845-5/50002-2>
- [10] El-Halwagi, M. M. (2012). *Sustainable Design Trough Process Integration*. ELSEVIER.
- [11] Paiz, F., & Meléndez, M. (n.d.). *Sistema de columnas de adsorción con carbón activado para el tratamiento de aguas naturales contaminadas con arsénico*. Retrieved May 5, 2024, from <http://repositorio.unan.edu.ni/id/eprint/17165>
- [12] Bernal-Morales, D., & Aguirre-Domelin, N. (2022). *Escalamiento columna de adsorción para la remoción de cromo en las aguas residuales de la industria de curtiembre por medio de la cáscara de banano*. Retrieved May 9, 2024, from <https://repository.uamerica.edu.co/bitstream/20.500.11839/8848/4/6162002-2022-1-IQ.pdf>
- [13] Frias-Peña, J. (n.d.). *La administración del diseño y la mercadotecnia, ¿un mismo objetivo?* Retrieved May 9, 2024, from <https://mxdesign.diseno.iberomex.mx/conference/2005/HTMs-PDFs/AdmonDelDisenoYMerca.pdf>
- [14] Max. S., P., & Klaus D., T. (1991). *Plant design and economics for chemical engineers* (Fourth Ed.). Mc Graw Hill.
- [15] El-Halwagi, M. M. (2006). *Synthesis of mass exchange networks: A graphical approach*. En *Process Integration* (7a ed., pp. 87–136). Elsevier B.V.
- [17] Espinosa, G. A., José, R., Rangel, M., San, L., & Potosí, S. L. P. (2007). *ACTIVACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES NANOESTRUCTURADOS (CN x y CST): REMOCIÓN DE CADMIO*. <https://ipicyt.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1010/610/3/TMIPICYTA5A32007.pdf>

- [18] Correa Cuevas, Laura Paloma, & Hernández Baltazar, Efrén. (2011). El uso de las microondas en la industria farmacéutica. *Revista mexicana de ciencias farmacéuticas*, 42(4),6-25.
http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1870-01952011000400002&lng=es&tlng=es.
- [19] Prado-Gonjal, J., Morán, E., & Morán Prado-Gonjal, E. J. (2011). *Síntesis asistida por microondas de sólidos inorgánicos* (Vol. 107, Issue 2). www.rseq.org
- [20] El-Halwagi, M. M., & Manousiouthakis, V. (1990). Automatic synthesis of mass-exchange networks with single-component targets. *Chemical Engineering Science*, 45(9), 2813–2831. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(90\)80175-E](https://doi.org/10.1016/0009-2509(90)80175-E)
- [21] Burciaga-Montemayor, N. G., Claudio-Rizo, J. A., Cano-Salazar, L. F., Martínez-Luévanos, A., & Vega-Sánchez, P. (2020). Compositos en estado hidrogel con aplicación en la adsorción de metales pesados presentes en aguas residuales. *TIP Revista Especializada En Ciencias Químico-Biológicas*, 23. <https://doi.org/10.22201/fesz.23958723e.2020.0.211>
- [22] Zarazua Aguilar, Yohuali, Velázquez-Herrera, Franchescoli Didier y Garzón Pérez, Amanda Stephanie (2023, septiembre-octubre). *Las microondas en la síntesis de nanomateriales*. Revista Digital Universitaria (rdu), 24(5). <http://doi.org/10.22201/cuaieed.16076079e.2023.24.5.2>
- [23] Geankoplis, Christie J. *Transport processes and unit operations*. Pearson Education India, 2013.
- [24] Chen, L., Gao, Z., Du, J., & Yao, P. (2007). A Simultaneous Optimization Method for the Structure and Composition Differences of a Mass Exchange Network. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15(2), 254–261. [https://doi.org/10.1016/S1004-9541\(07\)60067-6](https://doi.org/10.1016/S1004-9541(07)60067-6)
- [25] Mohanta, D., & Ahmaruzzaman, M. (2018). Bio-inspired adsorption of arsenite and fluoride from aqueous solutions using activated carbon@SnO₂ nanocomposites: Isotherms, kinetics, thermodynamics, cost estimation and regeneration studies. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 6(1), 356–366. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2017.11.076>
- [26] Kumar, P. S., Korving, L., van Loosdrecht, M. C. M., & Witkamp, G. J. (2019). Adsorption as a technology to achieve ultra-low concentrations of phosphate: Research gaps and economic analysis. *Water Research X*, 4, 100029. <https://doi.org/10.1016/j.wroa.2019.100029>
- [27] Delgadillo-Velasco, L., & Hernández-Montoya, V. (2021). *Design and construction of a water treatment system based on adsorption and chemical precipitation methods, for the*

removal of phosphate from the wastewater of an anodizing industry. Instituto Tecnológico de Aguascalientes.

[28] Y. DeLara-Ramos, *Determinación de Agentes másicos de Separación (MSAS) para la remoción de fosfatos de aguas residuales de la industria automotriz*, Tesis de maestría, Instituto Tecnológico de Aguascalientes, 2023.

[29] Crittenden, B., & Thomas, W. J. (1998). *Adsorption Technology and Design*. Butterworth-Heinemann.

[30] Ruthven, D. M. (1984). *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. John Wiley & Sons.

[31] Covarrubias, S. A., & Peña Cabriales, J. J. (2017). Contaminación ambiental por metales pesados en México: Problemática y estrategias de fitorremediación. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 33, 7–21. <https://doi.org/10.20937/RICA.2017.33.esp01.01>

[32] Reyes, Y. C., Vergara, I., Torres, O. E., Díaz, M., & González, E. E. (2016). *Heavy metals contamination: implications for health and food safety*. 16, 66–77.

[33] Giambattista, A., Richardson, B. M., & Richardson, R. C. (2013). *Physics: Principles with Applications* (7th ed.). Pearson Education.

[34] Wilke, C. R., & Chang, P. (1955). *Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions*. AIChE Journal, 264–270.

[35] Worch, E. (2012). *Adsorption Technology in Water Treatment*. En *Adsorption Technology in Water Treatment*. Hubert & Co. GmbH & Co. KG, Göttingen. <https://doi.org/10.1515/9783110240238>

[36] Bacelo, H., Pintor, A. M. A., Santos, S. C. R., Boaventura, R. A. R., & Botelho, C. M. S. (2020). *Performance and prospects of different adsorbents for phosphorus uptake and recovery from water*. Chemical Engineering Journal, 381(August 2019), 122566. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122566>

[37] Geankoplis, C. (1998). *Procesos de transporte y operaciones unitarias* (3ª ed.). México: Compañía Editorial Continental.

[38] 3.5.2 Mecanismo de calentamiento | Técnicas y operaciones avanzadas en el laboratorio químico (TALQ). (s. f.). <https://www.ub.edu/talq/es/node/247>

Anexo I

CÓDIGO EN GAMS DEL MODELO MATEMÁTICO

```
$Title Integración de Masa empleando O-Cd como material adsorbente
```

SCALAR

```
G      Flujo de la corriente rica /10/
yin    Concentración de fosfatos en la corriente rica /10/
yout   Concentración objetivo de fosfatos /0.2/
xin    Concentración de fosfatos en el MSA al inicio /0/
xoutmax composición máxima de fosfatos en el MSA /274.33/
m      Pendiente de la recta sin intercepto /0.0146/
b      Intercepto de la recta /-105.27/
DpMSA  Diámetro medio de partícula-Ferrolox /0.000675/
pMSA   Porosidad-Ferrolox /0.7/
DMSA   Densidad-Ferrolox /640/
T      Temperatura /303.15/
DB     Densidad-agua a 30°C /995.89/
VB     Viscosidad-agua a 30°C /0.0008007/
a      Área interfacial efectiva líquido-sólido /2666.7/
DAB    Difusividad fosfatos-agua /1.6432e-09/
NSc    Numero de Schmit /490.2376/
ciY    Ciclos de adsorción anual /50/
hr     Tiempo por ciclo de adsorción /12/
cMSA   Costo de Ferrolox por kg /190/
DNaOH  Densidad de NaOH al 50% /1520/
cNaOH  Costo de por kilogramo de NaOH para regeneración /64/
pNaOH  Fracción en peso de NaOH para regeneración /0.5/
ciMSAn Ciclos de adsorción con Ferrolox nuevo /1/
ciMSAr Ciclos de adsorción con Ferrolox regenerado /4/
ciMSA  Ciclos totales de adsorción con Ferrolox /5/
fL     Factor de conversión de g*s-1 a kg*h-1 /3.6/
fG     Factor de conversión de L*s-1 a m^3*s-1 /0.001/
n      años de vida útil del equipo /5/
```

g

```

POSITIVE VARIABLES xout, L, NTUy, v, NRe, JD, kc, HTUy, H, Hc, Dc, e, D;
VARIABLES Z;

xout.l = 100;    xout.lo = 1e-3;
L.l     = 50;    L.lo     = 1e-3;
H.l     = 1;     H.lo     = 1e-3;
Hc.l    = 1;     Hc.lo    = 1e-3;
Dc.l    = 1;     Dc.lo    = 1e-3;

v.l     = 0.0005;
JD.l    = 1;
kc.l    = 2e-5;
NRe.l   = 0.0016;

EQUATIONS EQ1, EQ2, EQ3, EQ4, EQ5, EQ6, EQ7, EQ8, EQ9, EQ10, EQ11, EQ12, EQ13,
          OBJETIVO;
EQ1.. yin =E= m*(xout+e)+b;
EQ2.. L*(xout-xin) =E= G*(yin-yout);

EQ3.. NTUy =E= (yin-yout)/
              ( ((yin-m*xout-b)-(yout-m*xin-b)) /
                ((yin-m*xout-b)/(yout-m*xin-b))/2)**0.333 );

EQ4.. fG*G =E= v*(pi/4)*Dc**2;
EQ5.. NRe*VB =E= (DpMSA*v*DB);
EQ6.. pMSA*JD*(NRe)**(0.6667) =E= 1.09;
EQ7.. kc*(NSc)**(0.6667) =E= (JD*v);
EQ8.. HTUy*(kc*a) =E= v;
EQ9.. H =E= NTUy*HTUy;
EQ10.. Dc =E= H/3;
EQ11.. Hc =E= 1.25*H;
EQ12.. fL*L*hr/DMSA =E= (pi/4)*Dc**2*H;
EQ13.. xout =L= xoutmax;

OBJETIVO.. Z =E= fL*L*hr*ciY*ciMSAn/ciMSA*cMSA
              + fL*L*hr*ciMSAr/ciMSA*ciY/DMSA*DNaOH*pNaOH*cNaOH
              + 46000/n*Hc**0.85*Dc**0.95;

MODEL PRODUCTS /ALL/;

display xout.l, L.l, H.l, Dc.l;

SOLVE PRODUCTS USING NLP MINIMIZING Z;

display xout.l, L.l, H.l, Dc.l;

```