

Simulación de una columna de lecho fijo para la remoción de cromo VI

Simulation of a fixed bed column for the removal of chromium VI

Beatriz Eugenia Rubio Campos¹, Iris Violeta Hernández Cervantes², Edilberto Murrieta Luna³, Brenda Marlene Ibarra Rivera⁴, Luis Ángel Pérez Sandoval⁵, Jesús Abelardo Razo Solís¹, Daniela Andrea González Cruz¹, André Paolo Sandoval Gallegos¹, Devany Valeria López Rodríguez⁶.

¹ Escuela de Nivel Medio Superior de Guanajuato, Colegio de Nivel Medio Superior, Universidad de Guanajuato.
be.rubiocampos@ugto.mx

² División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato.

³ Universidad Politécnica de Juventino Rosas.

⁴ División de Ciencias Naturales y Exactas, Licenciatura en Químico Farmacéutico Biólogo, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato.

⁵ División de Ciencias Naturales y Exactas, Licenciatura en Ingeniería Química, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato.

⁶ División de Derecho, Política y Gobierno. Licenciatura en Derecho. Universidad de Guanajuato.

Resumen

En este trabajo se presenta la simulación hidrodinámica de una columna de adsorción de lecho fijo mediante el uso del software comercial de Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). Un adsorbedor por lote fue tomado como caso de estudio. La zona empacada se considera rellena de partículas de café distribuidas uniformemente, del mismo tamaño y forma, y los efectos de la pared son despreciables. Los resultados obtenidos se reportan en forma de perfiles de velocidad, líneas de corriente y contornos de fases. La zona empacada al interior de la columna incrementa la caída de presión y genera cambios en la dirección de la velocidad del flujo ascendente. El número de Reynolds calculado de 497 corresponde a un flujo laminar, pero cuando la solución hace contacto con la superficie del lecho fijo se generan remolinos. Una vez penetrada esta superficie el ascenso es uniforme y casi lineal. Este tipo de flujo es conveniente ya que se pretende que el tiempo de residencia del adsorbente y el adsorbato sea lo suficientemente grande para que se realice de forma efectiva la transferencia de masa.

Abstract

This work presents the hydrodynamic simulation of a fixed bed adsorption column using the commercial software of Computational Fluid Dynamics (CFD). A batch adsorber was taken as a case study. The packed zone is considered filled with uniformly distributed coffee particles of the same size and shape, and the wall effects are negligible. The results obtained are presented in the form of velocity profiles, path lines, and phase contours. The packed zone inside the column increases the pressure drop and generates changes in the direction of the upward flow rate. The calculated Reynolds number of 497 corresponds to a laminar flow, but when the solution makes contact with the surface of the fixed bed, eddies are generated. Once this surface is penetrated, the rise is uniform and almost linear. This type of flow is convenient since the residence time of the adsorbent and adsorbate is intended to be large enough for mass transfer to occur effectively.

Palabras clave: CFD, hidrodinámica, lecho fijo, CFD, adsorción.

Introducción

La adsorción es un proceso de mucha importancia que se usa en la separación contaminantes en la industria química. Una de sus principales aplicaciones es el tratamiento de aguas [1], [2], [3]. Por esta razón, el desarrollo de nuevo materiales y la búsqueda de materiales naturales para este proceso, genera un área de oportunidad que continúa siendo muy explorada. El realizar caracterizaciones de materiales adsorbentes requiere de análisis de datos de sus propiedades cinéticas que son dependientes de muchos factores experimentales y de la determinación de equilibrio, que se puede describir con la isoterma de adsorción (por lotes) [4].

La mayoría de los procesos industriales trabajan de forma continua, por lo que es muy común realizar el proceso de adsorción en columna de lecho fijo que operan de forma continua o semicontinua. Las columnas de lecho fijo funcionan de manera que la disolución ingresa de forma continua, por lo que no funciona bajo condiciones de equilibrio. Es decir, la transferencia de masa entre la fase móvil y la fase sólida es permanente [5]. La interpretación teórica de este fenómeno es compleja, pues siempre se genera una competencia entre soluto-disolvente o soluto-soluto para adsorberse en los sitios aceptores de la superficie sólida [6], [7]. Para garantizar la máxima efectividad del proceso de adsorción, es importante conocer la hidrodinámica de la columna y determinar cómo afectan al proceso de transferencia de masa entre el adsorbente y el adsorbato [8]. La transferencia de masa incluye tanto el flujo de fluido como las operaciones de la unidad de separación. La fuerza impulsora de la transferencia de masa es diferente en concentración. El movimiento aleatorio de las moléculas provoca una transferencia neta de masa desde el área de alta concentración al área de baja concentración [9], [10].

El objetivo del presente artículo es proporcionar un análisis hidrodinámico de una columna de adsorción de lecho fijo. El análisis se llevó a cabo utilizando técnicas de Dinámica Computacional de Fluidos (CFD), con la que se podrán determinar los patrones de flujo mediante la obtención de datos numéricos y gráficos de colores de líneas de corriente, flujo másico, turbulencia y vectores de velocidad.

Caída de presión y Número de Reynolds

La ecuación de Ergun predice la caída de presión en este tipo de columnas de forma satisfactoria. Esta expresión es una función del diámetro de la partícula, la longitud y porosidad del lecho fijo, la viscosidad del fluido y la velocidad del flujo.

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu u^+}{(d_p \varepsilon)^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\rho (u^+)^2}{\Phi_s d_p} \quad (1)$$

Donde ΔP = Pérdida de presión manométrica [N/m²], L = altura del lecho [m], ε = Razón de volumen líquido a volumen total o porosidad del lecho, μ = viscosidad del fluido [kg/m*s], U^+ = Velocidad de flujo [m/s], d_p = Diámetro de la partícula [m], ρ = densidad [kg/m³] y Φ_s = factor de esfericidad

Esta expresión está basada en la condición de que el material del lecho está uniformemente distribuido y no existe irregularidad en el flujo a través del lecho. También supone que el diámetro de la partícula del empaque es pequeño con relación al diámetro de la columna y que este último es constante.

El número de Reynolds es utilizado para determinar el tipo de flujo que se presenta en la columna, y se calcula mediante la siguiente expresión:

$$Re = \frac{v d_p \rho}{\mu} \quad (2)$$

Ecuaciones gobernantes

El estudio de la hidrodinámica de columna de adsorción se realizó mediante el modelo Euleriano-Euleriano. Se supone que el fluido en cuestión es newtoniano. Las fases son tratadas como un medio continuo interpenetrado, el cual se representa mediante la fracción de volumen de las fases involucradas. Las ecuaciones que gobiernan el sistema son la ecuación de continuidad, momentum y ecuaciones de turbulencia.

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 u) = 0 \quad (3)$$

Ecuación de conservación de momentum

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 u) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 u u) = -\nabla p + \nabla \cdot (\alpha_1 \mu_1 \nabla u) + \rho_1 \alpha_1 g - S \quad (4)$$

Donde se refiere a la fase líquida 1, α es la fracción de volumen y S es el término fuente de la interacción líquido-partícula.

Metodología

El modelo de la columna de adsorción diseñado está basado en el modelo original, tiene un volumen total de $3.81e-04 \text{ m}^3$ y la zona de empacamiento tiene un volumen de $1.90e-04 \text{ m}^3$, este modelo es mostrado en la Figura 1a. La altura total es de 0.19 m con un diámetro de 0.05 m, la solución acuosa se alimenta por la parte inferior donde la entrada tiene un diámetro de 0.01 m, similar a la salida. Las partículas de café tienen un diámetro de 5 e-5 m. El fluido alimentado es agua a temperatura ambiente.

El modelo se realizó en CAD mediante el uso del software DESIGNMODELER de ANSYS y se ajusta a las medidas de la columna original, la Figura 1b muestra una imagen del diseño. La columna diseñada en CAD se exportó al módulo de ANSYS MESHING donde se le acondicionaron las condiciones de frontera al modelo. La alimentación de fluido a la columna se realizó por la parte inferior mediante la condición de velocidad y la salida con condición de presión. Las caras internas que dividen la zona empacada (lecho fijo) fueron acondicionadas con la condición interna, el resto de las caras que forman la columna tiene la condición wall.

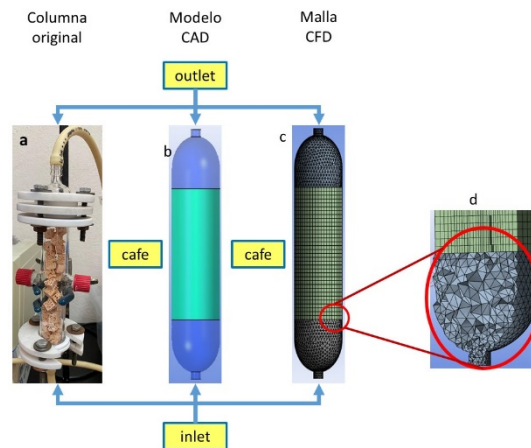


Figura 1. Columna de adsorción de lecho fijo. a) modelo original, b) modelo en CAD, c) modelo mallado y e) detalle de la malla.

El modelo mallado se muestra en la Figura 1c. La malla generada en el modelo fue estructurada en la parte central de la columna, donde tiene la forma de cilindro, generando volúmenes de control del tipo hexaédrico. Esta malla se acopla con la malla de la parte inferior y superior que tiene forma de medias esferas y están mallas con volúmenes de control del tipo tetraedros híbridos (Figura 1d). La independencia del tamaño de malla se aseguró refinando gradualmente la malla hasta que los resultados no fueran afectados. Se generaron 5 modelos en los cuales se realizaron mediciones de presión para 10 velocidades de alimentación, los cuales se muestran en la Figura 2.

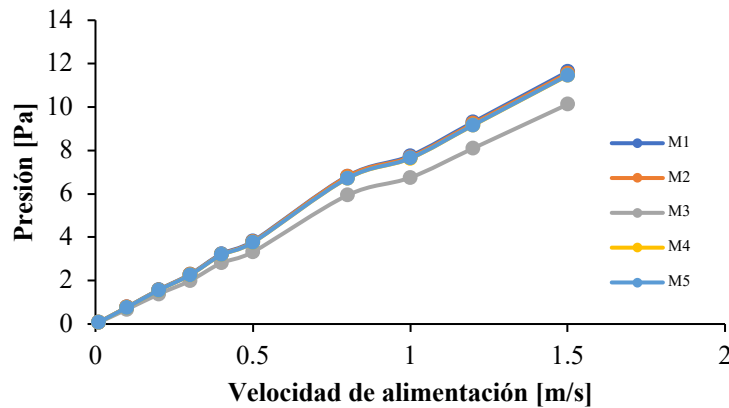


Figura 2. Gráfico de velocidad de alimentación [m/s] vs presión [Pa].

Se midieron los errores absolutos para determinar la malla a utilizar. La primera malla estuvo conformada de 11224 volúmenes de control, mientras que en la más refinada se generaron 271234. El modelo para utilizar consta de 75959 nodos y 134707 volúmenes de control y los errores calculados para esta malla fueron de 0.0013 error absoluto y 1.83 de error relativo, lo que hace que el modelo elegido sea confiable. Las simulaciones se llevaron a cabo bajo el régimen de estado estacionario con espacios temporales de 0.01 para 5000 iteraciones y la turbulencia fue simulada con el modelo de dos ecuaciones $k-\epsilon$.

Resultados y discusión

Caídas de presión

Las zonas empacadas dentro de una columna incrementan la caída de presión y en consecuencia cambios en la dirección de la velocidad del flujo ascendente. La Figura 3 muestra los contornos de presión, en la cual se observa que la presión es mayor en la parte inferior. El caso analizado se alimentó a una velocidad de 0.01 m/s, lo que generó un cambio de presión total de $7.5e-2$ Pa.

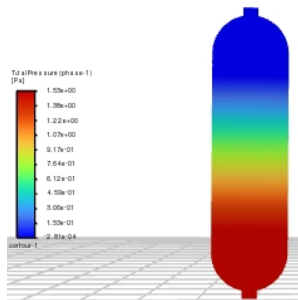


Figura 3. Contornos de presión.

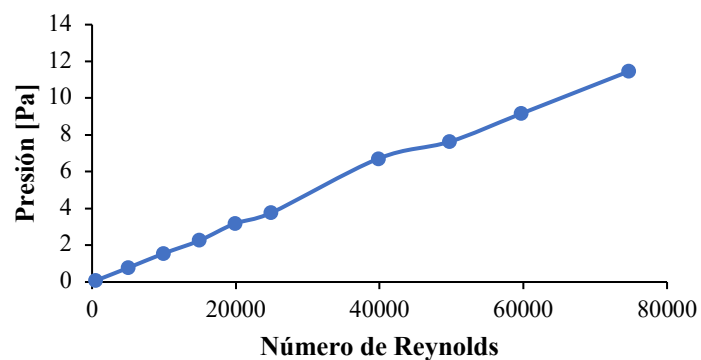


Figura 4. Gráfico de Número de Reynolds vs presión.

La presión calculada para la caída de presión en el lecho fijo mediante la ecuación de Ergun es de 5614 Pa para el caso analizado. Esto es debido a la resistencia de la solución alimentada a través de los huecos del lecho formado por las partículas de café molido, lo cual trae como consecuencia que se genere fricción entre todas las partículas del lecho. Esta fricción es el resultado de las fuerzas viscosas y las fuerzas de inercia.

Se graficó el número de Reynolds contra la Presión y se obtuvo que tiene una tendencia casi lineal para flujos laminares y turbulentos, pero presenta perturbaciones para flujos intermedios, este comportamiento se puede observar en la Figura 4. el número de Reynolds calculado para el caso analizado fue de 497, lo que indica que se estará trabajando bajo un régimen de flujo laminar. Este tipo de flujo es conveniente ya que se busca que el tiempo de residencia del adsorbente y el adsorbato sea lo suficientemente grande para que se realice de forma efectiva la transferencia de masa.

Contornos de fases

La Figura 5 muestra los contornos de fases en función del tiempo. La simulación se realizó con un espacio temporal de 0.1 s para 5000 iteraciones, generando un tiempo real de 500 s con lo que se asegura el llenado total de la columna. La velocidad de alimentación fue de 0.01 m/s (7.83×10^{-4} kg/s), lo cual significa que la columna se llena en un tiempo de 485 s (8 min). Para un tiempo de 5 s se ha llenado solo la boquilla de alimentación, mientras que para los 50 s de simulación se ha llenado la columna en su forma esférica. A los 250 s alcanza el borde de la zona de empacamiento, avanzando en forma gradual hasta alcanzar los 300 s, tiempo en el cual toca el fluido la superficie superior del lecho fijo. Se pudo analizar que la distribución de flujo presenta un ascenso de forma uniforme, tanto en la zona libre de partículas de café, tanto como en la zona empacada, lo que significa que durante la realización de pruebas no se presentaran zonas huecas que disminuyan el contacto entre la solución y el material adsorbente.

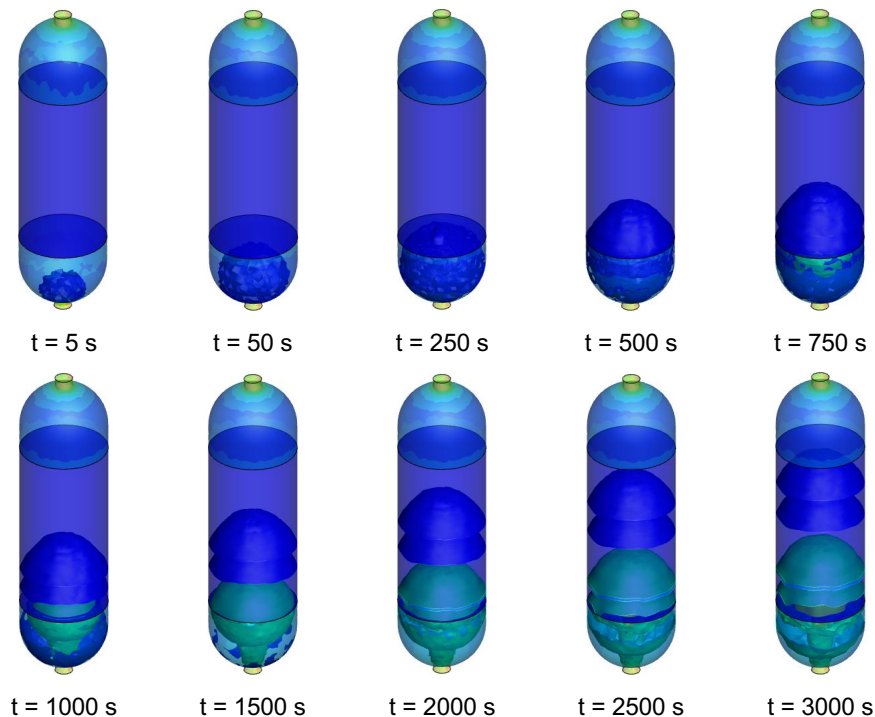


Figura 5. Contornos de fases.

Líneas de corriente

Las líneas de corriente se analizaron para determinar la forma en que se desarrolla el flujo dentro de la columna, las cuales son mostradas en la Figura 6. La Figura 6a muestra las líneas de corriente al inicio de la alimentación de solución por la parte inferior de la columna, donde se puede ver claramente la zona de alimentación ya que se representa de color rojo. La alimentación de fluido provoca movimiento en aire contenido en la columna.

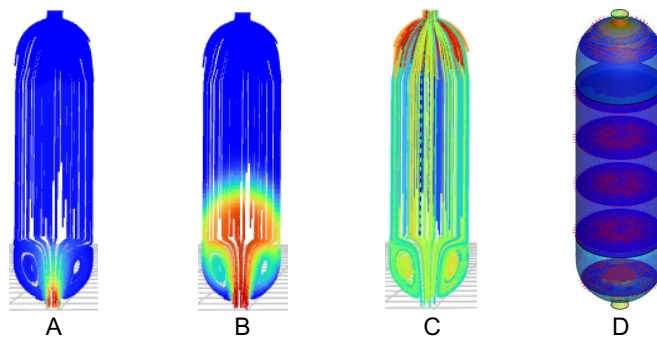


Figura 6. Líneas de corriente.

La Figura 6b es mostrada en un tiempo de simulación de 500 pasos. En la parte inferior de la columna se generan remolinos, esto debido al choque de las partículas de fluido con la interfase de la parte inferior del lecho fijo. para un tiempo de 5000 paso se graficaron las líneas de corriente, en las cuales se presentan remolinos en la parte inferior y en la parte empacada se muestra un flujo casi lineal, continuando así hasta la salida de la columna (Figura 6c). La Figura 6d muestra una imagen de 6 planos generados dentro de la columna, en los cuales se grafican los vectores de velocidad. Los planos muestran una distribución de las líneas de corriente las cuales tienden a orientarse de forma radial.

Conclusiones

Se generó la metodología para realizar la simulación de una columna de adsorción de lecho fijo. Se asumió que las partículas de café estaban distribuidas de manera uniforme, del mismo tamaño y forma y que los efectos de la pared son despreciables.

Se realizó el análisis de sensibilidad de malla obteniendo que se puede realizar simulación de forma confiable con una malla que consta de 134707 volúmenes de control con un error absoluto de 0.0013 y 1.83 de error relativo.

El número de Reynolds calculado para una velocidad de alimentación de 0.01 m/s fue de 497 y una presión total de 7.5×10^{-2} [Pa]. La caída de presión en la zona de empacamiento fue de 5614 [Pa] la cual es provocada por las fuerzas de fricción. El número de Reynolds calculado corresponde a un flujo laminar, pero cuando la solución hace contacto con la superficie del lecho fijo se generan remolinos, una vez penetrada esta superficie el ascenso de uniforme y casi lineal.

Agradecimientos

Agradecemos el apoyo brindado para la realización de esta investigación a la Dra. Rebeca Yasmín Pérez del Laboratorio de Servicios de Espectroscopía, Cromatografía y Calorimetría y Dra. Araceli Jacobo Azuara; ambas de la División de Ciencias Naturales y Exactas del Departamento de Química, por el apoyo brindado para el desarrollo de este proyecto. Con dedicatoria especial al Dr. Salvador Hernández Castro.

Bibliografía/Referencias

- [1] Juela, D., Vera, M., Cruzat, M., Alvarez, X., Vanegas, E., (2021), Mathematical modeling and numerical simulation of sulfamethoxazole adsorption onto sugarcane bagasse in a fixed-bed column. *Chemosphere*, 130687. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130687>
- [2] Alardhi, S.M., Albayati, T.M., Alrubaye, J.M., (2020), Adsorption of the methyl green dye pollutant from aqueous solution using mesoporous materials MCM-41 in a fixed-bed column, *Heliyon*, vol. 6, e03253. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03253>
- [3] Dela Quarme G., Hyun-Taek O., Dong-Hoon, O., Chang-Ha, L., Min, O., (2020), CFD simulation of a packed bed industrial absorber with interbed liquid distributors. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 95, 102983. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2020.102983>

- [4] B. Petkova, B., S. Tcholakova, S., N. Denkov, N., (2021), Foamability of surfactant solutions: Interplay between adsorption and hydrodynamic conditions. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol 626, 127009. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.127009>
- [5] Puhan, P., Awasthi, A., Mukherjee, A. K., & Atta, A., (2021), CFD modeling of segregation in binary solid-liquid fluidized beds: Influence of liquid viscosity and density, *Chemical Engineering Science*, vol. 246, 116965. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116965>
- [6] Fulazzaky, M.A., (2011), Determining the resistance of mass transfer for adsorption of the surfactants onto granular activated carbons from hydrodynamic column, *Chemical Engineering Journal*, vol. 166 pp. 832–840. doi: 10.1016/j.ces.2010.11.052
- [7] Finn, J.R., Galvin, J.E., Hornbostel, K., (2019). CFD investigation of CO₂ absorption/desorption by a fluidized bed of micro-encapsulated solvents. *Chemical Engineering Science*, vol. 6. <https://doi.org/10.1016/j.cesx.2019.100050>
- [8] Bruce, L.J., Chase, H.A., (2001), Hydrodynamics and adsorption behaviour within an expanded bed adsorption column studied using in-bed sampling, *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp. 3149–3162. doi: 10.1016/s0009-2509(00)00549-2
- [9] Douven, S., Paez, C.A., Gommès, C.J., (2015), The range of validity of sorption kinetic models, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 448, pp. 437–450. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcis.2015.02.053>
- [10] Nijssen, T.M.J., Padding, J.T., Ottens, M., (2023), Hydrodynamics of expanded bed adsorption studied through CFD-DEM, *Chemical Engineering Science*, vol.280 119027. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119027>