



UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE INGENIERIA
ESCUELA DE INGENIERIA QUÍMICA

**ESTUDIO CINÉTICO Y COMPARACIÓN DEL DESEMPEÑO DE LOS
FILTROS UKF Y EKF EN LA DECOLORACIÓN DEL NARANJA DE
METILO MEDIANTE LA REACCIÓN DE FENTON**

Trabajo de Grado presentado ante la Escuela de Ingeniería Química como requisito
parcial para optar al Título de Ingeniero Químico.

Presentado por: Beatriz A. Zambrano G.

ASESORES: Prof. Moira Miranda, Ph.D.

Prof. Antonio Rodríguez-Malaver, Ph.D.

MÉRIDA-VENEZUELA
Mayo, 2009



UNIVERSIDAD DE LOS ANDES
FACULTAD DE INGENIERIA
ESCUELA DE INGENIERIA QUÍMICA

**ESTUDIO CINÉTICO Y COMPARACIÓN DEL DESEMPEÑO DE LOS
FILTROS UKF Y EKF EN LA DECOLORACIÓN DEL NARANJA DE
METILO MEDIANTE LA REACCIÓN DE FENTON**

Beatriz A. Zambrano G.

MÉRIDA, VENEZUELA
2009

AGRADECIMIENTO

La constancia, dedicación y esfuerzo para lograr un objetivo, sólo es posible con el apoyo y ayuda incondicional de personas que continuamente nos guían a una montaña de éxitos. Es propicio darle las gracias a:

Dios y al Santo Cristo de La Grita por iluminarme, darme fuerzas y voluntad en la culminación exitosa de este trabajo de investigación. Gracias por ser fuente espiritual y no dejarme desfallecer en los momentos difíciles.

Mis Padres (Andrés y Olga), mis hermanos y demás familiares que contribuyeron con su energía y entusiasmo, dándome ánimo en todo instante para seguir adelante, sin desmayar ante cualquier situación. Los quiero mucho.

Mis asesores Prof. Moira Miranda y Prof. Antonio Rodríguez-Malaver, maestros y expertos del saber. Más que tutores, ¡Amigos! y modelos a seguir. Gracias por la orientación y consejos que me llevaron al logro de esta investigación.

Universidad de Los Andes, especialmente al Departamento de Bioquímica y Laboratorio de Bioquímica Adaptativa, por todas las contribuciones y beneficios instrumentales facilitados, para llevar a cabo este proyecto

Geison Rodríguez, ejemplo de lucha, perseverancia y trabajo. Tu valiosa paciencia, comprensión, lealtad y consejos me hicieron superar muchos obstáculos. Desde mi corazón mi amor, respeto y admiración.

Daniela Sólorzano, con quien compartí tantos momentos que no se volverán a repetir. Gracias por tu amistad y apoyo, en la solución de diferentes situaciones que se presentaron.

INDICE DE CONTENIDO

Lista de tablas	i
Lista de figuras	ii
Resumen	iii
Introducción	1
Capítulo I. EL PROBLEMA	
I.1. Planteamiento del problema	3
I.2. Objetivos de la investigación	5
I.3. Justificación e importancia	6
I.4. Variables de la investigación	7
I.5. Hipótesis	8
Capítulo II. MARCO TEÓRICO	
II.1. Antecedentes de la investigación	9
II.1.1. Reacción de Fenton	9
II.1.2. Filtros en Ingeniería	11
II.2. Bases teóricas	12
II.2.1. Aguas Residuales y Reactivo de Fenton	12
II.2.2. Filtración de procesos en ingeniería	16
Capítulo III. MARCO METOLÓGICO	
III.1. Nivel y Diseño de la Investigación	22
III.2. Materiales y Métodos	22
II.2.1. Materiales	22
II.2.2. Métodos	24
Capítulo IV. MARCO METOLÓGICO	
IV.1. Construcción de una Curva de Calibración	28
IV.1.1. Procedimiento	29

IV.2. Comportamiento de la absorbancia, concentración y decoloración del naranja de metilo a condiciones óptimas.	30
IV.2.1. Estudio de la Absorbancia	30
IV.2.2. Estudio de la Concentración	32
IV.2.3. Estudio de la Decoloración	34
IV.3. Efecto de la Temperatura	36
IV.4. Efecto de la Concentración de Cloruro de Sodio (NaCl)	40
IV.5. Efecto del pH	44
IV.6. Orden de Reacción y Parámetros Cinéticos	46
IV.6.1. Orden de Reacción	46
IV.6.2. Parámetros Cinéticos	50
IV.7. Filtros EKF, UKF	52
IV.7.1. Modelo del Reactor de Fenton	52
IV.7.2. Comparación del modelo del reactor de Fenton con los datos experimentales	59
IV.7.3. Comparación de los filtros EKF y UKF utilizando el modelo del reactor de Fenton	61
IV.7.4. Comparación de los filtros EKF y UKF utilizando la data experimental	66
IV.8. Estimación de parámetros mediante los filtros EKF y UKF	71
IV.8.1. Estimación de los parámetros cinéticos utilizando el modelo del reactor de Fenton	73
IV.8.2. Estimación de los parámetros cinéticos utilizando los datos experimentales de laboratorio	76
CONCLUSIONES	80
RECOMENDACIONES	82
NOMENCLATURA	84
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	86
ANEXOS	92

LISTA DE TABLAS

Tabla 1.	Absorbancia de diferentes soluciones	28
Tabla 2.	Absorbancia medida a distintas concentraciones de naranja de metilo	29
Tabla 3.	Absorbancia del naranja de metilo medida a distintos tiempos de reacción	31
Tabla 4.	Concentración del naranja de metilo a través del tiempo de reacción	33
Tabla 5.	Porcentaje de decoloración del naranja de metilo en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton	35
Tabla 6.	Absorbancia promedio del naranja de metilo medida en el tiempo con el reactivo de Fenton a diferentes temperaturas	37
Tabla 7.	Concentración promedio del naranja de metilo calculada en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton a diferentes temperaturas	38
Tabla 8.	Porcentaje de decoloración del naranja de metilo en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton a diferentes temperaturas	39
Tabla 9.	Absorbancia promedio del naranja de metilo en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton a diferentes concentraciones de NaCl	41
Tabla 10.	Concentración promedio del naranja de metilo calculada en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton a diferentes concentraciones de NaCl	42

Tabla 11.	Porcentaje de decoloración del naranja de metilo en el tiempo al tratarlo con el reactivo de Fenton a diferentes concentraciones de NaCl	42
Tabla 12.	Cambio del pH en el tiempo de la solución de naranja de metilo tratada con el reactivo de Fenton	44
Tabla 13.	Estudio del orden de reacción de la solución de naranja de metilo al tratarla con el reactivo de Fenton	47
Tabla 14.	Constantes de velocidad de reacción a distintas temperaturas para determinar la Energía de Activación y Factor de Frecuencia	50
Tabla 15.	Calores de formación y calores específicos de las especies que intervienen en la reacción del naranja de metilo	55
Tabla 16.	Resumen de los resultados obtenidos por los filtros EKF y UKF para el modelo del reactor	65
Tabla 17.	Resumen de los resultados obtenidos por los filtros EKF y UKF para los datos de laboratorio	70
Tabla 18.	Energía de Activación obtenida del modelo en el tiempo, a través de los filtros EKF y UKF.	73
Tabla 19.	Factor de Frecuencia obtenido del modelo en el tiempo, a través de los filtros EKF y UKF.	75
Tabla 20.	Energía de Activación obtenida con datos de laboratorio en el tiempo, a través de los filtros EKF y UKF.	76
Tabla 21.	Factor de Frecuencia obtenido con datos de laboratorio en el tiempo, a través de los filtros EKF y UKF.	78

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.	Molécula del Naranja de Metilo.	13
Figura 2.	Molécula del Peróxido de Hidrógeno.	15
Figura 3.	Cristales de Sulfato de Hierro Heptahidratado.	16
Figura 4.	Algoritmo sencillo de cálculo del Filtro de Kalman.	17
Figura 5.	Curva de calibración absorbancia versus concentración para distintas concentraciones de naranja de metilo.	30
Figura 6.	Efecto del tiempo de reacción en la absorbancia del naranja de metilo a condiciones ambiente.	32
Figura 7.	Efecto del tiempo de reacción en la concentración del naranja de metilo a condiciones ambiente.	34
Figura 8.	Efecto del tiempo de reacción en el porcentaje de decoloración del naranja de metilo tratado con el reactivo de Fenton.	36
Figura 9.	Efecto del tiempo de reacción en el porcentaje de decoloración del naranja de metilo tratado con el Reactivo de Fenton a distintas temperaturas	40
Figura 10.	Efecto del tiempo de reacción en el porcentaje de decoloración del naranja de metilo tratado con el reactivo de Fenton a distintas concentraciones de NaCl	44

Figura 11. Efecto del tiempo de reacción en el pH de la solución de naranja de metilo tratada con el reactivo de Fenton	45
Figura 12. Cinética de orden cero de la solución de naranja de metilo al tratarlo con el reactivo de Fenton	48
Figura 13. Cinética de primer orden de la solución de naranja de metilo al tratarlo con el reactivo de Fenton	49
Figura 14. Cinética de segundo orden de la solución de naranja de metilo al tratarlo con el reactivo de Fenton	49
Figura 15. Energía de activación y Factor de frecuencia obtenida por la ecuación de Arrhenius para la decoloración del naranja de metilo	51
Figura 16. Esquema del Reactor de Fenton	54
Figura 17. Estudio de la concentración de la solución de naranja de metilo al tratarlo con el reactivo de Fenton en el tiempo	57
Figura 18. Estudio de la temperatura de reacción de la solución de naranja de metilo al tratarlo con el reactivo de Fenton en el tiempo	58
Figura 19. Estudio de la temperatura externa del reactor de Fenton en el tiempo	58
Figura 20. Polinomio que se ajusta a la curva de concentración obtenida en el laboratorio	59
Figura 21. Comparación entre los datos de laboratorio y el modelo simulado para la concentración del naranja de metilo mediante la reacción de Fenton	60
Figura 22. Comparación del modelo de concentración con el ruido blanco del filtro EKF	62

Figura 23.	Comparación del modelo de concentración con el ruido blanco del filtro UKF	62
Figura 24.	Comparación del modelo de temperatura de reacción con el ruido blanco del filtro EKF	63
Figura 25.	Comparación del modelo de temperatura de reacción con el ruido blanco del filtro UKF	63
Figura 26.	Comparación del modelo de temperatura ambiente con el ruido blanco del filtro EKF	64
Figura 27.	Comparación del modelo de temperatura ambiente con el ruido blanco del filtro UKF	64
Figura 28.	Comparación de la concentración obtenida a partir de la curva de calibración con el ruido blanco del filtro EKF	67
Figura 29.	Comparación de la concentración obtenida a partir de la curva de calibración con el ruido blanco del filtro UKF	67
Figura 30.	Comparación de la temperatura obtenida en el laboratorio con el ruido blanco del filtro EKF	68
Figura 31.	Comparación de la temperatura obtenida en el laboratorio con el ruido blanco del filtro UKF	68
Figura 32.	Comparación de la temperatura ambiente obtenida en el laboratorio con el ruido blanco del filtro EKF	69
Figura 33.	Comparación de la temperatura ambiente obtenida en el laboratorio con el ruido blanco del filtro UKF	69
Figura 34.	Energía de Activación obtenida por el modelo a través del filtro EKF	74

Figura 35. Energía de Activación obtenida por el modelo a través del filtro UKF	74
Figura 36. Factor de Frecuencia obtenido por el modelo a través del filtro EKF	75
Figura 37. Factor de Frecuencia obtenido por el modelo a través del filtro UKF	75
Figura 38. Energía de Activación obtenida con datos de laboratorio a través del filtro EKF	77
Figura 39. Energía de Activación obtenida con datos de laboratorio a través del filtro UKF	77
Figura 40. Factor de Frecuencia obtenido con datos de laboratorio a través del filtro EKF	78
Figura 41. Factor de Frecuencia obtenido con datos de laboratorio a través del filtro UKF	78

RESUMEN

ESTUDIO CINÉTICO Y COMPARACIÓN DEL DESEMPEÑO DE LOS FILTROS UKF Y EKF EN LA DECOLORACIÓN DEL NARANJA DE METILO MEDIANTE LA REACCIÓN DE FENTON

AUTOR:

Beatriz Zambrano

ASESORES:

Moirá Miranda

Antonio Rodríguez-Malaver

Mérida, Mayo de 2009

El agua residual de la industria textil tiene que ser limpiada de productos químicos porque de lo contrario puede causar contaminación y posteriores efectos cancerígenos en las personas. Esta investigación tuvo como objetivo estudiar los parámetros cinéticos y comparar los filtros EKF y UKF en la decoloración del naranja de metilo (NM) mediante la reacción de Fenton. En el proceso se preparó una solución con los reactivos $NM:H_2O_2:Fe^{+2}$ y se estudió las condiciones óptimas, efecto de la temperatura, pH, presencia de concentraciones de NaCl, se determinó la cinética de la reacción y se estimó algunos parámetros a través de cada filtro. El porcentaje de decoloración del NM alcanzó un valor del 92,96% a los 60 min de reacción. Por otro lado, a mayor temperatura, la velocidad de reacción se incrementó y por lo tanto la decoloración ocurrió más rápido. Seguidamente, al añadir distintas concentraciones de NaCl a la solución de NM, el porcentaje de decoloración disminuyó a medida que la concentración de NaCl aumentó. El estudio de la cinética fue de segundo orden generando un valor de energía de activación y factor de frecuencia de 15,07 KJ/mol y $2,02 \times 10^6 M^{-1} \cdot min^{-1}$. El filtro EKF fue el más apto para estimar el estado real del proceso, mientras que el UKF demostró mayor rapidez y representó el procedimiento más adecuado para estimar los parámetros del modelo. El proceso Fenton, representa un valioso aporte al tratamiento de colorantes presentes en el agua, ya que los decolora eficazmente a bajo costo.

DESCRIPTORES: Agua Residual, Industria Textil, Naranja de Metilo, Reactivo Fenton, Filtros EKF y UKF.