

# SIMULACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE CROMO VI EN UNA COLUMNA EMPACADA CON ALÚMINA MEDIANTE CFD

Murrieta Escoto Samantha (1), Rubio Campos Beatriz Eugenia (2), Murrieta Luna Edilberto (3),  
Molina Bermúdez Diana Guadalupe (4)

1 [Escuela de nivel Medio Superior de Guanajuato, Universidad de Guanajuato] | [escotosamy@gmail.com]

2 [Escuela de nivel Medio Superior de Guanajuato, Universidad de Guanajuato] | [be.rubiocampos@ugto.mx]

3 [Departamento en Ingeniería Metalúrgica, Universidad Politécnica de Juventino Rosas] | [emurrieta\_ptc@upjr.edu.mx]

4 [Departamento en Ingeniería Metalúrgica, Universidad Politécnica de Juventino Rosas] | [dmolina\_ptc@upjr.edu.mx]

## Resumen

En este trabajo se presenta el análisis hidrodinámico de una columna de adsorción de cromo hexavalente sobre alúmina. La metodología se basa en la generación del modelo de la columna y del mallado del mismo mediante el uso del software especializado en simulación ANSYS 17.2 versión estudiantil. La simulación del modelo, se llevó a cabo tomando en consideración las dimensiones de ésta, las propiedades del medio poroso y agua líquida como fluido de interacción. Los resultados de las simulaciones se generaron mediante el análisis del post-procesamiento empleando el módulo ANSYS FLUENT. Los contornos de velocidad generados, indican mediante códigos de colores, que se presentan valores altos de velocidad al ingreso del fluido a la columna y que en la parte del empacamiento se presenta una disminución, pero al salir del empacamiento, la velocidad se vuelve a normalizar hasta adquirir el valor de la velocidad de entrada. Finalmente, el análisis de la presión y turbulencia, muestra un comportamiento similar, presentándose valores mayores en la entrada y salida.

## Abstract

In this work, the hydrodynamic analysis of a hexavalent chromium adsorption column on alumina is presented. The methodology is based on the generation the model of the column and its meshing through the use of specialized software in simulation ANSYS 17.2 student version. The simulation of the model was carried out taking into consideration the dimensions of the model, the properties of the porous medium and liquid water as interaction fluid. The results of the simulations were generated by post-processing analysis using the ANSYS FLUENT module. The generated velocity contours indicate by means of color codes that high velocity values are presented at the flow inlet to the column and that in the packaging part there is a decrease, but when leaving the packing, the speed is normalized again until acquiring the value of the low inlet velocity. Finally, the analysis of the pressure and turbulence shows a similar behavior, presenting higher values in the flow inlet and flow outlet.

### Palabras Clave

Geometría, contornos, velocidad, turbulencia, ANSYS

## INTRODUCCIÓN

En los efluentes de la industria cromadora, la concentración de cromo hexavalente (Cr VI), alcanza niveles de concentración que rebasa los límites establecidos en la norma oficial mexicana PROY-NOM-001-SEMARNAT-2017 (Diario Oficial de la Federación, 2018), cuyo valor es de 1.5 mg/L. El Cr (VI) es extremadamente tóxico y en general sus compuestos son muy irritantes debido a su solubilidad en los tejidos [1].

Entre los métodos para remoción de metales, se tienen: los métodos fisicoquímicos que han sido usados ampliamente para remover estos metales pesados de las aguas residuales de las industrias. Éstos, pueden ser inefectivos o caros y los métodos biológicos para la remoción de iones de metales pesados pueden proveer una atractiva alternativa a los métodos fisicoquímicos, [2].

Estudios realizados [3], sobre la adsorción de Cr (VI) empleando varios materiales adsorbentes, mostraron que utilizando alúmina se obtiene un 98% removido, así como carbón activado, que se considera como alto en comparación con otros materiales empleados (piedra pómez, caolín, arena fina). Sin embargo, el carbón activado es costoso.

Los procesos en las superficies gobiernan muchos aspectos de la vida cotidiana, incluyendo la vida misma. Aunque se limite la atención a las superficies sólidas, la importancia de los procesos apenas se reduce. La viabilidad de una industria está determinada bien constructivamente, como en la corrosión, por procesos que tienen lugar en las superficies sólidas.

## Marco teórico

### Mecanismo de adsorción

Se llama adsorción al fenómeno de acumulación de partículas sobre una superficie. La sustancia que se adsorbe es el adsorbato y el material sobre el cual lo hace es el adsorbente. El proceso inverso de la adsorción es la desorción [4].

Son muchos los tipos de adsorción existentes (sólido-gas, sólido-líquido, líquido-gas), pero en esta práctica se ceñirá al estudio de la adsorción sólido-líquido. Los sólidos son capaces de adsorber uno o más componentes de una mezcla líquida, o bien el soluto o el disolvente de una solución. Atendiendo a las fuerzas de interacción entre las moléculas de adsorbente y adsorbato, se acepta la existencia de dos tipos fundamentales de adsorción. Cuando estas fuerzas son del tipo dipolo-dipolo, dipolo-dipolo inducido o fuerzas de dispersión, se usa el término de adsorción física o fisorción. Cuando las fuerzas son enlaces covalentes se aplica el término de adsorción química o quimisorción. En la Tabla 1 se presentan las principales diferencias.

Tabla 1. Diferencias entre los mecanismos de adsorción.

Parámetro	Adsorción física	Quimisorción
Rango de temperatura	Baja	Alta
Entalpia de adsorción	Baja	Alta
Orden de entalpia	Condensación	Reacción
Velocidad	Rápida	No activada
Energía de activación	Baja	Baja
Cubrimiento	Multicapa	Monocapa
Reversibilidad	Alta	A menudo irreversible

## Alúmina

La alúmina activada es una forma porosa y adsorbente que se produce calentando los hidratos a temperatura superficial para expulsar la mayor parte del agua combinada. Es un material con buenas propiedades de adsorción de fluoruros del agua y constituyen el material adsorbente más usado para este fin. Los tipos muy adsorbentes o alúminas activadas se expanden en forma granular y de tabletas de tamaño apropiado para lechos catalizadores fijos. La magnitud de su superficie depende del método de preparación y del grado de activación. Las formas comerciales tienen entre 100 y 400 m<sup>2</sup> de área por gramo. La mayoría de los tipos contienen carbonato sódico como impureza, pero en algunas variedades solo llega al 0.1% o menos. Algunas alúminas activadas tienen resistencia excepcional al calor y conservan su área a 800°C [5].

## Simulación de la columna

En la actualidad el uso de las tecnologías de la Información y Comunicación (TIC's) como medios educativos es muy importante, ya que permiten analizar modelos reales para evitar el desperdicio de materiales, ahorrar tiempo y recursos económicos. Uno de los software más completo y utilizado a nivel mundial es ANSYS Inc., el cual cuenta con una versión estudiantil (ANSYS Student 17.2) con licencia libre y fue utilizado para el análisis en este trabajo de investigación [6].

El objetivo general de este trabajo es analizar el comportamiento hidrodinámico de una columna de adsorción empacada mediante el uso de la dinámica computacional de fluidos.

## MATERIALES Y MÉTODOS

La geometría se creó en el módulo ANSYS GEOMETRY, la malla fue creada en el módulo ANSYS MESH y el análisis hidrodinámico se realizó en el módulo ANSYS FLUENT

### Dimensiones del modelo

Para la simulación del modelo, se consideraron las dimensiones de la columna experimental: altura 0.65 m, diámetro 0.062 m, empaquetado de 0.35 m de altura ubicado en la parte central y porosidad de 0.58. El empaquetado consta de esferas de alúmina las cuales tienen un diámetro de 0.0035 m. El flujo volumétrico es de 6.5 mL/min (ascendente), por lo que para realizar la simulación se calculó la velocidad mediante la ecuación:

$$Q = \frac{V}{A}$$

donde V es la velocidad y A es el área de la sección transversal por la cual circula el fluido, obteniéndose que la condición inicial de velocidad de 0.0046 m/s. Las pruebas hidrodinámicas se realizaron con agua, considerando las propiedades a 20°C (293.15 K). El empaquetamiento se consideró como un medio poroso. Para el análisis se graficaron los contornos de velocidad, presión, turbulencia y líneas de corriente.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### Mallado de la columna

El modelo geométrico creado tiene la forma de un cilindro y se discretizó en una malla no estructurada la cual está conformada de tetraedros híbridos, la cual se muestra en la Figura 1. Se generaron 15,471 volúmenes de control mediante el uso del módulo ANSYS MESH.

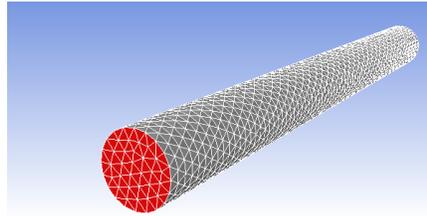


Figura 1. Mallado del modelo de la columna de adsorción de Cr (VI) sobre alúmina.

### Simulación de la columna

La Figura 2a muestra los contornos de velocidad obtenidos mediante la simulación. Al ingresar el fluido a la columna, se presentan los valores máximos de velocidad, representados por el color rojo, los cuales tiene un valor de  $5.08 \times 10^{-3}$  m/s. Cuando el flujo atraviesa la zona empacada, la velocidad presenta una disminución, observándose un color verde a amarillo, y su valor es de  $2.79 \times 10^{-3}$  m/s, este fenómeno ocurre debido a que el empacamiento no permite el libre tránsito de las moléculas de agua. Al salir de la zona de empacamiento, el fluido tiende a incrementar su velocidad, esto se debe a que nada impide su paso por la columna y adquiere un valor de  $4.57 \times 10^{-3}$  m/s, el cual es menor que la velocidad de entrada. Este fenómeno es conveniente para la adsorción, ya que el tiempo de residencia del material con contenido de Cr (VI) será mayor y esto permitirá que se obtenga una mejor remoción. También se puede apreciar que la velocidad cerca de pared de la columna es muy baja (tiende a cero), ya que el fluido tiende a adherirse y se distingue por el color azul turquesa.

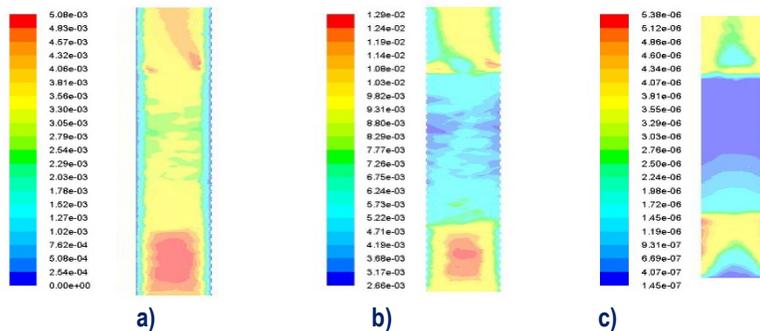


Figura 2. Contornos. a) Velocidad. b) Presión. c) Turbulencia

Los valores de presión obtenidos oscilan entre  $3.17 \times 10^{-3}$  a  $5.22 \times 10^{-3}$  N/m<sup>2</sup>, lo que indica que es muy baja. Al igual que en la velocidad se presenta una caída de presión cuando el fluido atraviesa la zona empacada y se muestra un incremento entre la entrada y la zona empacada y la zona empacada y la salida, esto se puede apreciar en la Figura 2b. Los contornos de turbulencia son presentados en la Figura 2c, en la cual se puede observar que en la entrada no se presenta turbulencia (color azul). Este fenómeno se origina antes de que el fluido entre a la zona de empaquetamiento y se debe a que las esferas de alúmina impiden el paso libre del flujo, por lo que algunas moléculas de agua chocan con las esferas y tienden a regresarse, chocando con más moléculas de agua, generando así remolinos. En la zona de empaquetamiento no se presenta turbulencia, esto se debe a que en esta zona la velocidad disminuye y también se presenta una caída de presión. Al salir de la zona de empaquetamiento se vuelve a generar turbulencia, ya que las esferas de alúmina generan huecos (caídas de presión) encima de ellas, los cuales tiene forma de conos y las moléculas de agua no rodean las esferas. Al pasar la caída de presión, el flujo se vuelve a estabilizar y continúa su movimiento en forma lineal hasta llegar a la salida de la columna.

La Figura 3 muestra el movimiento de las moléculas de agua al pasar por la columna. Se puede observar el movimiento sinuoso en la zona empacada debido a las esferas de alúmina y el movimiento lineal en la zona de entrada y salida.

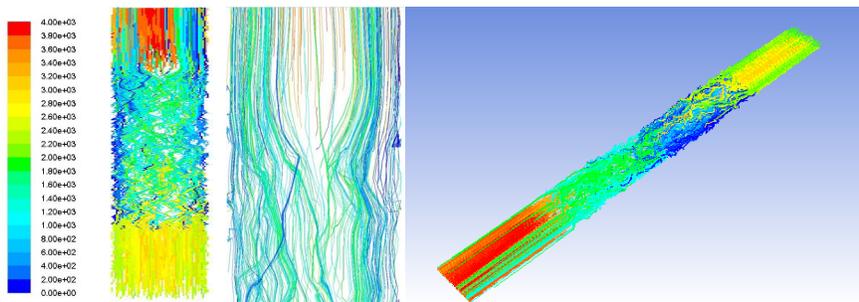


Figura 3. Líneas de corriente.

## CONCLUSIONES

A partir de las dimensiones de la columna, se generó un modelo geométrico de la columna de adsorción. Las condiciones propuestas en el dominio computacional permitieron simular de manera correcta el proceso de adsorción de Cr (VI) sobre alúmina. El análisis de los contornos de velocidad, presión y turbulencia, permiten tener una mayor comprensión del efecto de las variables involucradas en el proceso en estudio. La caída de velocidad en la zona de empaquetamiento representa la interacción específica del fluido con las esferas de alúmina, traduciendo este fenómeno a un mayor tiempo de residencia cuando se realice la adsorción, lo cual es conveniente para mejorar la remoción. Para la presión y turbulencia, existe un comportamiento similar, obteniéndose valores altos al alimentar el fluido a la columna. Este tipo de análisis generan ahorros de materiales y temporales a diferencia de los análisis físicos.

## AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo de investigación fue realizado bajo la supervisión de la Dr. Beatriz Eugenia Rubio Campos y el Dr. Edilberto Murrieta Luna, a quienes expreso mi más profundo agradecimiento por hacer posible la realización de este estudio. Además de agradecer su paciencia, tiempo y dedicación que tuvieron para que esto saliera de manera exitosa. Gracias por su apoyo.

## REFERENCIAS

- [1] Díaz, Y. Pájaro and F. (2012). Remoción de cromo hexavalente de aguas contaminadas usando quitosano obtenido de exoesqueleto de camarón. *Revista Colombiana de Química*, 41(2), 283-297.
- [2] Volesky, B. (1999). *Biosorption of Cd and Cu by different types of Sargassum biomass*. Amsterdam: Amils and Ballester.
- [3] Rubio, C. B. E. (2006). *Modelo de adsorción de Cromo (VI) en una columna de aglomerados de alúmina modificada*. Tesis.
- [4] Smith, J. (1986). *Ingeniería de la Cinética Química*. México. Editorial Continental.
- [5] Leyva R., Medellín N.A., Jacobo A., Mendoza J., Landin L., Martínez J.M, Aragón A. (2008). Fluoride removal from water solution by adsorption on activated alumina prepared from pseudo-boehmite. *J. Environ. Eng. Manage*, 18(5), 301-309.
- [6] ANSYS FLUENT Tutorial Guide. (2016). ANSYS, Inc. is certified to ISO 9001:2008.