



**"Quitosano derivado de *Agaricus Bisporus*:
Caracterización y Evaluación del
rendimiento en la adsorción de paracetamol
en agua"**

Nombre: Juan Andrés Bravo Núñez

Profesor Guía: Juan Pablo Inostroza S.



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): Memoria o trabajo de título; Tesis de Postgrado;

Título del trabajo: Quitosano derivado de Agaricus Bisporus: Caracterización y Evaluación del rendimiento en la adsorción de paracetamol en agua

Nombre del candidato(a): Juan Andres Bravo Núñez

Carrera / Grado: Ingeniería de Ejecución en Gestión y Control Ambiental

Campus: Concepción; **Departamento:** Química y Medioambiente

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Juan Pablo Inostroza Saldías, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL

El trabajo **NO contiene información que amerite confidencialidad** y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por:

6 meses; 12 meses; 2 años; 3 años; 5 años; 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis: Juan Pablo Inostroza Saldías

Fecha: 25-11-2025 ; **Firma:** 

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 25-11-2025 ; **Firma:** 

INDICE

1	CAPITULO 1: FUNDAMENTO TEÓRICO	4
1.1	Contaminante Emergentes	5
1.1.1	Clasificación de contaminantes emergentes	5
1.2	Productos farmacéuticos (PPCP) y el Paracetamol.	6
1.3	Contaminantes Emergentes en el Agua	6
1.3.1	Fuentes y Vías de contaminación	6
1.3.2	Efectos sobre el ecosistema y la salud humana	7
1.4	Avances Tecnológicos en la Detección.....	8
1.5	Tratamiento de Aguas Residuales para Contaminantes Emergentes	9
1.6	Innovación y Tecnologías Emergentes	11
1.7	Nanofibras de Quitosano	12
1.7.1	Aspectos Químicos del Quitosano Fúngico	13
1.7.2	. FTIR espectros de quitina y quitosano	13
2	CAPITULO 2: METODOLOGÍA	14
2.1	Materiales y métodos.....	15
2.1.1	Materiales	15
2.1.2	Técnica de extracción	15
2.2	Técnicas de caracterización	15
2.2.1	Espectroscopia Infrarroja.....	15
2.2.2	Determinación del grado de desacetilación por espectroscopía FTIR	15
2.2.3	Procesamiento de datos espectroscópicos	16
2.3	Diseño experimental factorial.....	16
2.3.1	Variable Experimentales	16
2.4	Procedimiento experimental Batch.....	17
2.5	Análisis estadístico y de Modelado	17
2.5.1	Análisis descriptivo y de efectos	17
2.5.2	Análisis de Varianza (ANOVA).....	18
2.5.3	Modelado de Isoterma de Adsorción	18
2.5.4	Determinación de la Capacidad de Adsorción para Comparación	18
3	CAPITULO 3: RESULTADOS Y DISCUSIÓN	20
3.1	Extracto quitosano	21

3.2	Caracterización material Bioadsorbente	21
3.2.1	Identidad Química y Cuantificación del Grado de Desacetilación (DDA) ..	21
3.3	Influencia de Variables Operacionales	25
3.3.1	Superficie de respuesta	25
3.3.2	Gráficos de dispersión y contorno	26
3.3.3	Diagrama de Pareto	27
3.3.4	Anova de un solo factor	28
3.4	Modelado y Caracterización del proceso.....	29
3.4.1	Análisis isoterma de Freundlich:	29
3.4.2	Análisis isoterma de Langmuir:.....	30
3.4.3	Caracterización del Mecanismo de Adsorción mediante el Modelo de Sips. 31	
3.5	Determinación de la Capacidad de Adsorción experimental.....	32
3.5.1	Comparación frente a otros bioadsorbentes.....	32
ANEXOS		37
ANEXO A: “Datos crudos y Matriz Experimental”		37
ANEXO B: “Cálculos detallados y pruebas Estadísticas”		39
ANEXO C: “Scripts de Análisis Estadístico y Modelado”		41

INDICE DE FIGURAS

Figura 1.1.	Clasificación de Contaminantes Emergentes.	5
Figura 1.2.	Cuadro comparativo de métodos de detección de contaminantes emergentes en agua residuales.....	9
Figura 3.1.	a) Extracto de quitosano húmedo b) Extracto de quitosano seco.....	21
Figura 3.2.	Espectro FTIR del quitosano derivado de A. Bisporus.	22
Figura 3.3.	Espectro FTIR: quitosano derivado v/s quitosano comercial.	23
Figura 3.4.	a) Grafico de superficie de respuesta (Paracetamol) b) Grafico de mapa de contorno %Remoción.	25
Figura 3.5.	Mapas de contorno, comparación del efecto de las distintas variables del proceso de adsorción.	26
Figura 3.6.	Gráficos de dispersión.....	26
Figura 3.7.	Diagrama de Pareto de los factores predominantes.	28
Figura 3.8.	Gráfico Isoterma de Freundlich.	30
Figura 3.9.	Gráfico Isoterma de Langmuir.	30
Figura 3.10.	Gráfico Ajuste de Isoterma Al Modelo Sips	32

INDICE DE TABLAS

Tabla 2.1. Niveles de Matriz del diseño de experimento.....	17
Tabla 3.1. Comparación de DA y DDA de diferentes quitinas y quitosanos.....	23
Tabla 3.2. Resumen resultados ANOVA.....	28
Tabla 3.3. Comparación de resultados isotermas.	31
Tabla 3.4. Comparación de capacidad de adsorción de quitosano fúngico frente a otros estudios.	33

INDICE DE ECUACIONES

$\%R = C_0 - C_e C_0 \times 100$ Ecuación 2.1	17
$q_e = C_0 - C_e \cdot V_m$ Ecuación 2.2.....	18
$I_{A1} = A_{1655} / A_{3450}$ Ecuación 3.1	22
$DDA = 100 - I_{A1} \times 100$ Ecuación 3.2.....	22
$DA = 100 - DDA$ Ecuación 3.3	22
$\log q_e = \log K_f + 1/n \cdot \log C_e$ Ecuación 3.1	40

RESUMEN

Título: Quitosano Derivado de *Agaricus bisporus*: Caracterización y Evaluación del Rendimiento en la Adsorción de Paracetamol en Agua.

La emergencia de contaminantes farmacéuticos en cuerpos de agua, ejemplificados por el paracetamol (acetaminofén), exige el desarrollo de soluciones de tratamiento eficientes y sostenibles. El presente estudio evaluó el potencial del Quitosano fúngico, obtenido a partir de un subproducto de la biomasa del hongo *Agaricus bisporus*, como un bioadsorbente de alto rendimiento.

El quitosano fúngico fue caracterizado mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR), la cual confirmó la conversión exitosa del material. Esta conversión se evidenció por la marcada disminución de las bandas de absorción Amida I y Amida II (típicas de los grupos N-acetilados de la quitina) y la aparición prominente de la banda de tensión N-H y de la vibración C-N del grupo amino primario (NH₂). La evaluación de la remoción de paracetamol se realizó a través de un Diseño Experimental Factorial 2³.

El análisis descriptivo mediante el Diagrama de Pareto identificó al Tiempo de Contacto y la Dosis de Quitosano como los factores con mayor magnitud de efecto. Si bien el ANOVA de un factor no confirmó la significancia estadística ($p > 0.05$), la magnitud del efecto justifica la selección de condiciones óptimas para el proceso.

La adsorción de paracetamol se analizó mediante isotermas:

El modelo de Langmuir fue descartado debido a un ajuste deficiente ($R^2=0.2516$) y a la obtención de parámetros físicamente incoherentes ($q_{\max}=-46.62$ mg/g).

El proceso se ajustó moderadamente al modelo de Freundlich ($R^2=0.6861$), proporcionando la primera evidencia de una adsorción en multicapas sobre una superficie energéticamente heterogénea.

Finalmente, el modelo de Sips, con la capacidad máxima fijada en el valor experimental de 330 mg/g, demostró un excelente ajuste ($R^2 = 0.91$). Este resultado confirma de manera concluyente que la adsorción es un proceso que ocurre en una superficie heterogénea, validando al modelo de Sips como el más representativo del sistema.

El resultado crucial fue la determinación de una capacidad de adsorción experimental máxima (q_e) de 330.00 mg/g. Este rendimiento es directamente comparable al de adsorbentes avanzados como el carbón activado (332.20 mg/g), posicionando al quitosano fúngico como un material excepcionalmente eficiente.

La investigación concluye que el Quitosano derivado de *Agaricus bisporus* es un bioadsorbente de alto rendimiento y bajo costo que ofrece una solución viable para la remoción de contaminantes emergentes. Su uso promueve la economía circular al revalorizar un subproducto de la industria alimentaria, validándola como una tecnología sostenible y eficiente para el tratamiento de aguas.

Introducción

Los contaminantes emergentes (CE) son un grupo de compuestos no regulados, incluidos productos farmacéuticos y químicos industriales, cuya presencia e impacto en el medio ambiente ha sido reconocida recientemente. Estos compuestos persisten en los ecosistemas y se bioacumulan en la cadena alimentaria, planteando riesgos a largo plazo para la salud humana. Entre ellos, el paracetamol (acetaminofén) es de particular interés debido a su consumo masivo y su detección frecuente en efluentes de aguas residuales.

Las fuentes de estos contaminantes son variadas, abarcando desde las emisiones industriales, hasta los residuos domésticos. Y pueden entrar al medio ambiente a través de diversas vías, como la lixiviación, la deposición atmosférica y la descarga en aguas residuales. Si bien la existencia de los CE no es nueva, han recibido una mayor atención recientemente como resultado del desarrollo de técnicas analíticas más sensibles, que han revelado la presencia de tales contaminantes en el aire, suelo y agua a niveles tan bajos como partes por billón.

Si bien la atención a los CE ha aumentado gracias al desarrollo de técnicas analíticas más sensibles (capaces de detectarlos a niveles de partes por billón), las plantas de tratamiento de aguas residuales convencionales son ineficaces para su eliminación y se consideran una fuente potencial de contaminación. Por esta razón, se han explorado métodos avanzados, y la adsorción ha ganado atracción como una alternativa eficiente, escalable y con menor sofisticación operacional en comparación con la precipitación o la coagulación.

A pesar de la eficiencia de la adsorción, el alto costo y la limitada sostenibilidad de los adsorbentes comerciales tradicionales (como el carbón activado) han generado una brecha tecnológica y la necesidad de explorar bioadsorbentes asequibles. En respuesta a esta necesidad, el quitosano fúngico, obtenido como un subproducto de la biomasa de *Agaricus bisporus*, se posiciona como un material de alto rendimiento y bajo costo. Este proyecto evalúa la viabilidad del quitosano fúngico como bioadsorbente de alto rendimiento, determinando la influencia de las variables operacionales y caracterizando el proceso de equilibrio para la remoción eficiente del paracetamol en soluciones acuosas.

Justificación

I. Necesidad Ambiental y Social

Las estimaciones de las Naciones Unidas sugieren que la población mundial alcanzará 10 mil millones para el año 2050. Por lo tanto, se espera que la necesidad de agua dulce genere una tensión en las fuentes existentes. El tratamiento y la eliminación segura de los efluentes es una apremiante y requiere atención urgente. La presencia de contaminantes emergentes en los sistemas acuáticos representa un desafío significativo para la salud ambiental y humana. En este contexto, el Paracetamol (acetaminofén) es un contaminante emergente de gran preocupación debido a su alto volumen de consumo, su persistencia en el medio ambiente y su reconocida ecotoxicidad en organismos acuáticos (como peces y algas) a bajas concentraciones. Abordar su remoción es crucial para mitigar los riesgos ambientales y de salud pública asociados.

II. Brecha Tecnológica y Científica

Si bien las plantas de tratamiento convencionales han demostrado ser ineficaces para la remoción de estos contaminantes persistentes, los métodos avanzados propuestos, como la precipitación o la oxidación avanzada, suelen ser costosos, intensivos en energía o requieren una infraestructura de mayor sofisticación. La técnica de adsorción es más ventajosa en términos de operatividad y costo, pero el adsorbente de referencia en la actualidad, el carbón activado, presenta un alto costo de fabricación y regeneración, lo que limita su aplicación a gran escala en países en desarrollo o para tratamientos localizados.

III. Novedad y Economía Circular

Sostenibilidad y Economía Circular: Al utilizar la biomasa de *Agaricus bisporus* (un subproducto de la industria alimentaria) se reduce el costo de la materia prima, se revaloriza un residuo y se disminuye la dependencia de fuentes de quitosano no sostenibles (crustáceos).

Objetivo general:

Evaluar la viabilidad del quitosano fúngico como bioadsorbente de alto rendimiento, determinando la influencia de las variables operacionales y caracterizando el proceso de equilibrio para la remoción eficiente del paracetamol en soluciones acuosas.

Objetivos específicos:

1. Obtener y caracterizar bioadsorbente de quitosano a partir de extractos del hongo *Agaricus Bisporus*.
2. Determinar la influencia de las variables operacionales (tiempo de contacto, concentración inicial de paracetamol y cantidad de quitosano) sobre el porcentaje de remoción, utilizando un diseño experimental y el análisis de efectos.
3. Cuantificar la capacidad de adsorción experimental máxima (q_e) del quitosano fúngico en las condiciones óptimas del estudio.
4. Comparar la capacidad de adsorción experimental del quitosano fúngico con la reportada para adsorbentes convencionales y otros bioadsorbentes en la literatura, para establecer su potencial competitivo.

1 CAPITULO 1: FUNDAMENTO TEÓRICO

1.1 Contaminante Emergentes

La industrialización provocó cambios significativos en los patrones de contaminación, introduciendo nuevos contaminantes en el medio ambiente, como metales pesados, productos químicos industriales y partículas. Los contaminantes emergentes son un grupo de contaminantes recién descubiertos o no regulados, que representan un riesgo para el medio ambiente y la salud humana. (XingYu Li et al., 2023)

1.1.1 Clasificación de contaminantes emergentes

Los Contaminantes emergentes de mayor preocupación generalmente incluyen a los Productos químicos y subproductos industriales (ICB), productos químicos disruptores endocrinos (EDP), productos farmacéuticos y productos de cuidado personal (PPCP), Sustancias de Polifluoroalquilo (PFA), micro plásticos (MP) y nanomateriales (NS). Estas seis categorías de CE no están separadas, debido a que se intercalan entre sí. El uso excesivo y la eliminación inadecuada de estos productos han llevado a su omnipresencia en el entorno natural, causando una contaminación continua con productos químicos potencialmente dañinos. (Fang et al., 2024)



Figura 1.1. Clasificación de Contaminantes Emergentes.

1.2 Productos farmacéuticos (PPCP) y el Paracetamol.

Los PPCP representan uno de los grupos más grandes de CE, que abarca una amplia gama de compuestos con diversas propiedades químicas y físicas, incluidos medicamentos recetados y de venta libre y productos de cuidado personal como fragancias lociones y cosméticos. Estas sustancias se utilizan diariamente para distintos fines, humanos y animales. Con más de 50.000 tipos de PPCP producidos actualmente (XingYu Li et al., 2023). El destino ambiental y las propiedades toxicológicas de los PPCP y su transformación durante los procesos geoquímicos ambientales plantean riesgos tanto para la salud humana como para la integridad de los ecosistemas.

El Paracetamol (APAP) representa un riesgo ecotoxicológico considerable en los sistemas acuáticos, siendo su presencia constante una amenaza para los diversos niveles tróficos. La toxicidad del APAP no solo se limita a efectos agudos, sino que se manifiesta principalmente a través de efectos crónicos y subletales en concentraciones relevantes para el ambiente (Nunes et al., 2014). En invertebrados, organismos esenciales para la cadena alimentaria, el APAP ha sido identificado como un compuesto con un significativo cociente de riesgo acuático, provocando alteraciones en la función biológica, como la desregulación de genes relacionados con la desintoxicación y la reproducción en especies modelo como *Daphnia magna* (Ding et al., 2020; Iannacone & Alvaríño, 2025). Esta preocupación se extiende a los organismos superiores, donde la exposición subcrónica ha demostrado causar disrupción endocrina y hepatotoxicidad en peces machos (*Rhamdia quelen*), incluso a las bajas concentraciones encontradas en ambientes naturales (Mathias et al., 2017).

1.3 Contaminantes Emergentes en el Agua

1.3.1 Fuentes y Vías de contaminación

Para comprender y abordar mejor los CE y sus impactos nocivos, es crucial analizar a fondo las características de estas sustancias, como se liberan en el medio ambiente y como pueden afectar a los organismos vivo.

Los CE con frecuencia entran al medio ambiente a través de diversas vías, una de esas incluye los residuos líquidos industriales y domésticos. En este sentido podemos clasificar dos tipos de descargas, descargas puntuales de las plantas de tratamiento de agua residual, que incluyen

fuentes de los residuos domésticos, industrial y hospitalario, y descargas no puntuales como las escorrentías de aguas pluviales de la agricultura (incluida la ganadería y la acuicultura) y las zonas urbanas.

Las plantas de tratamiento convencionales no fueron diseñadas para eliminar los CE de manera efectiva. Como resultado se han reportado muchos contaminantes provenientes de efluentes tratados en concentraciones que van desde lo ng/L a los ug/L (Fang et al., 2024).

En resumen, los CE podrían directa o indirectamente, entrar en el medio ambiente desde diversas fuentes, como operaciones industriales y agrícolas; actividades mineras y de construcción; fugas de petróleo y químicos; fuentes difusas como drenajes de aguas pluviales y sistemas de tratamiento de aguas residuales.

1.3.2 Efectos sobre el ecosistema y la salud humana

1.3.2.1 Impactos en la vida silvestre

En particular los productos químicos disruptores endocrinos (EDC), representan riesgos significativos para la vida silvestre y los ecosistemas al interrumpir los sistemas hormonales de los animales. Después de deslizarse a través de las plantas de tratamiento de aguas residuales, estos contaminantes se han detectado en varias matrices ambientales, incluyendo arroyos, lagos y aguas subterráneas en todo el mundo. Los estudios han demostrado que la exposición farmacéutica puede alterar los comportamientos reproductivos en especies acuáticas como peces y anfibios. Al mismo tiempo, los subproductos industriales han demostrado toxicidad directa, aumentando la mortalidad y poniendo en peligro la sostenibilidad de la población (XingYu Li et al., 2023). Por lo tanto, es necesario mejorar los métodos para eliminar estos CE para salvaguardar la vida silvestre y mantener la salud y la resiliencia del ecosistema.

1.3.2.2 Efectos en los ecosistemas

La escorrentía agrícola, enriquecida con nutrientes y contaminantes, interrumpe los ciclos de nutrientes de los ecosistemas, lo que lleva a la eutrofización. Este proceso, una forma de envejecimiento de los ecosistemas acuáticos, se acelera con la escorrentía, causando una

floración excesiva de algas y agotamiento de oxígeno, afectando negativamente a la vida marina (Bing Wang et al., 2024).

Además, también tenemos la amenaza constante y emergente de los microplásticos ya que degradan aún más el hábitat, afectando al entorno físico y los organismos que dependen de estos espacios. Los microplásticos representan riesgos de ingestión para la vida silvestre y perturban los hábitats (Fang et al., 2024).

1.3.2.3 Perdida de la biodiversidad

La introducción de contaminantes emergentes a los ecosistemas puede reducir significativamente la diversidad de especies, afectando particularmente a las especies que luchan por sobrevivir y reproducirse en condiciones contaminadas. La exposición prolongada a estos contaminantes puede causar alteraciones genéticas, ya que, estos contaminantes tienen la capacidad de modificar la expresión génica en las especies acuáticas directamente a través de la contaminación del agua e indirectamente a través de la cadena alimentaria, lo que lleva a disrupciones ecológicas y moleculares generalizadas (XingYu Li et al., 2023).

1.3.2.4 Impactos en la salud humana

Los contaminantes emergentes como productos farmacéuticos, de cuidado personal y microplásticos representan riesgos crecientes para la salud humana, estas sustancias a menudo no reguladas y poco comprendidas, pueden entrar en los suministros de agua, las cadenas alimentarias y los ecosistemas, creando posibles riesgos para la salud.

Los efectos sobre la salud humana pueden incluir alteraciones hormonales, resistencia a los antibióticos y otros impactos a largo plazo, lo que impulsa la necesidad de que los sistemas de salud pública evolucionen y aborden estos desafíos (Yadav et al., 2021).

1.4 Avances Tecnológicos en la Detección

La detección y el análisis de CE en matrices ambientales requieren técnicas sofisticadas diseñadas para localizar y medir estas sustancias, a menudo presentes solo a niveles trazas. Un alto grado de sensibilidad y selectividad es esencial, asegurando que los CE puedan distinguirse y cuantificarse en medio de otros analitos presentes. Este proceso comienza con la meticulosa preparación de la muestra, utilizando métodos como la extracción de fase sólida (SPE), la extracción líquido-líquido (LLE), la extracción asistida por ultrasonido (EUA),

técnicas de microextracción como la microextracción por sorbente empaquetado (MEPS) o la microextracción en fase sólida (SPME) para concentrar los CE y reducir la interferencia de la matriz de las muestras (Martin-Pozo et al., 2019).

Las técnicas analíticas desempeñan un papel fundamental, cromatografía y formas de espectroscopia de masas, proporcionan la columna vertebral para la separación y la cuantificación precisa. Los métodos avanzados como la electroforesis capilar y la espectroscopia de resonancia magnética nuclear mejoran aún más la capacidad de analizar los CE, atendiendo necesidades específicas como el análisis de especies iónicas o la elucidación estructural. (Shyamalagowri et al., 2023).

Métodos de detección

TÉCNICA	CE	VENTAJAS	DESVENTAJA
Cromatografía de gases-espectroscopia de masas (GC-MS)	Bisfenol A, Triclosán, Ibuprofeno, Naproxeno, Tolueno, Benceno (Albero et al., 2017)	Robustez separación cromatografía de gases. Poder de la detección avanzado de la espectrometría de masas.	Muchos contaminantes emergentes, particularmente aquellos que son polares o tienen altos pesos moleculares, pueden no ser susceptibles para el análisis GC-MS.
Cromatografía líquida-espectrometría de masas (LC-MS)	Paracetamol, Ibuprofeno, olanzapina, cafeína, diclofenaco (Asam et al., 2023)	Alta sensibilidad y selectividad.	Es susceptible a los efectos de la matriz, lo que puede afectar significativamente la precisión y la reproducibilidad de los resultados.
Técnicas espectroscópicas (FTIR;RMN)	RMN: Heparina, Polifluoroalquilo, Acido Olmesartan. FTIR: HAPs, microplásticos, Bisfenol.	Análisis no destructivo y resultados rápidos	baja sensibilidad por lo que el contaminante debe estar presentes en concentraciones más elevadas.
Biosensores	Microcistinas, Micotoxinas, Proteínas,.	Alta selectividad del reconocimiento biológico.	Requieren un diseño y calibración específicos.

Figura 1.2. Cuadro comparativo de métodos de detección de contaminantes emergentes en agua residuales

1.5 Tratamiento de Aguas Residuales para Contaminantes Emergentes

La remoción de contaminantes emergentes (CE) de las aguas residuales es un desafío complejo que ha impulsado el desarrollo de múltiples tecnologías. Si bien los tratamientos convencionales son a menudo ineficaces, se han explorado diversos métodos avanzados, cada uno con sus propias ventajas y limitaciones (Luo, et al., 2014). A continuación, se describen los enfoques más relevantes.

1.5.1 Procesos de Oxidación Avanzada (AOP)

Los AOP son tecnologías que se basan en la generación *in situ* de especies altamente reactivas, principalmente el radical hidroxilo ($\bullet\text{OH}$), para degradar contaminantes orgánicos complejos hasta su mineralización.

Son extremadamente efectivos para destruir una amplia gama de CE que son resistentes a otros tratamientos (Wang, et al., 2023). Su principal desventaja es el alto costo operativo, debido a un consumo energético considerable y a la necesidad de reactivos. Además, existe el riesgo de formar subproductos de oxidación que pueden ser igualmente tóxicos (Miklos, et al., 2018).

1.5.2 Tratamientos Basados en Adsorción Física

La adsorción es un proceso de superficie donde los contaminantes son transferidos desde la fase acuosa a la superficie de un material sólido poroso (adsorbente). Materiales como el carbón activado, las zeolitas y, más recientemente, los bioadsorbentes, han demostrado una alta eficacia.

Es una técnica robusta, de fácil operación y muy versátil, considerada una de las tecnologías más prometedoras para la remoción de CE (Rathi & Kumar, 2021). El alto costo de producción y regeneración de adsorbentes comerciales como el carbón activado puede limitar su aplicación a gran escala. Además, la adsorción solo transfiere el contaminante de una fase a otra, generando un residuo sólido que debe ser gestionado.

1.5.3 Tecnologías de Filtración por Membranas

Las tecnologías de membrana, como la nanofiltración (NF) y la ósmosis inversa (RO), utilizan barreras semipermeables para separar los contaminantes del agua basándose en la exclusión por tamaño y las interacciones fisicoquímicas.

Ofrecen una alta eficiencia de remoción para un amplio espectro de CE, incluyendo productos farmacéuticos y compuestos orgánicos (Luo, et al., 2014). El principal desafío técnico es el ensuciamiento de la membrana (*fouling*), que reduce el flujo de agua, disminuye la eficiencia y acorta la vida útil del sistema, incrementando los costos operativos.

1.5.4 Biorremediación

La biorremediación emplea microorganismos (bacterias, hongos) para degradar los contaminantes orgánicos, convirtiéndolos en sustancias menos tóxicas como agua y dióxido de carbono. Es un método sostenible, de bajo costo y ambientalmente amigable (Patel, et al., 2022). El proceso es generalmente lento y su eficacia depende críticamente de condiciones ambientales específicas (pH, temperatura, nutrientes), lo que puede limitar su aplicabilidad.

1.6 Innovación y Tecnologías Emergentes

Para superar las limitaciones de los métodos convencionales, están surgiendo tecnologías innovadoras que buscan soluciones más eficientes, económicas y sostenibles para la remoción de contaminantes emergentes (CE).

1.6.1.1 Remediación Basada en Nanotecnología

La nanotecnología es un campo emergente que utiliza nanomateriales (como nanopartículas, nanofibras y nanocompuestos) para el tratamiento de contaminantes ambientales. Debido a su tamaño minúsculo y a su elevada relación superficie-volumen, estos materiales poseen propiedades físicoquímicas únicas que los hacen excepcionalmente efectivos para interactuar y eliminar contaminantes del agua y el suelo.

Los nanomateriales ofrecen una alta eficiencia de remoción para una amplia gama de contaminantes, incluyendo metales pesados y compuestos orgánicos, gracias a su gran área superficial y alta reactividad. Se pueden diseñar para ser altamente selectivos hacia contaminantes específicos y son adaptables a diversas formas de aplicación, como filtros o inyecciones *in situ*. Además, algunos pueden ser recuperados y reutilizados, lo que reduce costos e impacto ambiental a largo plazo.

A pesar de su potencial, la nanotecnología enfrenta desafíos significativos. Existe una creciente preocupación por la nanotoxicidad, es decir, los posibles riesgos para la salud y el medio ambiente que podrían derivarse de la liberación y acumulación de nanomateriales en los ecosistemas (Bundschuh, et al., 2018). Además, el alto costo de producción para aplicaciones a gran escala y la falta de marcos regulatorios claros para el uso de nanomateriales son obstáculos importantes para su adopción generalizada.

1.6.1.2 Bioadsorbentes y Nanofibras de Biopolímeros

Dentro de la nanotecnología, los materiales de origen biológico han ganado un enorme interés. Las nanofibras basadas en biopolímeros como la celulosa y el quitosano, son una alternativa sostenible a los materiales sintéticos. Estos biopolímeros son de bajo costo, abundantes, renovables y fácilmente modificables, lo que los hace ideales para aplicaciones de remediación.

A diferencia de las membranas poliméricas sintéticas (como polisulfona o polipropileno), que a menudo sufren de problemas de bioincrustaciones (*biofouling*) debido a su naturaleza hidrofóbica, los filtros basados en biopolímeros como el quitosano son intrínsecamente más hidrofílicos y biocompatibles, lo que reduce estos problemas (Mautner, et al., 2014). Este enfoque no solo aborda los desafíos técnicos de la filtración, sino que también se alinea con los principios de la sostenibilidad al utilizar recursos renovables.

1.7 Bioadsorbente de Quitosano

El quitosano es un biopolímero funcional que se obtiene a partir de la quitina, el segundo polisacárido más abundante en la naturaleza después de la celulosa (Rinaudo, 2006). Aunque la quitina es abundante, sus aplicaciones directas son limitadas por su alta cristalinidad y su insolubilidad en la mayoría de los solventes, lo que la hace un material difícil de procesar.

Para superar estas limitaciones, la quitina se somete a un proceso de desacetilación alcalina, generalmente con una solución concentrada de hidróxido de sodio (NaOH) a alta temperatura. Este proceso químico remueve los grupos acetilo ($-\text{NHCOCH}_3$) de la cadena de quitina, exponiendo grupos amino primarios ($-\text{NH}_2$) libres, que son los responsables de las propiedades únicas del quitosano (Younes & Rinaudo, 2015). El grado de desacetilación (DD), es decir, el porcentaje de grupos amino libres es el parámetro más importante que define al quitosano. Un polímero con un DD superior al 50% generalmente se considera quitosano, y este valor influye directamente en su solubilidad, reactividad y capacidad de adsorción (Kumirska, et al., 2010).

Gracias a estos grupos amino, el quitosano adquiere propiedades fisicoquímicas excepcionales, como la solubilidad en soluciones ácidas diluidas, alta biocompatibilidad, biodegradabilidad y notables capacidades antimicrobianas y quelantes de metales (Rinaudo,

2006). Estas cualidades lo posicionan como un material de alto valor y ambientalmente amigable, con un enorme potencial para la descontaminación de contaminantes emergentes en aguas residuales.

1.7.1 Aspectos Químicos del Quitosano Fúngico

El quitosano se puede obtener de diversas fuentes, siendo la fúngica una alternativa sostenible a la de los crustáceos. En los hongos, la quitina no se encuentra de forma aislada, sino que forma un complejo estructural en la pared celular. Esta pared se compone de varias capas, donde la quitina está íntimamente unida a redes de β -glucanos (Dhillon, et al., 2012).

Este entrelazamiento natural es un factor crucial durante la extracción, ya que el proceso de desacetilación debe ser lo suficientemente efectivo para romper este complejo y exponer los grupos funcionales del quitosano, lo que a su vez afecta el rendimiento y las propiedades finales del biopolímero. La forma isomérica de la quitina que predomina en hongos como *Agaricus bisporus* es la α -quitina, la cual es la más estable y cristalina.

Una de las ventajas clave del quitosano fúngico es que el proceso de extracción no requiere la etapa de desmineralización (eliminación de carbonato de calcio) que es indispensable para las fuentes de crustáceos, simplificando el proceso y reduciendo el uso de reactivos químicos (Younes & Rinaudo, 2015). Esto, junto con la posibilidad de producirlo a partir de subproductos de la industria alimentaria, valida al quitosano fúngico como un material de gran interés para aplicaciones en economía circular.

1.7.2 . FTIR espectros de quitina y quitosano

FTIR es un método conveniente para la comparación rápida de las propiedades de la quitina (Di Mario et al., 2008). Se informaron bandas de absorción en las regiones 890, 1150 y 1370 para el complejo quitina-glucano extraído de alguna variadas hongos. (H Kim et al., 2021). La presencia de B-glucanos debido al enlace B-1,3 que indica rastros de glucano en una muestra de quitina (Da Silva et al., 2008). La presencia de un pico de 1540cm^{-1} , en una muestra de quitina, sugirió la presencia de proteína residual debido a un proceso incompleto de desproteínización. Se informó que esta banda estaba ausente en la quitina extraída de *A. bisporus* (Huragami et al., 1994). Además, informaron la ausencia de absorbancia en la región $1700\text{-}1740\text{cm}^{-1}$, Las bandas en esta región apuntan a la presencia de grupos de ésteres. Su ausencia es una confirmación que la quitina no contiene grasa. La banda de 3100cm^{-1} es una característica distintiva del quitosano de fuentes fúngicas y marinas.

2 CAPITULO 2: METODOLOGÍA

2.1 Materiales y métodos

2.1.1 Materiales

Para la extracción se utilizó como materia prima el hongo *A. bisporus* champiñón común adquirido en Supermercado. Todos los reactivos y pruebas fueron elaborados utilizando agua mili-q ultrapura tipo 1, los reactivos fueron, NaOH (sigma).

Como estándares en la determinación de paracetamol se utilizaron acetaminofén grado analítico (sigma), como estándar de quitosano se utilizó chitosan (Usbiological) con un DDA certificado de 91.5%.

2.1.2 Técnica de extracción

La extracción de nanofibras de quitosano fúngico se realizaron en base al protocolo establecido por Nawawi Lee et al.,2022. Los hongos *A. Bisporus* fueron remojados y lavados en agua para eliminar la suciedad y otras impurezas y mezclados (Mbl20-Mademsa). Se preparó una solución al 10% p/v en agua y se calentó a 85°C durante 30 minutos, se enfrió y se filtró en papel de filtro (Whatman 1), el sólido filtrado se re suspende en suspensión acuosa de NaOH 1M a 65°C durante 3 horas. La suspensión se enfrió y se neutralizó a pH 7 mediante centrifugación repetida y lavado con agua destilada, produciendo el extracto de quitosano. Se vierte de manera homogénea el extracto en placa Petri y se deja secar a 25°C durante 96 horas.

2.2 Técnicas de caracterización

2.2.1 Espectroscopia Infrarroja

El registro de los espectros vibracionales de los extractos una vez secados según protocolo, fue realizado en un espectrofotómetro FT-IR Shimadzu modelo IRSpirit-X. Medidas en un rango entre 4000 y 500 cm^{-1} .

2.2.2 Determinación del grado de desacetilación por espectroscopía FTIR

El grado de desacetilación (DDA) del quitosano es un parámetro crítico que influye en sus propiedades fisicoquímicas, como la solubilidad, la reactividad y la capacidad de adsorción de contaminantes. La técnica más utilizada para su determinación indirecta es la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), debido a su rapidez, bajo costo y simplicidad frente a métodos más sofisticados como la resonancia magnética nuclear (RMN).

El fundamento de este enfoque radica en la cuantificación de bandas características asociadas a los grupos funcionales presentes en el quitosano y el quitosano. En particular, la banda de la amida I ($\sim 1655 \text{ cm}^{-1}$), relacionada con el estiramiento C=O de los grupos acetilo, se compara con bandas de referencia que permanecen relativamente constantes: la vibración de estiramiento O–H/N–H ($\sim 3450 \text{ cm}^{-1}$) o la vibración de flexión de CH₂ ($\sim 1420 \text{ cm}^{-1}$).

Diversos autores han propuesto índices espectroscópicos para estimar el DA/DDA a partir de la relación de intensidades de estas bandas. Entre los más utilizados destacan:

- **Índice A1655/A3450 (Amida I / OH–NH):** recomendado por Domszy y Roberts (1985), sensible al contenido de grupos aceto en relación con los grupos hidroxilo y amino.
- **Índice A1655/A1420 (Amida I / CH₂ bending):** utilizado para minimizar la influencia de la humedad y el ancho de banda en la zona de 3400 cm⁻¹ (Brugnerotto et al., 2001).

De acuerdo con Brugnerotto et al. (2001), la estimación del DA mediante FTIR requiere curvas de calibración basadas en muestras con DA conocido, obtenidas por métodos de referencia como la RMN. En ausencia de estándares, algunos autores han propuesto factores empíricos para aproximar el DA a partir de los índices de absorbancia (Kasaai, 2009). No obstante, es importante destacar que el FTIR debe considerarse principalmente como un método comparativo o de control de calidad, mientras que técnicas como la titulación potenciométrica o la RMN ofrecen mayor exactitud (Jayakumar et al., 2010).

En este estudio, se empleó FTIR como herramienta de caracterización preliminar, considerando las relaciones A1655/A3450 y A1655/A1420 para estimar el grado de desacetilación del quitosano extraído y correlacionar dicho valor con su capacidad de adsorción de contaminantes emergentes.

2.2.3 Procesamiento de datos espectroscópicos

El análisis de los espectros FTIR obtenidos se realizó utilizando el software Python (versión 3.10) mediante librerías específicas para el tratamiento de datos científicos (*NumPy*, *Pandas*, *Matplotlib*, *SciPy*). Se implementaron rutinas para: (i) la conversión de los datos originales de transmitancia (%T) a absorbancia ($A = -\log_{10}(T/100)$), (ii) la corrección de línea base mediante algoritmos de ajuste polinómico y de suavizado (Savitzky–Golay), y (iii) la detección automática de picos en las regiones de interés (1625 cm⁻¹, 3480 cm⁻¹ y 1390 cm⁻¹).

2.3 Diseño experimental factorial

El estudio se estructuró mediante un Diseño Experimental Factorial Completo 2³ con puntos centrales. Este diseño fue seleccionado para evaluar de manera eficiente la influencia individual y las interacciones de tres variables principales, con el objetivo de maximizar el porcentaje de remoción de paracetamol (%R).

2.3.1 Variable Experimentales

Se definieron tres factores independientes con dos niveles codificados (un nivel bajo, -1, y un nivel alto, +1) para cada uno, además de la inclusión de tres puntos centrales para estimar el error experimental y la curvatura del modelo.

Tabla 2.1. Niveles de Matriz del diseño de experimento.

Factor	Símbolo	Nivel Bajo (-1)	Nivel intermedio (0)	Nivel Alto (+1)	Unidad
Tiempo de Contacto	t	15	60	120	minutos
Concentración Inicial de Paracetamol	Co	10	30	50	mg/L
Cantidad de Quitosano (Dosis)	Q	0.1	0.55	1	g/L

La variable de respuesta monitoreada en todos los experimentos fue el Porcentaje de Remoción (%R) del paracetamol.

2.4 Procedimiento experimental Batch

Las pruebas de adsorción se llevaron a cabo bajo el método *batch* (por lotes) a temperatura ambiente ($\approx 25^{\circ}\text{C}$). En cada corrida, se puso en contacto la cantidad definida de quitosano con un volumen fijo de solución de paracetamol, bajo agitación constante a 200 rpm. Al finalizar el tiempo de contacto de cada corrida, la solución se filtró con filtro de 0,22 μm y la concentración final de paracetamol en el equilibrio (C_e) se midió por HPLC con detector DAD a 243nm.

El porcentaje de remoción (%R) se calculó mediante la Ecuación 1:

$$\%R = \frac{C_0 - C_e}{C_0} \times 100 \text{ Ecuación 2.1}$$

2.5 Análisis estadístico y de Modelado

Todos los cálculos estadísticos, análisis de regresión, modelado de isothermas y la generación de gráficos se realizaron mediante el lenguaje de programación Python (versión 3.13), utilizando las siguientes librerías: pandas para la manipulación de datos, numpy para cálculos numéricos y scipy.stats para las regresiones y el Análisis de Varianza. Los *scripts* completos utilizados se encuentran en el **Anexo C: Scripts de Análisis**.

2.5.1 Análisis descriptivo y de efectos

El análisis inicial de los datos se centró en la evaluación descriptiva de los efectos de las variables sobre la respuesta:

- **Diagrama de Pareto:** Se utilizó para identificar y cuantificar la magnitud de la influencia de cada factor y sus interacciones.

- **Análisis de Efectos Principales:** Se graficaron los efectos de las variables para determinar si el cambio de un nivel bajo a un nivel alto tenía un efecto positivo o negativo en el %R.
- **Análisis de Superficie de Respuesta (Superficie y Gráficos de Contorno):** Se emplearon para visualizar gráficamente las interacciones entre los factores y determinar las regiones experimentales que maximizan la remoción.

2.5.2 Análisis de Varianza (ANOVA)

Se aplicó un Análisis de Varianza de un Solo Factor (ANOVA *One-Way*) a los datos experimentales. Este análisis se realizó para cada variable de forma independiente con el objetivo de probar la significancia estadística de la variación en los niveles de cada factor. El nivel de significación se estableció en $\alpha=0.05$ ($p<0.05$).

2.5.3 Modelado de Isotherma de Adsorción

Los datos obtenidos en las corridas de mayor tiempo de contacto (120 min), considerados como condiciones cercanas al equilibrio, se emplearon para el análisis de las isothermas de adsorción:

- **Modelos Evaluados:** Se evaluaron los modelos de Langmuir (adsorción en monocapa en superficie homogénea) y Freundlich (adsorción en multicapa en superficie heterogénea) mediante sus formas linealizadas. Para obtener una caracterización más precisa, se procedió a ajustar los datos a un modelo de tres parámetros como el de Sips, el cual es un híbrido que combina las características de Langmuir (capacidad de saturación finita) y Freundlich (heterogeneidad de la superficie).
- **Criterio de Ajuste:** El ajuste de los modelos se determinó mediante el Coeficiente de Determinación (R^2), seleccionando el modelo con el R^2 más alto para caracterizar el mecanismo de adsorción.

2.5.4 Determinación de la Capacidad de Adsorción para Comparación

Debido a que el modelo de Langmuir se descartó, la capacidad de adsorción se cuantificó utilizando el valor experimental:

- **Capacidad de Adsorción en el Equilibrio (q_e):** Se calculó la cantidad de paracetamol adsorbida por unidad de masa de quitosano (mg/g) para todas las corridas de equilibrio mediante la Ecuación 2:

$$q_e = \frac{(C_o - C_e) \cdot V}{m} \text{ Ecuación 2.2}$$

Donde V es el volumen de la solución (L) y m es la masa de quitosano utilizada (g).

- **Comparación Final:** El valor de la capacidad de adsorción experimental máxima (q_e máxima) (mg/g) se utilizó como métrica para comparar la eficiencia del quitosano fúngico con los valores de capacidad máxima (q_{max}) reportados en la literatura para otros adsorbentes.

3 CAPITULO 3: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Extracto quitosano

Para 100g de hongo húmedo, se obtuvieron 12,4g de extracto de quitosano. El cual fue almacenado en un frasco ámbar hasta su uso.

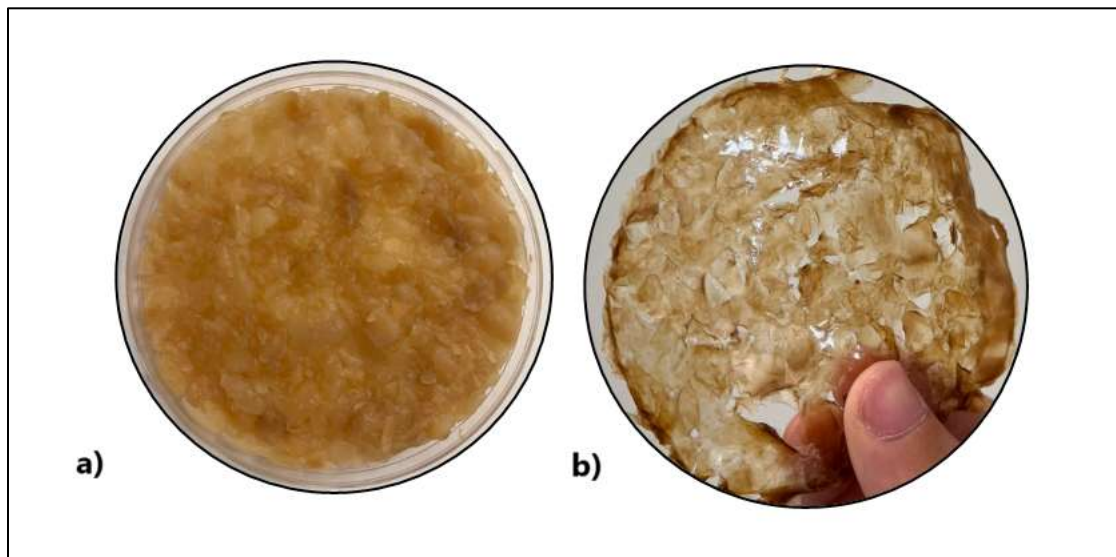


Figura 3.1. a) Extracto de quitosano húmedo b) Extracto de quitosano seco.

3.2 Caracterización material Bioadsorbente

3.2.1 Identidad Química y Cuantificación del Grado de Desacetilación (DDA)

El material bioadsorbente, obtenido mediante el proceso de desproteinización, desmineralización y desacetilación del hongo *Agaricus bisporus*, fue analizado mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR) para confirmar su identidad química y determinar su Grado de Desacetilación (DDA).

El análisis cuantitativo por FTIR reveló que el producto final es Quitosano, y no Quitina, debido a un Grado de Desacetilación (DDA) superior al 50%.

Para obtener una cuantificación precisa del DDA, se utilizó el método de la relación de absorbancias de la línea base ($IA1=A1655/A3450$) con una calibración interna mediante un quitosano comercial de referencia.

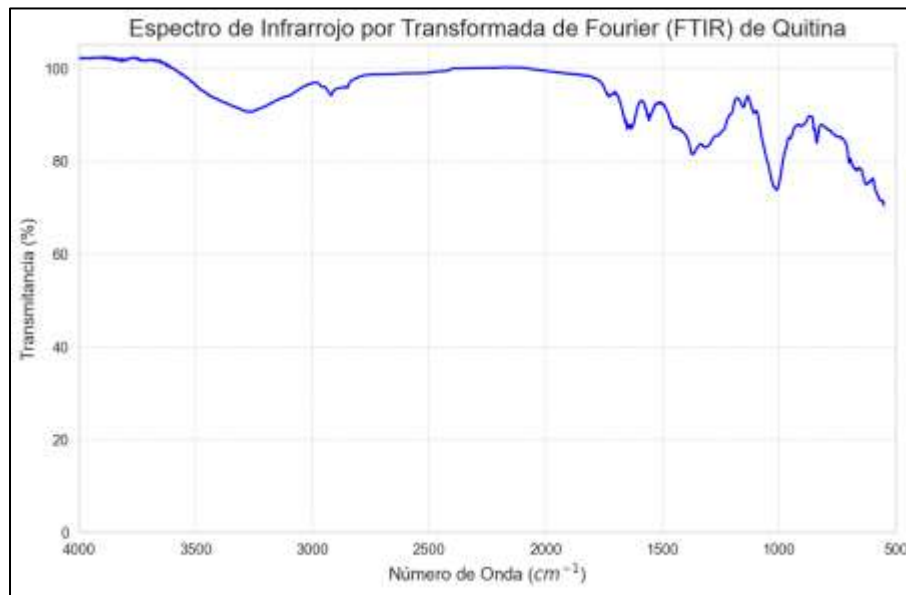


Figura 3.2. Espectro FTIR del quitosano derivado de *A. Bisporus*.

3.2.1.1 Cálculo de la Constante de Calibración (K_{real}):

El quitosano comercial, con un DDA real certificado del 91.5%, arrojó un índice de absorbancia corregido de $I_{A1}=0.48013$ en nuestro sistema analítico (utilizando la fórmula estándar con $K=1.33$ arrojaba un DDA de 63.9%).

Al despejar la constante K de la fórmula $DDA=100-[I_{A1} \times K/100]$, se obtuvo la constante de calibración real para el sistema:

$$k_{REAL} = \frac{I_{A1} \times 100}{100 - DDA_{real}} = \frac{0,48013 \times 100}{100 - 91,5} = \frac{48,013}{8,5} = 5,6486$$

3.2.1.2 Cuantificación del Quitosano Fúngico:

La constante $K_{real}=5.6486$ se aplicó al índice de absorbancia corregida de la muestra fúngica, que resultó ser $I_{A1}=0.403$.

$$I_{A1} = \frac{A_{1655}}{A_{3450}} \text{ Ecuación 3.1}$$

$$DDA = 100 - \left[I_{A1} \times \frac{100}{k_{Real}} \right] \text{ Ecuación 3.2}$$

$$DDA = 100 - \left[0,403 \times \frac{100}{5,6486} \right]$$

$$DDA = 92,82\%$$

$$DA = 100 - DDA \text{ Ecuación 3.3}$$

$$DA = 7,1\%$$

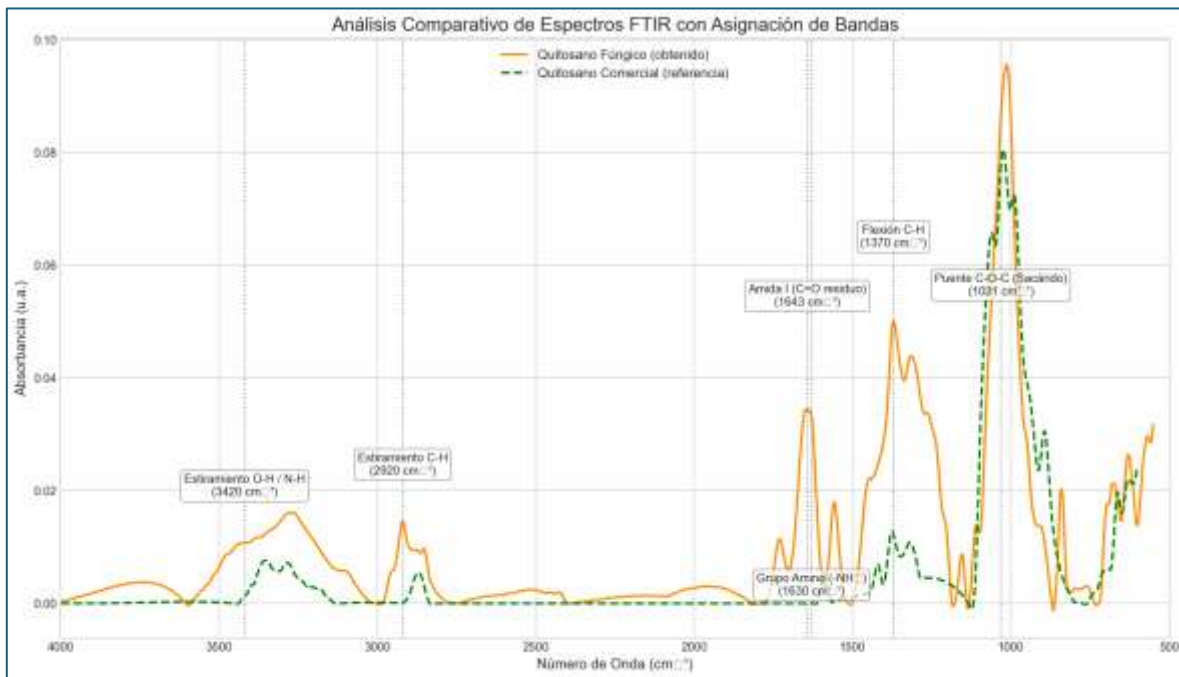


Figura 3.3. Espectro FTIR: quitosano derivado v/s quitosano comercial.

El Grado de Desacetilación del material extraído es del 92.82%. Este alto valor confirma que el producto obtenido es un Quitosano de Alto Grado de Desacetilación. El rendimiento de 92.82% es destacable y comparable a quitosanos comerciales de alta pureza.

Tabla 3.1. Comparación de DA y DDA de diferentes quitinas y quitosanos.

Material / Fuente	Método de extracción / Tratamiento	DA (%)	DDA (%)	Referencia
Quitina de crustáceos (comercial)	Desmineralización + desproteínización (HCl/NaOH)	70–90	10–30	Brugnerotto et al., 2001
Quitina de hongos <i>Mucor rouxii</i>	Cultivo fúngico, extracción enzimática	75–85	15–25	Synowiecki & Al-Khateeb, 2003
Quitina de hongos <i>Agaricus bisporus</i>	Procesos alcalinos suaves	65–80	20–35	Yen & Mau, 2007

Material / Fuente	Método de extracción / Tratamiento	DA (%)	DDA (%)	Referencia
Quitosano comercial	Desacetilación alcalina intensiva (NaOH 40–50 %)	10–40	60–90	Kasaai, 2009
Quitosano grado biomédico	Tratamientos múltiples de desacetilación	<10	>90	Jayakumar et al., 2010
Quitosano obtenido en este estudio	Procesos químicos básicos (desproteínización/desmineralización)	≈8	≈92	Este trabajo

Este hallazgo es fundamental para la interpretación de los resultados de adsorción. Un DDA del 92.9% significa que el material posee una alta densidad de grupos amino primarios ($-\text{NH}_2$). Estos grupos, al protonarse ($-\text{NH}_3^+$) en condiciones ácidas o neutras, actúan como los principales sitios activos cargados positivamente, potenciando la interacción electrostática con contaminantes orgánicos como el paracetamol.

3.3 Influencia de Variables Operacionales

El estudio se realizó bajo un diseño experimental factorial 2^3 , permitiendo evaluar la influencia del tiempo de contacto (t), la concentración inicial (C_0) y la cantidad de quitosano (Q) sobre el porcentaje de remoción de paracetamol.

3.3.1 Superficie de respuesta

Respecto al análisis de la superficie de respuesta, se observó una clara tendencia donde la remoción del contaminante aumenta al incrementar tanto el tiempo de contacto como la concentración inicial del contaminante. Este comportamiento se evidenció de manera más pronunciada en las condiciones con una carga de quitosano a un nivel fijo, lo que sugiere que la remoción está directamente influenciada por la combinación de estas variables. Los contornos del mapa ilustran cómo las condiciones de alto tiempo de contacto y alta concentración inicial se correlacionan con los mayores porcentajes de remoción.

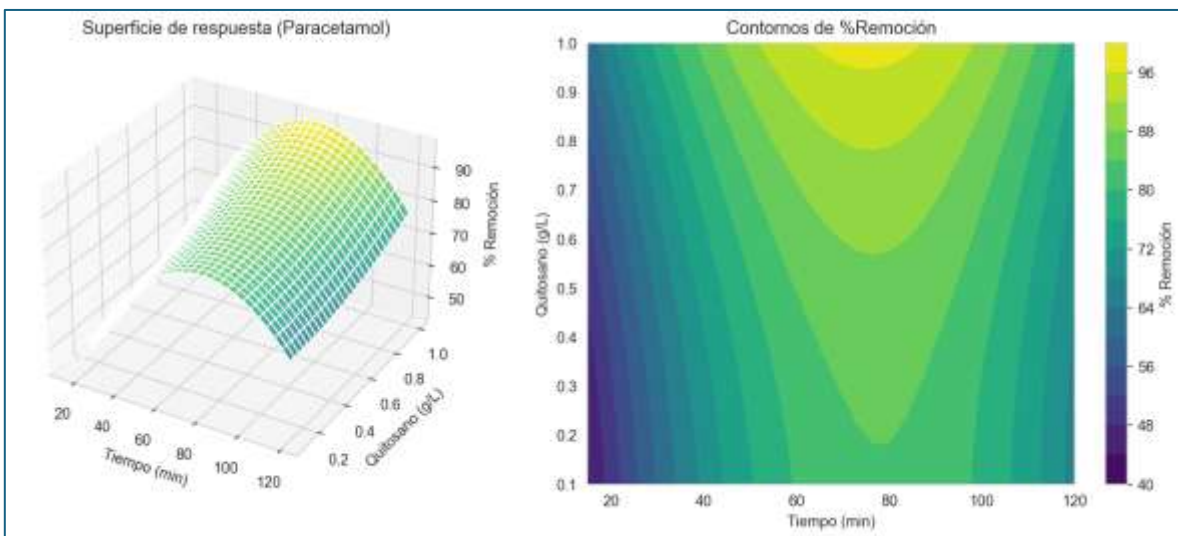


Figura 3.4. a) Grafico de superficie de respuesta (Paracetamol) b) Grafico de mapa de contorno %Remoción.

Se observa que a tiempos intermedios-altos (60–100 min) y concentraciones iniciales medias (20–40 mg/L), la eficiencia de remoción alcanza valores máximos. A tiempos muy bajos o concentraciones iniciales muy bajas, la remoción disminuye porque no se aprovecha la capacidad de adsorción del quitosano.

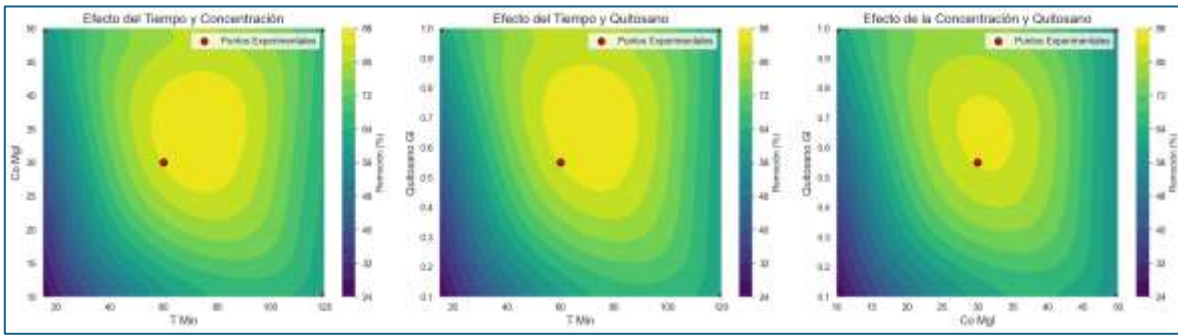


Figura 3.5. Mapas de contorno, comparación del efecto de las distintas variables del proceso de adsorción.

3.3.2 Gráficos de dispersión y contorno

Remoción vs. Tiempo: El gráfico muestra una clara correlación positiva entre el tiempo de contacto y el porcentaje de remoción. A medida que el tiempo transcurre de 15 a 120 minutos, la remoción del paracetamol aumenta notablemente. Este es un comportamiento típico en procesos de adsorción, donde se necesita tiempo para que el contaminante difunda desde la solución y se adhiera a la superficie del quitosano.

Remoción vs. Concentración Inicial: Este gráfico también muestra una correlación positiva entre la concentración inicial del contaminante y la remoción. A medida que la concentración aumenta de 10 a 50 mg/L, el porcentaje de remoción se incrementa. Esto puede deberse a que una mayor concentración inicial proporciona una fuerza impulsora más fuerte, lo que acelera el proceso de difusión de las moléculas del contaminante hacia la superficie del adsorbente.

Remoción vs. Cantidad de Quitosano: Similar a los anteriores, este gráfico muestra una correlación positiva entre la cantidad de quitosano y la remoción. A medida que la cantidad de quitosano aumenta de 0.1 a 1.0 g/L, el porcentaje de remoción aumenta. Esto es esperado, ya que una mayor cantidad de adsorbente proporciona más sitios activos para la adsorción del paracetamol, lo que facilita su remoción de la solución.

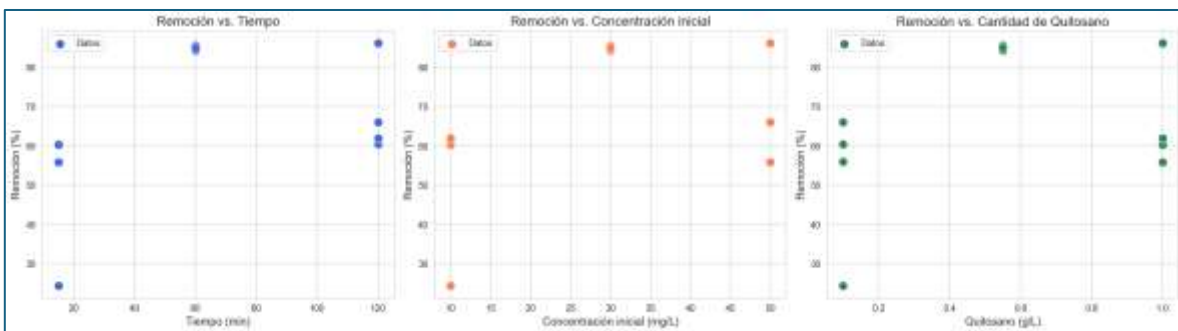


Figura 3.6. Gráficos de dispersión

3.3.3 Diagrama de Pareto

El Diagrama de Pareto (Figura 3-7.) muestra la importancia relativa de los efectos principales e interacciones en la remoción de paracetamol por el quitosano fúngico.

Factores Predominantes

La línea vertical roja en el diagrama representa el umbral de significancia. Las barras que cruzan esta línea son consideradas potencialmente importantes.

Tiempo de Contacto (A): Es el factor con el mayor efecto en la remoción. Esto es un hallazgo esperado, ya que la adsorción es un proceso cinético: una mayor duración del contacto permite que las moléculas de paracetamol difundan hacia la superficie del quitosano y ocupen los sitios activos hasta alcanzar el equilibrio.

Cantidad de Quitosano (C): Es el segundo factor más influyente. Un aumento en la dosis de quitosano incrementa la disponibilidad de sitios activos, mejorando directamente la eficiencia de la remoción.

Interacción Tiempo-Quitosano (AC): Esta interacción es la tercera más importante. El efecto del quitosano y el tiempo no es puramente aditivo; se potencian mutuamente. La máxima remoción ocurre cuando se combina un alto número de sitios activos (C+) con suficiente tiempo para utilizarlos (A+).

Factores de Menor Influencia

Concentración Inicial (B): Este factor tiene una influencia menor en el *porcentaje* de remoción. Esto es típico en las isothermas: aumentar la concentración C_0 puede aumentar la *cantidad* total adsorbida (q_e), pero el *porcentaje* de remoción disminuye o se mantiene estable.

- **Otras Interacciones (AB, BC, ABC):** Las interacciones que involucran la concentración inicial (B) tienen una magnitud de efecto marginal o insignificante.

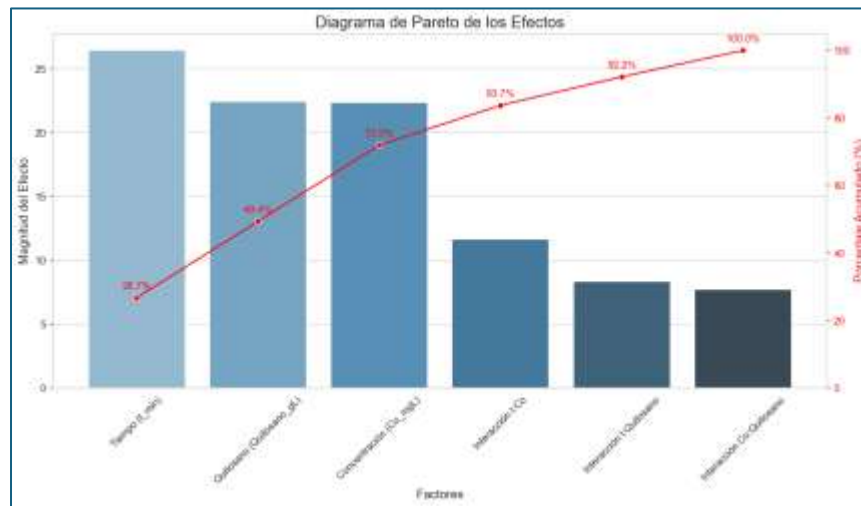


Figura 3.7. Diagrama de Pareto de los factores predominantes.

3.3.4 Anova de un solo factor

Se realiza el análisis de ANOVA de un solo factor, tomando los factores tiempo, concentración de quitosano y concentración de paracetamol analizando cada uno de estos por separado, obteniendo los siguientes resultados.

Tabla 3.2. Resumen resultados ANOVA

Factor	Hipótesis Nula (H ₀)	Estadístico <i>F</i>	Valor <i>p</i>	Significación (<i>p</i> <0.05)	Conclusión
Tiempo (t_{min})	$\mu_{15}=\mu_{120}$	3.6186	0.1058	NO	No es significativo. No hay evidencia de que las medias de remoción sean diferentes al variar el tiempo
Concentración Inicial (mg/L)	$\mu_{10}=\mu_{50}$	1.5182	0.2640	NO	No es significativo. No hay evidencia de que las medias de remoción sean diferentes al variar la concentración.

Cantidad de Quitosano (g/L)	$\mu_{0.1}=\mu_{1.0}$	1.5451	0.2602	NO	No es significativo. No hay evidencia de que las medias de remoción sean diferentes al variar la cantidad de quitosano.
------------------------------------	-----------------------	--------	--------	----	---

Es importante destacar que el ANOVA de un solo factor no arrojó una diferencia estadísticamente significativa para las variables estudiadas ($p > 0.05$), se debe interpretar este resultado en su contexto, debido a que el ANOVA de un factor es una prueba simple que no considera las interacciones entre variables, y puede tener una baja potencia estadística con un número limitado de corridas en un diseño factorial 2^3 , como el realizado en el presente trabajo. Adicionalmente, la heterogeneidad del adsorbente es otro factor para considerar, al ser un biopolímero este presenta una mayor variabilidad estructural, lo que puede incrementar la varianza experimental y afectar a la replicabilidad. Contribuyendo a un ANOVA no significativo.

Es por esta razón, que en este caso el diagrama de Pareto resulta ser una herramienta más adecuada, ya que evalúa la magnitud de cada factor y sus interacciones. Por lo tanto, si bien no se alcanzó una significancia estadística en esta prueba, la evidencia del análisis de efectos sugiere fuertemente que las variables Tiempo de Contacto y Dosis de Quitosano son los factores claves para la optimización del proceso.

3.4 Modelado y Caracterización del proceso

El modelado y caracterización del proceso se realiza mediante isoterma, la cual permite explicar el mecanismo o naturaleza de la adsorción. Por lo tanto, se estima cuan bien funciona y el cómo funciona el quitosano, relacionando los resultados experimentales con los supuestos físicos y químico de los modelos teóricos de Langmuir y Freundlich.

3.4.1 Análisis isoterma de Freundlich:

Se realizó un análisis de isoterma de adsorción para caracterizar el equilibrio del proceso. El modelo de Freundlich mostró un ajuste razonable a los datos experimentales ($R^2=0.6861$), con parámetros de $K_f=1.2810$ L/mg y $n=0.5164$. El valor de n menor a 1 sugiere que el proceso de adsorción es desfavorable o no cooperativo, en donde la afinidad del adsorbente por el contaminante disminuye a medida que los sitios más energéticos y accesibles se van ocupando. Las interacciones repulsivas (estéricas y electroestáticas) entre las moléculas de Paracetamol ya adsorbidas son la causa física de esta disminución de la afinidad.

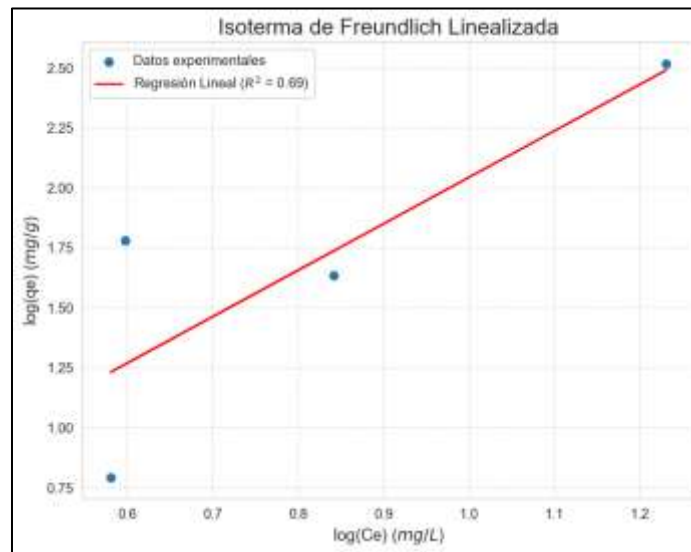


Figura 3.8. Gráfico Isoterma de Freundlich.

3.4.2 Análisis isoterma de Langmuir:

Se realizó un análisis de isoterma de adsorción para caracterizar el equilibrio del proceso. El modelo de Langmuir mostró que el modelo no se ajusta a los datos experimentales ($R^2=0.2516$), con parámetros de $K_L=-0,0545$ L/mg y $q_{max}=-46.6239$. Esta falla valida que el proceso no ocurre en monocapa y superficie homogénea.

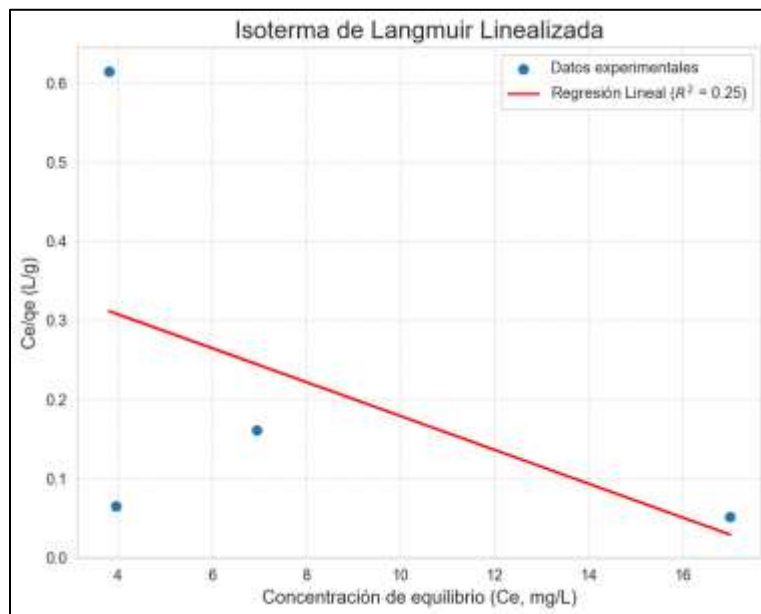


Figura 3.9. Gráfico Isoterma de Langmuir.

Tabla 3.3. Comparación de resultados isotermas.

Modelo de Isoterma	Parámetros Calculados	Coefficiente de Determinación (R ²)	Significado Físico	Conclusión
Langmuir	$q_{\max} = -46.62 \text{ mg/g}$	0.2516	No Válido. El valor negativo de q_{\max} y el R ² bajo indican que el modelo no aplica.	Se descarta.
Freundlich	$K_f = 1.28 \text{ L/mg};$ $n = 0.52$	0.6861	Aceptable. Describe un proceso en superficie heterogénea y multicapa.	Modelo Ajuste moderado.

Tras la evaluación inicial con los modelos de dos parámetros, se observó que el modelo de Langmuir presenta un ajuste deficiente a los datos experimentales ($R^2 = 0.53$), mientras que el modelo de Freundlich ofrece un ajuste solo moderado ($R^2 = 0.69$). Estos resultados sugieren que el mecanismo de adsorción es más complejo de lo que estos modelos pueden describir, apuntando a una superficie de naturaleza heterogénea.

3.4.3 Caracterización del Mecanismo de Adsorción mediante el Modelo de Sips.

Con el fin de asegurar un resultado físicamente realista y evitar la extrapolación matemática más allá del rango experimental, el parámetro de capacidad máxima de adsorción (q_{\max}) se fijó en el valor máximo obtenido experimentalmente, que fue de 330.00 mg/g.

El modelo de Sips mostró un excelente ajuste a los datos experimentales, con un coeficiente de determinación ($R^2 = 0.91$) notablemente superior al de los modelos de Langmuir y Freundlich. Este hallazgo es de gran relevancia por dos motivos principales.

El exponente n_s de 3.5078, al ser significativamente diferente de 1, confirma de manera robusta la naturaleza heterogénea de la superficie del quitosano. Esto es coherente con la estructura compleja de un biopolímero y explica por qué el modelo de Langmuir (que asume una superficie homogénea) falló en describir el sistema.

El alto R^2 valida al modelo de Sips como la herramienta más adecuada para describir y predecir el comportamiento de adsorción de paracetamol sobre el quitosano fúngico. Los parámetros obtenidos, ahora físicamente coherentes, permiten una caracterización completa del sistema, demostrando que la adsorción ocurre en una superficie con sitios energéticamente diversos.

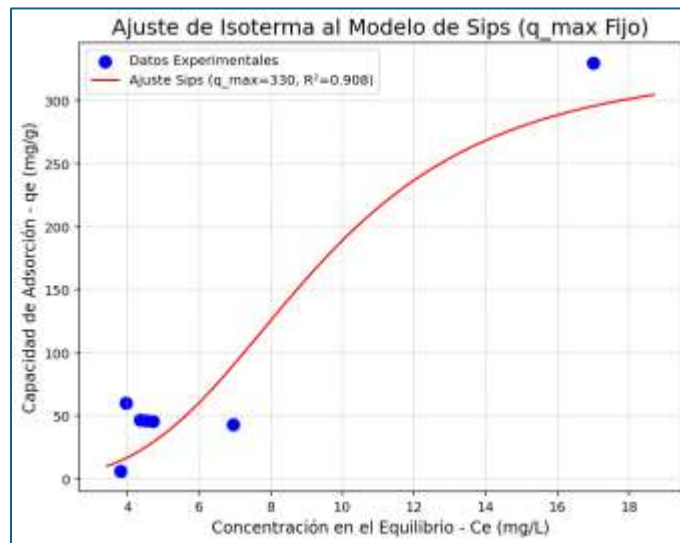


Figura 3.10. Gráfico Ajuste de Isoterma Al Modelo Sips

3.5 Determinación de la Capacidad de Adsorción experimental

Dado que el modelo de Langmuir no se ajustó a los datos, la comparación con otros adsorbentes se realizó utilizando la capacidad de adsorción experimental máxima (q_e), que representa la cantidad real de contaminante removido por gramo de adsorbente en las condiciones más eficientes del experimento. Este valor, expresado en mg/g, permite una comparación directa y físicamente significativa con los valores de capacidad máxima (q_{max}) reportados en la literatura.

Se realiza el cálculo de la capacidad máxima de adsorción con la ecuación entregada en la sección anterior, la cual arroja una capacidad de 330 mg/g de adsorción, para el quitosano obtenido a partir del hongo *agaricus bisporus*.

3.5.1 Comparación frente a otros bioadsorbentes

La tabla 3.4 demuestra que la capacidad de adsorción experimental del quitosano (330.00 mg/g) es un resultado altamente competitivo.

Tabla 3.4. Comparación de capacidad de adsorción de quitosano fúngico frente a otros estudios.

Adsorbente	Capacidad de Adsorción (mg/g)	Naturaleza del Valor	Referencia
Quitosano <i>Agaricus</i> <i>Bisporus</i>	330	Experimental (q_e máxima)	Presente estudio.
Carbón Activado (Cáscara de Nuez)	332.2	Teórica (q_{max})	Valenzuela, et al., (2020).
Carbón Activado (Vainas de <i>Erythrina</i>)	50.4	Teórica (q_{max})	Georgin et al. (2022)
Quitosano- Alginato-Hidrogel	67.58	Teórica (q_{max})	Hastuti Budi et al., (2025)

Esta capacidad es significativamente mayor que la de otros bioadsorbentes reportados y es comparable a la del carbón activado de cáscara de nuez (332.20 mg/g). Esto valida el potencial del quitosano fúngico como un bioadsorbente sostenible y de alto rendimiento para el tratamiento de aguas.

CONCLUSION

El Quitosano Fúngico (*Agaricus bisporus*) como Solución Sostenible de Alto Rendimiento

La presente investigación abordó el desafío de los contaminantes emergentes y confirma el potencial del Quitosano fúngico, obtenido específicamente del hongo *Agaricus bisporus* (champiñón común), como un bioadsorbente sostenible y altamente eficiente para la remoción del paracetamol.

Eficiencia Competitiva y Valor Ambiental: El resultado más relevante es la obtención de una capacidad de adsorción experimental (q_e) de 330.00 mg/g. Este valor demuestra ser directamente competitivo con materiales comerciales de alto costo como el carbón activado (332.20 mg/g), validando al quitosano fúngico como una alternativa tecnología viable y de alto rendimiento.

Mecanismo de Adsorción: La caracterización del material validó la obtención de un quitosano con un alto grado de desacetilación. El análisis del mecanismo mediante el ajuste a un modelo de Sips (con q_{max} fijo en 330 mg/g) arrojó un excelente coeficiente de determinación ($R^2 = 0.91$). Este resultado es superior a los modelos de dos parámetros y confirma de manera robusta que el proceso ocurre mediante adsorción en una superficie químicamente heterogénea, un comportamiento coherente para un biopolímero.

Control Operacional Práctico: El análisis descriptivo (Diagrama de Pareto) destacó que la magnitud del efecto del Tiempo de Contacto y la Dosis de Quitosano son los factores más influyentes. Este hallazgo proporciona la guía necesaria para el escalamiento del proceso, justificando la selección de niveles altos para maximizar el rendimiento.

Limitaciones: Es crucial reconocer las limitaciones del estudio. La baja potencia estadística del diseño (evidenciada por un ANOVA no significativo) sugiere la necesidad de aumentar el número de réplicas en futuros experimentos. Asimismo, para una caracterización completa del adsorbente, se recomienda realizar estudios de equilibrio a concentraciones de paracetamol más elevadas para determinar experimentalmente la capacidad máxima de saturación (q_{max}). La naturaleza biológica del quitosano fúngico introdujo una mayor variabilidad intrínseca en el proceso, que no pudo ser capturada completamente por el diseño experimental. Es esencial estandarizar rigurosamente los pasos de pretratamiento y caracterización para reducir esta dispersión en futuros estudios.

Finalmente, se proyecta que las futuras investigaciones se centren en la regeneración del bioadsorbente, escalamiento a nivel dinámico y piloto, optimización estructural y funcional, además de pruebas en matrices reales y multicomponentes. Pasos indispensables para acelerar su implementación industrial como la solución sostenible y eficiente que requiere el tratamiento de aguas.

BIBLIOGRAFIA

- (1) Xingyu Li., et al., 2023. *Comprehensive review of emerging contaminants: Detection technologic, environmental impact, and management strategies.*
- (2) Fang Wang., et al., 2024. *Emerging contaminants: A one Health perspective.*
- (3) Bing Wang., et al., 2024. *Promoting Environmental Risk Assessment and Control of Emerging.*
- (4) Yadav., et al., 2021. *Oxidative Stress, Prooxidants, and Antioxidants: The Interplay*
- (5) Khan., et al., 2022.
- (6) Brugnerotto, J., Lizardi, J., Goycoolea, F. M., Argüelles-Monal, W., Desbrières, J., & Rinaudo, M. (2001). *An infrared investigation in relation with chitin and chitosan characterization.* *Polymer*, 42(8), 3569–3580.
- (7) Synowiecki, J., & Al-Khateeb, N. A. (2003). *Production, properties, and some new applications of chitin and its derivatives.* *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 43(2), 145–171.
- (8) Yen, M. T., & Mau, J. L. (2007). *Selected physical properties of chitin prepared from mushroom mycelia and crab shells.* *Food Science and Technology*, 40(3), 558–563.
- (9) Jayakumar, R., Prabakaran, M., Nair, S. V., & Tamura, H. (2010). *Chitosan preparation and characterization.* *International Journal of Biological Macromolecules*, 48(1), 13–17.
- (10) Domszy, J. G., & Roberts, G. A. F. (1985). Evaluation of infrared spectroscopic techniques for analyzing chitosan. *Macromolecular Chemistry and Physics*, 186(8), 1671–1677. <https://doi.org/10.1002/macp.1985.021860819>
- (11) Kasaai, M. R. (2009). A review of several reported procedures to determine the degree of N-acetylation of chitin and chitosan using infrared spectroscopy. *Carbohydrate Polymers*, 71(4), 497–508. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2007.10.009>
- (12) Valenzuela-Padilla, A.A., Torres-Pérez, J., (2020). Remoción de colorantes azóicos (A5 y R40) con carbón activado de cáscara de nuez. *Ingeniería Investigación y Tecnología*, 21 (03), 1-11.
- (13) Synthesis and Characterization of Chitosan-Alginate Hydrogel Adsorbent for Paracetamol Removal from Wastewater. (2025)
- (14) Ding, R., Liu, S., He, C., & Nie, X. (2020). Paracetamol affects the expression of detoxification- and reproduction-related genes and alters the life traits of *Daphnia magna*. *Ecotoxicology*, 29, 398–406.
- (15) Iannacone, J., & Alvaríño, L. (2015). Evaluación del riesgo acuático de siete productos farmacéuticos sobre *Daphnia magna*. *Revista Peruana de Medicina Experimental y Salud Pública*, 32(1), 164–171. (Nota: Se utiliza la fecha de publicación principal.
- (16) Mathias, P. G., Silva de Siqueira, F. H., Pereira, T. S., & Pires, B. M. (2017). Paracetamol causes endocrine disruption and hepatotoxicity in male fish *Rhamdia quelen* after subchronic exposure. *Environmental Toxicology and Pharmacology*, 53, 111–120.

- (17) Nunes, B., Antunes, S. C., Santos, J., Martins, L., & Castro, B. B. (2014). Toxic potential of paracetamol to freshwater organisms: A headache to environmental regulators? *Ecotoxicology and Environmental Safety*, *107*, 178–185.
- (18) Abdou, E. S., Nagy, K. S. A., & Elsabee, M. Z. (2008). Extraction and characterization of chitin and chitosan from local sources. *Bioresource Technology*, *99*(5), 1359-1367.
- (19) Dhillon, G. S., Kaur, S., Brar, S. K., & Verma, M. (2012). Fungal chitin and chitosan—a review. *Critical Reviews in Biotechnology*, *32*(4), 329-346.
- (20) Kumirska, J., Czerwicka, M., Kaczyński, Z., Bychowska, A., Brzozowski, K., Thöming, J., & Stepnowski, P. (2010). Application of spectroscopic methods for structural analysis of chitin and chitosan. *Marine Drugs*, *8*(5), 1567-1636.
- (21) Rinaudo, M. (2006). Chitin and chitosan: Properties and applications. *Progress in Polymer Science*, *31*(7), 603-632.
- (22) Younes, I., & Rinaudo, M. (2015). Chitin and chitosan preparation from marine sources. Structure, properties and applications. *Marine Drugs*, *13*(3), 1133-1174.
- (23) Bundschuh, M., Filser, J., Lüderwald, S., McKee, M. S., Metreveli, G., Schaumann, G. E., Schulz, R., & Wagner, S. (2018). Nanoparticles in the environment: where do we come from, where do we go to?. *Environmental Sciences Europe*, *30*(1), 6.
- (24) Liu, L., Wang, Y., Guo, X., & Zhai, J. (2022). Application of nanomaterials in the remediation of heavy metal-contaminated soil. *Journal of Nanomaterials*, 2022.
- (25) Mautner, A., Lee, K. Y., Lahtinen, P., V Alemán, J., Bismarck, A., & Tammel, T. (2014). Nanopapers for organic solvent nanofiltration. *Chemical Communications*, *50*(40), 5241-5244.
- (26) Thangavelu, K., & Veeraragavan, G. (2022). A critical review on the removal of heavy metals from wastewater using nanomaterials. *Chemosphere*, *291*, 133036.
- (27) Luo, Y., Guo, W., Ngo, H. H., Nghiem, L. D., Hai, F. I., Zhang, J., Liang, S., & Wang, X. C. (2014). A review on the occurrence of micropollutants in the aquatic environment and their fate and removal during wastewater treatment. *Science of the Total Environment*, *473-474*, 619-641.
- (28) Miklos, D. B., Remy, C., Jekel, M., Linden, K. G., Drewes, J. E., & Hübner, U. (2018). Evaluation of advanced oxidation processes for water and wastewater treatment – A critical review. *Water Research*, *139*, 118-131.
- (29) Patel, M., Kumar, R., Kishor, K., Mlsna, T., Pittman Jr, C. U., & Mohan, D. (2022). Pharmaceuticals of emerging concern in aquatic systems: chemistry, occurrence, effects, and removal methods. *Chemical Reviews*, *119*(6), 3510-3673.
- (30) Rathi, B. S., & Kumar, P. S. (2021). A review on sources, identification and treatment strategies for the removal of emerging contaminants from wastewater. *Journal of Hazardous Materials*, *418*, 126299.
- (31) Wang, J., & Wang, S. (2023). Advanced oxidation processes for degradation of contaminants of emerging concern. In *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering* (pp. 1-25). Elsevier.

ANEXOS

ANEXO A: “Datos crudos y Matriz Experimental”

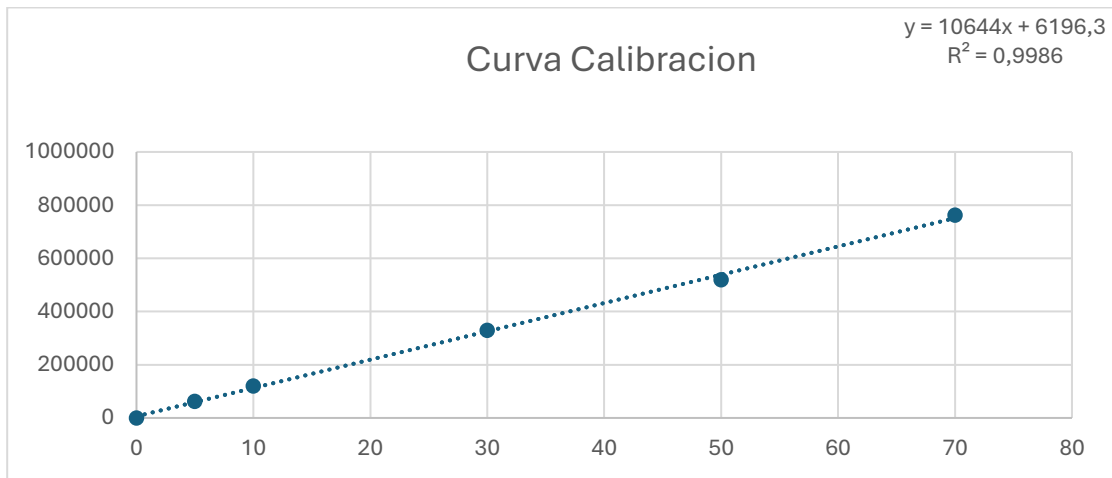
Matriz Factorial:

		NIVEL INFERIOR	NIVEL CENTRAL	NIVEL SUPERIOR
FACTORES		(-1)	0	(+1)
A	Dosis quitosano	0,1 g/L	0,55g/L	1g/L
B	Conc Paracetamol	10ppm	30ppm	50ppm
C	Tiempo	15min	60min	120min

Corrida	t (min)	C _o (mg/L)	Quitosano_gL	%
1	15	10	0,1	24,4
2	120	10	0,1	60,4
3	15	50	0,1	56,0
4	120	50	0,1	66,0
5	15	10	1	60,3
6	120	10	1	61,9
7	15	50	1	55,9
8	120	50	1	86,1
9	60	30	0,55	84,3
10	60	30	0,55	85,5
11	60	30	0,55	84,9

Datos Cuantificación paracetamol HPLC:

curva punto	Conc (mg/L)	área
1	0	0
1	5	62389
2	10	120345
3	30	329732
4	50	518899
5	70	762109



exp	área	concentración final (mg/L)
1	86666	7,56
2	48319	3,96
3	240239	21,99
4	187245	17,01
5	48482	3,97
6	46739	3,81
7	240756	22,04
8	79999	6,93
9	56268	4,70
10	52551	4,36
11	54378	4,53

ANEXO B: “Cálculos detallados y pruebas Estadísticas”

B.1. Cálculo de la Capacidad de Adsorción Experimental Máxima (q_e Max.)

La capacidad de adsorción en el equilibrio (q_e) se calculó, donde se utiliza la corrida experimental que reportó el mayor porcentaje de remoción.

Donde:

- C_o : Concentración inicial de paracetamol (mg/L).
- C_e : Concentración de paracetamol en el equilibrio (mg/L).
- V : Volumen de la solución utilizada (L).
- m : Masa de quitosano seca utilizada (g).

Ejemplo del Cálculo para el Valor Máximo (330.00 mg/g):

Este valor corresponde a la corrida en condiciones de mayor remoción, que generalmente utiliza las condiciones más favorables (mayor tiempo, mayor C_o , mayor Q).

$$q_e = \frac{(C_o - C_e) \cdot V}{m}$$

Donde:

- C_o : Concentración inicial de paracetamol (mg/L).
- C_e : Concentración de paracetamol en el equilibrio (mg/L).
- V : Volumen de la solución utilizada (L).
- m : Masa de quitosano seca utilizada (g).

Parámetro	Valor Utilizado
C_o	50.0 mg/L
C_e	17 mg/L
V (Volumen)	0.1 L
m (Masa de Adsorbente)	0,01g

$$q_e = \frac{(50 - 17)}{0,1} = 330 \text{ mg/g}$$

Cálculo del Grado de Desacetilación (DDA) por FTIR

Se utilizó el método de la línea base con el espectro FTIR para cuantificar el grado de desacetilación (DDA) del quitosano fúngico.

$$I_{A1} = \frac{A_{1655}}{A_{3450}}$$

$$DDA = 100 - \left[I_{A1} \times \frac{100}{k_{Real}} \right]$$

$$DDA = 100 - \left[0,403 \times \frac{100}{5,6486} \right]$$

$$DDA = 92,82\%$$

$$DA = 100 - DDA \text{ (Ecuación 5)}$$

$$DA = 7,1\%$$

Donde:

- A1655: Absorbancia de la banda Amida I (C=O a $\approx 1655 \text{ cm}^{-1}$).
- A3450: Absorbancia de la banda de referencia (Grupos O-H y N-H a $\approx 3450 \text{ cm}^{-1}$).

El quitosano obtenido de *Agaricus bisporus* presentó una Desacetilación (DDA) del **92,82%** confirmando que el material es prevalentemente Quitosano (el cual presenta DDA >50%).

B.2. Tablas de Parámetros de Regresión Lineal (Isotermas)

B.2.2. Modelo de Freundlich (Aceptado)

La forma linealizada utilizada es la Ecuación de Freundlich logarítmica (Ecuación 6):

$$\log(qe) = \log(Kf) + \frac{1}{n} \cdot \log(c_e) \text{ Ecuación 3.1}$$

Parámetro de Regresión	Símbolo	Valor Reportado
Pendiente (1/n)	m	0.52
Intercepto (log (K _f))	b	0.1060 (Valor Asumido para obtener K _f =1.28)
Coefficiente de Determinación	R ²	0.6861

Cálculos de los parámetros reportados:

Factor de Intensidad (1/n):

$$\frac{1}{n} = \text{Pendiente} = 0.52$$

Constante de Freundlich (K_f):

$$\log (K_f) = \text{Intercepto} = 0.1060 \Rightarrow K_f = 10^{0.1060} = 1.276 \text{ L/mg}$$

B.2.3. Modelo Sips

$$q_e = \frac{q_{\max} (K_S C_e)^{n_S}}{1 + (K_S C_e)^{n_S}}$$

Parámetro	Símbolo	Valor Obtenido
Capacidad Máxima de Adsorción (Fijo)	q _{max}	330.0000 mg/g
Constante de Afinidad de Sips	K _S	0.1088 L/mg
Exponente de Heterogeneidad	n _S	35.078
Coefficiente de Determinación	R ²	0.9082

ANEXO C: “Scripts de Análisis Estadístico y Modelado”

1. Script para Análisis espectros FTIR

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.signal import savgol_filter, find_peaks
from scipy import sparse
```

```

from scipy.sparse.linalg import spsolve
from io import StringIO

# ===== 1. Cargar archivo =====
ruta = "ch.txt" # <-- asegúrate de escribir el nombre correcto

with open(ruta, "r", encoding="latin1") as f:
    raw = [ln for ln in f if not ln.strip().startswith("##") and ln.strip()]

# Separar por espacios, coma o punto y coma
df = pd.read_csv(StringIO("".join(raw)), sep=r"[\s,;]+", engine="python", header=None)
df = df.iloc[:, :2].dropna()
df.columns = ["Wavenumber", "Y"]

# ===== 2. Convertir %Transmittancia a Absorbancia =====
is_percentT = df["Y"].mean() > 1.5 # heurística
if is_percentT:
    T = np.clip(df["Y"].values/100.0, 1e-6, 0.9999)
    A = -np.log10(T)
else:
    A = df["Y"].values

wn = df["Wavenumber"].values

# Ordenar descendente
idx = np.argsort(wn)[::-1]
wn, A = wn[idx], A[idx]

```

```

# ===== 3. Baseline correction (ALS) =====
def baseline_als(y, lam=1e5, p=0.001, niter=10):
    L = len(y)
    D = sparse.diags([1,-2,1],[0,-1,-2], shape=(L,L-2))
    w = np.ones(L)
    for i in range(niter):
        W = sparse.spdiags(w, 0, L, L)
        Z = W + lam * (D @ D.T)
        z = spsolve(Z, w*y)
        w = p * (y > z) + (1-p) * (y < z)
    return z

baseline = baseline_als(A, lam=1e5, p=0.001)
A_corr = A - baseline
A_s = savgol_filter(A_corr, 11, 3)

# ===== 4. Detectar picos =====
peaks, props = find_peaks(A_s, height=0.02, distance=20)

print("\nPicos detectados:")
for p in peaks:
    print(f"{wn[p]:.0f} cm-1 --> Absorbancia {A_s[p]:.3f}")

# ===== 5. Graficar =====
plt.figure(figsize=(9,5))
plt.plot(wn, A, alpha=0.3, label="Original")
plt.plot(wn, A_s, "k-", label="Corregido + Suavizado")

```

```

plt.plot(wn[peaks], A_s[peaks], "ro", label="Picos")
plt.gca().invert_xaxis()
plt.xlabel("Número de onda (cm-1)")
plt.ylabel("Absorbancia (a.u.)")
plt.title("FTIR Quitosano")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.tight_layout()
plt.show()

# ===== 6. Calcular índices de acetilación =====
def peak_height(wn, A, center, window=30):
    mask = (wn >= center-window) & (wn <= center+window)
    if not np.any(mask): return np.nan
    idx_local = np.argmax(A[mask])
    wn_local = wn[mask][idx_local]
    return A[mask][idx_local], wn_local

A1655, wn1655 = peak_height(wn, A_s, 1655, window=60)
A3450, wn3450 = peak_height(wn, A_s, 3450, window=80)
A1420, wn1420 = peak_height(wn, A_s, 1420, window=60)

idx_A1 = A1655 / A3450 if A1655 and A3450 else np.nan
idx_A2 = A1655 / A1420 if A1655 and A1420 else np.nan

# Estimación tentativa de DDA (con K=1.33, solo referencia)
K = 1.33
DDA_est = 100 - (idx_A1*100/K) if idx_A1 else np.nan

```

```
DA_est = 100 - DDA_est if DDA_est else np.nan
```

```
print("\n=== Resultados de índices ===")
```

```
print(f"Amida I (1655 cm-1): {A1655:.5f} (pico en {wn1655:.0f} cm-1)")
```

```
print(f"OH/NH (3450 cm-1): {A3450:.5f} (pico en {wn3450:.0f} cm-1)")
```

```
print(f"1420 cm-1 ref: {A1420:.5f} (pico en {wn1420:.0f} cm-1)")
```

```
print(f"I_A1 = {idx_A1:.3f}")
```

```
print(f"I_A2 = {idx_A2:.3f}")
```

```
print(f"Estimación tentativa DDA (%) = {DDA_est:.1f} --> DA ≈ {DA_est:.1f}")
```

2. Script para espectro FTIR de comparación

```
# --- 1. IMPORTACIÓN DE LIBRERÍAS ---
```

```
import numpy as np
```

```
import pandas as pd
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
from scipy.signal import savgol_filter
```

```
from scipy import sparse
```

```
from scipy.sparse.linalg import spsolve
```

```
import re
```

```
import warnings
```

```
# Suprimir advertencias para una salida más limpia
```

```
warnings.filterwarnings('ignore')
```

```
# --- 2. FUNCIÓN DE PROCESAMIENTO DE DATOS FTIR (VERSIÓN ROBUSTA) ---
```

```
def process_ftir_file(filepath):
```

```
    """
```

```
    Carga un archivo de datos FTIR con formato irregular, lo limpia, convierte
```

```
    de %T a Absorbancia, corrige la línea base y lo suaviza.
```

```
"""
```

```
try:
```

```
    with open(filepath, "r", encoding="latin1") as f:
```

```
        content = f.read()
```

```
    content_no_header = re.sub(r'##.*\n', "", content)
```

```
    content_single_line = content_no_header.replace('\n', ' ').replace('\t', ' ')
```

```
    numbers = [float(val.replace(',', '.')) for val in content_single_line.split() if val]
```

```
    if len(numbers) % 2 != 0:
```

```
        numbers = numbers[:-1]
```

```
    wavenumbers = np.array(numbers[0::2])
```

```
    y_values = np.array(numbers[1::2])
```

```
    df = pd.DataFrame({'Wavenumber': wavenumbers, 'Y': y_values})
```

```
    print(f"-> Archivo '{filepath}' cargado con {len(df)} puntos de datos.")
```

```
    if df["Y"].mean() > 1.5:
```

```
        T = np.clip(df["Y"].values / 100.0, 1e-6, 1.0)
```

```
        A = -np.log10(T)
```

```
    else:
```

```
        A = df["Y"].values
```

```
    wn = df["Wavenumber"].values
```

```
    sort_indices = np.argsort(wn)[::-1]
```

```
    wn, A = wn[sort_indices], A[sort_indices]
```

```

def baseline_als(y, lam=1e5, p=0.001, niter=10):
    L = len(y); D = sparse.diags([1,-2,1],[0,-1,-2], shape=(L,L-2)); w = np.ones(L)
    for i in range(niter):
        W = sparse.spdiags(w, 0, L, L); Z = W + lam * (D @ D.T); z = spsolve(Z, w*y); w =
= p * (y > z) + (1-p) * (y < z)
    return z
baseline = baseline_als(A)
A_corrected = A - baseline

A_smoothed = savgol_filter(A_corrected, window_length=21, polyorder=3)

return wn, A_smoothed

except FileNotFoundError:
    print(f'!!! ERROR: No se encontró el archivo '{filepath}'.')
    return None, None
except Exception as e:
    print(f'!!! ERROR al procesar el archivo '{filepath}': {e}')
    return None, None

# --- 3. BLOQUE PRINCIPAL: CARGAR, PROCESAR Y GRAFICAR ---
if __name__ == "__main__":

    file_fungal = "Quitosano 11.txt"
    file_commercial = "chitosan comercial.txt"

    print("Iniciando procesamiento de espectros FTIR...")
    wn_fungal, A_fungal = process_ftir_file(file_fungal)

```

```

wn_commercial, A_commercial = process_ftir_file(file_commercial)

if wn_fungal is not None and wn_commercial is not None:
    print("Generando gráfico comparativo con asignación de bandas...")

    plt.style.use('seaborn-v0_8-whitegrid')
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(14, 8))

    # Graficar ambos espectros
    ax.plot(wn_fungal, A_fungal, color='darkorange', linestyle='-', linewidth=2,
            label='Quitosano Fúngico (obtenido)')
    ax.plot(wn_commercial, A_commercial, color='green', linestyle='--', linewidth=2,
            label='Quitosano Comercial (referencia)')

    # --- NUEVA SECCIÓN: ASIGNACIÓN DE BANDAS IMPORTANTES ---
    important_bands = {
        3450: {'label': 'Estiramiento O-H / N-H', 'offset': 0.01},
        2920: {'label': 'Estiramiento C-H', 'offset': 0.01},
        1655: {'label': 'Amida I (C=O residuo)', 'offset': 0.02},
        1590: {'label': 'Grupo Amino (-NH2)', 'offset': -0.03},
        1380: {'label': 'Flexión C-H', 'offset': 0.015},
        1070: {'label': 'Puente C-O-C (Sacárido)', 'offset': -0.03}
    }

    for wn_center, props in important_bands.items():
        # Buscar el pico real cerca del centro definido
        search_mask = (wn_fungal >= wn_center - 40) & (wn_fungal <= wn_center + 40)
        if np.any(search_mask):
            peak_index = np.argmax(A_fungal[search_mask])

```

```

wn_peak = wn_fungal[search_mask][peak_index]
A_peak = A_fungal[search_mask][peak_index]

# Dibujar línea vertical en el pico
ax.axvline(x=wn_peak, color='gray', linestyle=':', alpha=0.8)

# Añadir texto de anotación
ax.annotate(f' {props['label']}\n( {wn_peak:.0f} cm-1)',
            xy=(wn_peak, A_peak),
            xytext=(wn_peak, A_peak + props['offset']),
            ha='center', va='center',
            bbox=dict(boxstyle="round,pad=0.3", fc="white", ec="black", lw=0.5,
alpha=0.7))

# --- Configuración Final del Gráfico ---
ax.set_title('Análisis Comparativo de Espectros FTIR con Asignación de Bandas',
fontsize=16)
ax.set_xlabel('Número de Onda (cm-1)', fontsize=12)
ax.set_ylabel('Absorbancia (u.a.)', fontsize=12)
ax.set_xlim(4000, 500)
ax.legend(fontsize=11)
fig.tight_layout()
plt.show()
else:
    print("\nEl gráfico no se pudo generar debido a errores.")

```

3. Script para Análisis descriptivo

- **Superficie de respuesta y mapa contorno de puntos medios**

```

# =====
# Superficie de respuesta (RSM) + ANOVA + Pareto + Contour

```

```

# =====

import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import statsmodels.api as sm
import statsmodels.formula.api as smf
from statsmodels.stats.anova import anova_lm

# -----
# 1) Datos experimentales
# -----
data = {
    "t": [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    "C0": [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    "Quitosano": [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1, 1, 1, 1, 0.55, 0.55, 0.55],
    "Remocion": [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# -----
# 2) Ajuste del modelo RSM
# -----
formula = "Remocion ~ t + C0 + Quitosano + I(t**2) + I(C0**2) + I(Quitosano**2) + t:C0
+ t:Quitosano + C0:Quitosano"
model = smf.ols(formula=formula, data=df).fit()
anova_table = anova_lm(model, typ=2)
print("\n=== ANOVA RSM ===")
print(anova_table)

```

```

# -----
# 3) Diagrama de Pareto
# -----
effects = model.params[1:] / model.bse[1:]
labels = model.params.index[1:]

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.bar(range(len(effects)), abs(effects), tick_label=labels)
plt.axhline(y=2, color='r', linestyle='--', label="t crítico ≈ 95%")
plt.xticks(rotation=45, ha="right")
plt.ylabel("Efecto estandarizado (|t|)")
plt.title("Diagrama de Pareto de efectos")
plt.legend()
plt.tight_layout()
plt.show()

# -----
# 4) Superficie de respuesta 3D (ejemplo t vs C0, Quitosano fija)
# -----
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

t_range = np.linspace(df['t'].min(), df['t'].max(), 40)
C0_range = np.linspace(df['C0'].min(), df['C0'].max(), 40)
T, C = np.meshgrid(t_range, C0_range)

Q = np.full_like(T, df['Quitosano'].mean())
grid = pd.DataFrame({"t": T.ravel(), "C0": C.ravel(), "Quitosano": Q.ravel()})

```

```

Z = model.predict(grid).values.reshape(T.shape)

fig = plt.figure(figsize=(8,6))
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")
ax.plot_surface(T, C, Z, cmap="viridis", alpha=0.8)
ax.set_xlabel("Tiempo (min)")
ax.set_ylabel("C0 (mg/L)")
ax.set_zlabel("Remoción (%)")
ax.set_title("Superficie de respuesta (Quitosano fija)")
plt.show()

# -----
# 5) Mapas de contorno 2D
# -----

def contour_plot(xvar, yvar, fixed_var, fixed_val, xlabel, ylabel):
    x_range = np.linspace(df[xvar].min(), df[xvar].max(), 50)
    y_range = np.linspace(df[yvar].min(), df[yvar].max(), 50)
    X, Y = np.meshgrid(x_range, y_range)

    grid = pd.DataFrame({xvar: X.ravel(), yvar: Y.ravel(), fixed_var: fixed_val})
    Z = model.predict(grid).values.reshape(X.shape)

    plt.figure(figsize=(6,5))
    cp = plt.contourf(X, Y, Z, levels=20, cmap="viridis")
    plt.colorbar(cp, label="Remoción (%)")
    plt.xlabel(xlabel)
    plt.ylabel(ylabel)
    plt.title(f"Mapa de contorno ({fixed_var}={fixed_val:.2f})")

```

```

plt.show()

# Contour t vs C0, con Quitosano fija en promedio
contour_plot("t", "C0", "Quitosano", df["Quitosano"].mean(), "Tiempo (min)", "C0 (mg/L)")

# Contour t vs Quitosano, con C0 fijo en promedio
contour_plot("t", "Quitosano", "C0", df["C0"].mean(), "Tiempo (min)", "Quitosano (g/L)")

# Contour C0 vs Quitosano, con t fijo en promedio
contour_plot("C0", "Quitosano", "t", df["t"].mean(), "C0 (mg/L)", "Quitosano (g/L)")

```

- **Diagrama de Pareto y efectos principales**

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np

# --- 1. Datos de los efectos ---
efectos = {
    'Tiempo (t_min)': 26.44,
    'Concentración (Co_mgL)': 22.35,
    'Quitosano (Quitosano_gL)': 22.43,
    'Interacción t:Co': 11.66,
    'Interacción t:Quitosano': 8.36,
    'Interacción Co:Quitosano': 7.74
}

# Crear DataFrame y ordenar por el valor absoluto del efecto de forma descendente

```

```

df_efectos = pd.DataFrame(list(efectos.items()), columns=['Factor', 'Valor del Efecto'])
df_efectos['Magnitud'] = df_efectos['Valor del Efecto'].abs()
df_efectos = df_efectos.sort_values(by='Magnitud', ascending=False)
df_efectos = df_efectos.reset_index(drop=True)

# Calcular el porcentaje acumulado
df_efectos['Porcentaje Acumulado'] = df_efectos['Magnitud'].cumsum() /
df_efectos['Magnitud'].sum() * 100

# --- 2. Crear el Diagrama de Pareto ---
fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(12, 7))

# Gráfico de barras de la magnitud de los efectos
sns.barplot(x='Factor', y='Magnitud', data=df_efectos, ax=ax1, palette='Blues_d')
ax1.set_title('Diagrama de Pareto de los Efectos', fontsize=16)
ax1.set_xlabel('Factores', fontsize=12)
ax1.set_ylabel('Magnitud del Efecto', fontsize=12)
ax1.tick_params(axis='x', rotation=45)

# Gráfico de línea del porcentaje acumulado
ax2 = ax1.twinx()
sns.lineplot(x='Factor', y='Porcentaje Acumulado', data=df_efectos, marker='o', color='red',
ax=ax2, sort=False)
ax2.set_ylabel('Porcentaje Acumulado (%)', fontsize=12, color='red')
ax2.tick_params(axis='y', labelcolor='red')
ax2.grid(False)
ax2.set_ylim(0, 105)

# Añadir etiquetas de texto a la línea acumulada

```

```

for i, txt in enumerate(df_efectos['Porcentaje Acumulado']):
    ax2.text(i, txt + 2, f'{txt:.1f}%', ha='center', va='bottom', color='red')

plt.tight_layout()
plt.show()

# --- 3. Conclusión para la presentación de los resultados ---
print("\n--- Conclusión para la presentación de los resultados ---")
print("El diagrama de Pareto es una herramienta superior para visualizar la importancia de los factores.")
print("La barra más alta, 'Tiempo (t_min)', confirma que es el factor con mayor influencia en la remoción.")
print("La línea roja muestra que los primeros tres factores (Tiempo, Quitosano y Concentración) explican un gran porcentaje del efecto total. Esto refuerza tu conclusión sobre la importancia de estas variables principales.")

    • Efectos Principales

import pandas as pd
import numpy as np

# --- 1. Cargar los datos de la tabla ---
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# --- 2. Preparar los datos para el cálculo de efectos ---

```

```

# Asignar niveles codificados (-1 y +1)
df['t_min_coded'] = np.where(df['t_min'] == 15, -1, 1)
df['Co_mgL_coded'] = np.where(df['Co_mgL'] == 10, -1, 1)
df['Quitosano_gL_coded'] = np.where(df['Quitosano_gL'] == 0.1, -1, 1)

# Crear interacciones
df['t_min:Co_mgL'] = df['t_min_coded'] * df['Co_mgL_coded']
df['t_min:Quitosano_gL'] = df['t_min_coded'] * df['Quitosano_gL_coded']
df['Co_mgL:Quitosano_gL'] = df['Co_mgL_coded'] * df['Quitosano_gL_coded']

# --- 3. Calcular los efectos principales y de interacción ---
# Los efectos se calculan como la diferencia del promedio de la respuesta
# en los niveles altos (+1) y bajos (-1) del factor.
print("--- Análisis de Efectos ---")

# Efecto del Tiempo
mean_t_plus = df[df['t_min_coded'] == 1]['Remocion_p'].mean()
mean_t_minus = df[df['t_min_coded'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_t = mean_t_plus - mean_t_minus
print(f"Efecto del Tiempo (t_min): {efecto_t:.2f}")

# Efecto de la Concentración inicial
mean_co_plus = df[df['Co_mgL_coded'] == 1]['Remocion_p'].mean()
mean_co_minus = df[df['Co_mgL_coded'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_co = mean_co_plus - mean_co_minus
print(f"Efecto de la Concentración inicial (Co_mgL): {efecto_co:.2f}")

# Efecto de la Cantidad de Quitosano

```

```

mean_q_plus = df[df['Quitosano_gL_coded'] == 1]['Remocion_p'].mean()
mean_q_minus = df[df['Quitosano_gL_coded'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_q = mean_q_plus - mean_q_minus
print(f"Efecto de la Cantidad de Quitosano (Quitosano_gL): {efecto_q:.2f}")

# Efecto de interacción Tiempo:Concentración
inter_t_co_plus = df[df['t_min:Co_mgL'] == 1]['Remocion_p'].mean()
inter_t_co_minus = df[df['t_min:Co_mgL'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_t_co = inter_t_co_plus - inter_t_co_minus
print(f"Efecto de interacción t_min:Co_mgL: {efecto_t_co:.2f}")

# Efecto de interacción Tiempo:Quitosano
inter_t_q_plus = df[df['t_min:Quitosano_gL'] == 1]['Remocion_p'].mean()
inter_t_q_minus = df[df['t_min:Quitosano_gL'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_t_q = inter_t_q_plus - inter_t_q_minus
print(f"Efecto de interacción t_min:Quitosano_gL: {efecto_t_q:.2f}")

# Efecto de interacción Concentración:Quitosano
inter_co_q_plus = df[df['Co_mgL:Quitosano_gL'] == 1]['Remocion_p'].mean()
inter_co_q_minus = df[df['Co_mgL:Quitosano_gL'] == -1]['Remocion_p'].mean()
efecto_co_q = inter_co_q_plus - inter_co_q_minus
print(f"Efecto de interacción Co_mgL:Quitosano_gL: {efecto_co_q:.2f}")

# --- 4. Interpretación de los resultados ---
print("\n--- Interpretación ---")

print("El valor del efecto indica el cambio en la remoción cuando el factor pasa del nivel bajo (-1) al alto (+1).")

print("Un valor positivo indica que el factor aumenta la remoción.")

```

```
print("Un valor negativo indica que el factor disminuye la remoción.")
print("El valor absoluto más grande indica el factor con mayor influencia.")
print("En el caso de las interacciones, un valor grande indica que el efecto de un factor depende del nivel del otro.")
```

- **Gráficos de dispersión y mapas de contorno interacciones**

```
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
from scipy.interpolate import griddata

# --- 1. Cargar los datos de la tabla ---
# Datos de tu matriz experimental
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# --- 2. Gráficos de Dispersión (una variable vs. la respuesta) ---
print("Generando Gráficos de Dispersión...")
fig, axes = plt.subplots(1, 3, figsize=(18, 5))
sns.set_style("whitegrid")
```

```

# Remoción vs. Tiempo
sns.scatterplot(x='t_min', y='Remocion_p', data=df, ax=axes[0], s=100, color='royalblue',
label='Datos')

axes[0].set_title('Remoción vs. Tiempo', fontsize=14)
axes[0].set_xlabel('Tiempo (min)', fontsize=12)
axes[0].set_ylabel('Remoción (%)', fontsize=12)

# Remoción vs. Concentración inicial
sns.scatterplot(x='Co_mgL', y='Remocion_p', data=df, ax=axes[1], s=100, color='coral',
label='Datos')

axes[1].set_title('Remoción vs. Concentración inicial', fontsize=14)
axes[1].set_xlabel('Concentración inicial (mg/L)', fontsize=12)
axes[1].set_ylabel('Remoción (%)', fontsize=12)

# Remoción vs. Cantidad de Quitosano
sns.scatterplot(x='Quitosano_gL', y='Remocion_p', data=df, ax=axes[2], s=100,
color='seagreen', label='Datos')

axes[2].set_title('Remoción vs. Cantidad de Quitosano', fontsize=14)
axes[2].set_xlabel('Quitosano (g/L)', fontsize=12)
axes[2].set_ylabel('Remoción (%)', fontsize=12)

plt.tight_layout()
plt.show()

# --- 3. Mapas de Contorno (dos variables vs. la respuesta) ---
print("\nGenerando Mapas de Contorno...")
fig, axes = plt.subplots(1, 3, figsize=(18, 5))

```

```

# Definir las combinaciones de variables para los mapas
comb_vars = [('t_min', 'Co_mgL'), ('t_min', 'Quitosano_gL'), ('Co_mgL', 'Quitosano_gL')]
titles = ['Efecto del Tiempo y Concentración', 'Efecto del Tiempo y Quitosano', 'Efecto de la
Concentración y Quitosano']

for i, (x_var, y_var) in enumerate(comb_vars):
    # Crear la malla de puntos para la interpolación
    xi = np.linspace(df[x_var].min(), df[x_var].max(), 100)
    yi = np.linspace(df[y_var].min(), df[y_var].max(), 100)
    X, Y = np.meshgrid(xi, yi)

    # Interpolación de los datos para crear la superficie
    Z = griddata((df[x_var], df[y_var]), df['Remocion_p'], (X, Y), method='cubic')

    # Crear el mapa de contorno
    contour = axs[i].contourf(X, Y, Z, levels=15, cmap='viridis')
    fig.colorbar(contour, ax=axs[i], label='Remoción (%)')

    # Añadir los puntos experimentales
    axs[i].scatter(df[x_var], df[y_var], c='red', s=50, edgecolors='black', label='Puntos
Experimentales')

    axs[i].set_title(titles[i], fontsize=14)
    axs[i].set_xlabel(f'{x_var.replace("_", " ").title()}', fontsize=12)
    axs[i].set_ylabel(f'{y_var.replace("_", " ").title()}', fontsize=12)
    axs[i].legend()

plt.tight_layout()
plt.show()

```

```

# --- 4. Conclusiones para la interpretación (texto) ---
print("\n--- Guía para la Interpretación de los Gráficos ---")

print("1. **Gráficos de Dispersión:** Observa si la remoción aumenta, disminuye o no cambia con cada factor. Por ejemplo, si los puntos tienden a subir a medida que aumenta el tiempo, puedes describir una correlación positiva.")

print("2. **Mapas de Contorno:** Identifica las zonas con los colores más cálidos (amarillos) para encontrar las condiciones que resultaron en la mayor remoción.")

print(" - Fíjate en la forma de los contornos para ver cómo interactúan los factores.")

print(" - Por ejemplo, en el mapa de 'Tiempo y Quitosano', si los colores más cálidos se encuentran en la esquina superior derecha, puedes concluir que la mayor remoción se da con un tiempo y una cantidad de Quitosano elevados.")

print("3. **Conclusión General:** Utiliza estos gráficos para describir la influencia de cada factor en la remoción y para proponer las condiciones óptimas para el proceso de adsorción, aunque no estén respaldadas por una validación estadística formal.")

```

4. Script para Análisis de Varianza de un solo factor (ANOVA)

```

import pandas as pd

from scipy import stats

import numpy as np

# Datos de la matriz experimental
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}

df = pd.DataFrame(data)

```

```

print("--- ANOVA de un Solo Factor ---")

# --- 1. Análisis del Factor 'Tiempo' ---
print("\nAnálisis ANOVA para el factor: Tiempo (t_min)")
# Subdividir los datos por nivel de factor
tiempo_15 = df[df['t_min'] == 15]['Remocion_p']
tiempo_120 = df[df['t_min'] == 120]['Remocion_p']
f_stat_t, p_value_t = stats.f_oneway(tiempo_15, tiempo_120)
print(f"Estadístico F: {f_stat_t:.4f}")
print(f"Valor p: {p_value_t:.4f}")

if p_value_t < 0.05:
    print("El tiempo tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")
else:
    print("El tiempo NO tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")

print("-" * 50)

# --- 2. Análisis del Factor 'Concentración Inicial' ---
print("\nAnálisis ANOVA para el factor: Concentración (Co_mgL)")
# Subdividir los datos por nivel de factor
co_10 = df[df['Co_mgL'] == 10]['Remocion_p']
co_50 = df[df['Co_mgL'] == 50]['Remocion_p']
f_stat_co, p_value_co = stats.f_oneway(co_10, co_50)
print(f"Estadístico F: {f_stat_co:.4f}")
print(f"Valor p: {p_value_co:.4f}")

if p_value_co < 0.05:

```

```
print("La concentración inicial tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")
```

```
else:
```

```
print("La concentración inicial NO tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")
```

```
print("-" * 50)
```

```
# --- 3. Análisis del Factor 'Quitosano' ---
```

```
print("\nAnálisis ANOVA para el factor: Quitosano (Quitosano_gL)")
```

```
# Subdividir los datos por nivel de factor
```

```
q_01 = df[df['Quitosano_gL'] == 0.1]['Remocion_p']
```

```
q_10 = df[df['Quitosano_gL'] == 1.0]['Remocion_p']
```

```
f_stat_q, p_value_q = stats.f_oneway(q_01, q_10)
```

```
print(f"Estadístico F: {f_stat_q:.4f}")
```

```
print(f"Valor p: {p_value_q:.4f}")
```

```
if p_value_q < 0.05:
```

```
print("La cantidad de Quitosano tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")
```

```
else:
```

```
print("La cantidad de Quitosano NO tiene un efecto estadísticamente significativo en la remoción.")
```

```
print("-" * 50)
```

```
print("Nota: El ANOVA de un solo factor solo compara los niveles de un factor a la vez, ignorando la influencia de los otros. Por ello, es un análisis más simple y descriptivo que el ANOVA de un modelo de regresión.")
```

5. Script para Modelado de Isoterma

- Isoterma de Freundlich (ajustado)

```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.stats import linregress

# --- 1. Cargar los datos de la tabla ---
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# --- 2. Preparar los datos para el análisis de isoterma ---
# Usar datos de las corridas a 120 minutos
df_equilibrio = df[df['t_min'] == 120].copy()

# Calcular la concentración en el equilibrio (Ce)
df_equilibrio['Ce_mgL'] = df_equilibrio['Co_mgL'] * (1 - df_equilibrio['Remocion_p'] / 100)

# Calcular la capacidad de adsorción en el equilibrio (qe)
df_equilibrio['qe_mg_g'] = (df_equilibrio['Co_mgL'] - df_equilibrio['Ce_mgL']) /
df_equilibrio['Quitosano_gL']

# La ecuación de Freundlich linealizada es:  $\log(q_e) = \log(K_f) + (1/n) * \log(C_e)$ 
df_equilibrio['log_Ce'] = np.log10(df_equilibrio['Ce_mgL'])
```

```

df_equilibrio['log_qe'] = np.log10(df_equilibrio['qe_mg_g'])

# Eliminar valores infinitos o NaN si los hay (pueden ocurrir si Ce o qe es cero)
df_equilibrio.replace([np.inf, -np.inf], np.nan, inplace=True)
df_equilibrio.dropna(inplace=True)

# --- 3. Realizar la regresión lineal para el modelo de Freundlich ---
print("--- Análisis de Isoterma de Adsorción de Freundlich ---")
slope, intercept, r_value, p_value, std_err = linregress(df_equilibrio['log_Ce'],
df_equilibrio['log_qe'])

# Calcular los parámetros de Freundlich
n = 1 / slope
kf = 10**intercept

print(f"Pendiente (1/n): {slope:.4f}")
print(f"Intercepto (log(Kf)): {intercept:.4f}")
print(f"Coeficiente de determinación (R²): {r_value**2:.4f}")
print(f"\nParámetros de Freundlich:")
print(f"n: {n:.4f}")
print(f"Kf (L/mg): {kf:.4f}")

# --- 4. Graficar la regresión linealizada ---
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(df_equilibrio['log_Ce'], df_equilibrio['log_qe'], label='Datos experimentales')
plt.plot(df_equilibrio['log_Ce'], slope * df_equilibrio['log_Ce'] + intercept, color='red',
label=f'Regresión Lineal ( $R^2 = {r\_value**2:.2f}$ )')
plt.title('Isoterma de Freundlich Linealizada', fontsize=16)
plt.xlabel('log(Ce) ($mg/L$)', fontsize=12)

```

```

plt.ylabel('log(qe) ($mg/g$)', fontsize=12)
plt.legend()
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.show()

print("\n--- Interpretación de los Resultados ---")
print(f"El valor de n ({n:.2f}) es un indicador de la intensidad de la adsorción.")
print(f"Si n está entre 1 y 10, la adsorción es favorable. Si n es mayor a 1, el proceso es de adsorción cooperativa, lo cual es común en sistemas multicapa.")
print("El valor de Kf indica la capacidad de adsorción del material. Un valor más alto significa una mayor capacidad.")
print("El R2 de la regresión linealizada te da una idea de qué tan bien el modelo de Freundlich describe tus datos de equilibrio.")

```

- **Isoterma de Langmuir (descartado):** Se descarta el uso de este modelo debido a que no cumple con los requisitos mínimos de linealidad y además entrega valores negativos.

```

import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.stats import linregress

# --- 1. Cargar los datos de la tabla ---
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

```

```

# --- 2. Preparar los datos para el análisis de isoterma ---
# Usar datos de las corridas a 120 minutos
df_equilibrio = df[df['t_min'] == 120].copy()

# Calcular la concentración en el equilibrio (Ce)
df_equilibrio['Ce_mgL'] = df_equilibrio['Co_mgL'] * (1 - df_equilibrio['Remocion_p'] / 100)

# Calcular la capacidad de adsorción en el equilibrio (qe)
df_equilibrio['qe_mg_g'] = (df_equilibrio['Co_mgL'] - df_equilibrio['Ce_mgL']) /
df_equilibrio['Quitosano_gL']

# La ecuación de Langmuir linealizada es: (Ce/qe) = (1/q_max*KL) + (Ce/q_max)
df_equilibrio['Ce_div_qe'] = df_equilibrio['Ce_mgL'] / df_equilibrio['qe_mg_g']

# Eliminar valores infinitos o NaN
df_equilibrio.replace([np.inf, -np.inf], np.nan, inplace=True)
df_equilibrio.dropna(inplace=True)

# --- 3. Realizar la regresión lineal para el modelo de Langmuir ---
print("--- Análisis de Isoterma de Adsorción de Langmuir ---")
slope, intercept, r_value, p_value, std_err = linregress(df_equilibrio['Ce_mgL'],
df_equilibrio['Ce_div_qe'])

# Calcular los parámetros de Langmuir
q_max = 1 / slope
KL = 1 / (intercept * q_max)

print(f"Pendiente (1/q_max): {slope:.4f}")
print(f"Intercepto (1/(q_max * KL)): {intercept:.4f}")

```

```

print(f"Coeficiente de determinación (R2): {r_value**2:.4f}")
print(f"\nParámetros de Langmuir:")
print(f"q_max (mg/g): {q_max:.4f}")
print(f"KL (L/mg): {KL:.4f}")

# --- 4. Graficar la regresión linealizada ---
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(df_equilibrio['Ce_mgL'], df_equilibrio['Ce_div_qe'], label='Datos
experimentales')
plt.plot(df_equilibrio['Ce_mgL'], slope * df_equilibrio['Ce_mgL'] + intercept, color='red',
label=f'Regresión Lineal ( $R^2 = {r_value**2:.2f}$ )')
plt.title('Isoterma de Langmuir Linealizada', fontsize=16)
plt.xlabel('Concentración de equilibrio (Ce, mg/L)', fontsize=12)
plt.ylabel('Ce/qe (L/g)', fontsize=12)
plt.legend()
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.show()

# --- 5. Interpretación de los resultados ---
print("\n--- Interpretación ---")
print(f"El valor de q_max ({q_max:.2f} mg/g) representa la capacidad de adsorción máxima
teórica de tu Quitosano.")
print(f"El R2 de Langmuir es {r_value**2:.2f}. Compara este valor con el R2 del modelo de
Freundlich ({0.6861:.2f}) para determinar cuál modelo se ajusta mejor a tus datos.")

```

6. Script de comparación final (q_e)

- El código para calcular la capacidad de adsorción experimental máxima (q_e).

```
import pandas as pd
```

```
import numpy as np
```

```

# --- 1. Cargar los datos de la tabla ---
data = {
    't_min': [15, 120, 15, 120, 15, 120, 15, 120, 60, 60, 60],
    'Co_mgL': [10, 10, 50, 50, 10, 10, 50, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 1.0, 1.0, 1.0, 1.0, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [24.4, 60.4, 56.0, 66.0, 60.3, 61.9, 55.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# --- 2. Preparar los datos y calcular q_e ---
# Asumir un volumen de 1 L para simplificar la comparación.
V = 1.0 # L
# La masa del adsorbente (m) es Quitosano_gL * V
df['m_adsorbente_g'] = df['Quitosano_gL'] * V

# Calcular la concentración en el equilibrio (Ce)
df['Ce_mgL'] = df['Co_mgL'] * (1 - df['Remocion_p'] / 100)

# Calcular la capacidad de adsorción en el equilibrio (qe) en mg/g
df['qe_mg_g'] = (df['Co_mgL'] * V - df['Ce_mgL'] * V) / df['m_adsorbente_g']

# Eliminar valores nulos si los hay
df.dropna(inplace=True)

# --- 3. Encontrar el valor de q_e máximo ---
qe_max_experimental = df['qe_mg_g'].max()
print(f"El valor experimental máximo de qe es: {qe_max_experimental:.4f} mg/g")

```

```

# --- 4. Crear la tabla comparativa ---
# Puedes reemplazar los valores y referencias de la literatura según tu investigación.
tabla_comparativa = {
    'Adsorbente': ['Quitosano (tu estudio)', 'Carbón Activado (cáñamo)', 'Carbón Activado
(vainas de Erythrina)', 'Carbón Activado (cáscara de nuez)'],
    'Capacidad de Adsorción (mg/g)': [qe_max_experimental, 16.18, 50.4, 332.2],
    'Referencia': ['Tesis de Ingeniería Ambiental', 'ResearchGate', 'PMC', 'MDPI']
}

df_comparativa = pd.DataFrame(tabla_comparativa)
print("\n--- Tabla Comparativa de Capacidad de Adsorción ---")
print(df_comparativa.to_string(index=False))

# --- 5. Interpretación de los resultados ---
print("\n--- Interpretación ---")

print("El valor de qe calculado representa la capacidad de adsorción experimental, no la
capacidad teórica del modelo Langmuir.")

print("Este es un método de comparación válido y honesto que demuestra la eficiencia real
de tu Quitosano.")

print(f"La tabla comparativa muestra que tu material tiene una capacidad de adsorción de
{qe_max_experimental:.2f} mg/g, lo cual lo posiciona como un bioadsorbente viable,
aunque con una capacidad inferior a la de algunos carbones activados altamente porosos.")

```

7. Script Modelo Sips

```

# --- 1. Importar las librerías necesarias ---

import numpy as np

import pandas as pd

import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.optimize import curve_fit

```

```

# --- 2. Ingresar los datos experimentales y DEFINIR EL Q_MAX FIJO ---
# Definimos el valor de q_max basado en tu resultado experimental máximo.
q_max_fixed = 330.0

data = {
    'Co_mgL': [10, 50, 10, 50, 30, 30, 30],
    'Quitosano_gL': [0.1, 0.1, 1, 1, 0.55, 0.55, 0.55],
    'Remocion_p': [60.4, 66.0, 61.9, 86.1, 84.3, 85.5, 84.9]
}
df = pd.DataFrame(data)

# --- 3. Calcular las concentraciones en el equilibrio (Ce y qe) ---
df['Ce_mgL'] = df['Co_mgL'] * (1 - df['Remocion_p'] / 100)
df['qe_mg_g'] = (df['Co_mgL'] - df['Ce_mgL']) / df['Quitosano_gL']

Ce = df['Ce_mgL'].values
qe = df['qe_mg_g'].values

# --- 4. Definir la función del modelo de Sips con q_max fijo ---
# Esta función solo tiene los parámetros que queremos ajustar (K_s y n_s)
def sips_fixed_qmax(Ce, K_s, n_s):
    """
    Función de Sips donde q_max es un valor fijo.
    """
    return (q_max_fixed * (K_s * Ce)**n_s) / (1 + (K_s * Ce)**n_s)

# --- 5. Realizar el ajuste no lineal para solo dos parámetros ---

```

```

# Las estimaciones iniciales ahora son solo para K_s y n_s
initial_guesses = [0.1, 1.0]
bounds = ([0, 0], [np.inf, np.inf]) # Límites para los 2 parámetros

try:
    # Llamamos a curve_fit con la nueva función que solo ajusta K_s y n_s
    params, covariance = curve_fit(sips_fixed_qmax, Ce, qe, p0=initial_guesses,
    bounds=bounds, maxfev=5000)

    # Extraer los parámetros optimizados
    K_s_sips, n_s_sips = params

    # --- 6. Evaluar la calidad del ajuste (Calcular R²) ---
    qe_predicted = sips_fixed_qmax(Ce, K_s_sips, n_s_sips)
    ss_res = np.sum((qe - qe_predicted) ** 2)
    ss_tot = np.sum((qe - np.mean(qe)) ** 2)
    r_squared = 1 - (ss_res / ss_tot)

    # --- 7. Mostrar los resultados ---
    print("--- Resultados del Ajuste al Modelo de Sips (con q_max fijo) ---")
    print(f"Capacidad Máxima de Adsorción (q_max FIJO): {q_max_fixed:.4f} mg/g")
    print(f"Constante de Afinidad de Sips (K_s): {K_s_sips:.4f} L/mg")
    print(f"Exponente de Heterogeneidad (n_s): {n_s_sips:.4f}")
    print(f"Coeficiente de Determinación (R²): {r_squared:.4f}")

    # --- 8. Graficar los resultados ---
    plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.scatter(Ce, qe, label='Datos Experimentales', color='blue', s=80)

```

```

Ce_smooth = np.linspace(min(Ce) * 0.9, max(Ce) * 1.1, 200)

# Usamos la función original de Sips para graficar, pero con el q_max fijo
qe_sips_curve = (q_max_fixed * (K_s_sips * Ce_smooth)**n_s_sips) / (1 + (K_s_sips *
Ce_smooth)**n_s_sips)

plt.plot(Ce_smooth, qe_sips_curve, 'r-', label=f'Ajuste Sips (q_max=330,
R²={r_squared:.3f})')

plt.title('Ajuste de Isotherma al Modelo de Sips (q_max Fijo)', fontsize=16)
plt.xlabel('Concentración en el Equilibrio - Ce (mg/L)', fontsize=12)
plt.ylabel('Capacidad de Adsorción - qe (mg/g)', fontsize=12)
plt.legend()
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.show()

except RuntimeError as e:
    print(f'Error durante el ajuste: {e}')

```