

Simulación de la adsorción de cromo hexavalente sobre biomasa de residuos de café en CFD

Simulation of hexavalent chromium adsorption onto coffee waste biomass using CFD.

Rubio Campos Beatriz Eugenia¹, Gamiño Arroyo Zeferino², Murrieta Escoto Samantha², Lugo Valadéz Mario Alberto², Novelo Esquivel Tare Ariel¹, Ramírez Luna Carlos Alberto Jorge¹, Ontiveros Mota Romel¹, Loyola Campos Gisela Guadalupe¹.

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, Departamento de Ingeniería Química, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato.

Resumen

En este trabajo se presenta la simulación de la adsorción de Cromo(VI) a partir de soluciones sintéticas, mediante el uso del software comercial de dinámica de fluidos computacional (CFD) AnsysFluent®. Un reactor de tanque agitado por lote fue tomado como caso de estudio. Dicho fue elaborado a partir de datos experimentales de estudios previos, considerando un sistema adiabático y transitorio con fluidos newtonianos. Se empleó el modelo $k-\epsilon$ para la determinación de la turbulencia dentro del reactor. Se presentan los resultados en función de los perfiles de las líneas de corriente y contornos de fase en función del tiempo. Así como, el cálculo para el número de Reynolds y número de Froude.

Palabras clave: adsorción; cromo hexavalente, residuo de café, CFD, ANSYS.

Introducción

Hoy en día, diversos estudios han buscado alternativas económicas para competir con el carbón activado como agente adsorbente, específicamente buscando materiales accesibles y de fácil preparación. Una de las alternativas ha sido el uso de subproductos agroindustriales generados por la agroindustria.

La agroindustria es una actividad que integra la producción primaria agrícola, pecuaria y forestal, el proceso de transformación, así como la comercialización del producto. Es decir, una actividad económica que combina el proceso productivo con el industrial para generar alimentos o materias primas semi-elaboradas destinadas al mercado.

La agroindustria genera residuos o subproductos de bajo costo y fácilmente disponibles como el bagazo del agave, la cáscara de plátano, la paja de cebada y las cáscaras de: la mandarina, el mango, el melón, la lima, la toronja y el arroz; la paja de avena, las cáscaras de coco, mazorca de maíz y el bagazo del azúcar.

En México, los subproductos agroindustriales se obtienen de cultivos que incluyen maíz, trigo, sorgo, frijol, arroz, soya, caña, cebada y cacahuate, mientras que dentro de los subproductos secundarios (los bagazos, tallos, semillas y paja) están también el algodón, cártamo, agave, maguey y café (Sandoval), et. al, 2023).

Estudios previos han mostrado que la biomasa de residuo de café (conocida como borra o cuncho de café) remueve metales pesados como el cromo (VI) a pH ácido y a una concentración inicial de 3 ppm en sistemas por lote. Actualmente, el uso de tecnologías de la Información y Comunicación (TIC's) como medios educativos es muy importante, ya que permiten analizar procesos reales. Estos procesos pueden ser representados por modelos matemáticos que al resolverse generan soluciones aproximadas, evitando el desperdicio de materiales y generando un ahorro temporal de recursos económicos. Uno de los software más completo y utilizado a nivel mundial es ANSYS Inc., el cual cuenta con una versión estudiantil. En este sentido, el propósito de este trabajo es simular el proceso de adsorción de cromo hexavalente sobre biomasa de residuos de café en sistemas por lote mediante el uso de la dinámica computacional de fluidos (CFD).

Dinámica de fluidos (CFD)

En las dos últimas décadas, se ha tenido un incremento en el uso de CFD para el diseño de múltiples productos y para realizar análisis en experimentos científicos [Paul y col. (2004), Zadhghfari y col. (2010)]. El desarrollo de algunos paquetes computacionales educativos basados en CFD, como ANSYS, ha permitido a los estudiantes de ingeniería el reforzar visualmente los conceptos de flujo de fluidos y transferencia de calor y masa por medio de laboratorios virtuales. CFD es una herramienta que permite la encontrar solución numérica a las ecuaciones de transporte por vía computacional. Mediante el uso de esta técnica se resuelven las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, masa y calor, en las que se encuentra presente la turbulencia, reacciones químicas, cambios de fase, etc. [Abdullah y Qasim (2021)]. Con CFD se puede generarse una gran cantidad de información que en la práctica no podría ser obtenida de forma experimental [Sommer y col (2021)]. CFD ha demostrado ofrecer resultados confiables en muchos problemas de flujo de fluidos. Los análisis de CFD aplicados a los reactores de tanques agitados son muy complejos, por lo que para su análisis solo se utilizaban correlaciones empíricas. En este trabajo se utilizó ANSYS Fluent V2023, el cual utiliza el método del volumen finito para la discretización del dominio físico.

La solución de las ecuaciones se realiza mediante técnicas de discretización (división del modelo en pates pequeñas) que permiten aproximar la solución de las ecuaciones mediante el uso de equipos de cómputo. En general, los pasos que se realizan resolver un modelo físico mediante CFD son los siguientes:

1. Definición de la geometría del problema.
2. Mallado de los modelos.
3. Determinación de las condiciones de frontera y límite.
4. Solución de las ecuaciones por métodos iterativos ya sea para estado estacionario o transitorio.
6. Análisis y visualización de las soluciones resultantes.

Ecuaciones de Navier-Stokes

La fase gaseosa y la fase líquida son tratadas como continuas y las ecuaciones de conservación de masa y momentum se resuelven para cada fase. Debido a que el volumen de una fase no puede ser ocupado por las otras dos fases, se utiliza el concepto de fracción de volumen, en el cual las funciones son continuas en el espacio y tiempo. Las ecuaciones de conservación para cada fase se derivan para obtener un sistema de ecuaciones, que tienen estructura similar para todas las fases. El sistema se resuelve bajo el régimen del modelo euleriano. Las ecuaciones son acopladas mediante el método phase Coupled SIMPLE. La ecuación de conservación de masa para cada fase se muestra en la ec. 1.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \alpha_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i) \quad (\text{ec. 1})$$

Donde α_i , ρ_i y \bar{U}_i representan la densidad, la fracción de volumen y la velocidad de la fase i. Se asume que las fases comparten el espacio en proporción a su volumen, de manera que el total de las fracciones suman un valor igual una unidad.

$$\alpha_g + \alpha_L = 1 \quad (\text{ec. 2})$$

La ecuación de momentum para la fase i se describe mediante la ec. 3.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \alpha_i \bar{U}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \bar{U}_i \bar{U}_i) = \alpha_i \nabla p + \nabla \cdot \tau_{eff_i} + \bar{R}_i + \bar{F}_i + \alpha_i \rho_i \bar{g} \quad (\text{ec. 3})$$

P es la presión compartida por ambas fases, g es la gravedad y R_i representa el intercambio de momentum en la interface, F_i representa las fuerzas de Coriolis y centrífuga τ representa el tensor de esfuerzos de Reynolds.

El modelo de turbulencia *k-e* estándar es utilizado para modelar el fenómeno de turbulencia, este se representa por las ec. 4 y ec. 5.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L \bar{U}_L) + \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \bar{U}_L \bar{U}_L) \\ & = \nabla \cdot \left(\alpha_L \frac{\mu_{t,L} \nabla \varepsilon_L}{\sigma k} \right) + \alpha_L G_{k,L} - \alpha_L \rho_L \varepsilon_L + \alpha_L \rho_L \Pi_{k,L} \end{aligned} \quad (\text{ec. 4})$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_L \alpha_L k_L \varepsilon_L) + \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \bar{U}_L \varepsilon_L) \\ & = \nabla \cdot \left(\alpha_L \frac{\mu_{t,L} \nabla \varepsilon_L}{\sigma \varepsilon} \right) + \alpha_L \frac{\varepsilon_L}{k_L} (C_{1\varepsilon} G_{k,L} - C_{2\varepsilon} \rho_L \varepsilon_L) + \alpha_L \rho_L \Pi_{\varepsilon,L} \end{aligned} \quad (\text{ec. 5})$$

En estas ecuaciones, G_k representa la generación de energía cinética turbulenta k_L de la fase líquida debido a los gradientes de la velocidad media, ε_L es la disipación de la energía cinética turbulenta. $\Pi_{k,L}$ y $\Pi_{\varepsilon,L}$ representan la influencia de la fase dispersa en la fase continua. $\mu_{t,L}$ es la viscosidad turbulenta, Los valores de las constantes son: $C_{1\varepsilon}$: 1,44, $C_{2\varepsilon}$: 1,92, C_μ : 0,09, σ_k : 1,00 y σ_ε : 1,30. σ_k y σ_ε representan el número de Prandtl turbulento para k y ε , respectivamente.

Adsorción

La adsorción es un proceso físico que se produce por interacciones débiles (fuerzas de van der Waals), lo que permite que partículas, moléculas o iones queden retenidos sobre la superficie del material. La sustancia que se adsorbe recibe el nombre de adsorbato y el material que se emplea para la adsorción es el adsorbente. La adsorción química o quimisorción se produce por la formación de enlaces (iónico o covalente), por lo que durante la quimisorción la superficie del adsorbente se modifica, dando lugar a un nuevo adsorbente.

Materiales y métodos

Determinación de la porosidad del café

Densidad real del café

Se tomó una muestra de residuo de café, previamente lavado y clasificado utilizando cribas de diferentes aberturas, el cual fue recolectado de una casa habitación de la ciudad de Guanajuato. Se dejó secar en un horno a 60°C durante 24 h. Para determinar la porosidad del material se utilizó un picnómetro, se lavó y secó (P_1) (Figura 1). En seguida se aforó con agua destilada y se registró la temperatura del agua en °C. Una vez que está aforado y limpio se registró el peso (P_2). Posteriormente, se vació el picnómetro y se dejó secar. Se colocaron 2 g de muestra dentro del picnómetro y se pesó (P_3). Se lleva hasta la mitad del volumen con agua destilada y se dejó reposar durante 20 horas a temperatura ambiente. Después de este tiempo se calentó a baño maría durante 1 hora a ebullición y se deja enfriar. Se saca del baño maría, se limpia cuidadosamente y se pesa (P_4).



Figura 1. Equipo utilizado para la determinación de la porosidad del residuo de café.

Se emplearon las siguientes ecuaciones:

$$V = (P_1 - P_2) - (P_4 - P_3) \quad (1)$$

$$D = \frac{P_3 - P_1}{V} \quad (2)$$

donde D es la densidad real del residuo de café en g/mL y V el volumen del polvo en mL.

Densidad aparente del café

Para la determinación de la densidad aparente del residuo de café, se colocó una probeta de 50 mL previamente lavada y secada, se llevó a una balanza analítica y se registró su peso (P_5). Después se rellenó con residuo de café, dando golpes para lograr su máxima compactación y se pesó (P_6). Se realizó el cálculo para determinar la densidad de acuerdo con la ecuación:

$$D^* = \frac{P_6 - P_5}{V^*}$$

Donde D^* es la densidad aparente del polvo y V^* el volumen ocupado por el residuo de café.

Dimensiones del modelo

Para la simulación del modelo, se tomaron como base los datos experimentales de estudios previos (Rubio-Campos, 2022) en sistemas por lote, en el que se pusieron en contacto 0.25 g de residuo de café con 50 mL de solución de Cr(VI) 3ppm. El sistema se mantuvo en agitación a 380 rpm durante 60 minutos a temperatura ambiente. (Figura 1).

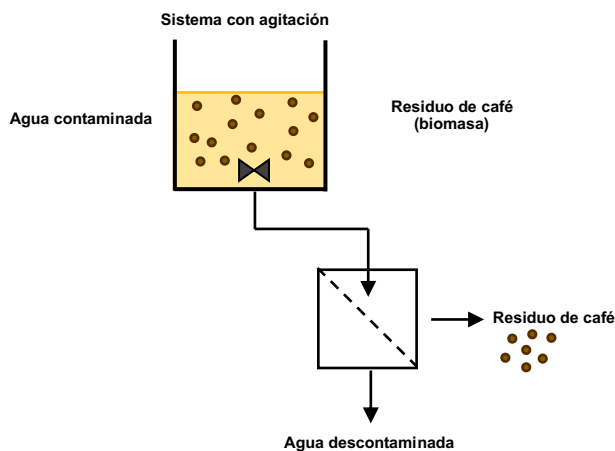
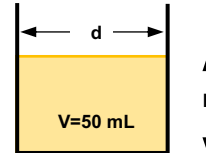


Figura 2. Representación esquemática de un sistema por lote.

Se consideraron las dimensiones del vaso de precipitados, la altura que ocupa la solución a tratar, tamaño de la partícula (residuo de café), densidad del café y porosidad, estos datos se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Datos experimentales para la simulación de la adsorción de cromo hexavalente sobre biomasa de residuo de café en sistemas por lote.

| | |
|---|---|
| Altura (h) | 2.6 cm |
| Diámetro interno del vaso (d) | 5 cm |
| Tamaño de la partícula (residuo de café) | 0.25 mm |
| Densidad del café | 0.1764 g/mL |
| Porosidad del residuo de café | 0.783 |
| Volumen de solución a tratar (V) | 50 mL |
| Concentración inicial de la solución a tratar | 3 ppm (mg/L) Cr(VI) |
| Velocidad de agitación | 380 rpm |
| Modelo de Langmuir | $q_L = \frac{0.2569C_e}{1 + 0.2743C_e}$ |



CFD para el tanque agitado

El modelo de vaso de precipitado a estudiar es de forma cilíndrica y tiene en la parte central inferior un agitador magnético. La parte superior está abierta a la atmosfera. La Figura 3 muestra una imagen del modelo del tanque diseñado en CAD (Diseño Asistido por Computadora). El dominio computacional de este modelo está basado en el modelo físico original, tiene una altura de 0.05 m, un diámetro de 0.05 m, la velocidad de agitación es de 320 rev/min y es llenado hasta 0.026 m de altura, con lo que se tiene un volumen de solución de 50 mL (Figura 4), estos datos juntos con las propiedades físicas del café el fueron calculadas mediante experimentos físicos, los cuales se usaron para realizar las simulaciones y determinar el mezclado.



Figura 3. Modelo en CAD del tanque agitado.

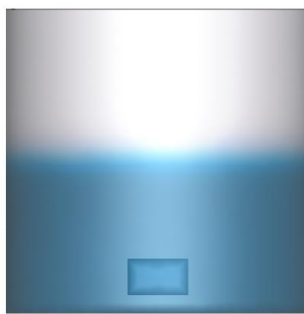


Figura 4. Modelo con 50 mL solución Cr(VI).

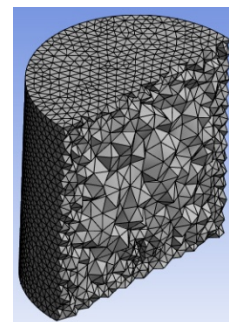


Figura 5. Modelo mallado.

Se utilizó el software ANSYS Fluent 2023 versión estudiantil para realizar generar la geometría y el mallado del reactor. La malla generada es del tipo tetraédrica híbrida constituida por 11256 nodos y 56280 volúmenes de control, esto se puede apreciar en la Figura 5, donde se aprecia la parte interna del mallado ya que se presenta el modelo con un corte longitudinal.

Los fluidos involucrados en el sistema se consideraron newtonianos, el sistema se considera adiabático y las fases generadas se modelaron con el modelo euleriano. El modelo k-ε fue utilizado para simular la turbulencia generada dentro del reactor. Las ecuaciones gobernantes se acoplaron mediante un esquema phase Coupled SIMPLE. Las ecuaciones fueron resueltas en estado transitorio

Resultados

Hidrodinámica del tanque agitado

Los tanques agitados promueven la homogeneización de fases y mejoran el contacto entre los reactivos, ayudando al proceso de adsorción a que se realice de forma eficiente. Estos tanques han sido diseñados de manera empírica, tomando en cuenta factores como la potencia requerida, esfuerzo, tiempo de mezclado y los patrones de flujo. Estos procesos ocurren de forma rápida, lo que dificulta la visualización del grado de homogeneización y la determinación del tiempo de mezclado. Mediante técnicas de CFD se puede analizar el mezclado en el interior del tanque agitado, determinando el espacio temporal deseado.

Las líneas de corriente muestran las trayectorias que siguen las partículas dentro de un fluido en movimiento, esto se puede apreciar en la Figura 6. El movimiento recirculatorio de la fase acuosa provoca que la interfase líquido-gas sea perturbada, provocando que la fase gas se mueva. Por esa razón, en la parte superior del reactor se parecían las líneas de corriente pertenecientes al aire. En la parte inferior se muestran las líneas de corriente de la mezcla (solución de Cr(VI)-café), las cuales presentan un movimiento browniano, esto es por que se graficaron cuando aun no se estabilizaba la agitación.

La Figura 7 muestra los contornos de fases del café, en ella se puede observar que se ha mezclado parcialmente la fase sólida con la fase acuosa. El movimiento rotacional del agitador provoca que las partículas sólidas se dispersen y tengan un movimiento recirculatorio. Las partículas de café chocan contra la pared del reactor debido a la fuerza centrífuga, lo que provoca que se concentren en la parte superior de la solución acuosa.



Figura 6. Líneas de corriente (café).

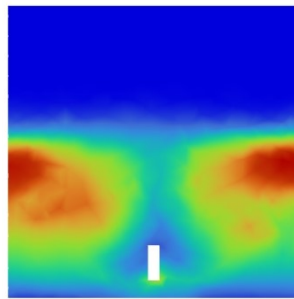


Figura 7. Contorno de fase.

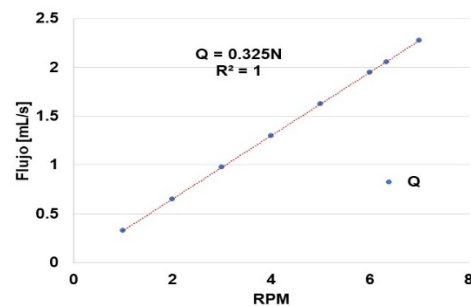


Figura 8. Gráfico velocidad vs flujo.

Número de Flujo

El número de flujo relaciona la potencia que consume el agitador con las fuerzas de inercia que se le induce al fluido. La Figura 8 muestra el gráfico de velocidad de agitación contra el flujo, observando que son directamente proporcionales, es decir, entre más se incremente la velocidad, más se incrementa el flujo, esto produce una buena recirculación interna del fluido, lo que finalmente se traduce en una buena distribución de las partículas de café en la solución de Cr(VI). Esta buena distribución garantizará que se tenga mayor contacto de los sólidos con el líquido y se incremente la adsorción.

Se diseñaron ocho casos de estudio para analizar el comportamiento de la mezcla dentro de vaso de precipitado. Para este análisis solo se tuvo como variable la velocidad de giro, ya que las concentraciones de la mezcla y el tamaño de las partículas sólidas se mantuvo constante. Las velocidades analizadas fueron de 1, 2, 3, 4, 5, 6, 6.3 y 7 rev/s. la velocidad propuesta para trabajar el tanque es de 6.3 rev/s. Con esta velocidad se tiene un buen mezclado y se generan las condiciones ideales para que se realice adecuadamente el

contacto entre la fase líquida y la sólida. La Figura 9a muestra una imagen de vaso de precipitado antes de iniciar la simulación, en ella se pueden apreciar las fases involucradas. Al iniciar el giro del agitador se inicia el movimiento de la solución de Cr (VI) y de café, generándose remolinos en todas las direcciones, tal como lo muestra la Figura 9b. El flujo tiende a estabilizarse y se genera un movimiento recirculatorio (Figura 9c), y así continuara hasta el momento en que se finalice la agitación. Se puede observar un vórtice en la parte central del tanque la formación de un vórtice, la cual coincide con el vórtice formado en el vaso de precipitado experimental.

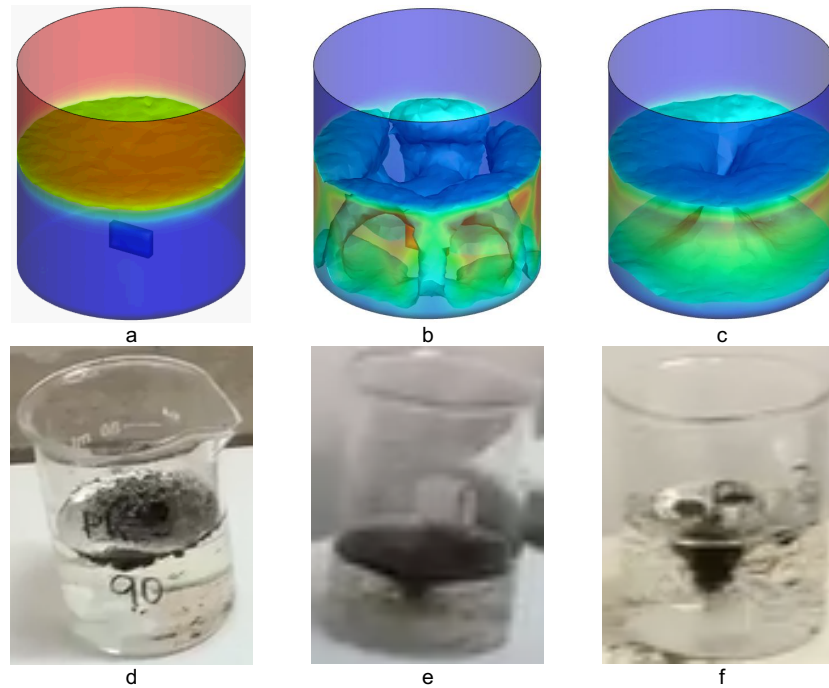


Figura 9. Contornos de fases con avance temporal. a) $t=0$, b) $t=0.625$ s, c) $t=1.25$ s y d, e y f) vaso de precipitados.

La Figura 9d, Figura 9e y Figura 9f muestran fotografías del vaso de precipitado agitándose, lo cual se usa como comparativo con los resultados de la simulación.

Número de Reynolds, número de Froude y Número de Potencia

El número de Reynolds calculado más bajo es de 99, lo que indica que si el agitador girar a 1 rev/s el flujo sería laminar. Para las velocidades 2 y 3 rev/s el flujo es intermedio. Para el resto de las velocidades el flujo es turbulento, y se forma un vórtice en la parte central del tanque.

La Figura 10 muestra el gráfico de número de Reynolds contra número de Froude, en ella se analiza que entre más grande es el número de Reynolds, más consumo de potencia se requiere, ya que este sistema no cuenta con deflectores. El número de Froude presenta valores que van desde los 1.09×10^{-3} , hasta 4.99×10^{-2} , lo que significa que las fuerzas de gravedad son más grandes que las fuerzas de inercia, pero las fuerzas de inercia son más grandes que las fuerzas viscosas, además, la densidad de las partículas de café es pequeña, lo que contribuye a que estas tiendan a dispersarse de forma homogénea por toda la solución de Cr(VI).

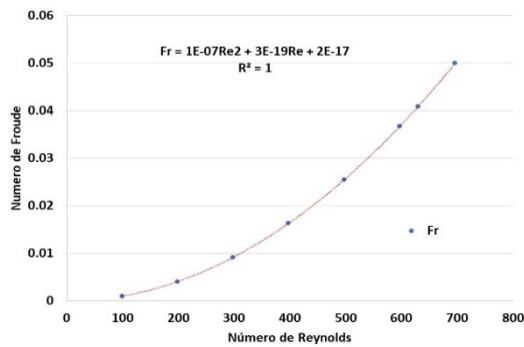


Figura 10. Número de Reynolds vs número de Froude.

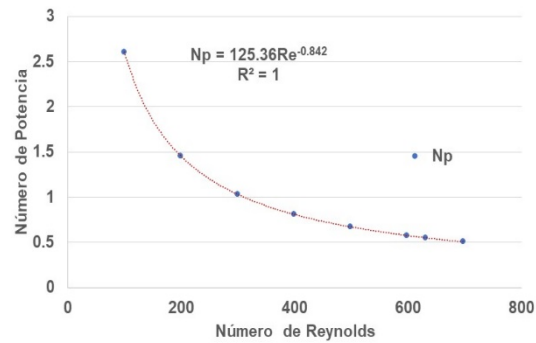


Figura 11. Número de Reynolds vs número de potencia.

El gráfico del número de Reynolds contra el número de potencia es presentado en la Figura 11, donde se puede analizar que tiene un comportamiento inverso, es decir, entre mayor es el número de Reynolds, menor es el número de potencia, teniendo la curva un comportamiento exponencial, tal como lo muestra la ecuación. El número de potencia indica la relación entre la fuerza de fricción que actúa sobre el agitador y las fuerzas de inercia, lo que se traduce en la potencia para mover el agitador, entre menos potencia se aplique, el movimiento del fluido será menor, mientras se incrementa la potencia, el movimiento del fluido es mayor, pasando de ser un flujo laminar a un flujo turbulento. Los valores del número de potencia van desde los 2.6 hasta 0.50

Conclusiones

En este trabajo se realizaron simulaciones multifásicas en un reactor de tanque agitado, el cual fue utilizado para realizar adsorción de Cr(VI) sobre partículas de café. El estudio hidrodinámico es muy importante ya que con él se pueden predecir los patrones de flujo, lo que involucra el movimiento de las partículas de café en la solución acuosa de Cr(VI). Mediante un buen mezclado se garantiza el mayor contacto entre los reactivos involucrados. Se analizaron diagramas de fases que muestran la distribución de las partículas del café, así como los números adimensionales que caracterizan un flujo realizado por agitación mecánica. Se obtuvieron resultados satisfactorios de la experimentación teórica realizada. Cabe mencionar la importancia del uso de la tecnología CFD para conocer o determinar el comportamiento de flujos de fluidos en tanque agitados.

Bibliografía/Referencias

- Abdullah, Mohd. Zamri; Qasim, Ali (2016). Parametric Analysis of Carbon Dioxide Adsorption on Nanoporous Activated Carbon Using Computational Approach. *Procedia Engineering*, Vol. 148, pp 1416–1422. doi:10.1016/j.proeng.2016.06.626
- A.-E. Sommer; H. Rox; P. Shi; K. Eckert; R. Rzehak; (2021). Solid-liquid flow in stirred tanks: “CFD-grade” experimental investigation. *Chemical Engineering Science*, vol. 245. doi: 10.1016/j.ces.2021.116743
- Edward L. Paul, Victor Atiemo-Obeng, Suzanne M. Kresta, (2004). *Handbook of Industrial Mixing*, New Jersey, John Wiley and Sons.
- R. Zadghaffari, J.S. Moghaddas, J. Revstedt, (2010). Large-eddy simulation of turbulent flow in a stirred tank driven by a Rushton turbine, Elsevier Ltd.
- Sánchez-Silva, J. M., González-Estrada, R. R., Blancas-Benitez, F. J. (2023). Utilización de subproductos agroindustriales para la bioadsorción de metales pesados. *Revista especializada en ciencias químico-biológicas*, 23.