

# Modeling and analysis of ion exchange for ammonium removal from groundwater <sup>\*</sup>

Luis Santamaria-Padilla\* Daniela Vera-Martínez\*  
Roberto G. Ramírez-Chavarría\*

\* *Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Ciudad de México, 04510, México (e-mail:  
LSantamariaP@ingen.unam.mx; RRamirezC@ingen.unam.mx).*

**Abstract:** The presence of ammonium and its derivatives in drinking water sources is a problem of worldwide concern. This work introduces a formal framework to model and analyze an ion exchange process for ammonium removal commonly used in drinking water treatment. The work aims to evaluate (via simulation) the breakthrough curves for ammonium removal in a fixed-bed column with zeolites operating in upflow regime. The results show quantitatively the influence of the initial ammonium concentration and the flow velocities on the behavior of the breakthrough curves. With this, the proposal is intended to be a reference framework for designing experiments in ion exchange processes for ammonia removal and further optimizing them using control strategies.

*Keywords:* Dynamic simulation, Ion exchange, Nonlinear systems, Groundwater, State-space model

## 1. INTRODUCCIÓN

El agua subterránea constituye una fuente hídrica fundamental para una gran parte de la población mundial, siendo vital para satisfacer necesidades básicas y desempeñando un papel crucial en las actividades agrícolas (Wu and Sun (2016), Zahedi et al. (2017), Lapworth et al. (2022)). No obstante, la contaminación de estas reservas es una problemática ambiental de alta relevancia, especialmente debido a la presencia de nitrógeno amoniacal, el cual representa un riesgo considerable tanto para la salud humana como para los ecosistemas acuáticos Wu et al. (2021) Morrissy et al. (2021).

Existen diversos métodos para la eliminación del nitrógeno amoniacal del agua, incluyendo la nitrificación biológica (James and Vijayanandan (2023), Preena et al. (2021)), la destilación con el uso de membranas (Beckinghausen et al. (2020)), la osmosis inversa (Shin et al. (2021), Zhang et al. (2022)) y el intercambio iónico (Labarca and Bórquez (2020), Li et al. (2020)). Entre estos, el intercambio iónico ha demostrado ser una solución eficaz y sostenible. En este contexto, el uso de zeolitas como adsorbentes en reactores de lecho empacado es una estrategia prometedora (Guida et al. (2020), Yaragal and Mutnuri (2023)).

El estado del arte sobre el proceso de intercambio iónico está relacionado, en su mayoría, con modelos experimentales. Cuando se desarrollan modelos teóricos para este proceso, a menudo se asume un estado estacionario o se trabaja con una simplicidad excesiva (Zewail and Yousef (2015)). Por ende, dichas aproximaciones pueden resultar

en la pérdida de información valiosa sobre la dinámica del proceso, limitando así la comprensión y capacidad para optimizarlo en escenarios prácticos. Más formalmente, es posible encontrar soluciones analíticas al fenómeno de intercambio iónico usando una ecuación de advección-dispersión (AD) (Pedregal-Montes et al. (2021)). Sin embargo, esta última no retrata en su totalidad la dinámica involucrada en el proceso de intercambio iónico al no considerar el efecto de reacción (Zhang et al. (2015)).

En este trabajo, se propone un enfoque alternativo para el modelado del proceso de intercambio iónico, considerando como caso de estudio la remoción de Amonio ( $\text{NH}_4^+$ ) en agua subterránea para potabilización. La contribución del enfoque planteado radica en el desarrollo de un modelo de parámetros distribuidos con base en la ecuación de advección-difusión-reacción (ADR), y su representación en el espacio de estados. Con ello, el modelo busca ser una herramienta de diseño de experimentos que considera todos los factores fisicoquímicos presentes en el proceso de intercambio iónico. Así, es posible optimizar la eficiencia de remoción de  $\text{NH}_4^+$ , y proporcionar una herramienta tecnológica para coadyuvar la gestión de la contaminación del agua subterránea.

El resto del trabajo se divide de la siguiente manera. En la Sección 2 se describe el proceso de intercambio iónico y el modelo de parámetros distribuidos. Los resultados obtenidos de simulaciones numéricas, para distintos puntos de operación, se presentan en la Sección 3. Finalmente, la Sección 4 está dedicada a las conclusiones derivadas del trabajo, y una visión del trabajo a futuro.

\* Este trabajo fue realizado gracias al apoyo de SECTEI-CDMX, proyecto 1564c23 (e-SAST).

## 2. PROCESO DE INTERCAMBIO IÓNICO

El estudio del proceso de intercambio iónico para determinar las curvas de ruptura (o de quiebre) se considera en modo de flujo continuo a través de columnas de lecho fijo. La Figura 1 muestra el diagrama de proceso de intercambio iónico, considerando una concentración inicial de  $\text{NH}_4^+$   $C_{in}$  proveniente de un reservorio con agua contaminada. La alimentación a la columna de se realiza con una bomba peristáltica en dirección ascendente para mantener un caudal constante. Las simulaciones numéricas para determinar las curvas de quiebre se llevan a cabo en diferentes condiciones de caudal, concentración del influente y presencia de iones  $\text{NH}_4^+$ . Finalmente, el comportamiento del proceso se evalúa considerando la concentración  $C$  muestreada en el efluente de la columna.

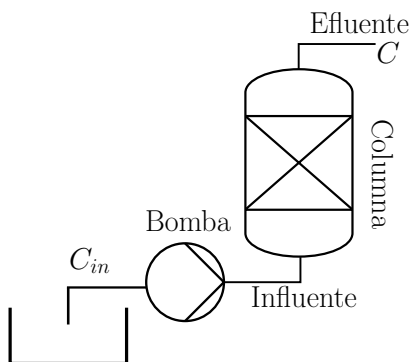


Figura 1. Diagrama del proceso de intercambio iónico en una columna de lecho fijo con flujo ascendente.

### 2.1 Modelo matemático

Como una primera aproximación para modelar la remoción de nitrógeno amoniacal presente en aguas subterráneas mediante un reactor/columna de intercambio iónico de lecho empacado que usa zeolita como agente adsorbente, se utilizará la ecuación diferencial parcial (EDP) unidimensional de advección-dispersión-reacción (Lapidus and Amundson, 1952; Zhang et al., 2015); refs)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} - D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial q}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

donde  $C$  es la concentración de la especie en la fase líquida,  $q$  es la concentración de la especie en la fase sólida (zeolita),  $v$  es la velocidad del fluido,  $D_z$  es el coeficiente de dispersión,  $z$  es la coordenada axial y  $t$  es el tiempo. El primer término de la ecuación (1) está asociado al cambio con respecto al tiempo de  $C$ , el segundo describe la advección debida a  $v$ , el tercero corresponde a la dispersión axial y el cuarto a la reacción debida a la adsorción de la especie en la fase sólida.

En varios trabajos (Eberle et al., 2023); refs) se omite el término de dispersión presente en la ecuación (1), para este trabajo hemos decidido mantenerlo para capturar todos los fenómenos del proceso, ya que es bien sabido que en columnas de adsorción los efectos de la difusión se pueden manifestar en 3 formas bajo suposiciones simples

(Lapidus and Amundson, 1952): (i) si hay resistencia a la transferencia de masa entre fluido y sólido (se asume que es un fenómeno difusivo), (ii) si las partículas usadas como adsorbente son de un cierto tamaño y si toda la partícula se usará efectivamente (es necesario que el adsorbato difunda a través del fluido en el volumen intraparticular antes de que la adsorción pueda tener lugar dentro de la partícula) y (iii) la difusión longitudinal causa un flujo de adsorbato que se superpone al flujo convectivo del fluido a través de la columna.

La transferencia de masa en fase líquida local se describe mediante la aproximación de fuerza impulsora lineal (LDF, por sus siglas en inglés [linear driving force]) y el equilibrio local entre las fases líquida y de resina en la superficie de la resina. Lo anterior resulta en

$$\left. \frac{\partial q}{\partial t} \right|_{r=R} = \frac{\partial q_R}{\partial t} = \frac{2k_l}{r\rho_b} (C - C^*) \quad (2)$$

donde  $q_R$  es la concentración de la especie sobre la superficie de la fase sólida,  $C^*$  es la concentración de la especie en fase líquida en equilibrio con la concentración de la especie sobre la superficie de la fase sólida,  $k_l$  es el coeficiente de velocidad de transferencia de masa en fase líquida,  $r$  es el radio de la resina y  $\rho_b$  es la densidad de la fase sólida.

El tipo de isoterma de equilibrio depende del tipo de resina, del contaminante y de otros factores, como puede ser el pH y la temperatura (Zhang et al., 2015). Se ha mostrado que la adsorción de nitrógeno amoniacal con zeolita (Eberle et al., 2023) se aproxima adecuadamente mediante la isoterma de Freundlich (Kyte, 1973)

$$q_R = K_F (C^*)^{1/n}$$

para calcular  $C^*$  como

$$C^* = \left( \frac{q_R}{K_F} \right)^n \quad (3)$$

Por lo anterior, el modelo resultante es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} - D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial q_R}{\partial t} = 0 \quad (4a)$$

$$\frac{\partial q_R}{\partial t} = \frac{2k_l}{r\rho_b} (C - C^*) \quad (4b)$$

$$C^* = \left( \frac{q_R}{K_F} \right)^n \quad (4c)$$

Con condiciones iniciales

$$C(t = 0, z) = 0 \quad (4d)$$

$$q_R(t = 0, z) = 0 \quad (4e)$$

y de frontera

$$C(t, z = 0) = C_{in} \quad (4f)$$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=L} = 0 \quad (4g)$$

donde  $C_{in}$  es la concentración de entrada en fase líquida y  $L$  es la longitud de la columna,  $K_F$  y  $n$  son parámetros

de la isoterma de Freundlich. El sistema (4) es no lineal, debido a la definición de  $C^*$  (3), ya que regularmente  $0 < n < 1$ .

### 2.2 Modelo de dimensión finita

Para obtener una representación ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), se aplica un esquema de diferencias finitas para las derivadas espaciales, usando diferencias finitas hacia atrás con 2 puntos para primera derivada y diferencias finitas centradas con 3 puntos para segunda derivada (Hundsdoerfer and Verwer, 2003). Con lo anterior se obtiene

$$\frac{dC_i}{dt} + v \left( \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta z} \right) - D_z \left( \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta z^2} \right) + \dots + \frac{k_l}{r\varepsilon} (C_i - C_i^*) = 0 \quad (5a)$$

$$\frac{dq_{R,i}}{dt} = \frac{k_l}{r\rho_b} (C_i - C_i^*) \quad (5b)$$

$$C_i^* = \left( \frac{q_{R,i}}{K_F} \right)^n \quad (5c)$$

Al considerar una discretización del dominio espacial usando  $N$  nodos, donde  $N$  es un grado de libertad, aplicando condiciones de frontera se tiene que para  $i = 1$  (al fondo del reactor)  $C_0 = C_{in}$ , mientras que en  $i = N$  (en la cima del reactor)  $C_{N+1} = C_N$  se tiene la misma concentración que en un nodo anterior.

Por lo anterior, es posible reescribir el modelo en EDOs (5) en forma vectorial como

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = -v\mathbf{AC} + D_z\mathbf{DC} - \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{d\mathbf{q}_R}{dt} + C_{in}\mathbf{B} \quad (6a)$$

$$\frac{d\mathbf{q}_R}{dt} = \frac{2k_l}{r\rho_b} (\mathbf{C} - \mathbf{C}^*) \quad (6b)$$

donde

$$\mathbf{C} = [C_1 \ C_2 \ \dots \ C_N]^T \quad (6c)$$

$$\mathbf{q}_R = [q_{R,1} \ q_{R,2} \ \dots \ q_{R,N}]^T \quad (6d)$$

$$\mathbf{C}^* = [C_1^* \ C_2^* \ \dots \ C_N^*]^T \quad (6e)$$

con las matrices

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\Delta z} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (6f)$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (6g)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \frac{v}{\Delta z} + \frac{D_z}{\Delta z^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (6h)$$

tal que  $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ ,  $\mathbf{C}^* \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ ,  $\mathbf{q}_R \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ ,  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ . El modelo en EDOs (6) es una

Tabla 1. Parámetros del sistema de intercambio iónico.

Dimensiones columna	
Longitud columna, $L$ (m)	0.2
Diámetro interno columna (m)	0.016
Porosidad, $\varepsilon$ (-)	0.2
Zeolita	
$k_l$	$5.2 \times 10^{-6}$
Densidad, $\rho_b$ (kg/L)	0.91
$D_z$ ( $m^2/s$ )	$2.39 \times 10^{-9}$
$r$ (mm)	4
$K_F$	1.02
$n$	0.93
Condiciones de operación	
$v$ (m/h)	1.19 – 2.08
$C_{in}$ (mmol/L)	0.7

aproximación razonable al modelo en EDPs (4) cuando el número de nodos  $N$  es lo suficientemente grande, tal que se preserva el comportamiento no lineal del sistema.

Así, el sistema se puede escribir en forma compacta como

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}_x(t, \mathbf{x}) \quad (7a)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_y(t, \mathbf{x}) \quad (7b)$$

donde

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{q}_R \end{bmatrix} \quad (7c)$$

$$\mathbf{f}_x(t, \mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -v\mathbf{AC} + D_z\mathbf{DC} - \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{d\mathbf{q}_R}{dt} + C_{in}\mathbf{B} \\ \frac{2k_l}{r\rho_b} (\mathbf{C} - \mathbf{C}^*) \end{bmatrix} \quad (7d)$$

$$\mathbf{f}_y(t, \mathbf{x}) = [1 \ \mathbf{0}_{N-2} \ 1 \ \mathbf{0}_N] \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_N \end{bmatrix} \quad (7e)$$

donde  $\mathbf{x}$  es el vector de estados,  $\mathbf{y}$  es el vector de salida (que corresponde a mediciones de concentración a la entrada y salida),  $\mathbf{f}_x(t, \mathbf{x})$  y  $\mathbf{f}_y(t, \mathbf{x})$  son funciones vectoriales no lineales. Esta última representación será útil para el análisis del sistema utilizando teoría de sistemas dinámicos, así como para el diseño de sistemas de control basados en modelo.

### 2.3 Planteamiento del problema

Utilizando el modelo (6) y considerando  $N = 300$  nodos (tamaño de discretización que un resolvidor convencional de EDPs usaría), se simulará el comportamiento de una columna de intercambio iónico para la remoción de Amonio presente en agua mediante zeolita. Se considerarán los parámetros reportados en la Tabla 1, donde las dimensiones de la columna corresponden a un prototipo en desarrollo del Instituto de Ingeniería-UNAM, mientras que los parámetros asociados a la zeolita y de Freundlich provienen de Eberle et al. (2023), ya que es de los pocos estudios que han probado el intercambio iónico entre agua con Amonio y zeolita.

Primero se simulará el proceso considerando una concentración  $C_0 = 0.7$  mmol/L (valor considerado alto por

Eberle et al. (2023)) con una  $v = 1.64$  m/h (velocidad intermedia que podrá proporcionar el equipo experimental), para verificar la consistencia de resultados contra procesos similares.

Después se modificará la concentración de entrada, con la finalidad de evaluar la capacidad de remoción de Amonio de la configuración simulada. Se considerará el valor máximo dado por la NOM-127 ( $C_0 = 0.5$  mg/L = 0.0130 mmol/L), así como un valor arbitrario, considerablemente por arriba de dicho valor (i.e.  $C_0 = 38.46$  mg/L = 0.9971 mmol/L).

Finalmente, considerando una variación de la velocidad de entrada desde el valor mínimo ( $v_{min} = 1.19$  m/h) hasta el máximo ( $v_{max} = 2.08$  m/h) de velocidad de flujo que la bomba peristáltica puede proporcionar, se evaluarán los tiempos de ruptura y de saturación de las curvas de ruptura para identificar las diferencias existentes en el rango de trabajo del sistema. Lo anterior será de utilidad para verificar la factibilidad del diseño e implementación de un sistema de control que regule la dosificación de agua contaminada para optimizar el proceso de intercambio iónico.

Para el análisis de las curvas de ruptura se definen el tiempo de ruptura  $t_r$  cuando se cumple que  $C/C_0 \geq 0.05$ , con  $C_0$  la concentración en  $t = 0$ . Mientras que, el tiempo de saturación  $t_s$  corresponde al instante en que se cumple  $C/C_0 \geq 0.9$ . Finalmente, el tiempo de total saturación  $t_{ts}$  está asociado a  $C/C_0 \approx 1$ , que es el tiempo en el cual se considera que el proceso ha finalizado.

Las simulaciones se realizan con MATLAB 2023a, empleando el método ode15s para resolver el sistema de EDOs.

### 3. RESULTADOS

#### 3.1 Resultados con parámetros de literatura

En la Figura 2 se muestra la curva de ruptura del caso con  $C_0 = 0.7$  mmol/L y  $v = 1.64$  m/h. En primer lugar, es importante observar que el comportamiento es similar a una función sigmoide, lo cual es lo normal para esta clase de procesos (Zhang et al., 2022). El punto de ruptura ocurre en  $t_r \approx 3.25$ h, el tiempo de saturación es  $t_s \approx 15.97$ h y en el tiempo de saturación total de  $t_{ts} \approx 27$ h se aprecia una saturación completa en las zeolitas. Lo anterior permite verificar que el modelo propuesto representa una aproximación adecuada del proceso al se comparado con reportes experimentales que poseen dimensiones y condiciones de operación similares.

#### 3.2 Distintas concentraciones de entrada

Se considerarán 3 casos de concentración de entrada: (i) caso nominal (CN), con  $C_0 = 0.013$  que es valor máximo indicado por NOM-127, (ii) caso atípico (CA), con  $C_0 = 0.7$  tomado de Eberle et al. (2023) (54 veces el valor máximo dado por NOM-127) y (iii) caso extremo (CE), con  $C_0 = 0.99$  (76 veces el valor máximo dado por NOM-127). La velocidad de entrada es la misma para todos los casos ( $v = 1.6413$  m/h).

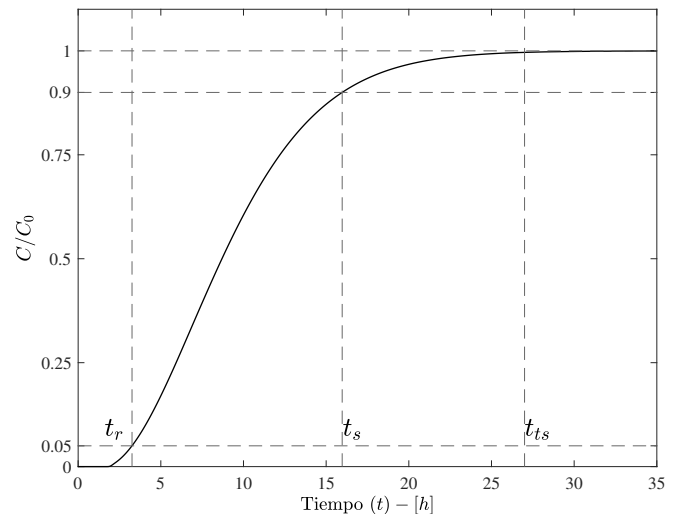


Figura 2. Curva de ruptura

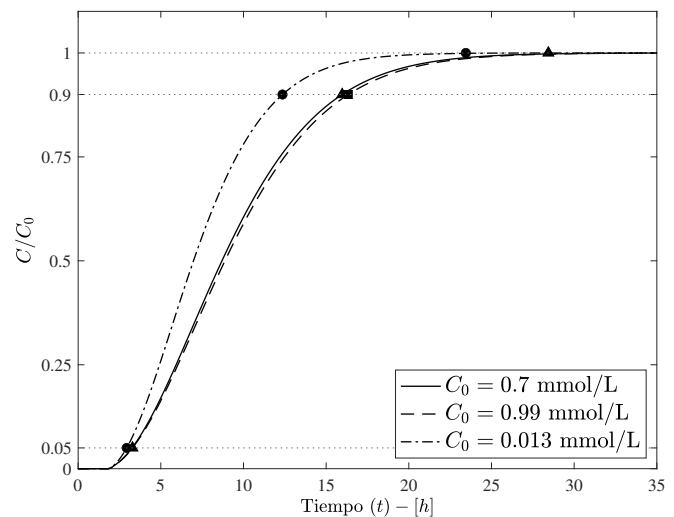


Figura 3. Comparación de curvas de ruptura con distintas concentraciones de entrada

En la Figura 3 se muestran las curvas de ruptura para los 3 casos mencionados. Es posible observar que el tiempo de ruptura es prácticamente el mismo ( $t_r \approx 2$ h). Los tiempos de saturación y de saturación total para CA y CE son muy parecidos, con  $t_s \approx 16$ h y  $t_{ts} \approx 28.39$ h, respectivamente, con una diferencia de 20-25 min entre casos. Para el CN,  $t_s \approx 12.36$ h y  $t_{ts} \approx 23.43$ h, con respecto a otros casos se tiene una diferencia de 3.64h y 4.96h, respectivamente. Lo anterior implica que a menor concentración de entrada los tiempos  $t_s$  y  $t_{ts}$  se alcanzarán en un tiempo menor, mientras que a concentraciones mayores se tendrá un mayor tiempo de operación.

Del análisis anterior se observa que es importante monitorear la concentración de amonio a la entrada y la salida, ya que los tiempos de saturación y de saturación total dependen de dichos valores y que una vez que se alcanzan, la columna de intercambio iónico pierde su capacidad de adsorción.

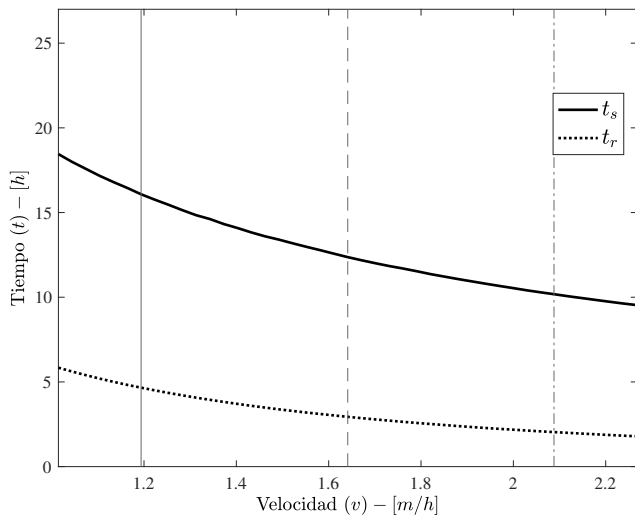


Figura 4. Comparación de tiempos de rompimiento y de saturación con distintas velocidades de entrada

### 3.3 Distintos flujos de entrada

En esta sección se realiza el análisis del comportamiento de la columna de intercambio iónico dentro del rango de valores de velocidad de entrada  $v$  que la bomba peristáltica puede proveer. Se utiliza la concentración de entrada del CN presentado previamente.

En la Figura 4 se dibujan los tiempos de saturación ( $t_s$ ) y de ruptura ( $t_r$ ) que poseen las curvas de ruptura para las velocidades de entrada que van de 1.19-2.08 m/h. De igual forma se realizaron simulaciones con flujos 20% por abajo y arriba de dicho rango, con la finalidad de analizar con mayor detalle la tendencia de los tiempos. Es posible observar que a menor velocidad los tiempos  $t_r$  y  $t_s$  poseen valores mayores a cuando la velocidad de incrementa, observando una tendencia monótonamente decreciente para ambos tiempos.

Para cuantificar las diferencias entre los tiempos, en la Figura 5 se presentan las curvas de ruptura asociadas a los casos de velocidad: (i) mínima (recta vertical – en Figura 4), (ii) intermedia (recta vertical – – en Figura 4) y (iii) máxima (recta vertical - · - en Figura 4). Los valores de  $t_r = 4.66$  y  $t_s = 16.07$  del caso con velocidad mínima, se toman de referencia y se observa que: (i) con velocidad intermedia, existe un decremento del 36.98% y del 23.08%, para  $t_r$  y  $t_s$ , respectivamente y (ii) con velocidad máxima, existe un decremento del 56.33% y del 36.71%, para  $t_r$  y  $t_s$ , respectivamente. Es posible notar que variar la velocidad  $v$  impacta de manera significativa en los tiempos de la curva de ruptura; en el rango de valores que se exploró se aprecia que en  $[v_{min}, v_{int}]$  es cuando se tienen los cambios más significativos (1.72h y 3.71h para  $t_r$  y  $t_s$ , respectivamente), mientras que en el intervalo  $[v_{int}, v_{max}]$  los cambios son de la mitad de la magnitud que en el otro intervalo lo son (0.9h y 2.19h para  $t_r$  y  $t_s$ , respectivamente).

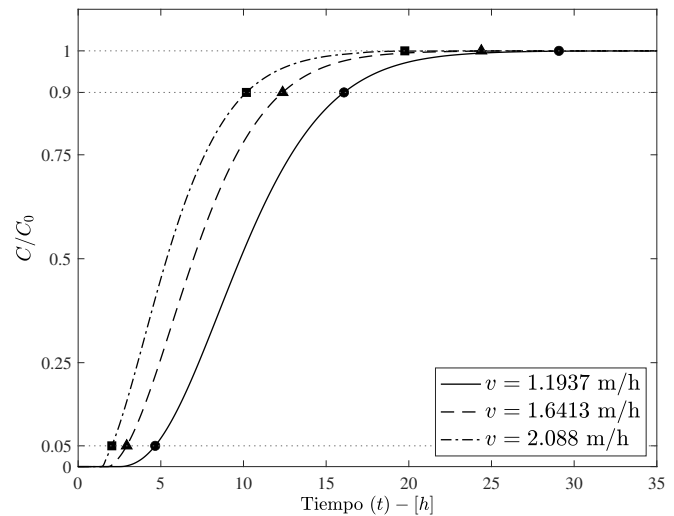


Figura 5. Comparación de curvas de ruptura con distintas velocidades de entrada

### 3.4 Implicaciones para el diseño de sistemas de control

Para el proceso de intercambio iónico es importante conocer los tiempos de ruptura, de saturación y de saturación total, los cuales se obtienen de las curvas de ruptura. Con el análisis reportado, se caracterizaron los efectos correspondientes al considerar distintas concentraciones de entrada y velocidades de flujo. Se encontró que la concentración de entrada modifica los tiempos de saturación, pero mantiene el tiempo de ruptura, mientras que el incremento de la velocidad modifica todos los tiempos. Estos parámetros ( $C_0$  y  $v$ ), son los que en la práctica pueden tener mayor variabilidad, ya que la concentración de amonio puede cambiar conforme pasa el tiempo y la velocidad de entrada (variable de control) se puede ajustar según convenga, vale la pena mencionar que en la mayoría de estudios se mantiene constante durante toda la operación.

Para este proceso es importante que el tiempo de ruptura sea lo más largo posible para maximizar la capacidad de retención de la columna, ya que a partir de este tiempo la columna no puede retener todo el soluto que está siendo alimentado y comienza a liberarlo en el flujo de salida. Por otro lado, es importante determinar o predecir el tiempo de saturación para planificar operaciones de mantenimiento y con esto optimizar el ciclo de vida de la zeolita, ya que a partir de dicho tiempo la columna estará completamente agotada, es decir que la zeolita empleada habrá absorbido todo el soluto que podía.

Por lo anterior, el objetivo de control consiste en alargar el tiempo de ruptura, así como garantizar que el tiempo de saturación se alcanza dentro de un margen óptimo, con la finalidad de maximizar y eficientar la capacidad de la columna de intercambio iónico para remover el amonio en agua subterránea. Lo anterior se conseguirá mediante la variación de la velocidad del flujo de entrada, considerando mediciones de la concentración en la entrada y la salida de la columna.

#### 4. CONCLUSIÓN Y TRABAJO FUTURO

En este trabajo se presentan resultados de simulación que predicen el intercambio iónico entre agua subterránea con Amonio y zeolita. Lo anterior posee relación con algunas pruebas experimentales realizadas, ya que el tiempo en el cual el proceso finaliza (24-30 h) es capturado con el modelo presentado. En un estudio posterior, se comparará contra datos experimentales y se realizarán los ajustes en parámetros necesarios para conseguir una descripción adecuada.

La concentración de entrada no afecta el tiempo de ruptura; sin embargo, cambia el tiempo de saturación, alrededor de 4.96h en los casos estudiados. Por otro lado, la velocidad de entrada afecta el tiempo de ruptura y los de saturación. En bajas velocidades, dichos tiempos incrementan, mientras que a altas velocidades disminuyen. Así, esta variable es el grado de libertad para modificar la ocurrencia de los tiempos de interés del proceso.

Como trabajo a futuro es necesario considerar: (i) validación experimental y ajuste de parámetros del modelo, (ii) identificar el tiempo óptimo de operación del proceso, para establecer los criterios que permitan fijar el tiempo deseado de saturación, (iii) reducción del orden de modelo en presencia de incertidumbre paramétrica, (iv) comparación de capacidad de predicción del modelo al considerar distintas isotermas, (v) diseño e implementación de sistemas de control automático basados en modelo y en datos.

#### REFERENCIAS

Beckingham, A., Odlare, M., Thorin, E., and Schwede, S. (2020). From removal to recovery: An evaluation of nitrogen recovery techniques from wastewater. *Applied Energy*, 263, 114616.

Eberle, S., Schmalz, V., Börnick, H., and Stolte, S. (2023). Natural zeolites for the sorption of ammonium: Breakthrough curve evaluation and modeling. *Molecules*, 28, 1614.

Guida, S., Potter, C., Jefferson, B., and Soares, A. (2020). Preparation and evaluation of zeolites for ammonium removal from municipal wastewater through ion exchange process. *Scientific reports*, 10(1), 12426.

Hundsdoerfer, W. and Verwer, J.G. (2003). *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, volume 33.

James, S.N. and Vijayanandan, A. (2023). Recent advances in simultaneous nitrification and denitrification for nitrogen and micropollutant removal: A review. *Biodegradation*, 34(2), 103–123.

Kyte, W. (1973). Non-linear adsorption in fixed beds: the freundlich isotherm. *Chemical Engineering Science*, 28, 1853–1856.

Labarca, F. and Bórquez, R. (2020). Comparative study of nanofiltration and ion exchange for nitrate reduction in the presence of chloride and iron in groundwater. *Science of the Total Environment*, 723, 137809.

Lapidus, L. and Amundson, N.R. (1952). Mathematics of adsorption in beds. vi. the effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns. *The Journal of Physical Chemistry*, 56, 984–988.

Lapworth, D., Boving, T., Kreamer, D., Kebede, S., and Smedley, P. (2022). Groundwater quality: Global threats, opportunities and realising the potential of groundwater. *Science of The Total Environment*, 811, 152471.

Li, D., Zhou, Y., Long, Q., Li, R., and Lu, C. (2020). Ammonia nitrogen adsorption by different aquifer media: An experimental trial for nitrogen removal from groundwater. *Human and Ecological Risk Assessment: An International Journal*, 26(9), 2434–2446.

Morrissy, J.G., Currell, M.J., Reichman, S.M., Surapaneni, A., Megharaj, M., Crosbie, N.D., Hirth, D., Aquilina, S., Rajendram, W., and Ball, A.S. (2021). Nitrogen contamination and bioremediation in groundwater and the environment: A review. *Earth-Science Reviews*, 222, 103816.

Pedregal-Montes, A.I., Abeywickrama, J., Hoth, N., Grimm, M., and Drebenstedt, C. (2021). Modeling of ion exchange processes to optimize metal removal from complex mine water matrices. *Water*, 13(21).

Preena, P.G., Rejish Kumar, V.J., and Singh, I.S.B. (2021). Nitrification and denitrification in recirculating aquaculture systems: the processes and players. *Reviews in Aquaculture*, 13(4), 2053–2075.

Shin, C., Szczuka, A., Jiang, R., Mitch, W.A., and Criddle, C.S. (2021). Optimization of reverse osmosis operational conditions to maximize ammonia removal from the effluent of an anaerobic membrane bioreactor. *Environmental Science: Water Research & Technology*, 7(4), 739–747.

Wu, J. and Sun, Z. (2016). Evaluation of shallow groundwater contamination and associated human health risk in an alluvial plain impacted by agricultural and industrial activities, mid-west china. *Exposure and health*, 8, 311–329.

Wu, J., Bian, J., Wan, H., Ma, Y., and Sun, X. (2021). Health risk assessment of groundwater nitrogen pollution in songnen plain. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 207, 111245.

Yaragal, R. and Mutnuri, S. (2023). Nitrates removal using ion exchange resin: batch, continuous column and pilot-scale studies. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 20(1), 739–754.

Zahedi, S., Azarnivand, A., and Chitsaz, N. (2017). Groundwater quality classification derivation using multi-criteria-decision-making techniques. *Ecological Indicators*, 78, 243–252.

Zewail, T. and Yousef, N. (2015). Kinetic study of heavy metal ions removal by ion exchange in batch conical air spouted bed. *Alexandria Engineering Journal*, 54(1), 83–90.

Zhang, J., Amini, A., O'Neal, J.A., Boyer, T.H., and Zhang, Q. (2015). Development and validation of a novel modeling framework integrating ion exchange and resin regeneration for water treatment. *Water Research*, 84, 255–265.

Zhang, Y., Tang, W., Bai, J., Li, J., Wang, J., Zhou, T., Guan, X., and Zhou, B. (2022). Highly efficient removal of total nitrogen and dissolved organic compound in waste reverse osmosis concentrate mediated by chlorine radical on 3d co3o4 nanowires anode. *Journal of Hazardous Materials*, 424, 127662.