

Predição do comportamento de colunas de leito fixo na adsorção de corantes têxteis via modelagem matemática

Emanuele Diógenes Guerra^a, Marta Maria Menezes Bezerra Duarte^a, Giovanna Amaral Jorge Correia Guedes^a, Raissa Aguiar Freitas^a, Gabriel Lopes de Albuquerque^b, Fábio Machado Cavalcanti^{c*}

^aDepartamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Laboratório de Engenharia Ambiental e da Qualidade (LEAQ), Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE, Brasil

^bEngenharia de Software, Campus Surubim, Universidade de Pernambuco, Surubim-PE, Brasil

^cDepartamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Instituto de Pesquisa em Petróleo e Energia (i-LITPEG), Laboratório de Refino e Tecnologias Limpas (LabRefino/LATECLIM), Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE, Brasil

* fabio.mcavalcanti@ufpe.br

RESUMO

O processo de adsorção é uma alternativa para realizar a remoção de corantes têxteis presentes em efluentes industriais. Quando aplicado em coluna de leito fixo, dois fenômenos de transporte podem atuar no processo, o de transferência de massa e a transferência de quantidade de movimento. Este trabalho teve o intuito de avaliar um modelo fenomenológico preditivo do processo de adsorção de um corante têxtil por um bioadsorvente, por meio da aplicação de um balanço de massa a um volume de controle infinitesimal. Com o uso do Método das Linhas, foi realizada a discretização do domínio espacial do modelo fenomenológico utilizando o Método de Diferenças Finitas, enquanto manteve-se o domínio temporal contínuo. Dessa maneira, a Equação Diferencial Parcial resultante do balanço de massa foi transformada em um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias, facilitando a solução do problema de valor inicial. Elaborou-se um código em linguagem de programação Python para prever o comportamento do processo de adsorção em coluna de leito fixo. Percebeu-se que as curvas de rupturas obtidas foram íngremes, indicando uma rápida saturação do sistema, com transferência de massa rápida e baixa dispersão. A consolidação do modelo pode ser feita a partir do ajuste dele frente a dados experimentais e da estimação de parâmetros específicos do sistema em estudo, em especial, do valor do coeficiente de dispersão axial.

Palavras-chave: Adsorção, corantes, coluna de leito fixo, modelo fenomenológico e preditivo.

1. Introdução

O processo de adsorção em coluna de leito fixo envolve um sistema no qual o soluto flui continuamente através de uma coluna recheada com adsorventes. Esse sistema é capaz de processar grandes volumes de águas residuais de forma eficiente e simples. Para isso, faz-se necessário estudar alguns parâmetros operacionais, como a vazão, a concentração de adsorvato, a altura do leito (quantidade de adsorvente), tempo de saturação do adsorvente, e a capacidade de adsorção (Mohsen; Gahnin, 2024). Esses parâmetros são determinantes quando objetiva-se aplicar sistemas dinâmicos em processos de tratamento de efluentes industriais.

Os parâmetros operacionais dependem de cada par adsorvente/adsorvato e podem ser determinados em estudos de adsorção em banho finito, para posteriormente serem aplicados na coluna de leito fixo. No entanto, não há uma configuração única e padronizada para colunas de leito fixo. Zayed *et al.* (2023), por exemplo, avaliaram a remoção de corantes por biocarvão ativado de coroa de beterraba em uma coluna com altura de leito de 7,5cm, em fluxo descendente e com vazão de 12 mL·min⁻¹. Tanure *et al.* (2024), por sua vez, utilizaram o bagaço de cana-de-açúcar (BCA) para remover o corante amarelo remazol dourado, em coluna de leito fixo com 1,0 cm de diâmetro interno e 10,0 cm de comprimento, com uma altura de leito de 2,2 cm e uma vazão de 2,0 mL·min⁻¹, em fluxo ascendente. Outro estudo que também avaliou a remoção de corante têxtil em coluna de leito fixo foi o de Rahman *et al.* (2025). Os autores avaliaram a remoção de azul de metileno por biocarvão ativado de casca de arroz em duas alturas de leito (1,0 e 1,5 cm) com diâmetro interno de 3,15 cm. O processo ocorreu utilizando fluxo descendente e a taxa de 2,5 mL·min⁻¹.

Diante do exposto, nota-se que cada configuração pode interferir no processo de adsorção e nos fenômenos físico-químicos envolvidos. Portanto, é importante compreender esses fenômenos uma vez que o mecanismo de

transferência de massa afeta diretamente o tempo de residência e o desempenho do sistema (Silva *et al.*, 2025). Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo avaliar, de forma preditiva, o processo de adsorção de um corante têxtil direto e aniônico, macro cíclico constituído de heteroátomos de nitrogênio coordenando um íon cobre (Cu^{2+}) e que continha grupos sulfonados, por um bioadsorvente aplicando o modelo matemático fenomenológico.

2. Métodos

A modelagem da coluna de leito fixo foi realizada para prever o comportamento fenomenológico do processo de adsorção de um corante têxtil com estrutura molecular formada por anéis aromáticos, grupos sulfonados e um íon de cobre por um bioadsorvente, por meio da aplicação do balanço de massa e da cinética de adsorção de segunda ordem, como descrito pelas Equações 1 e 2, respectivamente (Gama *et al.*, 2026). A princípio foi realizada a discretização do domínio espacial da Equação Diferencial Parcial (EDP) representada pela Equação 1, utilizando o Método de Diferenças Finitas, com posterior aplicação do Método das Linhas para solução do sistema resultante de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) no domínio do tempo (contínuo), obtendo-se a Equação 3.

$$D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right) \rho \frac{\partial q}{\partial t} - \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = k(q_{eq} - q_t)^2 \quad (2)$$

$$D_{ax} * \frac{C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1}}{\Delta z^2} - \left(4 * \frac{Q_f}{\pi} * d^2 \right) * \frac{C_{j+1} - C_{j-1}}{2\Delta z} - \left(\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \right) * \rho * k * (q_{eq} - q_t)^2 - \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

$$\varepsilon = 1 - \left[\left(\frac{6}{S_{BET} * d_{po}} \right) * \left(\frac{S_{BET} * d_{po}}{6} - \frac{6V_{po}}{S_{BET} * d_{po}} \right) \right] \quad (4)$$

Em que, D_{ax} ($\text{cm}^2 \cdot \text{min}^{-1}$) é o coeficiente de dispersão axial, z (cm) é a dimensão axial, Q_f ($\text{mL} \cdot \text{min}^{-1}$) é a vazão relacionada a velocidade de fluxo da solução (v), d (cm) diâmetro da coluna, q_{eq} e q_t ($\text{mg} \cdot \text{g}^{-1}$) são as capacidades de adsorção no equilíbrio e no tempo, respectivamente; ρ ($\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$) é a densidade da solução e ε é a fração de vazios do leito.

Em seguida, foi criado o código do modelo utilizando a linguagem de programação em *Python* no ambiente de programação *Google Colab*. Quanto as características do adsorvente, como o diâmetro e volume dos poros, foram utilizados os dados obtidos por Gama *et al.* (2022), tendo em vista que se tratou do mesmo adsorvente. Além disso, foram utilizados os parâmetros cinéticos obtidos do ajuste do modelo de pseudo-segunda ordem aos dados experimentais da adsorção desses corantes pelo mesmo adsorvente em sistema de banho finito, e as condições iniciais e de contorno foram as determinadas por Oliveira (2019), conforme disposto na Tabela 1. Além disso, são mostrados os valores de todos os parâmetros do modelo utilizados na simulação.

As partículas do adsorvente são consideradas esféricas e com tamanho uniforme, o leito é fixo e não sofre variações geométricas, as paredes da coluna são impermeáveis e não sofrem mudanças geométricas, o processo ocorre em condições uniformes de temperatura e pressão (isotérmica e isobárica), não ocorrem mudanças nas propriedades físicas do fluido, o fluxo é ascendente e unidirecional em z e não ocorre variação axial na velocidade do fluido no interior do leito.

Tabela 1. Condições iniciais e de contorno utilizadas no modelo fenomenológico e valores dos parâmetros do modelo para a simulação.

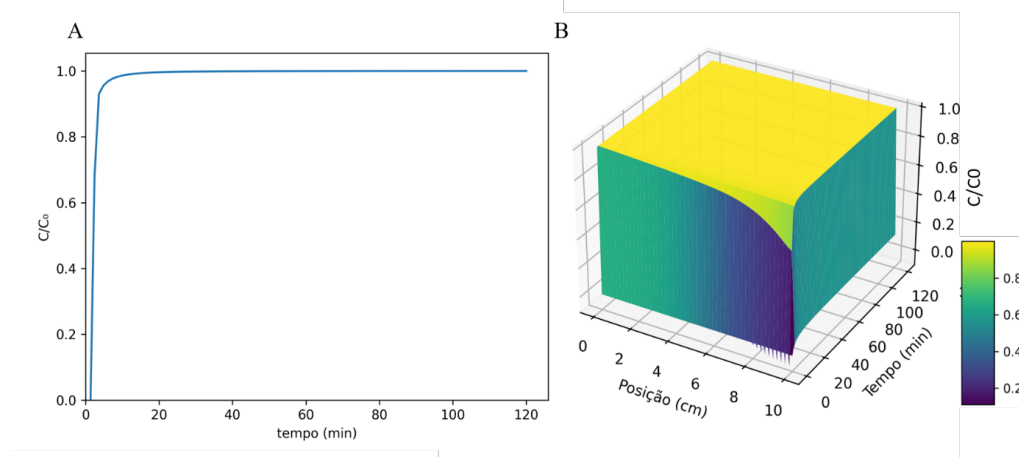
Condições	Tempo	Dimensão	Valores	Parâmetros utilizados no modelo	
inicial	t = 0	0 ≤ z ≤ L	q = 0; C = 0	S_{BET} (m ² ·g ⁻¹)	72,7
				V_{po} (cm ³ ·g ⁻¹)	0,10
				d_{po} (Å)	40,30
				k (min ⁻¹)	0,05
contorno	t > 0	z = 0	C = C ₀ = 50 mg·L ⁻¹	q_{eq} (mg·g ⁻¹)	6,69
	t < 0	z = L	$\frac{\partial C}{\partial z} = 0$	L (cm)	10
				ρ (g·L ⁻¹)	1
				D_{ax} (cm ² ·min ⁻¹)	0,9
				Q_f (mL·min ⁻¹)	1,2

Fonte: Oliveira (2019).

3. Principais resultados

A partir da discretização do domínio espacial com 50 pontos, foi possível criar o código em linguagem de programação Python para prever o comportamento do processo de adsorção em leito fixo. Na Figura 1, é possível observar a simulação do processo da adsorção do corante pelo adsorvente avaliado, por meio da curva de ruptura em 2D (C/C₀ em relação ao tempo no final da coluna) e da superfície de resposta em 3D (C/C₀ em relação ao tempo e à posição).

Figura 1. Simulação da curva de ruptura para o processo adsorptivo contínuo de um corante reativo em 2D (A) e em 3D (B), cujas condições foram: $q_{exp} = 6,69$ mg·g⁻¹, $Q = 1,2$ mL·min⁻¹, $C_0 = 50$ mg·L⁻¹ e $t = 120$ min.



Fonte: Elaborado pela autora (2026).

Na Figura 1, observa-se que a curva de ruptura teve um formato mais íngreme, indicando uma cinética de adsorção muito rápida em uma zona de transferência de massa estreita. Esse comportamento pode ser devido ao baixo valor do coeficiente de dispersão axial (D_{ax}) utilizado no modelo, com o escoamento se aproximando do regime *plug flow*, indicando pouca mistura ao longo do leito, e distanciamento do formato desejável de “S” da

curva com saturação mais prolongada. Esse parâmetro D_{ax} foi estimado por Gama *et al.* (2026) a partir de dados experimentais para outro tipo de corante: íons metálicos de cobre e de cádmio, que possuem estrutura molecular heterocíclica com átomos de nitrogênio e caráter parcialmente covalente nas ligações metal–ligante.

Apesar do modelo discretizado ter representado o comportamento da adsorção em coluna de leito fixo ascendente, é de suma importância realizar os estudos experimentais para corroborar esse comportamento e estimar um coeficiente de dispersão axial característico para o corante em estudo (têxtil direto e aniônico), tendo em vista que o valor deste parâmetro foi utilizado com base na literatura, e que o par adsorvente/adsorvato foram distintos ao desse estudo.

4. Conclusões

A partir do presente estudo, foi possível prever o comportamento do processo de adsorção do corante têxtil por bioadsorventes a partir de um modelo matemático fenomenológico, utilizando de ferramentas de linguagem de programação como o *Python*. Percebeu-se que as curvas de rupturas obtidas foram íngremes, indicando uma rápida saturação do sistema, com transferência de massa rápida e baixa dispersão. A consolidação do modelo pode ser feita a partir de estudos experimentais adotando os parâmetros calculados em diferentes pares adsorvente/adsorvato, além de buscar a otimização dos mesmos.

Agradecimentos: Os autores deste trabalho agradecem à Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Universidade Federal de Pernambuco (UFPE).

Referências

- D. Fila e D. Kołodyńska: Fixed-Bed Column Adsorption Studies: Comparison of Alginate-Based Adsorbents for La(III) Ions Recovery, *Materials* (16), 1058, 2023.
- B. M. V. Gama, D. C. S. Sales, G. E. Nascimento, J. M. Rodríguez-Díaz, C. M. B. M. Barbosa e M. M. M. B. Duarte: Modeling Monocomponente- and Multicomponent Adsorption of Phenol and Cadmium from Aqueous Solution by Peanut Shell Biochar, *Industrial & Engineering Chemistry Research* (61), 18833–18842, 2022.
- B. M. V. Gama, N. F. Campos, D. C. S. Sales, J. M. Rodríguez-Díaz, C. M. B. M. Barbosa e M. M. M. B. Duarte: Sustainable removal of cadmium and copper ions using peanut shell-based adsorbent: fixed-bed column performance and phenomenologic insights, *Chemical Engineering Science* (320), 122511, 2026.
- H. A. Mohsen e A. N. Ghanim: Efficient Removal of Zinc and Copper from Wastewater Using Activated Carbon Derived from Date Pits in a Continuous Fixed-Bed Column, *Revue des Composites et des Materiaux Avances* (34), 149–161, 2024.
- Oliveira, L. P. S. Adsorção de cádmio(ii) e cobalto(ii) em sistemas de banho finito e de leito fixo para soluções monocomponentes e binária. Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco. 159p. 2019.
- M. M. Rahman: Adsorptive removal of toxic heavy metal and dyes from wastewater by rice husk (lignocellulosic biomass) derived activated biochar: A fixed-bed column adsorption study, *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications* (6), 100380, 2025.
- M. N. S. Silva, I. L. S. Santana, G. A. J. C. Guedes, B. G. Ribeiro, C. O. Lima Silva, D. C. Napoleão, D. C. Sales, J. M. Rodríguez-Díaz e M. M. M. B. Duarte: Conversion of agro-industrial wastes as highly efficient adsorbents in the removal of pollutants: Characterization and study of dye adsorption in water, *Chemical Engineering Science* (309), 121442, 2025.
- N. R. M. Tanure, M. M. Elias, L. C. Maia, G. P. Silva, E. R. Azevedo, L. C. Soares e L. V. A. Gurgel: Removal of a model reactive azo dye from aqueous solution by a bioadsorbent in batch and fixed-bed column modes: Application of the developed technology to a textile wastewater, *Water Resources and Industry* (32), 10026, 2024.
- A. M. Zayed, B. S. Metwally, M. A. Masoud, M. F. Mubarak, H. Shendy, M. M. Abdelsatar, P. Petrounias, A. H. Ragab, A. A. Hassan e M. S. M. Abdel Wahed: Efficient dye removal from industrial wastewater using sustainable activated carbon and its polyamide nanocomposite derived from agricultural and industrial wastes in column systems, *RSC Advances* (13), 24887–24898, 2023.