

Evaluación del desempeño de reactores electroquímicos para recuperación de mercurio en efluentes hídricos a partir de la herramienta computacional Comsol Multiphysics®

Jhon Sebastian Fiallo Correa

Trabajo de Grado para Optar al Título de:

Ingeniero Metalúrgico

Director

Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo

Magíster en Ingeniería de Materiales

Codirector

Julio Andrés Pedraza Avella

Doctor en Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de los Materiales

Bucaramanga

2024

*Dedicado a Orinda y Omar, mis padres*

### **Agradecimientos**

*A María Isabel Gómez Suárez, por todo el apoyo, amor, tiempo, paciencia, compañía y comprensión que me ha brindado durante la realización de este proyecto. Para mí ha sido motivo de orgullo y felicidad compartir la recta final de mi formación profesional en compañía de una gran mujer, a quien hoy puedo llamar mi pareja, mejor amiga y confidente.*

*A mi madre, Orlinda Correa, por enseñarme el valor del esfuerzo, el trabajo duro y motivarme cada día a afrontar los desafíos que han surgido a lo largo de mi vida, porque con su ejemplo me he consolidado como la persona que soy hoy en día.*

*A mi padre, Omar Fiallo, porque desde el silencio que lo caracteriza siempre ha estado presente para mí, ha velado por mi bienestar y con su ejemplo he visto reflejada la figura de un hombre que trabaja honrada y duramente por el bienestar de su familia.*

*A mi hermano, Edwar Fiallo, porque ha sido una compañía valiosa en momentos difíciles y de soledad. De igual forma, agradezco el tiempo de ocio que hemos pasado y que me ha permitido despejar la mente, dejar de lado mis preocupaciones y recordar que estoy en compañía de un buen amigo.*

*A mi profesor y director, Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo, por abrirme las puertas y brindarme la oportunidad de participar en un proyecto que me permitió explorar nuevos campos del conocimiento y crecer como profesional. Agradezco encarecidamente toda la asesoría y paciencia, así como la confianza que ha depositado en mí para la ejecución de este proyecto.*

*A Nicolas Cabrera Ruiz, porque su apoyo fue fundamental en un momento de incertidumbre donde no tenía claridad de cómo continuar este trabajo.*

*A mi codirector, Julio Andrés Pedraza Avella, por permitirme participar de su proyecto y abrirme las puertas en el Grupo de Investigación en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente (GIMBA).*

*Al Grupo de Investigación en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente (GIMBA), por permitir mi estancia en la Sede UIS Guatiguará, permitirme conocer las excelentes personas que componen dicho equipo de trabajo y poner a mi disposición el equipo necesario para completar mi trabajo de grado.*

*A mí, porque a pesar de las dificultades, el estrés, el cansancio, la soledad, la impotencia, la frustración, el sentimiento de decepción, los días que las obligaciones me hicieron ayunar, los días que hubo contratiempos, los días que fueron contrarreloj, los días que no terminaron como esperaba, los días que no hubo descanso y las incontables noches en vela, logré sobreponerme, mantenerme fuerte y hoy me ha llevado a cumplir una de las metas más importantes de mi vida, terminar mis estudios.*

**Contenido**

	<b>Pág.</b>
Introducción.....	14
1. Objetivos .....	16
1.1 Objetivo general .....	16
1.2 Objetivos específicos.....	16
2. Fundamentación Teórica.....	17
2.1 Electroquímica.....	17
2.2 Modelos matemáticos.....	17
2.2.1 Primera ley de Fick.....	18
2.2.2 Cantidad de movimiento.....	18
2.2.3 Densidad de corriente y cinética electroquímica.....	18
2.3 Método de elementos finitos (FEM).....	19
3. Metodología .....	20
3.1 Etapa 1 .....	20
3.1.1 Estado del arte y revisión bibliográfica.....	20
3.1.1.1 Mercurio .....	20
3.1.1.1.1 Propiedades y descomposición del mercurio.....	20
3.1.1.1.2 Recuperación del mercurio iónico y líquido.....	21
3.1.2 Selección de Reactores .....	22

SIMULACIÓN ELECTROQUÍMICA	6
3.2 Etapa 2 .....	22
3.2.1 Construcción y modelamiento de reactores electroquímicos .....	22
3.2.2 Simulación computacional .....	23
3.2.2.1 Consideraciones y condiciones, límites.....	23
3.2.2.2. Malla.....	24
4. Resultados .....	24
4.1 Concentraciones.....	24
4.1.1 Reactor de placas paralelas.....	25
4.1.2 Reactor de lecho fluidizado .....	29
4.1.3 Reactor tubular .....	33
4.2 Densidad de corriente terciaria .....	37
4.2.1 Reactor de placas paralelas.....	38
4.2.2 Reactor de lecho fluidizado .....	40
4.2.3 Reactor tubular .....	42
5. Análisis de Resultados .....	44
6. Conclusiones .....	46
7. Recomendaciones.....	47
Referencias Bibliográficas.....	48
Apéndices .....	55

**Lista de tablas**

	<b>Pág.</b>
Tabla 1. Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor de placas paralelas ...	27
Tabla 2. Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor de lecho fluidizado.....	31
Tabla 3. Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor tubular .....	36

**Lista de figuras**

	<b>Pág.</b>
Figura 1. Representación de malla y modelos matemáticos aplicados en un nodo.....	19
Figura 2. Reactores electroquímicos seleccionados para estudio.....	22
Figura 3. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	25
Figura 4. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (0) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	25
Figura 5. Perfil de pH.....	26
Figura 6. Planos de corte para análisis de concentraciones.....	27
Figura 7. Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal.....	28
Figura 8. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	29
Figura 9. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (0) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	29
Figura 10. Perfil de pH.....	30
Figura 11. Planos de corte para análisis de concentraciones.....	31
Figura 12. Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal.....	32
Figura 13. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	33
Figura 14. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (0) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	34
Figura 15. Perfil de pH.....	35
Figura 16. Planos de corte para análisis de concentraciones.....	35
Figura 17. Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal.....	37
Figura 18. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ].....	38

Figura 19. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ]. Sección transversal .....	38
Figura 20. Densidad de corriente entre electrodos en [A/cm <sup>2</sup> ]. Corte transversal.....	39
Figura 21. Densidad de corriente entre electrodos en [A/cm <sup>2</sup> ]. Corte longitudinal.....	39
Figura 22. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ] .....	40
Figura 23. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ]. Sección longitudinal .....	40
Figura 24. Densidad de corriente entre electrodos en [A/cm <sup>2</sup> ]. Corte transversal.....	41
Figura 25. Densidad de corriente entre electrodos en [A/cm <sup>2</sup> ]. Corte longitudinal.....	41
Figura 26. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ] .....	42
Figura 27. Densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ]. Sección transversal .....	43
Figura 28. Densidad de corriente entre electrodos en [A/cm <sup>2</sup> ]. Corte transversal.....	43
Figura 29. Comparativa de concentración de Hg (II) a la entrada y salida de los reactores .	44

**Lista de apéndices**

	<b>Pág.</b>
Apéndice A. Listado de reactores preseleccionados.....	55
Apéndice B. Constantes utilizadas en la simulación computacional.....	57
Apéndice C. Mallado de reactores.....	58
Apéndice D. Perfil de concentración de Hg (0) en [mol/m <sup>3</sup> ].....	58
Apéndice E. Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m <sup>3</sup> ] .....	59
Apéndice F. Variación de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor tubular con electrodos invertidos .....	59
Apéndice G. Líneas de flujo en la región de salida del reactor tubular .....	60
Apéndice H. Velocidad en [dm/s] y densidad de corriente en [A/cm <sup>2</sup> ] .....	61

### Glosario

**Mercurio:** Metal altamente tóxico con gran capacidad de formar complejos y compuestos perjudiciales para la salud humana, vegetal y animal.

**Reactor Electroquímico:** Objeto utilizado para llevar a cabo reacciones químicas producidas por la transferencia de corriente eléctrica a través de la materia.

**Simulación Computacional:** Modelo abstracto creado en un programa informático para representar un determinado sistema y estudiar las variables que lo componen.

## Resumen

**Título:** Evaluación del desempeño de reactores electroquímicos para recuperación de mercurio en efluentes hídricos a partir de la herramienta computacional Comsol Multiphysics®\*

**Autor:** Jhon Sebastian Fiallo Correa\*\*

**Palabras Clave:** Simulación Computacional, Mercurio, Reactores Electroquímicos.

### Descripción:

En este trabajo se realizó una revisión bibliográfica para preseleccionar los reactores más destacables en sus áreas de aplicación y escoger tres (3) reactores electroquímicos. Los reactores escogidos fueron modelados en CAD a través de la herramienta SolidWorks® y evaluados en igualdad de condiciones de operación a través de la herramienta Comsol Multiphysics® 5.6, finalmente se comparó su capacidad de remoción de mercurio iónico Hg (II) y se estudió la influencia de la geometría en la densidad de corriente terciaria.

Se determinó que el reactor de lecho fluidizado es la mejor opción para la remoción de Hg (II) con una recuperación de 50.5% respecto a la concentración inicial; se concluye que la naturaleza del reactor favorece la reacción electroquímica al forzar al fluido a entrar en contacto con las paredes del electrodo logrando que una mayor fracción del fluido reaccione.

Se estableció que una mayor velocidad del fluido implicará una mayor densidad de corriente terciaria, lo cual indica un mayor transporte y balance de carga; adicionalmente, mayores valores en la densidad de corriente indican un mayor transporte de masa en el electrolito y la superficie del electrodo.

Dada la influencia que tiene la geometría del reactor en la velocidad del fluido, fue posible afirmar que el diseño geométrico del reactor posee una influencia directa sobre la eficiencia general del sistema al afectar la velocidad del fluido y por ende la distribución de corriente terciaria, la cual considera en transporte de carga y masa en el reactor.

---

\* Trabajo de Grado

\*\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de los Materiales. Director: Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo. Magíster en Ingeniería de Materiales. Codirector: Julio Andrés Pedraza Avella. Doctor en Química.

### Abstract

**Title:** Performance assessment of electrochemical reactors for mercury recovery in water effluents using the computational tool Comsol Multiphysics®\*

**Author:** Jhon Sebastian Fiallo Correa \*\*

**Key Words:** Computational Simulation, Mercury, Electrochemical Reactors.

#### Description:

In this work, a literature review was conducted to preselect the most notable reactors in their areas of application and choose three (3) electrochemical reactors. The selected reactors were modeled in CAD using the SolidWorks® tool and evaluated under equal operating conditions using the Comsol Multiphysics® 5.6 tool. Finally, their capacity for the removal of ionic mercury Hg (II) was compared, and the influence of geometry on tertiary current density was studied.

It was found that the fluidized bed reactor is the best option for Hg (II) removal with a recovery of **50.5%** compared to the first concentration. It is concluded that the nature of the reactor favors the electrochemical reaction by forcing the fluid to interact with the electrode walls, ensuring that a greater fraction of the fluid reacts.

It was proved that a higher fluid velocity will imply a higher tertiary current density, showing greater transport and charge balance. Additionally, higher values in current density show greater mass transport in the electrolyte and electrode surface.

Given the influence of reactor geometry on fluid velocity, it was possible to affirm that the geometric design of the reactor has a direct influence on the overall system efficiency by affecting fluid velocity and therefore the distribution of tertiary current, which considers charge and mass transport in the reactor.

---

\* Bachelor Thesis

\*\* Faculty Physicochemical Engineering. School of Metallurgical Engineering and Materials Science. Adviser: Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo. Master in Materials Engineering. Coadviser: Julio Andrés Pedraza Avella. PhD in Chemistry.

## Introducción

La presencia de mercurio en los efluentes hídricos es una problemática de importancia regional y nacional que impacta de forma constante a diversas regiones, centros urbanos y poblaciones (INFOBAE, 2022). La existencia de este metal en fuentes de agua está fuertemente relacionada con la ejecución de actividad minera, especialmente en municipios donde la minería es una actividad fuertemente arraigada económica y culturalmente (Fonnegra, 2023).

En provincias mineras, tales como lo son la provincia de Soto Norte, la minería aurífera ha tenido un gran impacto en la calidad de agua, puesto que en la última década plantas de tratamiento y entidades de control han realizado alertas sobre concentraciones de mercurio, cianuro, sólidos suspendidos y materia orgánica por encima de los límites permisibles en el río Vetás (Pérez, 2019). El mercurio representa el elemento de mayor interés en estos estudios, puesto que posee impacto crítico en la salud humana debido a la facilidad con la cual el catión  $\text{Hg}^{2+}$  forma compuestos orgánicos tales como el metilmercurio (Sierra J. Rodríguez R. Millán, 2010).

Diversos métodos de recuperación o eliminación del mercurio han sido planteados e implementados en los procesos de tratamiento de aguas y eliminación de metales. Desde el Grupo de investigaciones en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente (GIMBA) se han estudiado alternativas y propuesto nuevas tecnologías para enfrentar esta problemática: el reactor tubular (CABRERA RUIZ, 2019) y de placas paralelas (LOPEZ CONTRERAS, 2018). Los reactores electroquímicos poseen diversidad de geometrías, tales como los son el reactor de filtro tipo prensa, tubular, lecho fluidizado o CSTR. Adicionalmente, existen

variaciones geométricas en la forma de las celdas electroquímicas o de los electrodos (SANTOS AMADO, 2015).

La eficiencia de los reactores electroquímicos continúa siendo tema de discusión e investigación debido a que se requieren altos consumos de energía para lograr altas tasas de recuperación, lo cual representa altos costos de operación, por ende, desde el GIMBA se continúa investigando acerca de variables en el proceso que promuevan una mayor tasa de recuperación conservando un bajo costo de operación, permitiendo así viabilizar la aplicación de reactores electroquímicos a gran escala para la remoción de mercurio en agua (INNOUA, 2020).

A través de este trabajo se busca analizar por medio de *ingeniería asistida por ordenador (CAE)* el desempeño de tres (3) geometrías de reactor electroquímico en la recuperación de mercurio iónico Hg (II), para ello se hará uso de la herramienta computacional Comsol Multiphysics® 5.6, se usarán como medida de evaluación los siguientes resultados:

- Perfil de concentración Hg (II) en el reactor.
- Promedio de concentración de Hg (II) en la salida del reactor.
- Distribución de densidad de corriente terciaria.

## 1. Objetivos

### 1.1 Objetivo general

Evaluar el desempeño de reactores electroquímicos en la recuperación de mercurio en efluentes hídricos a partir de la herramienta computacional Comsol Multiphysics®.

### 1.2 Objetivos específicos

Recopilar información sobre reactores electroquímicos usados en la recuperación de mercurio mediante revisión bibliográfica en fuentes científicas.

Desarrollar modelos de simulación computacional para los reactores más sobresalientes en aplicaciones de recuperación de mercurio en efluentes hídricos.

Evaluar la eficiencia de los diferentes diseños de reactores en la recuperación de mercurio en contraste con la energía utilizada durante el proceso, a fin de seleccionar el diseño adecuado para el desarrollo de tecnologías en la recuperación de mercurio, conservando una alta eficiencia y un bajo costo de operación.

## 2. Fundamentación Teórica

### 2.1 Electroquímica

En este campo de estudio, el trabajo de la ingeniería se enfoca en optimizar, estudiar, caracterizar y analizar las diversas variables de un proceso relacionadas con la conversión de energía química en eléctrica y viceversa. Según Chang (2013), una definición acertada de la electroquímica es “reacciones redox en donde la energía liberada por una reacción espontánea se transforma en electricidad, o la electricidad se utiliza para inducir una reacción química”.

En la recuperación de Hg (II) en sistemas Hg/H<sub>2</sub>O la reacción de interés para remover el mercurio es la reducción del mercurio iónico.



Las reacciones redox presentan cambios en el estado de oxidación de las especies. Para llevar a cabo este proceso es necesaria una especie oxidada (Hg<sup>2+</sup>) y electrones (e<sup>-</sup>), para generar la especie reducida (Hg<sup>0</sup>) (Mendoza, 2003).

Tal como se observa en la (Ec. 1) es necesario contar con electrones para efectuar la reducción de una especie oxidada, los electrones son obtenidos a través de la oxidación de otra especie, en el sistema Hg/H<sub>2</sub>O los electrones se obtienen a partir de la oxidación del agua (H<sub>2</sub>O).



### 2.2 Modelos matemáticos

Los modelos matemáticos que controlan los fenómenos de transporte de especies, cantidad de movimiento y densidad de corriente son:

### 2.2.1 Primera ley de Fick

El transporte de especies es modelado a partir de la primera ley de Fick para la difusión (CRANK, 1975).

$$\nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) + u \cdot \nabla c_i = R_i \quad (\text{Ec. 3})$$

$D_i$  representa el coeficiente de difusión,  $c_i$  es el campo de concentración y  $u$  es el campo de velocidad.

### 2.2.2 Cantidad de movimiento

La velocidad y presión en el sistema es controlada a partir de la ecuación de Navier-Stokes para un fluido incompresible y en estado estacionario. El modelo se representa a continuación:

$$\rho (u \cdot \nabla) u = \nabla \cdot [-pI + K] + F + \rho g \quad (\text{Ec. 4})$$

$$\rho \nabla \cdot u = 0 \quad (\text{Ec. 5})$$

Donde  $\rho$  es la densidad,  $u$  es la velocidad promedio,  $p$  es la presión,  $K$  es la temperatura,  $g$  es la gravedad,  $F$  hace referencia a las fuerzas externas aplicadas al fluido y  $I$  es un vector para indicar la dirección de la presión (Dou, 2022).

### 2.2.3 Densidad de corriente y cinética electroquímica

A través de una transformación en la ecuación de Butler – Volmer es posible representar la densidad de corriente en función de la concentración, adicionalmente, la ecuación es trabajada desde su componente anódico (Ec. 6) y catódico (Ec. 7).

$$i = i_o \left( \frac{C}{C_o} \right) \cdot e^{\left[ a n \frac{Fy}{RT} \right]} \quad (\text{Ec. 6})$$

$$i = i_o \left( \frac{C^F}{C_o^F} \right) \cdot e^{\left[ (1-a) \cdot n \frac{Fy}{RT} \right]} \quad (\text{Ec. 7})$$

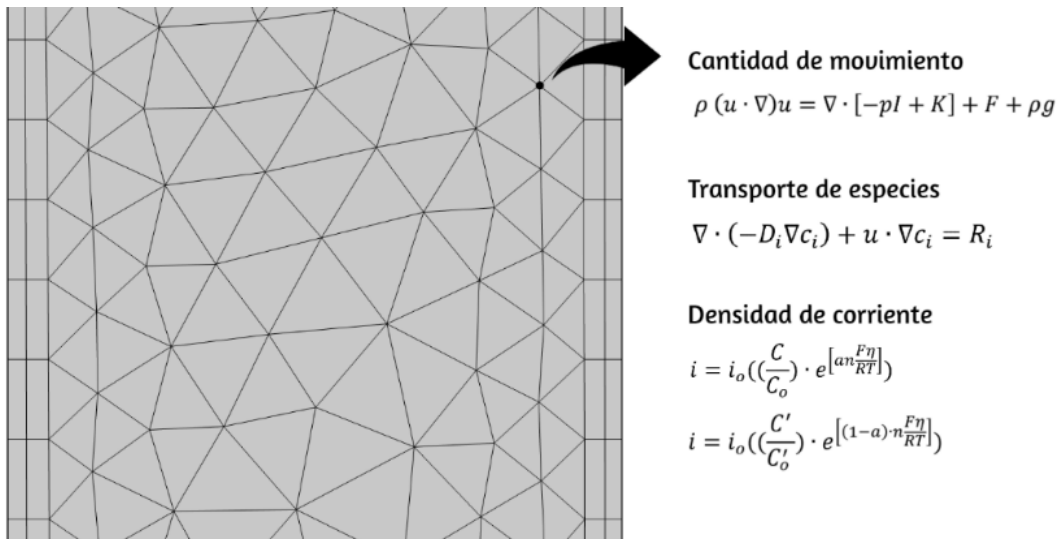
Donde  $i$  representa la densidad de corriente,  $i_o$  la densidad de corriente de intercambio,  $a$  el factor de simetría,  $n$  el número de electrones en la reacción,  $C$  y  $C'$  la concentración de las especies,  $C_o$  y  $C'$  la concentración inicial de las especies,  $F$  es la constante de Faraday,  $\eta$  el sobrepotencial,  $R$  la constante de gases y  $T$  la temperatura (Pavan, 2022).

### 2.3 Método de elementos finitos (FEM)

Es una técnica de tipo numérico para resolver ecuaciones diferenciales, el método funciona a partir del uso de condiciones de frontera en los modelos matemáticos antes descritos, mediante el cual, al discretizar el dominio en elementos finitos, se obtiene una malla en la cual cada nodo representa una matriz de ecuaciones diferenciales, la Figura 1 ilustra lo antes descrito (Oscar Gonzales, 2019).

#### Figura 1

*Representación de malla y modelos matemáticos aplicados en un nodo*



### 3. Metodología

## ETAPAS



#### 3.1 Etapa 1

##### 3.1.1 Estado del arte y revisión bibliográfica

Con el fin de conocer las variables y fenómenos bajo los cuales ocurren los procesos electroquímicos, se profundizó en la teoría sobre la cual se modela el funcionamiento de los reactores electroquímicos, y los diversos diseños existentes. Paralelamente, se realizó una investigación acerca del mercurio en la cual se abarcan diversos aspectos de interés para el proyecto.

##### 3.1.1.1 Mercurio.

**3.1.1.1.1 Propiedades y descomposición del mercurio.** El mercurio es un metal líquido que posee baja solubilidad en agua, es tóxico y reacciona fácilmente con diversas especies en solución. Al entrar en contacto con el agua, este elemento forma capas de gotas o partículas en suspensión y presenta tendencia a aglomerarse. Este metal puede reaccionar con alguna especie y formar iones (Sierra J. Rodríguez R. Millán, 2010):

El ion mercurioso  $Hg(I)$  no resulta de mayor interés para efectos de potabilización y tratamiento de aguas debido a que su formación es poco común, solo es estable a pH muy

ácido y cuando no presenta estabilidad se dismuta para formar sales mayormente insolubles en agua y/o inertes químicamente en este medio (Burriel, 2006).

El ion mercuríco Hg (II) es el catión de mayor interés para efectos de tratamiento de aguas y eliminación de mercurio, puesto que este ion posee un tiempo de residencia que puede oscilar entre horas a meses (Martínez. 2004), adicionalmente puede formar diversos complejos acuosos en función a los iones y especies en solución (Burriel, 2006).

La remoción del ion mercuríco Hg (II) resulta de gran importancia, puesto que a partir de este ion es posible la formación de nitrato de mercurio (II) y cianuro de mercurio (II) los cuales representan un alto riesgo de intoxicación, una vez que el ion o las sales ingresan en un organismo o entran en contacto con materia orgánica se da pie a la formación de metilmercurio y comienza un proceso de bioacumulación en la cadena alimentaria (Ramírez, 2008).

**3.1.1.1.2 Recuperación del mercurio iónico y líquido.** Existen diversos mecanismos para la recuperación del mercurio y sus iones. Los procesos más destacables para la remoción de dicho metal son:

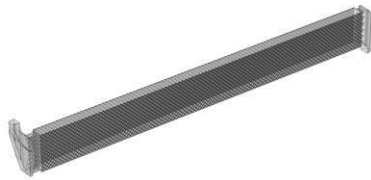
- **Iónico:** Para efectos de potabilización y tratamiento de agua para consumo humano, la remoción de iones vía electroquímica resulta una opción viable, considerando el porcentaje de remoción que puede lograrse sin adicionar sustancias que pongan en riesgo la calidad del agua (SANTOS AMADO, 2015).
- **Líquido:** La remoción de mercurio líquido presente en solución ha demostrado ser efectiva vía adsorción utilizando carbones activados (COLPAS, 2016).

### 3.1.2 Selección de Reactores

A partir de una exhaustiva revisión bibliográfica, se preseleccionaron diversos reactores electroquímicos destacables en su área de aplicación (Apéndice A), posteriormente se seleccionaron un total de tres (3) reactores para su análisis. Los reactores seleccionados se listan a continuación.

#### Figura 2

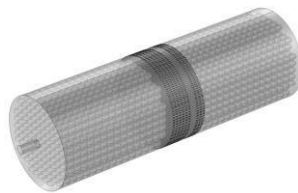
*Reactores electroquímicos seleccionados para estudio*



a) Reactor de placas paralelas.



b) Reactor tubular.



c) Reactor de lecho fluidizado.

## 3.2 Etapa 2

### 3.2.1 Construcción y modelamiento de reactores electroquímicos

Se utilizó la herramienta computacional SolidWorks® para efectuar la construcción de los reactores electroquímicos seleccionados en un modelo CAD (SOLIDWORKS, 2017).

### ***3.2.2 Simulación computacional***

A través de la herramienta computacional Comsol Multiphysics® 5.6, utilizando las físicas de Flujo laminar y Transporte de especies diluidas, se efectuó el modelo analítico del sistema (COMSOL, 2020). El software permite resolver los modelos matemáticos a través del método de elementos finitos por medio de una discretización del dominio (Oscar Gonzales, 2019).

***3.2.2.1.1 Consideraciones y condiciones, límites.*** A partir de información obtenida por medio de previos estudios relacionados con la reducción y remoción de mercurio en reactores electroquímicos, fueron seleccionados diversos valores y constantes de interés para la simulación, estos se encuentran recopilados en Apéndice B.

- Se considera un sistema en estado estacionario, no existe variación en la temperatura, coordenadas cartesianas, volumen, presión, se asume un régimen laminar y un fluido newtoniano.
- Se considera que los electrodos poseen un área electroactiva equivalente a su área geométrica.
- Existe una condición de no desplazamiento en las paredes de los reactores.
- Los valores de referencia para la concentración de las especies fueron obtenidos a partir de estudios para la evaluación en la calidad del agua del río Vetás (Apéndice B).
- Las reacciones químicas de interés en el sistema son la reducción del mercurio iónico a mercurio elemental (Ec. 1) y la oxidación del agua (Ec. 2).

**3.2.2.1.2 Malla.** La discretización del dominio se realizó con una malla de grosor normal. Esta configuración de malla permite obtener valores fiables y con buena exactitud. El resultado del mallado es presentado en el Apéndice C.

Las características más relevantes de una malla normal son un tamaño de elemento con dimensiones mínimas y máximas de 0.00136 y 0.00456 metros. La geometría de los elementos es tetraédrica, tal como se ilustra en la figura 1.

## **4. Resultados**

A través de *Comsol Multiphysics*® 5.6 es posible utilizar herramientas de análisis para estudiar el comportamiento y las variables de interés a través de gráficos, perfiles, líneas de flujo y curvas de nivel, adicionalmente la herramienta permite aplicar un postprocesado a la solución entregada por la simulación para examinar e interpretar los resultados (Antonio, 2014). Los perfiles de concentración de especies y densidad de corriente resultan de vital importancia para este estudio.

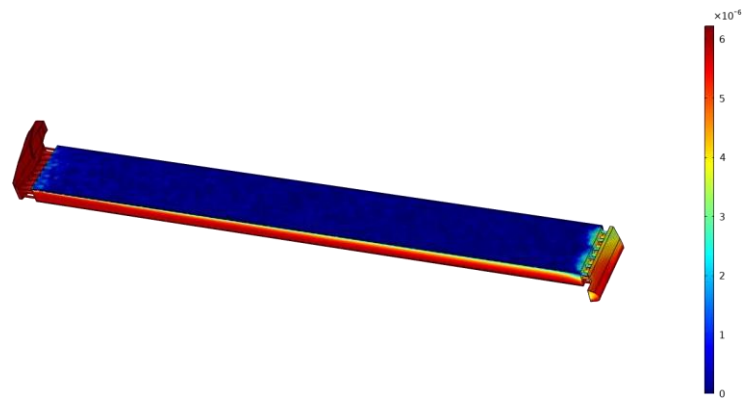
### **4.1 Concentraciones**

La concentración de las especies en los perfiles es representada a través de una escala de colores, donde la mayor concentración de la especie se ilustra en color rojo y la menor concentración se ilustra en color azul.

#### 4.1.1 Reactor de placas paralelas

##### Figura 3

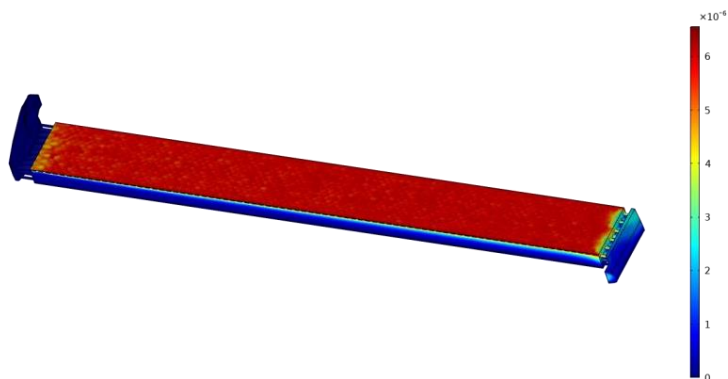
Perfil de concentración de mercurio iónico  $Hg(II)$  en  $[mol/m^3]$



En la Figura 3 se puede observar que la concentración de mercurio iónico  $Hg(II)$  disminuye a medida que la distancia de la solución con el cátodo es menor. Este comportamiento es de esperar, puesto que en el cátodo ocurre la reducción del  $Hg(II)$  (Ec 1).

##### Figura 4

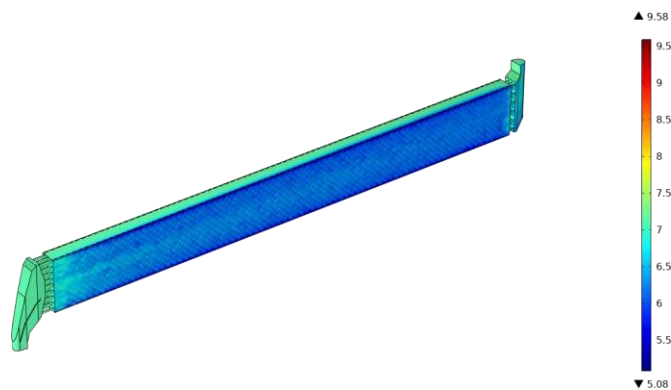
Perfil de concentración de mercurio líquido  $Hg(0)$  en  $[mol/m^3]$



En la Figura 4 se puede observar que la concentración de mercurio líquido Hg (0) aumenta a medida que la distancia de la solución con el cátodo es menor. Este comportamiento es de esperar, puesto que en el cátodo ocurre la formación de Hg (0) a partir de la reducción de Hg (II) (Ec 1).

### Figura 5

#### *Perfil de pH*

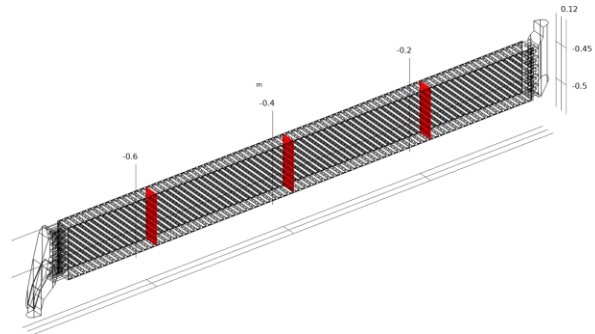


En la Figura 5 se puede observar que el pH cae a medida que la distancia de la solución con el ánodo es menor. Este comportamiento es de esperar, puesto que en el ánodo ocurre la formación de protones [H<sup>+</sup>] a partir de la oxidación del agua (Ec 2.).

Para analizar la variación del promedio de la concentración de las especies a lo largo del reactor, se evaluó el promedio de la concentración en 3 cortes transversales en el cuerpo, entrada y salida, tal como se ilustra en la Figura 6.

**Figura 6**

*Planos de corte para análisis de concentraciones*



A partir de los promedios de concentración tomados del reactor se construyó la Tabla 1, adicionalmente, se calculó la variación de la concentración inicial con respecto a la concentración final utilizando la (Ec. 8).

$$\%R = \frac{(C_i - C_f)}{C_i} \cdot 100 \quad (\text{Ec. 8})$$

Donde  $C_i$  y  $C_f$  representan la concentración inicial y final de la especie.

**Tabla 1**

*Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor de placas paralelas*

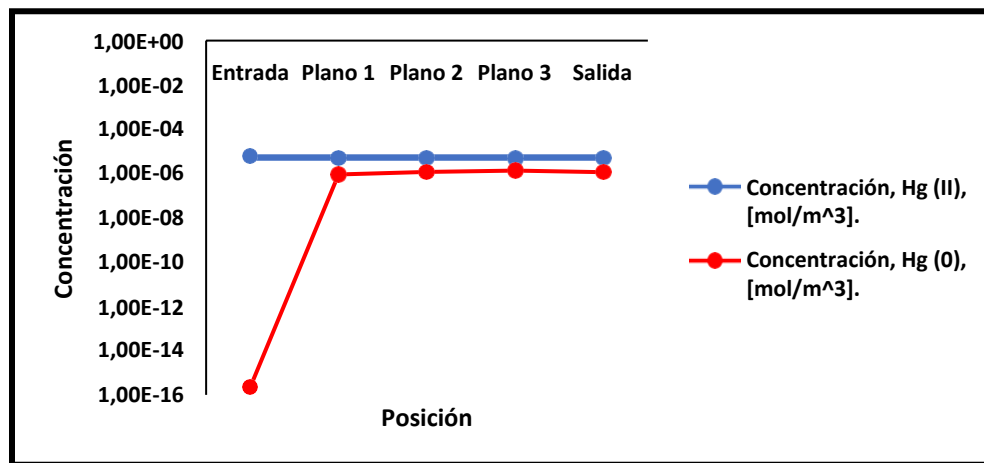
Posición	Hg (II), [mol/m <sup>3</sup> ]	Hg (0), [mol/m <sup>3</sup> ]	pH
Entrada	5,98E-06	2,22E-16	7,14
Plano 1	5,09E-06	8,92E-07	-
Plano 2	4,83E-06	1,15E-06	-
Plano 3	4,64E-06	1,34E-06	-
Salida	4,85E-06	1,13E-06	7,022
<b>Variación [%]</b> (Entrada vs Salida)	<b>18,94</b>	-	<b>1,65</b>

*Nota:* Esta tabla muestra cómo cambia la concentración de las especies a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

Con los datos obtenidos en la Tabla 1, se construyó la gráfica de la Figura 7 para analizar el comportamiento a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

**Figura 7**

*Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal*



Con base en los datos obtenidos en la Tabla 1, es posible afirmar que se obtuvo una remoción de Hg (II) de **18,94%** con respecto al Hg (II) presente en la entrada del reactor. En la Tabla 1 se observa una disminución de Hg (II) y un aumento de Hg (0) a medida que el fluido se acerca a la salida, sin embargo, se observa un aumento de Hg (II) y una disminución de Hg (0) entre el Plano 3 y la Salida.

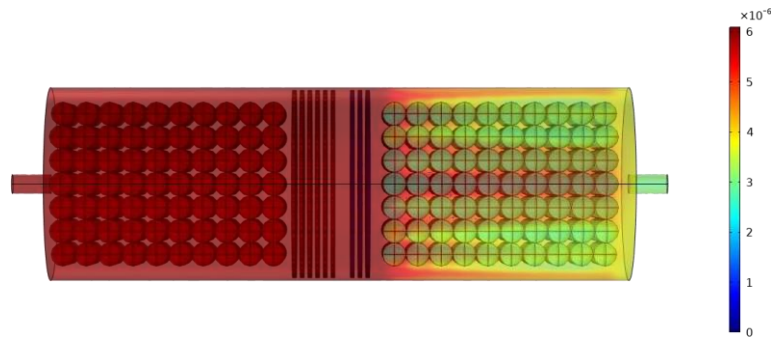
La variación de concentraciones se atribuye a un fenómeno relacionado con el transporte de especies, donde la región del fluido cercana al cátodo está empobrecida de Hg(II) y enriquecida de Hg (0), cuando esta región del fluido cruza los distribuidores de salida y se encuentra con el fluido de la región anódica el cual está empobrecido de Hg (0) y enriquecido

de Hg (II) el promedio de la concentración de las especies varía debido a que ambas regiones se mezclan y se homogeneiza la concentración de sus especies.

#### 4.1.2 Reactor de lecho fluidizado

### Figura 8

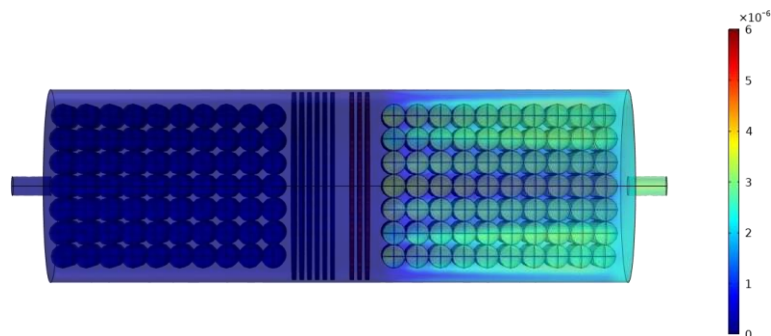
*Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m<sup>3</sup>]*



En la Figura 8 se puede observar que la concentración de mercurio iónico Hg (II) disminuye una vez que el fluido atraviesa el paquete catódico. Este comportamiento obedece a lo descrito en la ecuación de reducción de Hg (II) (Ec 1).

### Figura 9

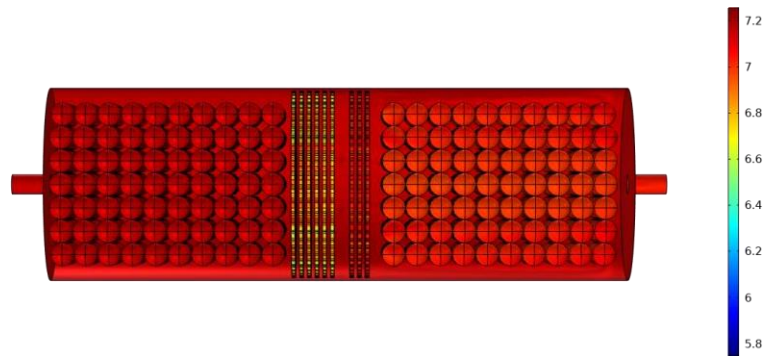
*Perfil de concentración de mercurio líquido Hg (0) en [mol/m<sup>3</sup>]*



En la Figura 9 se puede observar que la concentración de mercurio líquido  $\text{Hg}(0)$  aumenta, una vez que el fluido atraviesa el paquete catódico. Es posible destacar la presencia de altas concentraciones de  $\text{Hg}(0)$  sobre la superficie de las esferas, en el paquete catódico y en las fracciones de vacío del lecho (Apéndice D). Este fenómeno se atribuye a los reflujos y obstrucción ocasionados por el lecho de esferas.

### Figura 10

#### *Perfil de pH*

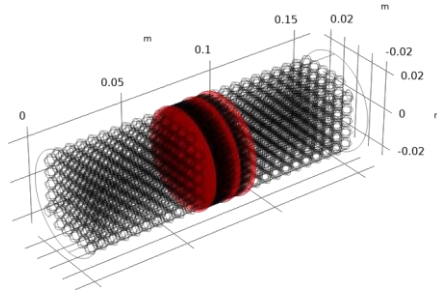


En la Figura 10 es posible observar que a lo largo del reactor se sostiene un pH homogéneo. La mayor variación de pH está presente en la región donde están ubicados los paquetes de electrodos.

Para analizar la variación del promedio de la concentración de las especies a lo largo del reactor se evaluó el promedio de la concentración en la entrada, salida, antes del paquete anódico, entre los dos paquetes de electrodos y después del paquete catódico, para ello se efectuaron tres cortes transversales en el cuerpo tal como se ilustra en la Figura 11.

**Figura 11**

*Planos de corte para análisis de concentraciones*



A partir de los promedios de concentración tomados del reactor se construyó la Tabla 2, adicionalmente, se calculó la variación de la concentración inicial con respecto a la concentración final utilizando la (Ec. 8).

**Tabla 2**

*Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor de lecho fluidizado*

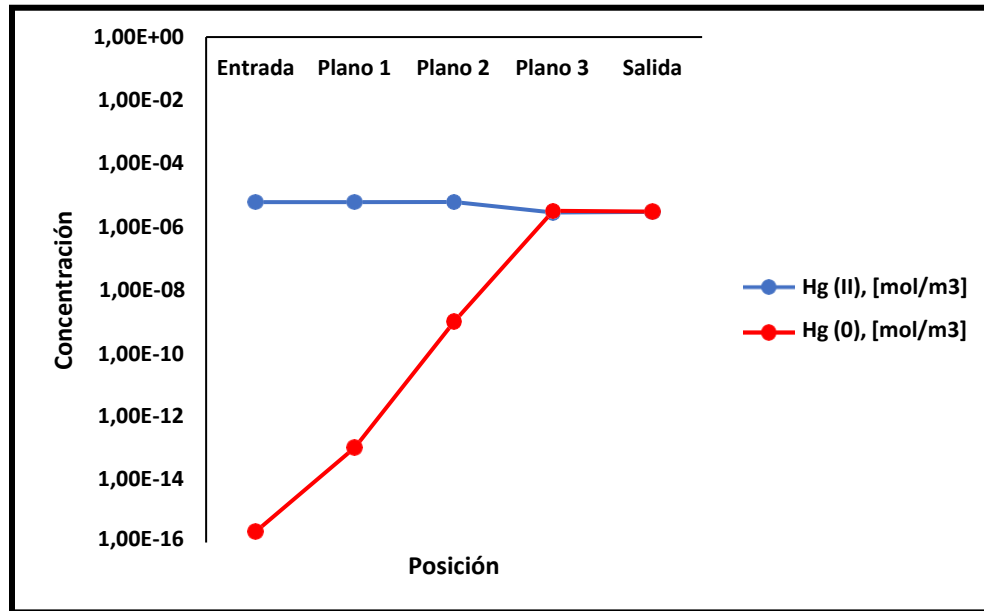
Posición	Hg (II), [mol/m <sup>3</sup> ]	Hg (0), [mol/m <sup>3</sup> ]	pH
Entrada	5,980E-6	2,220E-16	7,14
Plano 1	5,980E-6	1,024E-13	-
Plano 2	5,979E-6	9,898E-10	-
Plano 3	2,8039E-6	3,1750E-6	-
Salida	2,9600E-6	3,0192E-6	7,03
<b>Variación [%]</b> (Entrada vs Salida)	<b>50,5</b>	-	<b>1,54</b>

*Nota:* Esta tabla muestra cómo cambia la concentración de las especies a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

Con los datos obtenidos en la Tabla 2, se construyó la gráfica de la Figura 12 para analizar el comportamiento a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

**Figura 12**

*Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal*

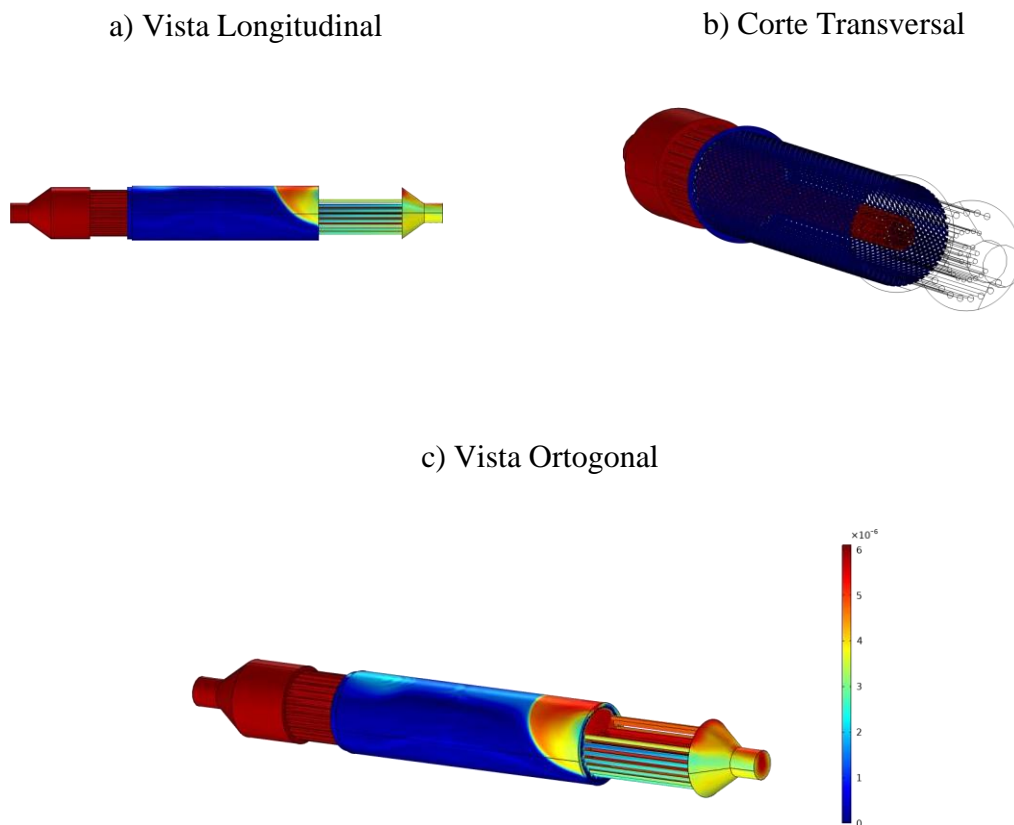


Con base en los datos obtenidos en la Tabla 2, es posible afirmar que se obtuvo una remoción de Hg (II) de **50,5%** con respecto al Hg (II) presente en la entrada del reactor. Se destaca una alta remoción de Hg (II), la cual se atribuyó a la naturaleza del reactor, donde el fluido se ve forzado a entrar en contacto con los electrodos.

### 4.1.3 Reactor tubular

**Figura 13**

*Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m<sup>3</sup>]*

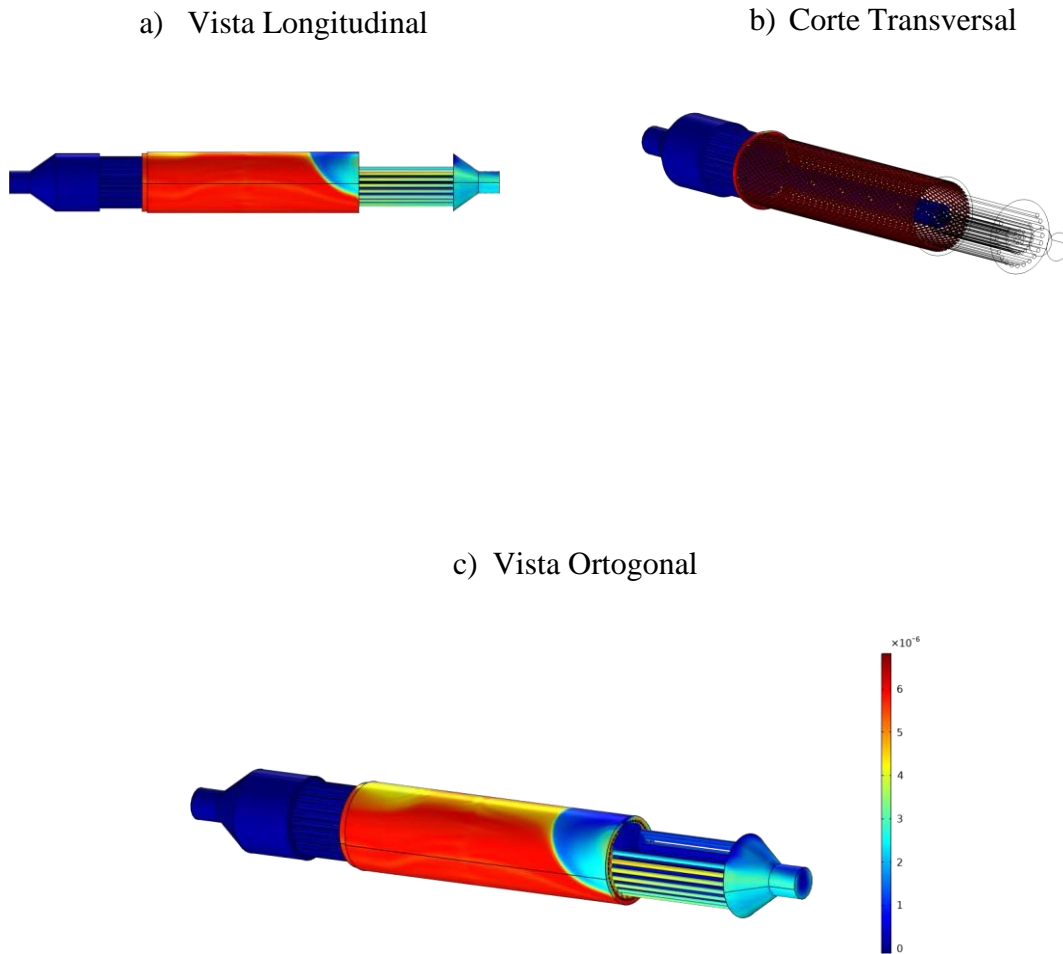


En la Figura 13 a) y c) es posible observar la distribución general de Hg (II) en el reactor, se destaca la variación en la concentración de Hg (II) cerca a los distribuidores de salida debido a reflujos dada la falta de distribuidores en esta zona, estos reflujos se pueden evidenciar en el Apéndice G.

En la Figura 13 b) se observa la distribución superficial de Hg (II) con énfasis en los electrodos. Se observan mínimos de concentración sobre el cátodo del reactor.

**Figura 14**

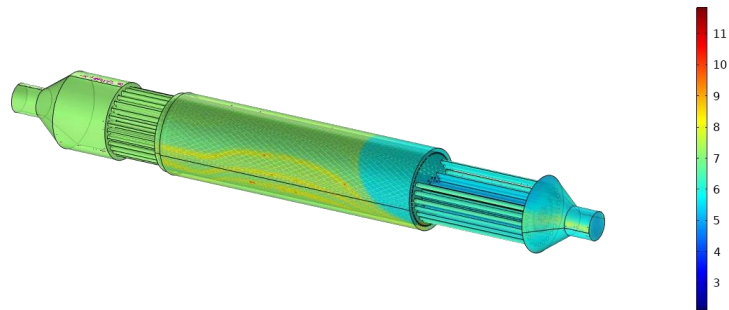
*Perfil de concentración de mercurio elemental Hg (0)*



En la Figura 14 a) y c) es posible observar la distribución general de Hg (0) en el reactor. La Figura 14 b) evidencia la distribución superficial de Hg (0) con énfasis en los electrodos; se observan máximos de concentración sobre el cátodo del reactor.

**Figura 15**

*Perfil de pH*

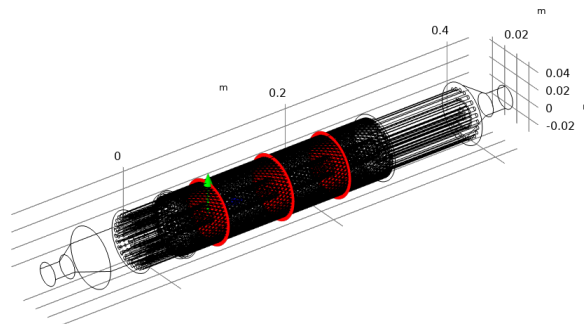


En la Figura 15 es posible observar variaciones de pH a lo largo del reactor con una importante caída en la región de salida hacia los distribuidores dada la presencia de reflujos.

Para analizar la variación del promedio de la concentración de las especies a lo largo del reactor, se evaluó el promedio de la concentración en 3 cortes transversales en el cuerpo, entrada y salida, tal como se ilustra en la Figura 16.

**Figura 16**

*Planos de corte para análisis de concentraciones.*



A partir de los promedios de concentración tomados del reactor se construyó la Tabla 3, adicionalmente, se calculó la variación de la concentración inicial con respecto a la concentración final utilizando la (Ec. 8).

**Tabla 3**

*Promedio de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor tubular*

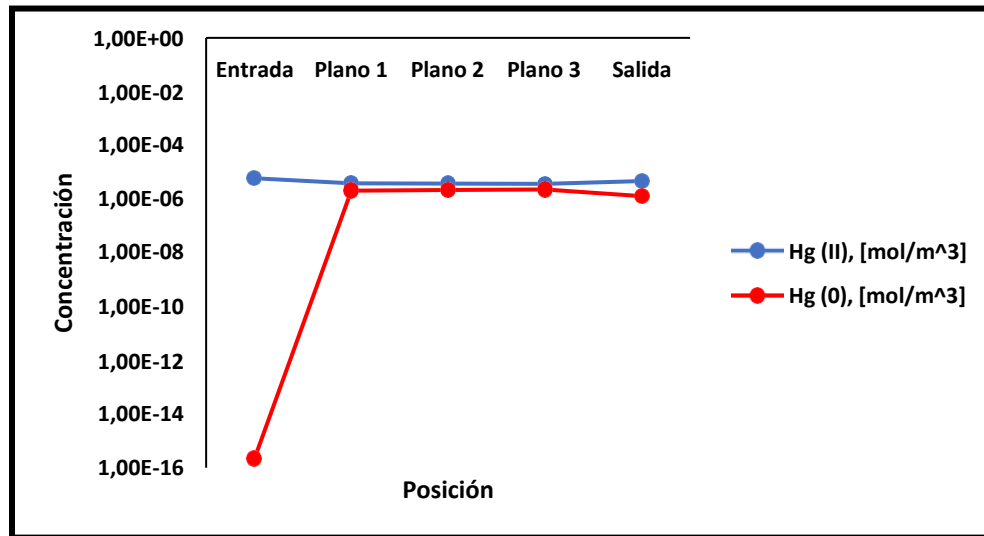
<b>Posición</b>	<b>Hg (II), [mol/m<sup>3</sup>]</b>	<b>Hg (0), [mol/m<sup>3</sup>]</b>	<b>pH</b>
Entrada	5,980E-6	2,22E-16	7,14
Plano 1	3,94E-06	2,04E-06	-
Plano 2	3,79E-06	2,19E-06	-
Plano 3	3,69E-06	2,29E-06	-
Salida	4,67E-06	1,31E-06	5,33
<b>Variación [%]</b>	<b>21,89</b>	-	<b>25,35</b>
(Entrada vs Salida)			

*Nota:* Esta tabla muestra cómo cambia la concentración de las especies a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

Con los datos obtenidos en la Tabla 3, se construyó la gráfica de la Figura 17 para analizar el comportamiento a lo largo de la sección longitudinal del reactor.

**Figura 17**

*Promedio de concentración para Hg (II) y Hg (0) a lo largo de la sección longitudinal*



Con base en los datos obtenidos en la Tabla 3, es posible afirmar que se obtuvo una remoción de Hg (II) de **21,98%** con respecto al Hg (II) presente en la entrada del reactor. Se observa una variación en las concentraciones entre el Plano 3 y Salida, esta variación se atribuye a fenómenos de difusión, reflujos y homogeneización en la concentración de las especies, esto se debe a que la región cercana al cátodo está enriquecida en Hg (0) y empobrecida en Hg (II), de igual forma cerca al ánodo el fluido está enriquecido de Hg (II) y empobrecido de Hg (0), cuando el fluido cruza los distribuidores de salida se ve forzado a interactuar y mezclarse con el fluido que ha estado en contacto con el cátodo y ánodo.

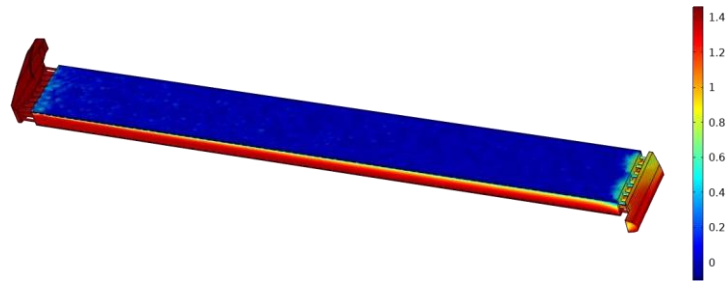
#### 4.2 Densidad de corriente terciaria

La densidad de corriente en los reactores es representada a través de una escala de colores, donde la mayor densidad de corriente se ilustra en color rojo y la menor se ilustra en color azul.

#### 4.2.1 Reactor de placas paralelas

**Figura 18**

*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$*

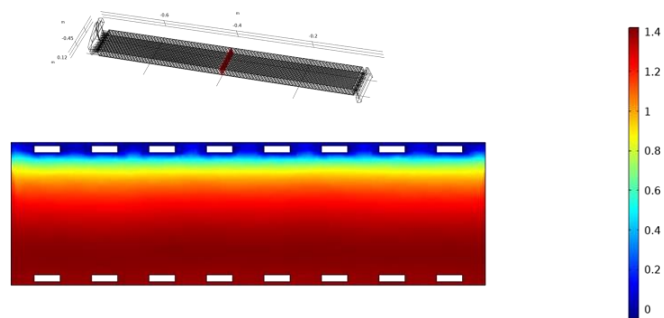


En la Figura 18 se puede observar que la densidad de corriente es menor a medida que el fluido está más cerca del cátodo. Es posible destacar que la máxima densidad de corriente se sitúa en el ánodo.

Para analizar el perfil de densidad de corriente con mayor detalle, se realizó un corte en la sección transversal del cuerpo, tal como se ilustra en la Figura 19.

**Figura 19**

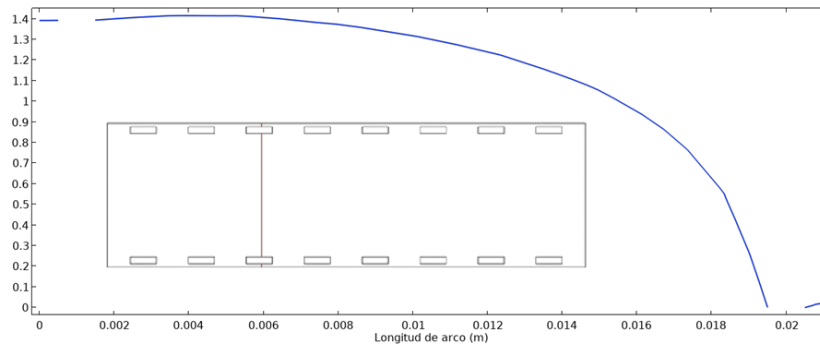
*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$ . Sección transversal*



Para analizar con mayor detalle la distribución de la densidad de corriente en los electrodos, se realizaron dos cortes en el plano de la Figura 19, los resultados obtenidos se presentan en la Figura 20 y 21.

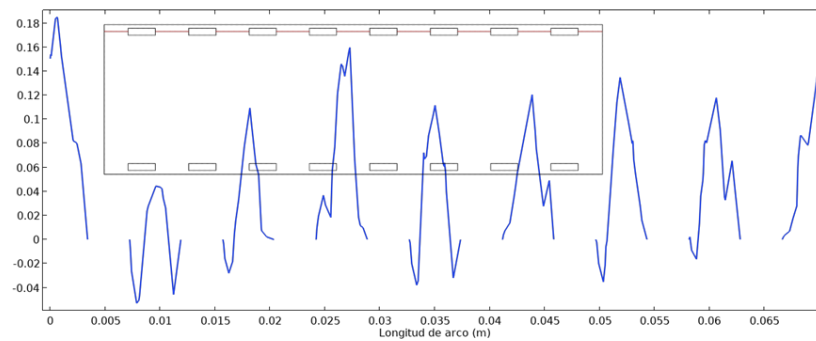
**Figura 20**

*Densidad de corriente entre electrodos en  $[A/cm^2]$ . Corte transversal*



**Figura 21**

*Densidad de corriente entre electrodos en  $[A/cm^2]$ . Corte longitudinal*

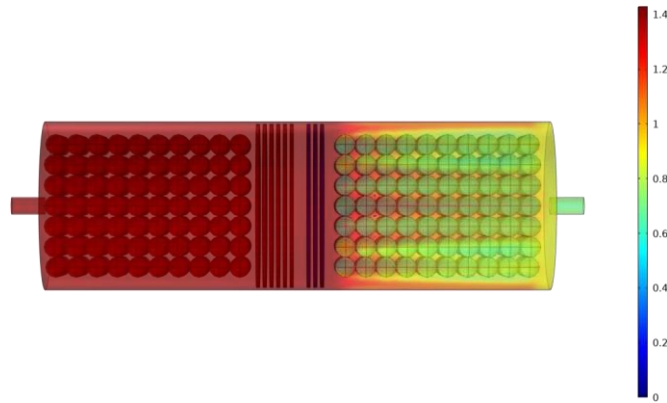


En la Figura 20 se puede observar la curva de densidad de corriente entre los dos electrodos. La densidad de corriente aumenta a medida que la distancia del cátodo aumenta, y en la Figura 21 se destacan los picos de densidad de corriente entre las paredes del cátodo.

#### 4.2.2 Reactor de lecho fluidizado

**Figura 22**

*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$*

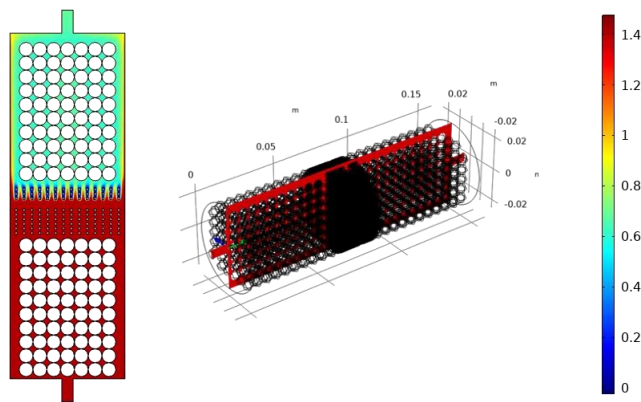


En la Figura 22 se puede observar que existe una caída en la densidad de corriente una vez que el fluido atraviesa el paquete de electrodos del cátodo; adicionalmente, la mínima densidad de corriente se localiza en el paquete catódico.

Para analizar el perfil de densidad de corriente con mayor detalle, se realizó un corte en la sección longitudinal del cuerpo, tal como se ilustra en la Figura 23.

**Figura 23**

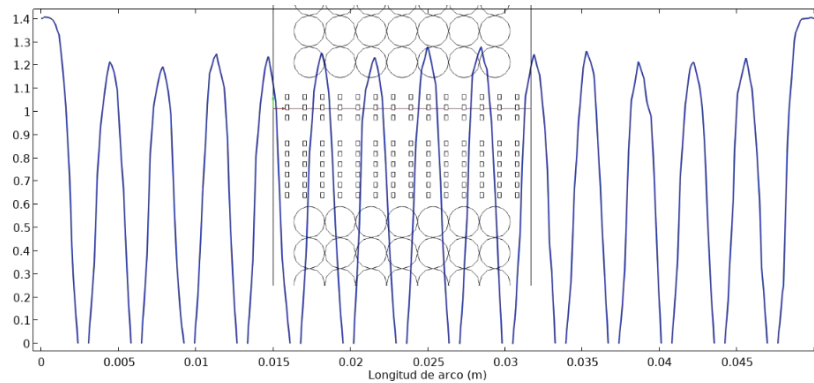
*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$ . Sección longitudinal*



Para analizar con mayor detalle la distribución de la densidad de corriente en los electrodos, se realizaron dos cortes en el plano de la Figura 23, los resultados se ilustran en la Figura 24 y 25.

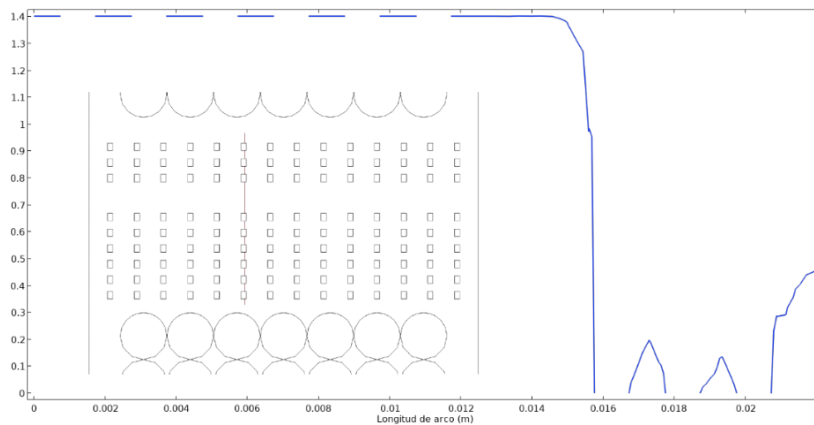
**Figura 24**

*Densidad de corriente entre electrodos en  $[A/cm^2]$ . Corte transversal*



**Figura 25**

*Densidad de corriente entre electrodos en  $[A/cm^2]$ . Corte longitudinal*

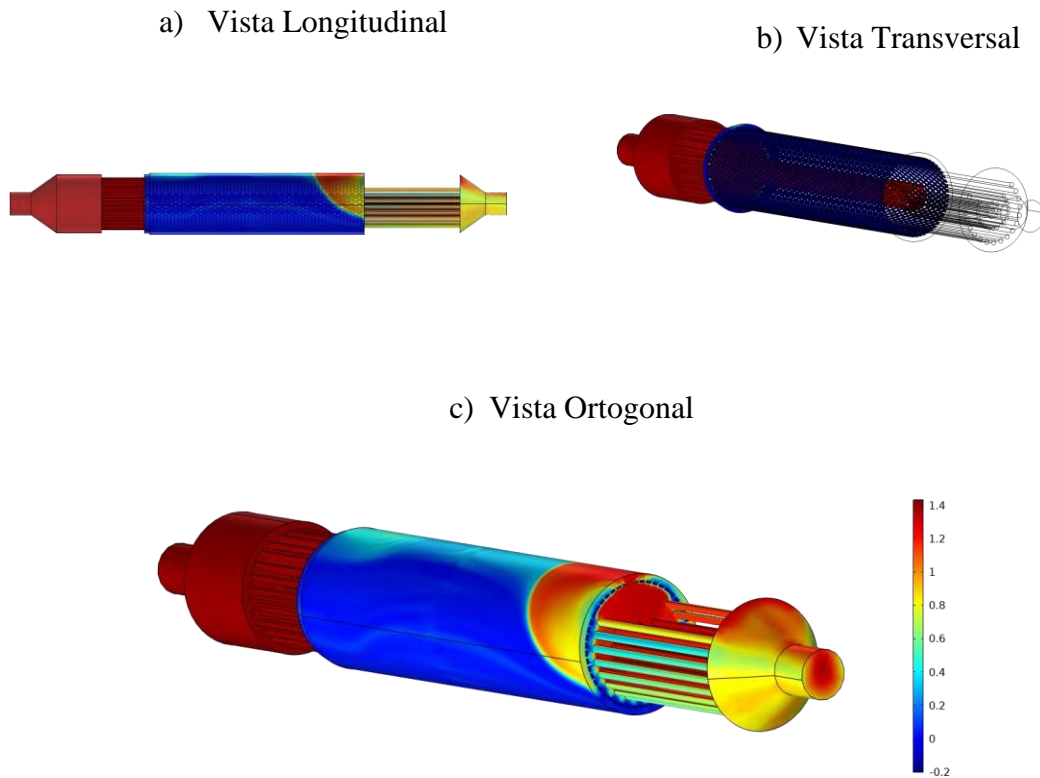


En la Figura 25 se puede observar la curva de densidad de corriente entre los dos electrodos. La densidad de corriente presenta máximos en el paquete anódico; posteriormente se evidencia una caída en la densidad de corriente al acercarse al paquete catódico. La Figura 24 denota la distribución de corriente entre los espacios de la malla en el cátodo.

### 4.2.3 Reactor tubular

**Figura 26**

*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$*

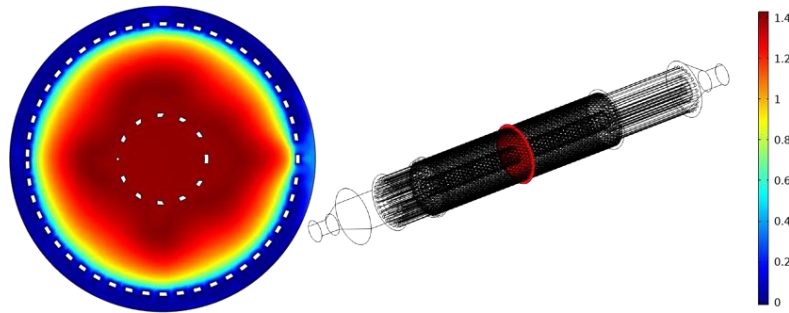


En la Figura 26 se puede observar que existe una caída en la densidad de corriente una vez que el fluido atraviesa el paquete de electrodos del cátodo.

Para analizar el perfil de densidad de corriente más a detalle, se realizó un corte en la sección transversal del cuerpo, tal como se ilustra en la Figura 27.

**Figura 27**

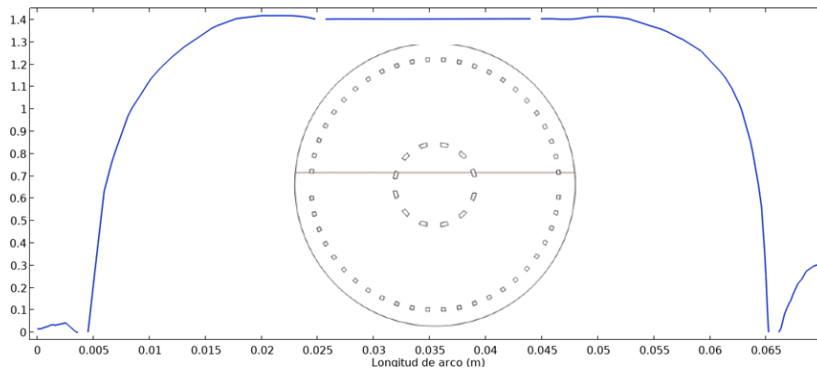
*Densidad de corriente en  $[A/cm^2]$ . Sección transversal*



Para analizar con mayor detalle la distribución de la densidad de corriente en los electrodos, se realizó un corte en el plano de la Figura 27, tal como se ilustra en la Figura 28.

**Figura 28**

*Densidad de corriente entre electrodos en  $[A/cm^2]$ . Corte transversal*



De igual forma que en los demás perfiles de densidad de corriente entre electrodos, la Figura 28 permite observar máximos en la densidad de corriente en el ánodo del sistema, donde existe la mayor distancia con las paredes del cátodo.

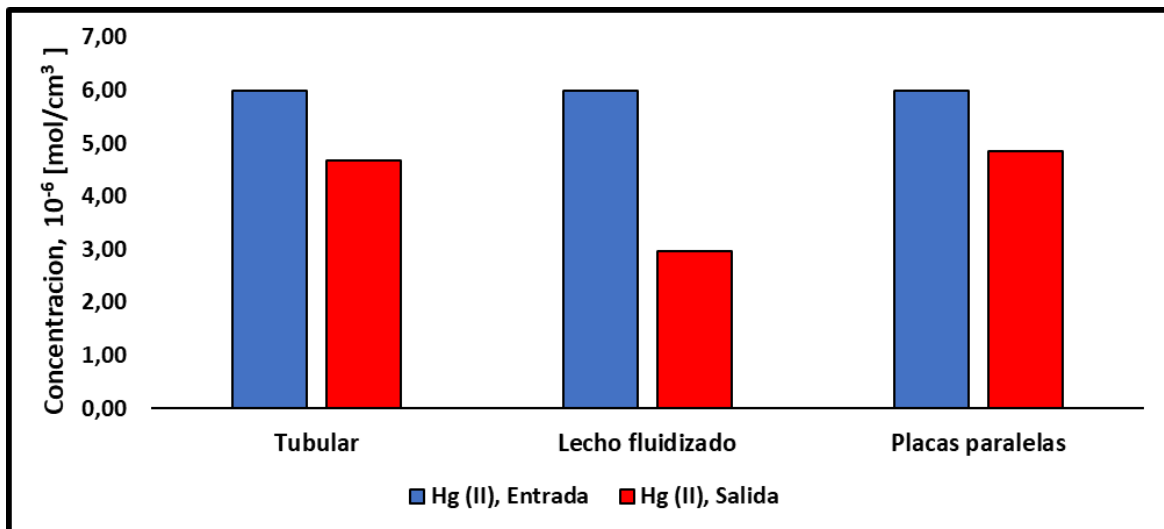
## 5. Análisis de Resultados

Con base en los resultados obtenidos a través de la herramienta computacional Comsol Multiphysics® 5.6 es posible afirmar que, en términos de recuperación de Hg (II), el reactor de lecho fluidizado es el más sobresaliente.

La alta recuperación del reactor de lecho se atribuye a la naturaleza del reactor. A diferencia del reactor tubular y de placas paralelas, la dirección de fluido es perpendicular a la posición de los electrodos, por ende, un mayor volumen del fluido se ve forzado a entrar en contacto con los electrodos.

**Figura 29**

*Comparativa de concentración de Hg (II) a la entrada y salida de los reactores*



Tal como fue mencionado en el anterior párrafo, una mayor interacción entre los electrodos y el electrolito conlleva una mayor recuperación, ya que una fracción más grande del fluido logra reaccionar, esta hipótesis pudo ser corroborada a través de un estudio paralelo realizado en el reactor tubular.

Para corroborar la influencia del área electroactiva, se modificó el reactor tubular para que el electrodo exterior fuese el ánodo y el electrodo interior el cátodo, obteniendo una menor área electroactiva. Los resultados arrojaron una recuperación de Hg (II) igual al 6,92% la cual es menor a la recuperación lograda con la configuración de electrodos inicial. Los perfiles y tablas de recuperación se encuentran adjuntos en el Apéndice E y F.

Se observa la presencia de Hg (0) en la salida de los reactores, esto indica que esta especie puede ser arrastrada por el fluido, adicionalmente se observan altas concentraciones de Hg (0) sobre la superficie de los electrodos en todos los reactores.

Comparando el comportamiento de las curvas en la Figura 21 y 24, se observan máximos en la densidad de corriente entre las paredes del cátodo. Si bien, este comportamiento se comparte en ambos reactores, los picos alcanzan valores superiores en el reactor de lecho fluidizado.

Se planteó una hipótesis acerca de la influencia que posee el perfil de velocidad en la densidad de corriente, para ello se sobrepuso la curva de velocidad en la Figura 21 y 24, tal como se observa en el Apéndice H.

La información obtenida a partir del Apéndice H confirma la influencia de la velocidad en la densidad de corriente, donde a mayor velocidad del fluido se obtiene una mayor densidad de corriente, en consecuencia, el balance y transporte de cargas es mayor, así como el transporte de masa en la superficie del electrodo y el electrolito (Comsol, s.f).

El análisis realizado en el anterior párrafo indica que la geometría del reactor posee influencia sobre la densidad de corriente terciaria al tener un impacto directo sobre la velocidad del fluido, por ende, es posible afirmar que la geometría del reactor afecta la eficiencia general del sistema.

El comportamiento observado en los perfiles de distribución de corriente terciaria guarda una estrecha relación con la ecuación de Butler – Volmer (Ec. 6) y (Ec. 7), si existe una alta concentración de especie reaccionante la densidad de corriente aumentará; es posible establecer una relación con la ley de velocidad, la cual considera que, a mayor concentración de reactivo, la cinética de la reacción aumentará (Pontifica Universidad Católica de Perú, 2020).

## 6. Conclusiones

A partir de los resultados de este estudio, es posible concluir que el reactor de lecho fluidizado es el más destacable en términos de recuperación, logrando una remoción de **50,5%** de Hg (II). La disposición de los electrodos en forma de paquete con una posición perpendicular al fluido posee una gran influencia sobre la reacción de reducción al promover la interacción entre electrodo y electrolito.

Se concluye que la velocidad del fluido es una variable que posee un impacto directo en la densidad de corriente terciaria y, por ende, en la transferencia de carga y masa del sistema, donde una mayor velocidad del fluido representa una mayor densidad de corriente, lo que conlleva un aumento en el transporte y balance de cargas acompañado de un aumento en el transporte de masa en la superficie del electrodo y el electrolito.

Es posible concluir que la geometría del reactor afecta directamente la velocidad del fluido, en consecuencia, el diseño geométrico influye indirectamente en la transferencia de carga y masa, por ende, se concluye que el diseño del reactor posee un impacto en la eficiencia general del sistema.

## 7. Recomendaciones

La presencia de Hg (0) en la salida de los reactores representa un riesgo para la calidad del agua y por ende para la salud humana, animal y vegetal; el potencial de reacción del Hg (0) para formar complejos, amalgamas e iniciar un proceso de metilación bacteriana para la generación de metilmercurio es un riesgo asociado, por ende, se recomienda la utilización de procesos de recuperación por adsorción en la salida del reactor a través del uso de carbones activados.

Dada la naturaleza del reactor de lecho, se recomienda estudiar qué efectos puede tener en la recuperación de Hg (0) la presencia de carbones activados en el volumen del reactor posterior al paquete catódico.

Se recomienda realizar posteriores estudios para analizar los efectos que tiene sobre el reactor, el cambio de sobrepotencial, separación de electrodos, velocidad de fluido, tamaño de malla y densidad de corriente de intercambio sobre la recuperación de Hg (II) y la densidad de corriente.

Se recomienda realizar estudios acerca de la recuperación de Hg (II) vía oxidación a través de la formación de HgO y reducción de H<sub>2</sub>O para formar H<sub>2</sub>.

**Referencias Bibliográficas**

- Antonio, J. (2014, diciembre 9). Manual de visualización y postprocesado en COMSOL Multiphysics. Addlink Software Científico. <https://www.addlink.es/noticias/comsol/2421-visualizacion-postprocesado-comsol>
- Asgharzadehahmadi, S., Abdul Raman, A. A., Parthasarathy, R., & Sajjadi, B. (2016). Sonochemical reactors: Review on features, advantages and limitations. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 63, 302–314
- Björketun, M. E., Tripkovic, V., Skúlason, E., & Rossmeisl, J. (2013). Modeling of the symmetry factor of electrochemical proton discharge via the Volmer reaction. *Catalysis Today*, 202, 168–174. doi:10.1016/j.cattod.2012.05.044
- CABRERA RUIZ, Ruíz Lizarazo, J. O., & Pedraza Avella, J. A. (2019). SIMULACION DEL EFECTO DEL CAUDAL SOBRE LA CORRIENTE LIMITE EN UN REACTOR FOTOELECTROQUIMICO TUBULAR [recurso electrónico]. UIS.
- CFD software for simulating fluid flow applications. COMSOL. Recuperado el 25 de noviembre de 2023, de <https://www.comsol.com/cfd-module>
- Chang, R., Goldsby, K. A. :, Álvarez Manzo, R., & Ponce López, S. (2013). *Química* (11a. ed. --.). México D.F.: McGraw Hill.

Chemical Engineering Software: Model Mass and Energy Balances. COMSOL. Recuperado el 25 de noviembre de 2023, de <https://www.comsol.com/chemical-reaction-engineering-module>

Colpas, F., Tarón, A. A., & Fon, y. W. (s/f). Adsorción de Mercurio Utilizando Carbones Activados Modificados con Peróxido de Hidrogeno y Calentamiento. <https://doi.org/10.4067/S0718-0764201600050000>

COMSOL (2020). Comsol.com. Recuperado el 25 de noviembre de 2023, de <https://cdn.comsol.com/doc/5.5/IntroductionToCOMSOLMultiphysics.pdf>

Comsol (s.f). The Tertiary Current Distribution, Nernst-Planck Interface. Comsol.com. Recuperado el 11 de febrero de 2024, de [https://doc.comsol.com/5.6/doc/com.comsol.help.battery/battery\\_ug\\_electrochem.07.018.html](https://doc.comsol.com/5.6/doc/com.comsol.help.battery/battery_ug_electrochem.07.018.html)

Conway, B. E., & Wilkinson, D. F. (1986). Entropic and enthalpic components of the symmetry factor for electrochemical proton transfer from various proton donors over a wide temperature range. *Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 214(1-2), 633–653. doi:10.1016/0022-0728(86)80129-2

CRANK, J. *The mathematics of diffusion*. 2a ed. New York: Oxford University Press, 1975.

Diffusion coefficients. (2015, noviembre 12). DGT Research.

<https://www.dgtresearch.com/diffusion-coefficients/>

Dou, H.-S. (2022). No existence and smoothness of solution of the Navier-Stokes equation.

Entropy (Basel, Switzerland), 24(3), 339. <https://doi.org/10.3390/e24030339>

F. Burriel Martí, F. Lucena Conde, S. Arribas Jimeno, J. Hernández Méndez (2006).

«Química analítica de los cationes: Mercurio». Química analítica cualitativa (18ª edición edición). Thomson. pp. 435-450.

Ferrer, Ángel & Tudela, Ignacio & Louisnard, Olivier & Sáez Bernal, Verónica & Esclapez,

María Deseada & Díez García, María Isabel & Bonete, Pedro & González-García,

José. (2011). Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods. Chemical Engineering Journal. 169. 270-281. 10.1016/j.cej.2011.02.053

Fonnegra, M. I. O. (2023, febrero 4). Alerta por alta presencia de mercurio en importante río

de Santander. El Tiempo.

<https://www.eltiempo.com/justicia/investigacion/mercurio-en-rio-de-santander-prende-alertas-de-autoridades-739429>

INFOBAE. (2022, agosto 10). Río Suratá, en Santander, está contaminado con mercurio y

Defensoría del Pueblo pide medidas. infobae.

<https://www.infobae.com/america/colombia/2022/08/11/rio-surata-en-santander-esta-contaminado-con-mercurio-y-defensoria-del-pueblo-pide-medidas/>

INNOUA (2020). Novedoso reactor electroquímico para regenerar de forma. Innoua.ua.es. Recuperado el 6 de noviembre de 2023, de <https://innoua.ua.es/es/novedoso-reactor-electroquimico-para-regenerar-de-forma-economica-y-eficiente-carbon-activado-agotado-3403>

INTRODUCCIÓN A SOLIDWORKS. (2017). Solidworks.com. Recuperado el 3 de diciembre de 2023, de [https://my.solidworks.com/solidworks/guide/SOLIDWORKS\\_Introduction\\_ES.pdf](https://my.solidworks.com/solidworks/guide/SOLIDWORKS_Introduction_ES.pdf)

LOPEZ CONTRERAS, Pedraza Avella, J. A., & Ruíz Lizarazo, J. O. (2018). ESTUDIO HIDRODINAMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUIMICO TIPO FILTRO PRENSA MEDIANTE DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL [recurso electrónico]. UIS.

M. A. Lominchar M. J. Sierra J. Rodríguez R. Millán. (2010). Estudio del Comportamiento y Distribución del Mercurio Presente en Muestras de Suelo Recogidas en la Ribera del Río Valdeazogues. Osti.gov. Recuperado el 26 de mayo de 2023, de <https://www.osti.gov/etdeweb/servlets/purl/21379861>

M. Mascia, A. Vacca, S. Palmas, Fixed bed reactors with three dimensional electrodes for electrochemical treatment of waters for disinfection, Chemical Engineering Journal, Volumes 211–212, 2012, Pages 479-487, ISSN 1385-8947, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.09.091>

Martinez, X. G. (2004). El mercurio como contaminante global Desarrollo de metodologías para su determinación en suelos contaminados y estrategias para la reducción de su liberación al medio ambiente. Tdx.cat. Recuperado el 8 de enero de 2024, de <https://www.tdx.cat/bitstream/handle/10803/3174/xgm1de1.pdf>

Nanseu-Njiki, Charles & Serge Raoul, Tchamango & Ngom, Philippe & Darchen, André & Ngameni, Emmanuel. (2009). Mercury(II) removal from water by electrocoagulation using aluminium and iron electrodes. Journal of hazardous materials. 168. 1430-6. 10.1016/j.jhazmat.2009.03.042.

Oscar González Woge. Carlos Omar González Morán. Asdrúbal López Chau. (30 de septiembre de 2019). Introducción al método del elemento finito: Solidworks y Matlab.

Panqueva, N., Santos, J., Albarracín, A., & Córdoba, E. (2014). REDUCCIÓN DE MERCURIO Y DEGRADACIÓN DE CIANURO EN UN REACTOR ELECTROQUÍMICO DE CILINDRO ROTATORIO (RCE) ASISTIDO POR LUZ. Revista Colombiana de Materiales, 5, 312–318. <https://doi.org/10.17533/udea.rcm.19242>

Pavan M. V & Andrew R. (2022, 28 agosto). 2.7: Electrochemistry. Chemistry LibreTexts.

[https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical\\_Chemistry/Physical\\_Methods\\_in\\_Chemistry\\_and\\_Nano\\_Science\\_\(Barron\)/02%3A\\_Physical\\_and\\_Thermal\\_Analysis/2.07%3A\\_Electrochemistry](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Analytical_Chemistry/Physical_Methods_in_Chemistry_and_Nano_Science_(Barron)/02%3A_Physical_and_Thermal_Analysis/2.07%3A_Electrochemistry)

Pérez, R., & Alberto, C. (2019). Evaluación de la calidad del agua del Río Vetas relacionada con la minería aurífera practicada en la provincia de Soto en Santander. Universidad de Manizales.

Pontificia Universidad Católica de Perú (2020). *Ley de velocidad y orden de reacción*.

Edu.pe. Recuperado el 5 de febrero de 2024, de

<http://corinto.pucp.edu.pe/quimicageneral/contenido/24-ley-de-velocidad-y-orden-de-reaccion.html>

Ramírez, Augusto V. (2008). Intoxicación ocupacional por mercurio. Anales de la Facultad de Medicina, 69(1), 46-51. Recuperado en 24 de noviembre de 2023, de

[http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1025-55832008000100010&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1025-55832008000100010&lng=es&tlng=es).

Reyes Pineda, Henry, Cardona Hernández, Leidy Carolina, & Pérez Herranz, Valentín.

(2015). Characterization of an electrochemical reactor operating in galvanostatic mode for recovering of exhausted etching baths. Ingeniare. Revista chilena de ingeniería, 23(2), 285-292. <https://dx.doi.org/10.4067/S0718-33052015000200013>

Ríos-Mendoza, Lorena M., Macías-Zamora, J. Vinicio, & Zirino-Weiss, Alberto R.. (2003).

Iridio: Una opción para medir el potencial redox. *Ciencias marinas*, 29(4), 509-520.

Recuperado en 23 de noviembre de 2023, de

[http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0185-](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0185-)

[38802003000400013&lng=es&tlng=es](http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0185-38802003000400013&lng=es&tlng=es).


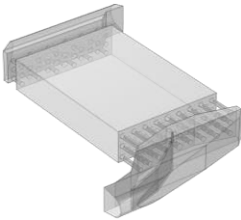
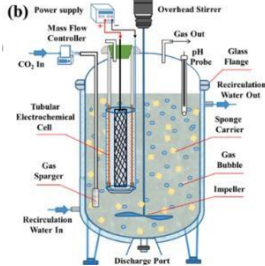
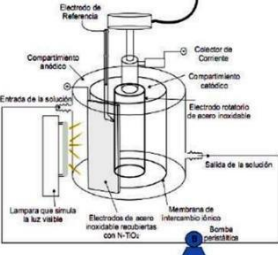
Ruiz Lizarazo, J. O., & Sanabria Mejia, L. A. (2016). ESTUDIO HIDRODINAMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUIMICO TUBULAR MEDIANTE DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL [Tesis de pregrado]. Universidad Industrial de Santander.

SANTOS AMADO, Gonzalez Martinez, I., & Cordoba Tuta, E. M. (2015). CONSTRUCCION Y EVALUACION DE UN ELECTROLIZADOR ASISTIDO POR LUZ PARA LA REMOCION DEL MERCURIO Y DEGRADACION DE CIANURO [recurso electrónico]. UIS

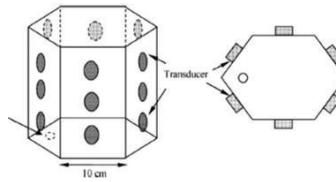
Shang, G., Cui, K., Cai, W., Hu, X., Jin, P., & Guo, K. (2023). A 20 L electrochemical continuous stirred-tank reactor for high rate microbial electrosynthesis of methane from CO<sub>2</sub>.

## Apéndices

## Apéndice A. Listado de reactores preseleccionados

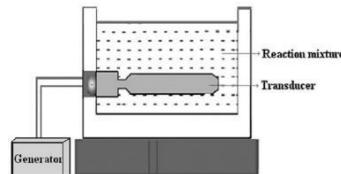
Tipo de reactor	Modelo	Referencia
Reactor tubular		Ruiz Lizarazo. 2016
Reactor de placas paralelas		LOPEZ CONTRERAS. 2018
Reactor de tanque agitado		Sang. 2023
Reactor de cilindro rotatorio		Panqueva. 2014

Reactor de baño  
ultrasónico



Asgharzadehahmadi.  
2016

Reactor de bocina  
ultrasónica



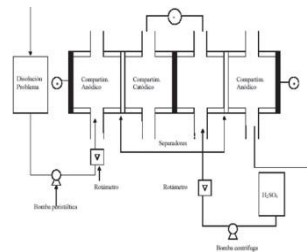
Asgharzadehahmadi.  
2016

Reactor  
electroquímico de  
ánodo espiral



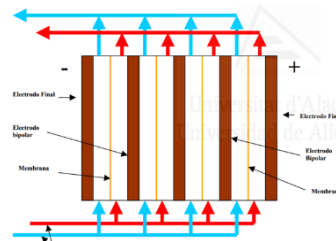
SANTOS AMADO.  
2015

Reactor de tipo filtro  
– prensa en serie



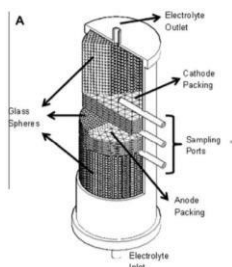
Reyes Pineda. 2015

Reactor de filtro tipo  
– prensa bipolar



Ferrer. 2011

Reactor de lecho  
fluidizado



Mascia. 2012

### Apéndice B. Constantes utilizadas en la simulación computacional

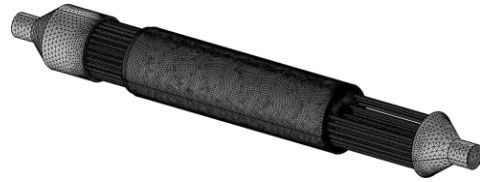
Constantes	Valor	Referencia
Caudal [Q]	3 [L/min]	Cabrera Ruiz. 2019
[Hg <sup>2+</sup> ]	5.98E-6 [mol/m <sup>3</sup> ]	Perez. 2019
[Hg <sup>0</sup> ]	2.2204E-16 [mol/m <sup>3</sup> ]	-
[O <sup>2</sup> ]	0.115625 [mol/m <sup>3</sup> ]	Perez. 2019
pH	7.14	Perez. 2019
Densidad de corriente	2.5 [mA/dm <sup>2</sup> ]	Nanseu-Njiki. 2009
Conductividad eléctrica del agua	157.99 [μS/cm]	Perez. 2019
Coefficiente de difusión de Hg <sup>2+</sup>	6 · 10 <sup>-6</sup> [cm <sup>2</sup> /s]	DGT Research. 2015
Temperatura del agua	15 [°C]	Perez. 2019
Factor de simetría	0.5	Björketun. 2013 Conway. 1986
Sobrepotencial	0.1 [V]	-

**Apéndice C. Mallado de reactores**

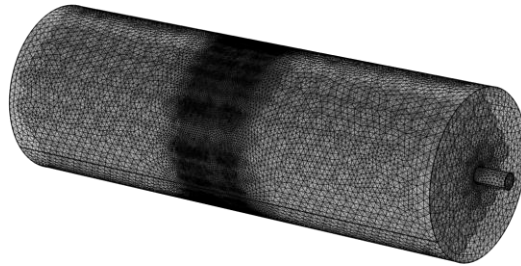
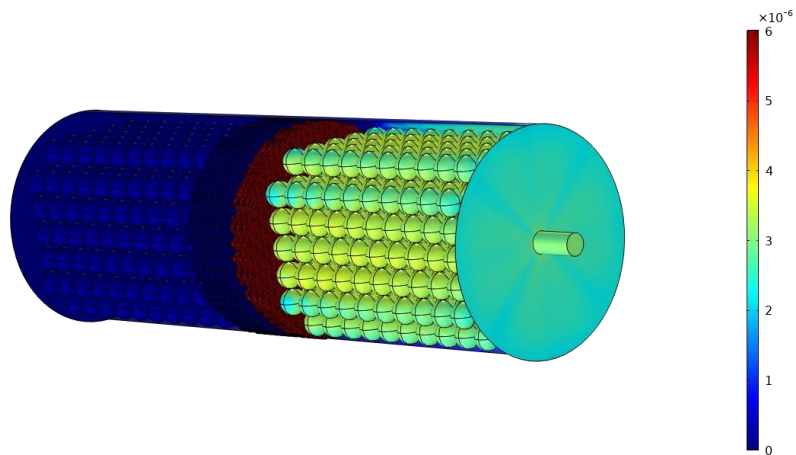
a) Reactor de placas paralelas



b) Reactor tubular



c) Reactor de lecho fluidizado

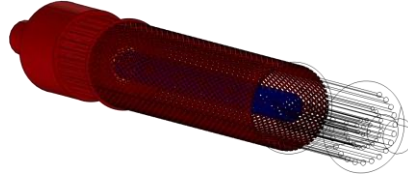
**Apéndice D. Perfil de concentración de Hg (0) en [mol/m<sup>3</sup>]**

**Apéndice E.** Perfil de concentración de mercurio iónico Hg (II) en [mol/m<sup>3</sup>]

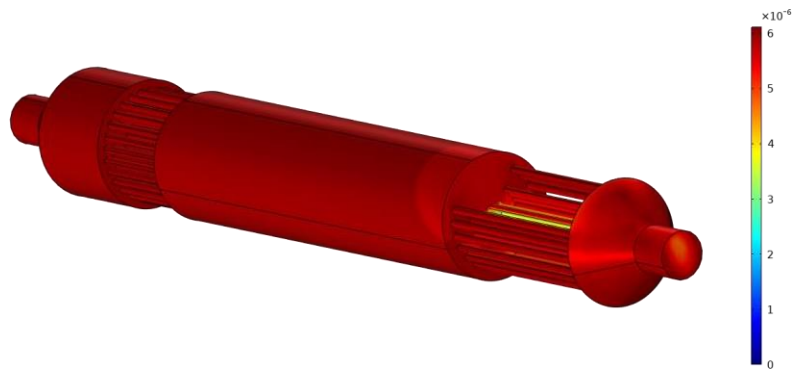
a) Vista longitudinal



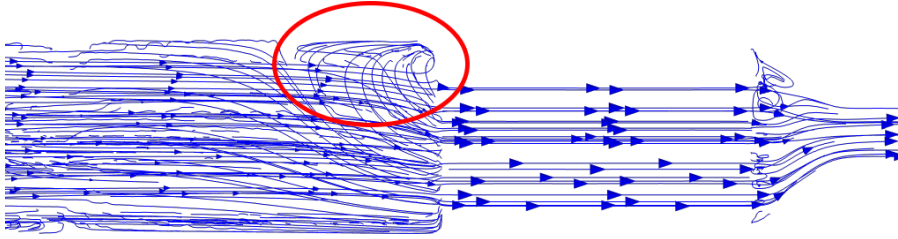
b) Vista en corte transversal

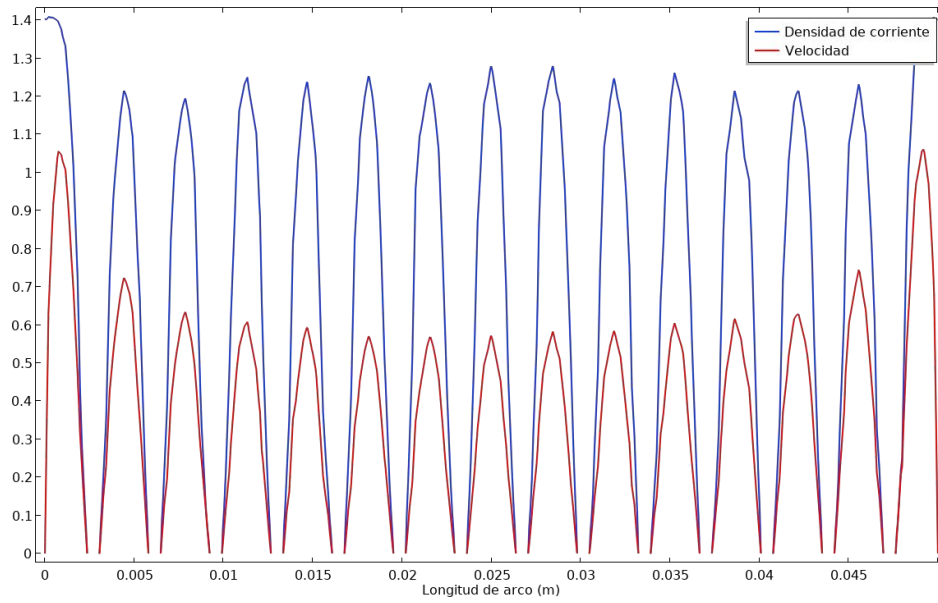


c) Vista ortogonal

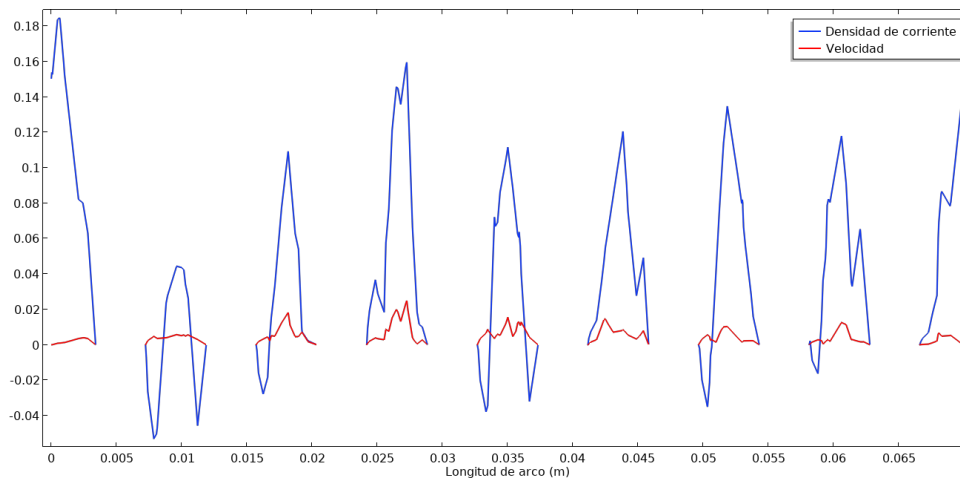
**Apéndice F.** Variación de concentración de Hg (II) y Hg (0) en reactor tubular con electrodos invertidos

Posición	Hg (II), [mol/m <sup>3</sup> ]	Hg (0), [mol/m <sup>3</sup> ]
Entrada	5,980E-6	2,22E-16
Salida	5,666E-6	4,132E-7
<b>Variación [%]</b> (Entrada vs Salida)	<b>6,92</b>	-

**Apéndice G.** Líneas de flujo en la región de salida del reactor tubular

**Apéndice H.** Velocidad en [dm/s] y densidad de corriente en [A/cm<sup>2</sup>]

a) Reactor de lecho fluidizado – Corte transversal.



b) Reactor de placas paralelas – Corte longitudinal.