

Análisis de la adsorción de cromo hexavalente sobre medio poroso utilizando CFD

Adsorption analysis of hexavalent chromium onto porous media using CFD

Orfelina Haydeé Cabello Meza¹, Carolina del Carmen Hernández Langarica², Edilberto Murrieta Luna³, Jesús Abelardo Razo Solís², Paolo Bernardo Nicolás Carrillo Castro², Nancy Guadalupe González Ceballos¹

¹ Escuela de Nivel Medio Superior de Pénjamo, Colegio de Nivel Medio Superior, Universidad de Guanajuato.

² Escuela de Nivel Medio Superior de Guanajuato, Colegio de Nivel Medio Superior, Universidad de Guanajuato.

³ Universidad Politécnica de Juventino Rosas.

orfelina.meza@ugto.mx

Resumen

Los metales pesados son de gran preocupación debido a que suelen ser tóxicos, no biodegradables y difíciles de eliminar. Uno de los más peligrosos es el cromo hexavalente Cr(VI) ya que provoca riesgos para la salud humana. Para el tratamiento de los efluentes líquidos que contienen metales pesados existen diferentes métodos fisicoquímicos; los más empleados son los siguientes: intercambio iónico, precipitación y adsorción. La adsorción es una de las tecnologías más prometedoras de eliminación de cromo hexavalente de medios acuosos. La adsorción con alúmina ha sido muy utilizada para el tratamiento del agua ya que es un material no tóxico, de bajo costo y con porosidad suficiente para que se depositen los iones de cromo hexavalente Cr (VI). En este trabajo de investigación se realiza un estudio teórico mediante la simulación CFD (análisis computacional de fluidos) aplicado a una columna de flujo continuo y con una sola esfera de alúmina colocada en la parte central de la columna. Se obtiene resultados de forma numérica y con gráficos de colores con los cuales se realizó el análisis hidrodinámico y de transferencia de masa. Las simulaciones fueron llevadas a cabo en estado transitorio para un tiempo real de 2 s, acumulando 2.7944 E-08 kg de masa de solución de cromo hexavalente Cr(VI) dentro de la esfera de alúmina.

Palabras clave: metal pesado, efluente, alúmina, adsorción, CFD.

Introducción

El agua es un recurso indispensable para la vida y las actividades antropogénicas, siendo las actividades industriales uno de los empleadores más importantes de este recurso, desechando aguas residuales contaminadas [1]. Los metales pesados son de gran preocupación debido a que suelen ser tóxicos, no biodegradables y difíciles de eliminar y pueden provenir de fuente naturales y artificiales [2].

Entre los metales pesados, de los más peligrosos para el medio ambiente es el cromo hexavalente Cr(VI). El Cr(VI) de las aguas residuales contaminadas se acumula en el suelo, esto provoca riesgos para la salud humana y el medio ambiente [3]. Se ha reportado que el cromo causa daños hepáticos y cardiovasculares, abortos espontáneos, necrosis, úlceras, bronquitis, disfunción pulmonar, neumonía e irritación nasal y en muchos casos hasta la muerte [4]. El cromo se deposita en el sistema hídrico en estado hexavalente y trivalente a través de actividades industriales como la galvanoplastia, las pinturas y el curtido de cuero, las industrias químicas, las refinerías de petróleo, la producción de pesticidas, las plantas petroquímicas, metalurgia, el acero inoxidable, la producción de tintes y pigmentos, la tinta de impresión y los textiles [5] [6] [7].

En busca de la protección del medio ambiente se han desarrollado diversas tecnologías como la precipitación química, la flotación e intercambio iónico, la filtración por membrana, la adsorción, la fotocatálisis, otros procesos de oxidación avanzada, la electrocoagulación, la remediación biológica y los procesos bioquímicos [8]. Uno de los procesos más estudiado y usado para el tratamiento del cromo hexavalente Cr(VI) es la adsorción, esto es debido a su alta eficiencia, bajo costo, alta capacidad de regeneración y fácil operación. La adsorción se considera como una de las tecnologías más prometedoras de eliminación de cromo hexavalente de medios acuosos incluso a bajas concentraciones. La adsorción con alúmina ha sido muy utilizada para el tratamiento del agua ya que es un material no tóxico y de bajo costo, con poros uniformes, área superficial alta y distribución estrecha del tamaño de poro, abundantes grupos funcionales superficiales y estabilidad térmica [9].

El análisis computacional de fluidos CFD es una herramienta poderosa para estudiar el proceso de adsorción en columnas empacadas. En cuanto a las simulaciones del lecho empacado, existen dos metodologías: el modelo de medios porosos y el modelo con resolución de partículas. El modelo de medios porosos puede predecir el patrón de flujo promedio, la transferencia de masa y el curso de la reacción dentro de un lecho empacado de tamaño macro [10] [11]. El modelo más utilizado es de medios porosos, ya que con esta metodología se pueden reducir costos de producción y experimentación. En este estudio se analiza el proceso de adsorción de cromo hexavalente Cr(VI) en alúmina dentro de una columna de lecho fijo utilizando técnicas de CFD con el uso del software ANSYS Fluent. Se obtendrán resultados como datos numéricos y gráficos de colores para una comprensión adecuada de la hidrodinámica en una esfera de alúmina, el transporte de masa y la reacción química involucrada.

Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones fundamentales que rigen la dinámica de fluidos son las ecuaciones de masa, momento y energía. La ecuación de conservación de masa establece que la masa no se crea ni se destruye. La ecuación de conservación de momento establece que la tasa de cambio del momento es igual a la suma de las fuerzas sobre una partícula de fluido, y se describe mediante la segunda ley de Newton. La ecuación de conservación de energía establece que la tasa de cambio de energía es igual a la tasa de cambio de la adición de calor y el trabajo realizado sobre una partícula de fluido, y es la primera ley de la termodinámica. Estas ecuaciones se definen como:

Masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (1)$$

Momentum

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2)$$

Energía

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}(\rho e_t + p)] = -\nabla \left[\sum_j h_j J_j \right] + S_h \quad (3)$$

donde ρ es la densidad, v el vector velocidad, g es la gravedad y S_m es un término fuente, e_t es la energía interna total, h_j entalpia de especies, J_j es el flux masico y S_h es el término fuente de generación de energía.

Modelado de turbulencia

(Modelo $k-\varepsilon$ Estándar)

La turbulencia es uno de los fenómenos más complejos en un lecho adsorbente ya que los flujos turbulentos son extremadamente sensibles a pequeñas perturbaciones, por lo que carecen de repetibilidad. Además, la turbulencia puede interactuar con el flujo de fluidos no turbulentos y puede aparecer de forma intermitente en un punto determinado. La ecuación utilizada en este estudio es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\kappa) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\kappa u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{(\Pr_t)_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho\varepsilon + S_\kappa \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{(\Pr_t)_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} + S_\varepsilon \quad (5)$$

donde G_k representa la generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes de velocidad, G_b es la generación de energía cinética turbulenta debido a la flotabilidad, $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ son constantes y S_κ y S_ε son funciones definidas por el usuario. La viscosidad turbulenta (remolino), μ_t , es calculada combinando k y ε .

Flujo en medio poroso

Los medios porosos son estudiados como resistencias al flujo distribuidas en el fluido, por lo tanto, el medio poroso actúa sobre el fluido que fluye a través de él y sus ecuaciones se definen como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) + S_i \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i H}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}(u_j (\tau_{ij} + \tau_{ij}^R) + q_i) + \frac{\partial p}{\partial t} - \tau_{ij}^R + \rho\varepsilon + S_i u_i + Q_H \quad (8)$$

donde u es la velocidad del fluido, ρ es la densidad del fluido, S_i es una fuerza externa distribuida en masa por unidad de masa debido a una resistencia de un medio poroso, τ_{ij} es el tensor de esfuerzo cortante viscoso, Q_H es el flujo de calor difusivo.

Metodología

Dominio computacional

Se generó el modelo utilizando el diseño asistido por computadora CAD, que consta de un cilindro por donde pasa el flujo de la solución acuosa, en la parte central de colocó una esfera de aluminio, que es el medio poroso donde se adsorberá el cromo hexavalente Cr(VI). La columna tiene un radio de 0.025 m y una altura de 0.1 m, su volumen es de 1.95 e-04 m³, la esfera tiene un radio de 0.005 m, con un volumen de 5.236 e-07 m³ y un área superficial externa de 3.14 e-04 m². La Figura 1 muestra una imagen del modelo computacional.

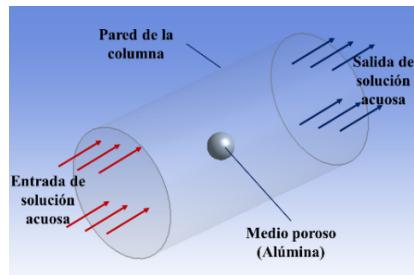


Figura 1. Diseño en CAD de la columna de adsorción.

El modelo en CAD se malló, obteniendo 8976 nodos y 45076 volúmenes de control, los cuales son de forma tetraédrica. La Figura 2a muestra la columna mallada, mientras que la esfera de alúmina mallada se muestra en la Figura 2b, donde se presenta, además, un corte para apreciar el malleo interior de la esfera.

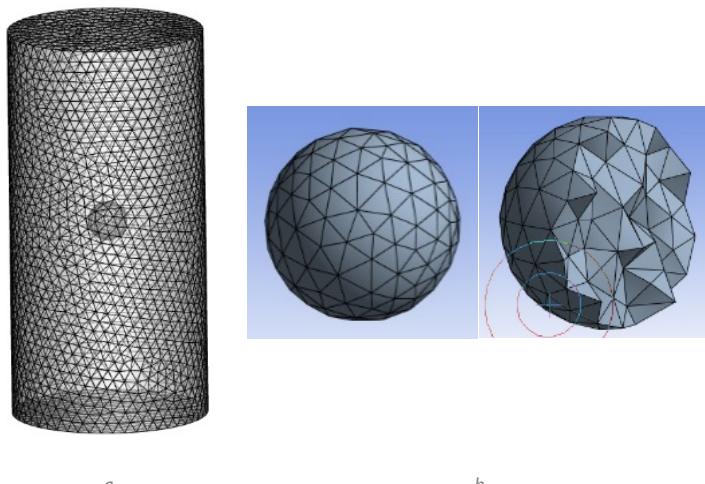


Figura 2. Modelo mallado. a) columna y b) esfera de alúmina.

La esfera de alúmina es tratada como un medio poroso, el cual es atravesado por el flujo de la solución acuosa. Las condiciones iniciales fueron tomadas de datos experimentales, [12] y se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Condiciones iniciales.

Condiciones de operación	
Flujo de operación [mg/cm ³]	6
Densidad de los aglomerados de alúmina [mg/cm ³]	1.25
Diámetro interno de la columna [cm]	6.2
Porosidad de lecho	0.25
Porosidad de la partícula	0.35
Altura rellena de la columna [cm]	20
Ecuación de Langmuir	$q = \frac{0.1436C}{1 + 0.0203C}$

El modelo viscoso utilizado fue el $k-\epsilon$ estándar, mediante el cual se modela la turbulencia provocada por el flujo. El Reynolds del flujo es 0.002, lo que significa que el flujo será laminar o presentará poca turbulencia. Las fases se modelaron mediante un modelo euleriano con volumen de fracción implícita. El transporte de masa se llevó a cabo con el modelo Species Transport. Las ecuaciones gobernantes se acoplaron mediante un esquema Phase Coupled SIMPLE y la presión fue discretizada mediante el modelo PRESTO. El proceso de simulación fue realizado en estado transitorio para un tiempo de 2 s de tiempo real, con espacio temporales de 0.01 s.

Resultados

La modelación matemática tiene como objeto realizar la descripción cuantitativa basada en modelos matemáticos que representan el proceso de adsorción. Estos modelos pueden estar basados en leyes y principios o en correlaciones obtenida de forma experimental. La eficiencia de los resultados obtenidos por simulación depende de factores como el tipo de mallado, el orden de los métodos de discretización, las condiciones iniciales proporcionadas al software, entre otros.

La adsorción es un fenómeno físico-químico de transferencia de masa en el cual, un soluto es removido de una fase líquida y se acumula en la superficie en fase sólida. Los adsorbatos son componentes que se enlazan en la superficie y son la sustancia que adsorbe el contaminante. Una columna de adsorción sirve para remover compuestos de una corriente líquida (adsorbatos) sobre algún material adsorbente. En este trabajo de investigación se realizó la simulación de la remoción de cromo hexavalente Cr(VI) sobre alúmina. El análisis fue llevado a cabo sobre una sola esfera de alúmina sobre la cual pasa el flujo de una solución acuosa que contiene cromo.

Análisis hidrodinámico

La columna de adsorción es alimentada por la parte inferior, la solución asciende hasta llegar a la mitad de la columna donde se encuentra la esfera de alúmina. Parte del flujo es desviado rodeando la esfera y genera turbulencia en la parte lateral de la columna a la altura de la esfera (Figura 3a), y al superar esta altura, su ascenso no presenta turbulencia. Las líneas de corriente laterales ascienden de forma casi lineal.

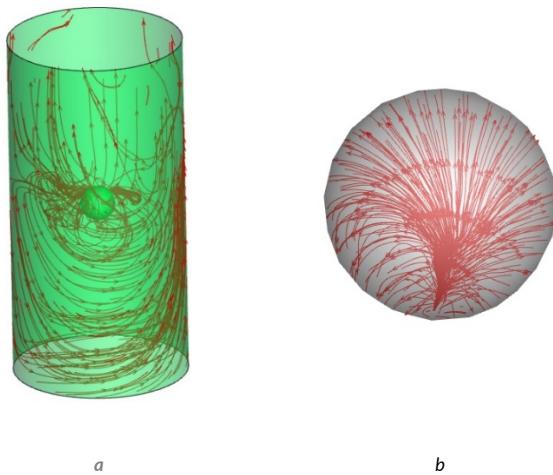


Figura 3. a) líneas de corriente en la columna de adsorción, b) líneas de corriente dentro de la alúmina.

La Figura 3b muestra una imagen de las líneas de corriente dentro de la esfera de alúmina. La solución acuosa atraviesa la pared de la alúmina y entra en todas las direcciones. De igual forma las líneas de corriente muestran que el fluido sale del medio poroso hacia todas las direcciones. En la parte inferior de la columna se presenta una mayor concentración de líneas de corriente, esto debido a que el flujo choca de frente en esta zona, lo que genera que entre más solución acuosa. Por la parte lateral ingresa menos solución ya que las corrientes son desviadas y pasan de forma tangencial a la esfera.

Análisis de la transferencia de masa

La eficiencia de la transferencia de masa depende directamente de la interacción entre el adsorbente y al adsorbato, la superficie de contacto (exterior y porosidad), el tamaño de la alúmina, el pH y el tiempo de residencia. En el proceso se analizó la transferencia de masa respecto al tiempo, considerando la transferencia de forma constante. La Figura 4 muestra imágenes del fenómeno de transferencia de cromo hexavalente Cr(VI) en solución hacia la esfera de alúmina. En un tiempo de cero segundos, la transferencia inicial hacia la alúmina aún no ha iniciado, por lo que la esfera se ve totalmente de color azul. El fenómeno de transferencia de masa inicia su registro a los 0.5 s, esto se pude observar en la parte inferior de la esfera, donde el color tiene un viraje de azul fuerte a azul cielo, en este momento la masa transferida fue de 1.1415800E-10 kg, teniendo una acumulación de 2.6784800E-10 kg. A los 2 s de tiempo de transferencia de masa la esfera tiene un color verde limón en casi su totalidad, lo que significa que dentro de toda la esfera has partículas distribuidas de cromo hexavalente Cr(VI), la masa transferida fue de 6.227250E-09 kg y la masa acumulada a este tiempo fue de 2.7021728E-08 kg.

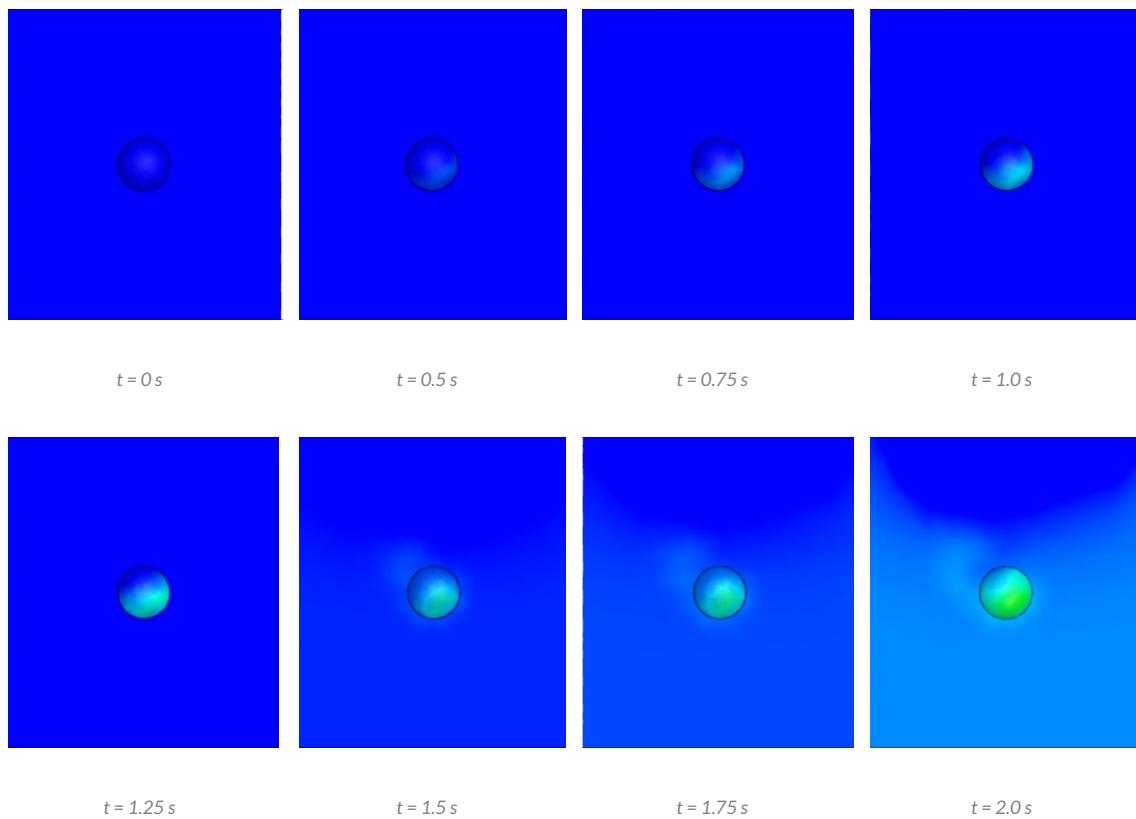


Figura 4. Contornos de transferencia de masa en la esfera de alúmina con avance temporal.

La Tabla 2 muestra la cantidad de masa transferida y de masa acumulada en función del tiempo.

Tabla 2. Masa transferida y masa acumulada en fusión del tiempo.

Tiempo [s]	Masa transferida [kg]	Masa acumulada [kg]
0		
0.5	1.1415800E-10	2.6784800E-10
0.75	8.018735E-10	2.2611975E-09
1	3.4442900E-10	3.5280890E-09
1.25	9.7406100E-10	5.5499485E-09
1.5	1.0567140E-10	8.4293050E-09
1.75	4.243825E-09	1.5132649E-08
2	6.227250E-09	2.7021728E-08

La cinética de adsorción describe la velocidad a la que la esfera de alúmina retiene cromo hexavalente Cr(VI) de la corriente de solución acuosa. Los resultados fueron graficados iniciando la simulación en espacios temporales de 0.001 s, con los cuales se obtuvo una fracción mísica de 2.7849E-11 dentro de la esfera de alúmina. La gráfica mostrada en la Figura 5 presenta la curva de transferencia de masa respecto al tiempo. Se pude observar que el punto de ruptura se presenta a los 0.5 s. Se realizó un modelo de ajuste el cual fue de cuarto orden. Además, se observan incrementos y decrementos en la transferencia de masa, los cuales se presentan por que la solución acuosa entra y sale de la esfera de alúmina.

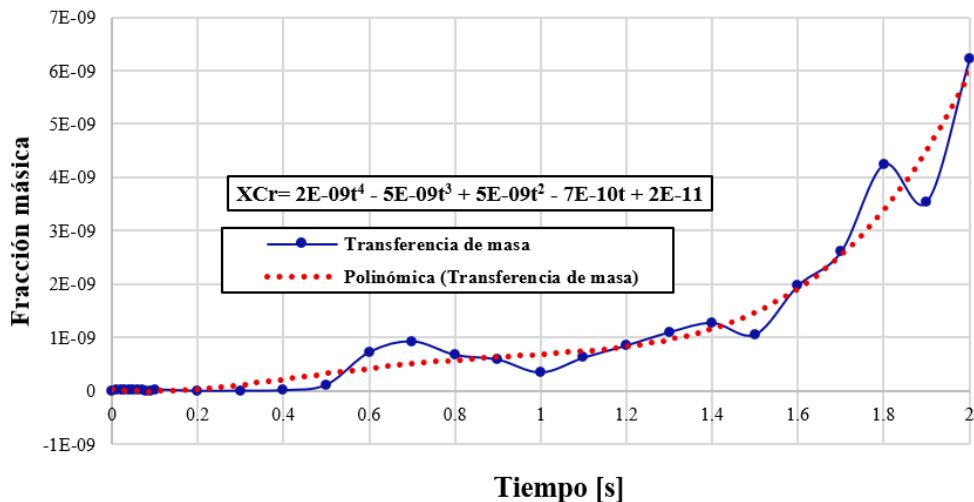


Figura 5. Gráfico de fracción mísica dentro de la alúmina contra tiempo [s].

Las partículas de cromo hexavalente Cr(VI) que no se depositan en la superficie de la alúmina salen de allá por los canales formados en el medio poroso. Las partículas depositadas se van acumulando dentro de la esfera y sobre la superficie, esta acumulación es medida y se presenta en forma gráfica en la Figura 6. El grafico muestra un crecimiento polinómico, el cual se ajusta de forma adecuada con una ecuación de cuarto orden. El máximo de cromo hexavalente Cr(VI) acumulado dentro de la esfera de alúmina fue de 2.7944 E-08 Kg, teniendo un promedio de masa transferida de 9.0072 E-10 kg. La esfera de alúmina no alcanza el grado de saturación, esto es porque la transferencia ocurre de forma lenta y porque entra y sale solución acuosa de la esfera. Estos resultados muestran que la alúmina tiene buena capacidad de remoción de cromo hexavalente Cr(VI) en medio acuoso y esto la hace un material adecuado para tratamientos de efluentes industriales primarios contaminados con este metal pesado.

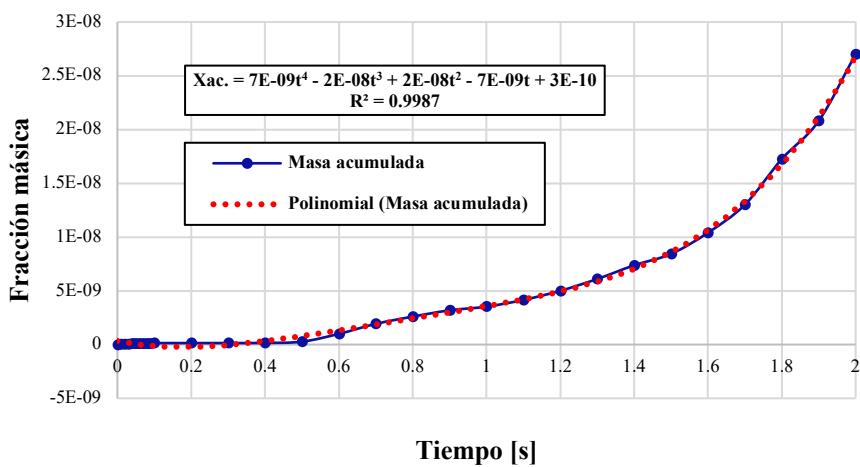


Figura 6. Gráfico de masa acumulada [Kg] contra tiempo [s].

La Figura 7a muestra los contornos de fracción mäsica, en los cuales se puede apreciar que la solución acuosa cruza hacia ambos lados de la esfera de alúmina. La fracción mäsica acumulada dentro de la esfera de alúmina se presenta en la Figura 7b, donde se observa que se acumula más cantidad de cromo hexavalente Cr(VI) en la parte inferior, esto se debe a que la esfera tiene contacto primero con la parte inferior de la esfera y por la parte de arriba hay más salida de flujo de solución acuosa.

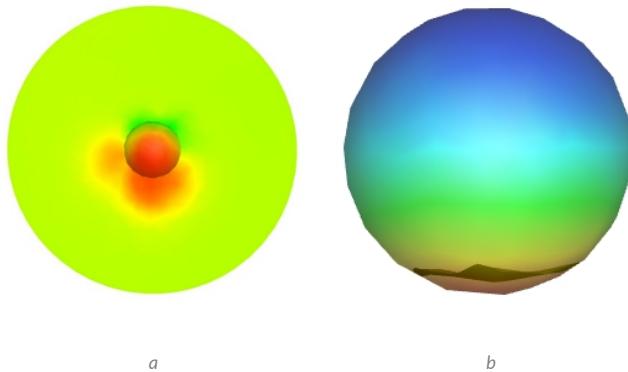


Figura 7. Gráfico de masa acumulada [Kg] contra tiempo [s].

Conclusiones

El proceso de adsorción es utilizado en gran medida por varias industrias para eliminar metales pesados, aunque existen diferentes materiales orgánicos utilizados en la remoción de cromo hexavalente Cr(VI) en solución, la alúmina presenta buenos resultados, por lo que es una opción viable para tratamiento de efluentes industriales primarios, aguas residuales primarias en las industrias.

La hidrodinámica presentada en el análisis por simulación muestra que el flujo de solución acuosa se distribuye por todo el interior de la esfera. Esto da oportunidad a que la área superficial de contacto entre adsorbente y adsorbato sea mayor y por lo tanto la remisión del cromo hexavalente Cr(VI) también sea mayor. El análisis computacional de fluidos CFD permite conocer la forma en que la masa se transfiere dentro de la esfera de alúmina y estos resultados podrían ser utilizados para analizar columnas empacadas.

La cantidad de masa transferida promedio fue de 9.0072 E-10 kg, acumulándose 2.7944 E-08 Kg en un tiempo de 2 s de simulación. No se alcanza la saturación de la alúmina y se tiene mayor concentración de cromo hexavalente Cr(VI) en la parte inferior de la esfera de alúmina. La transferencia de masa se da en todas direcciones y entra y sale de la esfera de la alúmina.

Bibliografía/Referencias

- [1] Zamora-Ledezma, C., Negrete-Bolagay, D., Figueroa, F., Zamora-Ledezma, E., Ni, M., Alexis, F., & Guerrero, V.H. (2021). Heavy metal water pollution: a fresh look about hazards, novel and conventional remediation methods. *Environmental Technology & Innovation*, 22, 101504. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2021.101504>
- [2] Hong-Giang, H., Chow-Feng, C., Chitsan, L., Cheng-Yen, W., Chia-Wei, L., Nicholas, K. C., Huu-Tuan, T., & Xuan-Thanh, B. (2021). Human health risk simulation and assessment of heavy metal contamination in a river affected by industrial activities. *Environmental Pollution*, 285, 117414. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.117414>
- [3] Alvarez, C. C., Bravo Gómez, M. E., & Hernández Zavala, A. (2021). Hexavalent chromium: regulation and health effects. *Journal of Trace elements in Medicine and Biology*, 65, 126729. <https://doi.org/10.1016/j.jtemb.2021.126729>
- [4] Wise, J. P., Young, J. L., Cai, J., & Cai, L. (2022). Current understanding of hexavalent chromium [Cr(VI)] neurotoxicity and new perspectives. *Environment International*, 158, 106877. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2021.106877>
- [5] Ao, M., Chen, X., Deng, T., Sun, S., Tang, Y., Morel, J. L., Qiu, R., & Wang S. (2022). Chromium biogeochemical behaviour in soil-plant systems and remediation strategies: A critical review. *Journal of Hazardous Materials*, 424, Part A, 127233. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.127233>
- [6] Iyer, M., Anand, U., Thiruvenkataswamy, S., Suresh-Babu, H. W., Narayanasamy, A., Prajapati, V. K., Tiwari, C. K., Valsala-Gopalakrishnan, A., Bontempi, E., Sonne, C., Barceló, D., & Vellingiri, B. (2023). A review of chromium (Cr) epigenetic toxicity and health hazards. *Science of The Total Environment*, 882, 163483. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.163483>
- [7] Czupryński, P., Plotka, M., Glamowski, P., Żukowski, W., & Bajda, T. (2022). An assessment of an ion exchange resin system for the removal and recovery of Ni, Hg, and Cr from wet flue gas desulphurization wastewater—a pilot study. *Royal Society of Chemistry Advances*, 12(9), 5145-5156. <https://doi.org/10.1039/d1ra09426b>
- [8] Ostovar, S., Moussavi, G., Tavakoli, T., Marin, M. L., Bosca, F., & Giannakis, S. (2025). Reductive adsorption capabilities of Cr(VI) from contaminated water with spinel structured γ Al₂O₃-Aerogel granules. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 13(3), 116605. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.116605>
- [9] Xu, X., Yu, Q., Lv, Z., Song, J., & He, M. (2018). Synthesis of high-surface-area rod-like alumina materials with enhanced Cr(VI) removal efficiency. *Microporous and Mesoporous Materials*, 262(15), 140-147. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2016.12.002>
- [10] Wu, J., Wei, Y., Li, S., Zhou, J., & Xu, Z. (2023). Computational fluid dynamics simulation and the experimental verification of protein adsorption on a hollow fiber membranes module. *Journal of Chromatography A*, 1687, 463706. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2022.463706>
- [11] Shi, H., Zong, H., Zhao, L., & Dai, G. (2024). Flow and mass transfer for the adsorption separation of para-xylene in a packed bed by particle-resolved CFD simulations. *Chemical Engineering Science*, 285, 119622. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119622>
- [12] Rubio-Campos, B. E. (2006). Modelo de adsorción de Cromo (VI) en una columna de aglomerados de alúmina modificada. Tesis de Maestría. Universidad de Guanajuato.