



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**

---

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO**

**“ESTUDIO NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE  
TRANSPORTE DE MOMENTUM Y MASA EN  
SISTEMAS DE ADSORCIÓN”**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN  
CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA**

**PRESENTA:**

**GARCIA HERNANDEZ ELIAS**

**DIRECTORES:**

**DR. RAÚL OCAMPO PÉREZ**

**DR. CARLOS GILBERTO AGUILAR MADERA**



**SAN LUIS POTOSÍ. S.L.P. ENERO 2024**

---

**UASLP-Sistema de bibliotecas**

**Repositorio institucional**

**Tesis digitales**

**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS**

**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en este Trabajo terminal está protegido por la Ley Federal de Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos.

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

## **CRÉDITOS INSTITUCIONALES**

Este proyecto se realizó en Laboratorio de Procesos Avanzados de Oxidación adscrito a la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí en el periodo comprendido entre los agosto del 2020 y enero del 2024, bajo la dirección de Dr. Raúl Ocampo Pérez y Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera.

El programa de Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química de la universidad autónoma de San Luis Potosí pertenece al Sistema Nacional de Posgrados de Calidad (SNP) del CONAHCyT, registro 000897, en el Nivel CONSOLIDADO. Numero de registro de la beca otorgada por CONAHCyT: 895641

El presente trabajo fue sometido a análisis de similitud en la plataforma “turnitin” y el informe de originalidad reporto un **26% de similitud**.

<input type="checkbox"/>	Título	Informe	Autor	Procesados	Acciones
<input type="checkbox"/>	ESTUDIO NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE TRANSPORTE DE MOMENTUM Y MASA EN SISTEMAS DE ADSORCIÓN 1 part - 0 words	26%	Elías García Hernández	9 ene 2024 15:00:33	 



Estudio numérico y experimental de transporte de momentum y masa en sistemas de adsorción © 2023 por García Hernández Elías se distribuye bajo una licencia [Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**



**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO**

**“ESTUDIO NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE TRANSPORTE DE MOMENTUM Y  
MASA EN SISTEMAS DE ADSORCIÓN”**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

P R E S E N T A:

**GARCIA HERNANDEZ ELIAS**

**SINODALES**

**Dr. Erik César Herrera Hernández  
Presidente**

\_\_\_\_\_  
**Firma**

**Dr. Nahúm Andrés Medellín Castillo  
Secretario**

\_\_\_\_\_  
**Firma**

**Dr. Valente Flores Cano  
Vocal**

\_\_\_\_\_  
**Firma**

**Dr. Raúl Ocampo Pérez  
Vocal**

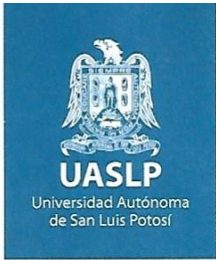
\_\_\_\_\_  
**Firma**

**Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera  
Vocal**

\_\_\_\_\_  
**Firma**

SAN LUIS POTOSI, SLP

ENERO 2024




San Luis Potosí. S.L.P


10 de enero de 2024

**Comité Académico del Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química**  
**Facultad de Ciencias Químicas de UASLP**  
**PRESENTE. -**

Por medio de la presente les comunicamos que la tesis realizada por el alumno de Doctorado MC. Elias García Hernández, titulada “Estudio numérico y experimental de transporte de momentum y mas en sistemas de adsorción”, ha sido concluida y aprobada por el comité tutorial para iniciar los trámites correspondientes para su titulación. El examen de grado tendrá lugar el próximo viernes 19 de enero de 2024 a las 12:00 h en la sala de exámenes profesionales de la Facultad de Ciencias Químicas.


**Atentamente**

  
Dr. Raúl Ocampo Pérez  
Director de Tesis

  
Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera  
Director de Tesis

  
Dr. José Valente Flores Cano  
Asesor

  
Dr. Erik Cesar Herrera Hernández  
Asesor

  
Dr. Nahum Andres Medellin  
Castillo  
Asesor

[www.uaslp.mx](http://www.uaslp.mx)

## **INTEGRANTES DEL COMITÉ DE TUTORIAL ACADÉMICO**

### **Directores de tesis**

Dr. Raúl Ocampo Pérez

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera

Facultad de Ciencias de la Tierra, Universidad Autónoma de Nuevo León.

### **Asesor 1**

Dr. José Valente Flores Cano

Facultad de Ciencias de la Tierra, Universidad Autónoma de Nuevo León.

### **Asesor 2**

Dr. Erik Cesar Herrera Hernández

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

### **Asesor 3**

Dr. Nahum Andrés Medellín Castillo

Programa Multidisciplinario de Posgrado en Ciencias Ambientales, Universidad autónoma de san Luis Potosí.

---

## **DEDICATORIA**

A mí amado hijo.

Que todo mi esfuerzo, trabajo y dedicación sean para brindarte lo mejor de mí.  
Eres el motor de mi vida, y mi motivación para ser mejor cada día. Te amo.

Daniel Alejandro García Rojas.



---

## AGRADECIMIENTOS

A JEHOVÁ por darme la vida, las energías, para poder cumplir mis sueños, y por brindarme una familia que siempre me ha apoyado, en mis decisiones.

A mis padres por acompañarme siempre en mi camino de educación y por apoyarme bajo cualquier circunstancia, por soportarme y aguantarme.

A mí amada novia Yadira y a nuestro hermoso bebé Daniel, por convertirse en el motor de mis sueños y aspiraciones, y por brindarme su compañía incondicional

Al Dr. Raúl Ocampo Pérez por convertirse en un segundo padre para mí, por su asesoría, por sus consejos académicos como personales, y por apoyarme en cada etapa de este proyecto.

Al Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera por brindarme su amistad, por sus consejos y apoyo en la realización de este proyecto.

A mis sinodales, Dr. Erik Cesar Herrera Hernández, Dr. Nahum Andrés Medellín Castillo y Dr. José Valente Flores Cano por su apoyo y ayuda en la revisión de esta tesis, además de sus consejos en la realización de esta.

A mis hermanos, Zuri, Abdías, Abigail e Isaac, por acompañarme siempre, darme su amistad y brindarme su apoyo incondicional en cualquier meta que me propongo.

A mis amigos Daniel, Daniela, José Guadalupe, Nancy, Sergio Eduardo, Adriana, Alberto, Samuel, Erick, Eyden, Carito, Héctor, y Andrea por compartir momentos alegres y tristes durante esta etapa de mi vida.

A mis amigos y compañeros de laboratorio, Karen, Karina, Moisés y Saul por todas las experiencias vividas, por su amistad.

A todas las demás personas, familiares y profesores que en determinado momento me ayudaron y me brindaron cariño y amistad.

---

## **AGRADECIMIENTOS A LAS INSTITUCIONES**

Centro de Investigación y Estudios de Posgrado

Facultad de Ciencias Químicas

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología

(CONACYT)

Numero de Beca y CVU:

895641

---

## **AGRADECIMIENTOS POR APOYO TÉCNICO**

A la Dra. Erika Padilla Ortega, por permitirme hacer uso de las instalaciones de su laboratorio durante todo el tiempo que estuve en el doctorado.

A la Dra. Esther Bailón García, por contribuir a la caracterización del material, así como a la escritura de este trabajo.

---

## RESUMEN

Esta tesis presenta el análisis experimental y numérico de la adsorción de piridina sobre tela de carbón activado en un adsorbedor de lote de tanque agitado en régimen de flujo de transición y turbulento. Se implementó un modelado numérico tridimensional del proceso de adsorción para la identificación de la velocidad y la concentración locales, además de los gradientes de concentración dentro del adsorbedor. Esto representa un costo computacional elevado en comparación con los modelos convencionales aplicados a la adsorción por lote, como es el caso del modelo cinético de Langmuir. Ambos tipos de modelización producen resultados comparables, sin embargo, la ventaja del modelado 3D es una resolución más detallada de las variables físicas asemejándose más a la realidad, y evitando las suposiciones de mezcla perfecta. Para este efecto, se varió la velocidad de agitación dentro del reactor (30-200 RPM) y la concentración inicial de piridina (99 a 487 mg/L). Como resultado se obtuvieron los parámetros cinéticos y de transporte propios de cada modelo. Además, se identificaron las capas límite hidrodinámicas y de flujo masico alrededor del material adsorbente, las cuales siguen la trayectoria de agitación dentro del reactor. Se observó que el mayor flujo masico de piridina tiene lugar alrededor del adsorbente, principalmente en la zona posterior del impulsor respecto a la dirección de la agitación. esta información es muy relevante en la búsqueda y diseño de sistemas adsorbentes más eficientes y efectivos.

Palabras clave: Modelado 3D. Proceso de adsorción. Flujo turbulento.

---

## **ABSTRACT**

This thesis presents the experimental and numerical analysis of the adsorption of pyridine on activated carbon cloth in a stirred tank batch adsorber in transition and turbulent flow regime. A three-dimensional numerical modeling of the adsorption process was implemented for the identification of the local velocity and concentration, as well as the concentration gradients within the adsorber. This represents a high computational cost compared to conventional models applied to batch adsorption, such as the Langmuir kinetic model. Both types of modeling produce comparable results, however, the advantage of the 3D modeling is a more detailed resolution of the physical variables resembling more closely to reality and avoiding the assumptions of perfect mixing. To this effect, the stirring speed inside the reactor (30-200 RPM) and the initial pyridine concentration (99 to 487 mg/L) were varied. As a result, the kinetic and transport parameters specific to each model were obtained. In addition, the hydrodynamic and mass flow boundary layers around the adsorbent material, which follow the agitation path within the reactor, were identified. It was observed that the highest mass flow of pyridine takes place around the adsorbent, mainly in the area behind the impeller with respect to the direction of agitation.

Key words: Modeling 3D. Adsorption processes. Turbulent flux.

---

## ÍNDICE GENERAL

1	INTRODUCCIÓN	1
2	ANTECEDENTES	3
2.1	Contaminantes del agua	3
2.2	Uso de adsorbentes para eliminación de contaminantes del agua	5
2.3	Modelos matemáticos para interpretar la velocidad de adsorción	7
2.3.1	Modelos cinéticos	7
2.3.2	Modelos difusionales	11
2.3.3	Modelo de transporte externo de masa	14
2.4	Modelos matemáticos para la interpretar velocidad de adsorción	15
3	JUSTIFICACIÓN	19
4	HIPÓTESIS	20
5	OVJETIVOS	21
6	MATERIAL Y MÉTODOS	22
6.1	Tela de carbón activado	22
6.2	Adsorbato	23
6.3	Obtención de la tasa de adsorción experimental	23
6.4	Modelo matemático	25
6.4.1	Ecuaciones de flujo de fluidos	25
6.4.2	Modelo advectivo-difusivo (MAD)	27
6.4.3	Modelo Cinético de Langmuir (MCL)	27

---

6.5	Características Computacionales.	29
7	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	30
7.1	Caracterización textural, química y morfológica del TCA	30
7.2	Equilibrio de adsorción	35
7.3	Análisis con el modelo cinético de Langmuir (MCL)	36
7.4	Análisis con el Modelo Advectivo Difusivo (MAD)	43
8	CONCLUSIONES	57
9	BIBLIOGRAFIA	58
10	ANEXOS	64
10.1	ÍNDICE DE FIGURAS	64
10.2	ÍNDICE DE TABLAS	67
11	Obra derivada	68

---

# 1 INTRODUCCIÓN

La adsorción es un proceso físico el cual se define como la acumulación preferencial de un soluto sobre la superficie de un material sólido denominado adsorbente, una vez que el soluto se deposita sobre el adsorbente se denomina adsorbato [1]. La adsorción se puede dar en fase líquida o en fase gas, en este trabajo nos centraremos específicamente en la adsorción en fase líquida. Esta es una técnica física de gran utilidad en el tratamiento terciario de aguas, ya sea para que estas alcancen el grado de potables, o para que puedan ser vertidas en efluentes de agua sin causar mayor daño al medio ambiente, esto último sucede con mayor frecuencia en efluentes industriales [2].

En los últimos años la contaminación del agua de origen antropogénico ha causado gran preocupación en la comunidad científica debido a las consecuencias catastróficas que supone para la sociedad no disponer del vital líquido. Es por esta razón que se han desarrollado novedosas tecnologías para darle tratamiento a los efluentes de agua contaminada, algunos de ellos basados en la filtración por membranas y procesos avanzados de oxidación [3]. Sin embargo, este tipo de tecnologías, la mayoría de las veces terminan siendo muy costosas lo que las hace poco viables, o bien terminan por ser difíciles de ejecutar a grandes escalas, con eso en mente la adsorción sigue siendo hoy por hoy un método convencional de fácil aplicación y bajo costo para la limpieza del agua [4], [5].

La piridina es un compuesto orgánico incoloro y de olor desagradable ampliamente utilizado en las industrias de tintes, pesticidas y herbicidas y como intermediario para sintetizar diversos compuestos orgánicos [6]. Debido a su alta solubilidad en agua, está presente en las aguas residuales de estas industrias. La piridina es tóxica para los seres humanos y se ha descubierto que afecta a órganos como el hígado y los riñones y es potencialmente cancerígena [6]. Se han propuesto varios métodos para eliminar la piridina del agua, como la degradación por radiación UV [7], [8], la degradación electroquímica [9], [10], la biodegradación con ondas ultrasónicas [11],



---

[12]y la degradación por radiación gamma [13]. Estos métodos tienen el inconveniente de generar subproductos de la degradación con mayor toxicidad que el compuesto original debido al bajo porcentaje de mineralización; además, la generación de lodos como uno de los subproductos es inconveniente [6].

El estudio de adsorción implica tres etapas cuales son: 1) Equilibrio de adsorción [14]: en esta etapa los estudios se centran en analizar y elucidar el mecanismo por el cual se lleva a cabo la adsorción, de esta manera se realizan experimentos para conocer cuáles son las variables más importantes por considerar para que se de dicho fenómeno físico, como pueden ser: pH de la solución, temperatura, las propiedades de textura del material adsorbente, así como la naturaleza del soluto y el solvente. 2) Velocidad de adsorción: en esta etapa el objetivo es estudiar y determinar cuál es el mecanismo de transferencia de masa dominante en el proceso [15]. En la literatura se ha reportado que la velocidad de adsorción consta de tres principales mecanismos de transferencia: 1° Es el transporte del soluto del seno de la solución a la superficie del material adsorbente, se le conoce como transporte externo de masa. 2° El transporte a través de la matriz porosa de material adsorbente ya sea por el volumen del poro o sobre la superficie del poro y se le denomina transporte intraparticular. 3° Se le conoce como adsorción en el sitio activo del adsorbente y se refiere a fenómeno que sufre el soluto al depositarse sobre el adsorbente [16]. En función del cualquiera de los tres mecanismos ya sea por separado o en conjunto, se han propuesto diferentes modelos matemáticos que buscan interpretar y predecir la velocidad de adsorción en cualquier sistema adsorbato-adsorbente. Algunos de dichos modelos contienen parámetros físicos que permiten el diseño y dimensionamiento de las columnas de adsorción [5]. 3) Adsorción en régimen dinámico[17], [18]: en esta etapa el objetivo es determinar las variables de operación del lecho empacado, así como conocer el tiempo de ruptura y saturación del lecho, también se pueden realizar una serie de pruebas para ver si el material adsorbente se puede regenerar y si es así cuantos ciclos puede servir el material.

---

## 2 ANTECEDENTES

### 2.1 Contaminantes del agua

La contaminación antropogénica del agua es uno de los principales problemas a los que como sociedad humana nos enfrentamos hoy en día. De hecho, el derecho al agua limpia y saneamiento ocupa el puesto número 6 de los objetivos de desarrollo sostenible decretados por la organización de naciones unidas en el año 2015 y con un plazo a cumplir en 15 años, pero está directamente relacionado con 14 de los 17 objetivos propuestos. Este hecho deja ver que la contaminación del agua es una realidad y requiere de acciones inmediatas para alcanzar dicho objetivo. Tal como se comentó en el capítulo anterior la comunidad científica ha puesto manos a la obra en este aspecto, sin embargo, aun representa un reto alcanzar el objetivo debido a que cada día se siguen vertiendo a los efluentes de agua toda clase de contaminantes, eh incluso algunos de ellos son nuevos lo que conlleva el desarrollo de nuevos estudios para conocer el tipo de impacto que tienen en el medio ambiente. Los diversos tipos de contaminantes los podemos clasificar en tres grandes grupos: inorgánicos, orgánicos y emergentes.

Los contaminantes inorgánicos hacen referencia principalmente a los metales pesados (MP) que se encuentran disueltos en forma de iones en el agua. Los MP más estudiados en la literatura son el Plomo, Mercurio, Cadmio, Arsénico, Níquel y Cromo, ya que aun en trazas muy pequeñas representan un grave peligro para la salud humana dado que estos no se descomponen y son bioacumulables [19]. Existen otros MP como el Cobre, Cobalto y Zinc, los cuales en dosis adecuadas son indispensables para el buen funcionamiento de los procesos enzimáticos de los seres vivos, sin embargo, en concentraciones altas pueden provocar envenenamiento del organismo [19]. En su gran mayoría este tipo de contaminantes provienen de los vertederos de actividades industriales como son: la minería, los fertilizantes, pesticidas y pinturas. Sin embargo, también la sociedad contribuye con el uso de artículos del hogar que

---

están directamente relacionados con este tipo de industrias. Entre algunas de las consecuencias que tiene el contacto humano con este tipo de contaminantes están enfermedades como: fluorosis, insuficiencia renal, diarrea sanguinolenta, cociente intelectual y bajo desarrollo, alteraciones al ADN, trastornos neuropsiquiátricos e incluso cáncer.

Los contaminantes orgánicos son moléculas compuestas principalmente de hidrogeno y carbono, aunque también contienen trazas de otros elementos. Al igual que los MP, este tipo de compuestos también generan toxicidad para los seres vivos y muchos son bioacumulables. En esta categoría se pueden encontrar una gran cantidad de contaminantes como son: colorantes, compuestos fenólicos, hidrocarburos aromáticos, compuestos perfluorados, clorados y nitrogenados. Este tipo de compuestos también causa severos daños a los seres vivos que pueden ir desde un simple malestar hasta la muerte. La mayoría de estos compuestos son provenientes de actividades industriales como: los textiles, alimentaria, plásticos, herbicidas, pesticidas, así como de la ganadería [20].

Los contaminantes emergentes provienen principalmente de las industrias: farmacéutica y de higiene personal. Aunque muchos de ellos son de origen orgánico su principal diferencia es que este tipo de compuestos no han sido regulados por las autoridades gubernamentales, esto debido a que se sabe poco o nada de los efectos que estos pueden tener al incidir en la flora y fauna del planeta, ya sea a corto, mediano o largo plazo. Sin embargo, en los últimos años se ha descubierto que este tipo de contaminantes también son bioacumulables, y se encuentran presentes en efluentes de agua. La principal problemática es que nuestros sistemas convencionales de tratamiento de agua no remedian la presencia de este tipo de compuestos en el agua. Además, con el gran crecimiento que han tenido las industrias de belleza con la elaboración de maquillaje, perfumes, cremas etc. Así como el uso desmedido de fármacos por parte de la sociedad, el problema se ha ido incrementando y se espera que la presencia de este tipo de compuestos se incremente gradualmente en los siguientes años, mientras no existan regulaciones claras.

---

## **2.2 Uso de adsorbentes para eliminación de contaminantes del agua**

En la literatura se han reportado numerosos estudios de adsorción para eliminar todo tipo de contaminantes del agua. Dado que existen diferentes tipos de contaminantes cuya naturaleza química y física son diferentes dependiendo del grupo en el que se encuentran categorizados. Es necesario que existan diferentes materiales adsorbentes que cuenten con las características necesarias para poder fungir como adsorbentes dependiendo de la naturaleza del soluto. Para los compuestos de origen inorgánico como son los MP se han empleado adsorbentes cuya superficie adsorbente posee una carga negativa, esto permite interacciones electroquímicas entre los iones metálicos cargados positivamente y de esta manera tanto adsorbato como adsorbente se atraen mutuamente y así forman un enlace iónico que permite disminuir la concentración de MP en la solución. Dentro de los materiales utilizados como adsorbentes encontramos: alúmina activada, diferentes tipos de arcillas, zeolitas e incluso materiales compuestos y sintéticos como las arcillas artificiales.

En el caso de los contaminantes orgánicos, estos son adsorbidos sobre materiales cuyo origen también es orgánico, tal es el caso de los materiales de carbón activado, los hay de todo tipo y de diferentes fuentes de origen vegetal como cáscaras de frutas, sorgo, biomasa, y semillas. El objetivo es que los compuestos orgánicos formen enlaces químicos y físicos con los grupos funcionales del carbón activado. El carbón activado es por excelencia un material adsorbente de compuestos orgánicos y se han desarrollado de diferentes presentaciones como: granular, polvo fieltros, telas, pellets. Gracias a que cuenta con un elevado desarrollo de porosidad, está dotado por una gran área superficial que le otorga grandes capacidades de adsorción. Existen otros materiales que también se han desarrollado para su aplicación como adsorbentes de compuestos orgánicos entre los que encontramos: órgano arcillas, derivados del grafeno, y materiales compuestos. En cuanto a los contaminantes emergentes, también se han provisto de varios materiales sintetizados con el objetivo de tener una

---

buena capacidad de adsorción, afín a la naturaleza del soluto, ya sea un fármaco o un derivado de un producto de higiene personal.

Algunos ejemplos del uso de la adsorción para eliminación de compuestos indeseables del agua son: Mei- Hong et al. En 2019 estudiaron la adsorción de  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$  y  $\text{Cu}^{2+}$  sobre zeolitas jerárquicas modificadas con aminoácidos y encontraron que la adsorción de  $\text{Ni}^{2+}$  depende de la jerarquía de la estructura porosa de la zeolita ya que al modificar la geometría del poro la adsorción de este ion se elevó al doble debido a la formación de nanoláminas de filosilicato dentro de la estructura porosa de la zeolita. Mientras que la adsorción de  $\text{Pb}^{2+}$  y  $\text{Cu}^{2+}$  no se vio afectada por el cambio en la geometría del poro, aun así, se reportaron capacidades de adsorción de 500 mg/g y 150 mg/g respectivamente a 28°C y pH de 6 [21].

En cuanto a compuestos orgánicos Fan Y et al. [22] En 2023 estudiaron la adsorción de azul de metileno sobre polioxalato basado en un MOF (Metal-Organic Framework) el cual presento una capacidad de adsorción de 441 mg/g a 25 °C. El equilibrio de adsorción fue interpretado por las isothermas de Langmuir, Freundlich y Temkin, siendo la primera la que interpreto de mejor manera los datos experimentales con una  $R^2$  de 0.998. Los estudios de velocidad de adsorción evidenciaron que el material permite una rápida adsorción alcanzando el equilibrio en los primeros 25 min, este hecho se atribuyó la alta cantidad de sitios activos vacantes al inicio del experimento. Los datos experimentales se interpretaron por el modelo cinético de pseudo segundo orden presentando un  $R^2$  de 0.9986. Por último, el estudio de efecto de temperatura mostro que el  $\Delta H$  es positivo eh igual a 63.23 kJ/mol, lo que indica que la adsorción es un proceso endotérmico, mientras que el  $\Delta G$  tiene un valor de -3.23 kJ/mol a 25 °C por lo cual se concluye que la adsorción es factible y espontanea.

---

## **2.3 Modelos matemáticos para interpretar la velocidad de adsorción**

Los modelos matemáticos encontrados en la literatura se basan en una o más etapas de transferencia de masa mencionadas en el capítulo anterior: transporte externo de masa, transporte por difusión en el medio poroso y adsorción en el sitio activo. El objetivo principal de los estudios de velocidad de adsorción es determinar la etapa de transferencia de masa dominante en el sistema adsorbato-adsorbente. En este sentido se puede realizar una analogía entre las etapas de transferencia de masa y un circuito de resistencia en serie y paralelo. Donde la etapa que opone mayor resistencia a la transferencia de masa es quien domina el mecanismo de adsorción. De esta manera, el transporte de soluto en la solución y hasta la superficie externa de la matriz porosa, se puede deber a el transporte advectivo o al transporte difusivo y estas dos etapas se consideran como dos resistencias en paralelo, sin embargo, estas resistencias generalmente se consideran como una sola y se le denomina transporte externo de masa. Las siguientes resistencias en paralelo se encuentran dentro de la matriz porosa y son: el transporte de soluto en el volumen del poro y en la superficie del poro. Finalmente, la última resistencia a considerar es la que se debe la adsorción en el sitio activo del adsorbente. Los modelos previstos en la literatura se basan en una o más de estas etapas.

### **2.3.1 Modelos cinéticos**

Los modelos cinéticos de velocidad de adsorción consideran como etapa dominante la adsorción en el sitio activo del adsorbentes y asemejan este proceso a una cinética de reacción química. Este tipo de modelos son los más sencillos de emplear ya que generalmente se representan por ecuaciones algebraicas, por esta razón también son

---

de los más empleados en la literatura. Sin embargo, este tipo de modelo presenta como principal desventaja que sus parámetros de ajuste (normalmente constantes), no poseen un significado físico que nos permita entender el mecanismo de adsorción, además que estos modelos son meramente interpretativos y no predictivos, por lo que cuando se desea emplear el mismo sistema adsorbato-adsorbente bajo condiciones distintas a las que se realizó el ajuste estos modelos no sirven. Y son menos útiles si se desea extrapolar la escala del sistema. Aun así, este tipo de modelos sirve como punto de partida en la interpretación de velocidades de adsorción. Estos modelos parten de un balance de masa en la solución donde se consideran condiciones de homogeneidad, además, se considera que la cantidad adsorbida es homogénea en todo el material adsorbente por lo que el balance global de masa se expresa como:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -m \frac{dq}{dt} \quad (1)$$

Donde:  $V$  es el volumen de la solución,  $C_A$  es la concentración del soluto A en la solución,  $t$  es el tiempo,  $m$  es la masa de adsorbente,  $q$  es la masa de soluto adsorbido por unidad de masa de adsorbente. El lado izquierdo de la ecuación (1) representa el decaimiento de la concentración de A en la solución, mientras el lado derecho representa la masa de A adsorbida. La ecuación (1) se puede integrar bajo la siguiente condición inicial:

$$t=0; q=0; C_A=C_{A0} \quad (2)$$

Obteniéndose la siguiente expresión:

$$q = \frac{V}{m} (C_A - C_{A0}) \quad (3)$$

La ecuación (3) permite determinar la masa del soluto A adsorbida en cualquier tiempo midiendo la concentración de la solución.

Entre los modelos cinéticos más empleados en la literatura se encuentran:

*Modelo Cinético de Pseudo Primer Orden*

---

La forma diferencial de este modelo en función de la masa adsorbida es la siguiente:

$$\frac{dq}{dt} = k_1(q_e - q); \quad t=0; \quad q=0 \quad (4)$$

Donde:  $k_1$  es la constante de ajuste del modelo. La forma diferencial del modelo en función de la concentración de la solución es la siguiente:

$$\frac{dC_A}{dt} = k_1(C_A - C_{Ae}); \quad t=0; \quad C_A = C_{A0} \quad (5)$$

#### *Modelo Cinético de Pseudo Segundo Orden*

La forma diferencial de este modelo en función de la masa adsorbida es la siguiente:

$$\frac{dq}{dt} = k_2(q_e - q)^2; \quad t=0; \quad q=0 \quad (6)$$

Donde:  $k_2$  es la constante de ajuste del modelo. El modelo permite expresar la caída de la concentración del soluto en solución por medio de la expresión:

$$C_A = C_{A0} - \left(\frac{m}{V}\right) \frac{k_2 \left[ \left(\frac{V}{m}\right) (C_{A0} - C_{Ae}) \right]^2 t}{1 + k_2 \left[ \left(\frac{V}{m}\right) (C_{A0} - C_{Ae}) \right] t} \quad (7)$$

#### *Modelo Cinético de Orden n*

Este modelo totalmente empírico del cual se puede obtener los modelos de primer y segundo orden por lo que es más general, pero menos utilizado debido a que sus constantes no se pueden asociar a ningún proceso físico y carecen de sentido. Su forma diferencial en base a la cantidad de soluto adsorbido es la siguiente:

$$\frac{dq}{dt} = k_n(q_e - q)^n; \quad t=0; \quad q=0 \quad (8)$$



---

Donde:  $k_n$  es la constante de ajuste del modelo. La forma diferencial que interpreta la caída de concentración en la solución es:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_n \left( \frac{V}{m} \right)^{n-1} (C_A - C_{Ae})^n; \quad t=0; \quad C_A = C_{A0} \quad (9)$$

#### *Modelo de Elovich*

La forma diferencial del modelo es la siguiente:

$$\frac{dq}{dt} = a \exp(-bq); \quad t=0; \quad q=0 \quad (10)$$

Donde:  $a, b$  son las constantes de ajuste del modelo. El parámetro  $b$  se asocia a la energía de activación necesaria para llevar a cabo la adsorción por quimisorción. Este modelo se relaciona empíricamente con una superficie de adsorción heterogénea.

#### *Modelo de Cinético de Difusión Intraparticular*

Este modelo se basa en el supuesto que la difusión intraparticular es constante y el adsorbente es homogéneo, la ecuación que lo representa es:

$$q = K_{id} t^{0.5} + C_{id} \quad (11)$$

Donde:  $K_{id}$  es la constante de velocidad de difusión intraparticular y  $C_{id}$  es la constante de difusión intraparticular.

#### *Modelo de Cinético de Langmuir*

Este modelo se basa en los principios propuestos por Langmuir para la adsorción en monocapa su forma diferencial es:

$$\frac{dq}{dt} = k_{ad} C_A (q_m - q) - k_{des} q; \quad t=0; \quad q=0 \quad (12)$$

Donde:  $k_{ad}$  y  $k_{des}$  son las constantes cinéticas de adsorción y desorción respectivamente y  $q_m$  es la máxima capacidad de adsorción de soluto por unidad de

---

masa del adsorbente dada por el estudio de equilibrio de adsorción interpretado por la Isoterma de Langmuir. En la ecuación (12) el primer término de la derecha representa la adsorción, mientras el segundo término representa la desorción.

### 2.3.2 Modelos difusionales

A diferencia de los modelos cinéticos los modelos difusionales contemplan más de una etapa en el mecanismo de transferencia de masa, como es el transporte externo, el transporte difusional a lo que deben su nombre y generalmente consideran la adsorción en el sitio activo como instantánea. Este tipo de modelos se basan en el balance de masa general en el medio adsorbente y son complejos ya que involucran la solución de ecuaciones diferenciales parciales de orden superior a uno, además, dependen de la geometría del material adsorbente y las condiciones de frontera dependen de los fluxes masicos en la geometría. Sin embargo, estos modelos también tienen en cuenta las siguientes consideraciones: 1) Homogeneidad en la solución. 2) El material adsorbente es isotrópico. 3) El proceso difusivo dentro del solido es análogo a la ley de Fick. 4) temperatura constante. Entre los modelos más utilizados en la literatura encontramos los siguientes:

#### *Modelo General de Difusión*

Este modelo considera tres etapas en el mecanismo de transferencia de masa: transporte externo, transporte intraparticular y adsorción en el sitio activo. El modelo se compone de las siguientes ecuaciones:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -mSk_L (C_A - C_P|_s); \quad t=0; \quad C_A = C_{A0} \quad (13)$$

$$\frac{\partial C_P}{\partial t} \left( \epsilon_p + \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_P} \right) = \nabla \cdot \left[ \left( D_{ep} + D_{sp} \frac{\partial q}{\partial C_P} \right) \nabla C_P \right]; \quad t=0; \quad C_P=0; \quad \nabla C_P|_0 = 0 \quad (14)$$

$$\left( D_{ep} + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_p} \right) \nabla C_p|_s = k_L (C_A - C_p|_s) \quad (15)$$

$$q = f(C_p) \quad (16)$$

Donde:  $C_p$  es la concentración dentro del adsorbente,  $C_p|_s$  es la concentración en la superficie externa del adsorbente,  $\varepsilon_p$  y  $\rho_p$  son la porosidad y la densidad del adsorbente respectivamente,  $D_{ep}$  y  $D_s$  son los coeficientes de difusión en el volumen y en la superficie del poro respectivamente,  $S$  es el área externa del adsorbente y  $k_L$  es el coeficiente de transporte externo de masa. La ecuación (13) representa la caída de concentración de soluto A en la solución debido a la acumulación de esta en el sólido. El lado izquierdo de la ecuación (14) representa que el soluto se acumula en la superficie y en el volumen de los poros de adsorbente, mientras el lado derecho representa que dicho soluto se difunde a través de la superficie y el volumen de los poros. La ecuación (15) nos dice que el flux masico que llega del seno de la solución a la superficie del adsorbente por convección se transporta en el sólido por difusión. La ecuación (16) representa que la adsorción en el sitio activo es instantánea y se debe al equilibrio de adsorción y por lo tanto es función de la concentración en el adsorbente.

#### *Modelo Difusión en la Superficie del Poro*

Este modelo se deriva del modelo general de difusión, considerando que la difusión de soluto dentro de la partícula se debe únicamente a la difusión en la superficie del poro y por lo tanto no existe difusión en el volumen del poro  $D_{ep}=0$ . Las ecuaciones que representan este modelo además de la ecuación (13) son las siguientes:

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} \left( \varepsilon_p + \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_p} \right) = \nabla \cdot \left[ \left( D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_p} \right) \nabla C_p \right]; \quad t=0; \quad C_p=0; \quad \nabla C_p|_0=0 \quad (17)$$

$$\left( D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_p} \right) \nabla C_p|_s = k_L (C_A - C_p|_s) \quad (18)$$

### *Modelo Difusión en el Volumen del Poro*

Este modelo considera que la difusión del soluto se da únicamente en el volumen del poro del adsorbente, y que la difusión en la superficie del poro es despreciable, aun así, el modelo si considera el transporte externo de masa, como una de las resistencias importantes a considerar dentro del proceso de adsorción. La forma matemática del modelo es la siguiente:

$$\frac{\partial C_p}{\partial t} \left( \varepsilon_p + \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_p} \right) = \nabla \cdot (D_{ep} \nabla C_p); \quad t=0; \quad C_p=0; \quad \nabla C_p|_0=0 \quad (19)$$

$$D_{ep} \nabla C_p|_s = k_L (C_A - C_p|_s) \quad (20)$$

### *Modelo de Difusión en Poro Ramificado*

Este modelo se desarrolló asumiendo que la estructura del solido poroso está compuesta por macroporos y microporos. Además, considera que la difusión en los macroporos es muy rápida, mientras que la difusión en los microporos es más lenta, por efectos de difusión restringida. Dichos efectos ocurren cuando el tamaño de la molécula de soluto es similar al diámetro de los microporos del adsorbente. El modelo se ha desarrollado para partículas de adsorbente de geometría esférica asumiendo además que la difusión es tipo Fick y únicamente existe difusión en el volumen del poro y no en la superficie de este, el modelo se expresa en las siguientes ecuaciones.

$$\varepsilon_{ma} \frac{\partial C_{Ar}^{ma}}{\partial t} + \rho_p f \frac{\partial q_{ma}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 D_{em} \frac{\partial C_{Ar}^{ma}}{\partial r} \right) - \rho_p K_C \left[ (1-f) q_T (C_{Ar}^{ma}) - q_{mi} \right] \quad (21)$$

$$t=0; \quad C_{Ar}^{ma} = 0; \quad \left. \frac{\partial C_{Ar}^{ma}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (22)$$

$$D_{em} \left. \frac{\partial C_{Ar}^{ma}}{\partial r} \right|_{r=R} = k_L (C_A - C_{Ar}^{ma}|_{r=R}) \quad (23)$$

$$\frac{dq_{mi}}{dt} = K_C [(1-f)q_T(C_{Ar}^{ma}) - q_{mi}]; \quad t=0; \quad q_{mi} = 0 \quad (24)$$

El flux de masa entre los macroporos y los microporos se considera por medio de una fuerza impulsora lineal representada por la constante de velocidad  $K_C$ . Mientras que la relación de masa de soluto adsorbida en los microporos se representa mediante  $1-f$ , es decir,  $1-f$  es la fracción peso de soluto adsorbido los microporos del adsorbente.

### 2.3.3 Modelo de transporte externo de masa

El modelo de transporte externo de masa se deriva del modelo general de difusión considerando que la difusión intraparticular es instantánea y que el transporte externo de masa el mecanismo que gobierna la velocidad de adsorción. Para una geometría esférica, el transporte de masa se representa por las ecuaciones siguientes:

$$\frac{m\varepsilon_p}{\rho_p} \frac{dC_{Ar}}{dt} + m \frac{dq}{dt} = mSk_L (C_A - C_{Ar}|_{r=R}); \quad t=0; \quad C_{Ar}|_{r=R} = 0; \quad q=0 \quad (25)$$

La ecuación (25) representa el balance de materia en el seno de la solución. El primer término del lado izquierdo de la Ecuación (25) indica que el soluto se acumula en los espacios huecos del adsorbente, y el segundo término implica que el soluto es adsorbido sobre el adsorbente. Mientras el lado derecho de la ecuación corresponde a la velocidad del transporte externo de masa.

---

## 2.4 Modelos matemáticos para la interpretar velocidad de adsorción

Los modelos más empleados en la literatura son los modelos cinéticos de pseudo primer y segundo orden como muestra el siguiente estudio: En 2021 J. Aravind et al.[23] Realizaron estudios de adsorción de acenafteno sobre un carbón sintetizado a partir de desechos de cascara palma, el cual fue activado con ácido oleico y la activación fue asistida por ultrasonido. Lo que promovió el aumento de la porosidad de este. Los resultados de fisisorción por N<sub>2</sub> mostraron que el carbón posee un área específica de 506 m<sup>2</sup>/g. además la isoterma da adsorción desorción se clasifico como una isoterma tipo IV que presenta un lazo de histéresis del tipo H4 de acuerdo con la clasificación de la IUPAC. Por lo que se considera que el carbón sintetizado es mesoporoso. El equilibrio de adsorción se interpretó por las isothermas de Langmuir, Freundlich, Temkin y Sips. Siendo esta ultima la que menor desviación presento con respecto de los datos experimentales, con un coeficiente de correlación de 0.999 se determinó que el material presenta una máxima capacidad de adsorción para el acenafteno de 52 mg/g. La velocidad de adsorción se interpretó por los modelos de pseudo primer y segundo orden además del modelo de difusión intraparticular de Weber y Morris el cual presento la mayor desviación con respecto los datos experimentales con un R<sup>2</sup> de 0.9253, mientras que el modelo de pseudo segundo orden fue el que mejor ajuste presento de los datos experimentales con un R<sup>2</sup> de 0.9987 de acuerdo con este resultado los autores concluyen que la adsorción en los sitios activos del material es el mecanismo dominante en el proceso de adsorción , mientras que la difusión intraparticular no presenta relevancia dentro del proceso.

En contraste con el estudio anterior, Ocampo Pérez et al. [24] En 2017 estudiaron la velocidad de adsorción de acetaminofén sobre pellets de carbón activado, empleando para la interpretación de los datos experimentales el modelo general de difusión en geometría 3D. Los experimentos se realizaron a 200 RPM, pH de 7 y 25 °C, se determinó que el tiempo que tarda en alcanzar el equilibrio fue función de la

---

concentración inicial y vario de 10 000 min para una concentración de 708 mg/L hasta los 3 000 min para una concentración de 105 mg/L. El equilibrio de adsorción se interpretó por la Isotherma de Langmuir presentando una capacidad de adsorción máxima de 198 m/g y una constante de isoterma de 0.107 L/g. En primer lugar, se interpretó la velocidad de adsorción por el modelo de difusión en el volumen del poro, considerando que la difusión en la superficie del poro no existe, sin embargo, los resultados mostraron que el coeficiente de difusión efectivo es mayor que el valor del coeficiente de difusión en la solución, por lo que, aunque se interpretaron adecuadamente los datos, el modelo carece de significado físico. Ahora bien, cuando se empleó el modelo general de difusión se evidencio que la de acuerdo con los fluxes masicos la difusión superficial es el mecanismo dominante en el transporte de masa para tiempos cortos, mientras que a tiempos largos superiores a los 83 h la difusión en el volumen del poro es el mecanismo dominante. El modelo 3D mostro que el transporte de masa es mayor en las esquinas del pellet que en cualquier lugar de este para tiempos cortos, mientras que conforme aumenta el tiempo el flux masico se homogeniza alrededor del pellet. Además, se evidencio que para tiempos cercanos al equilibrio el flux masico cambia de dirección, mostrando así que comienza la desorción hacia la solución. Este estudio muestra que el uso de un modelo difusional arroja mucha más información sobre el mecanismo de transporte de masa en el proceso de adsorción, además que el hecho de emplear un modelo en 3D es un plus que ayuda a determinar cuál es la etapa dominante durante el proceso.

Zhu et al. estudiaron la adsorción de piridina sobre dos materiales poliméricos basados en poliestireno y divinilbenceno y obtuvieron capacidades de adsorción de hasta 85 mg/g a 25 °C [25]. Alonso- Dávila et al. estudiaron el mecanismo de adsorción de piridina sobre tela de carbón activado (TCA) a pH = 3, 4, 5,2, 6, 8 y 10, mientras que la temperatura varió como 15, 25 y 35 °C. Los investigadores encontraron la máxima capacidad de adsorción = 70 mg/g para una concentración de equilibrio de 500 mg/L, además demostraron que las interacciones dispersivas  $\pi$ - $\pi$  jugaron un papel dominante durante la adsorción a pH de entre 3 y 6. Se

---

observó que entre 15 y 35 °C la capacidad de adsorción no se ve afectada, lo que indica que el proceso de adsorción es independiente de la temperatura [26]. Mohan et al. estudiaron la adsorción de piridina en carbón activado derivado de residuos de cáscara de coco, informando de capacidades de adsorción de hasta 45 y 35 mg/g a 40 y 25 °C, respectivamente, dando lugar a un proceso endotérmico. El estudio cinético mostró que el tiempo de equilibrio se alcanzó después de 48 h, mientras que la difusión intraparticular fue la etapa dominante en la velocidad global de adsorción [27].

Centrándose en la velocidad de adsorción, Ocampo-Pérez et al. [28] elucidaron el impacto de la difusión intraparticular en la velocidad global de adsorción de piridina en carbón activado granular. Las curvas de decaimiento de la concentración se interpretaron mediante un modelo difusional que considera los mecanismos de difusión tanto en el volumen de los poros como en la superficie de estos. Los resultados evidenciaron que la difusión superficial es mucho más importante que la difusión en el volumen de poro, contribuyendo en más de un 94% a la difusión intraparticular total. Como señalan, Ocampo-Pérez y colaboradores, el coeficiente de difusión superficial puede ser una función no lineal de la masa adsorbida en equilibrio, e independiente del diámetro de la partícula. Para el sistema experimental analizado, el transporte externo de masa no afectó a la velocidad global de adsorción para velocidades de agitación superiores a 150 RPM. Por el contrario, para velocidades de agitación inferiores a 150 RPM, el transporte externo de masa tiene un efecto considerable en la velocidad global de adsorción.

García- Hernández et al. [29] evaluaron la adsorción de fenol sobre fieltro de carbón activado en un tanque agitado considerando una geometría 2D. La hidrodinámica se resolvió considerando el régimen laminar, mientras que el proceso de adsorción se modeló utilizando un modelo cinético de pseudo primer orden en la interfase sólido-líquido. Los resultados evidenciaron una buena predicción de los datos experimentales para velocidades de agitación altas y bajas. En su análisis, el número de Reynolds para su sistema varió de 2 014 a 13 414,



---

indicando un régimen transitorio y turbulento dentro del tanque adsorbente [30]. Por lo que utilizar un modelo de flujo laminar no es lo más correcto. Se concluyo entonces, que es necesario implementar modelos matemáticos más rigurosos para la fase líquida con el fin de proporcionar una predicción más adecuada de la velocidad local y, en consecuencia, mejorar la predicción de la velocidad de adsorción.

---

### 3 JUSTIFICACIÓN

De las tres etapas antes mencionadas, en este trabajo se tratará específicamente la velocidad de adsorción. Debido a que de esta etapa se comprenden parámetros importantes en el dimensionamiento de los equipos de adsorción, tales como, los coeficientes de difusión intraparticular, coeficientes de transporte externo de masa, y coeficientes de cinética de adsorción de orden  $n$ . Lo anterior depende directamente del tipo de modelo matemático que se emplee para interpretar los datos experimentales, los cuáles a su vez dependen del sistema adsorbato-adsorbente y nos permiten comprender la velocidad de saturación del adsorbente al alcanzar el equilibrio de adsorción.

Ahora bien, aun cuando en la literatura existen reportados diferentes modelos matemáticos, la mayoría de estos modelos solo se basan en los fenómenos que ocurren dentro del adsorbente o desde la interfaz sólido-líquido. Pero no llegan a considerar los fenómenos de transferencia de masa que existen fuera de esa interfaz, tales como los fenómenos de: convección, difusión, advección del soluto en solución acuosa, que tiene lugar debido a los efectos hidrodinámicos y el régimen de flujo que posee el sistema de adsorción. Es importante entender este tipo de fenómenos sobre todo si las condiciones en que se lleva a cabo el proceso de adsorción no son completamente homogéneas o bien son completamente heterogéneas.

---

## 4 HIPÓTESIS

La determinación del mecanismo global que controla la velocidad de adsorción resulta crucial para el diseño de absorbedores a gran escala. Como es sabido, en los procesos de transporte en serie la etapa más lenta gobierna toda la dinámica. El principal mecanismo de transporte puede elucidarse aplicando un modelo matemático que no considere el supuesto de mezcla perfecta en el interior del adsorbedor, es decir, un modelo matemático que considere los perfiles locales de concentración y velocidad en función de la velocidad de agitación. Lo anterior no es una tarea simple, ya que implica la solución de múltiples ecuaciones diferenciales parciales acopladas en condiciones transitorias. Por ejemplo, hay que resolver la ecuación de Navier-Stokes junto con la ecuación de continuidad para determinar la hidrodinámica en el sistema acuoso. Sin embargo, este tipo de problema se puede resolver, aplicando el uso de dinámica computacional de fluidos al proceso de adsorción y acoplándolo a las ecuaciones de transporte de masa dadas por los modelos matemáticos para interpretar velocidades de adsorción.

---

## 5 OVJETIVOS

Desarrollar modelos teórico-numéricos que involucren la mayor cantidad de etapas de adsorción en sistemas adsorbato-adsorbente mediante simulación numérica y comprobar su aplicación mediante estudio experimental para identificar el mecanismo gobernante en el transporte de masa y momentum.

Introducir y resolver numéricamente un modelo matemático en 3D para predecir la velocidad de adsorción de piridina sobre tela de carbón activado (TCA) en un tanque agitado. El modelo matemático considera: (i) hidrodinámica en régimen turbulento; (ii) transporte de masa convectivo y difusivo en la solución; y (iii) adsorción en la interfase sólido-líquido.

---

## 6 MATERIAL Y MÉTODOS

### 6.1 Tela de carbón activado

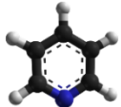
La tela de carbón activado (TCA) empleada procedía de Charcoal House. La TCA se lavó de 5-6 veces con agua desionizada para eliminar el polvo y las impurezas, y después se secó a 110 °C durante 24 h. Por último, la TCA se guardó en una bolsa con cierre hermético para evitar la contaminación hasta su uso posterior.

Las propiedades texturales del TCA se analizaron mediante fisisorción de N<sub>2</sub> a 196 °C utilizando un equipo ASAP 2020 de Micrometrics. Anteriormente, la muestra de TCA se desgasificó a 100 °C durante 12 h al vacío ( $\approx 10^{-2}$  Pa). La superficie específica se calculó aplicando la ecuación de Brunauer–Emmett–Teller (BET) a la isoterma de adsorción de N<sub>2</sub> en el intervalo de presión relativa  $0.05 < P/P_0 < 0.3$ . El volumen total de microporos,  $W_0$  (N<sub>2</sub>), se estimó aplicando la ecuación de Dubinin- Radushkevich a la isoterma de adsorción de N<sub>2</sub>. El tamaño promedio del microporo ( $L_0$ ) para ambos adsorbatos se estimó utilizando la ecuación de Stoeckli. El volumen total de poros se consideró como el volumen de N<sub>2</sub> adsorbido a  $P/P_0 = 0.95$ . El volumen de mesoporos ( $V_{\text{meso}}$ ) se obtuvo mediante la regla de Gurvich, y el diámetro promedio de mesoporos se calculó aplicando cálculos de DFT.

La morfología de la TCA se analizó mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) utilizando un microscopio SEM de alta resolución, modelo Helios NanoLab 600 de Thermo Fisher Scientific. La química superficial de la TCA se caracterizó mediante espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS) y espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR). Los espectros XPS se obtuvieron en un espectrómetro Thermo-Scientific K-Alpha utilizando radiación Al-K $\alpha$  (1486.6 eV). El equipo está equipado con un monocromador de doble cristal, que produce un punto de rayos X focalizado con un diámetro de 400  $\mu\text{m}$ . Los espectros de absorción IR se registraron en un espectrómetro FTIR Nicolet 20SXB

utilizando pastillas de muestra saturadas con KBr. Los espectros se registraron en la región de 0-4000  $\text{cm}^{-1}$ .

**Tabla 1.** Propiedades fisicoquímicas de la piridina.

Compuesto	Estructura molecular	Formula Molecular	pK <sub>a</sub>	D <sub>AB</sub> · 10 <sup>6</sup> cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> [28]	M.W. (g mol <sup>-1</sup> )	Talla X, Y, Z (nm)
Piridina		C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	5.25	7.7	79.1	0.636 0.638 0.335

## 6.2 Adsorbato

El adsorbato utilizado en este trabajo es piridina de grado analítico, que fue proporcionada por Fermont Company. Las propiedades fisicoquímicas se presentan en la Tabla 1. Las soluciones se prepararon a partir de una solución estándar de 5000 mg/L. La concentración de piridina en la solución se determinó mediante espectroscopia UV-visible. La absorbancia de la solución de piridina se midió en un espectrómetro, Shimadzu modelo UV-1800, a una longitud de onda de 249.5 nm. La concentración de piridina se estimó utilizando una curva de calibración de absorbancia frente a concentración, que se preparó a partir de 10 soluciones estándar con concentraciones comprendidas entre 1 y 40 mg/L.

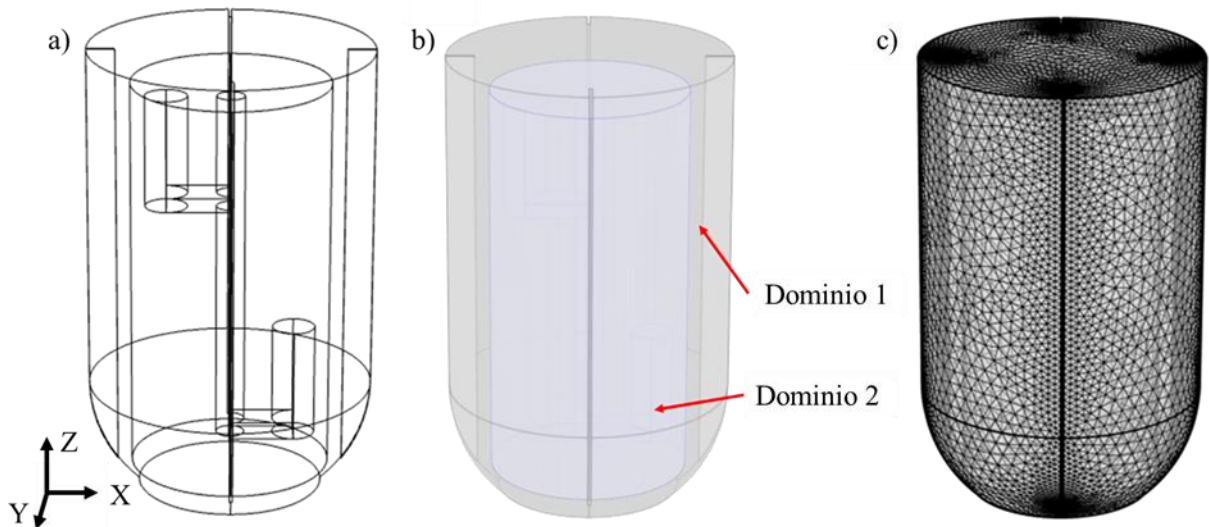
## 6.3 Obtención de la tasa de adsorción experimental

Las curvas de decaimiento de la concentración se obtuvieron empleando un adsorbedor de lote de tanque agitado, como se muestra en la Figura 1a. Este adsorbedor consiste en un matraz de fondo plano cuya tapa tiene tres agujeros por

el agujero central pasa el eje impulsor de la agitación, cuyos impulsores se sustituyeron por dos cilindros de acero inoxidable de paredes sólidas. A continuación, se colocó 1 L de la solución de piridina dentro del reactor. Los impulsores se recubrieron con TCA (1.3 g, aproximadamente). Los cilindros impulsores se sumergieron en la solución de piridina, y la agitación se programó en el rango de 30-200 RPM. Los experimentos se mantuvieron a pH = 7 y temperatura constante = 25 °C; se tomaron muestras de 1 mL de solución en diferentes momentos para determinar la concentración hasta que se alcanzó el equilibrio de adsorción. En nuestro análisis, el volumen de la solución se considera constante ya que no se eliminó más del 3% del volumen inicial. La masa de piridina adsorbida,  $q(t)$ , en función del tiempo se obtuvo mediante la siguiente ecuación:

$$q(t) = \frac{V}{m} [C_{A0} - C_A(t)] \quad (26)$$

Donde,  $C_A(t)$  es la concentración de piridina,  $C_{A0}$  es la concentración inicial de piridina  $V$  es el volumen del reactor y  $m$  es la masa del TCA.



**Figura 1.** Adsorbedor de lote de tanque agitado a) geometría 3D, b) dominios computacionales en la geometría, c) malla de arreglo tetraédrico.

---

## 6.4 Modelo matemático

Con el fin de elucidar las resistencias más importantes y los mecanismos dominantes en el sistema de adsorción, los datos de la velocidad de adsorción se interpretaron mediante dos métodos: (i) empleando el modelo cinético de Langmuir, y (ii) mediante el modelo advectivo-difusivo acoplado al modelo cinético de Langmuir considerando el flujo turbulento debido a la agitación en el interior del reactor. A continuación, se describen los fundamentos de estos dos modelos.

### 6.4.1 Ecuaciones de flujo de fluidos

Las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds (RANS) para fluidos incompresibles y newtonianos describen la hidrodinámica bajo fluctuaciones de velocidad que afectan flujo total de transporte de momento. La velocidad del campo vectorial del flujo promediada en el tiempo gobierna la hidrodinámica en la solución satisface la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{U} = -\nabla P - \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}^v + \boldsymbol{\tau}^t) + \rho \mathbf{g} \quad (27)$$

Donde:  $\mathbf{U}$  y  $P$  son la velocidad y la presión promediadas en el tiempo, respectivamente,  $\boldsymbol{\tau}^v$  es el tensor de estrés viscoso,  $\boldsymbol{\tau}^t$  es el tensor de estrés de Reynolds, que es una medida de la intensidad de la turbulencia,  $\rho$  es la densidad del fluido; y  $\nabla$  es el operador nabla.

La ecuación (27) debe resolverse mediante el acoplamiento con la ecuación de continuidad y el esquema para evaluar la correlación entre las fluctuaciones de velocidad. El balance de masa del fluido, también llamado ecuación de continuidad, describe las variaciones espaciales de la densidad del fluido. Para una densidad de fluido constante, el balance de masas es:



$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (28)$$

El tensor de estrés de Reynolds en la ecuación (27) considera las fluctuaciones de velocidad asociadas a la turbulencia en el fluido. Suponiendo la validez de la hipótesis de Boussinesq, el tensor de estrés de Reynolds puede escribirse equivalentemente como el tensor de estrés viscoso de acuerdo con la siguiente expresión.

$$\boldsymbol{\tau}' = -\mu_t \left[ \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right] + \frac{2}{3} \kappa \mathbf{I} \quad (29)$$

Donde:  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta y  $\kappa$  es la energía cinética turbulenta. Estos parámetros turbulentos se evalúan con el modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ , que consiste en el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\rho \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho (\mathbf{U} \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + P_\kappa - \rho \varepsilon \quad (30)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho (\mathbf{U} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (31)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (32)$$

$$P_\kappa = \mu_t \left[ \nabla \mathbf{U} : (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) \right] \quad (33)$$

Donde:  $\varepsilon$  representa la disipación turbulenta de energía cinética y  $P_\kappa$  cuantifica la generación de energía cinética debida al movimiento del fluido. El conjunto de ecuaciones (27) a (33) ayudan a resolver el problema de transporte de momento en el interior del adsorbedor y permite obtener el campo de velocidades que se acopla al problema de advección-difusión que se presenta a continuación. La solución de este conjunto de ecuaciones se complementa con las condiciones iniciales y de contorno apropiadas. Los coeficientes de las ecuaciones anteriores son:  $C_\mu = 0.09$ ,  $C_{\varepsilon 1} = 1.44$ ,  $C_{\varepsilon 2} = 1.92$ ,  $\sigma_\kappa = 1.0$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1.3$  [31]; estos han sido ampliamente utilizados para reactores agitados [32], [33].

---

### 6.4.2 Modelo advectivo-difusivo (MAD)

El transporte de soluto en el interior del adsorbedor viene dado por el balance de masa en el dominio del fluido considerando que la ley de Fick es válida. De esta forma, el transporte de masa de piridina esta dado por:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} - \nabla \cdot (D_{AB} \nabla C_A) + \mathbf{U} \cdot \nabla C_A = 0 \quad (34)$$

Donde:  $D_{AB}$  es el coeficiente de difusión molecular de piridina en agua y  $\mathbf{U}$  es el vector de velocidad dado por la (27).

La ecuación (34) se resuelve considerando que no hay flujo de masa excepto por los impulsores en los límites del adsorbedor, es decir:

$$-\mathbf{n} \cdot (-D_{AB} \nabla C_A) = 0 \quad (35)$$

Y la condición inicial es:

$$t = 0; \quad C_A = C_{A0} \quad (36)$$

En el impulsor, se aplica la siguiente condición frontera:

$$-\mathbf{n} \cdot (-D_{AB} \nabla C_A + \mathbf{U} C_A) = f(C_A) \quad (37)$$

Esta expresión significa que en la superficie del impulsor el flujo de masa de soluto es igual a la cinética heterogénea de tipo Langmuir; la cantidad de soluto que llega por difusión y advección a la interfase solución-impulsor queda atrapada (desaparece) en la tela como si tuviera lugar una reacción química heterogénea.

### 6.4.3 Modelo Cinético de Langmuir (MCL)

Este modelo se basa en los principios propuestos por Langmuir para la adsorción monocapa [34], [35], donde la siguiente ecuación proporciona la tasa de adsorción en la fase líquida:

$$\frac{dq(t)}{dt} = k_{ad} C_A(t) [q_m - q(t)] - k_{des} q(t) \quad (38)$$

Donde  $k_{ad}$  y  $k_{des}$  son las constantes cinéticas de adsorción y desorción, respectivamente. El primer término del lado derecho de la ecuación (38) representa el proceso de adsorción, mientras que el segundo término representa el proceso de desorción. En equilibrio, la la velocidad global de adsorción es igual a cero; por lo tanto, la tasa de adsorción es igual a la tasa de desorción, lo que conduce a las siguientes condiciones:

$$\frac{dq(t)}{dt} = 0; \quad q(t) = q_e; \quad C_A(t) = C_{Ae} \quad (39)$$

Sustituyendo la ecuación (39) en (38) y reordenando los términos, obtenemos la ecuación (40) que representa la isoterma de adsorción de Langmuir:

$$q_e = \frac{q_m K C_{Ae}}{1 + K C_{Ae}} \quad (40)$$

Donde  $q_m$  es la capacidad máxima de adsorción y  $K = k_{ad}/k_{des}$  que representa la constante de equilibrio de adsorción.

Introduciendo el balance de masa (26) la velocidad de adsorción puede expresarse en términos de la concentración. Ahora, definiendo  $\alpha = V/m$  y diferenciando la ecuación (26) con respecto al tiempo, tenemos que:

$$\frac{dq(t)}{dt} = -\alpha \frac{dC_A(t)}{dt} \quad (41)$$

Este resultado se sustituye en la ecuación (38) junto con (26) para obtener:

$$-\frac{dC_A(t)}{dt} = k_{ad} [C_A(t)^2 + (\beta - C_{A0} + K') C_A(t) - K' C_{A0}] \quad (42)$$

Donde  $K' = 1/K$  y  $\beta = q_m/\alpha$ . La ecuación (42) representa el modelo cinético de Langmuir y se utiliza como condición de contorno en la ecuación (37), es decir:

$$f(C_A) = k_{ad} [C_A(t)^2 + (\beta - C_{A0} + K') C_A(t) - K' C_{A0}] \quad (43)$$

---

## 6.5 Características Computacionales.

Las ecuaciones que componen el MAD se resolvieron utilizando el software comercial Comsol Multiphysics, en el que la geometría del adsorbedor (ver Figura 1b) se creó mediante dos dominios: uno fijo (cilindro externo) y otro rotatorio (cilindro interno) formando un ensamblaje entre ambos dominios. Comsol Multiphysics se basa en subrutinas de elementos finitos. Ambos dominios, interno y externo, se acoplan mediante una condición de continuidad de flujo para las diferentes físicas en los contornos del ensamblaje. El modelo de turbulencia  $\kappa$ - $\epsilon$  se incorporó para resolver la hidrodinámica dentro del reactor; mientras que, el transporte de masa de soluto se programó mediante un módulo general de ecuaciones diferenciales parciales. La hidrodinámica y el transporte de masa se resolvieron en estudios separados utilizando el método numérico de diferenciación hacia atrás (BDF); ambos estudios se realizaron utilizando un revolvedor segregado. Se utilizó una malla de arreglo tetraédrico para la solución de la geometría (Figura 1c), creando 300.791 elementos de dominio, 2.690 elementos de contorno, 1.616 elementos de borde y 76 elementos de vértice. Esta densidad de malla es suficiente para obtener resultados coherentes y precisos, como se compara a continuación con los datos experimentales.

---

## 7 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

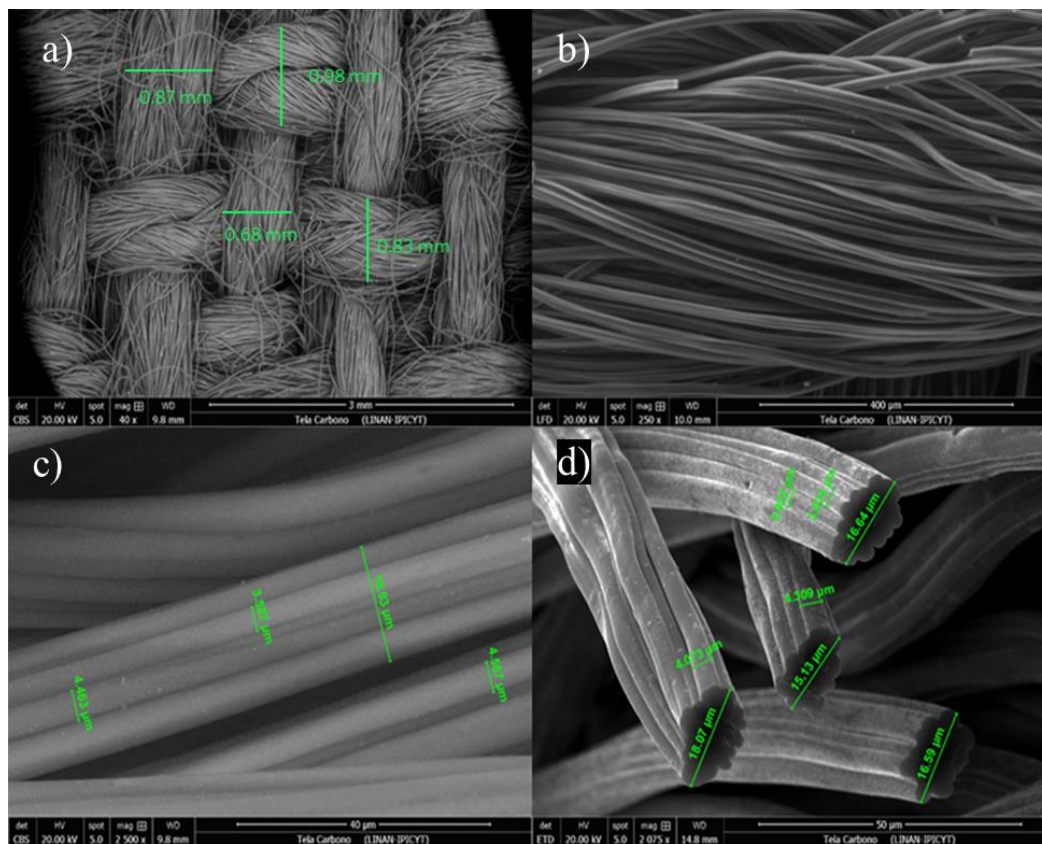
### 7.1 Caracterización textural, química y morfológica del TCA

La morfología de la muestra de TCA se caracterizó por SEM y las imágenes de las características se representan en la Figura 2. La TCA está formado por haces de fibras enroscadas longitudinalmente (Figura 2b) de unos 0.85 mm, que se enroscan transversalmente y forman una estructura de textura ordenada (Figura 2a). La ampliación de un haz de fibras (Figura 2c, d) revela que está formado por fibras individuales de unos 16.5  $\mu\text{m}$  de diámetro, que a su vez consisten en fibras individuales fusionadas de 3-4  $\mu\text{m}$  de diámetro.

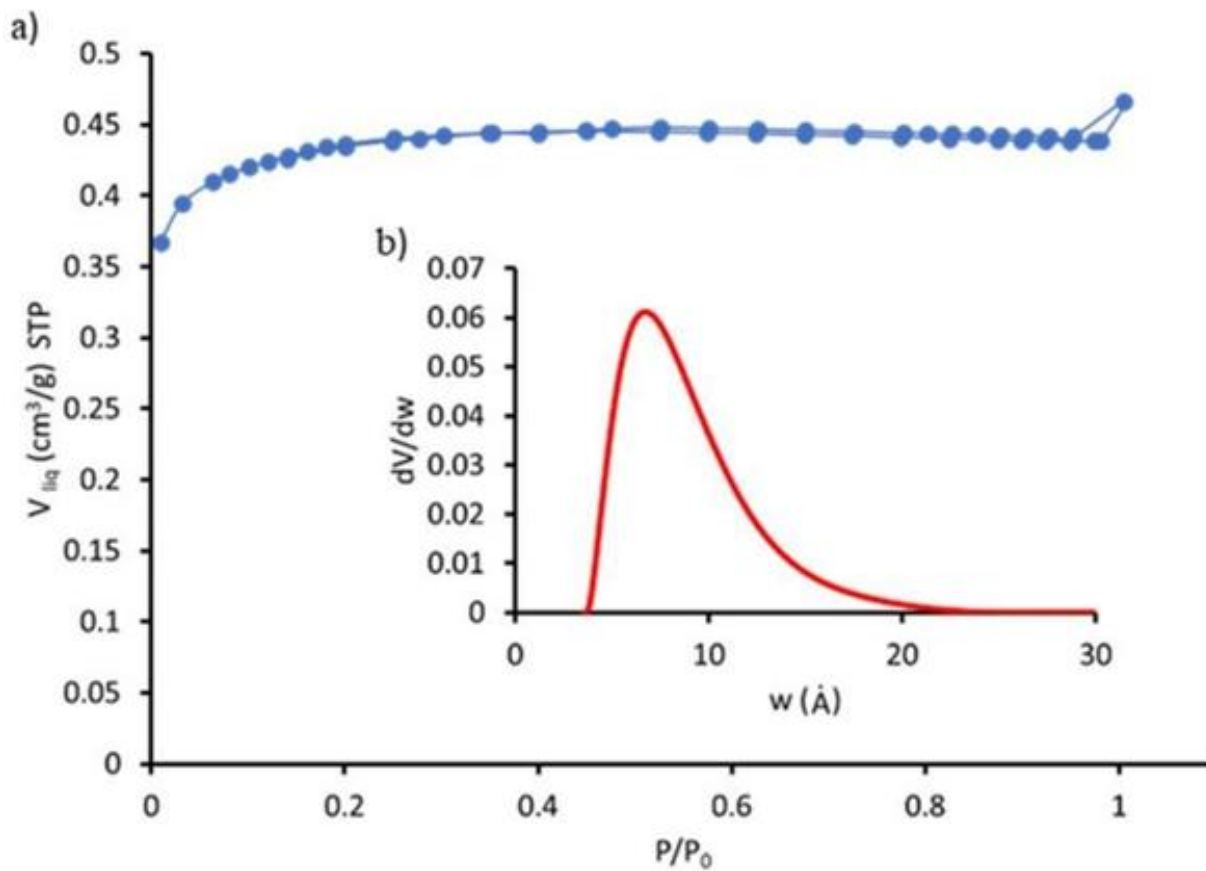
Las propiedades texturales de la TCA se analizaron a partir de la isoterma de adsorción/desorción de  $\text{N}_2$ , como se muestra en la Figura 3. En esta isoterma se observa un comportamiento de tipo I-B, característico de los materiales microporosos (se adsorbe una gran cantidad de  $\text{N}_2$  a bajas presiones). Además, se observa un ligero bucle de histéresis de tipo H4, que es representativo de los sólidos con poros con rendijas estrechas. Los datos experimentales ayudaron a determinar que para el material estudiado el volumen total de poros fue de  $0.45 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$ . La ecuación BET estableció un área específica de  $880 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ , con un volumen de microporos de  $0.44 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$ . La distribución del tamaño de los poros que se presenta en la Figura 3 se obtuvo mediante el método DFT, se observa una distribución unimodal estrecha en la región microporosa.

La química de la superficie se analizó mediante XPS y FTIR. Las regiones espectrales C1s, O1s, y N1s se representan en la Figura 4 y los datos por deconvolución de estas regiones se recogen en la Tabla 2. La región espectral C1s puede ajustarse utilizando seis picos: a 284.6 eV atribuidos al carbono amorfo no oxigenado, a 285.6, 286.3, 287.3 y 288.9 eV asignados a grupos alcohol y éter (C-O), carbonilo (C=O), carboxilo (COO-) y carbonato, respectivamente, y un pico débil

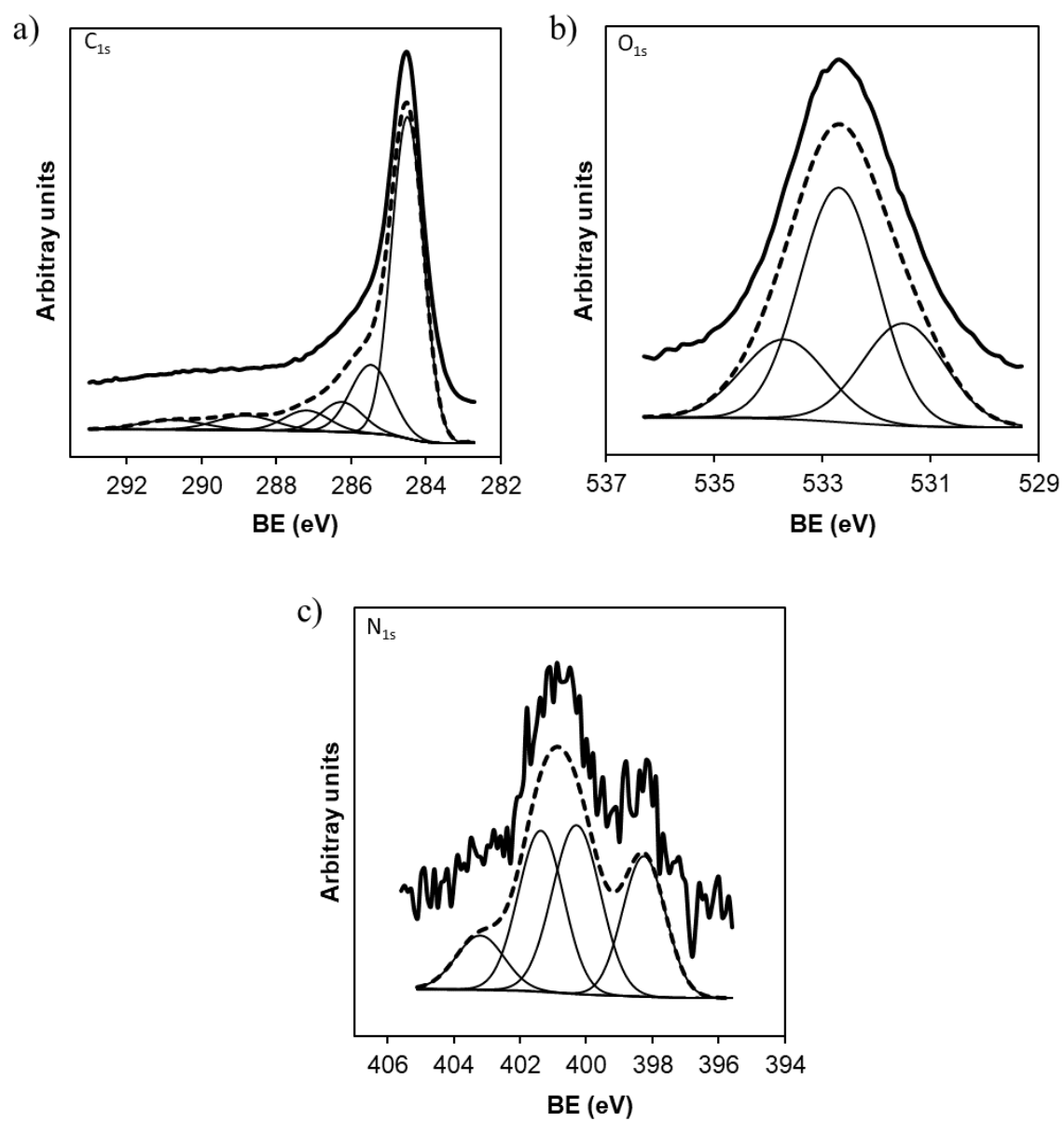
encontrado a 291.4 eV asignado a excitaciones  $\pi$ -plasmónicas. Por su parte, la región O1s muestra tres picos centrados en 531.5 eV, característicos de un grupo hidroxilo enlazado (-OH), o bien de un grupo oxigenado (-OH) como las cetonas (C=O) en la superficie del carbono [20]; a 532.7 eV que corresponde a ácidos, anhídridos, lactonas o grupos éter (C-O-C), y a 533.7 atribuido al oxígeno quimisorbido. La región espectral N1s muestra cuatro tipos de funcionalidades del nitrógeno: piridínico-N (N-6) a 398.3 eV, pirrólico-N o piridona- N (N-5) a 400.3 eV, y nitrógeno cuaternario (N-Q) a 401.4 eV, y N-óxido a 403.2 eV. Analizando la composición superficial de la muestra, la superficie del TCA está compuesta por un 16.8 % en peso de O y un 1.1 % en peso de N.



**Figura 2.** Microfotografías de la tela de carbono activado: (a) Estructura de textura ordenada TCA, (b) Filamentos de fibras retorcidas longitudinalmente, (c, d) imagen ampliada de la TCA.



**Figura 3.** a) Isotherma de adsorción-desorción de  $\text{N}_2$  y b) distribución del tamaño de los poros.



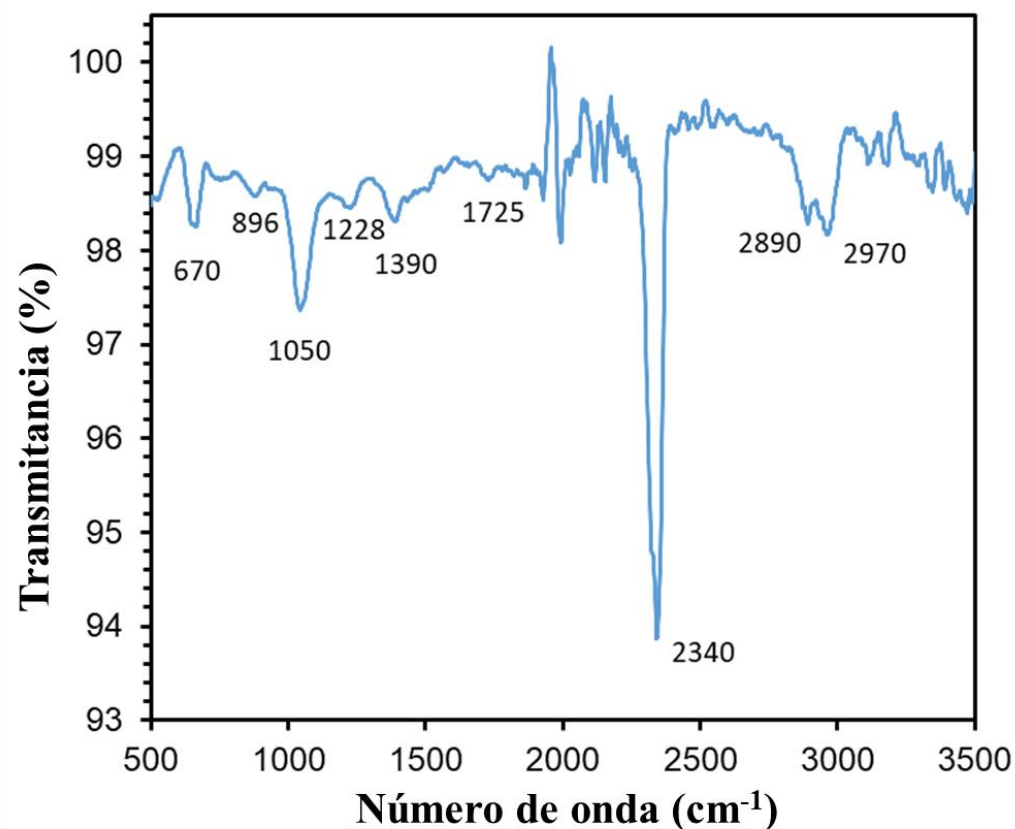
**Figura 4.** a) Regiones espectrales  $C_{1s}$ , b)  $O_{1s}$  y c)  $N_{1s}$  de TCA.



**Tabla 2.** Resultados XPS de la TCA: los contenidos superficiales de C, O y N (CXPS, OXPS y NXPS), la energía de enlace y el porcentaje de los componentes utilizados para ajustar las regiones espectrales C1s, O1s y N1ps.

<b>BE (eV)</b> <b>C<sub>1s</sub></b>	<b>%</b>	<b>BE (eV)</b> <b>O<sub>1s</sub></b>	<b>%</b>	<b>BE (eV)</b> <b>N<sub>1s</sub></b>	<b>%</b>	<b>C<sub>XPS</sub></b> <b>%W</b>	<b>O<sub>XPS</sub></b> <b>%W</b>	<b>N<sub>XPS</sub></b> <b>%W</b>
248.6	61	531.5	25	398.3	25	82.1	16.8	1.1
285.6	17	532.7	55	400.3	34			
286.3	7	533.7	20	401.4	30			
287.3	5			403.2	11			
288.9	5							
290.9	4							

La química de la superficie también se caracterizó por FTIR y los datos se recogen en la Figura 5. Los picos a 670 y 1050  $\text{cm}^{-1}$  se asignan a la presencia del anillo aromático. Las bandas en torno a 1165 y 1230  $\text{cm}^{-1}$  pueden asignarse a los modos de estiramiento de las especies C-O en ácidos, ésteres o éteres [36]. La banda en torno a 1390  $\text{cm}^{-1}$  indica la presencia de especies de nitrógeno C-N en la estructura del carbono, lo que corrobora los resultados de la XPS. La banda a 1725  $\text{cm}^{-1}$  puede asignarse a la vibración de estiramiento de C=O en el ácido carboxílico y el grupo lactona. Obsérvese también que aparece una banda intensa a 2325-2368  $\text{cm}^{-1}$ , atribuida al enlace -OH perteneciente a los grupos carboxílicos [37]. Las bandas a 2890 y 2970  $\text{cm}^{-1}$  se asignan a los modos de estiramiento de los enlaces C-H.



**Figura 5.** Espectros FTIR de la tela de carbón activado.

## 7.2 Equilibrio de adsorción

Se realizaron diecisiete experimentos variando la velocidad de agitación a 30, 50, 100, 150 y 200 RPM, para determinar los efectos de la velocidad de agitación en las curvas de decaimiento de la concentración. La concentración inicial de piridina se varió entre 100 y 500 mg/L a velocidades de agitación de 30, 100 y 200 RPM. Todas las corridas experimentales fueron simuladas empleando las formulaciones MCL y MAD, donde los parámetros  $k_{ad}$  y  $k_{ad}'$  necesitan ser optimizados para coincidir con las curvas experimentales. Las características de los experimentos se resumen en la Tabla 3, junto con los valores de los parámetros empleados en el procedimiento de optimización del modelo. La optimización de los parámetros se realizó mediante

---

la siguiente función objetivo para disminuir el porcentaje de desviación. En la ecuación (44)  $q_{i_{obs}}$  representa los datos experimentales y  $q_{i_{pred}}$  los datos predichos a partir del modelo matemático.

$$\% D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{q_{i_{obs}} - q_{i_{pred}}}{q_{i_{obs}}} \right| \times 100 \quad (44)$$

### 7.3 Análisis con el modelo cinético de Langmuir (MCL)

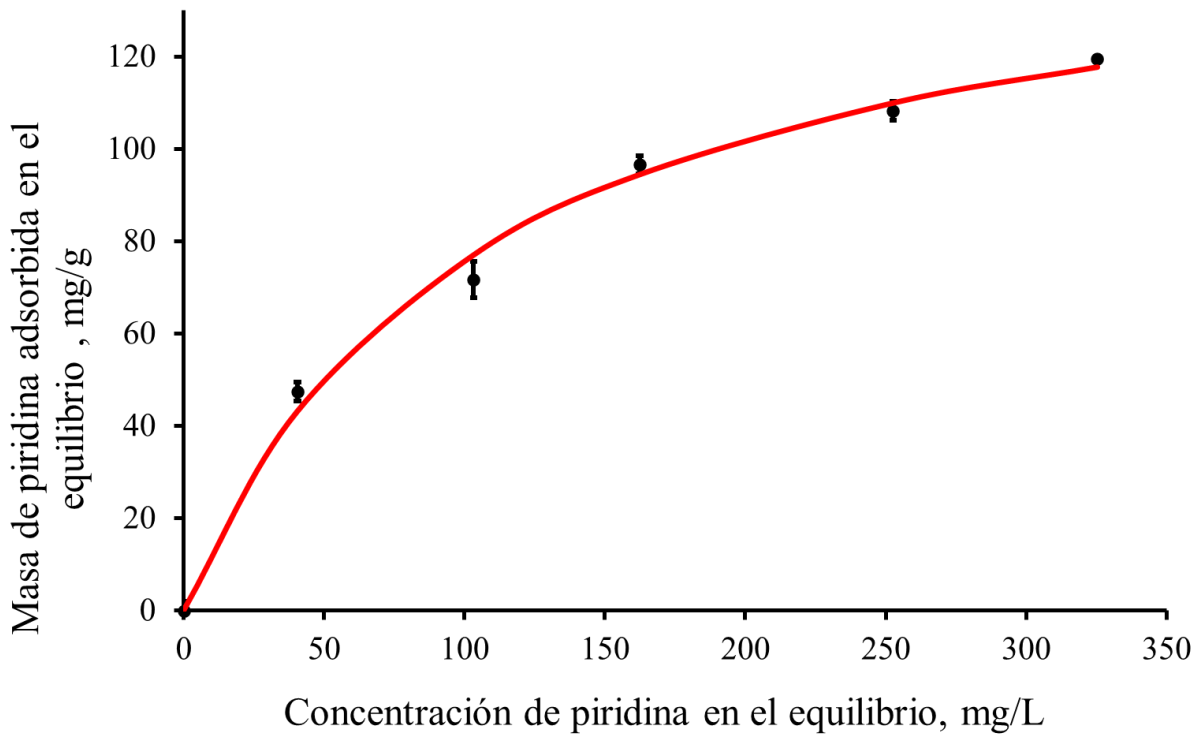
Los datos de equilibrio de adsorción se obtuvieron a diferentes concentraciones iniciales y luego se utilizaron para construir la isoterma de Langmuir dada por la Ecuación (40). La isoterma de Langmuir se ajustó utilizando el programa STATISTICA minimizando la siguiente función objetivo:

$$E(k_{ad}, k'_{ad}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[ q_{obs}^i - q_{pred}^i(k_{ad}, k'_{ad}) \right]^2 \quad (45)$$

Los datos experimentales y la predicción por el modelo, junto con los parámetros ajustados, se muestran en la Figura 6. En general, el modelo de isoterma de Langmuir predice bien las concentraciones de equilibrio, con un error inferior al 5%. Además, los parámetros de la isoterma de Langmuir se utilizan en los modelos MCL y MAD para ajustarse a las curvas de decaimiento experimentales.

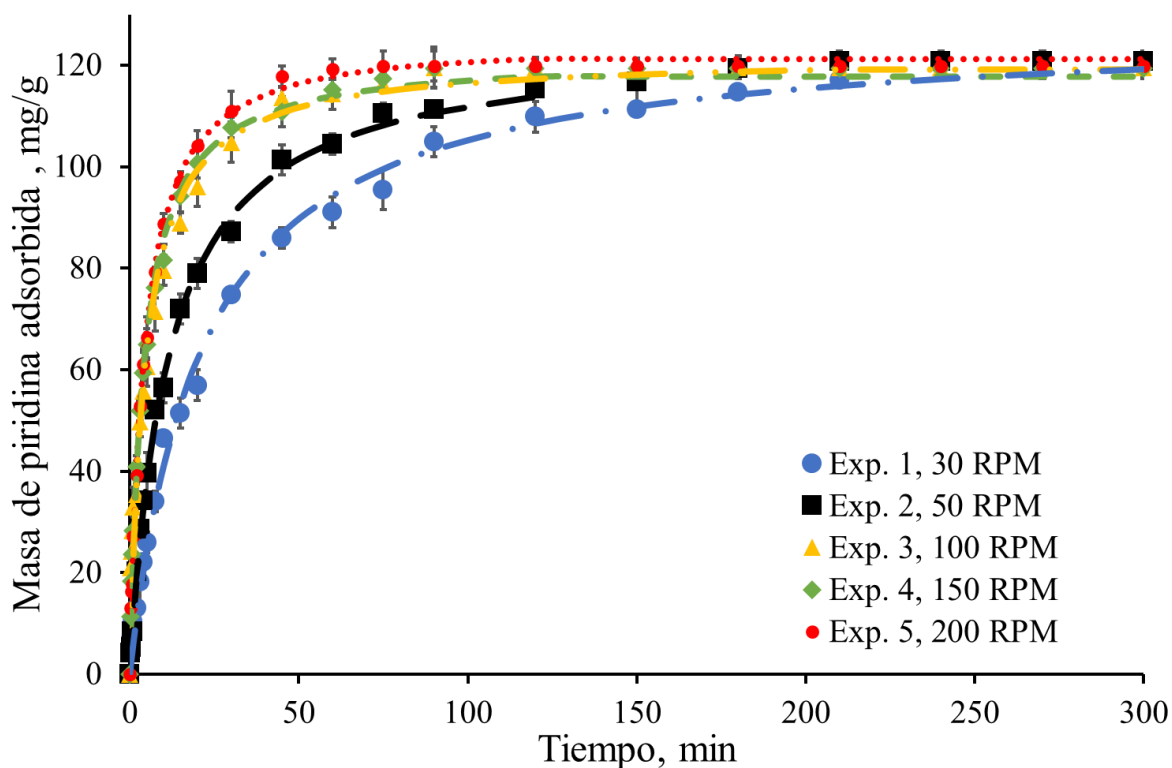
**Tabla 3.** Parámetros cinéticos y condiciones experimentales utilizados para obtener la velocidad de adsorción de piridina sobre TCA.

N. EX P	RPM	C <sub>A0</sub> mg L <sup>-1</sup>	q <sub>e</sub> exp mg g <sup>-1</sup>	MCL			MAD		
				q <sub>e</sub> cal	k <sub>ad</sub> × 10 <sup>4</sup>	%D	q <sub>e</sub> cal	k <sub>ad</sub> '	%D
				mg g <sup>-1</sup>	L mg <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>		mg g <sup>-1</sup>	cm <sup>4</sup> (mg s) <sup>-1</sup>	
1	30	487	120	119	2.86	0.7	118	0.0135	1.2
2	50	487	120	119	5.49	4.6	119	0.018	1.2
3	100	487	120	119	11.3	1	119	0.017	4.1
4	150	487	120	118	17.02	6.3	119	0.02	1.4
5	200	487	120	121	14.9	4.9	120	0.025	0.9
6	30	99	47	44	2.44	4.9	46	0.118	5.6
7	30	198	71	71	6.09	1.4	72	0.01	3.5
8	30	295	98	99	2.78	0.5	98	0.015	3.4
9	30	385	108	105	0.73	1.7	108	0.011	2.7
10	100	99	47	48	7.66	1.4	48	1.2	6.7
11	100	198	71	72	7.68	3.2	73	1.5	6.5
12	100	295	98	95	9.16	1.3	95	1.9	4.9
13	100	385	108	106	6.58	0.8	107	2	2.6
14	200	99	47	46	20.9	7.2	47	0.0255	5.6
15	200	198	71	73	12.5	3.8	72	0.021	3.5
16	200	295	98	96	14.7	2.6	95	0.0175	3
17	200	385	108	106	16.3	3.3	107	0.0211	2.7



**Figura 6.** Datos de equilibrio de adsorción de piridina. Los símbolos representan los datos experimentales y la línea continua las predicciones del modelo de isoterma de Langmuir.

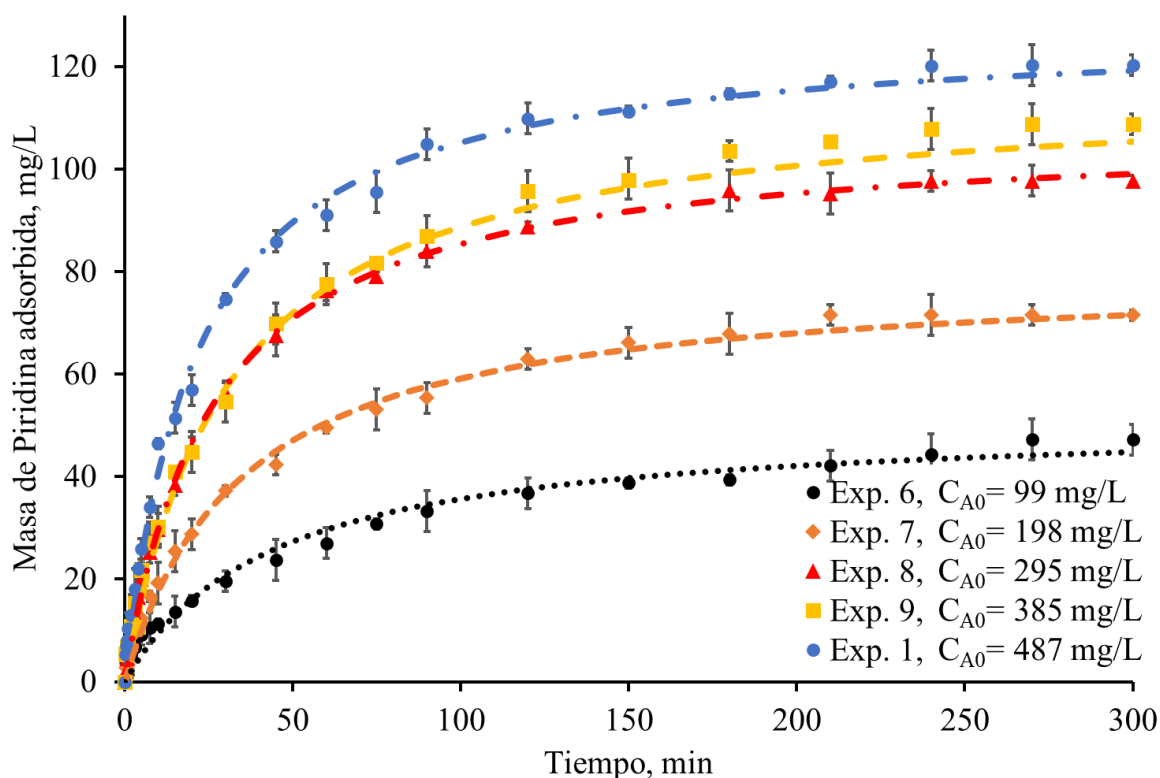
La Figura 7 muestra las curvas de velocidad de adsorción de los experimentos 1-5 a diferentes velocidades de agitación. Se observa que la capacidad de adsorción es similar para todos los experimentos, alrededor de 120 mg/g; sin embargo, el efecto de la hidrodinámica en cada curva de velocidad de adsorción es diferente cuando se analiza el tiempo de equilibrio; el equilibrio se alcanza lentamente para aquellos experimentos a velocidades de agitación pequeñas, caso contrario se observa para las velocidades de agitación elevadas. Por ejemplo, el experimento 5 realizado a 200 RPM alcanzó el equilibrio después de aproximadamente 50 min, mientras que el experimento 1 a 30 RPM alcanzó el equilibrio alrededor de 210 min, es decir, tres veces más que el caso del experimento 5. En los experimentos 2, 3 y 4, el equilibrio de adsorción se alcanzó cerca de 180, 150 y 90 minutos, respectivamente.



**Figura 7.** Variación de la capacidad de adsorción de la TCA en función de la velocidad de agitación. La predicción mediante el modelo cinético de Langmuir se representa con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.

En la Figura 7, se muestran las predicciones del MCL para los experimentos 1-5 con una máxima capacidad de adsorción en el equilibrio de  $120 \text{ mg g}^{-1}$ . El parámetro ajustado  $k_{ad}$  osciló entre  $2.86 \times 10^{-4}$  a  $17.02 \times 10^{-4} \text{ L (mg s)}^{-1}$ . El valor máximo de  $k_{ad}$  se encontró a 150 RPM y luego para el de 200 RPM. El  $k_{ad}$  mínimo corresponde a 30 RPM. Teniendo en cuenta que el MCL no considera el transporte de masa en la solución, sino sólo la adsorción en los sitios activos del adsorbente, ninguno de los parámetros cuantifica la hidrodinámica. Así pues, este fenómeno se incluye implícitamente en las variaciones de la constante cinética  $k_{ad}$ . Esto puede explicar por qué el parámetro  $k_{ad}$  varía conforme cambia la velocidad de agitación. Para los experimentos representados en la Figura 7, los porcentajes de desviación obtenidos

a partir de la Ecuación (44) se recogen en la Tabla 3; todos son inferiores al 5% excepto para el Exp. 4. (%D = 6,3), por lo que podemos afirmar que el MCL predice razonablemente bien los datos experimentales de velocidad de adsorción para el sistema Piridina-TCA.



**Figura 8.** Variación de la capacidad de adsorción de la TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 30 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir están representadas por líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.

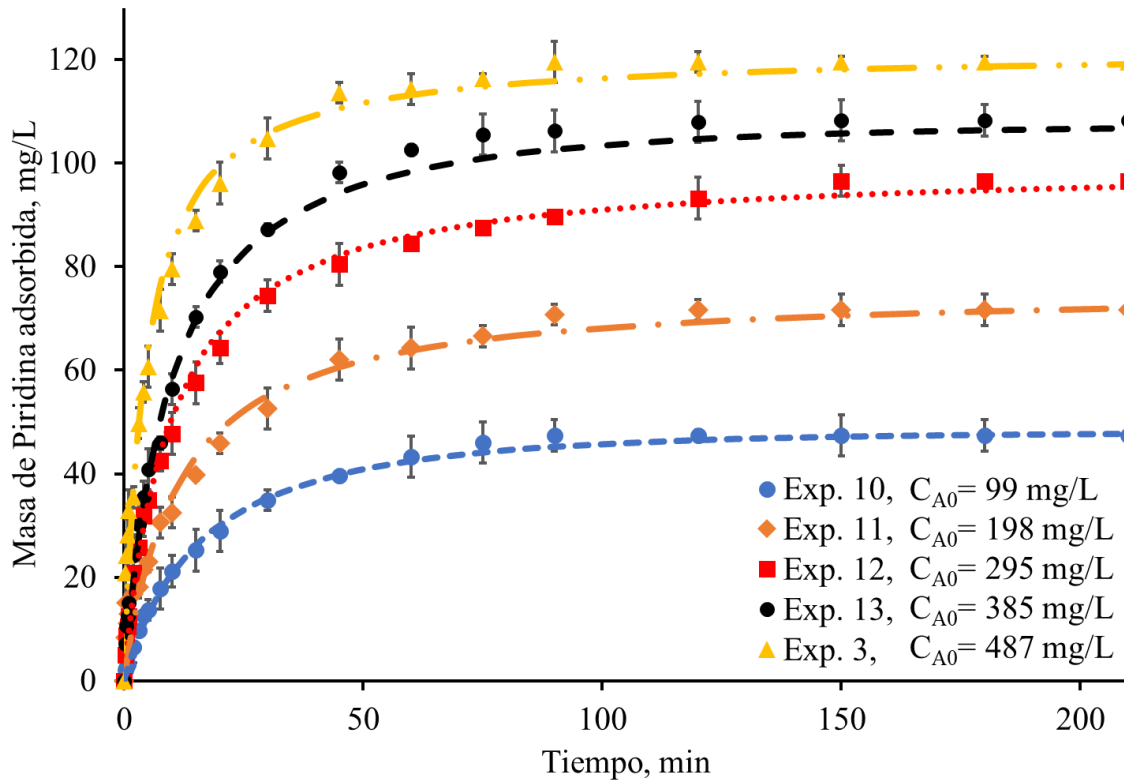
En la Figura 8, trazamos la velocidad de adsorción a diferentes concentraciones iniciales que van de 99 a 487 mg/L, fijando la velocidad de agitación en 30 RPM. La concentración inicial juega un papel clave en el equilibrio de adsorción; cuanto mayor es la concentración inicial, más rápido se alcanza el equilibrio. En la Figura 8, el experimento 1 (concentración inicial = 487 mg/L) alcanza el equilibrio después

---

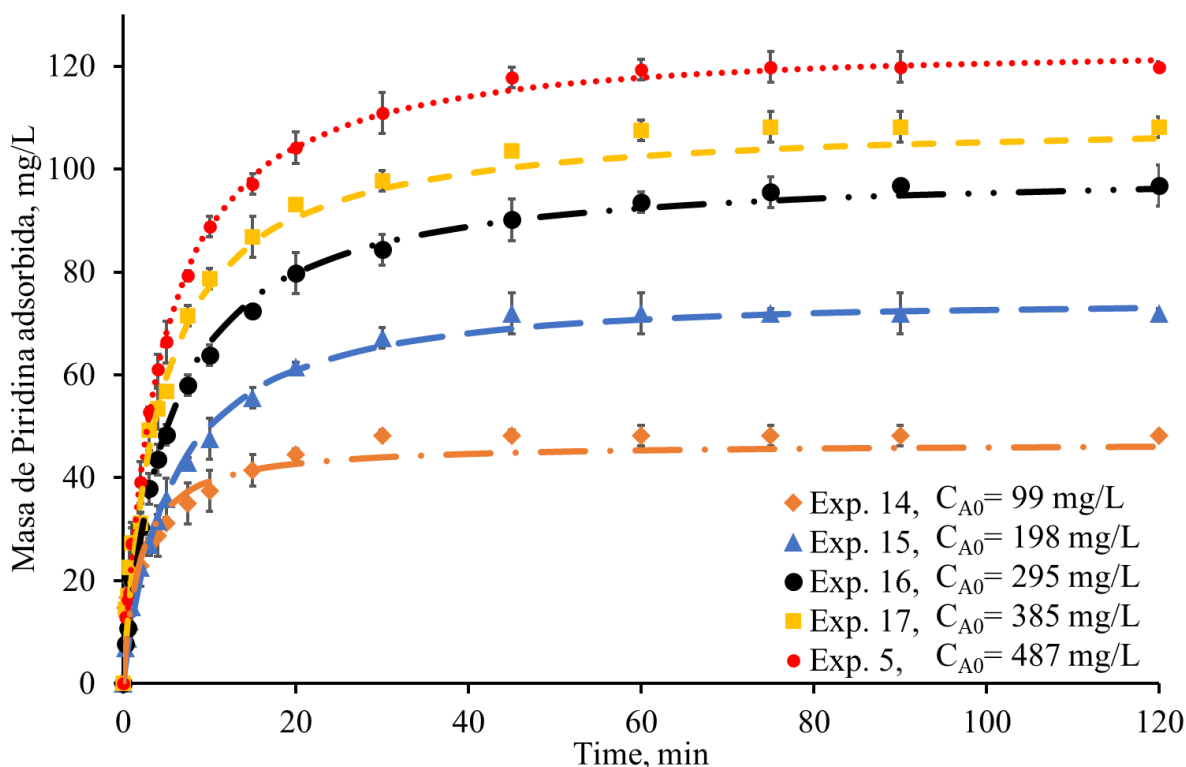
de aproximadamente 210 min, mientras que el experimento 6 (concentración inicial = 99 mg/L) tarda más de 300 min en alcanzar el equilibrio. El mayor gradiente de concentración entre la solución y la superficie del material adsorbente explica este efecto, ya que genera un flujo de masa más rápido hacia la tela de carbón. El parámetro ajustado  $k_{ad}$  oscila entre  $0,73 \times 10^{-4}$  a  $6,09 \times 10^{-4}$  L (mg s)<sup>-1</sup> en estos casos. Según la Tabla 3, el parámetro  $k_{ad}$  parece ser constante alrededor de  $2.7 \times 10^{-4}$  L (mg s)<sup>-1</sup> para los experimentos: 1, 6 y 8, lo que puede denotar el efecto de la concentración inicial al fijar la velocidad de agitación. Basándonos en los cálculos de la desviación porcentual, afirmamos que el MCL interpreta bien los datos experimentales.

En las Figuras 9 y 10, se analiza el efecto de la concentración inicial sobre la capacidad de adsorción a 100 y 200 RPM, respectivamente. Se observa que la piridina adsorbida en el equilibrio es la misma que para los casos correspondientes de la Figura 8. Esto significa físicamente que el equilibrio de adsorción es independiente de la velocidad de agitación, pero depende significativamente de la concentración inicial de soluto. Comparando los experimentos. 10 (Figura 9) y 14 (Figura 10) (ambos con concentración inicial = 99 mg/L), se observa que la velocidad de adsorción se ve afectada por la velocidad de agitación, ya que hay una diferencia de alrededor de 80 min para alcanzar el equilibrio; en otras palabras, el proceso de adsorción a 100 RPM es 1,6 veces más lento que el de 200 RPM. El mismo efecto se observa al comparar los pares de experimentos: 11 y 15, 12 y 16, 13 y 17, y 3 y 5, cuyas concentraciones iniciales son: 198, 295, 385 y 487 mg/L, respectivamente. En esos casos, el tiempo necesario para alcanzar el equilibrio osciló entre 80 y 120 min para los experimentos con concentraciones iniciales más elevadas.





**Figura 9.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 100 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir son representadas por líneas discontinuas, mientras que los símbolos discretos corresponden a los datos experimentales.



**Figura 10.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 200 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir están representadas por líneas discontinuas, mientras que los símbolos discretos corresponden a los datos experimentales.

#### 7.4 Análisis con el Modelo Advectivo Difusivo (MAD)

Como se ha comentado anteriormente, resolvimos el MAD utilizando una geometría 3D que representa un procedimiento computacional muy intensivo. Es la razón principal por la que este método de modelización no se utiliza habitualmente para simular experimentos de adsorción. En este caso, realizamos simulaciones numéricas para velocidades de agitación 30, 50, 100, 150, y 200 RPM que, de acuerdo con la definición del número de Reynolds en la Ecuación (46), el régimen de flujo se clasifica como de transición para 30, 50, 100 RPM, mientras que las condiciones turbulentas se cumplen para 150 y 200 RPM. Para los regímenes

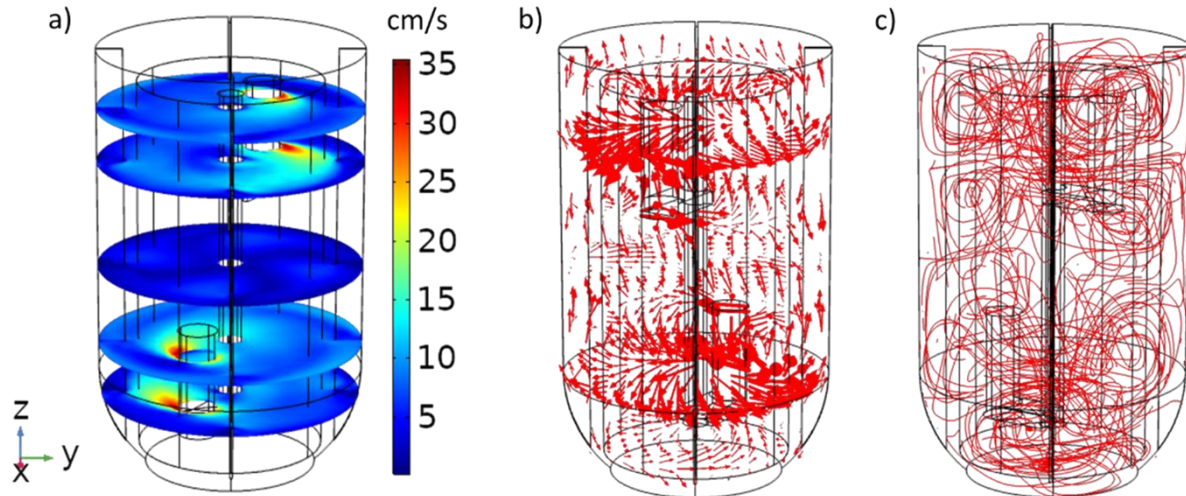
---

turbulentos, es necesario incorporar la viscosidad turbulenta y ecuaciones adicionales que den cuenta de la energía cinética y la tasa de disipación de la energía. Así pues, se emplea el modelo RANS en el entorno del programa Comsol. Recordamos que estamos tratando con el cálculo de velocidades locales y presión dentro del adsorbedor agitado, y, además, resoluciones más altas de trayectorias de flujo, concentración, y flujos de masa pueden ser proporcionados a través de la solución del MAD. En la ecuación (46) , N representa la velocidad de agitación y D el diámetro del impulsor.

$$Re = \frac{\rho N D^2}{\mu} \quad (46)$$

En la Figura 11 a) se representa la velocidad local del fluido en cinco planos de corte (cm/s) en el plano (X, Y). se puede ver que la velocidad máxima se alcanza en las proximidades de los impulsores para las partes superior e inferior del adsorbedor, donde las velocidades máximas son similares. La zona con la velocidad más baja es la del centro del adsorbedor, lo que se debe a la disposición geométrica del eje del impulsor. Curiosamente, en la Figura 11 a) se observan capas límite hidrodinámicas alrededor del adsorbente TCA, que siguen principalmente la trayectoria angular impulsada por la disposición de la agitación. Esta disposición contribuye a homogeneizar, en cierta medida, la velocidad local en el interior del adsorbente. Esto puede verificarse con los gráficos del plano de corte y los vectores de velocidad representados por las flechas rojas que se muestran en la Figura 11 b), donde las longitudes de estos vectores son bastante similares y aumentan cerca de los impulsores del adsorbedor. Otra variable importante que trazamos son las líneas de corriente locales del fluido, que nos ayudan a determinar la trayectoria seguida por las moléculas de fluido. Las líneas de corriente se representan en la Figura 11 c); estas líneas siguen una distribución completa dentro del adsorbedor con trayectorias a lo largo de todas las direcciones. Esto significa que el uso del modelo hidrodinámico puede elucidar el comportamiento del fluido cuando la velocidad de un elemento de fluido varía tanto en magnitud como en posición dentro

del adsorbedor.



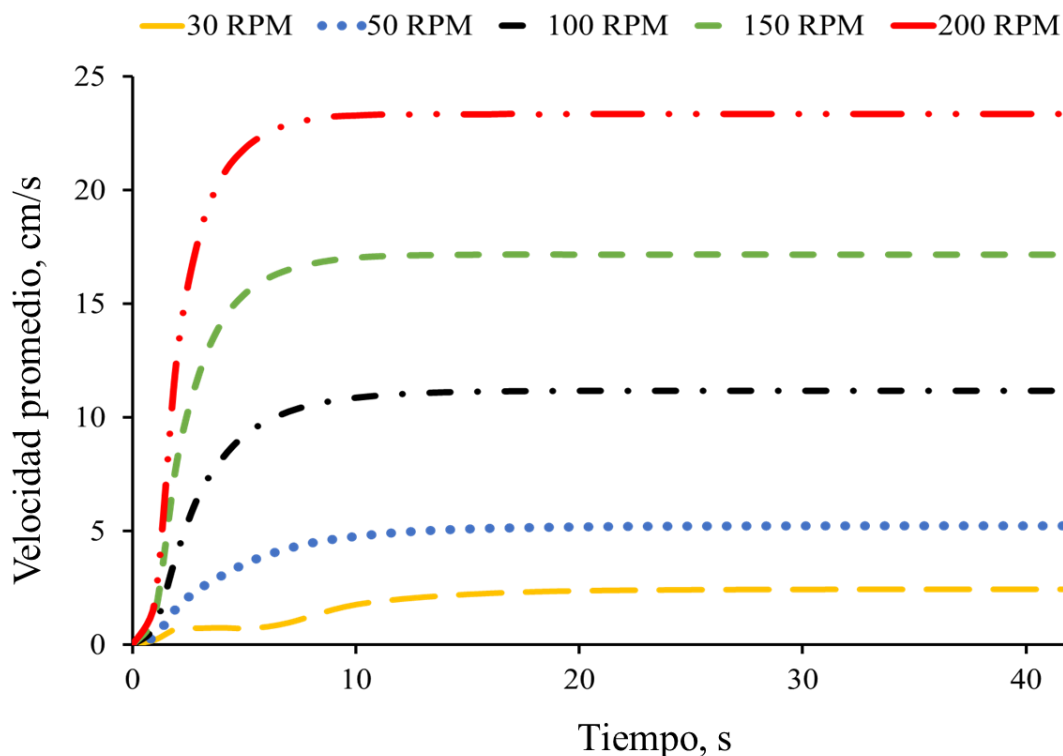
**Figura 11.** Variables hidrodinámicas en el adsorbedor a 100 RPM: a) perfiles de velocidad en el plano (X, Y). b) vectores de velocidad, c) líneas de flujo.

Las líneas de flujo también contribuyen a determinar el momento en que se alcanza el estado estacionario, y esto ocurre cuando los elementos del fluido que pasan por una coordenada (X, Y, Z) determinada siguen la misma trayectoria a medida que transcurre el tiempo; decimos entonces que se cumple el equilibrio hidrodinámico en el interior del adsorbedor. Alcanzar el equilibrio hidrodinámico no significa que también se alcance el equilibrio en el transporte de masa. La dinámica de ambos fenómenos está desacoplada y se rige por parámetros físicos y escalas temporales diferentes; el equilibrio hidrodinámico tiene lugar en un periodo corto en comparación con el equilibrio de masa. Una manera visual y cuantitativa de verificar el equilibrio hidrodinámico es trazando la velocidad media de todo el adsorbedor frente al tiempo y ver que no hay cambios en la velocidad media después de un período. Este hecho se observa en las gráficas de la Figura 12; allí notamos que el tiempo de equilibrio depende de la velocidad de agitación: a mayor velocidad de

---

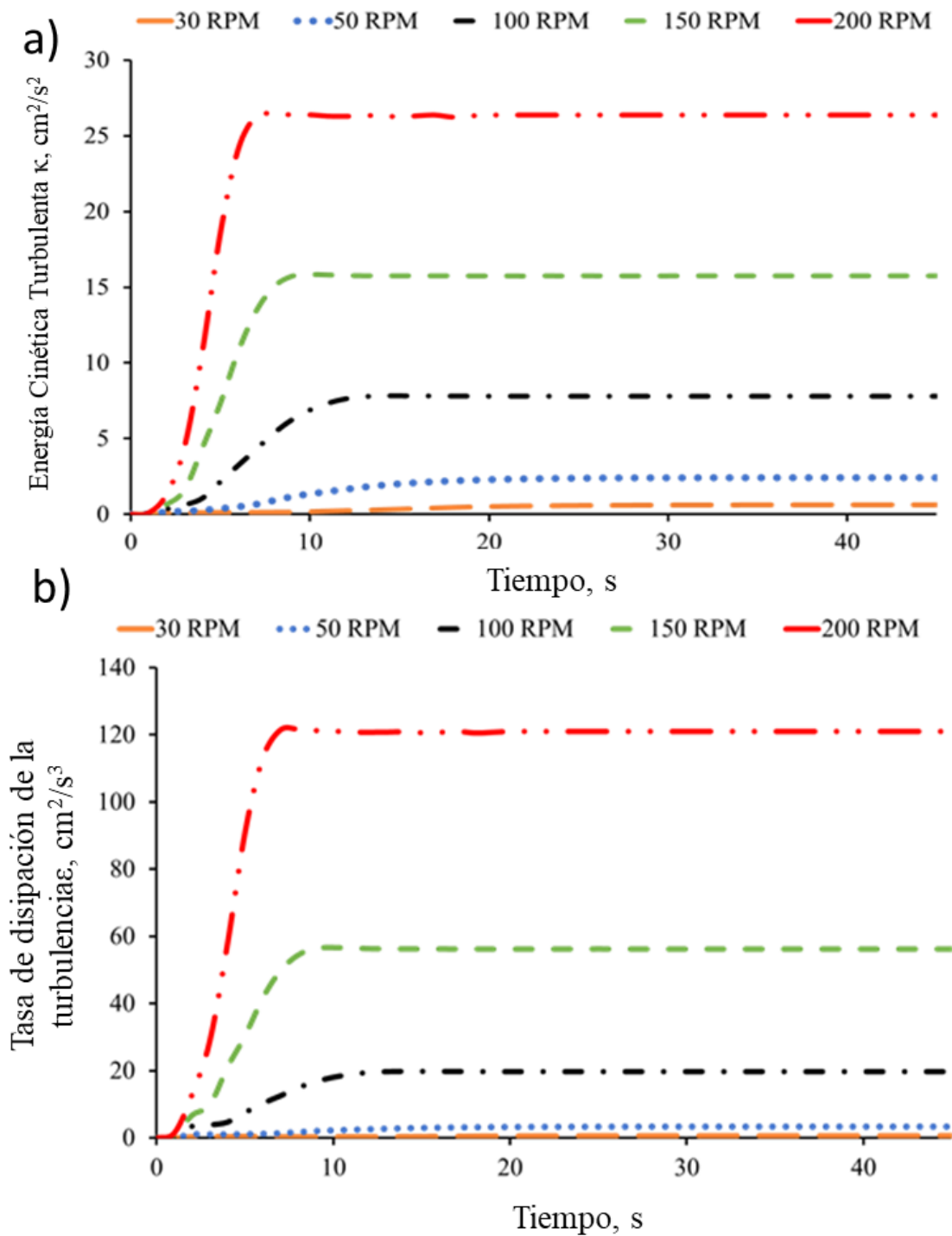
agitación, más rápido se alcanza el equilibrio. Según los resultados presentados en la Figura 12, el equilibrio hidrodinámico a 30, 50, 100, 150 y 200 RPM se obtiene después de 25, 20, 15, 12 y 10 s, respectivamente; la velocidad media en estado estacionario para cada caso es de 2,5, 4,5, 10,5, 16 y 23 cm/s, respectivamente. Obsérvese que la velocidad media en estado estacionario crece a medida que aumenta la velocidad de agitación. A un nivel elevado de agitación, el fluido pierde impulso por disipación turbulenta. Así, una cierta cantidad de energía mecánica transmitida por el impulsor al líquido es disipada por la turbulencia. Estos resultados de la velocidad local en el interior del adsorbedor ayudan a comprender mejor los principales mecanismos de transporte de masa y adsorción de piridina.

La Figura 13 a) muestra la evolución temporal de la energía cinética turbulenta en función de la velocidad de agitación. Como se observa, el equilibrio hidrodinámico coincide aproximadamente con un comportamiento constante del parámetro  $\kappa$  con el tiempo, y se puede concluir que la energía cinética también alcanza el equilibrio. Dicho equilibrio energético se alcanza más rápidamente para velocidades de agitación altas que para casos de velocidad lenta. Por ejemplo, a 30 RPM la energía cinética se hace constante después de 20 s, mientras que para 200 RPM la invariabilidad con el tiempo tiene lugar después de aproximadamente 10 s.



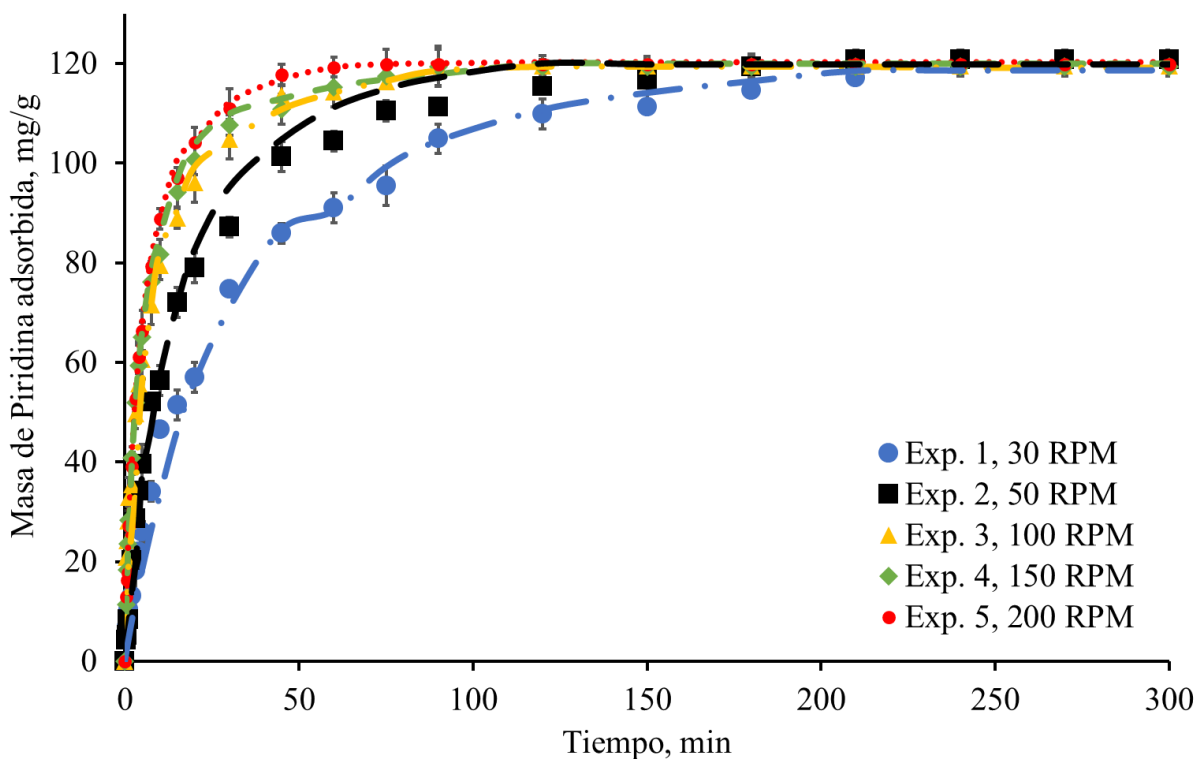
**Figura 12.** Velocidad media (cm/s) frente al tiempo (s) en función de la velocidad de agitación.

En la Figura 13 a) se puede observar otra característica interesante: al aumentar la velocidad de agitación se obtiene una mayor energía cinética dentro del adsorbedor. El aumento de la energía cinética turbulenta podría implicar un mayor número de vórtices en el interior del adsorbedor; físicamente, esto puede ser sinónimo de un mejor mezclado a mayores RPM y, por tanto, de una mayor homogeneidad del soluto en el interior del adsorbedor. Obsérvese cómo, a medida que aumenta la velocidad de agitación en el interior del adsorbedor, la energía cinética también aumenta exponencialmente. Por ejemplo, la energía cinética a 200 RPM es 25 veces superior a la de 30 RPM. Sin embargo, aquí vale la pena mencionar que las tasas de agitación más altas podrían crear mejores condiciones de mezcla desde el punto de vista de las velocidades locales y la energía cinética turbulenta, pero eso también significa que se debe proporcionar un mayor



**Figura 13.** a) Turbulencia de energía cinética ( $\text{cm}^2/\text{s}^2$ ) frente al tiempo (s) en función de la tasa de agitación. b) Tasa de disipación de la turbulencia ( $\text{cm}^2/\text{s}^3$ ) frente al tiempo (s) en función de la velocidad de agitación.

consumo de energía a través del rotor de agitación, aumentando así los costes de operación a niveles industriales. El análisis de la energía cinética turbulenta va acompañado del término de energía de disipación  $\epsilon$ , que se representa gráficamente en la Figura 13 b) en función de la velocidad de agitación. Como era de esperar, el aumento de las tasas de agitación indica que se disipa más energía en los vórtices formados en el fluido.



**Figura 14.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la velocidad de agitación. Las predicciones del modelo de advección- difusión se representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.

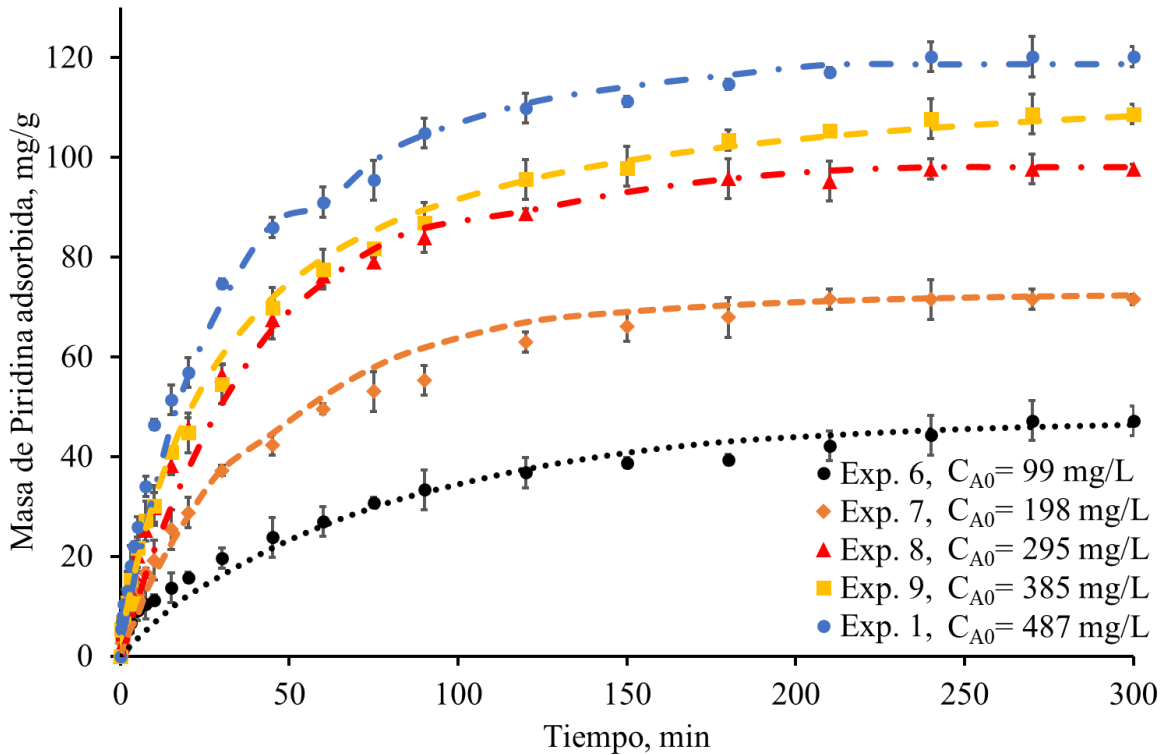
La Figura 14 muestra el efecto de la velocidad de agitación sobre la capacidad de adsorción de piridina sobre tela de carbón activado a una concentración inicial de 487 mg/L. La máxima capacidad de adsorción encontrada para la adsorción de



---

piridina en equilibrio es de 120 mg/g. Las curvas trazadas en la Figura 14 corresponden a los resultados de la solución del MAD descrita en las secciones anteriores. Para los experimentos 1 a 5, el modelo matemático predice con exactitud el equilibrio de adsorción y, según la Tabla 3, el porcentaje de desviación del modelo con respecto a los datos experimentales es inferior al 5%. A partir de estas observaciones, puede afirmarse que el MAD predice bien los datos de equilibrio y cinéticos.

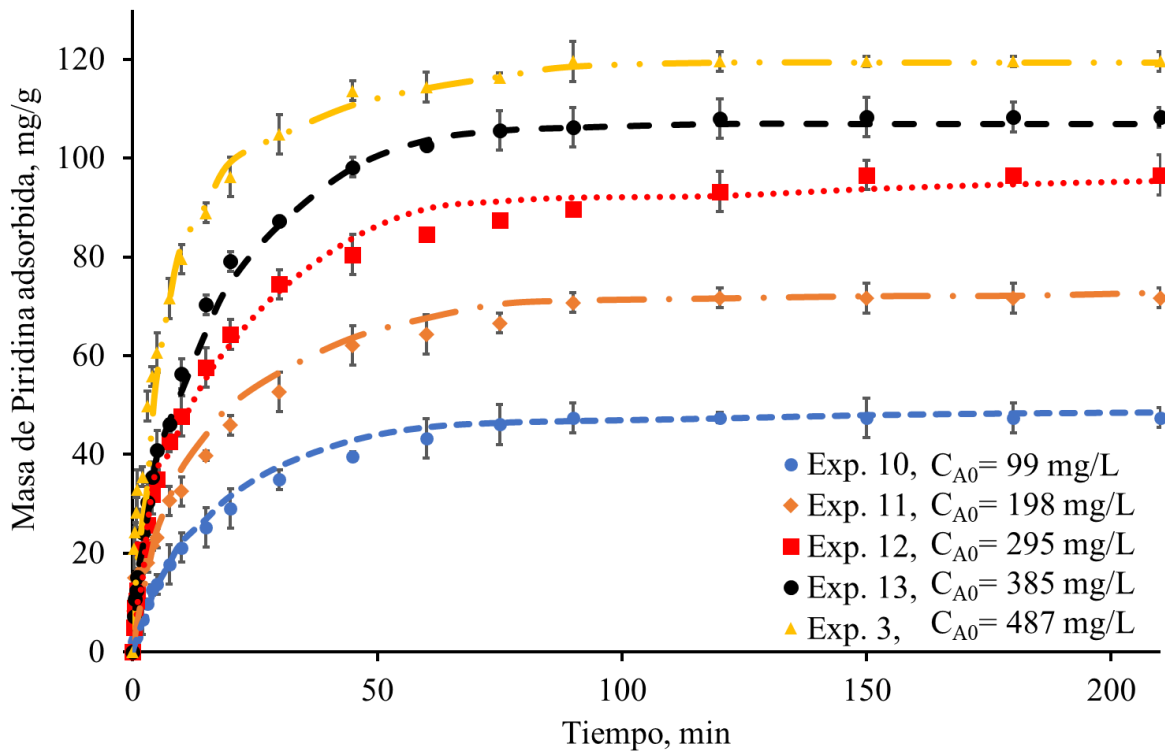
La Figura 15 presenta la cinética de adsorción a diferentes concentraciones iniciales fijando la velocidad de agitación en 30 RPM. Las curvas punteadas representan las predicciones numéricas del MAD para los experimentos 1 y 6 a 9. Se observa que el modelo predice con exactitud el equilibrio de adsorción para todos los casos. Sin embargo, existe un ligero desajuste con los datos experimentales en torno a los 30 min en los experimentos. 6 y 7. Estos experimentos corresponden a concentraciones iniciales más bajas. Dado que este desajuste no aparece para concentraciones iniciales más altas (experimentos. 1, 8 y 9), puede decirse que la capacidad de predicción de las predicciones MAD se ve afectada por las concentraciones iniciales a bajas revoluciones de agitación. Una explicación de este fenómeno es que el gradiente de concentración entre la solución y la superficie del adsorbente es demasiado pequeño, y el modelo no los estima correctamente en los primeros tiempos. De acuerdo con los datos reportados en la Tabla 3, los valores del parámetro  $k_{ad}'$  están en el rango de 0.01 a 0.1  $\text{cm}^4 (\text{mg s})^{-1}$ , y los porcentajes de desviación con respecto a los datos experimentales son menores al 5%, excepto para el experimento 6 cuya desviación es del 5.6%. En este sentido, incluso con esa pequeña desviación mostrada en los experimentos 6 y 7, el modelo puede utilizarse para interpretar los datos cinéticos.



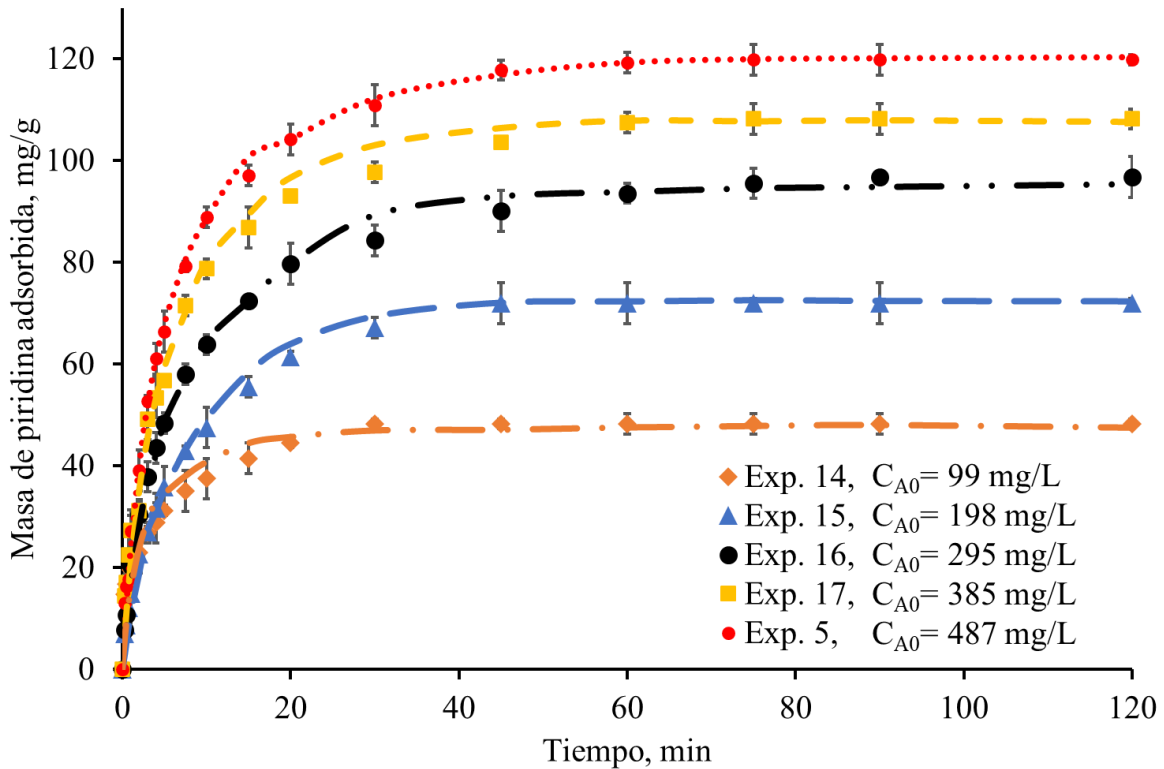
**Figura 15.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Las predicciones del modelo de advección-difusión se representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.

Las Figuras 16 y 17 muestran el efecto de la concentración inicial a 100 y 200 RPM, respectivamente. Para ambas figuras, las predicciones realizadas por el MAD interpretan de manera correcta el equilibrio de adsorción y los datos experimentales con porcentajes de desviación cercanos al 5% (véase la Tabla 3). Al comparar ambas figuras, se observa que la velocidad de agitación desempeña un papel importante en la velocidad de adsorción. Recordemos que la velocidad de agitación cambia significativamente la hidrodinámica, afectando al flujo de masa local alrededor de la tela de carbón. Este fenómeno se refleja en los parámetros físicos que intervienen en cualquier modelo matemático. Por ejemplo, obsérvense las variaciones del parámetro  $k_{ad}'$  a diferentes concentraciones iniciales. El ajuste de

este parámetro ayuda a interpretar correctamente los datos experimentales en la simulación numérica 3D, en la que pueden calcularse con precisión los flujos de masa y las concentraciones locales. Aquí se destacan las capacidades de la simulación 3D, ya que, de este modo, se da un significado físico más amplio de los resultados interpretados.



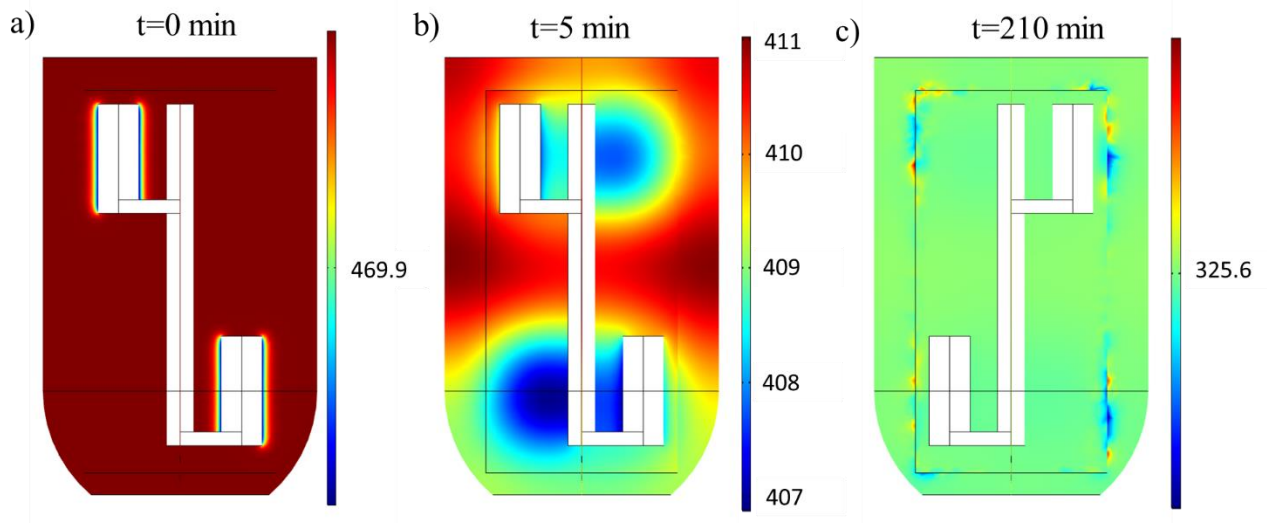
**Figura 16.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Aquí, la velocidad de agitación es de 100 RPM. Las predicciones del modelo de advección-difusión se representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.



**Figura 17.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Aquí, la velocidad de agitación es de 200 RPM. Las predicciones del modelo de advección-difusión están representadas por líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a datos experimentales.

Una simulación numérica en 3D basada en la formulación MAD permite observar cómo tiene lugar el proceso de adsorción desde la solución hasta la superficie del material adsorbente. Este tipo de modelización calcula los gradientes locales de concentración en cada punto del interior del adsorbente, así como el flujo másico de piridina. A partir del análisis presentado a continuación, corroboramos para todas las velocidades de agitación estudiadas que la convección es el mecanismo dominante para el transporte de solutos en la solución y hacia la superficie del adsorbente. Por ejemplo, en la Figura 18 se representan los gradientes de concentración a diferentes tiempos para el experimento 3 (concentración inicial = 487 mg/L a 100 RPM). Teóricamente, al comienzo de las simulaciones,  $t = 0$  min,

no hay gradientes de concentración de piridina en la solución (Figura 18 a) porque el proceso de adsorción aún no ha comenzado. En cuanto comienzan la adsorción y la agitación, se crean gradientes de concentración en la solución (Figura 18 b) para  $t = 5$  min en diferentes zonas. Las concentraciones más pequeñas tienen lugar cerca de la superficie de los cilindros impulsores recubiertos con el TCA. Es evidente que la adsorción favorece los gradientes de concentración; de hecho, para  $t = 5$  min, pueden observarse capas límite de masa alrededor del TCA que siguen la trayectoria angular de forma similar al caso de la capa límite hidrodinámica (véase la Figura 11 a)). Los gradientes de concentración son significativos hasta que se alcanza el equilibrio, como se muestra en la Figura 18 c), donde la concentración es prácticamente homogénea a  $t = 210$  min.



**Figura 18.** Perfiles de concentración de piridina en la solución (mg/L) en función del tiempo a) 0 min, b) 5 min, c) 210 min.

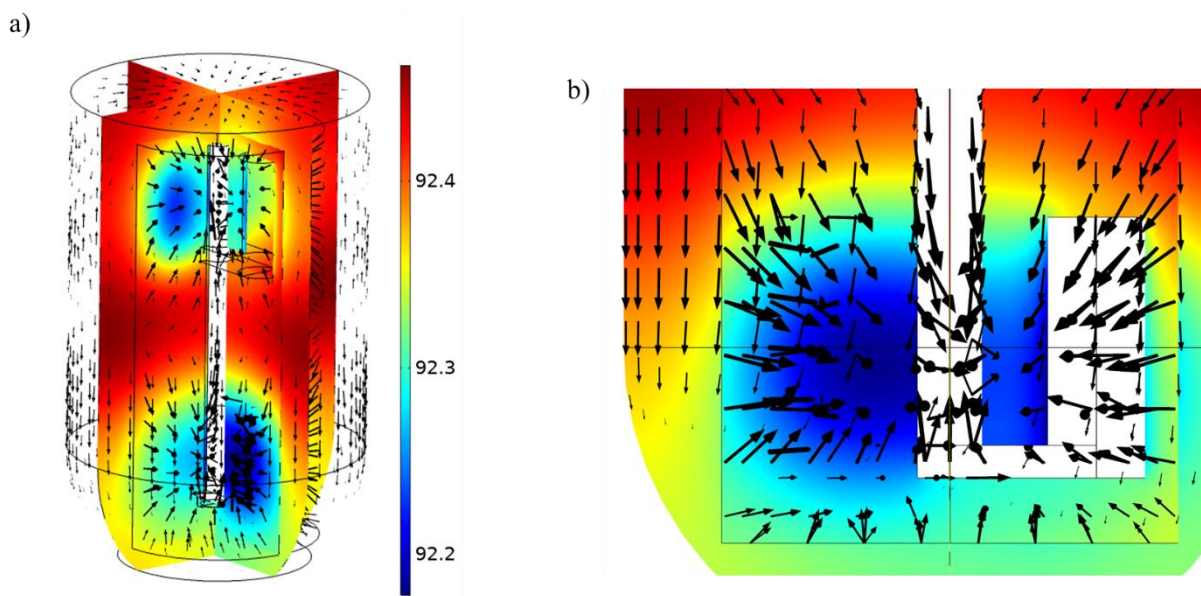
El análisis del flujo de masa de piridina en la solución fluida se presenta visualmente en la Figura 19. En este caso, trazamos el vector de flujo de masa total:

$$\mathbf{N} = \mathbf{U}C_A - D_{AB}\nabla C_A \quad (47)$$

Debido a la agitación, la contribución convectiva es mucho más importante que el

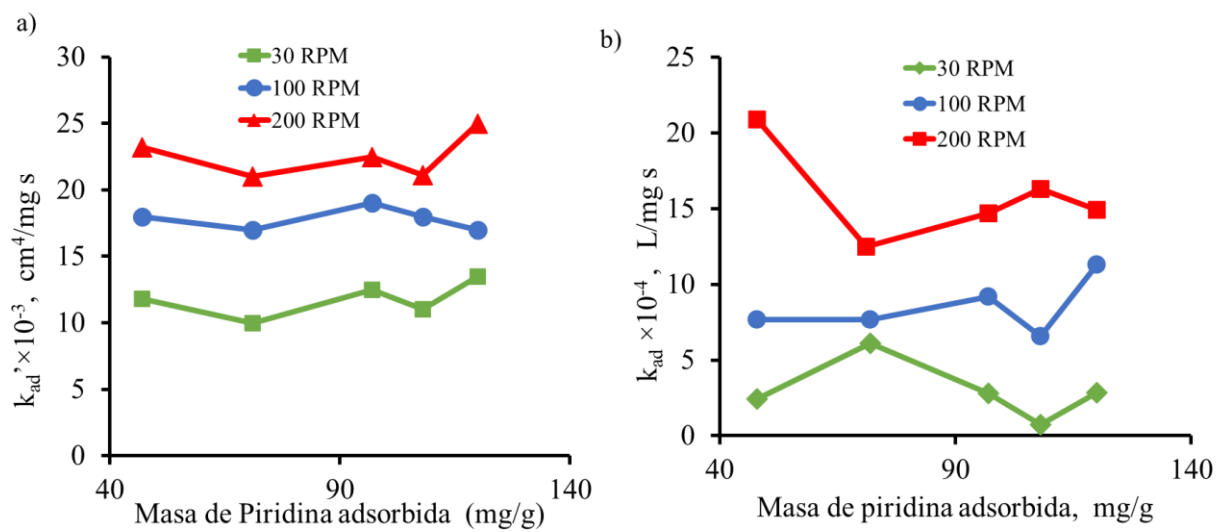
---

transporte por mecanismo difusivo. Esto es evidente en los vectores de flujo masico, ya que siguen la trayectoria del movimiento del fluido. Un hallazgo relevante es que el mayor flujo de masa tiene lugar en la parte trasera de los cilindros motrices, mientras que en el resto del fluido (lejos de los límites estáticos) el flujo de masa es menor. A partir de la velocidad vectorial trazada en la Figura 19 b), observamos que las principales contribuciones de la velocidad se producen en las direcciones radial y angular más que en la dirección axial.



**Figura 19.** a) Perfil de concentración y fluxes de masa (vectores negros). b) Acercamiento 2D a la TCA en la parte inferior. Velocidad de agitación = 100 RPM, concentración inicial = 487 mg/L, tiempo de simulación = 1 min.

La comparación entre los valores de las constantes de ajuste MCL y MAD permite corroborar que cuando el modelo cinético no depende directamente de las condiciones de agitación dentro del sistema, sus constantes adquieren un mayor significado físico al depender directamente de las condiciones de adsorción como la concentración inicial y por tanto de la capacidad de adsorción, por lo que el modelo MAD permite una mejor comprensión del sistema estudiado (ver Figura 20).



**Figura 20.** Comparación entre las constantes de ajuste a) MAD y b) MCL.

---

## 8 CONCLUSIONES

Se empleó un modelo matemático para la adsorción de piridina en una tela de carbón activado en un adsorbedor de lote agitado. El modelo matemático se compone de una ecuación de balance de momento para un flujo turbulento en la solución, el balance de masa de soluto y expresiones auxiliares para modelar la adsorción en la superficie de carbón. La solución del modelo matemático se lleva a cabo numéricamente en una geometría tridimensional en la que la tela de carbón activado gira alrededor del eje central del adsorbedor. Desde el punto de vista computacional, esto representa un reto en comparación con los modelos de adsorción tradicionales, en los que toda la dinámica de transporte y adsorción del soluto se modela mediante expresiones cinéticas, que asumen la condición de mezcla perfecta en la solución. Se corroboró que este tipo de modelado puede predecir bien las curvas de decaimiento de la concentración en la solución para varias velocidades de agitación (de 30 a 200 RPM) y concentraciones iniciales de piridina (de 99 a 487 mg/L). La precisión de las predicciones numéricas de las curvas de decaimiento es comparable a las obtenidas a partir del modelo cinético de Langmuir. Algunas de las capacidades del modelo matemático 3D son las posibilidades de calcular con precisión el flujo local de masa de soluto alrededor de la tela de carbón activado y las concentraciones locales como funciones del tiempo y la posición. Identificamos que, dependiendo de la velocidad de agitación, la suposición de una condición de mezcla perfecta es cuestionable durante algunos periodos del proceso. Además, se observó la existencia de capas límite hidrodinámicas y de masa alrededor del material adsorbente siguiendo la dirección angular.

En el MAD considera tres de las etapas gobernantes en el transporte de masa en sistemas de adsorción. Y para el sistema estudiado se logró identificar que las etapas gobernantes dependen de la velocidad de agitación.



---

## 9 BIBLIOGRAFIA

- [1] R. Ramos, "Fundamentos de Adsorción en Sistemas Líquido-Sólido," 2010, pp. 45–60.
- [2] I. A. W. Tan, A. L. Ahmad, and B. H. Hameed, "Adsorption of basic dye on high-surface-area activated carbon prepared from coconut husk: Equilibrium, kinetic and thermodynamic studies," *J Hazard Mater*, vol. 154, no. 1–3, pp. 337–346, Jun. 2008, doi: 10.1016/j.jhazmat.2007.10.031.
- [3] S. Agarwal, I. Tyagi, V. K. Gupta, N. Ghasemi, M. Shahivand, and M. Ghasemi, "Kinetics, equilibrium studies and thermodynamics of methylene blue adsorption on Ephedra strobilacea saw dust and modified using phosphoric acid and zinc chloride," *J Mol Liq*, vol. 218, pp. 208–218, Jun. 2016, doi: 10.1016/j.molliq.2016.02.073.
- [4] V. K. Gupta, R. Jain, S. Malathi, and A. Nayak, "Adsorption–desorption studies of indigocarmine from industrial effluents by using deoiled mustard and its comparison with charcoal," *J Colloid Interface Sci*, vol. 348, no. 2, pp. 628–633, Aug. 2010, doi: 10.1016/j.jcis.2010.04.085.
- [5] A. Shahat, K. T. Kubra, and A. El-marghany, "Equilibrium, thermodynamic and kinetic modeling of triclosan adsorption on mesoporous carbon nanosphere: Optimization using Box-Behnken design," *J Mol Liq*, vol. 383, p. 122166, Aug. 2023, doi: 10.1016/j.molliq.2023.122166.
- [6] K. V. Padoley, S. N. Mudliar, and R. A. Pandey, "Heterocyclic nitrogenous pollutants in the environment and their treatment options – An overview," *Bioresour Technol*, vol. 99, no. 10, pp. 4029–4043, Jul. 2008, doi: 10.1016/j.biortech.2007.01.047.
- [7] T. Liu, Y. Ding, C. Liu, J. Han, and A. Wang, "UV activation of the pi bond in pyridine for efficient pyridine degradation and mineralization by UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

- 
- treatment,” *Chemosphere*, vol. 258, p. 127208, Nov. 2020, doi: 10.1016/j.chemosphere.2020.127208.
- [8] S. Liu *et al.*, “Advanced reduction process to achieve efficient degradation of pyridine,” *Chemosphere*, vol. 287, p. 132240, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.chemosphere.2021.132240.
- [9] D. Li *et al.*, “Electrochemical degradation of pyridine by Ti/SnO<sub>2</sub>–Sb tubular porous electrode,” *Chemosphere*, vol. 149, pp. 49–56, Apr. 2016, doi: 10.1016/j.chemosphere.2016.01.078.
- [10] Z. Lou, Y. Song, B. Shao, J. Hu, J. Wang, and J. Yu, “Pre-electrochemical treatment combined with fixed bed biofilm reactor for pyridine wastewater treatment: From performance to microbial community analysis,” *Bioresour Technol*, vol. 319, p. 124110, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.biortech.2020.124110.
- [11] Q. Lu *et al.*, “Using ultrasonic treated sludge to accelerate pyridine and p-nitrophenol biodegradation,” *Int Biodeterior Biodegradation*, vol. 153, p. 105051, Sep. 2020, doi: 10.1016/j.ibiod.2020.105051.
- [12] G. Zhu *et al.*, “Synergy of strains that accelerate biodegradation of pyridine and quinoline,” *J Environ Manage*, vol. 285, p. 112119, May 2021, doi: 10.1016/j.jenvman.2021.112119.
- [13] L. Chu, S. Yu, and J. Wang, “Degradation of pyridine and quinoline in aqueous solution by gamma radiation,” *Radiation Physics and Chemistry*, vol. 144, pp. 322–328, Mar. 2018, doi: 10.1016/j.radphyschem.2017.09.016.
- [14] M. Fouladgar, M. Beheshti, and H. Sabzyan, “Single and binary adsorption of nickel and copper from aqueous solutions by  $\gamma$ -alumina nanoparticles: Equilibrium and kinetic modeling,” *J Mol Liq*, vol. 211, pp. 1060–1073, Nov. 2015, doi: 10.1016/j.molliq.2015.08.029.

- 
- [15] M. Al-Jabari, "Kinetic models for adsorption on mineral particles comparison between Langmuir kinetics and mass transfer," *Environ Technol Innov*, vol. 6, pp. 27–37, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.eti.2016.04.005.
- [16] R. Leyva-Ramos and C. J. Geankoplis, "Model simulation and analysis of surface diffusion of liquids in porous solids," *Chem Eng Sci*, vol. 40, no. 5, pp. 799–807, 1985, doi: 10.1016/0009-2509(85)85032-6.
- [17] D. Dadebo, A. Atukunda, M. G. Ibrahim, and M. Nasr, "Integrating chemical coagulation with fixed-bed column adsorption using rice husk-derived biochar for shipboard bilgewater treatment: Scale-up design and cost estimation," *Chemical Engineering Journal Advances*, vol. 16, p. 100520, Nov. 2023, doi: 10.1016/j.ceja.2023.100520.
- [18] E. I. Unuabonah, B. I. Olu-Owolabi, E. I. Fasuyi, and K. O. Adebawale, "Modeling of fixed-bed column studies for the adsorption of cadmium onto novel polymer–clay composite adsorbent," *J Hazard Mater*, vol. 179, no. 1–3, pp. 415–423, Jul. 2010, doi: 10.1016/j.jhazmat.2010.03.020.
- [19] S. Perumal, W. Lee, and R. Atchudan, "A review on bismuth-based materials for the removal of organic and inorganic pollutants," *Chemosphere*, vol. 306, p. 135521, Nov. 2022, doi: 10.1016/j.chemosphere.2022.135521.
- [20] S. S. Chan, K. S. Khoo, K. W. Chew, T. C. Ling, and P. L. Show, "Recent advances biodegradation and biosorption of organic compounds from wastewater: Microalgae-bacteria consortium - A review," *Bioresour Technol*, vol. 344, p. 126159, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.biortech.2021.126159.
- [21] M. Hong *et al.*, "Heavy metal adsorption with zeolites: The role of hierarchical pore architecture," *Chemical Engineering Journal*, vol. 359, pp. 363–372, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.cej.2018.11.087.
- [22] Y.-H. Fan, Y.-X. Li, W.-J. Zhu, Y. Bai, and D.-B. Dang, "Ultra-fast and selective adsorption of methylene blue with polyoxometalate-based metal-organic

- 
- frameworks,” *Dyes and Pigments*, vol. 216, p. 111363, Aug. 2023, doi: 10.1016/j.dyepig.2023.111363.
- [23] J. A. Kumar *et al.*, “Acenaphthene adsorption onto ultrasonic assisted fatty acid mediated porous activated carbon-characterization, isotherm and kinetic studies,” *Chemosphere*, vol. 284, p. 131249, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.chemosphere.2021.131249.
- [24] R. Ocampo-Perez, C. G. Aguilar-Madera, and V. Díaz-Blancas, “3D modeling of overall adsorption rate of acetaminophen on activated carbon pellets,” *Chemical Engineering Journal*, vol. 321, pp. 510–520, Aug. 2017, doi: 10.1016/j.cej.2017.03.137.
- [25] Q. Zhu, G. D. Moggridge, M. Ainte, M. D. Mantle, L. F. Gladden, and C. D’Agostino, “Adsorption of pyridine from aqueous solutions by polymeric adsorbents MN 200 and MN 500. Part 1: Adsorption performance and PFG-NMR studies,” *Chemical Engineering Journal*, vol. 306, pp. 67–76, Dec. 2016, doi: 10.1016/j.cej.2016.07.039.
- [26] P. Alonso-Davila, O. L. Torres-Rivera, R. Leyva-Ramos, and R. Ocampo-Perez, “Removal of Pyridine from Aqueous Solution by Adsorption on an Activated Carbon Cloth,” *Clean (Weinh)*, vol. 40, no. 1, pp. 45–53, Jan. 2012, doi: 10.1002/clen.201100049.
- [27] D. Mohan, K. P. Singh, S. Sinha, and D. Gosh, “Removal of pyridine from aqueous solution using low cost activated carbons derived from agricultural waste materials,” *Carbon N Y*, vol. 42, no. 12–13, pp. 2409–2421, 2004, doi: 10.1016/j.carbon.2004.04.026.
- [28] R. Ocampo-Perez, R. Leyva-Ramos, P. Alonso-Davila, J. Rivera-Utrilla, and M. Sanchez-Polo, “Modeling adsorption rate of pyridine onto granular activated carbon,” *Chemical Engineering Journal*, vol. 165, no. 1, pp. 133–141, Nov. 2010, doi: 10.1016/j.cej.2010.09.002.

- 
- [29] E. García-Hernández, C. G. Aguilar-Madera, E. C. Herrera-Hernández, R. Ocampo-Pérez, E. Bailón-García, and F. B. Cortés, "Hydrodynamic effects on the overall adsorption rate of phenol on activated carbon cloth through the advection-diffusion model application," *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, vol. 93, pp. 267–278, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.jiec.2020.10.003.
- [30] V. Santos-Moreau, L. Brunet-Errard, and M. Rolland, "Numerical CFD simulation of a batch stirred tank reactor with stationary catalytic basket," *Chemical Engineering Journal*, vol. 207–208, pp. 596–606, Oct. 2012, doi: 10.1016/j.cej.2012.07.020.
- [31] B. E. Launder and D. B. Spalding, "The numerical computation of turbulent flows," *Comput Methods Appl Mech Eng*, vol. 3, no. 2, pp. 269–289, Mar. 1974, doi: 10.1016/0045-7825(74)90029-2.
- [32] S. L. Yeoh, G. Papadakis, and M. Yianneskis, "Numerical Simulation of Turbulent Flow Characteristics in a Stirred Vessel Using the LES and RANS Approaches with the Sliding/Deforming Mesh Methodology," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 82, no. 7, pp. 834–848, Jul. 2004, doi: 10.1205/0263876041596751.
- [33] J. A. Yáñez-Varela, I. González-Neria, A. Alonzo-García, G. Rivadeneyra-Romero, and S. A. Martínez-Delgado, "Numerical analysis of the hydrodynamics induced by rotating ring electrode using  $\kappa$ - $\epsilon$  models," *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 158, p. 108203, Dec. 2020, doi: 10.1016/j.cep.2020.108203.
- [34] M. Al-Jabari, "Kinetic models for adsorption on mineral particles comparison between Langmuir kinetics and mass transfer," *Environ Technol Innov*, vol. 6, pp. 27–37, Nov. 2016, doi: 10.1016/j.eti.2016.04.005.
- [35] I. Langmuir, "THE ADSORPTION OF GASES ON PLANE SURFACES OF GLASS, MICA AND PLATINUM.," *J Am Chem Soc*, vol. 40, no. 9, pp. 1361–1403, Sep. 1918, doi: 10.1021/ja02242a004.

- 
- [36] J. F. Vivo-Vilches, E. Bailón-García, A. F. Pérez-Cadenas, F. Carrasco-Marín, and F. J. Maldonado-Hódar, "Tailoring the surface chemistry and porosity of activated carbons: Evidence of reorganization and mobility of oxygenated surface groups," *Carbon N Y*, vol. 68, pp. 520–530, Mar. 2014, doi: 10.1016/j.carbon.2013.11.030.
- [37] G. Lota *et al.*, "The application of activated carbon modified by ozone treatment for energy storage," *Journal of Solid State Electrochemistry*, vol. 20, no. 10, pp. 2857–2864, Oct. 2016, doi: 10.1007/s10008-016-3293-5.

---

## 10 ANEXOS

### 10.1 ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1.** Adsorbedor de lote de tanque agitado a) geometría 3D, b) 24 dominios computacionales en la geometría, c) malla de arreglo tetraédrico. 24
- Figura 2.** Microfotografías de la tela de carbón activado: (a) Estructura de textura ordenada TCA, (b) haces de fibras retorcidas longitudinalmente, (c, d) imagen ampliada de la TCA. 31
- Figura 3.** a) Isoterma de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> y b) distribución del tamaño de los poros. 32
- Figura 4.** a) Regiones espectrales C1s, b) O1s y c) N1s de TCA. 33
- Figura 5.** Espectros FTIR de la tela de carbón activado. 35
- Figura 6.** Datos de equilibrio de adsorción de piridina. Los símbolos representan los datos experimentales y la línea continua las predicciones del modelo de isoterma de Langmuir. 38
- Figura 7.** Variación de la capacidad de adsorción de la TCA en función de la velocidad de agitación. La predicción mediante el modelo cinético de Langmuir se representa con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales. 39
- Figura 8.** Variación de la capacidad de adsorción de la TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 30 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir están representadas por líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales. 40
- Figura 9.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 100 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir son representadas por líneas 42

---

	discontinuas, mientras que los símbolos discretos corresponden a los datos experimentales.	
<b>Figura 10.</b>	Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida a 200 RPM. Las predicciones del modelo cinético de Langmuir están representadas por líneas discontinuas, mientras que los símbolos discretos corresponden a los datos experimentales.	43
<b>Figura 11.</b>	Variables hidrodinámicas en el adsorbedor a 100 RPM: a) perfiles de velocidad en el plano (X, Y). b) vectores de velocidad, c) líneas de flujo.	45
<b>Figura 12.</b>	Velocidad media (cm/s) frente al tiempo (s) en función de la velocidad de agitación.	47
<b>Figura 13.</b>	a) Turbulencia de energía cinética ( $\text{cm}^2/\text{s}^2$ ) frente al tiempo (s) en función de la tasa de agitación. b) Tasa de disipación de la turbulencia ( $\text{cm}^2/\text{s}^3$ ) frente al tiempo (s) en función de la velocidad de agitación.	48
<b>Figura 14.</b>	Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la velocidad de agitación. Las predicciones del modelo de advección- difusión se representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.	49
<b>Figura 15.</b>	Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Las predicciones del modelo de advección-difusión se representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.	51
<b>Figura 16.</b>	Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Aquí, la velocidad de agitación es de 100 RPM. Las predicciones del modelo de advección-difusión se	52



---

representan con líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a los datos experimentales.

- Figura 17.** Variación de la capacidad de adsorción de TCA en función de la masa de piridina adsorbida. Aquí, la velocidad de agitación es de 200 RPM. Las predicciones del modelo de advección-difusión están representadas por líneas discontinuas, mientras que los valores discretos corresponden a datos experimentales. 53
- Figura 18.** Perfiles de concentración de piridina en la solución (mg/L) en función del tiempo a) 0 min, b) 5 min, c) 210 min. 54
- Figura 19.** a) Perfil de concentración y flujos de masa. b) Acercamiento 2D en la TCA inferior. Velocidad de agitación = 100 RPM, concentración inicial = 487 mg/L, tiempo de simulación = 1 min. 55
- Figura 20.** Comparación entre las constantes de ajuste a) MAD y b) MCL. 56

---

## 10.2 ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1.</b> Propiedades fisicoquímicas de la piridina.	23
<b>Tabla 2.</b> Resultados XPS de la TCA: los contenidos superficiales de C, O y N (CXPS, OXPS y NXPS), la energía de enlace y el porcentaje de los componentes utilizados para ajustar las regiones espectrales C1s, O1s y N1ps.	34
<b>Tabla 3.</b> Parámetros cinéticos y condiciones experimentales utilizados para obtener la velocidad de adsorción de piridina sobre TCA.	37

---

## 11 Obra derivada

### Artículo

3D Modeling of the Adsorption Rate of Pyridine on Activated Carbon Cloth in a Stirred Tank under Turbulent Conditions.

### Autores:

Elias García-Hernández, Carlos Gilberto Aguilar-Madera, Erik Cesar Herrera-Hernández, José Valente Flores-Cano, Esther Bailón-García, Ana Teresa Finol González, Angelica Aguilar-Aguilar y Raúl Ocampo-Pérez.

**DOI:** <https://doi.org/10.3390/pr10040735>