

SIMULACIÓN DE LOS FENOMENOS ELECTROKINETICOS EN UNA CELDA DE ELECTROREMEDIACIÓN

Laura García Hernández^{1*}, Marissa Vargas Ramírez ¹, Reyes Cruz Víctor E.¹

¹Area Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, ICBI, UAEH. Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México, CP 42128.
Email ^{1*}: lauragh09@yahoo.com.mx

Resumen

En el presente trabajo se realizó una simulación de los fenómenos electrocinéticos que se presentan en una celda de electroremediación experimental utilizando el software COMSOL 3.2, se utilizaron las dimensiones reales de la celda, considerando un factor de escala de 5 y 3275 nodos de mallado, basado en las ecuaciones de Darcy y Navier-Stokes para el cálculo de velocidades en electrolitos y suelo, y la ecuación de Nernst-Planck para el balance de masa, se observó que los resultados obtenidos mediante simulación presentan la misma tendencia a los obtenidos experimentalmente. Los resultados del modelo matemático proporcionan el comportamiento de las variables que intervienen en el proceso electroremediación y sirven de base para un futuro escalamiento de este cuando se traten suelos contaminados con EPT's.

Introducción

Los residuos mineros (jales) pueden contener cantidades variables de sulfuros, minerales de ganga y residuos de los reactivos utilizados en el proceso de beneficio [1]. Los sulfuros metálicos de los jales al estar expuestos al intemperismo pueden oxidarse y liberar metales y metaloides tóxicos en el proceso conocido como drenaje ácido de minas, produciendo aguas con un bajo pH y elevadas concentraciones de sulfatos [2]. Además las condiciones climáticas prevaletentes en el sitio de disposición, puede dar lugar a una dispersión de contaminantes por medios físicos (erosión, transporte eólico y pluvial), o bien una alteración de los residuos con la consecuente movilidad química de elementos potencialmente tóxicos, (EPT's) [3]. La electroremediación, es una tecnología de remediación aplicada con éxito a suelos de baja permeabilidad, para la extracción de contaminantes orgánicos y iónicos, de suelos, mediante la aplicación de un campo eléctrico. Por el tiempo involucrado en la electroremediación (existen trabajos reportados de semanas hasta meses), los modelos matemáticos, presentan una alternativa para poder simular los fenómenos involucrados, por

lo que en el presente trabajo se realiza un modelo basado en las ecuaciones de Darcy y Navier-Stokes para el cálculo de las velocidades en los electrolitos y el suelo, la ecuación de Nernts-Planck para el balance de masa, se considera al suelo como un medio conductor para la distribución de potencial, de esta forma se establecen las condiciones para la simulación de un modelo matemático del proceso de electroremediación en tres dimensiones.

Procedimiento Experimental

Celda de electroremediación

Se realizaron los experimentos en una celda de remediación experimental cilíndrica, de 0.045 m de diámetro y 0.1 m. de longitud con dos electrodos funcionando como ánodo y cátodo [4], se empacó la celda suelos obtenidos de un muestreo sistemático del distrito minero de Zimapán, utilizando diferentes electrolitos, con recirculación para el control de pH, se aplico un potencial de 20 V, el experimento se llevo acabo durante 24 horas. Durante el desarrollo de los experimentos se monitoreo el potencial de la celda, el pH del anolito y el catolito.

Modelo matemático.

Se realizó la simulación en el software COMSOL 3.2 [5], con las dimensiones reales de la celda, figura 1, trabajando a un tiempo de 24 horas a intervalos de 5 minutos considerando un factor de escala de 5 y 3275 nodos de mallado

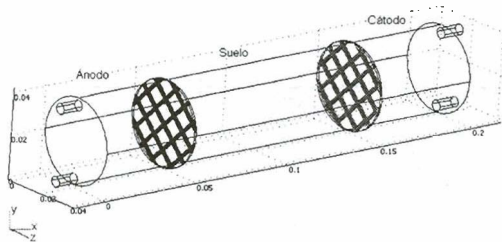


Figura 1. Celda electroquímica utilizada en COMSOL 3.2

Las ecuaciones de Navier-Stokes describen el movimiento de un fluido y se toman de base para simular el movimiento del electrolito dentro de los compartimentos anódico y catódico de la celda.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-p2I + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)] + F \quad (1)$$

Para el cálculo de las velocidades dentro del suelo, se utilizó la ecuación de Darcy, que junto con la ecuación de continuidad, simula el movimiento del fluido en un medio poroso

$$\text{homogéneo. } \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot \rho \left(-\frac{k}{\eta} \nabla p \right) = 0 \quad (2)$$

La ley de Darcy en combinación con la ecuación de continuidad provee de un modelo matemático para una variedad de aplicaciones que involucran flujo en medio poroso

La ecuación para el cálculo del potencial en un medio conductor (considerando al suelo humedecido como este medio). $-\nabla \cdot d(\delta \nabla \phi - J^e) = dQ_j$ (3)

Para definir el flujo electrocinético se considera: un medio poroso, dos electrodos generando una diferencia de potencial, una conductividad muy pequeña y los efectos de las reacciones electroquímicas sobre las superficies de los electrodos despreciables. Las ecuaciones para el

$$\text{balance de masa esta dado por: } \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot N = 0 \quad (4)$$

Donde N es el vector de flujo acorde a la siguiente ecuación de Nernst-Planck.

$$N = -D\nabla c - zu_m Fc\nabla\phi + cv \quad (5)$$

El término $-D\nabla c$, representa el flujo difusivo (*Electroosmosis*), el segundo término $-zu_m Fc\nabla\phi$, representa el flujo por migración (*Electromigración*) y el tercer termino cv el flujo convectivo (*Electroforesis*).

Se establecen las condiciones de frontera y condiciones iniciales (tiempo=0) para la integración en espacio y en tiempo; se considera que la entrada se ubica en la posición $X=0$, mientras que en la salida se encuentra en la posición $X=L$. Las condiciones iniciales (CI), las condiciones frontera (CF) para las variables H^+ y OH^- están definidas con las siguientes ecuaciones [6].

Para H^+	Para OH^-
CI (t = 0) $[H^+]^0 = 10^{-pH_0}$	CI (t = 0) $[OH^-]^0 = \frac{K_w}{[H^+]^0}$
CF. 1, (X = 4.5) $v^0[H^+]^0 + \frac{I}{nF} = N_{H^+}$	CF. 1, (X = 4.5) $[H^+][OH^-] = K_w$
CF. 2, (X = 14.5) $[H^+][OH^-] = K_w$	CF. 2, (X = 14.5) $\frac{I}{nF} = -N_{OH^-}$

Resultados y Discusión

En la figura 2, se presenta el perfil de velocidades dentro de los electrolitos y del medio poroso dentro de la celda. El cálculo de estas velocidades es para estimar si estas tienen contribución por presión hidráulica dentro de suelo (arena).

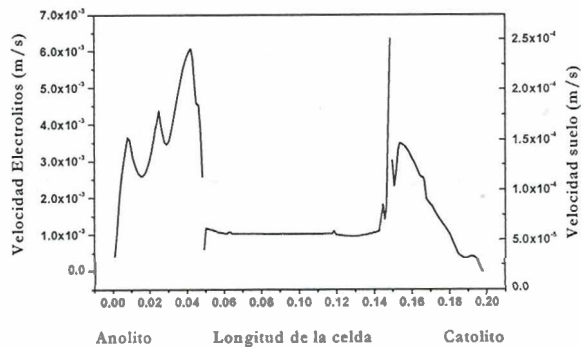


Figura 2. Perfil de velocidades para los electrolitos y para el medio poroso (arena) en la celda a 24 horas.

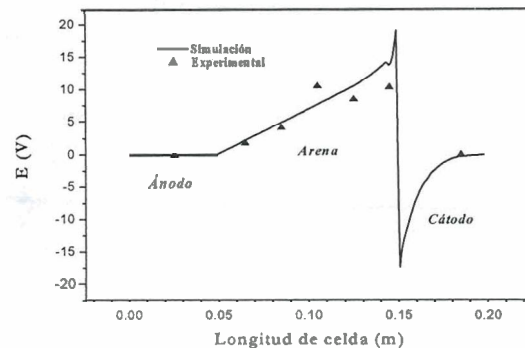
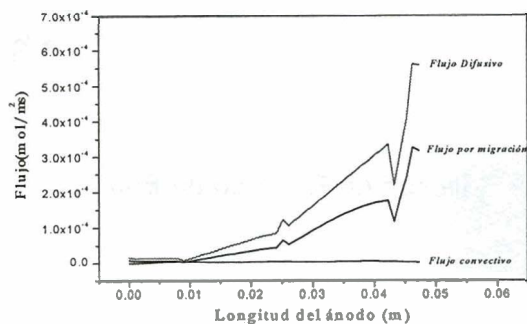


Figura 3. Distribución de Potencial al tiempo de 24 horas, a lo largo de la celda electroquímica.

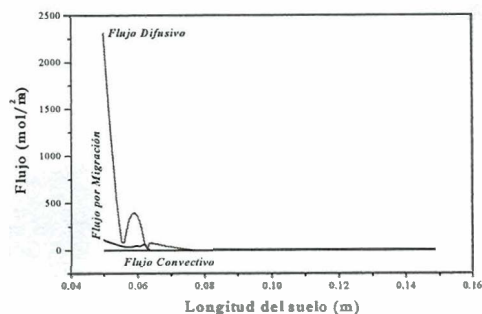
Se aprecia la velocidad del anolito disminuye al acercarse al límite con el suelo, al igual que el catolito, debido a estas magnitudes y en relación con el número de Reynolds obtenido mediante la simulación se consideran que los flujos son laminares y no tienen contribución por presión hidráulica en el suelo. Las velocidades para el medio poroso son de magnitud pequeña, por lo que no se atribuye movimiento del electrolito por presión, y el flujo dentro de la celda es el provocado por la imposición del potencial eléctrico. Esta es una variable que se puede estimar mediante la simulación más no experimentalmente.

En la figura 3, se representa la distribución del potencial a lo largo de la celda a un tiempo de 24 horas, de forma experimental (puntos) y mediante la simulación (línea continua). Se observa que el potencial obtenido mediante la simulación es menor cercano al ánodo, y aumentada conforme se va acercando al cátodo y coincide con el medido experimentalmente cuando la medición se hace tomando al ánodo como electrodo de referencia.

En la figura 4, se muestra la distribución de los flujos difusivo, convectivo y por migración, que contribuyen al balance de masa para la especie H⁺ dentro del (a) ánodo y (b) arena.



(a)



(b)

Figura 4. Distribución de los flujos, difusivo, por migración y convectivo que se presentan para (a) anolito y (b) arena al tiempo de 24 horas

En (a) se observa que la contribución más fuerte para el flujo másico de la especie H^+ , es el proceso de difusión y por migración, y el flujo convectivo se considera despreciable para el balance de masa del H^+ . Los altos valores del flujo difusivo se pueden atribuir a que cercano a la frontera con el ánodo, y sobre la interfase de este se presenta la reacción de electrolisis del agua. En (b) se observa que el flujo difusivo de la especie H^+ es de varios órdenes de magnitud mayor comparado con el flujo que se presenta en el anolito, sobre todo en la región cercana al electrodo (ánodo), lo que se puede atribuir a la generación del H^+ por la reacción de electrolisis del agua sobre la superficie del electrodo, así mismo se aprecia que los flujos son de intensidad mayor cercano al ánodo y disminuye al entrar al suelo, esto se debe a la permeabilidad del suelo, que depende de su porosidad, tamaño, geometría y distribución de los poros. Por otra parte la fluidez del agua depende de la presión a la que este sometida y de su temperatura, la cual afecta directamente a la viscosidad y la densidad.

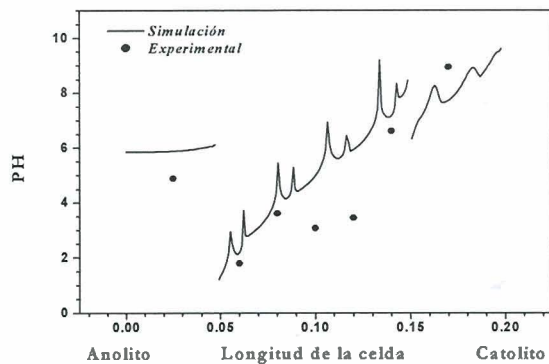


Figura 5, Perfil de pH dentro del anolito, suelo y catolito de la celda de electroremediación.

La figura 5, muestra el pH obtenido a un tiempo de 24 horas mediante la simulación (línea continua) y son comparadas con el pH experimental (puntos), Los resultados puede ser atribuidos a la reacción de electrolisis del agua provocada por la imposición del potencial eléctrico, en el anolito el pH es ácido, mientras que en el suelo cercano a la región anódica es ácido y este se va incrementando conforme se acerca a la región catódica, siendo alcalino en el catolito, así mismo se puede apreciar una misma tendencia entre los resultados experimentales y los obtenidos mediante los cálculos matemáticos de simulación.

Conclusiones

- Las velocidades obtenidas mediante la simulación confirman que la contribución por presión hidráulica por parte del electrolito es despreciable.
- La distribución del potencial de celda no excede al aplicado durante la experimentación.
- Los flujos, difusivo, convectivo y migratorio contribuyen al balance de masa de las especies dentro de la celda.
- El pH calculado mediante la simulación concuerda con los valores obtenidos experimentalmente.
- Los resultados del modelo matemático proporcionan el comportamiento de las diferentes variables que intervienen en el proceso electrocinético.
- Los resultados del modelo pueden servir de base para un futuro escalamiento del proceso de electroremediación cuando se traten suelos contaminados con EPT's.

Referencias

1. ARMIENTA, MA, VILLASEÑOR, G, and ROMERO, FM. 2005. XXVI Convención Internacional de Minería, Veracruz, México,
2. USEPA, Technical Document. Acid mine drainage prediction. 1994, EPA 530-R-94-036, NTIS PB94-201829, Environmental Protection Agency, USA,
3. SMITH, KS, and HUYCK, HLO. An overview of the abundance, relative mobility, bioavailability, and human toxicity of metals. In Plumlee, G.S. and Logsdon, JJ. (Eds.), 1999. Soc. Econ. Geol. Review in Econ. Geol., 6A: 29
4. MURILLO B. Diseño y construcción de un dispositivo para evaluar y caracterizar la electroremediación de suelos contaminados con hidrocarburos. 2006. Tesis de Maestría, UAMI.
5. FEMLAB Modeling Guide, by COMSOL 3.2. 2004.
6. TEUTLI-LEON, MM, OROPEZA, MT, GONZALEZ I and A, SORIA, 2005. A. *Journal American Institute of Chemical Engineers.* (51) 6:1822-1832.