



Universidad San Carlos de Guatemala  
Facultad de Ingeniería  
Escuela de Ingeniería Química

**COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRESA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**

**Melannie Fabiola Chávez Córdón**

Asesorada por el Ing. William Eduardo Fagiani Cruz

Guatemala, julio de 2020



UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
POR

**MELANNIE FABIOLA CHÁVEZ CORDÓN**

ASESORADA POR EL ING. WILLIAM EDUARDO FAGIANI CRUZ

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

**INGENIERA QUÍMICA**

GUATEMALA, JULIO DE 2020



UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA  
FACULTAD DE INGENIERÍA



**NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA**

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
VOCAL I	Ing. José Francisco Gómez Rivera
VOCAL II	Ing. Mario Renato Escobedo Martínez
VOCAL III	Ing. José Milton De León Bran
VOCAL IV	Br. Christian Moisés De La Cruz Leal
VOCAL V	Br. Kevin Vladimir Armando Cruz Lorente
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez

**TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO**

DECANA	Inga. Aurelia Anabela Cordova Estrada
EXAMINADOR	Ing. Carlos Salvador Wong Davi
EXAMINADOR	Ing. Adela María Marroquín González
EXAMINADOR	Ing. Jaime Domingo Carranza González
SECRETARIO	Ing. Hugo Humberto Rivera Pérez



## HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

**COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 27 de mayo de 2019.



**Melannie Fabiola Chávez Cordón**

Guatemala 10 de marzo de 2020

Ingeniero  
Williams Guillermo Álvarez Mejía  
DIRECTOR  
Escuela Ingeniería Química  
Presente.

Estimado Ingeniero Álvarez:

Le saludo cordialmente, deseándole éxitos en sus actividades. Por medio de la presente hago constar que he revisado y aprobado el Informe Final del trabajo de graduación titulado: "COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA", elaborado por el estudiante de la carrera de Ingeniería Química, Melannie Fabiola Chávez Cordón, quien se identifica con el registro académico 201403843 y con el CUI 3449 37895 1904.

Agradeciendo la atención a la presente, me suscribo de usted,

Atentamente,



INGENIERO QUÍMICO  
WILLIAM EDUARDO FAGIANI CRUZ  
COL. 1734

William Fagiani Eduardo Fagiani Cruz  
ASESOR  
Ingeniero Químico  
Colegiado activo no. 1734





Guatemala, 28 de abril de 2020.  
Ref. IQ.TG-IF.017.2020.

Ingeniero  
Williams Guillermo Álvarez Mejía  
DIRECTOR  
Escuela de Ingeniería Química  
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Álvarez:

Como consta en el registro de evaluación, correlativo 025-2019, le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

**INFORME FINAL**

Solicitado por el estudiante universitario: **Melannie Fabiola Chávez Cordón**.  
Identificado con número de carné: **3449378951904**.  
Identificado con registro académico: **201403843**.  
Previo a optar al título de la carrera: **Ingeniería Química**.  
En la modalidad: **Informe Final, Seminario de Investigación**.

Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

**COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por:

**William Eduardo Faglaní Cruz, profesional de la Ingeniería Química**

Habiendo encontrado el referido trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"

**César Ariel Villela Rodas**  
Profesional de la Ingeniería Química  
COORDINADOR DE TERNA  
Tribunal de Revisión  
Trabajo de Graduación

C.c.: archivo





**USAC**  
TRICENTENARIA  
Universidad de San Carlos de Guatemala

FACULTAD DE INGENIERÍA  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Edificio T-5, Ciudad Universitaria, Zona 12, Guatemala, Centroamérica  
EIQD-REG-SG-007

Guatemala, 8 de julio de 2020.  
Ref. EIQ.165.2020

**Aprobación del informe final del trabajo de graduación**

Ingeniera  
Aurelia Anabela Cordova Estrada  
Decana  
Facultad de Ingeniería  
Universidad de San Carlos de Guatemala

Revisado el INFORME FINAL DEL TRABAJO DE GRADUACIÓN DENOMINADO **COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**, del(la) estudiante Melannie Fabiola Chávez Córdón, se conceptúa que el documento presentado, reúne todas las condiciones de calidad en materia administrativa y académica (rigor, pertinencia, secuencia y coherencia metodológica), por lo tanto, se procede a la autorización del mismo, para que el(la) estudiante pueda optar al título de Ingeniería Química.

*"Id y Enseñad a Todos"*

Ing. Williams G. Alvarez Mejia, M.I.Q., M.U.I.E.

DIRECTOR

Escuela de Ingeniería Química



Cc. Archivo  
WGAM/wgam



Formando Ingenieros Químicos en Guatemala desde 1939



**NO SALGAS  
QUÉDATE EN  
CASA**

DTG. 149.2020.

La Decana de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al Trabajo de Graduación titulado: **COMPARACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA Y DISTRIBUCIÓN DE CORRIENTE PRIMARIA Y SECUNDARIA, POR MEDIO DE UNA SIMULACIÓN COMPUTACIONAL, DE UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO-PRENSA CON DOS DISEÑOS DIFERENTES, PARA ESTIMAR EL EFECTO QUE TIENE EL ÁREA SUPERFICIAL EN EL PROCESO DE OXIDACIÓN AVANZADA**, presentado por la estudiante universitaria: **Melannie Fabiola Chávez Cordón**, y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE:



Inga. Anabela Cordova Estrada  
Decana



Guatemala, julio de 2020



## **ACTO QUE DEDICADO A:**

### **Mis padres**

Por inculcarme la importancia del estudio y alentarme a ser una mujer de éxito, con su ejemplo como profesionales. Por su apoyo incondicional a lo largo de mi formación académica, por estar a mi lado en mis triunfos y fortalecerme en mis momentos difíciles.

### **Mis abuelos**

Por apoyarme desde la distancia con sus muestras de cariño, por sacarme una risa en momentos estresantes y por sus oraciones.

Quiero hacer una dedicación especial a mi abuelo paterno, que en paz descansa, por su espíritu de superación y el amor a la ingeniería que transmitió de generación en generación.

## **AGRADECIMIENTOS A:**

<b>Dios</b>	Por ser mi guía en el transcurso de la vida, por protegerme en todo momento y permitirme alcanzar una de mis metas.
<b>Escuela de Ingeniería Química</b>	Por darme la oportunidad de tener mi primera experiencia laboral y el apoyo que me brindaron en mi formación académica.
<b>Dr. Tzayam Pérez Segura, Universidad de Guanajuato</b>	Por darme la oportunidad de ser parte de su equipo para este proyecto de investigación y permitirme continuar con el estudio como trabajo de graduación para licenciatura.
<b>Inga. Lisely de León</b>	Por alentarme a crecer como profesional, por sus consejos y el apoyo que me brindó durante esta fase de mi vida.
<b>Mi papá</b>	Alonso Chávez, por estar a mi lado y brindarme su amor y apoyo incondicional en todo momento. Por inculcarme a ser una persona autodidacta y, a través de su ejemplo, enseñarme siempre a trabajar con pasión y ética.

**Mi mamá**

Elizabeth Córdón, por apoyarme durante toda mi formación académica y estar presente en cada faceta de mi vida. Por enseñarme a dar siempre lo mejor de mí, tanto personal como profesionalmente, y por el amor que me demuestra día a día.

**Mis primos**

Por ser los hermanos que no tuve, por brindarme su amor y siempre sacarme una sonrisa; especialmente a Cristian y Andrea, porque me han apoyado en todo momento y han sido mis confidentes y mi fortaleza cuando más lo necesito.

**Mis tíos**

Por las muestras de cariño que cada uno me ha brindado, por apoyarme desde la distancia y por estar a mi lado en todo momento.

**Mis amigos**

A mis amigos “Protones Químicos” que fueron el mejor equipo de trabajo que Dios me pudo dar y con los que tuve la oportunidad de compartir los mejores momentos de mi carrera y de mi vida. Quiero agradecer especialmente a Krisbel Dayanara, por apoyarme y transmitirme sus conocimientos desde el día que la conocí.

**Mi novio**

Abdi Gil, porque desde que lo conocí me demostró ser un amigo incondicional, brindándome todo su apoyo y siempre alentándome a tomar las mejores decisiones. Hoy en día, agradezco a Dios por ponerlo en mi camino y porque, además de ser mi mejor amigo y mi colega, ocupa un espacio importante en mi corazón.



# ÍNDICE GENERAL

INDICE DE ILUSTRACIONES.....	V
LISTA DE SÍMBOLOS.....	IX
GLOSARIO.....	XI
RESUMEN .....	XV
OBJETIVOS .....	XVII
INTRODUCCIÓN.....	XIX
1. ANTECEDENTES .....	1
2. MARCO TEÓRICO .....	7
2.1 Celda electroquímica .....	7
2.1.1 Partes de una celda electroquímica .....	7
2.1.2 Potencial de una celda electroquímica.....	9
2.2 Reactor tipo filtro-prensa .....	9
2.3 Celdas electroquímicas con electrodos de BDD.....	11
2.4 Procesos de oxidación avanzada .....	12
2.4.1 Reacciones de oxidación del agua.....	13
2.5 Tipo de flujo .....	15
2.5.1 Flujo turbulento .....	16
2.6 Distribución de corriente .....	19
2.6.1 Distribución de corriente primaria.....	20

2.6.2	Distribución de corriente secundaria.....	20
2.7	Método de elementos finitos.....	22
2.7.1	Comsol Multiphysics .....	24
3.	DISEÑO METODOLÓGICO .....	25
3.1	Variables .....	25
3.1.1	Variables independientes.....	25
3.1.2	Variables dependientes .....	26
3.2	Delimitación del campo de estudio.....	26
3.3	Recursos humanos disponibles.....	27
3.4	Recursos materiales disponibles.....	27
3.5	Técnica cuantitativa.....	29
3.6	Ordenamiento y procesado de la información .....	29
3.6.1	Metodología para realizar la geometría del dominio .....	29
3.6.2	Metodología para realizar el análisis de malla .....	30
3.6.3	Metodología para la simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica .....	32
3.6.4	Metodología para la simulación de la distribución de corriente primaria en función del largo de la celda electroquímica .....	36
3.6.5	Metodología para la simulación de la distribución de corriente secundaria en función del largo de la celda electroquímica .....	40
3.7	Plan de análisis de los resultados .....	43
3.7.1	Métodos y modelos según tipo de variable.....	43

3.7.2	Programas a utilizar para el análisis de datos.....	44
4.	RESULTADOS.....	45
4.1	Geometría de ambos diseños de celda electroquímica tipo filtro-prensa y análisis de malla.....	45
4.2	Simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica .....	47
4.2.1	Resultados de la hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados .....	47
4.2.2	Resultados de la hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original.....	50
4.2.3	Distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa.....	54
4.3	Simulación de la distribución de corriente primaria.....	55
4.4	Simulación de la distribución de corriente secundaria.....	57
4.4.1	Resultados de la distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto.....	57
4.4.1	Resultados de la distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original.....	59
5.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	61

5.1	Geometría de ambos diseños de celda electroquímica tipo filtro-prensa y análisis de malla .....	61
5.2	Simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica.....	61
5.2.1	Hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto.....	62
5.2.2	Hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original .....	63
5.2.3	Distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa .....	64
5.3	Simulación de la distribución de corriente primaria .....	65
5.4	Simulación de la distribución de corriente secundaria.....	66
5.4.1	Distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto.....	66
5.4.2	Distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original .....	67
	CONCLUSIONES .....	69
	RECOMENDACIONES .....	71
	BIBLIOGRAFÍA .....	73
	APÉNDICE.....	75

## INDICE DE ILUSTRACIONES

### FIGURAS

1.	Partes de una celda electroquímica .....	8
2.	Esquema de la configuración de un reactor tipo filtro-prensa de placas paralelas .....	11
3.	Formación de radicales hidroxilo sobre electrodos BDD y los subproductos, en el proceso de oxidación del agua .....	13
4.	Nodos y elementos de una malla .....	23
5.	Diseño original de la celda electroquímica tipo .....	26
6.	Tamaños de elementos para el análisis de malla .....	31
7.	Selección del modelo k- $\epsilon$ para la simulación de la hidrodinámica dentro de la celda.....	33
8.	Línea de corte en 3D.....	35
9.	Selección de la ecuación de Laplace para la simulación de la distribución de corriente primaria .....	37
10.	Geometría de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original.....	45
11.	Geometría de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados.....	46
12.	Análisis de malla realizado con la malla normal en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto .....	46
13.	Análisis de malla realizado con la malla fina en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto .....	47

14.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 0,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	48
15.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	48
16.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda ....	49
17.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 2,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda ....	49
18.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 3,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda ....	50
19.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 0,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	51
20.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	51
21.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	52
22.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 2,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda. ....	52

23.	Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 3,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda.....	53
24.	Diagrama de la distribución de la magnitud del campo de velocidad para el caudal de 1,5 L/min, dentro de la celda electroquímica con el diseño propuesto.....	54
25.	Diagrama de la distribución de la magnitud del campo de velocidad para el caudal de 1,5 L/min, dentro de la celda electroquímica con el diseño original. ....	55
26.	Distribución de corriente primaria de la celda electroquímica con el diseño propuesto, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	56
27.	Distribución de corriente primaria de la celda electroquímica con el diseño original, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	56
28.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 1,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	57
29.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 1,5 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	58
30.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 2,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	58
31.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 1,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico.....	59

32.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 1,5 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico .....	60
33.	Distribución de corriente secundaria de la celda electroquímica con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 2,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico .....	60

## TABLAS

I.	Equipo a utilizar .....	27
II.	Parámetros utilizados en simulaciones numéricas de distribución de corriente primaria, a 298 K.....	38
III.	Parámetros utilizados en simulaciones numéricas de distribución de corriente secundaria, a 298 K.....	41



## LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
<b>A</b>	Amperios
<b>Cm</b>	Centímetros
<b>cm<sup>2</sup></b>	Centímetros cuadrados
<b>K</b>	Conductividad electrolítica
<b>P</b>	Densidad
<b>j<sub>a</sub></b>	Densidad de corriente anódica
<b>j<sub>c</sub></b>	Densidad de corriente catódica
<b>j<sub>0</sub></b>	Densidad de corriente de intercambio
<b>°C</b>	Grados Celsius
<b>L</b>	Litros
<b>Ma</b>	Miliamperios
<b>b<sub>a</sub></b>	Pendiente de Tafel anódica
<b>b<sub>c</sub></b>	Pendiente de Tafel catódica
<b>V<sub>a</sub></b>	Potencial aplicado anódico
<b>V<sub>c</sub></b>	Potencial aplicado catódico
<b>ϕ<sub>a</sub></b>	Potencial del circuito abierto del ánodo
<b>ϕ<sub>c</sub></b>	Potencial del circuito abierto del cátodo
<b>P</b>	Presión
<b>S</b>	Segundos
<b>u</b>	Velocidad
<b>μ</b>	Viscosidad dinámica
<b>V</b>	Voltios



## GLOSARIO

<b>Compuesto recalcitrante</b>	Compuesto con estructuras químicas muy estables provocando que sean resistentes al ataque biológico. Son difíciles de descomponer.
<b>Corriente eléctrica</b>	Es el flujo de carga eléctrica que atraviesa un material conductor durante un periodo de tiempo determinado. Se expresa en amperios.
<b>Densidad de corriente</b>	Es la cantidad de corriente por unidad de área a través de un conductor. Se expresa en $A/cm^2$ .
<b>Dominio de simulación</b>	Es el conjunto de elementos en el cual se dividió la geometría de estudio.
<b>Efluente contaminado</b>	Son aguas que contienen desechos sólidos, líquidos o gaseosos que son emitidos por viviendas o industrias.
<b>Electrodo</b>	Es un conductor eléctrico utilizado para hacer contacto con una parte no metálica de un circuito.

**Electrodo de diamante dopado con boro (BDD)**

Tipo de electrodo que tiene la capacidad de descomponer microbiológicamente los contaminantes orgánicos, transformándolos en subproductos biodegradables.

**Electrolito**

Es una sustancia que contiene aniones y cationes y que por lo tanto es capaz de conducir la corriente eléctrica.

**Extruir**

En términos de dibujo, extruir es crear un cuerpo sólido 3D a partir de una superficie plana que se estira a lo largo de una trayectoria.

**Flujo laminar**

Fluido cuyo movimiento es ordenado y suave, se mueve en láminas paralelas sin mezclarse.

**Flujo turbulento**

Fluido cuyo movimiento se da en forma caótica y la trayectoria de las partículas forma pequeños remolinos.

**Geometría**

En términos de simulación computacional, la geometría representa el equipo o pieza que se trabajará. En este estudio, la geometría representa una celda electroquímica tipo filtro-prensa.

**Mineralización**

Es el proceso por el cual la materia orgánica se degrada a través de microorganismos y se transforma en  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y los compuestos minerales básicos tales como  $\text{N}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , entre otros.

**Radical libre**

Es un átomo o un grupo de átomos que contiene uno o más electrones no apareados. A diferencia de un ion, los radicales libres no poseen carga.

**Voltaje**

Es la energía que se requiere para mover un electrón de un punto a otro.



## RESUMEN

En el presente trabajo de investigación se compararon dos diseños de una misma celda electroquímica tipo-filtro prensa de oxidación avanzada, donde la diferencia consistió en modificar el área superficial del promotor de turbulencia y los electrodos. La comparación se realizó por medio de un programa de simulación computacional, el cual permitió estimar la hidrodinámica y la distribución de corriente primaria y secundaria, esto con la finalidad de predecir si el diseño propuesto es más eficiente en la producción de radicales hidroxilos.

Se pretende que la función principal de la celda electroquímica estudiada sea el tratamiento de agua contaminada, es por ello que se estudió específicamente el proceso de oxidación avanzada, debido a que la aplicación de la electroquímica al tratamiento de efluentes contaminados con compuestos orgánicos permite reducirlos, transformarlos e incluso eliminarlos.

Se tomó como punto de partida el diseño original de la celda y se dimensionó el segundo equipo con un promotor de turbulencia y electrodos con una longitud equivalente al largo total del dispositivo. Una vez realizada la geometría de la celda y establecido el dominio, se realizó un análisis de malla donde se infiere que la malla óptima para las simulaciones es la malla normal, con número óptimo de elementos de 5 462 759.

La hidrodinámica en la celda se simuló a cinco caudales diferentes en un rango de 0,5 a 3,0 L/min, generando perfiles de velocidad a tres líneas de corte distintas y gráficos de distribución de la magnitud del campo de velocidad. El cálculo de la distribución de corriente fue descrito por las respectivas

condiciones de frontera de la distribución de corriente primaria y secundaria a través de la ley de Ohm, obteniendo perfiles de distribución de esta variable en función del largo de la celda.

Al comparar el estudio de la hidrodinámica de ambos diseños de celda electroquímica tipo filtro-prensa, se infiere que el diseño propuesto proporciona mejores condiciones para la producción de radicales hidroxilos debido a la formación de un flujo turbulento en la zona donde ocurre el proceso de oxidación avanzada. También se concluye, por medio de la comparación del estudio de la distribución de corriente primaria y secundaria, que la densidad de corriente generada por el diseño propuesto favorece significativamente la formación de los radicales antes mencionados y evita que se den reacciones secundarias en el proceso de oxidación avanzada, aumentando la eficiencia del proceso.



# OBJETIVOS

## General

Comparar la hidrodinámica y distribución de corriente primaria y secundaria, por medio de una simulación computacional, de una celda electroquímica tipo filtro-prensa con dos diseños diferentes, el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y electrodos alargados, para estimar el efecto que tiene el área superficial en el proceso de oxidación avanzada.

## Específicos

1. Dibujar la geometría de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, para establecer el número óptimo de elementos que debe tener la malla del dominio computacional.
2. Simular gráficamente la velocidad del flujo dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa, con el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, en función del ancho de la celda, a tres posiciones diferentes del largo de la celda,  $1/3$ ,  $1/2$  y  $2/3$ .
3. Simular gráficamente la distribución de corriente primaria y secundaria sobre los electrodos de la celda electroquímica, con el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, en función del largo de la celda.

4. Comparar el comportamiento del flujo dentro de la celda electroquímica, con el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, con el fin de determinar el diseño que favorezca la producción de radicales hidroxilos.
  
5. Comparar el comportamiento de la distribución de corriente primaria y secundaria en la celda electroquímica, con el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, con el fin de determinar el diseño que favorezca la producción de radicales hidroxilos.

## INTRODUCCIÓN

El agua residual proviene de diferentes fuentes como residencias, instituciones y locales comerciales e industriales. Esta puede tratarse en el sitio donde se contamina por medio de fosas sépticas u otros medios de depuración, o bien puede ser captada y transportada mediante una red de tuberías a una planta de tratamiento municipal. Los esfuerzos para llevar a cabo esta operación generalmente están sujetos a regulaciones y normas locales, estatales y federales.

A menudo ciertos contaminantes de origen industrial presentes en las aguas residuales requieren procesos de tratamiento especializado. Los procesos biológicos son la opción más económica para eliminar contaminantes orgánicos, sin embargo, tienen sus limitantes cuando las aguas presentan características de toxicidad que afectan a los microorganismos en agua que contiene electrolitos. Sin embargo, la carga iónica incrementa la conductividad eléctrica, por esta razón los métodos electroquímicos resultan comúnmente favorecidos, por ejemplo, el electrodo de diamante dopado con boro (BDD) tiene la capacidad de descomponer microbiológicamente los contaminantes orgánicos, transformándolos en subproductos biodegradables, los cuales pueden eliminarse en forma biológica.

En el 2013 los autores Tzayam Pérez, María León y José Nava, en la Universidad de Guanajuato, Departamento de Ingeniería Geomática e Hidráulica, realizaron un estudio sobre el uso de electrodos sintéticos de BDD en una oxidación anódica, demostrando que la sobretensión de  $O_2$  es mucho

más alta que la observada para los ánodos convencionales, produciendo mayores cantidades de  $\text{OH}\cdot$  a través de la reacción.

El presente trabajo busca proponer un diseño de celda electroquímica tipo filtro-prensa, con electrodos BDD, que produzca mayores cantidades de radicales hidroxilos, en comparación con el diseño de celda original, para que la remoción de contaminantes presentes en el agua sea más rápida y efectiva. A continuación, se detalla la metodología que se utilizó para realizar el estudio, los resultados obtenidos con ambos diseños y el análisis que se llevó a cabo para determinar qué diseño se ajustan mejor al objetivo propuesto. También se muestran investigaciones previas donde se estudió la eficiencia de los electrodos de BDD en el proceso de oxidación avanzada y cómo el tipo de flujo que se desarrolla dentro de la celda afecta significativamente el proceso.

## 1. ANTECEDENTES

En estudios anteriores se ha analizado la efectividad del uso de electrodos BDD para el proceso de oxidación avanzada, así como la simulación de la distribución de corriente, en una celda electroquímica tipo filtro-prensa, bajo condiciones de flujo turbulento. Debido a que estos temas son de interés para el presente trabajo, se realizó una búsqueda de investigaciones que han estudiado los temas antes mencionados. A continuación, se muestran algunas de ellas:

En el 2014, Pérez, de León, Walsh y Navas, de la División de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad de Guanajuato, Campus de Guanajuato, realizaron un estudio de investigación titulado *Simulation of current distribution along a planar electrode under turbulent flow conditions in a laboratory filter-press flow cell*, en el cual se presentó un estudio teórico para las distribuciones de corriente primaria y secundaria y una aproximación para el límite de distribución de corriente por medio del modelo de turbulencia estándar  $\kappa$ - $\epsilon$ . En esta investigación se realizó una simulación numérica de las distribuciones de corriente primaria, secundaria y limitante a lo largo de un cátodo plano de níquel usando la reducción de los iones  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  a  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ . De acuerdo a los resultados del estudio, la distribución de corriente primaria sufre caídas en la entrada y salida de la celda, y a medida que se alejaba de la entrada y la salida, se torna uniforme. Bajo las condiciones experimentales, la simulación de la distribución secundaria confirmó la conveniencia de usar una celda de flujo filtro-prensa como un reactor de prueba para reacciones catódicas o anódicas

de sistemas electroquímicos homogéneos, en un electrodo plano, debido a su distribución de corriente uniforme en la superficie del electrodo.

El análisis de este trabajo puede utilizarse como un punto de referencia para desarrollar estudios teóricos-empíricos en esta celda de flujo filtro-prensa, para diseñar otras modificaciones que aumenten el rendimiento de una celda electroquímica.

En el 2013, Pérez, León y Nava, de la Universidad de Guanajuato, del Departamento de Ingeniería Geomática e Hidráulica, realizaron un estudio de investigación titulado *Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water*, en el cual se muestra un análisis teórico de la distribución de corriente primaria y secundaria a lo largo de un ánodo de diamante dopado de boro (BDD) de un reactor filtro-prensa tipo FM01-LC. La formación de radicales hidroxilos a través de la descarga de agua se utilizó como sistema de prueba. Los estudios de microelectrólisis confirman que los radicales hidroxilos se forman a potenciales entre  $2,3 \text{ V} \leq E \leq 2,75 \text{ V}$  y que a valores mayores se produce una reacción de evolución de oxígeno. La distribución de corriente primaria es más uniforme lejos de las esquinas curvas de la celda, originada por el espaciador entre los electrodos; sin embargo, los valores de distribución actuales en las esquinas y cerca de ellos, difieren con un orden de magnitud de  $1 \times 10^{-5}$ ; por lo tanto, la distribución de corriente primaria en el ánodo BDD en el reactor FM01-LC puede considerarse uniforme, ya que los efectos de borde en estos sitios son despreciables. La distribución de la corriente secundaria a diferentes valores potenciales de 1,7, 1,9 y 2,15 V, respectivamente, no muestra dichos efectos. La atenuación de la distribución de corriente secundaria está

asociada a los parámetros cinéticos de la descarga de agua en el BDD y al diseño apropiado de la celda.

Bajo las condiciones experimentales descritas en este trabajo, las distribuciones de corriente secundarias simuladas confirman la conveniencia de usar la celda FM01-LC como un reactor de prueba para la producción de radicales hidroxilos en el ánodo BDD, debido a su distribución de corriente uniforme en la superficie BDD, evitando la reacción de la evolución del oxígeno.

En el 2018, Alcocer, Picos, Uribe, y Pérez, de la Universidad de Guanajuato, del Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, realizaron un estudio de investigación titulado *Comparative study for degradation of industrial dyes by electrochemical advanced oxidation processes with BDD anode in a laboratory stirred tank reactor*, en el cual se estudió la degradación comparativa de los tintes industriales Azul BR, Violeta SBL y Café MF, mediante el proceso de oxidación electroquímica basado en electrodos BDD. Cada colorante se probó en  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  con  $\text{Fe}^{2+}$  a 3,0 de pH, y se electrolizó en un reactor de tanque agitado en condiciones galvanostáticas con 2,0, 5,0, 7,0, 11,0 y 18,0  $\text{mA cm}^{-2}$ . Los tintes se oxidaron a través de radicales hidroxilos (OH) formados en el ánodo BDD de la oxidación con agua junto con la reacción de Fenton producida catódicamente con peróxido de hidrógeno ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ). Mediante el medio  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  se logró acercarse al 100 % de la decoloración. A través de la tasa de reducción de color se analizó el comportamiento de los tintes al comienzo del proceso de oxidación.

Como es bien sabido, las descargas industriales y particularmente las de la industria del cuero contienen grandes variedades de tintes en una mezcla; por esas razones, y para simular una descarga real, se llevó a cabo un

experimento donde se mezclaron los tres tintes mencionados anteriormente. En este estudio se destaca el potencial del proceso electroquímico BDD para la degradación de tintes industriales que se encuentran en aguas residuales en condiciones experimentales apropiadas. Es por ello que para esta investigación se simularán electrodos de BDD.

En el 2006, Núñez, de la Universidad Autónoma Metropolitana de la Ciudad de México, realizó un estudio de investigación titulado *Electroincineración del p y o-cresol sobre electrodos de diamante dopado con boro (BDD) en una celda electroquímica FM01-LC*, en el cual se muestra la formación de radicales  $\text{OH}\cdot$ , debido a la oxidación del agua, sobre los electrodos de BDD y los otros subproductos, como son el  $\text{H}_2\text{O}_2$  y  $\text{O}_2$ , los cuales también oxidan materia orgánica, pero la degradación ocurre con una eficiencia menor a la obtenida con el radical hidroxilo. El estudio reveló que, en el intervalo de  $1,5\text{V} \leq E \leq 2,2 \text{ V}$ , la oxidación del agua ocurre con un electrón para formar el  $\text{OH}\cdot$ . Mientras que, a potenciales mayores de 2,2 V, la oxidación del agua se oxida con más de 1 electrón, formando oxidantes menos potentes que el radical hidroxilo. Este mismo estudio indicó que la oxidación del cresol se lleva a cabo indirectamente vía radical hidroxilo. Del estudio llevado a cabo en este trabajo de investigación se mostró la conveniencia de emplear un reactor FM01-LC con electrodos BDD, para la incineración electroquímica de moléculas orgánicas recalcitrantes, como el cresol, hasta  $\text{CO}_2$ , observándose que las condiciones hidrodinámicas favorecen la mineralización de las moléculas orgánicas.

Con las investigaciones mencionadas anteriormente se puede inferir que las celdas electroquímicas tipo filtro-prensa son convenientes como reactores de prueba para la producción de radicales hidroxilo, cuando estas trabajan bajo



condiciones de flujo turbulento y se utilizan electrodos de BDD, ya que estos factores aumentan la eficiencia del proceso, siendo favorables para la mineralización de componentes orgánicos presentes en el agua contaminada.



## 2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan los conceptos teóricos que fundamentan el trabajo de investigación, como el mecanismo de oxidación del agua en electrodos BDD, las ecuaciones que rigen la simulación de la hidrodinámica y la distribución de corriente primaria y secundaria, el método de elementos finitos, entre otros.

### 2.1 Celda electroquímica

Una celda electroquímica es un dispositivo que permite obtener energía eléctrica a partir de reacciones químicas (celda galvánica) o que facilita las reacciones químicas al suministrar energía eléctrica (celda electrolítica). Estos procesos electroquímicos se conocen como reacciones óxido-reducción o *redox*, en las cuales se produce una transferencia de electrones de una especie química a otra<sup>1</sup>.

#### 2.1.1 Partes de una celda electroquímica

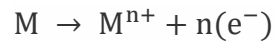
La celda electroquímica está conformada por dos electrodos que se encuentran dentro de disoluciones apropiadas, unidos por un puente salino y conectados por un voltímetro que permite el paso de los electrones.

---

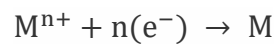
<sup>1</sup> LÓPEZ, Oscar. *Celdas Electroquímicas*. <https://quimica.laguia2000.com/general/celdas-electroquimicas>.

Sus componentes principales son:

- **Ánodo:** es el electrodo sobre el que se produce la oxidación. El agente reductor pierde electrones y por tanto se oxida.

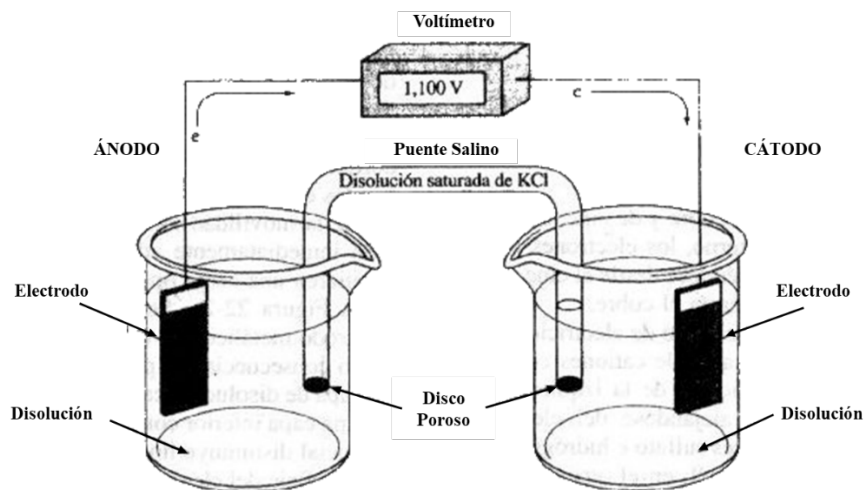


- **Cátodo:** es el electrodo sobre el que se produce la reducción. El agente oxidante gana electrones y por tanto se reduce.



- **Puente salino:** se utiliza para proporcionar un contacto iónico entre las dos celdas con electrolitos diferentes, para evitar que las soluciones se mezclen y provoquen reacciones secundarias.

Figura 1. **Partes de una celda electroquímica**



Fuente: LÓPEZ, Oscar. *Celdas electroquímicas*. <https://quimica.laguia2000.com/general/celdas-electroquimicas>. Consulta: marzo de 2019.

### 2.1.2 Potencial de una celda electroquímica

La fuerza que impulsa el transporte de los electrones a través del circuito externo es provocada por la diferencia de potencial entre los dos electrodos de la celda. A esta diferencia de potencial se le conoce como fuerza electromotriz o *fem*.

A la fuerza electromotriz de una celda se le denomina potencial de celda y se expresa como  $E_{\text{celda}}$ . Debido a que  $E_{\text{celda}}$  se mide en voltios, generalmente se hace referencia a ella como voltaje de celda.<sup>2</sup>

El rango aproximado de los potenciales de una celda está entre 0 y 6 voltios, pero cuando el electrolito es agua, el potencial generalmente se reduce a valores menores a 2,5 voltios, debido a que los oxidantes y reductores necesarios para producir un potencial de celda elevado tienden a reaccionar con el agua.<sup>3</sup>

## 2.2 Reactor tipo filtro-prensa

El reactor tipo filtro prensa es una celda electroquímica de flujo la cual emplea una configuración de electrodos en paralelo en un diseño expansible y compacto. Este tipo de celdas satisface diversas necesidades entre las cuales se encuentran:

---

<sup>2</sup> BROWN, Theodore. *Electroquímica*. p 899.

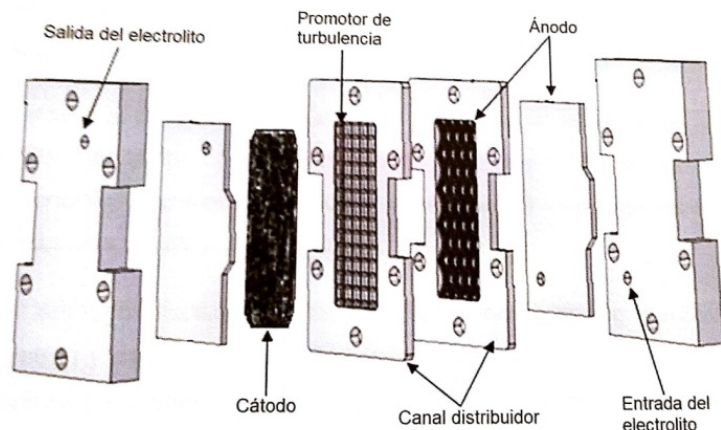
<sup>3</sup>Visual Avi, *Como funciona una celda electroquímica*. <https://www.visualavi.com/celda-electroquimica-elemental-descripcion-y-funcionamiento/>.

- Distribución de potencial uniforme en el electrodo
- Altos índices de transporte de masa
- Simplicidad en el diseño e instalación
- Amplia disponibilidad de materiales de electrodo y membrana
- Versatilidad

Los electrodos a emplear en este tipo de celdas son muy diversos, entre los que se incluyen: placas metálicas planas, placas de carbón para electrodos bidimensionales, sin embargo, debido a la configuración es posible utilizar materiales porosos o tridimensionales tales como fieltro de carbón, carbón vítreo reticulado, espumas metálicas o mallas metálicas expandidas. Los electrodos están separados por un espaciador entre el cual fluye el electrolito teniendo contacto con ambos electrodos (celda no dividida) o solo con uno dividiendo la celda en sus compartimientos anódico y catódico mediante una membrana.

Estas celdas son ampliamente utilizadas en síntesis orgánicas e inorgánicas, recuperación de metales, celdas de combustible y en el tratamiento de efluentes mediante eliminación de metales, iones y compuestos orgánicos e inorgánicos. La figura 2 esquematiza una configuración de reactor tipo filtro prensa para la remoción de cianuro presente en aguas residuales, donde se emplearon un ánodo tridimensional y un cátodo poroso, mostrando la versatilidad de esta celda.

Figura 2. **Esquema de la configuración de un reactor tipo filtro-prensa de placas paralelas**



Fuente: PÉREZ, Tzayam; LEÓN, María y NAVA, José. *Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water.* p 2.

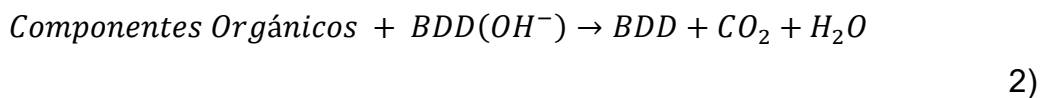
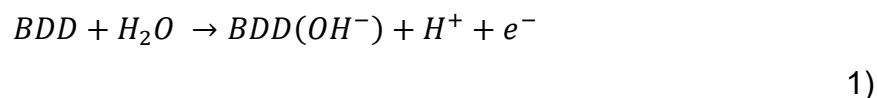
### 2.3 Celdas electroquímicas con electrodos de BDD

El uso de un electrodo sintético de diamante dopado con boro (BDD) en una oxidación anódica ha demostrado que la sobretensión de  $O_2$  es mucho más alta que la observada para los ánodos convencionales tales como  $PbO_2$ ,  $SnO_2$  dopado o  $IrO_2$ , produciendo mayores cantidades de  $OH\cdot$  a través de la reacción, lo que lleva a una remoción más rápida y efectiva de los contaminantes.<sup>4</sup>

---

<sup>4</sup> PATIÑO, Kelly; ARROYAVE, Sandra y MARÍN, Juan. *Oxidación Electroquímica y Ozonización Aplicadas al Tratamiento de Aguas de Lavado de la Producción de Biodiesel.* <https://scielo.conicyt.cl/scielo.php>.

Los electrodos sintéticos de diamantes dopados con boro (BDD), fabricados por deposición de vapor químico (CVD), se han utilizado para degradación de compuestos orgánicos recalcitrantes. Esta degradación puede tener lugar a través de la oxidación indirecta utilizando oxidantes formados en el ánodo. Estos se componen principalmente de radicales hidroxilos ( $\text{OH}\cdot$ ) formados por la oxidación de agua en BDD (ecuación 1) cuyas propiedades únicas permiten la oxidación a compuestos de  $\text{CO}_2$  como fenoles, clorofenoles, metoxifenol, hidroquinona, cresoles, naftales, medicamentos farmacéuticos, colorantes complejos, por mencionar algunos de ellos.



En comunicados anteriores, se ha reportado que la ecuación 1 ocurre en un rango de potenciales entre  $2,3 < E < 2,75 \text{ V}$ .<sup>5</sup>

## 2.4 Procesos de oxidación avanzada

La finalidad de estos procesos es eliminar compuestos solubles no biodegradables, presentes en el agua residual. El proceso consiste en una oxidación química, bajo condiciones moderadas de presión y temperatura, hasta la mineralización completa de contaminantes. El agente oxidante es el radical

---

<sup>5</sup> PÉREZ, Tzayam; LEÓN, María y NAVA, José. *Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water*. p 4.

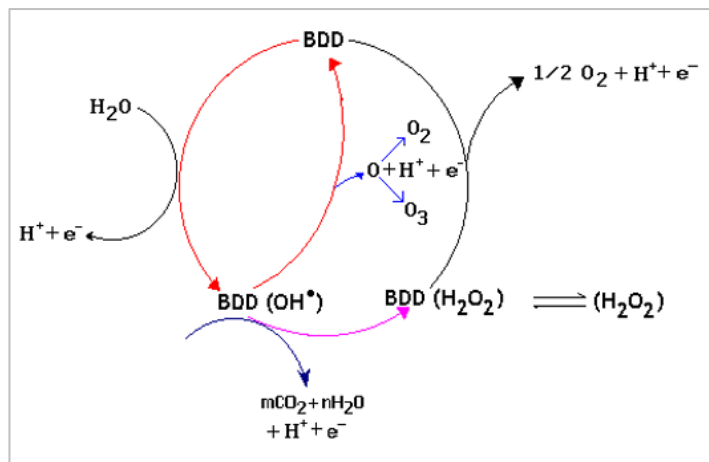


hidroxilo ( $\text{OH}\cdot$ ), el cual posee una elevadísima capacidad oxidante y con tiempos de reacción muy cortos.

### 2.4.1 Reacciones de oxidación del agua

El mecanismo de oxidación del agua sobre electrodos BDD se muestra en la figura 3, donde se observa la formación de radicales  $\text{OH}\cdot$  y los subproductos, como el  $\text{H}_2\text{O}_2$  y  $\text{O}_2$ , derivados de las reacciones secundarias.<sup>6</sup>

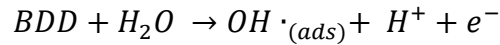
Figura 3. **Formación de radicales hidroxilo sobre electrodos BDD y los subproductos, en el proceso de oxidación del agua**



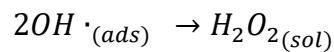
Fuente: NÚÑEZ, Francisco. *Electroincineración del p y o-cresol sobre electrodos de diamante dopado con boro (BDD) en una celda electroquímica FM01-LC*. p 11.

<sup>6</sup> NÚÑEZ, Francisco. *Electroincineración del p y o-cresol sobre electrodos de diamante dopado con boro (BDD) en una celda electroquímica FM01-LC*. p 11.

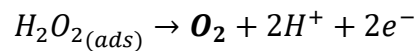
La primera reacción que se lleva a cabo es la oxidación del agua, en la cual se produce  $H^+$ ,  $e^-$  y el radical  $OH\cdot$ , como se muestra a continuación:



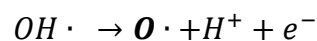
Si los radicales hidroxilos no son utilizados, puede ocurrir que algunos de los radicales presentes en la superficie reaccionen entre ellos para formar  $H_2O_2$ :



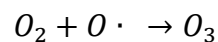
Si el  $H_2O_2$  absorbido se desorbe y difunde a la solución puede oxidar a la materia orgánica, pero la degradación ocurre con una eficiencia menor a la obtenida con el  $OH\cdot$ , lo cual es un efecto no deseado. Si el  $H_2O_2$  permanece absorbido, puede ser oxidado en la superficie del BDD, formando  $O_2$ .



Si esta reacción ocurre en paralelo con la formación de  $OH\cdot$ , se puede formar oxígeno monoatómico:



Cuando los productos  $O_2$  y  $O\cdot$  se combinan, pueden llegar a producir ozono. El ozono degrada la materia orgánica; sin embargo, este proceso tiene una eficiencia menor que el  $H_2O_2$  y el  $OH\cdot$ .



Para los propósitos de mineralización se pretende que la mayor cantidad de  $OH\cdot$  producidos permanezcan adsorbidos sin generar los subproductos de oxidación del agua mencionados en las reacciones anteriores. Es importante mencionar que las reacciones de oxidación del agua en los electrodos BDD,

son función del potencial, por lo que se debe encontrar el dominio de potencial de electrodo o bien la densidad de corriente apropiada para favorecer la formación del radical hidroxilo; si esto se logra, la transferencia de masa de la materia orgánica ocurre con mayor eficiencia, llevando a cabo una completa mineralización del compuesto orgánico.

## 2.5 Tipo de flujo

La reacción que ocurre en los electrodos de un reactor electroquímico a menudo está estrechamente relacionada con la hidrodinámica y, en la práctica, el patrón de flujo en las celdas de filtro-prensa se ha aproximado al flujo laminar o turbulento. Una aproximación teórica para un patrón laminar ha sido desarrollada usando la ecuación de Navier-Stokes para modelar el flujo laminar dentro de la celda, uniendo las condiciones de frontera de Dirichlet y Neumann. Otra aproximación emplea las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas (RANS), que incluyen viscosidad turbulenta por medio del modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ . Modelos turbulentos, en presencia de paredes sólidas, requieren el acoplamiento de las funciones logarítmicas universales de pared para las fronteras estáticas. En geometrías complejas, donde hay cambios en el área transversal del flujo, el campo de velocidad varía de forma aleatoria y caótica, generando flujos de chorro, vórtice y estructuras de flujo de rotación, también llamados remolinos turbulentos. En tales geometrías, los modelos de turbulencia se pueden usar para simular patrones de flujo realistas.<sup>7</sup>

---

<sup>7</sup> PÉREZ, Tzayam; DE LEÓN, Carlos; WALSH, Frank y NAVAS, José. *Simulation of current distribution along a planar electrode under turbulent flow conditions in a laboratory filter-press flow cell.* p 352.

Teniendo en cuenta que la mayoría de los reactores electroquímicos continuos funcionan en condiciones de flujo turbulento, la simulación en esas condiciones es atractiva para mejorar el diseño, con el fin de lograr mejores condiciones hidrodinámicas de transporte de masa y transferencia de carga.

Otro factor que debe considerarse es la distribución de corriente y potencial que afecta las características de ingeniería de la reacción dentro del reactor. Comúnmente, cuando se trabaja con electrodos de placa paralelos, los estudios se realizan bajo condiciones galvanostáticas suponiendo que la reacción de interés puede ocurrir sobre toda el área del electrodo. Sin embargo, se sabe que el uso de electrodos con un área superficial alta puede conducir a un potencial y distribuciones de densidad de corriente no heterogéneas a lo largo del electrodo, dando lugar a reacciones secundarias, como la electrólisis de la especie iónica de fondo o la degradación del material del electrodo. Estas modificaciones en el electrolito y el electrodo pueden producir subproductos y cambios de pH que afectan el rendimiento de la reacción de interés, por lo que es importante mantener un potencial y distribución corriente uniforme, a lo largo del electrodo de trabajo con el fin de asegurar la reacción deseada y aumentar la selectividad y eficiencia actual.

### 2.5.1 Flujo turbulento

En condiciones de flujo turbulento, las ecuaciones para el fluido incompresible se pueden expresar de la siguiente manera. Las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas y las ecuaciones de continuidad son:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla P + \nabla \cdot \left( (\mu + \mu_T)(\nabla u + (\nabla u)^T) \right)$$

3)

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0$$

4)

Donde  $u$  es el promedio del vector de velocidad,  $P$  la presión,  $\mu$  la viscosidad dinámica y  $\rho$  la densidad del fluido, y los llamados esfuerzos de Reynolds se pueden expresar en términos de una viscosidad turbulenta  $\mu_T$ , de acuerdo con el modelo de turbulencia estándar  $k - \varepsilon$ :

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 5)$$

$$\rho(u \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left( \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + P_k - \rho \varepsilon \quad 6)$$

$$\rho u \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon + C_{e1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{e2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 7)$$

Donde  $k$  es la energía cinética turbulenta,  $\varepsilon$  es la tasa de energía turbulenta disipada,  $P_k$  es el término de producción de energía y  $C_\mu$  (0,009),  $C_{e1}$  (1,44),  $C_{e2}$  (1,92),  $\sigma_k$  (1),  $\sigma_\varepsilon$  (1,3) son valores constantes adimensionales que se obtienen mediante el ajuste de datos para una amplia gama de flujos turbulentos. La notación  $( \ )^T$  denota la transposición de  $\nabla u$ , y no debería de confundirse con cualquier sufijo turbulento.

Este modelo se aplica a números de Reynolds elevados, por esta razón, en las regiones cercanas a las paredes, donde la velocidad del flujo decrece rápidamente, no es aplicable. Para resolver este problema se utilizan usualmente las funciones de pared, estas funciones son basadas en la ley universal de distribución de velocidades, que en una capa turbulenta se describe por la siguiente ecuación:

$$u^+ = 2,5 \ln y^+ + 5,5 \quad (8)$$

Donde  $u^+$  es el componente de velocidad normalizado dentro de la capa límite logarítmica y  $y^+$  es la distancia adimensional de la pared. Para resolver las ecuaciones (3) - (7), las condiciones de frontera son las siguientes:

- Un flujo normal en la entrada,  $u = -\mathbf{n}U_0$ , donde  $\mathbf{n}$  es el vector normal; en este trabajo la aproximación para los valores de entrada de  $k_0$  y  $\varepsilon_0$  se obtiene a partir de la intensidad turbulenta  $I_T$ , y la escala de longitud turbulenta  $L_T$ , mediante las siguientes suposiciones:  $k_0 = 3/2(U_0 I_T)^2$  y  $\varepsilon_0 = C_\mu^{3/4} k^{3/2}/L_T$ , donde  $I_T$  y  $L_T$ , se fijaron a 0,05 y 0,035 cm, respectivamente. La intensidad turbulenta para flujos completamente turbulentos tiene valores adimensionales entre 0,05 y 0,1. La escala de longitud turbulenta se puede determinar en tuberías en función del radio por medio de  $L_T = 0,07r$ .
- Un estrés normal es igual a la presión de salida,  $[-P + ((\mu + \mu_T)(\nabla u + (\nabla u)^T))]n = -nP_0$  con  $\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0$  y  $\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0$ . La ecuación anterior expresa que la característica turbulenta de cualquier cosa que esté fuera del dominio computacional es guiada por el flujo dentro del mismo. Tal suposición es físicamente razonable siempre y cuando cantidades relativamente pequeñas de líquido entren al sistema.
- Una velocidad  $u^+$  dada por ecuación 8 a una distancia  $y^+$  desde la superficie sólida, para todas las demás fronteras.

## 2.6 Distribución de corriente

La densidad de corriente,  $j$ , en cualquier punto dentro de la celda se calcula a partir del gradiente de potencial local,  $\phi$  de acuerdo con la Ley de Ohm.

$$j = -k\nabla\phi \quad 9)$$

Donde  $k$  es la conductividad electrolítica. Siguiendo el análisis de la conservación de carga  $\nabla \cdot j = 0$ , la distribución de potencial en el electrolito se describe por la ecuación de Laplace:

$$\nabla^2\phi = 0 \quad 10)$$

Dependiendo de las características de las condiciones de frontera en el electrodo de trabajo, pueden describirse tres tipos de modelos de distribución de corriente. Para la distribución de corriente primaria, las siguientes condiciones de fronteras son válidas tanto a lo largo del ánodo como del cátodo:

$$\phi = E_{oc_{anodo}} \quad 11)$$

$$\phi = E_{oc_{catodo}} \quad 12)$$

Donde el gradiente de potencial local,  $\phi$ , es igual al potencial de la solución adyacente a cada electrodo que, en la práctica, corresponde al potencial de circuito abierto de los electrodos.

### 2.6.1 Distribución de corriente primaria

Dependiendo de las características de las condiciones de frontera en el electrodo de trabajo, se pueden especificar tres tipos de modelos de distribución de corriente. Para una distribución de corriente primaria se cuenta con las siguientes condiciones de frontera a lo largo del ánodo, el cátodo y las paredes aislantes:

$$\phi = \phi_a \quad (13)$$

$$\phi = \phi_c \quad (14)$$

$$-k \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = 0 \quad (15)$$

Donde  $\phi_a$ ,  $\phi_c$  son potenciales de superficie de ánodo y cátodo, que se ajustan al potencial de la solución adyacente a cada electrodo, y  $\xi$  es la normal de la superficie del cátodo. En la práctica, el potencial de la solución adyacente a cada electrodo corresponde al potencial de circuito abierto. La distribución de corriente primaria asume que tanto las condiciones de transferencia de carga como las condiciones de transporte de masa son insignificantes.

### 2.6.2 Distribución de corriente secundaria

Se puede obtener una distribución de corriente secundaria cuando la reacción electroquímica dependa exclusivamente de la transferencia de carga y



el gradiente de concentración sea despreciable. Se asume que la concentración de la especie es similar en la superficie del electrodo de trabajo y en la mayor parte del electrolito. Bajo estas condiciones, la densidad de corriente local puede estar relacionada con el sobrepotencial local,  $\eta$  en el electrodo.

El exceso de potencial es la diferencia de potencial entre el electrodo y la solución adyacente al electrodo:

$$\eta = V - \phi_0 \quad (16)$$

El sobrepotencial está adecuadamente relacionado con la magnitud de la densidad de corriente local a través de la aproximación Tafel:

$$j = j_0 \exp\left(\frac{\eta}{b}\right) \quad (17)$$

Donde  $j_0$  es el intercambio de densidad actual,  $b$  es la pendiente anódica de Tafel, y  $\eta$  es el potencial de exceso en el electrodo. El modelo de distribución de corriente secundaria posee las siguientes condiciones de frontera:

- No hay corriente en todas las superficies aislantes y en las corrientes de flujo de entrada y salida del electrolito, según la ecuación 15.
- La cinética de Tafel se aplica en el electrodo de trabajo, el cual soporta una reacción bajo el control de transferencia de carga:

$$-k \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = j_0 \exp\left(\frac{\eta}{b_a}\right) \quad (18)$$

- Se asume que la reacción del contraelectrodo tiene una densidad de corriente aplicada constante:

$$-k \frac{\partial \phi}{\partial \xi} = -j_{ave} \left( \frac{A_{WE}}{A_{CE}} \right) \quad 19)$$

Donde  $j_{ave}$  es la densidad de corriente en el electrodo de trabajo, y  $A_{WE}$  y  $A_{CE}$  son el área del electrodo de trabajo y el contra electrodo, respectivamente. En la práctica, la densidad de corriente promedio es la densidad de corriente aplicada entre el electrodo de trabajo y el contraelectrodo.

## 2.7 Método de elementos finitos

Actualmente las empresas realizan análisis y mejoras de calidad por medio de simulación computacional. La mayoría de estos análisis se llevan a cabo mediante uso de algoritmos que utilizan el Método de Elementos Finitos, para obtener respuestas en numerosos problemas de ingeniería.

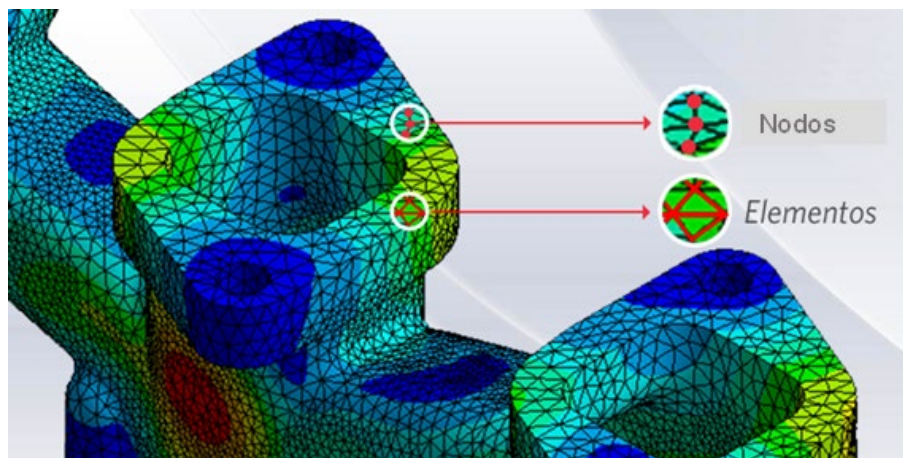
El equipo o pieza que se trabajará, también denominado geometría, se subdivide en partes más pequeñas, conocidas como elementos; el conjunto de estos elementos representa el dominio del problema. Al dividir la geometría en pequeños elementos se logra resolver un problema complejo, lo que permite al software hacer las tareas con eficiencia.<sup>8</sup>

---

<sup>8</sup> MIRLISENNA, Giuseppe. *Método de Elementos Finitos*. <https://www.esss.co/blog/es/metodo-de-los-elementos-finitos-que-es/>.

Esta operación sustituye un número infinito de variables desconocidas por un número limitado de elementos definidos. Los elementos pueden ser triangulares, cuadrangulares, entre otros, dependiendo del tipo y tamaño del problema. Los elementos están conectados entre sí por nodos o puntos nodales, y al conjunto de elemento y nodos se le conoce como *mall*a. Las ecuaciones matemáticas que describen el comportamiento físico no resuelven el problema de manera exacta, sino aproximada, debido a las subdivisiones de la geometría. Por lo tanto, entre menor sea el tamaño de la malla y mayor el número de elementos que esta posea, los resultados del análisis tendrán mejor precisión.

Figura 4. **Nodos y elementos de una malla**



Fuente: MIRLISENNA, Giuseppe. Método de Elementos Finitos.

<https://www.esss.co/blog/es/metodo-de-los-elementos-finitos-que-es/>. Consulta: 13 de marzo de 2018.

### **2.7.1 Comsol Multiphysics**

Comsol es un software CAE (Computer Aided Engineering) utilizado para realizar análisis, simulaciones y modelo de fenómenos físico 3D en ingeniería. El programa resuelve problemas de mecánica de fluidos, estructurales, sistema multicuerpos, térmicos, electromecánicos, de optimización, entre otros.<sup>9</sup> Los parámetros que generalmente se utilizan para las simulaciones están basados en el ambiente y en las interacciones que el dominio experimenta cuando empieza a operar la simulación.

---

<sup>9</sup> *3D CAD Portal*. 2019. <http://www.3dcadportal.com/comsol.html>.

### 3. DISEÑO METODOLÓGICO

A continuación, se detalla la metodología que se utilizó para llevar a cabo el trabajo de investigación, desde el procedimiento empleado para diagramar el diseño de celda propuesto, los parámetros asignados para la simulación de la distribución de corriente primaria y secundaria, hasta el procedimiento para asignar las ecuaciones necesarias de cada simulación, en el programa de simulación computacional.

#### 3.1 Variables

Las variables utilizadas en la simulación gráfica para comparar ambos diseños de celdas tipo filtro-prensa son cuantitativas continuas.

##### 3.1.1 Variables independientes

- Posiciones a través del ancho de la celda electroquímica (cm).
- Posición a un 1/3, 1/2 y 2/3 a través del largo de la celda electroquímica (cm).
- Flujo volumétrico de entrada de la celda (L/min).
- Conductividad electrolítica (k).
- Potencial del circuito abierto del ánodo ( $\phi_a$ ).
- Potencial del circuito abierto del cátodo ( $\phi_c$ ).
- Pendiente de Tafel anódica ( $b_a$ ).
- Pendiente de Tafel catódica ( $b_c$ ).
- Densidad de corriente de intercambio ( $j_0$ ).
- Potencial aplicado anódico ( $V_a$ ).

- Potencial aplicado catódico ( $V_c$ ).

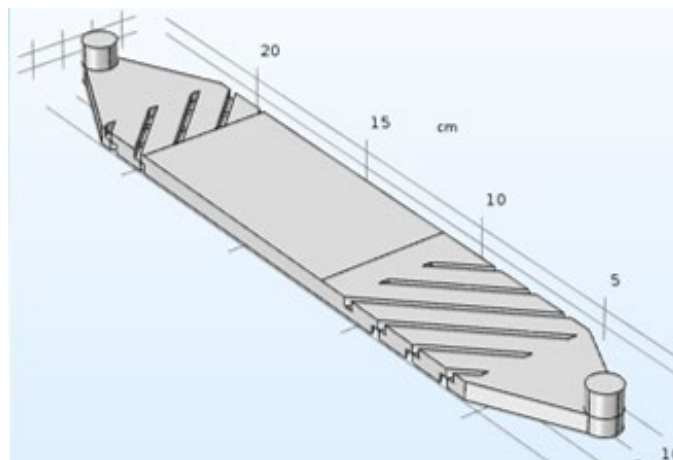
### 3.1.2 Variables dependientes

- Velocidad del flujo en la celda electroquímica (cm/s)
- Densidad de corriente ( $A/cm^2$ )

### 3.2 Delimitación del campo de estudio

En este estudio se modificó el diseño original de una celda electroquímica tipo filtro-prensa, alargando el promotor de turbulencia, el electrodo de trabajo y contraelectrodo, de tal manera que abarquen todo el largo de la celda.

Figura 5. **Diseño original de la celda electroquímica tipo filtro-prensa**



Fuente: PÉREZ, Tzayam. *Celda Electroquímica tipo filtro-prensa con el Diseño Original.*

Se realizaron simulaciones gráficas para comparar el comportamiento de la velocidad del flujo dentro de cada celda y comparar cómo se distribuye la corriente primaria y secundaria a través de los electrodos, esto con el fin de determinar el efecto que tiene el área superficial en el proceso de oxidación avanzada.

### 3.3 Recursos humanos disponibles


Investigadora: Br. Melannie Fabiola Chávez Cordón

Asesor: M.A. Ing. Qco. William Eduardo Fagiani Cruz



### 3.4 Recursos materiales disponibles

Para realizar el trabajo de investigación se utilizó el equipo detallado a continuación:

Tabla I. **Equipo a utilizar**

<b>Equipo</b>	<b>Imagen</b>	<b>Descripción</b>	<b>Uso</b>
Computadora de escritorio		Computadora con procesador Intel (R) Core (TM) i9-7900X CPU de 3.30 GHz, 64 GB de RAM y 64 bits de sistema operativo.	Esta computadora se utilizó por medio del programa TeamViewer, para realizar la geometría de la celda electroquímica y para realizar las simulaciones de velocidad y distribución de corriente con el diseño modificado de la celda.

Continuación de la tabla I.

<b>Equipo</b>	<b>Imagen</b>	<b>Descripción</b>	<b>Uso</b>
Laptop Acer (Aspire)		Computador con procesador Intel Core i5, Intel Core HD graphics, 8GB de memoria Ram y 64 bits de sistema operativo.	Esta computadora se utilizó para las simulaciones de velocidad y distribución de corriente primaria y secundaria con el modelo original de la celda electroquímica.
TeamViewer		Software de control remoto	Este programa permitió conectarse a la computadora de escritorio desde la Laptop Acer, sin importar la distancia a la que se esté. Al conectarse a la computadora de escritorio, se pudo sacar provecho de las especificaciones de la computadora y utilizar COMSOL sin problema.

Fuente: elaboración propia.



### **3.5 Técnica cuantitativa**

El estudio de la hidrodinámica, distribución de corriente primaria y secundaria de ambas celdas electroquímicas tipo filtro-prensa, se resolvió numéricamente en 3D a partir del método de elementos finitos y las ecuaciones de RANS, que incluyen viscosidad turbulenta por medio del modelo  $k-\epsilon$ .

Los resultados obtenidos fueron gráficas de velocidad en función del ancho de la celda electroquímica, y distribución de corriente primaria y secundaria en función del largo de la celda electroquímica. Para comparar el efecto que tuvo el área superficial de la celda electroquímica en el proceso de oxidación avanzada, se analizaron los valores numéricos obtenidos en las gráficas, por lo que se estableció que el estudio propuesto tendrá un enfoque cuantitativo.

### **3.6 Ordenamiento y procesado de la información**

Ocurre como se describe a continuación:

#### **3.6.1 Metodología para realizar la geometría del dominio**

- Se dibujó el contorno de la celda electroquímica con los dispersores de flujo en la entrada y la salida de la celda. De acuerdo con el diseño original, el área donde ocurrió la reacción de oxidación avanzada será de 4 cm de ancho por 16 cm de largo.
- Se dibujaron las barillas del lado superior del promotor de turbulencia a lo largo de toda la celda e inclinadas a la izquierda.

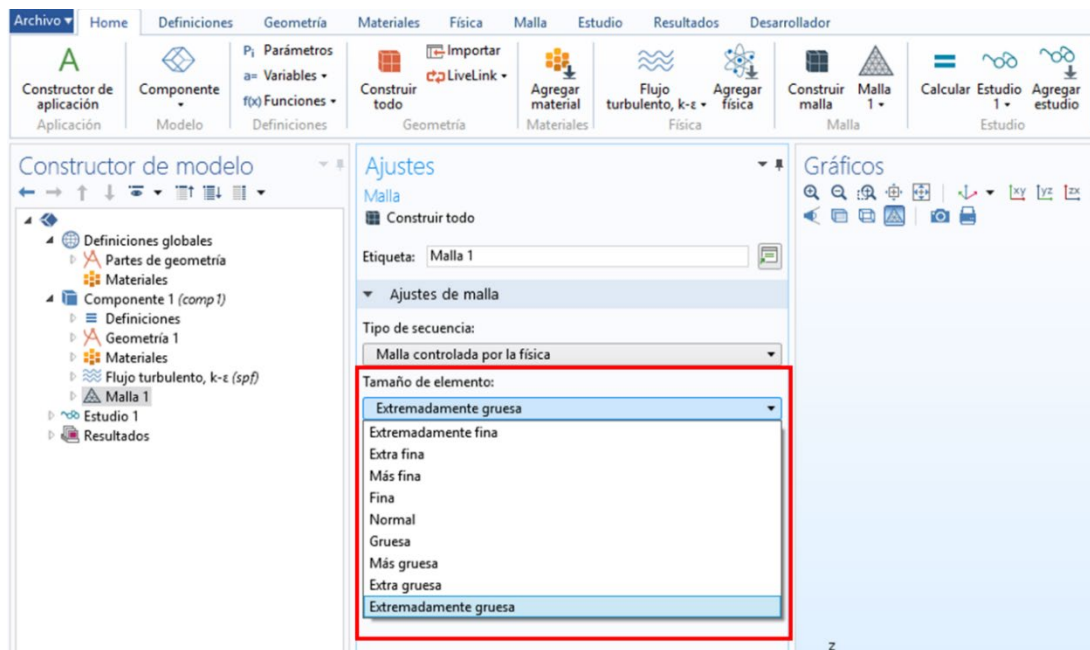
- Se dibujaron las barillas del lado inferior del promotor de turbulencia a lo largo de toda la celda e inclinadas a la derecha.
- Se extruyeron las barras superiores del promotor de turbulencia 0,275 cm sobre el eje  $z^+$ .
- Se extruyeron las barras inferiores del promotor de turbulencia 0,275 cm sobre el eje  $z^-$ .
- Se unieron ambas barillas para que el promotor de turbulencia esté conformado por una sola geometría. El promotor de turbulencia midió 4 cm de ancho y 16 cm de largo.
- Se extruyó el contorno de la celda electroquímica realizado en el paso 1, 0,55 cm sobre el eje  $z^+$ . De esta manera se formarán las paredes de la celda, quedando la geometría del promotor de turbulencia dentro de ella.
- Se realizó una diferencia entre la geometría del promotor de turbulencia (paso 6) y la geometría de la celda electroquímica (paso 7) para suprimir las partes donde no fluye el agua, creando una sola geometría que abarcó las paredes de la celda, los dispersores de flujo y el promotor de turbulencia.
- Se dibujaron las compuertas de entrada y de salida en el lado superior de la celda electroquímica, con un radio de 0,5 cm cada una.
- Se extruyó cada compuerta 1 cm sobre el eje  $z^+$ .
- Se unió la geometría del paso 8 con la geometría de las compuertas para obtener un solo dominio computacional.

### **3.6.2 Metodología para realizar el análisis de malla**

Para conocer el número de elementos óptimo que debe tener la malla del dominio computacional, se realizó un análisis de malla, el cual se llevó a cabo de la siguiente manera:

- Se seleccionó el dominio computacional y se seleccionó el menú Malla.
- Se eligió cada tamaño de elemento que propone el software (figura 1), empezando por la malla extremadamente gruesa hasta la extremadamente fina.

Figura 6. **Tamaños de elementos para el análisis de malla**



Fuente: elaboración propia.

- Se simuló la velocidad del flujo dentro de la celda electroquímica en función del ancho de la celda, con los diferentes tamaños de malla.
- Se compararon las gráficas obtenidas con cada malla.
- Entre más fina es la malla, más complejo se vuelve el cálculo, por lo tanto, se eligió la malla cuyos resultados no presenten una variación significativa a la malla posterior.

El dominio creado en el numeral 4.6.1 con la malla seleccionada en el numeral 4.6.2, se utilizó para la simulación tanto de la hidrodinámica como de la distribución de corriente primaria y secundaria de la celda electroquímica.

### **3.6.3 Metodología para la simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica**

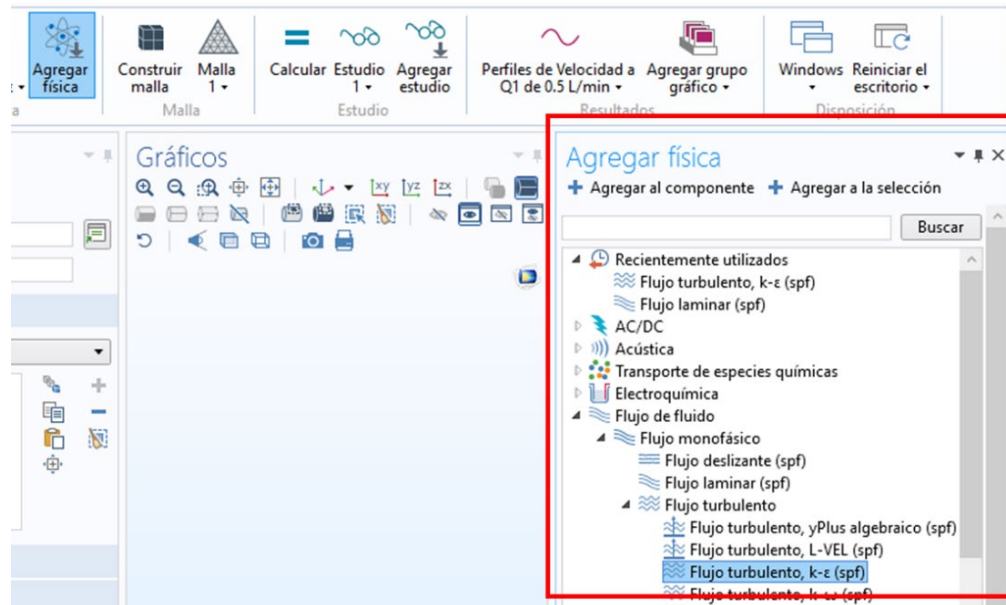
La metodología es la siguiente:

#### **3.6.3.1 Asignación de las ecuaciones que se utilizarán en la simulación de la hidrodinámica**

Para este estudio se asumió que el flujo era turbulento, por lo tanto, se utilizaron las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas (RANS), que incluyen viscosidad turbulenta por medio del modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ . A continuación, se presenta la metodología utilizada para agregar el modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  a la simulación (figura 6):

- En el menú inicio, se seleccionó el submenú Agregar Física
- En la pestaña emergente, se seleccionó la opción Flujo de Fluidos
- Se seleccionó Flujo turbulento
- Se seleccionó Flujo turbulento,  $\kappa$ - $\epsilon$ , y se agregó al componente

Figura 7. Selección del modelo k- $\epsilon$  para la simulación de la hidrodinámica dentro de la celda



Fuente: elaboración propia.

### 3.6.3.2 Asignación de parámetros necesarios para la simulación de la hidrodinámica

- Se estableció la temperatura a la que se realizaron las simulaciones de la celda electroquímica (25 °C).
- Se establecieron las propiedades del flujo como densidad ( $\rho$ ) y viscosidad dinámica ( $\mu$ ).
- Se asignaron los valores iniciales: Velocidad ( $u$ ) y Presión ( $P$ ).
- Se seleccionó el dominio creado para indicar las paredes donde fluiría el agua.
- Se seleccionó la compuerta donde entraría el fluido.

- Se estableció el caudal con el que entraría el fluido a la celda electroquímica. Para este estudio se trabajaron cinco caudales en un rango de 0,5 a 3,0 L/min.
- Se seleccionó la compuerta donde saldría el fluido.
- Posteriormente, en el submenú Agregar Estudio se seleccionó el estado estacionario.

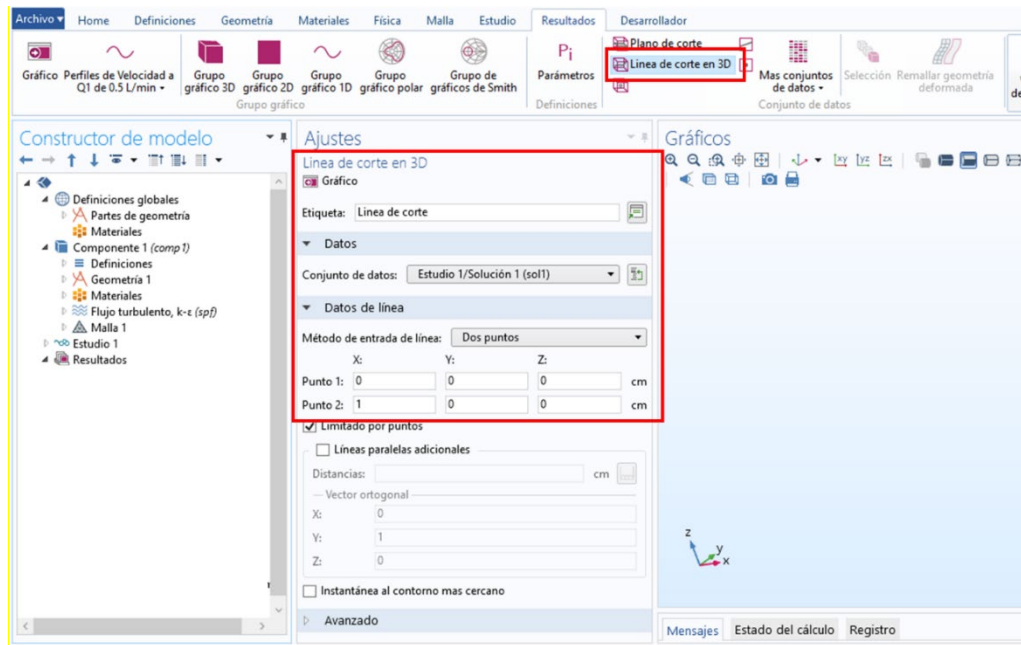
### **3.6.3.3 Metodología para crear los gráficos de velocidad en función del ancho de la celda electroquímica**

Para realizar un análisis más detallado del comportamiento hidrodinámico de la celda electroquímica, se simuló la velocidad del flujo en función del ancho de la celda, a tres diferentes posiciones del largo de la celda, las cuales se representaron por tres líneas de corte. Para crear los perfiles de velocidad se siguió la siguiente metodología:

- Se creó una línea de corte en 3D en el menú de resultados (figura 7).
- Se etiquetó la línea de corte, con la posición que tendría a lo largo de la celda.
- Se asignó el método de entrada de la línea, el cual fue de dos puntos.
- Se asignaron las coordenadas  $x$  (ancho de la celda),  $y$  (largo de la celda) y  $z$  (alto de la celda) para cada punto, de tal manera que la línea de corte atravesara todo el ancho de la celda y estuviera posicionada a la mitad del alto de la celda.
- Se crearon tres líneas de corte: a  $1/3$ ,  $1/2$  y a  $2/3$  del largo de la celda, por lo tanto, las coordenadas del eje  $x$  y  $z$  fueron igual en las tres líneas de corte, variando únicamente el eje  $y$ .

- Se creó el gráfico con cada línea de corte.

Figura 8. Línea de corte en 3D



Fuente: elaboración propia.

- Se creó un gráfico 1D en el menú de resultados.
- Se etiquetó la gráfica con el caudal utilizado para la simulación, de esta manera se llevó un control de los gráficos creados.
- En la opción de conjunto de datos, se seleccionó la línea de corte a 1/3 de la celda.
- Se activaron las etiquetas del eje  $x$  y el eje  $y$ , colocándole nombre a cada uno. El eje  $x$  se nombró ancho de la celda (cm) y el eje  $y$  como velocidad (cm/s); y se creó el gráfico.
- Se repitió del paso 7 al 10 con las líneas de corte a 1/2 y 2/3 de la celda.

- Una vez obtenidos los tres gráficos, se ajustaron los límites de cada eje hasta lograr apreciar con detalle el comportamiento de las gráficas.
- Se repitió del paso 7 al 12 con los otros cuatro caudales restantes.

### **3.6.4 Metodología para la simulación de la distribución de corriente primaria en función del largo de la celda electroquímica**

Como la distribución de corriente primaria asume que tanto las condiciones de transferencia de carga como las condiciones de transporte de masa no son significativas, la distribución de corriente estará determinada por la resistencia óhmica dentro de la celda. Para este estudio, la reacción electroquímica en el electrodo de trabajo se consideró reversible y la distribución de corriente primaria dependió únicamente de la geometría de la celda.

#### **3.6.4.1 Asignación de las ecuaciones que se utilizarán en la simulación de la distribución de corriente primaria**

De acuerdo con el análisis de conservación de carga,  $\nabla \cdot j = 0$ , el potencial de distribución en el electrolito se describió por la ecuación de Laplace.<sup>10</sup>

---

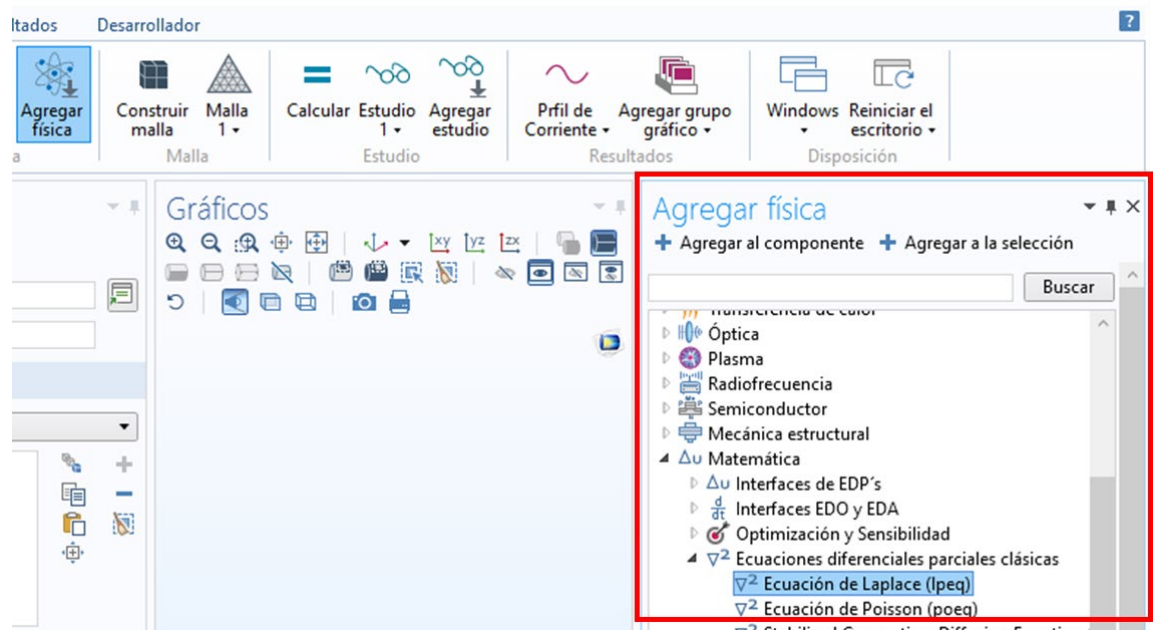
<sup>10</sup> PÉREZ, Tzayam; DE LEÓN, Carlos; WALSH, Frank y NAVAS, José. Simulation of current distribution along a planar electrode under turbulent flow conditions in a laboratory filter-press flow cell. p 355.



A continuación, se presenta la metodología utilizada para agregar la ecuación de Laplace a la simulación (figura 8):

- En el menú inicio, se seleccionó el submenú Agregar Física.
- En la pestaña emergente, se seleccionó la opción Matemática.
- Se seleccionó Ecuaciones diferenciales parciales clásicas.
- Se seleccionó Ecuación de Laplace y se agregó al componente.

Figura 9. Selección de la ecuación de Laplace para la simulación de la distribución de corriente primaria



Fuente: elaboración propia.

### 3.6.4.2 Asignación de parámetros necesarios para la simulación de la hidrodinámica

- Se estableció un valor para la conductividad electrolítica ( $k$ ).
- Se seleccionaron las partes del dominio que representarían el ánodo, el cual estaba conformado por la parte superior del promotor de turbulencia.
- Se asignó el valor del potencial del circuito abierto del ánodo ( $\phi_a$ ).
- Se seleccionaron las partes del dominio que representarían el cátodo, el cual estaba conformado por la parte inferior del promotor de turbulencia.
- Se asignó el valor del potencial del circuito abierto del cátodo ( $\phi_c$ ).
- Posteriormente, en el submenú Agregar Estudio se seleccionó el estado estacionario.

Tabla II. **Parámetros utilizados en simulaciones numéricas de distribución de corriente primaria, a 298 K**

1. Conductividad electrolítica, $k$	$0,35 \Omega^{-1}cm^{-1}$
2. Potencial del circuito abierto del ánodo $\phi_a$	$0,6 V$
3. Potencial del circuito abierto del cátodo $\phi_c$	$0,0 V$

Fuente: PÉREZ, Tzayam; LEÓN, María y NAVA, José. Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water. p 2

### 3.6.4.3 Metodología para crear los gráficos de distribución de corriente primaria en función del largo de la celda electroquímica

- Se creó una línea de corte en 3D en el menú de resultados (figura 7).
- Se etiquetó la línea de corte como línea de corte anódica o catódica.
- Se asignó el método de entrada de las líneas, el cual fue de dos puntos.
- Se asignaron las coordenadas  $x$  (ancho de la celda),  $y$  (largo de la celda) y  $z$  (alto de la celda) para cada punto, de tal manera que la línea de corte atravesara todo el largo de la celda y estuviera posicionada a la mitad del ancho de la celda.
- Se crearon dos líneas de corte: una que estuviera sobre el ánodo y otra que estuviera sobre el cátodo, por lo tanto, las coordenadas del eje  $x$  y  $y$  serían igual en las dos líneas de corte, variando únicamente el eje  $z$ .
- Se creó el gráfico con cada línea de corte.
- Se creó un gráfico 1D en el menú de resultados.
- Se etiquetó la gráfica, de acuerdo al electrodo donde se realizó la simulación.
- En la opción de conjunto de datos, se seleccionó la línea de corte anódica.
- Se activaron las etiquetas del eje  $x$  y el eje  $y$ , colocándole nombre a cada uno. El eje  $x$  se nombró Largo de la celda (cm) y el eje  $y$  como Distribución de Corriente  $j$  (A/cm<sup>2</sup>).
- Se repitió del paso 7 al 10 con la línea de corte catódica.
- Una vez obtenidos los dos gráficos, se ajustaron los límites de cada eje hasta lograr apreciar con detalle el comportamiento de las gráficas.

### **3.6.5 Metodología para la simulación de la distribución de corriente secundaria en función del largo de la celda electroquímica**

Al igual que el estudio de la distribución de corriente primaria, la distribución de corriente secundaria también se basó en la ecuación de Laplace y las respectivas condiciones de frontera descritas en la sección del marco teórico, por lo tanto, para asignar las ecuaciones a la simulación de la distribución de corriente secundaria, se utilizó la misma metodología descrita en el numeral 3.6.4.1.

#### **3.6.5.1 Asignación de parámetros necesarios para la simulación de la hidrodinámica**

- En el menú inicio, se seleccionó el submenú Parámetros y se establecieron los parámetros descritos en la tabla III.
- En el menú inicio, se seleccionó el submenú Variables.
- Se agregaron las variables  $j_a$  y  $j_c$ , asignándole a cada variable las ecuaciones 14 y 15, modificadas para cada electrodo. Era importante que los símbolos de las variables en las ecuaciones fueran iguales a los símbolos descritos en la sección de parámetros.
- Se seleccionaron las partes del dominio que representaban el ánodo, el cual estaba conformado por la parte superior del promotor de turbulencia.
- Se asignó el valor de la densidad de corriente del ánodo, para ello se colocó únicamente la variable  $j_a$ , ya que anteriormente se le asignó una ecuación a esa variable.
- Se seleccionaron las partes del dominio que representaban el cátodo, el cual estaba conformado por la parte inferior del promotor de turbulencia.

- Se asignó el valor de la densidad de corriente del cátodo, para ello se colocó únicamente la variable  $j_c$ , ya que anteriormente se le asignó una ecuación a esa variable.
- Posteriormente, en el submenú Agregar Estudio se seleccionó el estado estacionario.

Tabla III. **Parámetros utilizados en simulaciones numéricas de distribución de corriente secundaria, a 298 KG**

1. Conductividad electrolítica, $k$	$0,35 \Omega^{-1}cm^{-1}$
2. Potencial del circuito abierto del ánodo $\phi_a$	$0,6 V$
3. Potencial del circuito abierto del cátodo $\phi_c$	$0,0 V$
4. Pendiente de Tafel anódica $b_a$	$0,25 V$
5. Pendiente de Tafel catódica $b_c$	$0,05 V$
6. Densidad de corriente de intercambio $j_0$	$3 \times 10^{-7} mAcm^{-2}$
7. Potencial aplicado anódico	$1,0, 1,5 y 2,0 V$
8. Potencial aplicado catódico	$0,05 V$

Fuente: PÉREZ, Tzayam; LEÓN, María y NAVA, José. Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water. p 2

### **3.6.5.2 Metodología para crear los gráficos de distribución de corriente secundaria en función del largo de la celda electroquímica**

En la simulación de la distribución de corriente secundaria, se utilizó un potencial aplicado catódico constante y un potencial aplicado anódico de 1,0, 1,5 y 2,0 V. El potencial aplicado anódico se modificó cuando se ingresaron los parámetros de la tabla III de acuerdo con la metodología del numeral 4.6.5.1. Se comenzó con el potencial de 1,0 V y se continuó con la siguiente metodología:

- Se creó una línea de corte en 3D en el menú de resultados.
- Se etiquetó la línea de corte como línea de corte anódica o catódica.
- Se asignó el método de entrada de las líneas, el cual fue de dos puntos.
- Se asignaron las coordenadas  $x$  (ancho de la celda),  $y$  (largo de la celda) y  $z$  (alto de la celda) para cada punto, de tal manera que la línea de corte atravesara todo el largo de la celda y estuviera posicionada a la mitad del ancho de la celda.
- Se crearon dos líneas de corte: una que estaba sobre el ánodo y otra que estaba sobre el cátodo, por lo tanto, las coordenadas del eje  $x$  y  $y$  fueron igual en las dos líneas de corte, variando únicamente el eje  $z$ .
- Se creó un gráfico con cada línea de corte.
- Se creó un gráfico 1D en el menú de resultados.
- Se etiquetó la gráfica, de acuerdo al electrodo donde se realizó la simulación.
- En la opción de conjunto de datos, se seleccionó la línea de corte anódica.

- Se activaron las etiquetas del eje  $x$  y el eje  $y$ , colocándole nombre a cada uno. El eje  $x$  se nombró Largo de la celda (cm) y el eje  $y$  como Distribución de Corriente  $j$  (A/cm<sup>2</sup>).
- Se repitió del paso 7 al 10 con la línea de corte catódica.
- Una vez obtenidos los dos gráficos, se ajustaron los límites de cada eje hasta lograr apreciar con detalle el comportamiento de las gráficas.
- Repetir del paso 7 al 12 con el potencial aplicado anódico 1,5 y 2 V.

### **3.7 Plan de análisis de los resultados**

A continuación, se describe el método que se utilizó para analizar los resultados obtenidos:

#### **3.7.1 Métodos y modelos según tipo de variable**

Los datos obtenidos en las simulaciones se llevaron a cabo por medio del método de elementos finitos. Para la simulación de la hidrodinámica de la celda electroquímica se utilizaron las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas (RANS), que incluyen viscosidad turbulenta por medio del modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ , y la simulación de la distribución de corriente de la celda electroquímica se describió por las respectivas condiciones de frontera de la distribución de corriente primaria y secundaria a través de la ley de Ohm y la ecuación de Laplace.

### **3.7.2 Programas a utilizar para el análisis de datos**

El análisis de los datos obtenidos de las simulaciones de hidrodinámica y distribución de corriente primaria y secundaria se realizó en un programa de simulación computacional diseñado para analizar, simular y modelar fenómenos físicos 3D en ingeniería.

También se utilizó el programa Microsoft Word 365 ProPlus para editar y presentar el informe con los resultados obtenidos en este trabajo de investigación.

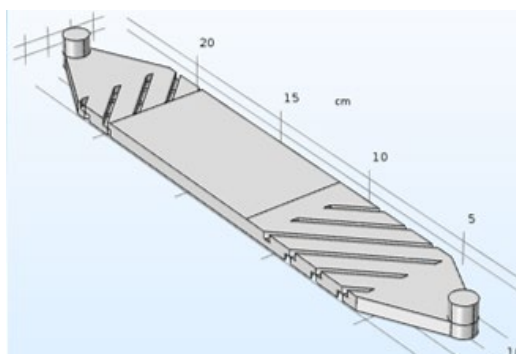


## 4. RESULTADOS

### 4.1 Geometría de ambos diseños de celda electroquímica tipo filtro-prensa y análisis de malla

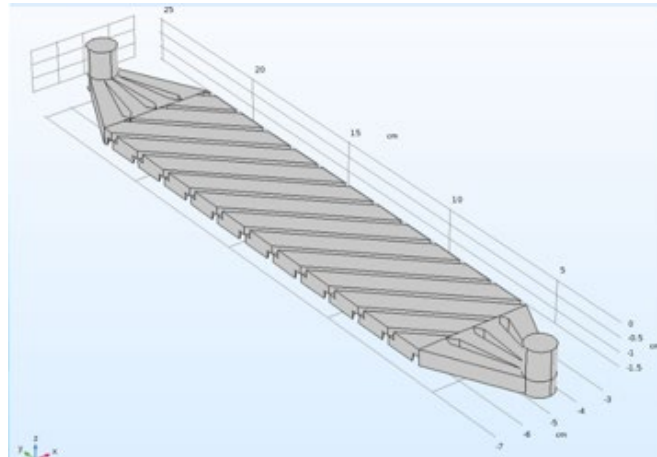
En las figuras 10 y 11 se presentan los dos diseños de la celda electroquímica tipo filtro-prensa que fueron estudiados. Ambos diseños poseen una compuerta de entrada y una salida con un radio de 0,5 cm cada una. La celda original posee electrodos de 8 cm de largo y 4 cm de ancho, y dos promotores de turbulencia, uno antes del electrodo (6 cm de largo por 4 cm de ancho) y otro después del electrodo (2 cm de largo por 4 cm de ancho). La celda con el diseño propuesto posee electrodos de 16 cm de largo y 4 cm de ancho y un único promotor de turbulencia, con la misma área superficial que los electrodos, y se encuentra entre el electrodo anódico y catódico.

Figura 10. **Geometría de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original**



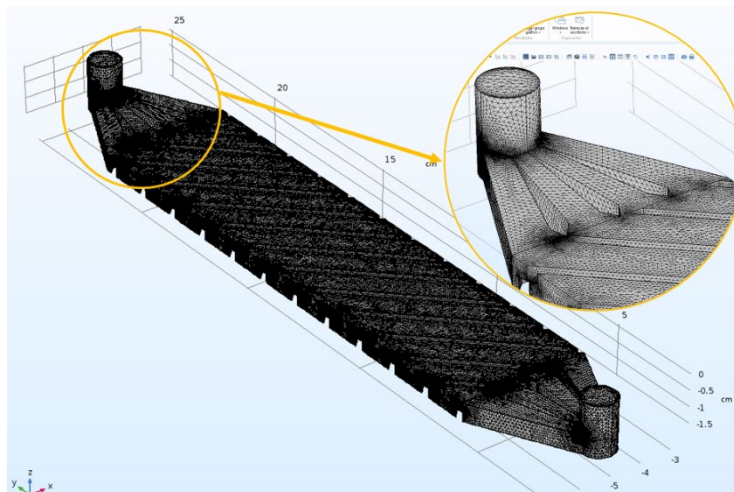
Fuente: PÉREZ, T. Celda Electroquímica tipo filtro-prensa con el Diseño Original. 2018.

Figura 11. **Geometría de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados**



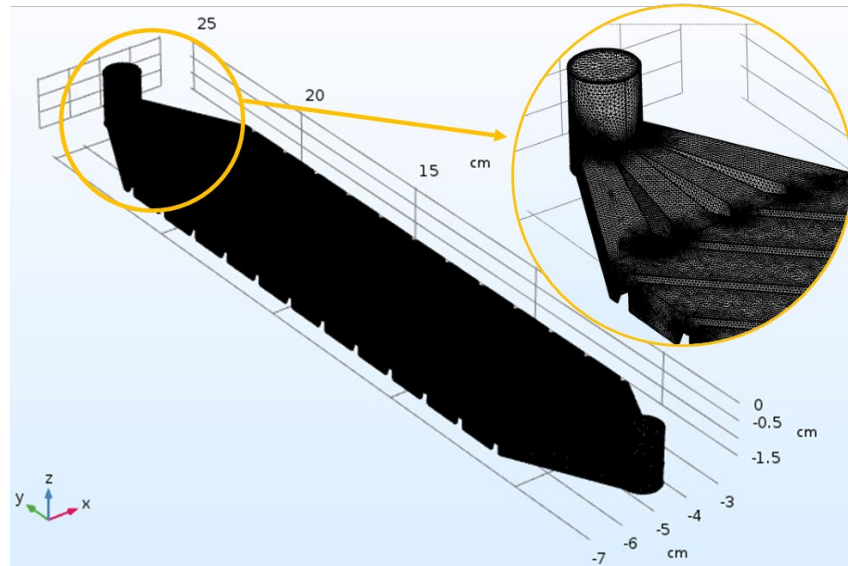
Fuente: elaboración propia.

Figura 12. **Análisis de malla realizado con la malla normal en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto**



Fuente: elaboración propia.

Figura 13. **Análisis de malla realizado con la malla fina en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto**



Fuente: elaboración propia.

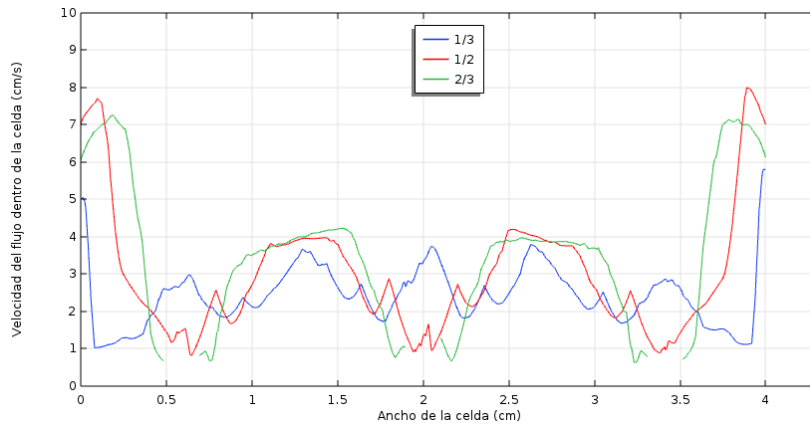
## 4.2 Simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica

La información atingente se presenta a continuación:

### 4.2.1 Resultados de la hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados

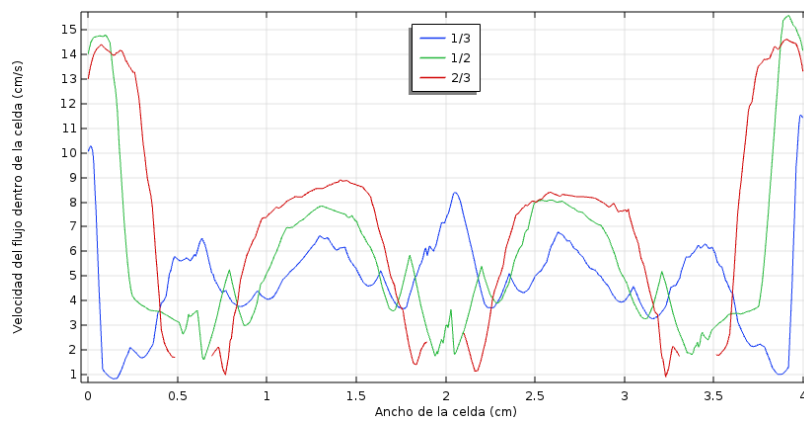
A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la hidrodinámica con cinco flujos de entrada diferentes, en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto.

**Figura 14. Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 0,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



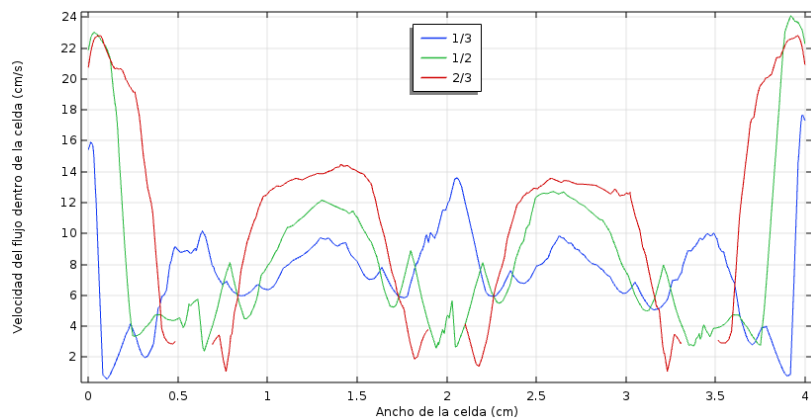
Fuente: elaboración propia.

**Figura 15. Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



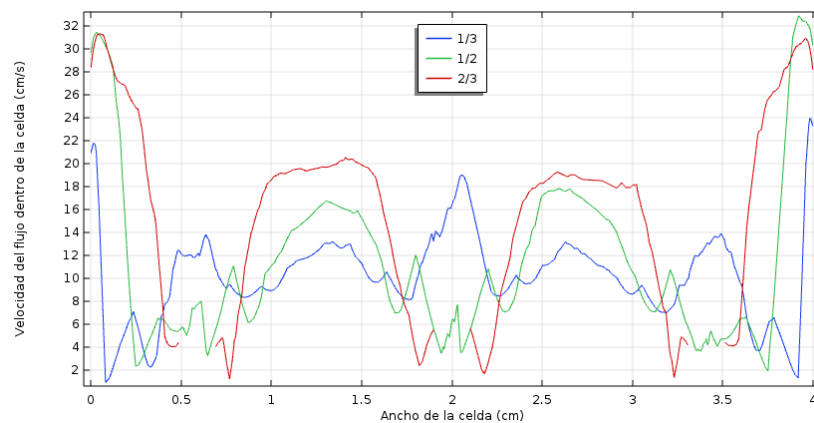
Fuente: elaboración propia.

Figura 16. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



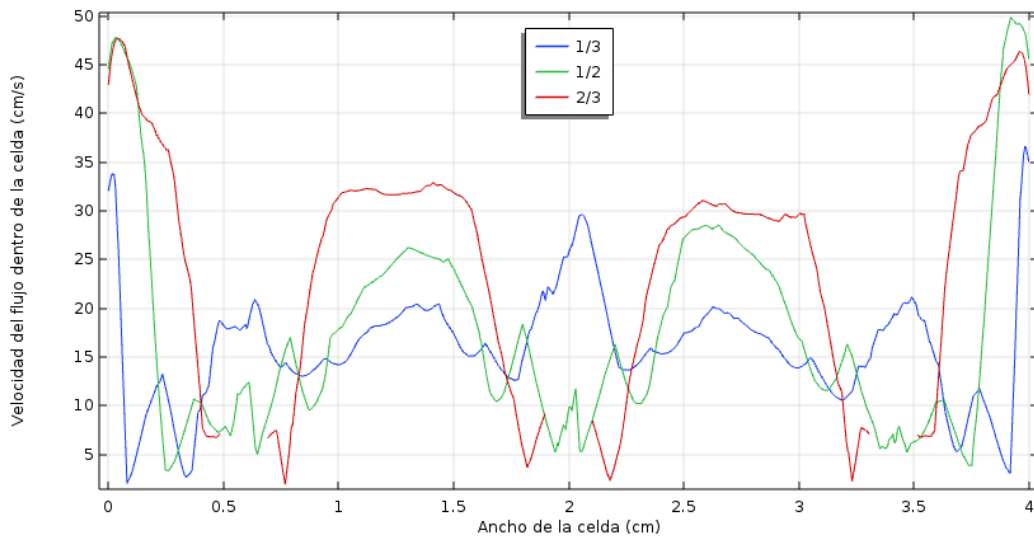
Fuente: elaboración propia.

Figura 17. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 2,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



Fuente: elaboración propia.

**Figura 18. Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 3,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño propuesto, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**

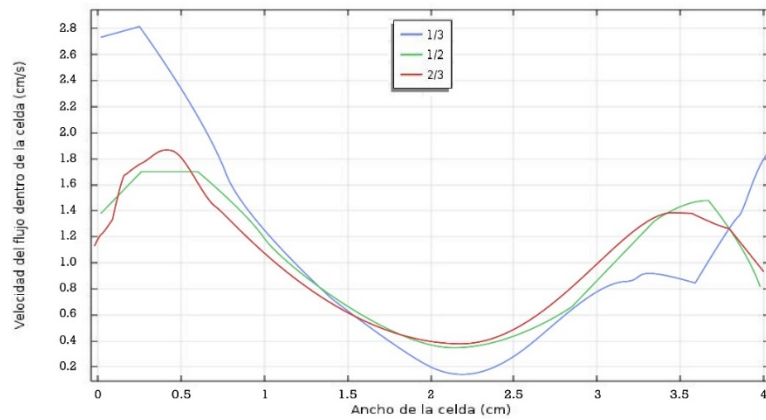


Fuente: elaboración propia.

#### **4.2.2 Resultados de la hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original**

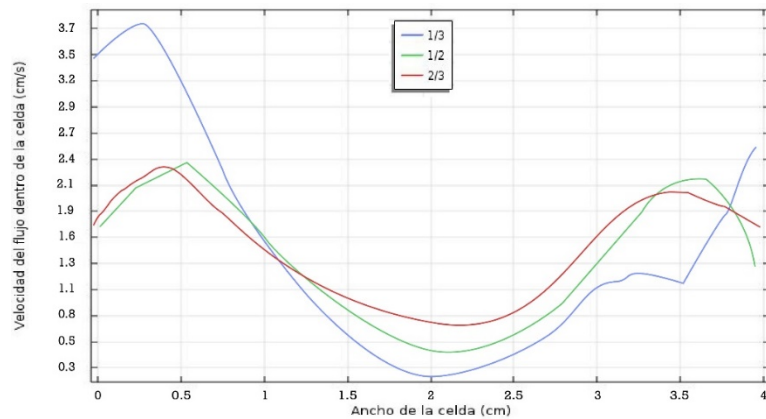
A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la hidrodinámica con cinco flujos de entrada diferentes, en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original.

Figura 19. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 0,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



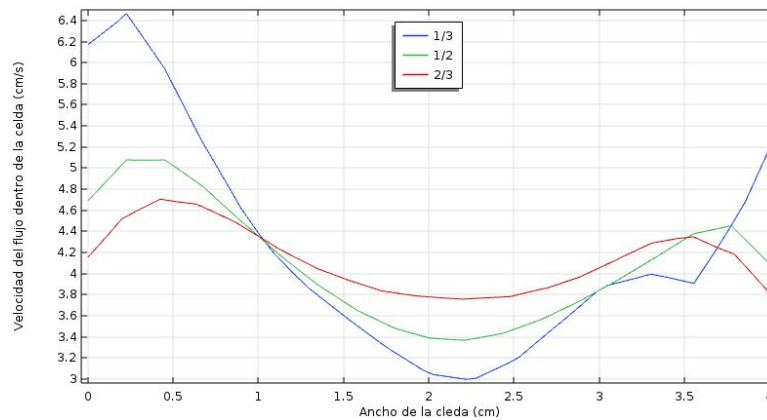
Fuente: elaboración propia.

Figura 20. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



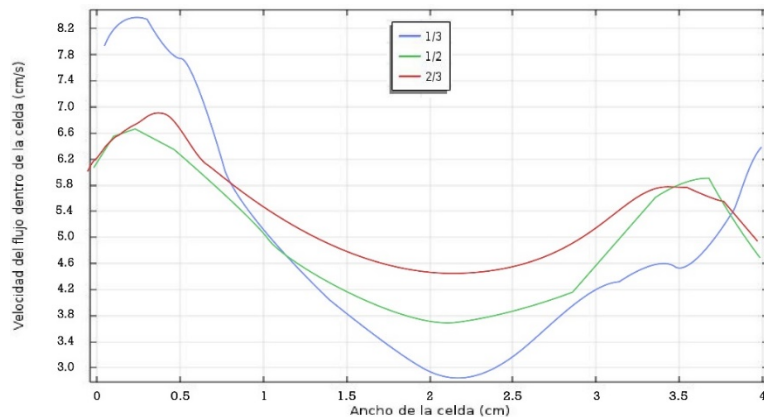
Fuente: elaboración propia.

Figura 21. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 1,5 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



Fuente: elaboración propia.

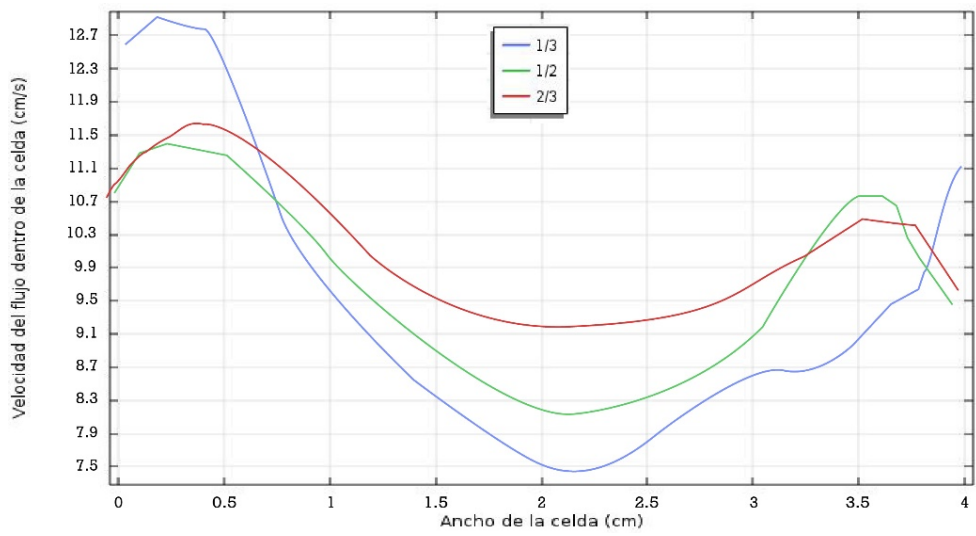
Figura 22. **Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 2,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda**



Fuente: elaboración propia.



Figura 23. Perfil de velocidad con un flujo de entrada de 3,0 L/min en la celda electroquímica con el diseño original, medido a 1/3, 1/2 y 2/3 del largo de la celda



Fuente: elaboración propia.

La velocidad mínima a la que llegó el flujo dentro de la celda electroquímica con el diseño original fue de 0,10 cm/s (figura 19) y la velocidad máxima fue de 9,15 cm/s (figura 23). Una vez conociendo las velocidades máximas y mínimas del fluido dentro de la celda, la viscosidad dinámica ( $8,91 \times 10^4 \text{ Kg/m}\cdot\text{s}$ ), la densidad del agua ( $1\ 000 \text{ kg/m}^3$ ) y el diámetro de la compuerta de entrada de la celda (0,01 m), se calculó el rango del número de Reynolds a la que se encontraba el flujo:

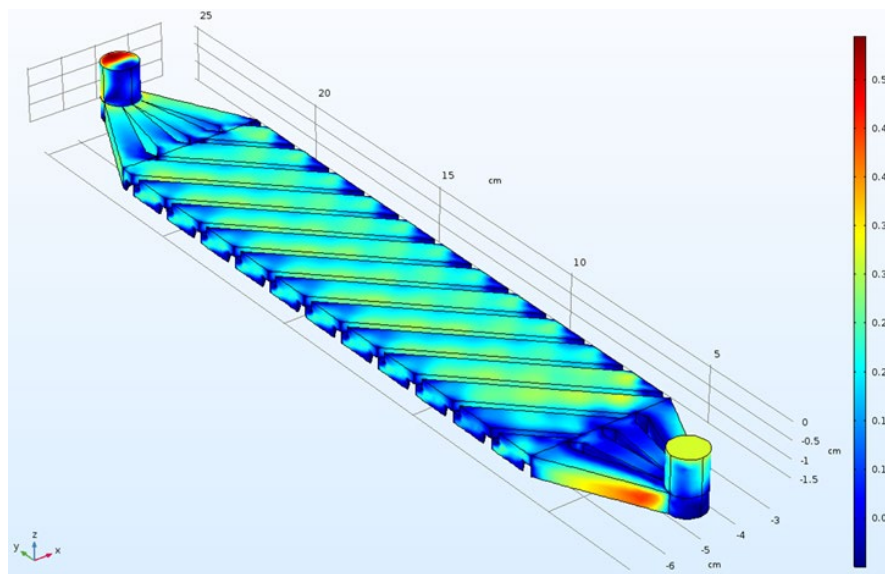
$$Re: \frac{\rho * d * V}{\mu}$$

Se determinó que el número de Reynolds del flujo dentro de la celda electroquímica con el diseño original estuvo en un rango de 11,22 a 1 026,94.

### 4.2.3 Distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa

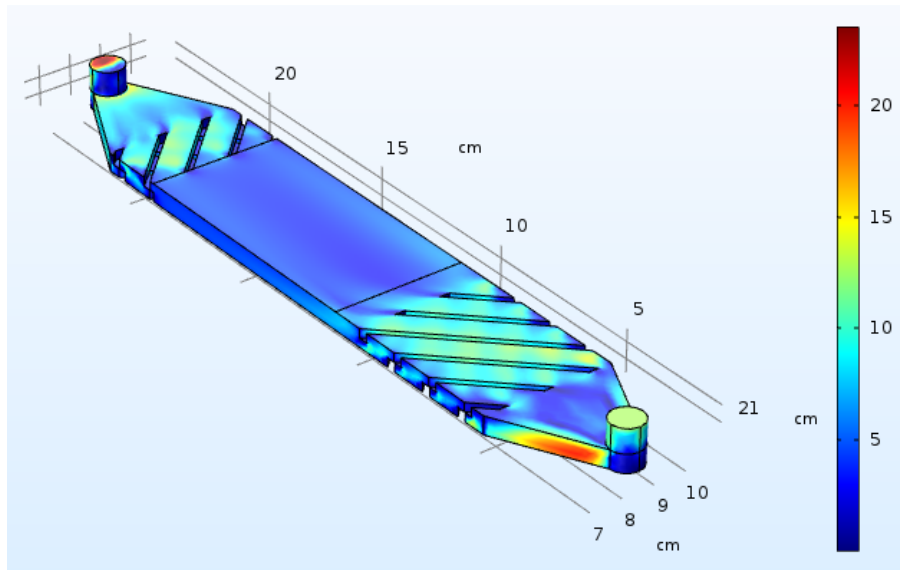
Para comparar mejor ambos diseños se presentan los gráficos de la distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original y el diseño con el promotor de turbulencia y electrodos alargados, ambos a un caudal de 1,5 L/min.

Figura 24. **Diagrama de la distribución de la magnitud del campo de velocidad para el caudal de 1,5 L/min, dentro de la celda electroquímica con el diseño propuesto**



Fuente: elaboración propia.

Figura 25. **Diagrama de la distribución de la magnitud del campo de velocidad para el caudal de 1,5 L/min, dentro de la celda electroquímica con el diseño original**

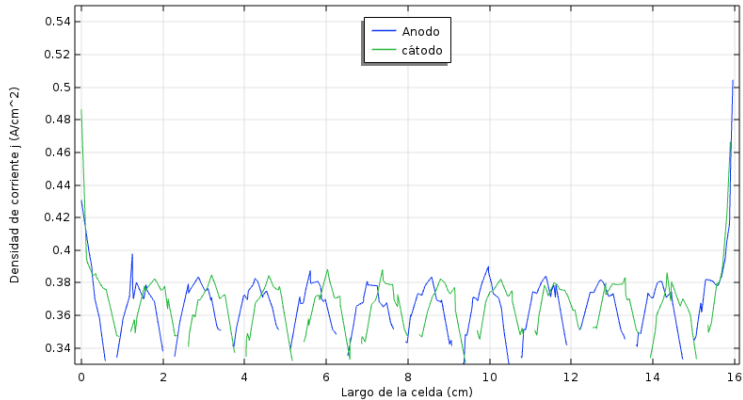


Fuente: elaboración propia.

#### 4.3 Simulación de la distribución de corriente primaria

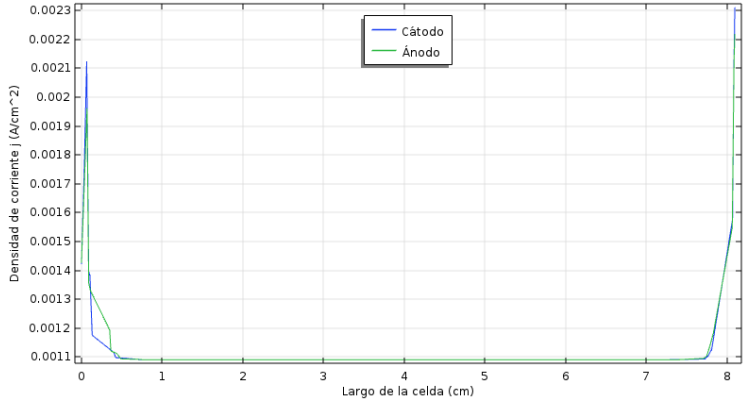
A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la distribución de corriente primaria, medida a lo largo del electrodo anódico y catódico de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto y el diseño original.

Figura 26. **Distribución de corriente primaria de la celda con el diseño propuesto, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



Fuente: elaboración propia.

Figura 27. **Distribución de corriente primaria de la celda con el diseño original, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



Fuente: elaboración propia.

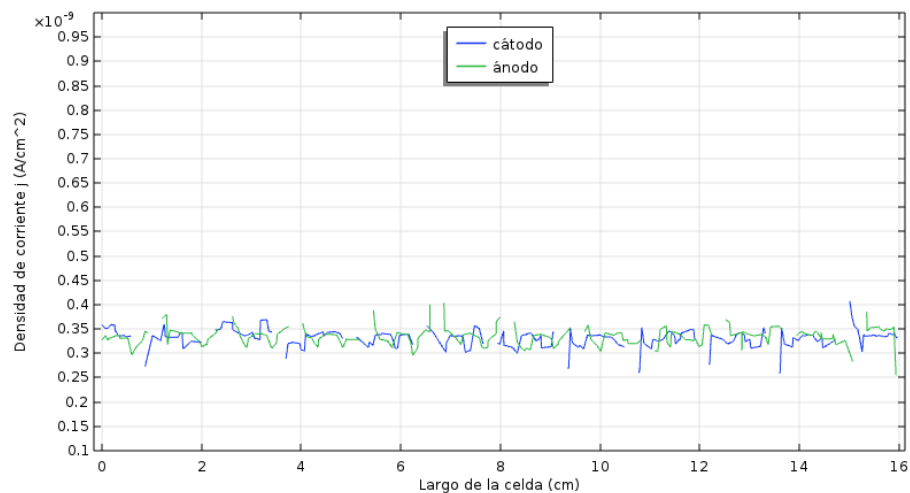
## 4.4 Simulación de la distribución de corriente secundaria

A continuación, se describe lo concerniente a este punto.

### 4.4.1 Resultados de la distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto

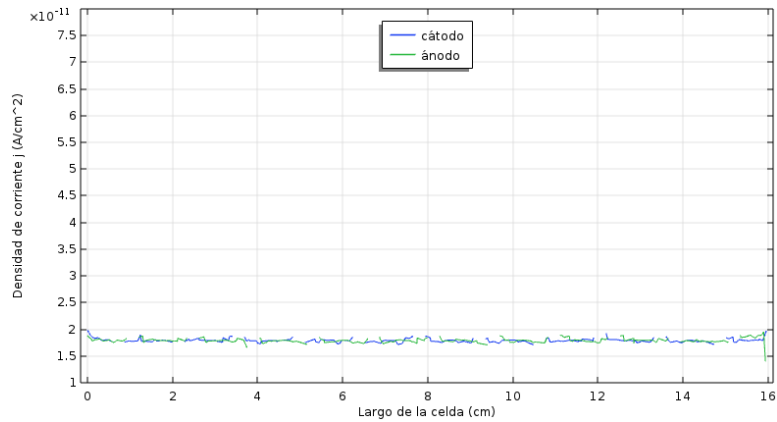
A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la distribución de corriente secundaria con tres diferentes voltajes, medida a lo largo del electrodo anódico y catódico de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto.

Figura 28. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 1,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



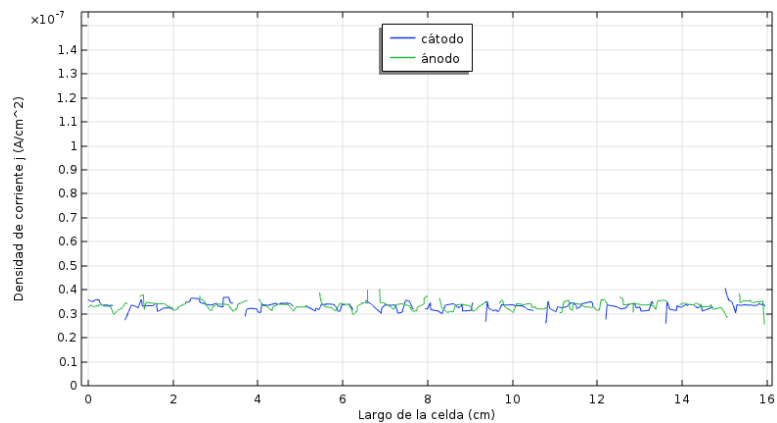
Fuente: elaboración propia.

Figura 29. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 1,5 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



Fuente: elaboración propia.

Figura 30. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño propuesto, a un valor de potencial anódico de 2,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**

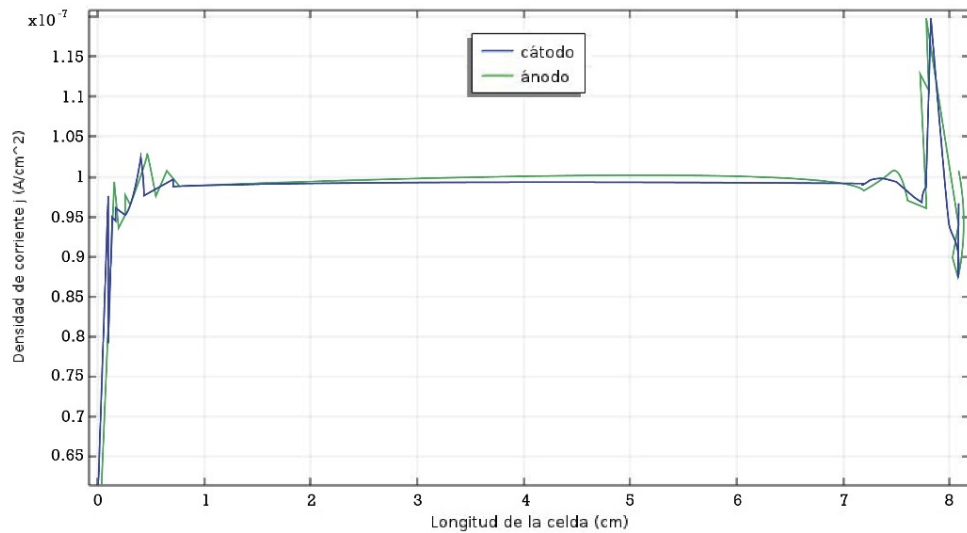


Fuente: elaboración propia.

#### 4.4.1 Resultados de la distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original

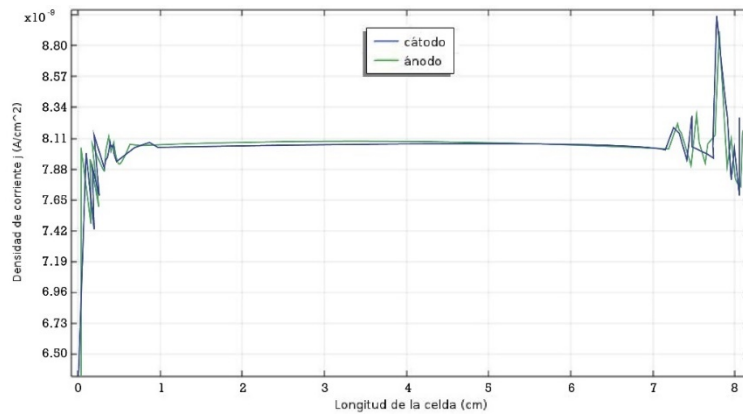
A continuación, se muestran los resultados obtenidos en la simulación de la distribución de corriente secundaria con tres diferentes voltajes, medidos a lo largo del electrodo anódico y catódico de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original.

Figura 31. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 1,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



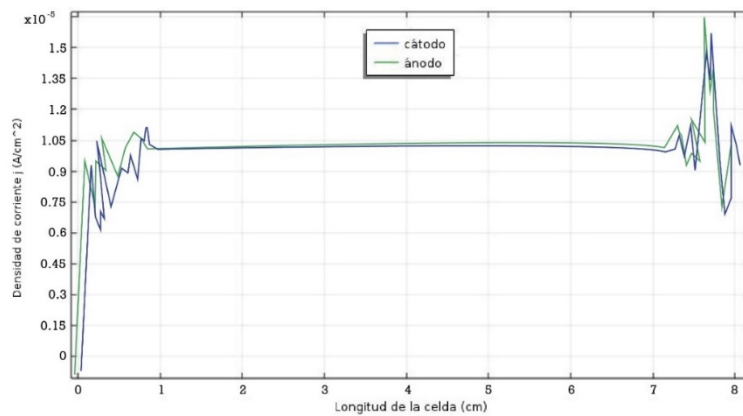
Fuente: elaboración propia.

Figura 32. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 1,5 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



Fuente: elaboración propia.

Figura 33. **Distribución de corriente secundaria de la celda con el diseño original, a un valor de potencial anódico de 2,0 V, en función del largo del electrodo anódico y catódico**



Fuente: elaboración propia.



## **5. DISCUSIÓN DE RESULTADOS**

### **5.1 Geometría de ambos diseños de celda electroquímica tipo filtro-prensa y análisis de malla**

Se puede apreciar que la diferencia entre ambos diseños es el área superficial de la zona donde ocurre el proceso de oxidación avanzada (figuras 10 y 11). Como se mencionó anteriormente, la celda electroquímica con el diseño propuesto posee mayor área superficial que el diseño original.

En el análisis de malla se puede observar que, al disminuir la malla, los perfiles de velocidad presentaban una diferencia significativa entre cada uno; sin embargo, al comparar los perfiles de velocidad de una malla normal y la malla fina (figura 12 y 13), la variación es insignificante. Por lo tanto, entre ambas mallas se prefiere usar la malla normal, considerando que entre más fina la malla, más complejo se vuelve el cálculo. De acuerdo a la estadística del elemento del dominio, el número de elementos de malla en el dominio de simulación es de 5 462 759.

### **5.2 Simulación de la hidrodinámica dentro de la celda electroquímica**

A partir de los resultados de la simulación de la hidrodinámica se pudo inferir lo siguiente.

### **5.2.1 Hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto**

Al analizar el comportamiento de la simulación de la hidrodinámica de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y el electrodo alargados (figuras 14 a la 18), se puede observar que, sin importar la magnitud del flujo de entrada, en los primeros 0,5 cm del ancho de la celda y los últimos 0,5 cm, existe una caída de velocidad brusca, esto ocurre debido a que el fluido se ve afectado por las paredes sólidas de la celda electroquímica.

Luego de la caída repentina de velocidad, comienza una fluctuación en los valores de velocidad del fluido, lo que se infiere como la presencia de un flujo turbulento y el comportamiento es igual a  $1/3$ ,  $1/2$  y  $2/3$  del largo de la celda, aumentando únicamente el rango de velocidad al que se encuentra el fluido en las tres diferentes secciones del largo de la celda.

Se observa que las velocidades mínimas del fluido se registraron a  $1/3$  de la celda, es decir cuando el fluido recién ingresó a la celda electroquímica, y conforme este fue avanzando a lo largo de la celda, su velocidad fue incrementando, sin embargo, las velocidades del fluido dentro de la celda nunca superaron la velocidad de entrada y salida del flujo, sin importar la magnitud del flujo en la entrada, esto ocurrió porque el fluido se vio afectado por las paredes sólidas del promotor de turbulencia a lo largo de la celda electroquímica (figuras 14 a 18).

Como el contacto entre el fluido y el promotor de turbulencia ocurre en múltiples ocasiones durante el recorrido del fluido dentro de la celda, se puede afirmar que el promotor de turbulencia es el causante de la fluctuación de

velocidad mencionada anteriormente, por lo tanto, también es el responsable de crear un flujo turbulento.

### **5.2.2 Hidrodinámica en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original**

En la simulación de la hidrodinámica de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original (figuras 19 a la 23) el comportamiento de la velocidad no es uniforme. Cerca de las paredes de la celda electroquímica, la magnitud de la velocidad presenta una caída brusca, llegando hasta un valor mínimo. Este comportamiento es igual a los cinco flujos de entrada diferentes.

El fluido a lo largo de la celda con el diseño original muestra una tendencia similar a la del diseño propuesto, ya que las velocidades más pequeñas se registraron a  $1/3$  del largo de la celda, es decir cuando el fluido recién ingresó a la celda electroquímica, y conforme este fue avanzando a lo largo de la celda, la velocidad fue incrementando, manteniéndose por debajo de las velocidades de flujo en la entrada y la salida. Sin embargo, con el diseño original el comportamiento de la velocidad a  $1/3$ ,  $1/2$  y  $2/3$  del largo de la celda siempre presenta un mínimo, sin importar la magnitud del flujo en la entrada, lo que podría demostrar que el tipo de flujo dentro de la celda electroquímica con el diseño original es un flujo laminar, esto se comprobó calculando el número de Reynolds del flujo dentro de la celda, el cual se encuentra en un rango de 11,22 a 1 026,94.

### **5.2.3 Distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa**

La distribución de la magnitud del campo de velocidad dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y electrodo alargado para una mejor apreciación de la hidrodinámica se muestra en la figura 24. De acuerdo a la escala de colores, la distribución del campo de velocidad a lo largo de los electrodos de la celda se mantuvo en un rango de intensidad medio, tendiendo a valores elevados, esto se debe al flujo turbulento ocasionado por el promotor de turbulencia, y debido a que este se encuentra a lo largo de todo el electrodo, la magnitud del campo de velocidad en la zona donde ocurre la oxidación es uniforme, favoreciendo la transferencia de masa, es decir la producción de radicales hidroxilos.<sup>11</sup>

Por otro lado, con el diseño original la distribución del campo de velocidad en los promotores de turbulencia, en la entrada y la salida de la celda, se encuentra en un rango de intensidad medio, al igual que la celda con el diseño propuesto (figura 25). Sin embargo, la distribución del campo de velocidad en los electrodos presentó valores de intensidad bajos, dando una desventaja significativa al diseño original de la celda, puesto que los valores más bajos de magnitud de velocidad los presentó la zona donde ocurre la oxidación avanzada, desfavoreciendo la transferencia de masa y con ello la producción de radicales hidroxilos.

---

<sup>11</sup> PÉREZ, Tzayam; DE LEÓN, Carlos; WALSH, Frank y NAVAS, José. Simulation of current distribution along a planar electrode under turbulent flow conditions in a laboratory filter-press flow cell. p 352.

El análisis de los perfiles de velocidad y los gráficos de la distribución de la magnitud del campo de velocidad, de ambos diseños, demostró que las celdas electroquímicas funcionan mejor en condiciones de flujo turbulento, ya que logran mejores condiciones hidrodinámicas de transporte de masa y carga. Por lo tanto, de acuerdo al estudio de la hidrodinámica, se puede determinar que la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el promotor de turbulencia y electrodo alargados proporciona mejores condiciones para la producción de radicales hidroxilos y, con base en el estudio que realizó Núñez en el 2006, este fenómeno aumenta la eficiencia del proceso de oxidación avanzada.

### **5.3 Simulación de la distribución de corriente primaria**

En la figura 26 se observa la distribución de corriente primaria dentro de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto, el cual muestra un comportamiento oscilante en la densidad de corriente, entre un rango de 0,34 a 0,38 A/cm<sup>2</sup>, teniendo una variación relativamente pequeña pero significativa. Para este estudio no se aplicó voltaje a los electrodos, demostrando que las condiciones de transferencia de carga y las condiciones de transporte de masa no son significativas para la distribución de corriente primaria, y que únicamente dependen de la resistencia dentro de la celda.

El comportamiento de la densidad de corriente en la figura 26 es uniforme en todo el largo de la celda electroquímica, debido a que el promotor de turbulencia abarcó toda la región del electrodo, provocando así una homogenización en los fenómenos de transporte de los radicales hidroxilo.

A diferencia de la celda con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, la densidad de corriente dentro de la celda original tiene un

comportamiento lineal con valores cercanos a cero (figura 27), demostrando que, al no pasar un flujo turbulento en la zona de los electrodos, la cantidad de corriente producida por la geometría de la celda no es significativa para el proceso de oxidación avanzada.

#### **5.4 Simulación de la distribución de corriente secundaria**

Se obtuvieron los siguientes datos a partir de la simulación de la distribución de corriente:

##### **5.4.1 Distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto**

En las figuras 28 a la 30 se muestra que cuando se aplica un voltaje 1,0 V al electrodo anódico, la densidad de corriente oscila en un rango de  $0,35 \times 10^{-9}$  a  $0,35 \times 10^{-9}$  A/cm<sup>2</sup>, cuando se aplica 1,5 V, la densidad de corriente osciló entre  $1,5 \times 10^{-11}$  a  $2,0 \times 10^{-11}$  A/cm<sup>2</sup>, y para 2,0 V la densidad de corriente osciló entre  $0,3 \times 10^{-7}$  a  $0,4 \times 10^{-7}$  A/cm<sup>2</sup>. De acuerdo a los rangos de oscilación que presenta la densidad de corriente, se puede afirmar que, sin importar el voltaje aplicado al electrodo anódico, el comportamiento de la densidad de corriente en la celda electroquímica con el promotor de turbulencia y los electrodos alargados, es completamente lineal en todo el equipo. Este comportamiento evita que se den reacciones secundarias en el proceso de oxidación avanzada, como la reacción de evolución del oxígeno, por lo tanto, se puede concluir que, al presentar un comportamiento de densidad de corriente uniforme, este diseño favorece significativamente la producción de radicales hidroxilos.

#### **5.4.2 Distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original**

El comportamiento de la densidad de corriente en la celda original no es uniforme (figuras 31 a la 32 g) como ocurre en la celda con el diseño propuesto, debido a que los valores cambiaron significativamente en la entrada y salida de los electrodos, sin importar el potencial aplicado al electrodo anódico. Esto pudo ocurrir debido al cambio en el tipo flujo ocasionado por la presencia de los promotores de turbulencia ubicados antes y después de los electrodos, pues, al no haber promotor en toda la celda y de acuerdo al estudio de la hidrodinámica analizando anteriormente, cuando el fluido sale del primer promotor e ingresa a la zona de electrodos, se puede inferir que cambia de régimen turbulento a laminar, y al regresar, el tipo de flujo vuelve a cambiar, esta vez, de laminar a turbulento; por consiguiente, es probable que este cambio brusco en la turbulencia del fluido es el causante del comportamiento variante en la densidad de corriente a lo largo de la celda. Entonces, al no existir el promotor de turbulencia en la zona de los electrodos, la densidad de corriente producida por la celda no es adecuada para generar una mayor cantidad de radicales hidroxilo y es posible que provoque reacciones secundarias, por lo tanto, el proceso de oxidación avanzada ocurriría con una eficiencia menor que en la celda con el diseño propuesto.





## CONCLUSIONES

1. De acuerdo al análisis de malla, la malla óptima para las simulaciones es la malla normal, y de acuerdo a la estadística del elemento del dominio, el número óptimo de elementos que tiene es de 5 462 759.
2. El comportamiento de la simulación de la hidrodinámica de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto es uniforme en toda la longitud de la celda, mostrando fluctuaciones repetitivas debido al movimiento causado por el promotor de turbulencia.
3. El comportamiento de la simulación de la hidrodinámica de la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño original no es uniforme y, sin importar el flujo de entrada, presenta un mínimo en los caudales estudiados, demostrando que la ausencia de un promotor de turbulencia en la zona de electrodos ocasiona un régimen laminar.
4. La distribución de corriente primaria en la celda electroquímica con el diseño propuesto muestra un comportamiento oscilante en la densidad de corriente, entre un rango de 0,34 a 0,38 A/cm<sup>2</sup>, siendo uniforme en toda la longitud de la celda, debido a que el promotor de turbulencia provoca una homogenización en las variables de transporte de los radicales hidroxilo.
5. La tendencia de distribución de corriente primaria en la celda electroquímica con el diseño original es lineal, tendiendo a cero, lo que demuestra que, al no desarrollarse un flujo turbulento en la zona de los

electrodos, la cantidad de corriente producida por la geometría de la celda no es significativa para el proceso de oxidación avanzada.

6. La simulación de distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica con el diseño propuesto muestra que el comportamiento de la densidad de corriente es completamente lineal, sin importar el voltaje aplicado al electrodo anódico, debido a que el régimen de flujo no varía a lo largo de la celda.
7. La simulación de distribución de corriente secundaria en la celda electroquímica con el diseño original muestra que el comportamiento de la densidad de corriente no es uniforme, sin importar el potencial aplicado al electrodo anódico, debido al cambio brusco en la turbulencia del fluido ocasionado por la ausencia del promotor de turbulencia en la zona de electrodos.
8. Al comparar el estudio de la hidrodinámica de ambos diseños se infiere que el diseño propuesto proporciona mejores condiciones para la producción de radicales hidroxilos debido a la formación de un flujo turbulento en la zona de electrodos, aumentando la eficiencia del proceso de oxidación avanzada.
9. Al comparar el estudio de la distribución de corriente primaria y secundaria de ambos diseños, el propuesto genera una densidad que favorece significativamente la formación de radicales hidroxilo y evita que se den reacciones secundarias en el proceso de oxidación avanzada, aumentando la eficiencia de este proceso.

## RECOMENDACIONES

1. Al crear el dominio computacional es indispensable que el equipo de estudio esté formado por una sola geometría, así el cálculo matemático que se necesita para llegar a la solución sea lo más simplificado posible y sea fácil de ejecutar en el programa de simulación computacional.
2. Utilizar una computadora con un procesador adecuado para el programa de simulación computacional seleccionado, como el procesador Intel Core i9, y una memoria RAM adecuada, como de 64 GB; de esta manera, el computador no presentará dificultad al momento de ejecutar la simulación.
3. Realizar el análisis de malla en la celda electroquímica tipo filtro-prensa con el diseño propuesto, ya que, entre ambos diseños, este diseño es más complejo. Una vez determinada la malla óptima, utilizar esta misma con el otro equipo, así los resultados poseerán el mismo grado de confiabilidad y será más fácil realizar alguna comparación.



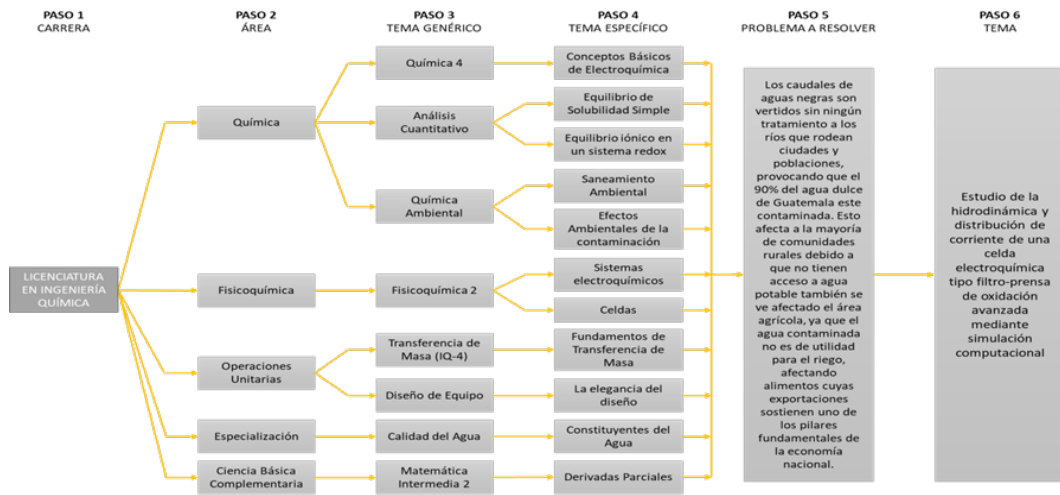
## BIBLIOGRAFÍA

1. ALCOCER, Salvador; et al. *Comparative study for degradation of industrial dyes by electrochemical advanced oxidation processes with BDD anode in a laboratory stirred tank reactor*. 2018. 8 p.
2. BROWN, Theodore; et al. *Electroquímica. Química: la ciencia central*. México: Pearson, 2009. 899 p.
3. Comsol Inc. 3D CAD *portal*. [en línea]. <<http://www.3dcadportal.com/comsol.html>>. [Consulta: marzo de 2019].
4. ELÍAS, José. *Las aguas sucias de Guatemala*. [en línea]. <[https://elpais.com/internacional/2015/06/24/actualidad/1435177135\\_432060.html](https://elpais.com/internacional/2015/06/24/actualidad/1435177135_432060.html)>. [Consultado febrero de 2019]
5. FARRERA, Luis F. *Introducción a la Electroquímica*. Departamento de Fisicoquímica de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). [en línea]. <[http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/INTRODUCCIONALAELECTROQUIMICA\\_22641.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/INTRODUCCIONALAELECTROQUIMICA_22641.pdf)>. [Consulta: febrero de 2019].
6. LEAO, Lucas. *CAD vs CAE vs CAM: ¿cuáles son las diferencias? Blog de Ingeniería Eléctrica Moderna*. [en línea] <<https://www.e3seriescenter.com/blog-de-ingenieria-electrica-moderna/cad-vs-cae-vs-cam-diferencias>>. [Consulta: febrero de 2019].
7. LÓPEZ, Óscar. *Celdas electroquímicas*. La Guía. [en línea]. <<https://quimica.laguia2000.com/general/celdas-electroquimicas>>. [Consulta: marzo de 2019].

8. MIRLISENNA, Giuseppe. *Método de los Elementos Finitos. ESSS*. [en línea]. <<https://www.esss.co/blog/es/metodo-de-los-elementos-finitos-que-es/>>. [Consulta: 13 de marzo de 2018.]
9. NÚÑEZ, Francisco. *Electroincineración del p y o-cresol sobre electrodos de diamante dopado con boro (BDD) en una celda electroquímica FM01-LC*. Tesis de Maestría. México D.F.: s.n., 2006. 80 p.
10. PATIÑO, Kelly; ARROYAVE, Sandra y MARÍN, Juan. *Oxidación Electroquímica y Ozonización Aplicadas al Tratamiento de Aguas de Lavado de la Producción de Biodiesel*. Scielo. [En línea]. <[https://scielo.conicyt.cl/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0718-07642012000200006](https://scielo.conicyt.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0718-07642012000200006)>. [Consulta: agosto de 2019.]
11. PÉREZ, Tzayam; et al. *Simulation of current distribution along a planar electrode under turbulent flow conditions in a laboratory filter-press flow cell*, 2014. 9 p.
12. PÉREZ, Tzayam; LEÓN, María I. y NAVA, José L. *Numerical simulation of current distribution along the boron-doped diamond anode of a filter-press-type FM01-LC reactor during the oxidation of water*, 2013. 6 p.
13. VÁZQUEZ, Mario. *Tipos de celdas electroquímicas*. Instituto de Química de la Universidad de A. [en línea] <<http://aprendeonline.udea.edu.co/lms/ova/mod/resource/view.php?inpopup=true&id=694>>. [Consulta: febrero de 2019].
14. Visual Avi. *Cómo funciona una celda electroquímica*. [en línea]. <<https://www.visualavi.com/celda-electroquimica-elemental-descripcion-y-funcionamiento/>>. [Consulta: marzo de 2019]

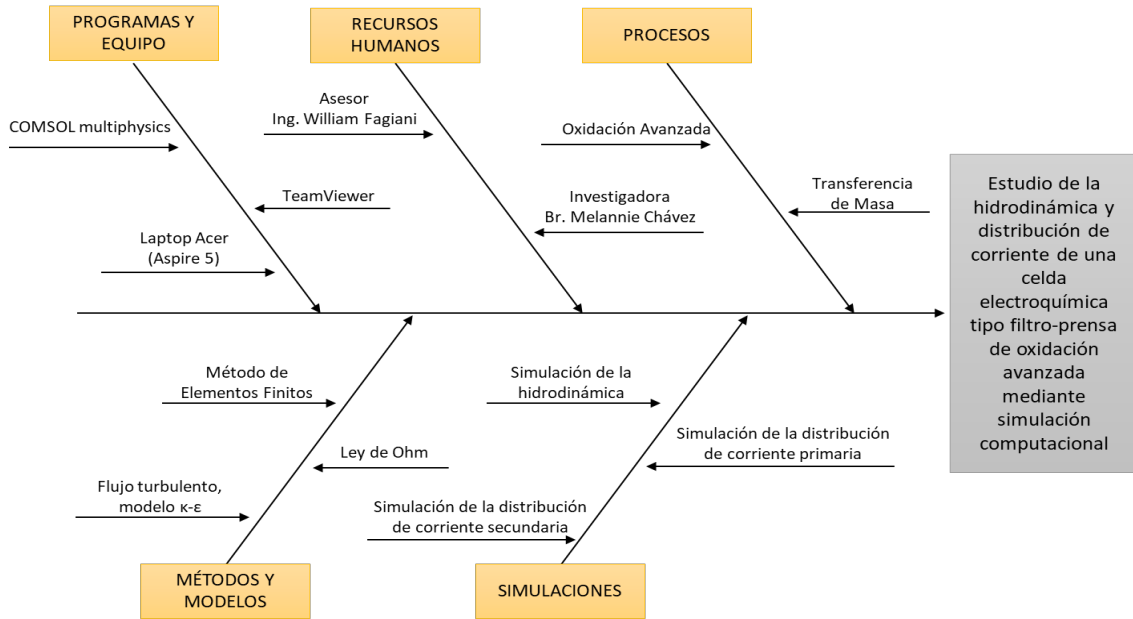
# APÉNDICE

Apéndice 1. Diagrama de requisitos académicos



Fuente: elaboración propia

## Apéndice 2. Diagrama de requisitos académicos



Fuente: elaboración propia