

Predicción de las curvas de ruptura del sistema a fluoruro carbón de hueso mediante la aplicación de un modelo matemático basado en la dispersión axial.

Prediction Breakthrough-curves of the system fluoride bone char by applying a mathematical model based on axial dispersion.

Samuel Aguirre Contreras¹, Raúl Ocampo Pérez², Roberto Leyva Ramos³, Nahúm Andrés Medellín Castillo⁴

^{1,2,3}Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. Manuel Nava Martínez #6 Zona Universitaria, C.P. 78210, San Luis Potosí, México, ¹4444188425,

⁴Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. Manuel Nava Martínez #6 Zona Universitaria, C.P. 78210, San Luis Potosí, México

¹A237074@alumnos.uaslp.mx, ²raul.ocampo@uaslp.mx, ³rlr@uaslp.mx,
⁴nahum.medellin@uaslp.mx

Palabras Clave: Adsorción, Curvas de ruptura, Lecho fijo, Fluoruro, Carbón de hueso.

Key words: Adsorption, Breakthrough-curves, Fixed-bed, Fluoride, Bone-char.

INTRODUCCIÓN

El nivel de fluoruro es un factor fisicoquímico de importancia en la calidad del agua potable. Dependiendo de su concentración puede tener un efecto positivo o negativo para la salud humana. Cuando se encuentra a nivel de 0.5 mg/L ayuda a prevenir la caries dental, en cambio, cuando se encuentra a un nivel mayor de 1.5 mg/L perjudica la salud provocando fluorosis dental o incluso fluorosis esquelética. Es por esta razón que en los procesos de potabilización del agua se debe tratar la concentración de fluoruro. La adsorción ha sido aplicada para reducir el nivel de contaminantes en el agua, entre ellos el fluoruro. El diseño de adsorbedores requiere realizar estudios en las siguientes etapas: i) equilibrio de adsorción; ii) velocidad de adsorción; y iii) adsorción en régimen dinámico. Medellín-Castillo y col. (2007) estudiaron el equilibrio de adsorción de fluoruro en un carbón de hueso, en el cual se presentó la caracterización del carbonizado reportando las

propiedades de textura, fisicoquímicas y la composición química. También se estudió el efecto de la temperatura y pH sobre la capacidad de adsorción y se reportaron isothermas de adsorción. Leyva-Ramos y col. (2010) analizaron la velocidad de adsorción del fluoruro en el carbón de hueso y encontraron que la difusión intraparticular controla la velocidad global de adsorción mediante la difusión en el volumen de los poros. Leyva-Ramos y col. (2010) recomiendan usar un valor de tortuosidad de 2.1 en este sistema. Con base en lo anterior, el objetivo de este trabajo es predecir las curvas de ruptura del sistema fluoruro carbón de hueso en una columna de lecho fijo escala laboratorio mediante un modelo de dispersión axial.

METODOLOGÍA

Modelado de la columna de lecho fijo. El modelo fue desarrollado considerando dos fases en la columna de lecho fijo: la solución líquida y el adsorbente sólido (carbón de hueso). Además, el modelo considera la dispersión y convección axial a lo largo de la columna, el transporte externo al adsorbente y la difusión intraparticular en el adsorbente. Las suposiciones fueron las siguientes: i) el proceso es isotérmico; ii) la fase líquida es incompresible; iii) la velocidad es constante en la dirección radial y axial; iv) el gradiente de concentración radial del fluoruro en la fase líquida es despreciable; v) el coeficiente de dispersión axial en la fase líquida es constante; vi) el transporte del fluoruro entre la fase líquida alrededor de las partículas del adsorbente y la superficie externa de las partículas es cuantificado por un coeficiente de transferencia de masa externo; vii) las partículas del carbón de hueso son esféricas de tamaño uniforme y están empaquetadas uniformemente en la columna; viii) la concentración de fluoruro en el volumen de los poros y el fluoruro adsorbido en la superficie del carbón de hueso están en equilibrio local. Considerando las suposiciones anteriores y realizando un balance de masa del fluoruro en un elemento diferencial en la fase líquida en la columna obtenemos la siguiente ecuación:

$$\varepsilon \frac{\partial C_A}{\partial t} + (1-\varepsilon)\rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = -\varepsilon v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + \varepsilon D_z \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \quad (1)$$

El modelo anterior es conocido como el Modelo de Dispersión Axial (ADM). El segundo término de la ecuación (1) es la cantidad de fluoruro que se acumula en la fase sólida, la cual es igual a la cantidad de fluoruro que se transporta de la solución a la superficie externa del adsorbente:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = S k_L (C_A - C_p|_{r=R_p}) \quad (2)$$

La ecuación (1) está sujeta a las siguientes condiciones frontera:

$$t=0; \quad z \geq 0; \quad C_A = 0 \quad (3)$$

$$t \geq 0; \quad z=0; \quad C_A = C_{A0} \quad (4)$$

$$t \geq 0; \quad z=L_b; \quad \frac{\partial C_A}{\partial z} = 0 \quad (5)$$

La concentración de fluoruro en la superficie externa de la partícula es evaluada mediante la siguiente ecuación (6), la cual esta sujeta a las condiciones (7), (8) y (9).

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_p}{\partial t} + \rho_p \frac{\partial q_r}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \left(D_{ep} \frac{\partial C_p}{\partial r} \right) \right] \quad (6)$$

$$t=0; \quad 0 \leq r \leq R_p; \quad C_p = 0 \quad (7)$$

$$\left. \frac{\partial C_p}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (8)$$

$$D_{ep} \left. \frac{\partial C_p}{\partial r} \right|_{r=R_p} = k_L (C_A - C_p|_{r=R_p}) \quad (9)$$

El modelo anterior es conocido como PVDM. Por último, la relación entre el fluoruro adsorbido en la superficie del carbón de hueso y la concentración de fluoruro en el volumen de los poros del carbón de hueso es la isoterma de adsorción (10).

$$q_r = f(C_p) \quad (10)$$

Las ecuaciones (1)-(10) forman el Modelo General de Lecho Fijo (FBGM), el cual fue resuelto numéricamente usando Comsol Multiphysics®.

Cálculo de parámetros. El coeficiente de transporte externo y el coeficiente de dispersión axial fueron calculados con las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{Pe} = \frac{20}{\varepsilon} \frac{1}{ReSc} + \frac{1}{2}; \quad Pe = \frac{2R_p v_z}{D_z} \quad (11)$$

$$Sh = \frac{1.09}{\varepsilon} Re^{0.33} Sc^{0.33}; \quad Sh = \frac{2R_p k_L}{D_{AB}} \quad (12)$$

Los parámetros restantes fueron tomados de los estudios reportados por Medellín-Castillo y col. (2007; 2009), y Leyva-Ramos y col. (2010).

RESULTADOS Y DISCUSION

Se realizaron cuatro corridas variando el flujo volumétrico. La Figura 1 muestra las curvas de ruptura obtenidas. El número de Reynolds es directamente proporcional al flujo volumétrico, así como al número de Sherwood. Esto significa que al incrementar el flujo volumétrico aumentamos también el coeficiente de transporte externo de masa, de manera que incrementamos el transporte

del fluoruro de la solución líquida a las partículas de carbón de hueso. Es por esta razón que la saturación de lecho se alcanza a menores tiempos al aumentar el gasto volumétrico.

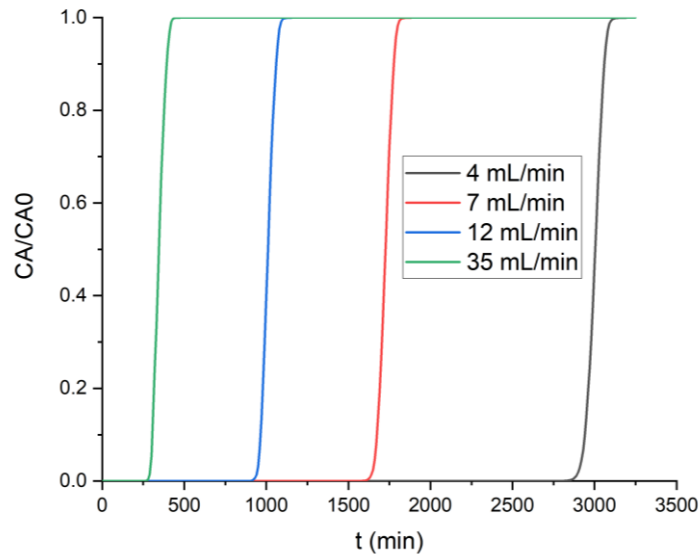


Figura 1. Curvas de ruptura predichas por el FBGM. $C_{A0}=4$ mg/L

CONCLUSIONES

A pesar de que es necesario realizar estudios experimentales de adsorción del equilibrio, velocidad, y en régimen dinámico para el diseño de adsorbedores, es posible predecir el comportamiento de las columnas de lecho fijo mediante datos experimentales adecuados del equilibrio y la cinética.

BIBLIOGRAFÍA

Leyva, R.; Rivera, J.; Medellín, N.A.; Sánchez, M. (2010). "Kinetic modeling of fluoride adsorption from aqueous solution onto bone char". *Chemical Engineering Journal* 158: 458–467.

Medellín, N.A.; Leyva, R.; Ocampo, R.; García, R.F.; Aragón, A.; Martínez, J.M.; Guerrero, R.M.; Fuentes, L. (2007). "Adsorption of fluoride from water solution on bone char." *Ind. Eng. Chem. Res.* 46: 9205–9212.

Medellín -Castillo, N.A. 2009. Equilibrio y cinética de adsorción de fluoruro sobre carbón de hueso. Tesis profesional. UASLP, Facultad de Ciencias Químicas. San Luis Potosí. México.