



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

POSGRADO EN CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MONOLITOS

IMPRESOS EN 3D PARA LA REMOCIÓN DE

CONTAMINANTES DEL AGUA

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

P R E S E N T A:

GUTIERREZ REYNA SAUL OSMAR

DIRECTORES:

Dr. RAÚL OCAMPO PÉREZ

Dr. CARLOS GILBERTO AGUILAR MADERA

SAN LUIS POTOSI, S.L.P. JULIO 2023



El programa de Maestría en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONAHCyT, registro 00896, en el Nivel Consolidado.

Número de registro de la beca otorgada por CONAHCyT: 1143566



SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MONOLITOS IMPRESOS 3D PARA LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES DEL AGUA por GUTIERREZ REYNA SAUL OSMAR se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

[
<span xmlns:dct="http://purl.org/dc/terms/"](http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

<input type="checkbox"/>	<p>SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MONOLITOS IMPRESOS EN 3D PARA LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES DEL AGUA</p> <p>1 part - 0 words</p>	<p>17%</p>	<p>Saul Osmar Gutierrez Reyna</p>	<p>12 Jul 2023 13:15:51</p>	 
--------------------------	---	------------	-----------------------------------	-----------------------------	---



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

POSGRADO EN CIENCIAS EN INGENIERIA QUIMICA



**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MONOLITOS IMPRESOS 3D PARA
LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES DEL AGUA**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

P R E S E N T A:

GUTIERREZ REYNA SAUL OSMAR

DIRECTORES

Dr. RAÚL OCAMPO PÉREZ

Dr. CARLOS GILBERTO AGUILAR MADERA

SINODALES

Dr. Erik César Herrera Hernandez

Presidente

Dr. Raúl Ocampo Pérez

Sinodal

Dr. Omar González Ortega

Sinodal

San Luis Potosí S.L.P. México

Julio, 2023

Comité Académico del Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química

Facultad de Ciencias Químicas

Presente. _

Por medio de la presente comunicamos que la Tesis llevada a cabo por el alumno de Maestría I.Q. Saul Osmar Gutierrez Reyna, titulada SIMULACIÓN NUMÉRICA DE MONOLITOS IMPRESOS 3D PARA LA REMOCIÓN DE CONTAMINANTES DEL AGUA ha sido concluida y aprobada por el comité tutorial para iniciar los trámites correspondientes para su titulación, la cual tendrá lugar el próximo día 18 de Julio del 2023 a las 17:00 horas en el auditorio chico de la facultad.

Dr. Erik César Herrera Hernández

Presidente Facultad de Ciencias Químicas/UASLP

Dr. Raúl Ocampo Pérez

Miembro Facultad de Ciencias Químicas/UASLP

Dr. Omar González Ortega

Miembro Facultad de Ciencias Químicas/UASLP

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)

Beca No. 1143566

AGRADECIMIENTOS POR APOYO TÉCNICO

A la Dra. Ma. Angelica Aguilar, por su apoyo al proporcionarme el material y asistencia para el montado de experimentos, así como su disponibilidad para atender cualquier duda

Al M.C. Juan Carlos Serna Carrizalez, por su apoyo en el uso del equipo de laboratorio y apoyo para montar experimentos.

Al M.C. Jonathan Michel Sánchez Silva, por sus consejos en la redacción y apoyo en el uso del UV-Vis y otros procedimientos.

Al M.C. Samuel Aguirre Contreras, por su valioso apoyo en la redacción y disposición para el uso de los parámetros utilizados en este trabajo.

Al M.C. Elías Hernández, Por su apoyo en la discusión del modelo matemático utilizado en el estudio.

Al M.C. Saul Alejandro Aguilar Maruri, por apoyarme en la redacción y uso del material de laboratorio.

A la I.Q Karina Esmeralda Mota Resendiz, por compartir conmigo su conocimiento académico y acompañarme en el proceso de redacción de tesis

Al I.Q. Moisés Adolfo Ulloa Arrieta, por apoyarme en la redacción, y discusión de resultados de isotermas de adsorción.

AGRADECIMIENTOS PERSONALES

Estoy inmensamente agradecido con mis padres Patricia Reyan López y Carlos Gutierrez Ramírez por el apoyo incondicional que me han brindado a lo largo de mi viaje para lograr mis aspiraciones personales y académicas.

Quisiera agradecerles a mis asesores, el Dr. Raúl Ocampo Pérez y Dr. Carlos Gilberto Aguilar con quienes no tengo más que una inmensa gratitud, por su compromiso inquebrantable y su notable paciencia. Es gracias a su guía invaluable, correcciones meticulosas y palabras perspicaces que finalmente llegué a este momento tan esperado. Siempre atesoraré su sabiduría y sus consejos.

Agradecimientos a mi comité compuesto por el Dr. Erik César Herrera y el Dr. Omar González Ortega por su invaluable consejo, y por impartir el conocimiento esencial que me ha llevado a donde estoy hoy.

Un agradecimiento especial a Carolina Faz Hernández por siempre brindarme su apoyo y consejo tanto académico como profesional, gracias.

Gracias a Jorge Lara por acompañarme en mis años de licenciatura y ahora en esta etapa de maestría en la que me impulsó a superarme física y profesionalmente, siempre estaré eternamente agradecido por darme tu consejo y apoyo.

Expreso mi gratitud a Emanuel Cuellar, Odín Vázquez y Héctor Ruiz los cuales se han convertido en amigos y hermanos. a quienes agradezco las innumerables horas que hemos pasado juntos, y las extraordinarias experiencias que hemos compartido.

RESUMEN

Debido a la necesidad de hacer más eficientes los sistemas actuales de adsorción en lecho fijo, en este trabajo se propuso un modelado matemático capaz de reproducir el proceso de adsorción en régimen dinámico, el cual se aplicó sobre una amplia variedad de geometrías de lecho, con el propósito de llevar a cabo la simulación de la remoción de un soluto sobre un lecho fijo. Con los resultados obtenidos de la simulación se realizaron modificaciones a la geometría del lecho con la intención de lograr un mejor aprovechamiento del material adsorbente. El enfoque que se utilizó para esto fue el de plantear geometrías de lecho que nos permitan obtener diferentes distribuciones de mezclado, de tal manera que en el interior del lecho se provoque un adelgazamiento de la capa límite, ubicada en la interfaz sólido-líquido que nos permitan disminuir los efectos difusivos presentes en la interfaz, Para lograr esto se propusieron 4 geometrías de lecho con una distribución axisimétricas, en cada geometría se propuso diferente distribución de canales manteniendo constante las dimensiones del lecho de 15cm de alto por 5 cm de radio, de tal manera que en las 4 geometrías estudiadas se mantuvo constante el volumen de huecos y la masa de material adsorbente. El modelado matemático propuesto fue derivado a partir de los fenómenos de transferencia de masa y momentum, y fue resuelto utilizando el software COMSOL Multiphysics, utilizando los parámetros del estudio de adsorción de 8-hidroxiquinoleína sobre carbón activado realizado por (Aguirre Contreras, 2022). Para cada una de las geometrías propuestas se evaluó el desempeño general del lecho a partir del tiempo de ruptura y saturación, y el aprovechamiento derivado de las curvas de ruptura obtenidas. A partir de los resultados se encontró que es posible disminuir los efectos difusivos y acotar la zona de transferencia de masa al interior de los monolitos, incrementando así la eficiencia.

Palabras clave: Simulación, Lecho fijo, Adsorción, Capa límite, Geometría

ABSTRACT

Due to the need to make current fixed-bed adsorption systems more efficient, this work proposed a mathematical model capable of reproducing the adsorption process in a dynamic regime, which was applied to a wide variety of bed geometries, with the purpose of carrying out the simulation of the removal of a solute on a fixed bed. With the results obtained from the simulation, modifications were made to the geometry of the bed with the intention of achieving a better use of the adsorbent material. The approach used for this was to propose bed geometries that allow us to obtain different mixing distributions, in such a way that inside the bed a thinning of the boundary layer is caused, located in the solid-liquid interface that allow to reduce the diffusive effects present in the interface. To achieve this, 4 bed geometries with an axisymmetric distribution were proposed, in each geometry a different distribution of channels was proposed, maintaining constant the dimensions of the bed of 15 cm high by 5 cm of radius of in such a way that in the 4 geometries studied the volume of voids and the mass of adsorbent material remained constant. The proposed mathematical modeling was derived from the mass and momentum transfer phenomena, and was solved using the COMSOL Multiphysics software, using the parameters of the 8-hydroxyquinoline adsorption study on activated carbon carried out by (Aguirre Contreras, 2022). For each of the proposed geometries, the general performance of the bed was evaluated based on the rupture and saturation time, and the use derived from the rupture curves obtained. Based on the results, it was found that it is possible to reduce diffusional effects and delimit the mass transfer zone inside the monoliths, thus increasing efficiency.

Keywords: Simulation, Fixed bed, Adsorption, Boundary layer, Geometry

CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS A LAS INSTITUCIONES	I
AGRADECIMIENTOS POR APOYO TÉCNICO	I
AGRADECIMIENTOS PERSONALES	II
RESUMEN	III
ABSTRACT	IV
1.-INTRODUCCIÓN.....	1
2.-ANTECEDENTES.....	4
2.1.-Generalidades del proceso de adsorción	4
2.2.-Espontaneidad del proceso de adsorción	5
2.3.-Variables que afectan el proceso de adsorción.....	6
2.3.1.-Propiedades texturales.	6
2.3.2.-Área específica.	7
2.3.3.-Punto de carga cero	7
2.3.4.-pH de la solución	7
2.3.5.-Temperatura	7
2.4.-Materiales adsorbentes	8
2.4.1.-Carbón activado	8
2.4.2.-Resinas de adsorción.....	9
2.5.-Caracterización de los procesos de adsorción.....	10
2.5.1.-Estudios de equilibrio.....	10
2.5.1.1.-Isoterma de adsorción.....	11
2.5.1.2.-Modelos de equilibrio de adsorción	12
2.5.2.-Velocidad de adsorción	12
2.5.2.1.-Mecanismos de transferencia de masa	13
2.5.2.1.-Modelos de velocidad de adsorción	13
2.6.-Aplicación práctica de la adsorción	17
2.7.-Generalidades de impresión 3D	19
2.7.1.-Tipos de impresión en 3D.....	19
2.7.1.1.-Modelado por deposición fundida – FFF	19
2.7.1.2.-Estereolitografía – SLA	20
2.7.1.3.-Procesamiento digital de luz – DLP	20

2.7.1.4.-Fusión por láser selectiva – SLM.....	20
2.7.1.5.-Inyección de aglutinante – BJ	20
2.7.2.-Materiales para impresión 3D	22
2.8.-Generalidades de los geles de carbón	23
2.8.1.-Síntesis de los geles de carbón	23
2.8.2.-Dopado de geles de carbón	24
2.9.-Generalidades de simulación computacional.....	25
2.10.-Aplicación de nuevos enfoques en problemas de vanguardia	27
3.-JUSTIFICACIÓN	29
4.-HIPÓTESIS	30
5.-OBJETIVOS.....	30
5.1.-Objetivo general.....	30
5.2.-Objetivos específicos.....	30
6.-METODOLOGIA	31
6.1.-Diseño e implementación de las geometrías	31
6.2.-Descripción matemática del proceso de adsorción.....	35
6.3.-Descripción matemática de la fase líquida	36
6.4.-Descripción matemática de la fase sólida	39
6.5.-Cálculo de fracción saturada y rendimiento de la columna.	41
6.6.-Aspectos computacionales.....	42
8.-. CONCLUSIONES	45
9.-REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	46
10.-ANEXOS.....	48

1.-INTRODUCCIÓN

La creciente población mundial y su aumento en capacidad económica han llevado inevitablemente a mayores presiones sobre las fuentes de abastecimiento de agua, en gran parte debido a la necesidad de producir más energía y alimentos, así como cumplir la demanda de las actividades urbanas y productivas. Este aumento en la producción y consumo de bienes y servicios ha resultado en una mayor necesidad de agua, así como en la generación de un mayor volumen de aguas residuales. Desafortunadamente, una cantidad sustancial de estas aguas residuales se vierte en cuerpos de agua superficiales sin someterse a ningún tratamiento, lo que ha llevado a un deterioro visible en los ecosistemas marinos y de agua dulce. No sólo se han visto afectadas las funciones ambientales y diversidad de los ecosistemas, sino que en determinados casos se han producido daños irreversibles, dado que la contaminación de las aguas superficiales y acuíferos tiene un impacto inmediato en la disponibilidad de agua limpia, lo que requiere costosos procesos de tratamiento y depuración.(Cervantes Rendón et al., 2020).

Si bien en nuestro planeta hay una gran abundancia de agua (aprox. 1400 Mkm³) debido a que la superficie terrestre está cubierta 70% de agua, solamente el 2.5% de esta agua es apta para su consumo. Aunado a esto, el 68.7% del agua se encuentra en los glaciares y el otro 30% en pozos subterráneos lo que solo deja 0.4% del agua disponible para su consumo en cuerpos de agua superficiales como ríos y lagos.(UN Environment, 2019).

El consumo de agua varía de países a regiones debido a factores ambientales, socioeconómicos y demográficos únicos. A nivel mundial, el sector agrícola se erige como el mayor consumidor de agua, excepto en Europa, donde representa una proporción menor. Este sector consume entre el 70% y el 90% del consumo total de agua. Le sigue de cerca el

sector público, con un consumo entre el 7% y el 18%, y el sector industrial, que, aunque en menor medida, supone del 1% al 11% del consumo de agua.(FAO, 2023).

Los consumidores de agua en México están divididos por la Conagua en tres categorías: agrícola, de abastecimiento público e industrial. El volumen de agua adjudicado para estos fines en 2017 creció un 21% en relación con lo registrado en el año 2001, pasando de 72,7 a 87,9 km³. Esta última cifra representa un 19,2% del total de agua renovable disponible, que es de 451,6 km³. En 2017, además de los 87,91 km³ concedidos a los sectores ya mencionados, se destinaron 183 km³ adicionales para la generación de energía eléctrica en centrales hidroeléctricas.(Comisión Nacional del Agua, 2005).

Casi todos los esfuerzos humanos que implican el uso del agua, ya sea en la agricultura, la industria o los entornos urbanos, generan lo que se conoce como "agua residual" como subproducto. El agua residual se caracteriza por la presencia de sustancias químicas, partículas o microorganismos disueltos o en suspensión que tienen el potencial de degradar la calidad de los cuerpos de agua, como ríos, lagos, presas o zonas costeras, en los que se descargan.

Esta degradación es particularmente pronunciada cuando el agua residual no se trata adecuadamente para eliminar los elementos o sustancias potencialmente perjudiciales.

El impacto de la contaminación del agua se extiende más allá de los seres humanos, ya que puede tener efectos perjudiciales en diversos organismos, incluidos microorganismos, plantas y animales. Estos contaminantes tienen el potencial de obstaculizar su crecimiento, reproducción y supervivencia en general. En ciertos casos, la contaminación puede incluso resultar en la extinción de especies, lo que ocasiona un daño significativo tanto a los ecosistemas como a las comunidades que dependen de ellos (Carrillo-Guerrero et al., 2013).

Por todo lo mencionado anteriormente, es importante la aplicación del conocimiento disponible para aprovechar correctamente los recursos y disminuir nuestra huella hídrica al mínimo. Esta tarea puede hacerse aprovechando técnicas sostenibles y amigables con el medio ambiente como es la adsorción, la cual tiene el potencial de remover los agentes perjudiciales del agua y mantenerlos confinados, siempre y cuando el equilibrio de adsorción se mantenga. (Tubert & Talanquer, 1997).

Esta tecnología ha sido ampliamente aplicada en la purificación del agua, sin embargo, debido a que la mayoría de los sólidos empleados son altamente porosos, existe la presencia de fenómenos difusionales que disminuyen la velocidad de adsorción (Ocampo-Perez et al., 2010), propiciando que el aprovechamiento de las columnas de adsorción industriales sea bajo. Para subsanar esta desventaja, actualmente ha surgido una alternativa para la obtención de monolitos impresos en 3D con geometría de canales diversos que promuevan el mezclado y la transferencia de masa al interior del lecho, para disminuir así la presencia de efectos difusionales y potenciar la transferencia de masa (Chaparro-Garnica et al., 2020).

En este sentido lo que se busca en esta tesis es predecir el efecto de la geometría de los monolitos sobre la curva de ruptura a partir de ecuaciones fundamentales de transferencia de masa y momentum. Estos resultados permitirán en una posterior etapa sintetizar los monolitos y aplicarlos en la adsorción en fase líquida con la finalidad de maximizar el desempeño de las columnas.

2.-ANTECEDENTES

2.1.-Generalidades del proceso de adsorción

La adsorción es el proceso en el que las moléculas son absorbidas por la superficie de un sólido o líquido, y de forma general se refiere al enriquecimiento de una sustancia química en la superficie de un material, a diferencia del proceso de absorción, en el que una sustancia se difunde en un sólido o líquido para formar una solución. La adsorción es un fenómeno superficial y no penetra a través de la superficie hasta la mayor parte del adsorbente (Worch, 2012).

La adsorción es la adhesión de átomos, iones o moléculas de un gas, líquido o sólido disuelto a una superficie, e implica la formación de una película de moléculas o átomos, también conocida como adsorbato. El resultado de la adsorción es la formación de una película de adsorbato en la superficie del adsorbente, y este proceso puede ocurrir a partir de un gas, líquido o sólidos disueltos. El proceso de desorción es el inverso de la adsorción y normalmente se mide a temperatura constante. La cantidad de material adsorbido se normaliza por la masa del adsorbente con fines de comparación, y una isoterma puede mostrar la cantidad de adsorbato en el adsorbente en función de la presión o la concentración (Ramos, 2017).

La adsorción es una consecuencia de las interacciones atractivas entre la superficie del adsorbente y las especies que se adsorben, y la unión en la adsorción depende de los detalles específicos de las especies involucradas. Además, puede ser de naturaleza física o química, donde la adsorción física no tiene especificidad química e involucra la formación de fuerzas débiles de van der Waals entre el gas y el sólido, mientras que la adsorción química involucra fuerzas químicas específicas entre gases y superficies sólidas (Worch, 2012).

2.2.-Espontaneidad del proceso de adsorción

La **Ecuación** (1) muestra la relación entre la energía libre de Gibbs, la entalpía y entropía del proceso de adsorción. Según las observaciones, el proceso de adsorción ocurre espontáneamente cuando los sitios activos están presentes en la superficie del material adsorbente, por lo que el cambio de energía libre de Gibbs deberá de ser negativo. Ahora bien, si estudiamos el caso de cómo cambia la entropía durante el proceso de adsorción esta adquiere un valor negativo, debido a que durante el proceso de adsorción ocurre una disminución del desorden del sistema, dado que a medida que el soluto se fija en la superficie del adsorbente el sistema se vuelve más ordenado. Por último, siguiendo la **Ecuación** (1) encontramos que si la energía libre de Gibbs y la entropía son negativas, la entalpía deberá ser negativa de la misma forma, lo que supone que el proceso de adsorción se exotérmico.

La **Ecuación** (1) también aplica para el proceso de desorción, pero en este proceso la entropía tiene un valor positivo por lo que la entalpía adquiere un valor positivo, esto lleva a la conclusión de que el proceso de desorción es endotérmico. Este proceso de desorción ocurre de forma paralela al proceso de adsorción solo que cuando el sistema no se encuentra en equilibrio este ocurre más lentamente en relación con el proceso de adsorción, y a medida que la concentración de soluto en la superficie aumenta la velocidad de desorción aumenta hasta que iguala la velocidad de adsorción, en ese momento la energía libre de Gibbs es igual a 0 y el proceso alcanza el equilibrio.

$$\Delta G_{ads} = \Delta H_{ads} - T\Delta S_{ads} \quad (1)$$

Dependiendo de la entalpía del proceso este se puede clasificar como adsorción o absorción; particularmente, la fisorción requiere menos energía que la absorción. Los procesos de adsorción involucran entalpías menores de 50 kJ/mol, mientras que los procesos de absorción involucran entalpías mayores de 50 kJ/mol.

2.3.-Variables que afectan el proceso de adsorción

2.3.1.-Propiedades texturales.

Las características texturales del material adsorbente juegan un papel muy importante en el proceso de adsorción, debido a que éste se lleva a cabo gracias a las interacciones que surgen entre el soluto en solución y los grupos funcionales presentes en la superficie del material. Por características texturales se entiende al conjunto de factores relacionados con la distribución interna de la estructura porosa del material. Como el área específica, volumen de poro, y diámetro promedio de poro. El principal método utilizado para la determinación de estas propiedades es el método BET. Las características texturales dependen de dos factores: la activación utilizada para la obtención del material, y el precursor utilizado para obtenerlo. Existen 3 clasificaciones de la estructura porosa del material según el diámetro de poro: i) los poros cuyo diámetro es mayor a 50 nm se les considera macroporos, ii) los poros cuyo diámetro se encuentra entre 2 nm y 50 nm se les conoce como mesoporos y, iii) aquellos poros cuyo diámetro es menor a los 2 nm son llamados microporos. Los materiales están formados por estructuras de los tres tamaños de poro, pero cada material tendrá diferente distribución de estas estructuras, lo que determinará en gran medida el área específica del material. La estructura microporosa es la principal responsable del área específica de los materiales adsorbentes. Si bien el área específica es un factor muy importante en la elección de material adsorbente, debido a que materiales con área específica grande tienen capacidades de adsorción grandes, Esto dependerá del tipo de sustancia que se quiera adsorber, ya que muchos materiales con áreas específicas grandes tienen una estructura principalmente microporosa. Sin embargo, esto puede convertirse en un problema si el soluto es de gran tamaño, ya que podría obstruir los poros y dificultar el acceso al interior del material (Ramos, 2017) (Cooney, 1998).

2.3.2.-Área específica.

Dado que la adsorción es un fenómeno superficial, es conveniente que el adsorbente tenga alta área superficial para poseer mayor capacidad de adsorción. Sin embargo, en algunos casos existen otros factores limitantes como la estructura porosa.

2.3.3.-Punto de carga cero

El punto de carga cero es una característica del material que surge de las interacciones entre los iones presentes en la solución y los grupos funcionales del material adsorbente. En el punto de carga cero los iones H^+ y OH^- adsorbidos sobre la superficie se encuentran en equilibrio, lo que confiere a la superficie una carga neutra. La carga de la superficie del material depende de los iones adsorbidos sobre la superficie. El pH determina la carga de la superficie; en valores de pH menores que en el punto cero se espera que la superficie adquiera una carga positiva, mientras que para pH mayores la superficie adquiriría una carga negativa.

2.3.4.-pH de la solución

El pH es un factor muy importante en los procesos de adsorción dado que no solo afecta la naturaleza de la superficie del material adsorbente, sino que también tiene un impacto importante en la ionización de las especies químicas presentes en la solución. Algunos compuestos iónicos pueden presentarse en diferentes formas en función del pH.

2.3.5.-Temperatura

La temperatura es un factor importante en el proceso de adsorción. Como se presentó anteriormente, el proceso de adsorción es inherentemente exotérmico. Este proceso al llevarse a cabo a bajas temperaturas favorece el equilibrio de adsorción. Esto es provocado por el aumento de la energía vibracional de las moléculas. Que favorece el escape del adsorbato hacia la superficie del adsorbente(Worch, 2012).

2.4.-Materiales adsorbentes

Existe una amplia variedad de materiales que pueden funcionar como adsorbentes. En general, se debe cumplir con 2 características claves: tener una gran área superficial y, que en la superficie se encuentren grupos funcionales que actúen como sitios activos donde se pueda fijar el adsorbente.

En el mercado de adsorbentes existen materiales naturales y artificiales. Los adsorbentes naturales son aquellos que se pueden encontrar directamente en la naturaleza, y no requieren de un pretratamiento o proceso para ser utilizados. Si bien se requiere de su extracción y procesado para que se utilicen eficientemente, estos materiales son un adsorbedor por sí mismo. Los adsorbentes artificiales requieren de un preprocesamiento o fase de activación para poder ser utilizados como adsorbentes. Estos incluso llegan a ser sintetizados y diseñados para remover contaminantes específicos.

2.4.1.-Carbón activado

El carbón activado es una forma porosa de carbón que puede fabricarse a partir de diversas materias primas carbonosas. La síntesis de este material se lleva a cabo a partir de un precursor cuya estructura está compuesta principalmente de carbón como es el caso de las cascaras de frutas, semillas, madera, etc. El material es sometido a una carbonización en la que se controla cuidadosamente la atmósfera utilizando nitrógeno o dióxido de carbono, para evitar el consumo excesivo de la superficie. Este procedimiento se realiza con el objetivo de romper las cadenas de celulosa del material y dejar un esqueleto formado principalmente de carbón. Este tipo de material tiene algunas propiedades interesantes para la remoción de compuestos aromáticos y farmacéuticos, debido a grupos funcionales presentes en el material. El área específica de estos materiales ronda los 800 – 1000 m²/g, lo que les confiere capacidades de adsorción muy competitivas en relación con los materiales disponibles en el

mercado. Uno de los principales usos del carbón activado es la remoción del sabor y olor del agua en el proceso de purificación. Una de las principales ventajas de este material es su bajo costo, debido a que los precursores y el proceso de obtención son sencillos y de bajo costo, lo que permite producir grandes cantidades en poco tiempo.

2.4.2.-Resinas de adsorción

Los adsorbentes poliméricos o resinas de adsorción son un tipo de adsorbente artificial que se fabrica mediante copolimerización de estireno con ácido acrílico, utilizando divinilbenceno como entrecruzante. La estructura de este tipo de materiales es similar a los intercambiadores iónicos, pero se diferencian en los grupos funcionales presentes en su superficie ya que las resinas de adsorción tienen una menor cantidad de grupos funcionales, y la gran mayoría de estos grupos son no polares o muy ligeramente polares. Este tipo de adsorbentes pueden ser producidos para la remoción de compuestos específicos, mediante la variación de la concentración de entrecruzante y material inerte. Este tipo de material tiene áreas específicas que oscilan entre $800 \text{ m}^2/\text{g}$ y $1200 \text{ m}^2/\text{g}$ según la cantidad de entrecruzante que se utilice. El material puede regenerarse utilizando solventes como el metanol o el isopropanol. Debido a que este tipo de materiales tiene un costo mucho más alto en comparación a los carbones activados, y se requiere de solventes más costoso para su regeneración, no son apropiados para su uso en el tratamiento de agua a gran escala. Su uso está reservado principalmente para la recuperación de compuestos de alto valor agregado.

2.5.-Caracterización de los procesos de adsorción

Antes de utilizar un material adsorbente se requiere de estudios que permitan caracterizar sus propiedades y saber de antemano si el material es apto para el proceso, o prever sus limitaciones para evaluar la rentabilidad de su uso. En este caso se realizan 3 tipos de estudios: i) estudios del equilibrio, ii) estudios cinéticos y iii) estudios dinámicos.

2.5.1.-Estudios de equilibrio

Los estudios de equilibrio de adsorción son importantes ya que nos permiten conocer las capacidades máximas de adsorción del material, y de esta manera estimar los tiempos de vida útil que tendría. En este tipo de estudio se evalúa principalmente la dependencia de la cantidad adsorbida con la concentración en sistemas de lote.

La adsorción inicia cuando el adsorbente se pone en contacto con la solución, la cual cuenta con una cierta concentración de soluto. A medida que el proceso avanza, el adsorbato se adhiere a la superficie del adsorbente disminuyendo así la superficie disponible del adsorbente. A medida que la concentración de adsorbato aumenta, el fenómeno de desorción aparece, y parte del adsorbato que se encuentra fijado en la superficie es liberado nuevamente a la solución, en un principio el proceso de adsorción ocurre más rápidamente que el proceso de desorción, por lo que en un principio es más el soluto que se adsorbe que el que se desorbe. Pero a medida que el proceso avanza el ritmo al que ocurre la desorción es cada vez más rápido, ya que hay una mayor concentración en la superficie del sólido. Eventualmente ambos procesos ocurrirán a la misma velocidad y es en ese momento el sistema habrá alcanzado el equilibrio. En este tipo de estudios se busca principalmente como cambiar el equilibrio de adsorción en función de la concentración (Pillai, 2020).

2.5.1.1.-Isoterma de adsorción

Este tipo de estudio da información acerca de la cantidad adsorbida por gramo de adsorbente, en contacto con una solución de concentración conocida de soluto en fase líquida. Hay una amplia variedad de enfoques que se pueden tomar para analizar los datos utilizando modelos matemáticos. Pero primero se deben de plantear las variables relevantes para el estudio. La concentración de soluto, la cantidad adsorbida y la temperatura del sistema se relacionan según la **Ecuación (2)** como se muestra a continuación:

$$q_e = f(C_{Ae}, T) \quad (2)$$

Donde:

$$q_e = \text{Concentración adsorbida (mg/g)}$$

$$C_{Ae} = \text{Concentración de la solución en equilibrio (mol/L)}$$

$$T = \text{Temperatura (K)}$$

Comúnmente este tipo de estudios del equilibrio de adsorción se llevan a cabo a temperatura constante, de esta forma se evitan los efectos térmicos en el equilibrio, es decir que se utiliza una relación como la descrita por la **Ecuación (3)**:

$$q_e = f(C_{Ae}) \quad (3)$$

Donde:

$$q_e = \text{Concentración adsorbida (mg/g)}$$

$$C_{Ae} = \text{Concentración de la solución en equilibrio (mol/L)}$$

La Tabla 1 presenta, a modo de ejemplo, modelos de isotermas ampliamente utilizados en la literatura.

2.5.1.2.-Modelos de equilibrio de adsorción

Existen varios modelos de isoterma como los mostrados en la Tabla 1 que nos permiten modelar el equilibrio de adsorción. Cada uno se derivó con diferentes supuestos lo que les da diferente estructura matemática y número de parámetros. Dependiendo del modelo, puede obtenerse diferente información acerca del proceso dependiendo de la base teórica del modelo. Sin embargo, en muchas ocasiones este tipo de modelos no aportan información de relevancia teórica, pero ayudan a inferir el comportamiento del sistema con una precisión aceptable. De hecho, pueden utilizarse modelos que fueron desarrollados bajo determinados supuestos sin que el sistema al que se le va a aplicar cumpla con ellos, ya que lo que se busca es modelar el comportamiento en general.

Tabla 1. Modelos de isotermas de adsorción

Modelo de isoterma	Expresión matemática	Parámetros del modelo
Lineal o Ley de Henry	$q_e = kC_{Ae}$	k (L/g)
Freundlich	$q_e = kC_{Ae}^{1/n}$	k ($L^{1/n}/mg^{1/n-1}g$), n
Langmuir	$q_e = \frac{q_m k C_{Ae}}{1 + k C_{Ae}}$	q_m (mg/g), k (L/mg)
Redlich-Peterson	$q_e = \frac{a C_{Ae}}{1 + b C_{Ae}^\beta}$	a (L/g), b (L/mg) $^\beta$, β

2.5.2.-Velocidad de adsorción

Para que el sistema alcance el equilibrio se requiere de un tiempo determinado. El proceso de adsorción puede segmentarse por etapas, las cuales involucran el transporte del soluto desde la solución hasta el sitio activo. El proceso de adsorción en general actúa como una

serie de resistencias a la transferencia de masa, y de ellas depende el tiempo que se requiere para alcanzar el equilibrio. Para determinar las resistencias se llevan a cabo estudios cinéticos, en los que se evalúa el proceso de adsorción con el tiempo.

Este tipo de estudios permite conocer la velocidad global de adsorción y conocer cuál de los mecanismos de transporte de masa presentes controla la velocidad de adsorción, lo que permitiría hacer modificaciones que mejoren la adsorción y eviten cuellos de botella.

2.5.2.1.-Mecanismos de transferencia de masa

El proceso de adsorción sobre sólidos porosos comprende una serie de etapas que involucran transporte de masa. Estas etapas se pueden dividir en tres pasos consecutivos.

1. El soluto se transporta desde la solución líquida a la superficie exterior del material sólido a través de procesos convectivos.
2. El soluto es transportado a la partícula adsorbente a través de dos mecanismos: difusión molecular dentro del líquido presente en el volumen de poro y difusión superficial del soluto que ya está adsorbido
3. El soluto se adsorbe en los sitios activos ubicados en la superficie de los poros.

2.5.2.1.-Modelos de velocidad de adsorción

Los diversos modelos utilizados para explicar el proceso de adsorción a lo largo del tiempo se basan en distintos factores. Por lo general, estos modelos abarcan ecuaciones que explican la transferencia de masa, las correlaciones de equilibrio y el balance general de materiales dentro del adsorbedor. En esencia, hay dos categorías principales de modelos empleados para representar el proceso de adsorción: modelos difusionales y modelos cinéticos de reacción.(Leyva-Ramos & Geankoplis, 1985)

Modelos difusionales.

Los modelos difusionales son ampliamente reconocidos como uno de los modelos más comúnmente aceptados para explicar la velocidad a la que se produce la adsorción en sólidos porosos. Dado que la difusión intraparticular suele ser la fase más lenta dentro de todo el proceso de adsorción, se convierte en la etapa que determina la tasa de adsorción en sólidos porosos. Estos modelos permiten el cálculo de los coeficientes de difusión utilizando los datos adquiridos de los experimentos por lotes. Las ecuaciones (4-9) ilustran el modelo de difusión empleado en un sistema por lotes.

Este modelo fue desarrollado en base a los siguientes supuestos subyacentes.

1. La temperatura se mantiene constante en todo momento.
2. La solución se ha mezclado a la perfección.
3. La transferencia de masa dentro de la partícula adsorbente se puede caracterizar como un proceso de difusión.
4. La velocidad a la que se produce la adsorción en un sitio activo es significativamente mayor en comparación con la velocidad de los procesos de difusión.
5. El material adsorbente posee forma esférica y exhibe propiedades isotrópicas.

$$V \frac{dC_A}{dt} = -mSk_L (C_A - C_{Ar} |_{r=r}) \quad (4)$$

$$t = 0 \quad C_A = C_{A0} \quad (5)$$

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial t} \left[r^2 \left(D_{ab} \frac{\partial C_{Ar}}{\partial t} + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \right) \right] \quad (6)$$

$$C_{Ar} = 0 \quad t = 0 \quad 0 \leq r \leq R \quad (7)$$

$$\frac{\partial C_{Ar}}{\partial r} |_{r=0} = 0 \quad (8)$$

$$D_{ep} \frac{\partial C_{Ae}}{\partial r} |_{r=R_p} + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = k_L (C_A - C_A |_{r=R_p}) \quad (9)$$

Donde:

C_A = Concentración del soluto en solución acuosa (mol/L)

C_{A0} = Concentración inicial del soluto en solución acuosa (mol/L)

$C_A|_{r=R_p}$ = Concentración del soluto en la superficie externa de la partícula ()

k_L = Coeficiente de transporte externo de masa en fase líquida

m = Masa el adsorbente

S = Área externa por unidad de masa de adsorbente

V = Volumen de la solución

t = Tiempo

C_{Ar} = Concentración del soluto dentro de la partícula a una distancia r

D_{AB} = Coeficiente de difusión efectivo

D_S = Coeficiente de difusión superficial

ε_p = Fracción hueca de las partículas

ρ_p = Densidad de las partículas del adsorbente

q = Masa de soluto adsorbida por unidad de peso de adsorbente

r = Distancia radial

Modelos cinéticos.

La suposición subyacente de estos modelos es que el proceso de adsorción del soluto en los sitios activos es el factor determinante. Esto implica que la velocidad de adsorción puede compararse con las velocidades de las reacciones químicas. Aunque estos modelos son sencillos y fáciles de usar, los parámetros derivados de ellos son aplicables solo dentro de las condiciones específicas de los experimentos por lotes, lo que restringe su aplicabilidad más amplia. Estos modelos cinéticos de adsorción se derivan realizando un balance de masa completo del soluto, como se demuestra en la **Ecuación** (10) (Wang & Guo, 2020).

$$m \frac{d\bar{q}}{dt} = -V \frac{dC_A}{dt} \quad (10)$$

Donde:

- $m =$ Masa de adsorbente (g)
- $\bar{q} =$ Concentración adsorbida molar (mol/g)
- $t =$ Tiempo (s)
- $V =$ Volumen de la solución (L)
- $C_A =$ Concentración de la solución (mol/L)

A continuación, discutiremos 3 de los modelos cinéticos más utilizados (Tan & Hameed, 2017):

La **Ecuación** (11) presenta el PFO, que es una versión simplificada del modelo cinético de Langmuir. Esta simplificación asume una alta concentración inicial, la primera etapa de adsorción y un número limitado de sitios activos en el adsorbente. Dentro de este modelo, el parámetro k_1 varía en función de los factores operativos, como la concentración inicial y la masa del adsorbente.

La **Ecuación** (12) presenta el PSO, que es una versión simplificada del modelo cinético de Langmuir, siguiendo los mismos principios que el modelo PFO. Sin embargo, en este caso, el término independiente se expresa de forma cuadrática. En este modelo, el parámetro k_2 varía en función de los factores operativos, incluida la concentración inicial y la masa del adsorbente.

La **Ecuación** (13) describe el modelo de orden mixto, cuyo objetivo es explicar tanto la difusión como la adsorción. Este modelo se basa en varios supuestos clave: que cualquier paso en el proceso de adsorción puede ser el factor de control, ya sea la difusión o la propia adsorción, y que la concentración inicial puede elegirse arbitrariamente.

Pseudo Primer Orden (PFO)

$$\frac{dq}{dt} = k_1 (q_e - q) \quad t = 0 \quad q = 0 \quad (11)$$

Pseudo Segundo Orden (PSO)

$$\frac{dq}{dt} = k_2 (q_e - q)^2 \quad t = 0 \quad q = 0 \quad (12)$$

Modelo de Orden Mixto (MO)

$$\frac{dq}{dt} = k_1 (q_e - q) + k_2 (q_e - q)^2 \quad t = 0 \quad q = 0 \quad (13)$$

Donde:

k_1 = Parámetro de ajuste para el modelo de primer orden

k_2 = Parámetro de ajuste para el modelo de segundo orden

2.6.-Aplicación práctica de la adsorción

De forma práctica y masiva, la adsorción en fase líquida se lleva a cabo en columnas de lecho empacado cuyo diseño y escalamiento no es una tarea simple. En esta parte se involucra el conocimiento suficiente sobre la hidrodinámica del fluido al interior del lecho, y de los fenómenos de transferencia de masa que ocurren en la fase líquida y sólida (Díaz-Blancas et al., 2020). Entre estos fenómenos, la resistencia a la transferencia de masa debido a la difusión intraparticular (difusión en el volumen del poro y difusión superficial) juega un papel relevante en el dimensionamiento de las columnas.

De acuerdo con (Worch, 2012) la adsorción en columnas empacadas es un proceso que depende del tiempo y de la altura del lecho. Durante la operación, las partículas adsorbentes se saturan desde la entrada hasta alcanzar eventualmente la salida de la columna.

Debido a los fenómenos difusionales, la transferencia del adsorbato desde el líquido hasta los sitios de adsorción del sólido no ocurre instantáneamente, y por ende se establece una zona donde predomina el transporte de masa en el lecho conocida como zona de transferencia de masa (ZTM). A medida que transcurre el tiempo, la ZTM se desplaza hacia la salida de la columna hasta su desaparición. A partir de ese momento, la columna se encuentra saturada y la concentración del efluente es igual a la concentración de la alimentación. Al gráfico de la concentración del efluente contra el tiempo se le conoce como curva de ruptura, la cual es un espejo de la ZTM.

Si bien, la columna puede operar hasta el punto de saturación, en la práctica se opera hasta el punto de ruptura, ya que, en este punto, el efluente tiene la máxima concentración permitida. Si la ZTM es amplia el grado de desaprovechamiento de la columna es grande, lo cual es indeseable. Por ejemplo, (Al-Degs et al., 2009) investigaron la remoción dinámica del colorante reactivo amarillo y negro remazol utilizando carbón activado F-400. Los resultados demostraron que modificando la altura del lecho a 3, 6, y 9 cm, y manteniendo otras condiciones operacionales fijas ($C_{A0} = 190 \text{ mg L}^{-1}$, $q = 5 \text{ mL min}^{-1}$, $\text{pH} = 5$, $dp = 600 - 700 \text{ }\mu\text{m}$, $T = 20.0 \text{ }^\circ\text{C}$) se desaprovecha la columna hasta un 56-86 % seleccionando un punto de ruptura de $C_A/C_{A0} = 0.2$. En estudios similares, (Karunaratne & Amarasinghe, 2013) sobre remoción de fenol con carbón activado proveniente del bagazo de caña de azúcar, se realizaron experimentos en columnas de 16 y 32 cm obteniéndose porcentajes de desaprovechamiento de la columna entre 50 y 90 %, respectivamente, con un punto de ruptura de $C_A/C_{A0} = 0.2$. Este desaprovechamiento fue debido a la elevada ultramicroporosidad del carbón activado.

2.7.-Generalidades de impresión 3D

La fabricación aditiva, comúnmente conocida como impresión 3D, abarca una variedad de técnicas utilizadas para crear objetos agregando material capa por capa, alineándolos con las sucesivas secciones transversales de un modelo 3D. Si bien los plásticos y las aleaciones metálicas son los materiales predominantes utilizados en la impresión 3D, la versatilidad de esta tecnología se extiende a prácticamente cualquier sustancia, incluido el hormigón e incluso el tejido vivo.

2.7.1.-Tipos de impresión en 3D

El campo de la impresión 3D ha experimentado un aumento significativo en popularidad debido a su capacidad para producir herramientas que antes se fabricaban exclusivamente a través de intrincados procedimientos de mecanizado. La gama de técnicas disponibles para la impresión 3D ha crecido sustancialmente, abriendo nuevas vías para crear estructuras complejas y diversas utilizando una variedad de materiales con propiedades mecánicas mejoradas. A continuación, se presentan las técnicas empleadas con más frecuencia en el ámbito de la impresión 3D.

2.7.1.1.-Modelado por deposición fundida – FFF

El proceso de modelado por deposición fundida (FFF) implica la deposición de capas de polímeros termoplásticos en estado fundido para crear objetos. Este método se utiliza principalmente para la construcción de prototipos y ayudas visuales. Se puede emplear una amplia gama de materiales, lo que permite flexibilidad para cumplir con los requisitos específicos. Al igual que con cualquier técnica, existen ventajas y desventajas asociadas. En la tabla 2 se menciona algunas de las ventajas y desventajas de la (FFF).

2.7.1.2.-Estereolitografía – SLA

La estereolitografía, también conocida como SLA, es un método que utiliza el poder de la luz láser UV para curar selectivamente un tanque lleno de resina líquida, lo que finalmente da como resultado la formación de un modelo sólido. Esta técnica es muy precisa y produce una calidad superficial encomiable. Exploremos ahora las ventajas y desventajas asociadas. En la tabla 2 se menciona algunas de las ventajas y desventajas de la (SLA).

2.7.1.3.-Procesamiento digital de luz – DLP

El proceso de procesamiento de luz digital (DLP) implica la activación específica de la luz para solidificar una resina líquida y formar un modelo tangible. Si bien comparte similitudes con la técnica SLA en la utilización de resina curable, los dos métodos difieren en cuanto a la fuente de luz empleada para curar el fotopolímero. DLP se basa en un proyector de luz digital para generar una imagen única para cada capa. Las ventajas y desventajas de (DLP) se encuentran en la tabla 2

2.7.1.4.-Fusión por láser selectiva – SLM

La fusión selectiva por láser (SLM) es un proceso que emplea potentes láseres para fusionar selectivamente materiales plásticos en polvo. Esta técnica encuentra sus principales aplicaciones en los ámbitos de la creación de prototipos, las pruebas funcionales y la fabricación de ayudas para la fabricación. Al igual que con cualquier método de fabricación, existen ventajas y desventajas en el uso de SLM.

2.7.1.5.-Inyección de aglutinante – BJ

El proceso conocido como Binder Jetting (BJ) utiliza un líquido adhesivo para conectar varios componentes de un lecho de polvo. Esta técnica se emplea principalmente para la creación de prototipos a todo color y la creación de patrones. Los beneficios e inconvenientes asociados con este método en particular se pueden resumir en la tabla 2.

Tabla 2.- Ventajas y desventajas de las diferentes técnicas de impresión en 3D

Técnica	Ventajas	Desventajas
FFF	<ul style="list-style-type: none">• Rápida velocidad de impresión• Posibilidad de crear piezas de uso final• Amplia gama de materiales compatibles	<ul style="list-style-type: none">• Líneas de capa visibles• Menos detalles que otros métodos
SLA	<ul style="list-style-type: none">• Alta precisión• Calidad de la superficie lisa	<ul style="list-style-type: none">• Las piezas tienden a degradarse con la luz solar• Bajas propiedades mecánicas• Requiere la eliminación del soporte
DLP	<ul style="list-style-type: none">• Alta precisión• Calidad de superficie suave	<ul style="list-style-type: none">• Las piezas tienden a degradarse con la luz solar• Ofrece bajas propiedades mecánicas• Requiere la eliminación del soporte.
SLM	<ul style="list-style-type: none">• Ideal para geometrías complejas• Buena para la producción de piezas en series pequeñas	<ul style="list-style-type: none">• Mayor coste que la mayoría de las otras técnicas• Resultado de superficie granulada y porosa
BJ	<ul style="list-style-type: none">• Permite la producción de modelos a todo color• Buena calidad superficial	<ul style="list-style-type: none">• Ofrece propiedades mecánicas limitadas• Las piezas tienden a ser frágiles y quebradizas

La gama de técnicas disponibles para la creación de prototipos en 3D es amplia y abarca una gran variedad de opciones para satisfacer casi cualquier demanda de complejidad, funcionalidad mecánica o precisión. Por lo tanto, es crucial tener una comprensión clara del objeto previsto y su propósito para seleccionar la técnica de impresión más adecuada, y estar al tanto que todas estas técnicas requieren de técnicas de postprocesamiento, las cuales dependerán no solo de la técnica utilizada, sino del material que se utilizó para el prototipado.

2.7.2.-Materiales para impresión 3D

La variedad de materiales de impresión 3D que se pueden encontrar en el mercado hoy en día es el resultado de una larga evolución desde las primeras etapas de la tecnología de fabricación aditiva. Actualmente, existe una amplia gama de estos materiales, cada uno en diversas formas, como polvo, filamentos, gránulos y resinas. Cada material está diseñado específicamente para una aplicación o propósito particular.

Hay cinco clasificaciones principales para la variedad de materiales que se pueden utilizar en el proceso de impresión 3D.

1. Plásticos; poseen los atributos notables de flexibilidad y un punto de fusión relativamente bajo. En el ámbito de la impresión 3D, se utilizan comúnmente como un filamento en bobina que interactúa con la impresora.
2. Composites; son materiales que poseen una amplia gama de cualidades y pueden ser rígidos o flexibles. Sin embargo, su principal ventaja radica en su excepcional funcionalidad mecánica. Los compuestos se encuentran comúnmente en forma de filamentos.
3. Los metales son conocidos por su excepcional durabilidad y capacidad para soportar el calor extremo. A menudo se utilizan en procesos que involucran altos niveles de estrés y temperatura. Por lo general, los metales se utilizan en forma de filamentos que se han infundido con partículas de metal. Para lograr el componente metálico final deseado, estos filamentos requieren un tratamiento posterior al calor.
4. La cerámica, un material versátil, encuentra su aplicación en la producción de componentes diseñados para su uso en entornos duros o corrosivos. Con un rango de temperatura de impresión de 230 a 260 °C, la cerámica exhibe una durabilidad excepcional incluso en condiciones de frío extremo.

2.8.-Generalidades de los geles de carbón

Los geles de carbón son una sustancia innovadora derivada del proceso de carbonización de geles orgánicos. Más concretamente, se crean mediante la policondensación de monómeros de resorcinol y formaldehído. La característica más notable de estos materiales radica en su excepcional versatilidad, ya que permiten la personalización de las propiedades de textura dentro de los microporos. En consecuencia, se vuelve factible determinar atributos importantes del material por adelantado, incluido el volumen de poro, el área de superficie y la distribución de poro. Dadas estas características distintivas, los geles de carbono son muy prometedores en los ámbitos de la catálisis y la adsorción (Bailón García, 2016).

2.8.1.-Síntesis de los geles de carbón

Como se dijo anteriormente, la técnica de policondensación se emplea en la producción de este material. Para crearlo, se utilizan como precursores el resorcinol y el formaldehído, que experimentan una reacción que conduce a la formación de un derivado conocido como hidroximetil-resorcinol. A continuación, tiene lugar una reacción de condensación que da como resultado la producción de agua y la formación de estructuras poli-aromáticas. Estas estructuras sirven como base del gel de carbón, formando un grupo de macromoléculas que imparten a la solución propiedades Sol-Gel. Tras la adquisición del Sol-Gel, este se somete a un proceso de secado del que se obtienen tres materiales diferentes, determinados por el método de secado elegido. Un enfoque involucra la sustitución del solvente con un fluido supercrítico, lo que resulta en la formación de xerogeles. Otra opción consiste en la congelación seguida de sublimación, lo que da lugar a la producción de crio-geles. El método final es la evaporación térmica, que es el más directo. Entre las tres técnicas de secado, la utilización de CO₂ supercrítico demuestra ser la más efectiva para preservar la estructura del Sol-Gel. Sin embargo, también es la opción más costosa disponible. El proceso de

carbonización se lleva a cabo a temperaturas que oscilan entre 500 y 1500 °C. Durante esta etapa se establecen las propiedades texturales del material. Es importante tener en cuenta que, debido a la naturaleza del proceso, existe la posibilidad de que ciertas estructuras porosas dentro del material colapsen (Bailón García, 2016).

2.8.2.-Dopado de geles de carbón

Es posible lograr un material dopado introduciendo un precursor metálico en la mezcla original. Sin embargo, la incorporación de este agente a la solución inicial provoca alteraciones en la estructura del gel. Esto se debe a su impacto en el pH de la solución y los aspectos químicos del proceso.

El material dopado en cuestión posee propiedades fascinantes cuando se trata de catálisis tanto en fase gaseosa como líquida. Sin embargo, debido a que los metales que sirven como catalizadores están firmemente unidos dentro de la estructura del material desde el principio, se minimiza la probabilidad de lixiviación durante el proceso. Si bien esto ofrece ventajas, también presenta inconvenientes. Por un lado, se vuelve extremadamente difícil para los metales incrustados escapar de la matriz del material. Por otro lado, una parte del material queda completamente envuelta por el polímero, lo que lo vuelve no catalítico y da como resultado un desperdicio de energía para el material adsorbente.

realizaron una extensa investigación sobre el impacto del dopaje en las características del material. Sus hallazgos demostraron que el dopaje tiene una influencia multifacética, que afecta no solo el pH inicial y las propiedades de textura de la mezcla de gel, sino que también altera la naturaleza del metal involucrado. Además, el dopaje puede afectar significativamente la química del proceso Sol-Gel, modificando en consecuencia la estructura del gel de carbono (Bailón-García et al., 2013).

2.9.-Generalidades de simulación computacional

El estudio de la simulación por computadora se centra en el examen de los fenómenos físicos mediante el empleo de técnicas numéricas y el aprovechamiento del poder computacional de las computadoras. Este campo engloba la resolución de ecuaciones gobernantes mediante la aplicación de métodos numéricos. Las simulaciones se pueden clasificar en dos ramas principales de análisis: análisis termo estructural, que se basa en el método de elementos finitos (FEM), y análisis de fluidos, que se basa en la dinámica de fluidos computacional (CFD). El proceso de realizar una simulación computacional generalmente involucra tres componentes esenciales: a) preprocesamiento, b) resolución de ecuaciones (también conocido como procesamiento) y c) postprocesamiento.

La etapa de preprocesamiento implica la introducción de varios elementos necesarios para el análisis, como datos geométricos, condiciones de contorno, perturbaciones del sistema, mallado espacial (también conocido como discretización espacial) y el tipo de análisis elegido. Para llevar a cabo con éxito esta etapa, es fundamental tener un conocimiento previo de las condiciones iniciales. Esto a menudo implica recopilar datos del campo o hacer suposiciones sobre el comportamiento preliminar del componente que se está estudiando. A partir de ahí, se vuelve imperativo determinar el análisis adecuado que se requiere para lograr la respuesta deseada.

Para resolver las ecuaciones se emplea una computadora y algoritmos especializados de cálculo numérico. Este proceso lo realiza el ordenador de forma independiente, siguiendo la configuración preestablecida. Sin embargo, es importante señalar que la exactitud y precisión de los resultados obtenidos dependen de la calidad de la información inicial proporcionada.

Una vez que la etapa anterior ha dado una solución, el paso siguiente implica el procesamiento posterior. Esto implica un examen y una presentación más exhaustivos de los resultados obtenidos. En caso de que los resultados se desvíen de las expectativas o revelen inconsistencias, se decide si se vuelve a la etapa de preprocesamiento o se acepta la solución actual como satisfactoria.

Al utilizar la simulación por computadora, se puede examinar una amplia gama de fenómenos físicos, lo que permite a los diseñadores explorar varios escenarios sin la necesidad de extensos experimentos de laboratorio. La utilización de esta tecnología en el desarrollo de productos facilita la consecución rápida y precisa de soluciones. Desde la conceptualización inicial hasta la ingeniería compleja, se vuelve factible obtener una comprensión integral de la física subyacente y las distintas respuestas de los sistemas diseñados. Además, un atributo digno de mención es la capacidad de investigar productos y equipos, lo que lleva a una mayor eficiencia operativa para las empresas mediante la aplicación de esta tecnología en diversos dominios, como mantenimiento, procesos de fabricación, análisis de fallas, investigación y optimización para la mejora del producto. Al utilizar estas tecnologías, se vuelve factible crear prototipos virtuales y evaluar varios escenarios. Esto permite lograr ahorros sustanciales de tiempo y costos.

La dinámica de fluidos computacional ofrece una comprensión integral del comportamiento de los fluidos, que abarca sus atributos fisicoquímicos reales. Esto permite a los ingenieros evaluar el rendimiento de sus diseños por adelantado, sin necesidad de realizar costosos ensayos experimentales. Al utilizar CFD, los ingenieros pueden realizar evaluaciones aerodinámicas para examinar el impacto del flujo externo en vehículos y aeronaves. Este análisis produce datos valiosos, incluidos coeficientes de arrastre y elevación, perfiles de presión, perfiles de velocidad y más.

El método de elementos finitos permite la determinación de los valores de tensión-deformación en cualquier componente de una estructura compleja durante el análisis estructural. Además, este método produce resultados significativos en estudios térmicos, análisis de vibraciones, evaluaciones de daños acumulados y vida útil por fatiga, y optimización estructural, entre otras áreas clave. A través de simulaciones por computadora, los investigadores pueden examinar el comportamiento de mecanismos intrincados y la interacción entre sus partes individuales. Por ejemplo, siguiendo un análisis dinámico, se pueden adquirir medidas de desplazamientos, velocidades y aceleraciones dentro de un conjunto que representa los componentes de la suspensión de un vehículo.

2.10.-Aplicación de nuevos enfoques en problemas de vanguardia

La utilización de la tecnología de impresión 3D ha surgido recientemente como un método alternativo para producir estructuras con geometrías complejas y controladas, como los monolitos. Los monolitos, bloques de forma uniforme con canales paralelos para la circulación de fluidos, ofrecen varias ventajas, incluida una transferencia de masa mejorada, mayor estabilidad mecánica, menor acumulación de depósitos y obstrucciones, menores caídas de presión que permiten el tratamiento de caudales más altos y facilidad de instalación y mantenimiento. y reemplazo. Estos beneficios han sido destacados en estudios de Liu et al. (2021), Thakkar et al. (2017, 2018), Zhang et al. (2020) y Rangel Sequeda et al. (2022).

La utilización de la impresión 3D no solo permite la creación de diversas estructuras utilizando diferentes materiales, sino que también permite la formación de bloques sólidos compuestos por canales con geometrías únicas. Estas geometrías facilitan un aumento en el área de la superficie de contacto y la distribución de fluidos y solutos por todo el lecho. En consecuencia, esto promueve una transferencia de masa más eficiente entre el fluido y el material sólido. Para ilustrar, Chaparro-Garnica et al. (2020) utilizó la impresión 3D para

sintetizar un monolito con canales interconectados. Este monolito sirvió como material de soporte, concretamente CuO/CeO₂, para la ejecución de la reacción COPROX.

Los hallazgos indicaron que el rendimiento de este monolito en particular superó al de un monolito de canal recto tradicional. Esto se atribuyó a la mayor transferencia de masa de reactivos y productos. Los monolitos ofrecen claras ventajas en términos de control de la geometría del flujo, así como la distribución y densidad de los sitios adsorbentes. Estas características son cruciales para optimizar el proceso de transferencia de solutos desde el líquido portador hasta el sitio del adsorbente y, en última instancia, reducir la zona no utilizada en una columna empaquetada para la adsorción. Además, la impresión 3D proporciona un beneficio adicional al permitir la creación de un modelo digital. Este modelo se puede utilizar para aplicar ecuaciones de gobierno para la transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento, lo que facilita la simulación y la predicción del comportamiento del sistema sin necesidad de ensayos experimentales costosos y lentos. Por lo tanto, con los avances actuales en la impresión 3D y la producción de monolitos de carbono innovadores, se vuelve imperativo evaluar su rendimiento y la influencia que ejerce la geometría en la utilización de la columna en configuración de adsorción continua.

3.-JUSTIFICACIÓN

Desde que se empezó a utilizar materiales adsorbentes como lecho fijo en las columnas de adsorción para la remoción de contaminantes del agua, los esquemas de contacto no han logrado un aprovechamiento adecuado del material adsorbente, debido en parte a la dinámica del proceso de adsorción que tiene lugar al interior del lecho. Esto como consecuencia de que el proceso de adsorción no sea instantáneo, sino que suceda en 3 etapas, [i) Transferencia de masa externa, ii) Difusión intraparticular y iii) Fijación sobre la superficie del sólido] provocando que la adsorción en lecho fijo no sea homogénea, sino que suceda sobre una sección de la columna llamada zona de transferencia de masa (ZTM), cuyo tamaño va de la mano con los fenómenos difusivos antes mencionados. La otra parte de la problemática proviene de las regulaciones utilizadas para la operación de los lechos, que en la práctica solo permiten utilizar el lecho hasta que el efluente del proceso alcanza un 10% de la concentración de la alimentación.

Por ende, ha sido primordial desarrollar esquemas de contacto más eficaces que nos permitan tener lechos con distribuciones de soluto que propicien un mejor aprovechamiento del material adsorbente, logrado a partir de la disminución de los efectos difusivos presentes en el proceso de adsorción. Ahora bien, en la actualidad han surgido una variedad de enfoques para abordar esta problemática, pero recientemente la tecnología de impresión 3D ha ido en auge lo que abre la posibilidad de diseñar estructuras novedosas que permitan una distribución de mezclado que reduzca el efecto de la transferencia de masa externa, aprovechando el diseño asistido por computadora para crear modelos en 3D que posteriormente se podrían simular y construir aprovechando software especializado e impresión en 3D, permitiéndonos ahorrar tiempo y recursos al modificar la geometría sin recurrir al proceso de producción para diseñar un lecho adecuado para el proceso.

4.-HIPÓTESIS

El desarrollo de estructuras monolíticas con diferente geometría y distribución de sus canales permite maximizar la adsorción en lecho fijo disminuyendo la resistencia a la transferencia de masa externa, lo cual se obtiene al adelgazar la capa límite entre la solución y el material adsorbente. Consecuentemente, la Zona de Transferencia de Masa de la columna se reducirá aumentando la eficiencia y uso del material adsorbente.

5.-OBJETIVOS

5.1.-Objetivo general

En este estudio se busca construir estructuras que permitan una distribución de mezclado que reduzca el efecto de la transferencia de masa externa, aprovechando el diseño asistido por computadora para crear modelos en 3D, e implementar un modelo matemático robusto basado en transferencia de masa y momento para predecir la distribución de soluto en cada geometría, con énfasis en aquellas adecuadas para la impresión 3D, y evaluar su desempeño mediante simulación numérica y estudios extensos en diferentes condiciones de proceso.

5.2.-Objetivos específicos

1. Implementar un modelo matemático basado en fenómenos de transferencia de masa y momentum que permita predecir con precisión la distribución de soluto dentro de una amplia variedad de geometrías.
2. Plantear al menos 2 geometrías en las que se utilice el modelo matemático propuesto y cumplan con las características para ser impresas utilizando impresión 3D.
3. Evaluar el desempeño de las geometrías propuestas mediante las curvas de ruptura obtenidas a través de la simulación numérica.
4. Realizar estudios extensos que permitan evaluar la fiabilidad del modelo matemático en un amplio espectro de condiciones de proceso

6.-METODOLOGIA

6.1.-Diseño e implementación de las geometrías

En este trabajo se estudiarán 4 casos, cada uno con diferente geometría de lecho como se muestra en la **Figura** (1), en donde se puede observar los 4 planos de trabajo en 2D, junto con las dimensiones características de cada caso. A partir de los planos de trabajo mostrados en la **Figura** (1) se construirá la estructura de los lechos en 3D para los 4 casos utilizando la rotación axisimetrica del plano de trabajo. Mientras que la **Figura** (2) muestran las geometrías obtenidas a partir de la rotación de los planos de trabajo presentados en la **Figura** (1).

Las geometrías fueron diseñadas en el software COMSOL Multiphysics y tienen una disposición diferente del espacio hueco debido al arreglo de los canales.

En la Figura (1A) podemos observar el plano de trabajo utilizado para la obtención de la geometría del caso 1 mostrada en la **Figura** (2A), en este trabajo se emplearon canales en forma de T, para observa que efecto tiene, el sucesivo cambio de dirección del fluido dentro del lecho.

En la Figura (1B) Se observa el plano de trabajo para la geometría del caso 2 en esta podemos observar como el fluido converge ala salida en el canal central de la geometría y provoca un canal amplio como se ve en la **Figura** (2B)

En lo que respecta al caso 3 podemos observarlo en la **Figura** (1C), este caso tiene la particularidad que el área de flujo es constante, además de que es el que tiene la mayor área de flujo de los 4 casos estudiados.

Por ultimo el plano de trabajo para el caso 4 se encuentra en la **Figura** (1D), Este caso posee la particularidad de que el ancho de sus canales es el mas grande de los 4 casos. Y posee un canal central donde el fluido converge en uno solo.

En la **Tabla (3)** se presentan el volumen total, volumen de sólido, porosidad, masa de adsorbente y el área específica, estas son las principales características de cada monolito, y como se puede observar se hizo lo posible por trabajar con geometrías cuyas características sean muy similares entre ellas, Esto se hizo con el motivo de poder realizar comparativas entre los casos, manteniendo al mínimo las diferencias.

Cada uno de los lechos miden 5 cm de radio y 15 cm de altura. Dependiendo de cada caso, hay variaciones del volumen de sólido de alrededor de 31 cm³ ya que cada geometría tiene diferente distribución y volumen de huecos. En el caso de la cantidad de masa de adsorbente se observa un máximo de 671.05 g y un mínimo de 637.69 g, es decir se tiene una variación máxima del 5 % en la cantidad de masa entre los 4 monolitos. Por lo cual, se puede considerar que los resultados derivados serán comparables y atribuibles a la diferencia de diseño de los monolitos.

Tabla 3. Características geométricas y físicas de los monolitos.

Caso	Volumen total [cm ³]	Volumen de solido [cm ³]	Porosidad	Masa de adsorbente [g]	Área específica [cm ² /g]
1	1177.0	594.31	0.495	637.69	12.10
2	1177.0	623.92	0.470	669.47	15.90
3	1177.0	600.45	0.490	644.28	18.00
4	1177.0	625.40	0.469	671.05	8.18

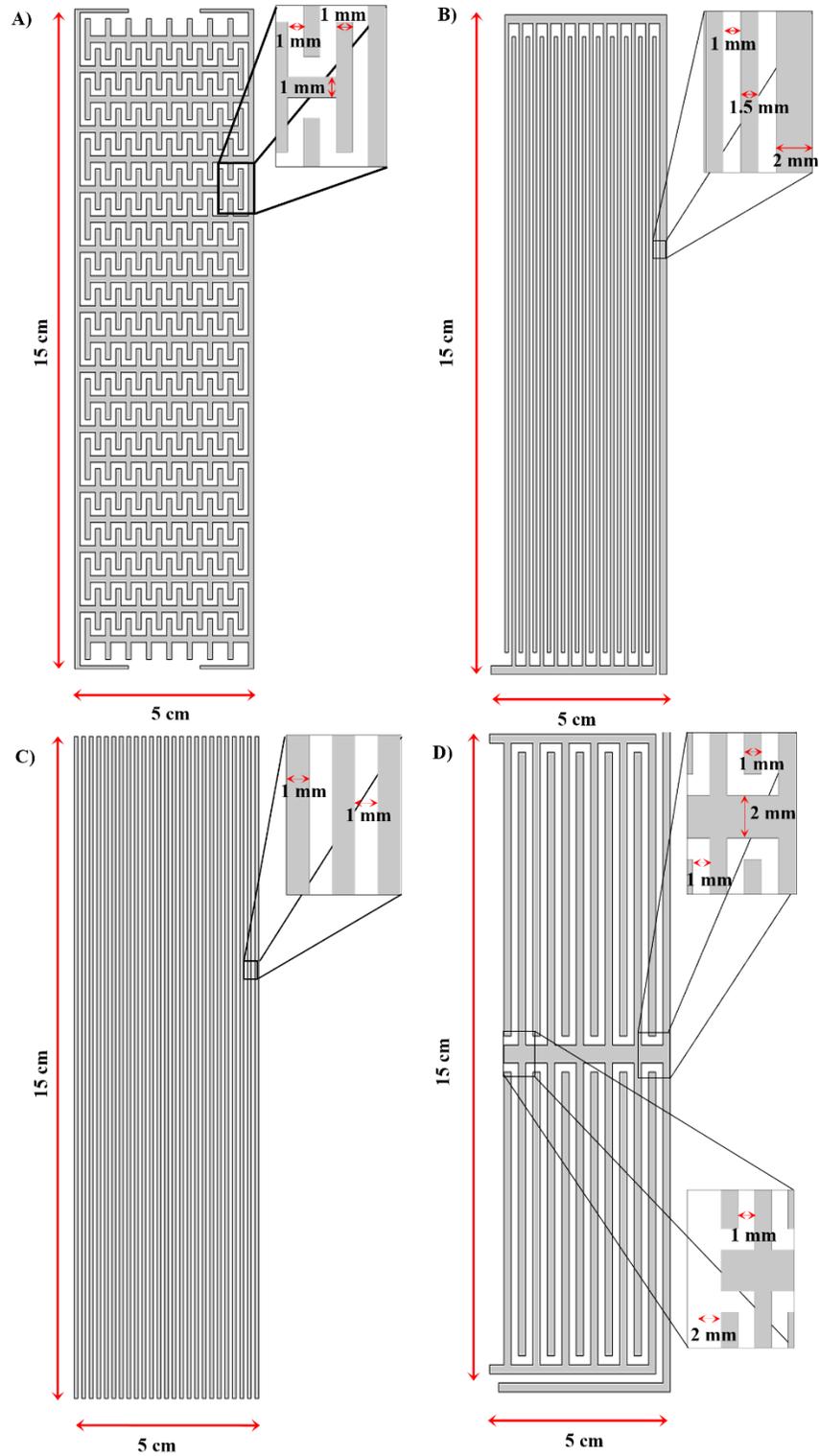


Figura 1. A) Monolito con canales en forma de T, B) Monolito de canales entrecruzados, C) Monolito de anillos concéntricos, D) Monolito de canales con intersección. Dimensiones en cm.

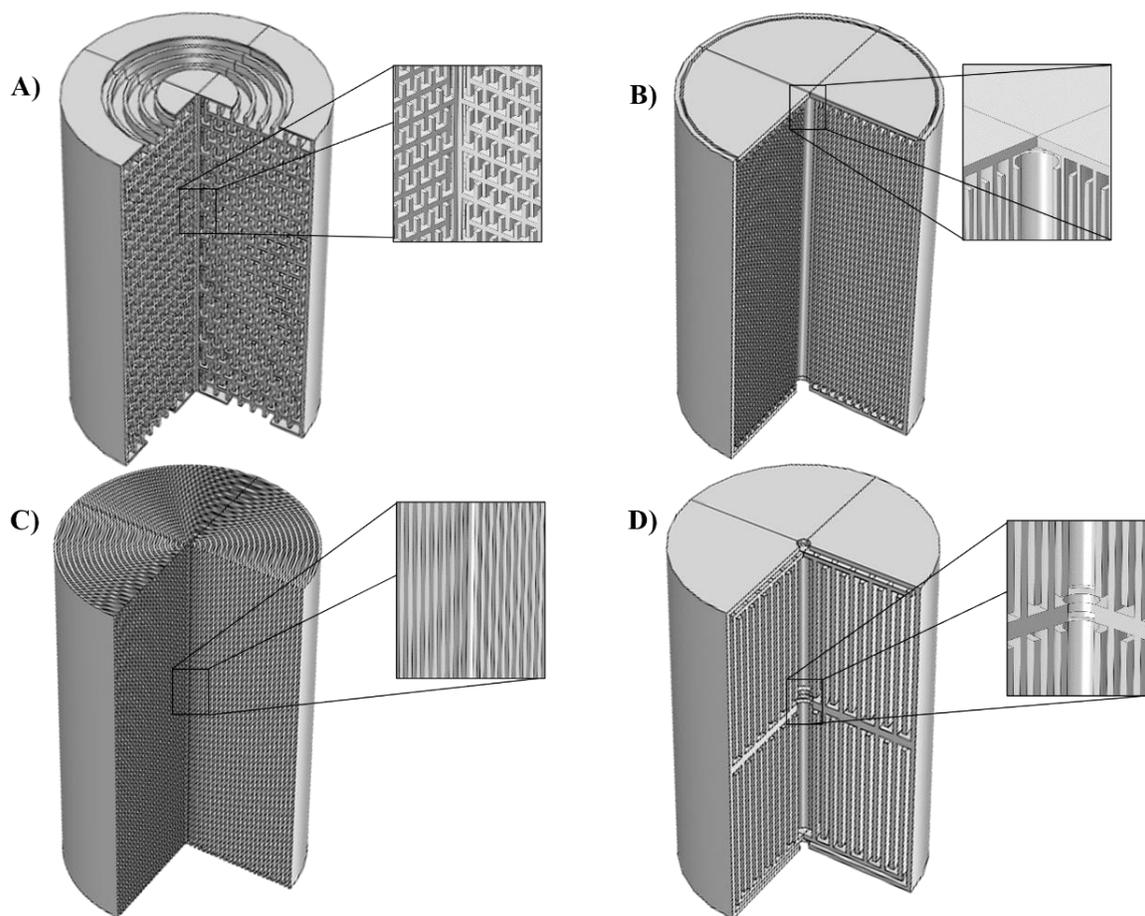


Figura 2. Revolución axisimétrica y tipo de canal de los monolitos A) Monolito A, forma de T; B) Monolito B, canales entrecruzados, C), Monolito C, anillos concéntricos; y D) Monolito D canales con intersección.

6.2.-Descripción matemática del proceso de adsorción

Antes de intentar describir matemáticamente cualquier proceso dado, es imperativo tener una comprensión completa de su mecánica subyacente. Con esta comprensión en su lugar, uno puede seleccionar un modelo apropiado que posea una base teórica sólida o que sea de aplicación general. Posteriormente, a través de un proceso de ajuste de parámetros, el modelo elegido puede representar efectivamente el comportamiento del sistema real dentro de un rango aceptable de certeza.

El tema de este trabajo gira en torno al concepto de adsorción, un fenómeno que ha sido ampliamente investigado y comprendido a fondo. Como se mencionó anteriormente, el proceso de adsorción se puede dividir en tres etapas distintas: transferencia de masa externa, transferencia de masa intraparticular y adsorción en el sitio activo. Cada una de estas etapas juega un papel importante en el proceso general de adsorción. Por lo tanto, para replicar con precisión este proceso, es crucial que nuestro modelo incorpore ecuaciones que abarquen estas tres etapas. Aparte de tomar en consideración las etapas del proceso de adsorción el modelo se debe adaptar a el entorno en el que se aplicara, debido a que como se muestra en la **Figura (3)** en donde se aprecian los dominios de sólido y líquido para el caso 1 marcados con negro y azul respectivamente, tales dominios deben su importancia debido a que de los dependerán las ecuaciones que se apliquen en cada uno.

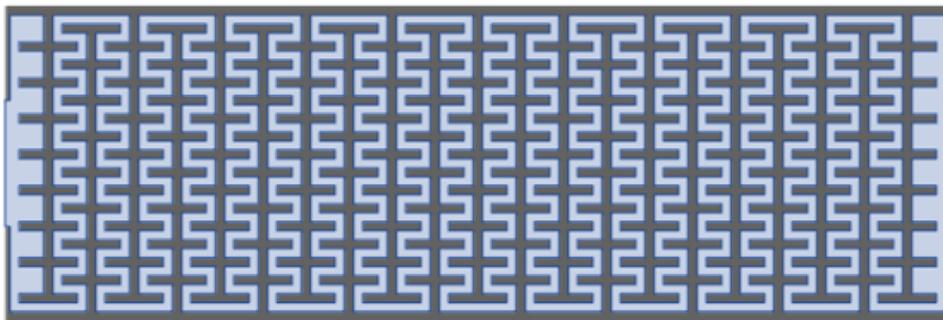


Figura 3. Identificación de los dominios asignados al caso 1. El color azul claro representa la fase líquida y el color gris oscuro la fase sólida.

6.3.-Descripción matemática de la fase líquida

En el caso de la fase líquida se requiere de describir 2 fenómenos de manera conjunta, la transferencia de momento y la transferencia de masa, debido a que en esta fase ocurren ambos fenómenos de forma simultánea. Es muy importante que los modelos que se utilizaran en esta fase líquida se resuelvan de forma conjunta, ya que ello da origen a la convección forzada que permite un mezclado homogéneo en los canales del lecho fijo.

Para el análisis de momento se optó por utilizar el modelo de Navier-Stokes [Ecuación (13)] en conjunto con la Ecuación de continuidad [Ecuación (12)].

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-P \mathbf{I} + (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] \quad (13)$$

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (14)$$

Donde:

ρ = Densidad del fluido

t = Tiempo

\mathbf{u} = Velocidad del fluido

μ = Viscosidad

μ_T = Viscosidad turbulenta

P = Presión

En la Ecuación (13) el término μ_T representa la viscosidad turbulenta, la cual resulta de considerar verdadera la hipótesis de Boussinesq para el tensor de estrés de Reynolds y se estima con la Ecuación (15). En este caso se determina usando el modelo de cerradura kappa-epsilon ($\kappa - \epsilon$) el cual consta de las Ecuaciones (16) y (17) (Wilcox, 1998). Este modelo, introduce las variables de energía cinética de turbulencia, κ , y la tasa de disipación de energía cinética, ϵ .

$$\mu_T = \rho c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (15)$$

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (16)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + c_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - c_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (17)$$

Donde:

$\rho =$ Densidad del fluido

$t =$ Tiempo

$\mathbf{u} =$ Velocidad del fluido

$c_{\varepsilon 1} =$ Primer parámetro del modelo disipación de energía

$c_{\varepsilon 2} =$ Segundo parámetro del modelo de disipación de energía

$c_\mu =$ Constante del modelo de turbulencia

$\sigma_k =$ Constante del modelo de energía cinética

$\sigma_\varepsilon =$ Constante del modelo de disipación de energía

Para la solución del modelo descrito por la **Ecuación** (13) se utilizaron 3 condiciones de frontera, una condición de no deslizamiento para las paredes de los canales descrita por la **Ecuación** (18), una condición de velocidad de entrada constante **Ecuación** (19) en el límite inferior de la geometría, y como condición de salida igualdad con la presión de los alrededores [**Ecuación** (20)], como condición inicial se estableció que la velocidad a lo largo de la columna sería 0 [**Ecuación** (21)]

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (18)$$

$$\mathbf{u} = -U_o \mathbf{n} \quad (19)$$

$$[-p\mathbf{I} + \mathbf{K}]\mathbf{n} = -p_o \mathbf{n} \quad (20)$$

$$\mathbf{u} = 0 \quad (21)$$

Para el caso de la transferencia de masa a lo largo de los canales, se consideraron 2 mecanismos de transporte, convección forzada y dilución molecular, ambos procesos de transferencia se incorporaron en el modelo matemático propuesto en la **Ecuación** (22) en la que el segundo término, considera la difusión molecular, y el tercer término, la convección forzada. Para el caso de la convección forzada como se observa en la **Ecuación** (22) depende de un vector de velocidad, el cual se tomará a partir de la solución de la **Ecuación** (13)

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_{AB} \nabla C_A) + \mathbf{u} \cdot \nabla C_A = 0 \quad (22)$$

Donde:

C_A = Concentración en la fase líquida

t = tiempo

\mathbf{u} = Velocidad del fluido

D_{AB} = Difusividad del componente a en b

Para la solución del modelo descrito por la **Ecuación** (22) se utilizaron 3 condiciones frontales, una condición de concentración constante a la entrada, descrita por la **Ecuación** (23), una condición de igualdad de concentraciones en la interfaz de la fase líquida y sólida descrita por la **Ecuación** (24) y una condición de discontinuidad de flujo de materia por difusión molecular descrita por la **Ecuación** (25), como condición inicial del proceso se consideró que la concentración a lo largo de los canales es 0 mol/L, esto se describe en la **Ecuación** (26)

$$C_A = C_{A0} \quad (23)$$

$$C_{A,Superficie} = C_{A,Poros} \quad (24)$$

$$\mathbf{n} \cdot D_{AB} \nabla C_A = 0 \quad (25)$$

$$C_A = 0 \quad (26)$$

6.4.-Descripción matemática de la fase sólida

En el caso de la fase sólida ocurren 2 fenómenos relacionados con el proceso de adsorción, la difusión intraparticular y la adsorción superficial, estos procesos fueron tomados en consideración al proponer el modelo descrito por la **Ecuación (27)**, en el que la difusión intraparticular se encuentra presente a través de 2 mecanismos de difusión; difusión por volumen de poro y difusión superficial, estos dos mecanismos de difusión fueron tomados en consideración en el modelo con los coeficientes de difusión superficial D_s y el coeficiente de difusión por volumen de poro D_{ep} . Aparte de los fenómenos difusivos el mismo modelo descrito por la **Ecuación (27)** toma en consideración el proceso de adsorción en el sitio activo, el cual se encuentra representado por el cociente $\partial q/\partial t$, este término nos permite relacionar la concentración adsorbida con la concentración presente en los canales del sólido.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_{ep} \nabla C_A + D_s \rho_p \frac{\partial q}{\partial C_A} \nabla C_A \right) \quad (27)$$

Donde:

C_A = Concentración de la solución en los poros

q = Concentración adsorbida

t = tiempo

D_{ep} = Difusividad en el volumen del poro

D_s = Difusividad en por la superficie

Para la solución del modelo descrito por la **Ecuación (27)** se utilizaron 2 condiciones frontera y una condición inicial. La primera condición frontera se encuentra descrita por la **Ecuación (28)**, Esta condición de frontera describe la igualdad de fluxes que existe en la interfaz sólido-

líquido, y la segunda condición frontera es una condición de no flujo [**Ecuación (29)**] la cual fue aplicada en la periferia de la geometría y representa el límite del material absorbente.

Aparte de las condiciones de frontera se utilizó una condición inicial, en la que se consideraba que la concentración inicial en el sólido será de 0 mol/L, esta condición se encuentra descrita por la **Ecuación (30)**.

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = -D_{ab} \nabla C_A \quad (28)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (29)$$

$$C_A = 0 \quad (30)$$

El término $D_s \rho_p [\partial q / \partial C_A] \nabla C_A$ en la **Ecuación (27)** representa la relación que existe entre la cantidad de masa de soluto adsorbida (adsorbato) y la concentración dentro de las paredes del monolito. Generalmente, se considera que la adsorción en el sitio activo del adsorbente es instantánea y se determina por medio del modelo de equilibrio de adsorción. En este trabajo se empleó como modelo de equilibrio la isoterma de Langmuir, la cual está dada por la **Ecuación (31 y 32)**, y considera que la adsorción se da en una monocapa.

$$q_e = \frac{q_m k C_{Ae}}{1 + k C_{Ae}} \quad (31)$$

$$\frac{\partial q}{\partial C_A} = \frac{k q_m}{(1 + k C_A)^2} \quad (32)$$

Donde:

C_{Ae} Concentración en equilibrio

q_m = Concentración máxima de adsorción

q = Concentración adsorbida

k = Constante del modelo de Langmuir

6.5.-Calculo de fracción saturada y rendimiento de la columna.

Una vez obtenidas las distribuciones a lo largo de la columna se requiere de calcular su desempeño, en este trabajo se optó por monitorear la concentración a la salida del monolito, para obtener la curva de ruptura para cada caso, y con esto evaluar el punto de saturación, el punto de ruptura y el aprovechamiento de la columna.

Para medir el punto de ruptura se monitoreo la concentración del efluente hasta que alcanzo un 10% de la concentración de la solución a al entrada, y en ese momento se evaluó el tiempo, mientras que para el punto de saturación se evaluó el tiempo en el momento en que la concentración a las salida del sistema alcanzo el 95% de la concentración de la entrada, esto se hizo de esta manera ya que el tiempo requerido para una saturación del 100% era muy largo, ya que las zonas que impedían que se alcanzara el 100% eran puntos muertos donde el proceso de adsorción era muy lento, por ultimo para el aprovechamiento de la columna se utilizó la **Ecuación** (35), la cual se apoyó en la **Ecuación** (33 y34) las cuales nos permiten obtener el área por encima de la curva de ruptura, la cual es proporcional a la cantidad de materia adsorbida por la columna. Otra manera de evaluar el aprovechamiento es con la **Ecuación** (36) la cual sirve para obtener un estimado del espesor de la Zona de transferencia de masa.

$$A_r = \int_0^{t_r} \left(1 - \frac{C_A}{C_0}\right) dt \quad (33)$$

$$A_s = \int_0^{t_s} \left(1 - \frac{C_A}{C_0}\right) dt \quad (34)$$

$$\%A = \frac{A_R}{A_S} \cdot 100 \quad (35)$$

$$H_B = \left(1 - \frac{A_R}{A_S}\right) \cdot H_T \quad (36)$$

6.6.-Aspectos computacionales

Para la solución del sistema de Ecuaciones (13)-(32) se empleó el software comercial COMSOL Multiphysics, el cual emplea el método de elemento finito para la solución de las ecuaciones diferenciales parciales y sus respectivas condiciones iniciales y de frontera. Con el fin de resolver el modelo matemático en cada una de las geometrías propuestas, se crearon arreglos de malla tetraédricos utilizando una distribución normal lo cual facilito la creación en cada caso de los elementos de dominio, aristas y vértices propios para cada geometría, de tal forma que el tamaño mínimo del elemento de malla fuera congruente con la dimensión de los canales más pequeños presentes en la geometría. Además, se realizó un refinamiento de malla en la frontera solido-líquido para evitar problemas de convergencia provocados por las fluctuaciones de velocidad y concentración. El número de elementos que conforman el mallado de cada geometría se encuentran en la **Tabla (4)**.

Tabla 4. Características del mallado para cada caso de estudio.

Caso de estudio	N° de dominios	N° de vértices	N° de contornos	Calidad mínima de los elementos
1	184019	3432	28084	0.4733
2	134957	810	17062	0.4514
3	132679	732	18176	0.4427
4	125459	800	12588	0.518

Para la solución de las ecuaciones algebraicas se empleó el revolvedor MUMPS el cual es un método directo que permite resolver el conjunto de ecuaciones aprovechando al máximo las capacidades de la computadora por lo que se obtiene un resultado en menor tiempo en comparación con un revolvedor iterativo.

Para la solución de los diferentes dominios sobre los cuales se aplica el modelo matemático para el transporte de momentum y materia, se emplearon diferentes estudios con la finalidad de obtener los valores óptimos para la convergencia del sistema de ecuaciones. Los valores

iniciales óptimos que permiten la convergencia del modelo planteado por las Ecuaciones (13)-(32), se obtuvieron mediante el siguiente procedimiento:

- Para la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante la solución de las ecuaciones RANS se realizó un estudio en estado estacionario, cuyos valores de solución para las variables de velocidad y presión, así como las variables de turbulencia fueron empleados como valores iniciales para un segundo estudio dependiente del tiempo, y cuya solución se acopla a las ecuaciones de transporte de masa.
- En el caso del de transporte de masa, los valores iniciales para la solución de sus variables se obtuvieron a partir de un estudio en estado estacionario que acopla las variables de presión y velocidad, así como las variables de turbulencia en el monolito a las ecuaciones de transporte de masa.

El modelo matemático se alimentó de parámetros de operación y de transporte de masa de acuerdo a los mostrados en la **Tabla** (5), los cuales se reportaron por Aguirre-Contreras et al., (2022) para la obtención de curvas de ruptura del sistema carbón activado (F-400) e hidroxiquinoleína. Es importante mencionar que la metodología desarrollada en este trabajo es independiente del sistema adsorbato-adsorbente. Así, el único requisito para emplearla es contar con valores para los parámetros mostrados en la **Tabla** (4) para el sistema adsorbato-adsorbente que se pretenda analizar.

Tabla 5. Parámetros operacionales y de transporte de masa para el sistema carbón activado-Hidroxiquinoleína (Aguirre Contreras Samuel, 2022).

Parámetro	Valor	Descripción
q_m [mg/g]	450	Capacidad máxima de adsorción
K [L/mg]	0.0802	Constante de Equilibrio del modelo de Langmuir
D_s [cm ² /s]	2.32×10^{-8}	Coefficiente de difusión Superficial
D_{ep} [cm ² /s]	2.14×10^{-7}	Coefficiente de difusión por volumen del poro
D_{ab} [cm ² /s]	1.36×10^{-6}	Coefficiente de difusión molecular
C_o [mol/L]	0.01	Concentración inicial
ε_p	0.55	Fracción hueca del adsorbente
τ	3.5	Factor de tortuosidad
ρ [g/cm ³]	1.073	Densidad de la partícula
MW [g/mol]	145.16	Peso molecular del soluto
V_o [m/s]	1×10^{-6}	Velocidad inicial

8.-. CONCLUSIONES

Aplicamos un modelo matemático basado en fenómenos de transporte, que nos permitió obtener las distribuciones de concentración y velocidad a lo largo de las 4 geometrías propuestas como se muestra en las **Figuras** (11-14) y **Figuras** (4-7).

Se realizaron una serie de estudios paramétricos en los que se varió la velocidad inicial, la concentración inicial y la difusividad, y se encontró que la metodología también es capaz de ser aplicada a un espectro amplio de condiciones **Figura** (17-19),

El modelo matemático utilizado para la reproducción de los fenómenos de transporte presentes en el proceso de adsorción es suficientemente robusto como para que pueda ser aplicado a cualquier geometría **Figura** (1)

Los estudios de sensibilidad realizados demostraron que el modelo matemático reproduce adecuadamente lo que sucede en el proceso de adsorción **Figura** (16)

La velocidad no solo mostro modifica el tiempo de residencia, sino que, demostró que esta tiene un impacto importante en el proceso de adsorción debido al adelgazamiento de la capa limite como se muestra en la **Figura** 18

Los cambios en la concentración y la difusividad demostraron que el espesor de la curva de ruptura es dependiente de los gradientes de concentración y los efectos difusivos como se muestra en la **Figura** (17) y **Figura** (19).

El Caso 2 en el cual se utilizó un monolito que solo cuenta con una etapa de estrechamiento después de todos los estudios realizados demostró ser el que tiene mejor desempeño ya que en este monolito se obtuvo la curva de ruptura menos amplia ala ves que es el Caso con menores perdidas de energía lo cual vemos reflejado en caídas de presión bajas **Tabla** (6), **Figura** (9).

9.-REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Aguirre Contreras Samuel. (2022). *Modelado matemático de curvas de ruptura para la eliminación de 8-hidroxiquinoleína a partir de estudios fundamentales de equilibrio y velocidad de adsorción* [UASLP]. <https://repositorioinstitucional.uaslp.mx/xmlui/handle/i/7506>
- Al-Degs, Y. S., Khraishah, M. A. M., Allen, S. J., & Ahmad, M. N. (2009). Adsorption characteristics of reactive dyes in columns of activated carbon. *Journal of Hazardous Materials*, 165(1–3), 944–949. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2008.10.081>
- Bailón García, E. (2016). *Hidrogenación selectiva de aldehídos A, B-Insaturados y fotodegradación de contaminantes con catalizadores basados en xerogeles de carbón* [Universidad de Granada]. <https://digibug.ugr.es/handle/10481/42973>
- Bailón-García, E., Maldonado-Hódar, F., Pérez-Cadenas, A., & Carrasco-Marín, F. (2013). Catalysts Supported on Carbon Materials for the Selective Hydrogenation of Citral. *Catalysts*, 3(4), 853–877. <https://doi.org/10.3390/catal3040853>
- Carrillo-Guerrero, Y. K., Flessa, K., Hinojosa-Huerta, O., & López-Hoffman, L. (2013). From accident to management: The Cienega de Santa Clara ecosystem. *Ecological Engineering*, 59, 84–92. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2013.03.003>
- Cervantes Rendón, E., Sánchez León, S., & Montano Armendáriz, G. (2020). Problemáticas socioambientales en torno al agua utilizada para actividades agrícolas en cinco municipios del estado de Chihuahua, México. *Sociedad y Ambiente*, 22, 124–151. <https://doi.org/10.31840/sya.vi22.2087>
- Chaparro-Garnica, C. Y., Jordá-Faus, P., Bailón-García, E., Ocampo-Pérez, R., Aguilar-Madera, C. G., Davó-Quiñonero, A., Lozano-Castelló, D., & Bueno-López, A. (2020). Customizable Heterogeneous Catalysts: Nonchanneled Advanced Monolithic Supports Manufactured by 3D-Printing for Improved Active Phase Coating Performance. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(49), 54573–54584. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c14703>
- Comisión Nacional del Agua. (2005). *Síntesis de las Estadísticas del Agua en México*. https://sina.conagua.gob.mx/publicaciones/EAM_2019.pdf
- Cooney, D. O. (1998). *Adsorption design for wastewater treatment* (1a ed., Vol. 1). U.S. Department of Energy. <https://www.osti.gov/biblio/691462>
- Díaz-Blancas, V., Aguilar-Madera, C. G., Flores-Cano, J. v., Leyva-Ramos, R., Padilla-Ortega, E., & Ocampo-Pérez, R. (2020). Evaluation of mass transfer mechanisms involved during the adsorption of metronidazole on granular activated carbon in fixed bed column. *Journal of Water Process Engineering*, 36, 101303. <https://doi.org/10.1016/J.JWPE.2020.101303>
- FAO. (2023). AQUASTAT - FAO's Global Information System on Water and Agriculture. En *AQUASTAT*. <https://www.fao.org/aquastat/en/>
- Karunarathne, H. D. S. S., & Amarasinghe, B. M. W. P. K. (2013). Fixed Bed Adsorption Column Studies for the Removal of Aqueous Phenol from Activated Carbon Prepared from Sugarcane Bagasse. *Energy Procedia*, 34, 83–90. <https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2013.06.736>

- Leyva-Ramos, R., & Geankoplis, C. J. (1985). Model simulation and analysis of surface diffusion of liquids in porous solids. *Chemical Engineering Science*, 40(5), 799–807. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(85\)85032-6](https://doi.org/10.1016/0009-2509(85)85032-6)
- Ocampo-Perez, R., Leyva-Ramos, R., Alonso-Davila, P., Rivera-Utrilla, J., & Sanchez-Polo, M. (2010). Modeling adsorption rate of pyridine onto granular activated carbon. *Chemical Engineering Journal*, 165(1), 133–141. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2010.09.002>
- Pillai, S. B. (2020). Adsorption in Water and Used Water Purification. En *Handbook of Water and Used Water Purification* (pp. 1–22). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-66382-1_4-1
- Ramos, R. (2017). *Importancia y Aplicaciones de la Adsorción en Fase Líquida*. https://www.researchgate.net/publication/320407302_Importancia_y_Aplicaciones_de_la_Adsorcion_en_Fase_Liquida
- Tan, K. L., & Hameed, B. H. (2017). Insight into the adsorption kinetics models for the removal of contaminants from aqueous solutions. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 74, 25–48. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2017.01.024>
- Tubert, I., & Talanquer, V. (1997). Sobre adsorción. *Educación química*, 8(4), 186–190. <https://doi.org/doi.org/10.22201/fq.18708404e.1997.4.66595>
- UN Environment. (2019). *Global Environment Outlook – GEO-6: Healthy Planet, Healthy People* (UN Environment, Ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/9781108627146>
- Wang, J., & Guo, X. (2020). Adsorption kinetic models: Physical meanings, applications, and solving methods. *Journal of Hazardous Materials*, 390, 122156. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122156>
- Wilcox, D. C. (1998). *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries. <https://books.google.com/cu/books?id=-KhtQgAACAAJ>
- Worch, E. (2012). Adsorption Technology in Water Treatment. En *Fundamentals, Processes, and Modeling*. De Gruyter. <https://doi.org/doi:10.1515/9783110240238>

10.-ANEXOS

Índice de tablas

Tabla 1. Modelos de isotermas de adsorción	12
Tabla 2.- Ventajas y desventajas de las diferentes técnicas de impresión en 3D	21
Tabla 3. Características geométricas y físicas de los monolitos.	32
Tabla 4. Características del mallado para cada caso de estudio.	42
Tabla 5. Parámetros operacionales y de transporte de masa para el sistema carbón activado- Hidroxiquinoleína (Aguirre Contreras Samuel, 2022).....	44

Índice de Figuras

Figura 1. A) Monolito con canales en forma de T, B) Monolito de canales entrecruzados, C) Monolito de anillos concéntricos, D) Monolito de canales con intersección. Dimensiones en cm. ...	33
Figura 2. Revolución axisimétrica y tipo de canal de los monolitos A) Monolito A, forma de T; B) Monolito B, canales entrecruzados, C), Monolito C, anillos concéntricos; y D) Monolito D canales con intersección.....	34
Figura 3. Identificación de los dominios asignados al caso 1. El color azul claro representa la fase líquida y el color gris oscuro la fase sólida.....	35