



## Ajuste de datos en isotermas de adsorción: efecto del modelo y función objetivo

### Data fitting of adsorption isotherms: effect of model and objective function

Adrián Bonilla-Petriciolet<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> Tecnológico Nacional de México – Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Departamento de Ingeniería Química. Email: adrian.bp@aguascalientes.tecnm.mx

\* Autor de correspondencia: adrian.bp@aguascalientes.tecnm.mx; Tel.: +52 4499105002

**Fecha de Recepción:** 22 de agosto del 2025.

**Fecha de Revisión:** 02 de septiembre del 2025.

**Fecha de Publicación:** 19 de diciembre del 2025.

**ISSN:** 3061-838X.

**DOI:** 10.82580/revateh.v1i1.18

**Citación:** Adrián Bonilla-Petriciolet. Ajuste de datos en isotermas de adsorción: efecto del modelo y función objetivo. Revista en Ciencia y Tecnología del Valle de Tehuacán, 2025, 1, 1-15.

**Copyright:** © 2025 por los autores. Enviado para posible publicación en acceso abierto bajo los términos y condiciones de la Ley de Creatividad.

### Resumen

En este trabajo se abordan algunos aspectos metodológicos que deben ser considerados en el ajuste de parámetros en isotermas de adsorción. Específicamente, se analiza el efecto que tiene la función objetivo y el modelo en los resultados de la correlación de la isoterma. Se comentan algunos criterios estadísticos adecuados para evaluar la pertinencia del proceso de ajuste de parámetros en este tipo de modelos. El contenido de este artículo es una guía para estudiantes, investigadores y profesionistas que requieren realizar la modelación de datos de adsorción para fines de diseño y simulación de procesos.

**Palabras clave:** Ajuste de datos, equilibrio de adsorción, modelación de datos.

### Abstract

In this manuscript, some methodology aspects that should be considered in the data fitting of adsorption isotherms are discussed. The effect of the objective function and the model on the results of isotherm correlation is analyzed. Suitable statistical criteria for testing the quality of adsorption isotherm data fitting are also described. The content of this paper is a guide for students, researchers and engineers that require the modeling of adsorption data for process design and simulation.

**Keywords:** Data fitting, adsorption equilibrium, data modelling.



## 1. Introducción

En el ámbito de la Ingeniería, el fenómeno de adsorción es ampliamente utilizado para el desarrollo de estrategias enfocadas a la separación de compuestos en fluidos, así como el tratamiento de efluentes líquidos y gaseosos que están contaminados por diversas especies químicas (Bonilla-Petriciolet et al. 2019). Este tipo de aplicaciones se debe principalmente a que los procesos de adsorción son atractivos debido a su simplicidad, bajo costo, facilidad de operación y su capacidad de regeneración del material utilizado como medio de separación (Messaoudi et al. 2024). Varios adsorbentes, de origen sintético o natural, pueden ser utilizados para la separación o remoción de sustancias orgánicas e inorgánicas tales como colorantes, compuestos fenólicos, metales pesados, farmacéuticos, fluoruros, entre otros (Miao et al. 2022).

Desde el punto teórico y experimental, las cinéticas e isotermas de adsorción son importantes ya que permiten comprender cómo las sustancias de interés interactúan con el adsorbente y proporcionan datos fisicoquímicos relevantes para evaluar la aplicación de este proceso como una operación unitaria (Wang et al. 2024). Bajo este contexto, la correlación de datos de adsorción empleando modelos teóricos o empíricos es esencial en las etapas de simulación, diseño y optimización de procesos industriales, plantas de tratamiento de agua, entre otros.

Hasta la fecha, diversos modelos teóricos, semi-empíricos y empíricos han sido propuestos para la correlación de datos cinéticos e isotermas de adsorción. Para el caso de la adsorción de un solo componente, estos modelos generalmente presentan dos o tres parámetros de ajuste; existiendo inclusive modelos empíricos con cinco parámetros (Majd et al. 2022). Una práctica común para la determinación de los parámetros de ajuste de los modelos como el de Langmuir y Freundlich es una regresión lineal mediante la transformación de sus ecuaciones matemáticas (Chen et al. 2022). Este enfoque es ampliamente utilizado

debido a su simplicidad y es la primera alternativa que usualmente se explora para correlacionar datos de adsorción. Cuando este procedimiento no puede emplearse pues la complejidad matemática del modelo no permite realizar una regresión lineal, se debe realizar un proceso de regresión no lineal donde un método de optimización adecuado debe aplicarse para la obtención de los parámetros del modelo (Bonilla-Petriciolet et al. 2019). Diversos estudios han indicado que los procedimientos de regresión lineal y no lineal pueden generar, para un mismo modelo, parámetros de ajuste con valores significativamente discrepantes (Al-Ghouti y Da'ana, 2020; Majd et al. 2022). Por otra parte, el comparativo del desempeño del modelo debe basarse en análisis estadísticos formales para establecer sus ventajas y limitaciones. Dentro de estos análisis también debe considerarse el efecto que puede presentar el tipo de función objetivo sobre los resultados del proceso de ajuste de parámetros, ya que diferentes funciones objetivo pueden generar diferencias significativas en los resultados del proceso de correlación de datos (Bonilla-Petriciolet et al. 2019). En general, estos aspectos no son considerados dentro del proceso de modelación de datos cinéticos y de equilibrio de adsorción a pesar de su importancia.

En este artículo se discute el efecto que tiene la función objetivo y el tipo de modelo de isoterma sobre los resultados del ajuste de datos de equilibrio de adsorción. En este análisis, se han considerado diferentes modelos de isotermas y funciones objetivo. Se realiza una comparación entre los resultados obtenidos al emplear transformaciones lineales y un procedimiento de regresión no lineal en la correlación de diferentes isotermas. Se comentan algunos de los criterios y herramientas estadísticas que pueden emplearse para evaluar la pertinencia del ajuste de parámetros en este tipo de modelos. Este documento aporta conceptos y elementos que pueden ser utilizados por estudiantes, investigadores y profesionistas



que requieran realizar, de forma correcta, el proceso de correlación de datos de adsorción.

## 2. Metodología

### 2.1 Descripción de los modelos de isotermas de adsorción

Las isotermas de adsorción muestran la relación en el equilibrio entre la cantidad adsorbida de una especie sobre un material adsorbente y la concentración de dicha especie en una solución o fase gaseosa. Dichos datos de equilibrio son requisitos básicos para el diseño de sistemas de adsorción. Diferentes modelos de isotermas se han propuesto y utilizado para correlacionar los datos experimentales del fenómeno de adsorción. La mayoría de estos modelos fueron desarrollados originalmente para el estudio de gases, sin embargo, su aplicación en fase líquida está soportada en razones teóricas y prácticas (Bonilla-Petriciolet *et al.* 2019). En esta sección se describen algunos de los modelos de isotermas de mayor aplicación en el área de la Ingeniería Química, Ambiental y campos afines. Estos modelos corresponden a expresiones que pueden emplearse para la correlación de isotermas del Tipo L (Hu *et al.* 2023), la cual es la isoterma más común para diferentes sistemas, y son los modelos usados en este artículo.

El modelo clásico y más utilizado para el ajuste de isotermas de adsorción corresponde a la expresión de Langmuir (Swenson y Stadie, 2019). Este modelo tiene una base teórica donde se asume que existe una adsorción de monocapa homogénea. Generalmente, el modelo de Langmuir no es capaz de representar los datos de adsorción experimentales dentro de todo el rango de concentración o presión. Este modelo está descrito por la ecuación 1:

$$q_e = \frac{q_m K_m v}{1 + K_m v} \quad (1)$$

donde  $q_m$  es la máxima capacidad de adsorción por unidad de masa de adsorbente para una monocapa,  $K_m$  es la constante de equilibrio de adsorción,  $q_e$  es la cantidad del componente de interés que es adsorbido en el equilibrio, mientras que  $v$  puede ser la presión o concentración de equilibrio según sea el caso. Cuando  $v \rightarrow 0$ , la isoterma de Langmuir se reduce a una isoterma lineal y, por consecuencia, sigue la Ley de Henry (Swenson y Stadie, 2019). Los parámetros de esta isoterma ( $q_m$ ,  $K_m$ ) pueden determinarse a través de un ajuste no lineal o empleando una regresión lineal basada en algunas de las siguientes transformaciones del modelo (Prihatdini *et al.* 2023).

$$\frac{v}{q_e} = \frac{1}{K_m q_m} + \frac{1}{q_m} v \quad (2)$$

$$\frac{1}{q_e} = \frac{1}{q_m} + \frac{1}{K_m q_m v} \quad (3)$$

Para el caso de la Ecuación (2), la regresión lineal se realiza en el plano  $v/q_e$  vs.  $v$ , mientras que el plano  $1/q_e$  vs.  $1/v$  se utiliza para la Ecuación (3). Es importante indicar que el proceso de ajuste de parámetros basado en las transformaciones lineales de la ecuación de la isoterma es el más utilizado debido a su simplicidad ya que puede llevarse a cabo en programas de cómputo convencionales tales como Excell®, Statistica® u otros.

Por otra parte, otro de los modelos más empleados para el ajuste de isotermas de adsorción corresponde al modelo empírico de Freundlich (Vigdoowitsch *et al.* 2021)

$$q_e = K_F v^{1/n} \quad (4)$$

donde  $K_F$  y  $n$  son los parámetros empíricos del modelo. En esta isoterma se considera que existen diferencias en la entalpía de adsorción entre los diferentes tipos de sitios activos del adsorbente (Vigdoowitsch *et al.* 2021). A pesar de que el modelo es empírico, el parámetro  $K_F$  puede utilizarse para establecer la capacidad de adsorción relativa entre diferentes adsorbentes y  $n$  puede



relacionarse con la intensidad de adsorción (Vigdoowitsch *et al.* 2021). Ya que se carece de una base termodinámica que fundamentalmente a este modelo, la isoterma no satisface la ley de Henry cuando  $v \rightarrow 0$  (Vigdoowitsch *et al.* 2021). Nuevamente, los parámetros ajustables de este modelo pueden obtenerse a través de una regresión lineal empleando la siguiente transformación basada en una función logarítmica.

$$\ln q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln v \quad (5)$$

donde los parámetros se determinan considerando los datos experimentales en el plano  $\ln q_e$  vs.  $\ln v$ . La aplicación del modelo de Freundlich se ha justificado para superficies heterogéneas y es capaz de representar satisfactoriamente datos de adsorción en rangos limitados de concentración o presión.

Debido a que los modelos convencionales de Langmuir y Freundlich presentan algunas limitaciones para ajustar satisfactoriamente los datos experimentales en todo el rango de concentración o presión, otros modelos teóricos o empíricos con dos o más parámetros de ajuste han sido propuestos. Una de las isothermas con tres parámetros de ajuste es el modelo propuesto por Redlich-Peterson (Chu *et al.* 2024). Este modelo se aproxima a la ley de Henry en la región de baja concentración o presión, mientras que para altas concentraciones (o presiones) tiene un comportamiento similar a la isoterma de Freundlich. Esta isoterma se define como:

$$q_e = \frac{a_r v}{1 + b_r v^\beta} \quad (6)$$

donde ( $a_r$ ,  $b_r$ ,  $\beta$ ) son los parámetros del modelo. El parámetro  $\beta$  se restringe a valores entre 0 y 1. Se debe indicar que una regresión no lineal es el mecanismo más adecuado para establecer los parámetros del modelo. No obstante, también es posible utilizar una transformación lineal de la isoterma para el proceso de correlación de datos, es decir

$$\frac{v}{q_e} = \frac{1}{a_r} + \frac{b_r}{a_r} v^\beta \quad (7)$$

donde los datos experimentales en la proyección  $v/q_e$  vs.  $v$  son utilizados para determinar a las variables de ajuste (Hu *et al.* 2023).

Otros modelos que también presentan tres variables de ajuste son las isothermas de Toth y Sips (Majd *et al.* 2022). Generalmente, estas isothermas tienen una mejor capacidad de descripción que los modelos de Langmuir y Freundlich por su mayor cantidad de parámetros. El modelo de Toth, el cual fue originalmente propuesto para la adsorción de gases, se basa en el modelo de Langmuir y corresponde a la ecuación 8; mientras que la isoterma de Sips es una combinación de los modelos de Langmuir y Freundlich que se muestra en la ecuación 9.

$$q_e = \frac{q_m v}{(b + v^n)^{1/n}} \quad (8)$$

$$q_e = \frac{q_m b v^{1/n}}{1 + b v^{1/n}} \quad (9)$$

donde ( $q_m$ ,  $b$ ,  $n$ ) son los parámetros ajustables de estos modelos.

Algunos de los parámetros de los modelos descritos presentan restricciones para sus valores derivados de su significado físico. No obstante, esas restricciones pueden no considerarse dentro del proceso de ajuste de parámetros mediante una regresión no lineal ya que, dada la naturaleza no lineal de los modelos de isoterma, los óptimos globales de la función objetivo pueden corresponder a valores de los parámetros que no satisfacen las restricciones físicas o teóricas ya definidas para éstos. Por ejemplo, Valenzuela y Myers (1989) han reportado valores para la isoterma de Toth que no cumplen la restricción teórica para uno de sus parámetros. Estos resultados, y otros reportados en la literatura (Majd *et al.* 2022), justifican la aplicación de este enfoque. Este conjunto de modelos de adsorción fue utilizado en este artículo, con diferentes funciones objetivo, para ajustar los datos experimentales de tres sistemas utilizados



como casos de estudio. A continuación, se describen las funciones objetivo que fueron empleadas en la correlación de los datos de adsorción.

## 2.2 Funciones objetivo empleadas en el ajuste de las isothermas de adsorción y criterios estadísticos para su comparación

Generalmente, la correlación de datos de equilibrio de adsorción comprende la aplicación de funciones objetivo del tipo de mínimos cuadrados ya que estas funciones son derivables y pueden emplearse con métodos de optimización convencionales que son altamente eficientes y se basan en el cálculo del gradiente. No obstante, cuando se utilizan estrategias de optimización que no requieren del cálculo de derivadas, prácticamente cualquier tipo de función objetivo puede emplearse en el proceso de ajuste de datos. Con base en lo anterior y con la finalidad de ilustrar el efecto de la función objetivo en los resultados del ajuste de isothermas de adsorción, las siguientes expresiones fueron utilizadas.

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{ndat} (x_i^{exp} - x_i^{calc})^2 \quad (10)$$

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^{ndat} \left( \frac{x_i^{exp} - x_i^{calc}}{x_i^{exp}} \right)^2 \quad (11)$$

donde  $x_i^{exp}$  y  $x_i^{calc}$  son los valores experimentales y estimados para las variables dependientes; mientras que  $ndat$  es el número total de datos experimentales considerados en el ajuste.

La primera función objetivo (Ecuación 10) es utilizada en el procedimiento clásico de regresión lineal. Como se ha indicado, la regresión lineal es un procedimiento ampliamente aplicado en el ajuste de isothermas de adsorción (Hu *et al.* 2023). A pesar de que este procedimiento es simple y fácil de implementar, su uso es teóricamente incorrecta para la correlación de datos con modelos cuya naturaleza matemática es no

lineal. Adicionalmente, dicho enfoque puede generar resultados inconsistentes con el comportamiento experimental del sistema analizado, tal y como se demostrará en la sección de resultados. Para la función objetivo descrita por la Ecuación (10), los datos correspondientes a la región de alta concentración o presión son los que afectan más el proceso de ajuste de parámetros. En el caso de la segunda función objetivo, Ecuación (11), los datos experimentales de las zonas de baja concentración o presión tienen un mayor peso en el proceso de correlación. Es conveniente resaltar que en dichas zonas se presenta la mayor incertidumbre en la determinación experimental de las variables independientes (concentración o presión de equilibrio) y, por consecuencia, también en las cantidades derivadas de ellas (cantidades adsorbidas de equilibrio).

Debido a las características de estas funciones objetivo y a la no linealidad de los modelos de isothermas, los parámetros de ajuste obtenidos a partir de la minimización global de ellas pueden diferir entre sí. Considerando lo anterior y con la finalidad de ilustrar los resultados que pueden obtenerse empleando diferentes funciones objetivo, en este trabajo se han considerado los siguientes criterios para caracterizar los resultados del proceso de correlación de datos:

- a) Coeficiente de determinación ( $R^2$ ) del modelo. Desde el punto de vista estadístico, es conveniente que un modelo presente un coeficiente de determinación cercano a la unidad. Esta métrica estadística es la más utilizada dentro de la literatura para caracterizar la calidad del ajuste de las isothermas de adsorción (Hu *et al.* 2023). Sin embargo, el coeficiente de determinación debe complementarse con otros indicadores para llevar a cabo la discriminación de modelos.
- b) Error porcentual promedio (E). Entre las cantidades adsorbidas determinadas experimentales y las



calculadas por el modelo de la isoterma de adsorción, es decir,

$$E = \frac{100}{ndat} \sum_{i=1}^{ndat} \left| \frac{q_e^{exp} - q_e^{calc}}{q_e^{cal}} \right| \quad (12)$$

- c) Comparación estadística de los errores porcentuales promedios obtenidos para los diferentes modelos de isotermas de adsorción y funciones objetivo que fueron consideradas en la etapa de ajuste de datos. El paquete de cómputo STATISTICA® fue utilizado para llevar a cabo esta comparación empleando el estadístico de Duncan.
- d) Evaluación visual de la distribución de los residuales de  $q_e$  con el objeto de identificar tendencias. Con base a criterios estadísticos, un modelo es adecuado si su distribución de residuales no muestra patrones, es decir, es aleatoria (Wisniak y Polishuk, 1999). Es conveniente indicar que el análisis de residuales es omitido usualmente dentro del proceso de ajuste de datos en los estudios realizados dentro del área de adsorción.

Por otra parte, el proceso de correlación de datos debe llevarse a cabo empleando una estrategia de optimización robusta que permita establecer en forma confiable los valores de los parámetros del modelo en cuestión. Bonilla-Petriciolet *et al.* (2005) han establecido que a pesar de la sencillez matemática presentada por los modelos de isotermas de adsorción, la función objetivo que es empleada en el ajuste de parámetros puede ser no convexa y con varios óptimos locales. Bajo este contexto, estrategias de optimización global deben utilizarse con el objeto de establecer los parámetros del modelo que permitan la mejor descripción del sistema además de asegurar una comparación objetiva entre los resultados obtenidos para los diferentes modelos y funciones objetivo. Dichos autores han

evaluado el comportamiento numérico del método de Recocido Simulado en la regresión no lineal de modelos de isotermas de adsorción y han indicado que éste es adecuado para tal propósito. Este algoritmo fue empleado en este trabajo para la minimización de las funciones objetivo ya descritas. Finalmente, datos experimentales reportados en la literatura (Hindarso *et al.* 2001 y Park *et al.* 2022) fueron usados como ejemplos para ilustrar el ajuste de los modelos de isotermas de adsorción ya descritos.

### 3. Resultados y discusión

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para un conjunto de casos de estudio que fueron elegidos para ilustrar los conceptos mencionados en este trabajo.

**Ejemplo 1:** Adsorción de tricloroetileno en fibras de carbón activado. En este ejemplo se han considerado los datos experimentales de la adsorción del tricloroetileno en fibras de carbón activado a 298.15 K (Park *et al.* 2002). Estos datos experimentales fueron ajustados con el modelo de Langmuir empleando los dos tipos de regresiones, es decir: no lineal y lineal aplicando las dos transformaciones descritas por las Ecuaciones (2) y (3). En ambos casos, las dos funciones descritas por las Ecuaciones (10) y (11) fueron también consideradas en el ajuste de parámetros. Los datos obtenidos del ajuste de datos para este modelo se presentan en la **Tabla 1** y **Figura 1**.

En esta **Tabla 1** se observa que los coeficientes de determinación son menores para la regresión no lineal, independientemente de la función objetivo utilizada, y son mayores para la transformación lineal en la proyección  $P/q_e$  vs.  $P$ . En particular, el ajuste de parámetros empleando la regresión lineal (Ecuación 2) en dicha proyección en conjunto con la función objetivo de mínimos cuadrados (Ecuación 10) presenta el mejor valor de  $R^2$  (ver **Figura 1**). Sin embargo, su error porcentual promedio ( $E$ ) es el mayor de todos los ajustes realizados. El análisis estadístico realizado para comparar los errores porcentuales promedio confirmó

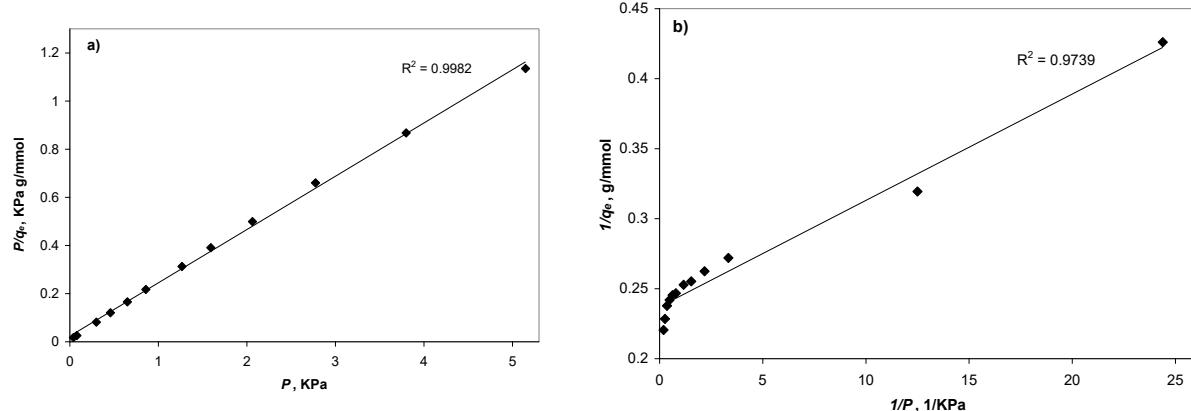
este resultado. Por otra parte, el resto de los ajustes son equivalentes estadísticamente en el valor promedio de los errores porcentuales absolutos. Este resultado claramente ejemplifica las desventajas de aplicar transformaciones lineales para el ajuste de parámetros de modelos de adsorción, cuya naturaleza es no lineal.

Dicha transformación genera la pérdida de la fidelidad del modelo, sus propiedades se pierden o distorsionan al linealizar, y los valores estimados para los parámetros de ajuste pueden sesgarse, generando así conclusiones erróneas acerca del desempeño de la isoterma bajo análisis.

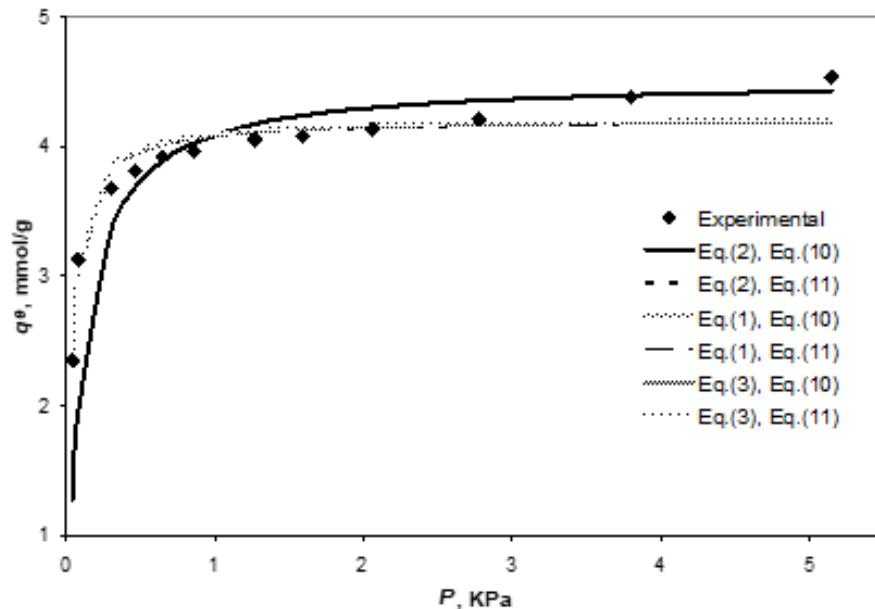
**Tabla 1.** Resultados del ajuste de la isoterma de Langmuir para la adsorción de tricloroetileno en fibras de carbón activado a 298.15 K

Función objetivo	Modelo	Parámetros de ajuste ( $q_m$ , $K_m$ )	$R^2$	$E, \%$	$F_{obj}$
(10)	(1)	(4.2320, 30.2331)	0.9392	$2.82 \pm 2.01$	0.2355
(11)		(4.2137, 31.1623)	0.9385	$2.74 \pm 2.07$	0.0137
(10)	(2)	(4.5165, 9.5402)	0.9982	$9.63 \pm 15.25$	0.0025
(11)		(4.2313, 30.9500)	0.9931	$2.87 \pm 1.91$	0.0147
(10)	(3)	(4.2180, 31.2112)	0.9739	$2.79 \pm 2.01$	0.0009
(11)		(4.2313, 30.9500)	0.9737	$2.87 \pm 1.91$	0.0147

Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002).



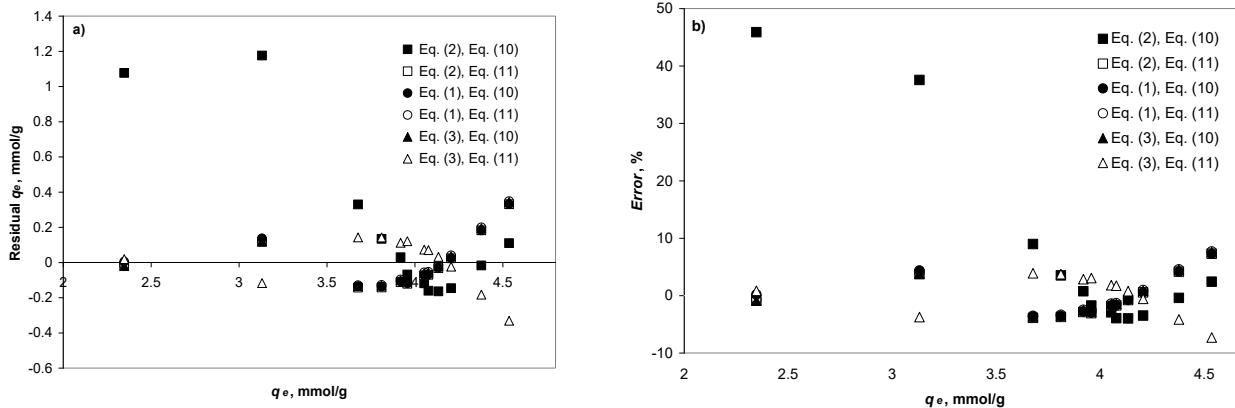
**Figura 1.** Transformaciones lineales del modelo de Langmuir para la adsorción de tricloroetileno en fibras de carbón activado a 298.15 K. **a)**  $P/q_e$  vs.  $P$ , **b)**  $1/q_e$  vs.  $1/P$ . El símbolo “◆” representa los datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002).



**Figura 2.** Isoterma de adsorción de tricloroetileno en fibras de carbón activado a 298.15 K. Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002) y Modelo de Langmuir.

En la **Figura 2** se muestran los datos experimentales y predichos de la isoterma con los diferentes ajustes realizados, mientras que en la **Figura 3** se muestran la distribución de residuales de  $q_e$  y los errores porcentuales obtenidos para cada modelo y función objetivo. Se puede observar que, con excepción del ajuste realizado con las Ecuaciones (2) y (10), se obtiene una representación satisfactoria de los datos experimentales de la isoterma de adsorción. La transformación lineal de la isoterma de Langmuir en la proyección  $v/q_e$  vs.  $v$  (donde  $v$  es la concentración o presión en equilibrio) es un procedimiento ampliamente aceptado y utilizado en la literatura para el ajuste de datos experimentales. No obstante, tal y como lo demuestran los resultados obtenidos en este ejemplo, esta transformación no asegura el ajuste adecuado de la isoterma a pesar de que la regresión lineal en dicha proyección es

estadísticamente significativa ( $p\text{-level} \rightarrow 0$ ). La transformación lineal de un modelo con respecto a sus parámetros, y su correlación con una regresión lineal, no es válido y puede generar resultados inconsistentes. Bajo este contexto, un ajuste de parámetros no lineal genera resultados más confiables, siempre y cuando, se utilice un método de optimización robusto para la localización del mínimo global de la función objetivo utilizada. La distribución de residuales para los diferentes ajustes realizados en este ejemplo muestra algunas tendencias (ver **Figura 3**). Por tanto, se concluye que es conveniente evaluar otros modelos de isotermas para ajustar los datos experimentales de este caso con el objetivo de obtener una mejor distribución de los residuales.



**Figura 3.** a) Distribución de residuales de  $q_e$  y b) Errores porcentuales en la predicción de la isoterma de adsorción de tricloroetileno en fibras de carbón activado a 298.15 K empleando el modelo de Langmuir y diferentes funciones objetivo.

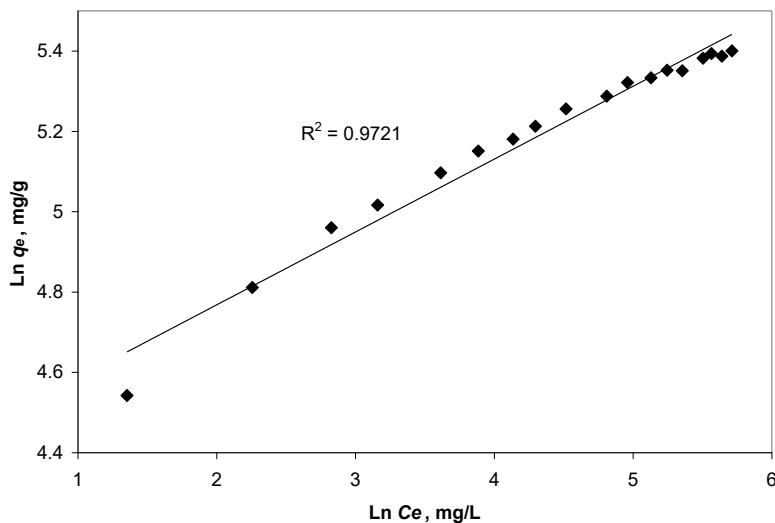
**Ejemplo 2:** Adsorción de benceno en carbón activado granular: Para este ejemplo, se consideraron los datos experimentales de la adsorción de benceno en carbón activado granular a 303.15 K (Hindarso *et al.* 2001). El modelo de Freundlich fue ajustado a los datos experimentales empleando la regresión lineal y no lineal con las dos funciones objetivos ya descritas. Los resultados de los ajustes realizados se reportan en la **Tabla 2**, mientras que en las **Figuras 4 y 5** se muestran la transformación lineal en el plano  $\ln q_e$  vs.  $\ln C_e$  así como los datos experimentales de la isoterma y su respectiva correlación. Como se puede apreciar, en este caso no existen diferencias significativas entre los coeficientes de determinación y los errores porcentuales promedio de los diferentes ajustes realizados, ver **Figura 6**. El análisis estadístico confirmó que los errores porcentuales promedio obtenidos para cada ajuste son equivalentes. No obstante, sí existen diferencias significativas entre los valores de la función objetivo. Considerando los resultados del estadístico de Duncan, prácticamente cualquier función objetivo,

así como procedimiento de ajuste, podrían utilizarse para correlacionar los datos de la isoterma. Para este caso, un usuario podría elegir el procedimiento de regresión lineal generando un resultado, de manera fortuita, que es estadísticamente significativo y proporciona una representación satisfactoria de la isoterma bajo estudio. Con respecto a los residuales obtenidos en cada ajuste, todas las distribuciones de residuales de  $q_e$  presentan tendencias (ver **Figura 6**). Nuevamente, es conveniente evaluar otros modelos de isothermas con el objeto de obtener una mejor distribución de los residuales.

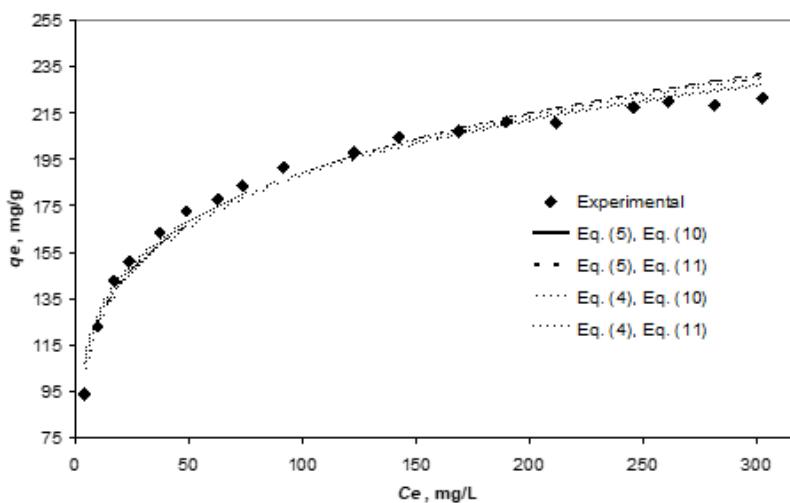
**Tabla 1.** Resultados del ajuste de la isoterma de Freundlich para la adsorción de benceno en carbón activado granular a 303.15 K.

Función objetivo	Modelo	Parámetros de ajuste ( $K_F$ , $1/n$ )	$R^2$	$E, \%$	$F_{obj}$
(10)	(4)	(86.9948, 0.1682)	0.9892	2.74±3.51	491.6103
(11)		(81.0680, 0.1832)	0.9861	3.09±2.38	0.0268
(10)	(5)	(81.8948, 0.1813)	0.9860	3.01±2.51	0.0257
(11)		(80.6773, 0.1847)	0.9858	3.15±2.30	0.0011

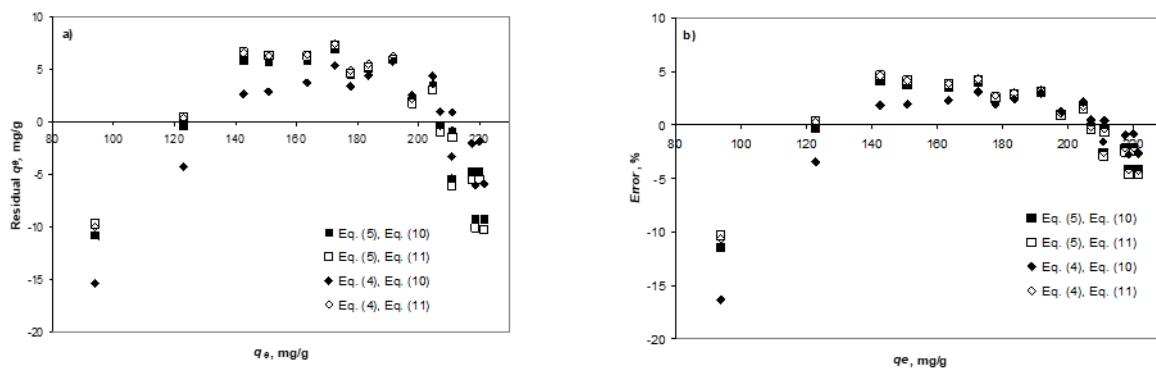
Datos experimentales reportados por Hindarso *et al.* (2001).



**Figura 4.** Transformación lineal del modelo de Freundlich para la adsorción de benceno en carbón activado granular a 303.15 K. El símbolo “◆” representa los datos experimentales reportados por Hindarso *et al.* (2001).



**Figura 5.** Isoterma de adsorción de benceno en carbón activado granular a 303.15 K. Datos experimentales reportados por Hindarso *et al.* (2001) y el modelo de Freundlich.



**Figura 6.** a) Distribución de residuales de  $q_e$  y b) Errores porcentuales en la predicción de la isoterma de adsorción de benceno en carbón activado granular a 303.15 K empleando diferentes funciones objetivo y el modelo de Freundlich.

**Ejemplo 3:** Adsorción de tolueno en fibras de carbón activado. Para este ejemplo se utilizaron los datos experimentales de la adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K, los cuales fueron reportados por Park *et al.* (2002). Esta isoterma se ajustó al modelo de Redlich-Peterson empleando las Ecuaciones (6) y (7) en conjunto con las funciones descritas por las Ecuaciones (10) y (11). Los resultados de los ajustes realizados se reportan en la **Tabla 3**, mientras que en las **Figuras 7** y **8** se muestran los datos experimentales de la isoterma, el comportamiento del modelo para los diferentes ajustes, así como su distribución de residuales de  $q_e$  y errores porcentuales. Para todas las correlaciones en este sistema, la constante  $\beta$  no satisface la restricción teórica establecida para este modelo.

El análisis estadístico indicó que no existen diferencias significativas en cuanto al error porcentual promedio reportado para cada ajuste. Sin embargo, los ajustes realizados con la función de mínimos cuadrados proporcionan una mejor representación del comportamiento de la isoterma y presentan mejores valores del coeficiente de determinación. Para el caso de las correlaciones realizadas con la Ecuación (11), los modelos obtenidos predicen un comportamiento que no corresponde a los datos experimentales (es decir, la

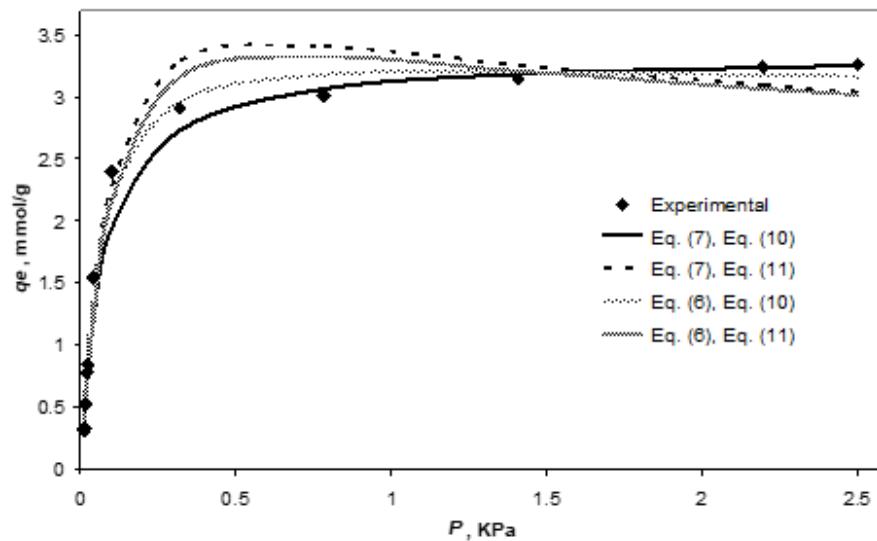
modelación muestra un valor máximo para la capacidad de adsorción que no es consistente con el valor observado experimentalmente) y su coeficiente de determinación es inferior al obtenido para la otra función objetivo. Se observó que la distribución de los residuales en todos los ajustes realizados muestra tendencias, es decir, no son aleatorios.

Con fines comparativos, este conjunto de datos experimentales también fue correlacionado con los modelos de Toth y Sips. La **Tabla 4** muestra los resultados obtenidos en el ajuste de parámetros de dichos modelos y en la **Figura 9** se presenta la isoterma experimental y su respectiva modelación. No se identificaron diferencias importantes entre los coeficientes de determinación para los ajustes realizados con los dos modelos de isothermas y las dos funciones objetivo, sin embargo, sí difieren los valores de los parámetros de la isoterma obtenidos para cada ajuste. Los valores calculados para el parámetro  $n$  de la isoterma de Toth no satisfacen la restricción teórica, es decir  $n \notin (0, 1)$ . En cuanto al error porcentual promedio, el análisis estadístico indicó que no existen diferencias significativas entre dichos errores para las diferentes correlaciones.

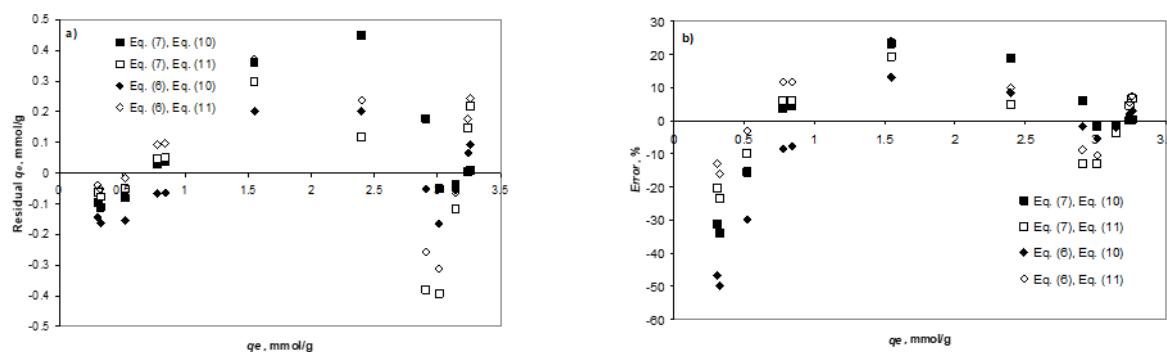
**Tabla 3.** Resultados del ajuste de la isoterma de Redlich-Peterson para la adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K

Función objetivo	Modelo	Constantes de ajuste ( $a_r$ , $b_r$ , $\beta$ )	$R^2$	$E$ , %	$F_{obj}$
(10)	(6)	(50.1957, 14.7068, 1.0543)	0.9939	14.85±17.41	0.2083
(11)		(36.3501, 10.0438, 1.1614)	0.9860	10.31±5.93	0.1663
(10)	(7)	(45.7917, 13.6699, 1.0015)	0.9998	11.71±12.44	0.0004
(11)		(38.6997, 10.5230, 1.1726)	0.9967	10.92±6.92	0.1767

Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002).



**Figura 7.** Isoterma de adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K. Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002) y el modelo de Redlich-Peterson.

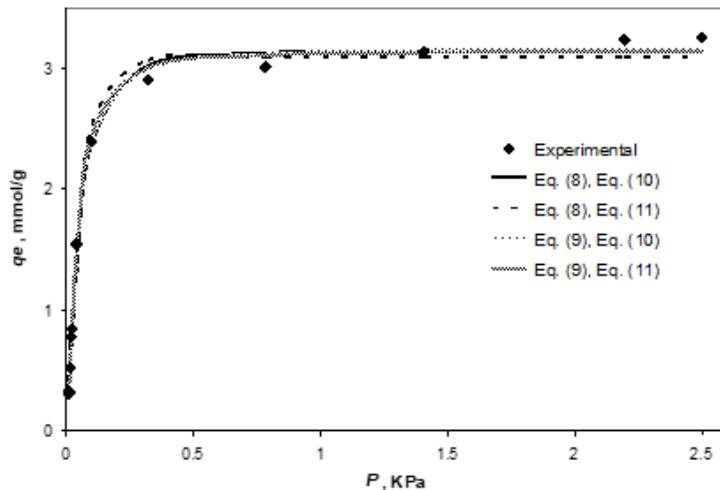


**Figura 8.** a) Distribución de residuales de  $q_e$  y b) Errores porcentuales en la predicción de la isoterma de adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K empleando diferentes funciones objetivo y el modelo de Redlich-Peterson.

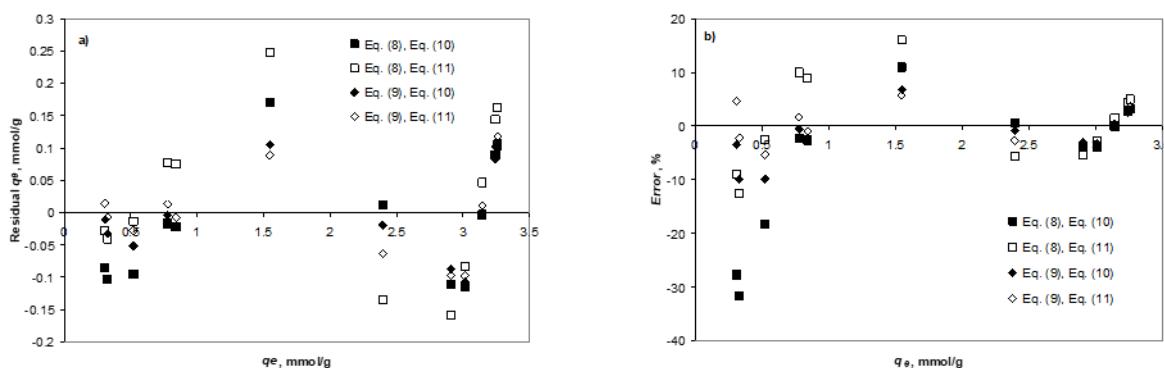
**Tabla 4.** Resultados del ajuste de la isoterma de Toth y Sips para la adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K

Función objetivo	Modelo	Constantes de ajuste ( $q_m$ , $b$ , $n$ )	$R^2$	$E, \%$	$F_{obj}$
(10)	(8)	(3.1577, 0.0109, 1.7856)	0.9970	8.98±10.92	0.101645
(11)		(3.0982, 0.0011, 2.8494)	0.9949	6.98±4.39	0.079545
(10)	(9)	(3.1706, 89.1612, 0.6888)	0.9985	3.86±3.31	0.051438
(11)		(3.1481, 120.6743, 0.6514)	0.9984	3.07±1.64	0.014252

Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002).



**Figura 9.** Isoterma de adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K. Datos experimentales reportados por Park *et al.* (2002) y los modelos de Toth y Sips.



**Figura 10.** a) Distribución de residuales de  $q_e$  y b) Errores porcentuales en la predicción de la isoterma de adsorción de tolueno en fibras de carbón activado a 323.15 K empleando diferentes funciones objetivo y los modelos de Toth y Sips.



La distribución de residuales de  $q_e$  y sus errores porcentuales para los ajustes realizados se muestra en la Figura 10. Se observó que la distribución de los residuales mejoró para ambos modelos en contraste con los resultados obtenidos para el modelo de Redlich-Peterson. En este caso, los residuales del modelo de Sips presentan un comportamiento más aleatorio y con menor tendencia.

Los resultados obtenidos en los tres ejemplos indican que el proceso de regresión lineal comúnmente aplicado en la modelación de datos de isotermas de adsorción puede generar resultados inconsistentes y parámetros con magnitudes que difieren sustancialmente con respecto a las características del sistema (por ejemplo, capacidades de adsorción muy altas o bajas que no corresponden a los valores experimentales). La naturaleza matemática de los modelos de isotermas de adsorción implica que debe ser utilizado un procedimiento de regresión no lineal para determinar sus parámetros. Este proceso de ajuste de parámetros debe realizarse con un método de optimización confiable para identificar, con la mayor certeza posible, el mejor valor (es decir, óptimo global) de los parámetros del modelo. Es conveniente mencionar que es una práctica común en el área de adsorción omitir el uso de una estrategia de optimización global en las regresiones no lineales. Debido a lo anterior, es posible que algunos de los parámetros de las isotermas que se han reportado en varios trabajos no correspondan a óptimos globales y, como consecuencia, la comparación entre modelos o funciones objetivo pueda ser inapropiada.

La evaluación de los resultados obtenidos en un ajuste de datos de isotermas de adsorción considerando solamente  $R^2$  no es apropiada ya que puede conducir a conclusiones erróneas. Es decir, un valor alto para este coeficiente no siempre implica una representación adecuada del sistema principalmente si se aplicó una transformación lineal del modelo para su ajuste (Wisniak y Polishuk, 1999). Un análisis completo para establecer que

modelo y función objetivo son más convenientes para representar al sistema en cuestión debe acompañarse de un análisis de residuales. Sin embargo, en cualquier escenario debe prevalecer la utilización de un procedimiento de ajuste no lineal de los parámetros del modelo de isoterma.

#### 4. Reflexiones finales y/o conclusiones

En este trabajo se ha demostrado que el tipo de función objetivo afecta significativamente los resultados del ajuste de parámetros en modelos de isotermas de adsorción. También, se ha determinado que las transformaciones lineales comúnmente empleadas para el ajuste de los modelos de Langmuir y Freundlich no aseguran la adecuada representación de la isoterma experimental en algunos casos, a pesar de que los resultados de la regresión lineal en dicha transformación sean estadísticamente significativos. Para el caso de regresiones no lineales, es necesaria la aplicación de estrategias de optimización global para establecer con certidumbre los parámetros del modelo que mejor representen al sistema en cuestión. El proceso de ajuste de parámetros en isotermas de adsorción debe considerar la evaluación de diferentes funciones objetivo y modelos de isotermas en su forma no lineal, la aplicación de estrategias de optimización global adecuadas para el ajuste de los parámetros, así como criterios y métricas estadísticas, y el análisis de residuales para establecer, de manera objetiva y rigurosa, la capacidad de descripción del modelo y los resultados obtenidos del proceso de correlación de datos.

**Financiamiento:** Esta investigación no recibió financiamiento externo.

#### Referencias

Al-Ghouti, M.A., Da'ana, D.A. (2020). "Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: a review". Journal of Hazardous Materials, Vol. 393, 122383.



Bonilla-Petriciolet A., Lira-Padilla M.G., Soto-Becerra C. (2005). "Aplicación del método de optimización de Recocido Simulado en la regresión de isotermas de adsorción". *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, Vol. 21, 201 – 206.

Bonilla-Petriciolet, A., Mendoza-Castillo, D.I., Dotto, G.L., Duran-Valle, C.J. (2019). "Adsorption in water treatment". Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering, Vol. 2019, 1-21.

Chu, K.H., Hashim, M.A., Santos, Y.T. da Costa, Debord, J., Harel, M., Bollinger, J.C. (2024). "The Redlich-Peterson isotherm for aqueous phase adsorption: pitfalls in data analysis and interpretation". *Chemical Engineering Science*, Vol. 285, 119573.

Hindarso H., Ismadji S., Wicaksana F., Indraswati M., Indraswati N. (2001). "Adsorption of benzene and toluene from aqueous solution onto granular activated carbon". *Journal of Chemical Engineering Data*, Vol. 46, 788 – 791.

Hu, Q., Lan, R., He, L., Liu, H., Pei, X. (2023). "A critical review of adsorption isotherm models for aqueous contaminants: curve characteristics, site energy distribution and common controversies". *Journal of Environmental Management*, Vol. 329, 117104.

Majd, M.M., Kordzadeh-Kermani, V., Ghalandari, V., Askari, A. (2022). "Adsorption isotherm models: a comprehensive and systematic review (2010-2020)". *Science of the Total Environment*, Vol. 812, 151334.

Messaoudi, N.E., Franco, D.S.P., Gubernat, S., Georgin, J., Senol, Z.M., Cigeroglu, Z., Allouss, D., Hajam, M.E. (2024). "Advances and future perspectives of water defluoridation by adsorption technology: a review". *Environmental Research*, Vol. 252, 118857.

Miao, Q., Jiang, L., Yang, J., Hu, T., Shan, S., Su, H. (2022). "MOF/hydrogel composite-based adsorbents for water treatment: a review". *Journal of Water Process Engineering*, Vol. 40, 103348.

Park J.W., Lee S.S., Choi D.K., Lee Y.W., Kim Y.M. (2002). "Adsorption equilibria of toluene, dichloromethane, and trichloroethylene onto activated carbon fiber". *Journal of Chemical Engineering Data*, Vol. 47, 980 – 983.

Prihatdini, R.W., Suratman, A., Siswanta, D., (2023). "Linear and nonlinear modeling of kinetics and isotherm of malachite green dye adsorption to trimellitic-modified pineapple peel". *Materials Today Proceedings*, Vol. 88, 33-40.

Swenson, H., Stadie, N.P. (2019). "Langmuir's theory of adsorption: a centennial review". *Langmuir*, Vol. 35, No. 16, 5409-5426.

Valenzuela D.P., Myers A.L., (1989). "Adsorption equilibrium data handbook". Prentice Hall, USA.

Vigdorowitsch, M., Pchelintsev, A., Tsygankova, L., Tanygina, E. (2021). "Freundlich isotherm: an adsorption model complete framework". *Applied Sciences*, Vol. 11, No. 17, 8078.

Wang, Y., Wang, C., Huang, X., Zhang, Q., Wang, T., Guo, X. (2024). "Guideline for modeling solid-liquid adsorption: kinetics, isotherm, fixed bed, and thermodynamics". *Chemosphere*, Vol. 349, 140736.

Wisniak J., Polishuk A. (199). "Analysis of residuals – a useful tool for phase equilibrium data analysis". *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 164, 61 – 82.