

Efecto del cambio de alimentación frontal a lateral sobre la reducción de Hg(II) en un reactor fotoelectroquímico tubular mediante CFD

Alejandro Buelvas Noguera y Nafer Stevens Prada Jaimes

Trabajo de grado para optar por el título de ingeniero químico

Director:

Julio Andrés Pedraza Avella, Dr.

Ing. Químico

Codirector:

Jeferson Owaldo Ruiz Lizarazo, Mg.

Ing. Metalúrgico

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga, Santander

2024

Dedicatoria

A mí a veces ruidosa, excesivamente afectuosa, extremadamente delicada y querida hermana.

Alejandro Buelvas Noguera

Dedicatoria

*A mi mamá,
por ser mi inspiración y mi ejemplo,
por cada sacrificio, cada palabra de aliento,
y por enseñarme con su amor y su entrega
que los sueños se alcanzan con esfuerzo y dedicación.*

*Gracias por creer en mí incluso en los momentos en que yo dudaba,
por estar siempre a mi lado y darme la fuerza para llegar hasta aquí.
Este logro es tan tuyo como mío.*

Con todo mi amor y gratitud.

Nafer Stevens Prada Jaimes

Agradecimientos

A mi mamá, papá y abuelos, por su apoyo constante y sus sacrificios a lo largo de los años. Gracias por su paciencia, por sus consejos y por brindarme siempre tranquilidad. Sus palabras y su ejemplo me han guiado a lo largo de mi vida.

Al doctor Julio Andrés Pedraza, por su tiempo, orientaciones y enseñanzas que fueron esenciales en este trabajo. Y a Jeferson Ruiz, por el acompañamiento brindado en el desarrollo del trabajo.

Al grupo de investigación GIMBA, por facilitar las herramientas necesarias para el desarrollo de este proyecto.

A Nafer, por todas las experiencias y vivencias compartidas a lo largo de esta etapa universitaria, entre ellas, la realización de este trabajo.

A Omar Andrés Benavides, por su colaboración, asesoría y consejos para que el proyecto llegase a término de la mejor manera.

A todos y cada uno de mis compañeros y amigos, quienes a lo largo de la carrera compartieron conmigo momentos de estudio y diversión.

A la Universidad Industrial de Santander, por brindarnos el ambiente académico y los espacios que hicieron posible este recorrido.

Alejandro Buevas Noguera

Agradecimientos

Quiero expresar mi profunda gratitud a todas las personas e instituciones que me acompañaron en este proyecto y a lo largo de mi formación en Ingeniería Química.

A mi mamá, quien, con sus oraciones, su apoyo incondicional y su amor me dio la fortaleza para superar cada desafío. A mi hermano, por su sabiduría y sus consejos, siempre oportunos, que me guiaron y me dieron ánimo cuando más lo necesitaba.

A mi compañero de tesis y amigo, Alejandro, con quien compartí no solo este proyecto, sino toda nuestra vida universitaria.

A todos y cada uno de mis compañeros y amigos, quienes a lo largo de la carrera compartieron conmigo momentos de estudio y diversión.

A mi director, el profesor Julio Pedraza, por su sabiduría, por brindarme esta oportunidad y por sus valiosos consejos, que fueron una guía esencial en este trabajo. Y a mi codirector, Jeferson Ruiz, por su constante apoyo y sus orientaciones precisas.

Al grupo de investigación GIMBA, por abrirnos sus puertas y permitirnos desarrollarnos profesionalmente en sus instalaciones.

Al profesor Omar Benavides, por sus buenos consejos y la generosidad con la que compartió su experiencia durante el proyecto.

A la Universidad Industrial de Santander, por brindarnos el ambiente académico y los espacios que hicieron posible este recorrido.

Nafer Stevens Prada Jaimes

Contenido

1	Justificación y problema	14
2.	Estado del arte	15
3.	Marco teórico	17
3.1.	Reactor fotoelectroquímico tubular (T-PECR)	17
3.2.	Modelado de la hidrodinámica en el reactor	17
3.2.1.	Modelos de turbulencia	18
3.2.2.	Modelo de k-épsilon-estándar	19
3.3.	Fundamentación química	19
3.4.	Cinética química	20
3.4.1.	Método de las ecuaciones integradas	20
3.4.2.	Método diferencial	21
3.5.	Factores adimensionales para diseño de cabezales	21
3.6.	Conceptos de modelado y simulación	22
3.6.1.	Método de elementos finitos	22
4.	Objetivos	24
4.1.	Objetivo general	24
4.2.	Objetivos específicos	24
5.	Metodología	25
5.1.	Etapa 1: Construcción de los prototipos	25

5.2.	Etapa 2: Comparación y selección de los prototipos	26
5.3.	Etapa 3: Evaluación de la capacidad de reducción de mercurio y conclusiones	27
6.	Resultados	28
6.1.	Construcción y preevaluación de los prototipos	28
6.1.1.	Identificación del modelo de turbulencia	28
6.1.2.	Diseño de las geometrías del reactor.....	29
6.1.3.	Primera ronda de simulación y preselección	34
6.2.	Simulación y evaluación de la hidrodinámica del reactor	36
6.2.1.	Segunda ronda de simulación y determinación del campo de velocidad	36
6.2.2.	Estimación de los parámetros requeridos para la selección del prototipo..	42
6.3.	Evaluación de la capacidad de reducción de mercurio y propuesta del reactor.....	44
6.3.1	Determinación de la ecuación cinética de la reacción	44
6.3.2	Ronda final de simulación y determinación de la reducción de mercurio ..	46
6.3.3	Propuesta del reactor UIS – GIMBA 3.0.....	48
7	Conclusiones	49
8.	Recomendaciones	50
	Referencias bibliográficas.....	51
	Apéndices	55

Lista de figuras

	Pág.
Figura 1. <i>Reactor UIS – GIMBA 2.1</i>	15
Figura 2. <i>Flujo en reactor tubular con alimentación lateral</i>	16
Figura 3. <i>Método de elementos finitos</i>	23
Figura 4. <i>Esquema de la metodología</i>	25
Figura 5. <i>Cabezales de entrada y salida del reactor: cabezal de entrada (A), cabezal de salida (B)</i>	30
Figura 6. <i>Cuerpo del reactor: empalme a 0° (A), 90° (B), 45°(C)</i>	32
Figura 7. <i>Electrodos: cátodo (A), ánodo (B)</i>	33
Figura 8. <i>Prototipo 90°(e) – 45°(s)</i>	33
Figura 9. <i>Simulación de prototipo 0°(e) – 0° (s)</i>	35
Figura 10. <i>Dominio del fluido, prototipo 90°(e) – 90°(s)</i>	37
Figura 11. <i>Mallado del prototipo 90°(e) – 90°(s)</i>	38
Figura 12. <i>Campo de velocidad prototipo 45°(e) – 45°(s)</i>	39
Figura 13. <i>Campo de velocidad prototipo 45°(e) – 90°(s)</i>	40
Figura 14. <i>Campo de velocidad prototipo 90°(e) – 45°(s)</i>	40
Figura 15. <i>Campo de velocidad prototipo 90°(e) – 90°(s)</i>	41
Figura 16. <i>Perfil de velocidad en la zona central del reactor: 90°(e) – 45°(s) (A), 90°(e) – 90°(s) (B)</i>	43
Figura 17. <i>Campo de concentración prototipo 90°(e) – 90°(s)</i>	46
Figura 18. <i>Campo de concentración prototipo 90°(e) – 45°(s)</i>	47
Figura 19. <i>Reactor UIS – GIMBA 3.0 geometría completa: externa (A) e interna (B)</i>	48

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 1. <i>Comparación entre los modelos $k - \varepsilon - e$ y $k - \omega$</i>	28
Tabla 2. <i>Factor de ajuste de efectos de entrada/salida</i>	30
Tabla 3. <i>Efectos de entrada/salida cabezal de entrada</i>	31
Tabla 4. <i>Efectos de entrada/salida cabezal de salida</i>	31
Tabla 5. <i>Condiciones límite</i>	34
Tabla 6. <i>Preselección de los prototipos con mejor rendimiento</i>	36
Tabla 7. <i>Características e histograma del mallado, prototipo 90(e) – 90(s)</i>	38
Tabla 8. <i>Evaluación de los prototipos teniendo en cuenta los parámetros turbulentos e hidrodinámicos</i>	42
Tabla 9. <i>Comportamiento de la concentración en la reacción de reducción de mercurio</i>	44
Tabla 10. <i>Método diferencial para determinar la ecuación cinética</i>	45
Tabla 11. <i>Método de las ecuaciones integradas para determinar el orden de reacción aparente</i>	45
Tabla 12. <i>Parámetros hidrodinámicos, turbulentos y reducción de Hg^{2+} alimentación frontal vs lateral</i>	47

Lista de Apéndices

	Pág.
APÉNDICE A. Modelo de k-épsilon estándar detallado.....	55
APÉNDICE B. Planos detallados de las piezas del reactor.....	55
APÉNDICE C. Dominio del fluido de los prototipos.	59
APÉNDICE D. Mallado de los prototipos.....	60
Apéndice E. Resultados detallados de los métodos para la determinación de la cinética.	61
APÉNDICE F. Resultados completos reactor alimentación frontal.....	64
APÉNDICE G. Equipo de cómputo empleado y tiempos de simulación.....	65
APÉNDICE H. Perfiles de velocidad en dos dimensiones.....	66

Lista de símbolos

- $\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$: densidad.
- $\vec{v} \left[\frac{m}{s} \right]$: vector de velocidad.
- $P [Pa]$: presión.
- $g \left[\frac{m}{s^2} \right]$: gravedad.
- $\mu [Pa * s]$: viscosidad dinámica.
- $k \left[\frac{m^2}{s^2} \right]$: energía cinética de turbulencia.
- $\varepsilon \left[\frac{m^3}{s^2} \right]$: disipación de energía cinética de turbulencia.
- P_k : generación de energía cinética turbulenta debido a la velocidad.
- G_k : generación de energía cinética turbulenta debido a la flotación.
- Y_M : aporte de la fluctuación de la dilatación sobre la turbulencia compresible debido a la disipación.
- σ_k & σ_ε : números de Prandtl turbulentos.
- μ_t : viscosidad turbulenta.
- $C_{1-3\varepsilon}$: constantes de la disipación de energía cinética turbulenta.
- Ψ : factor de diseño de cabezales.
- ζ : relación de área de distribuidores con área total de reactor.
- $A_R [m^2]$: área transversal del reactor.
- $A_D [m^2]$: área de los distribuidores.
- n_D : número de distribuidores.
- $d_e [m]$: diámetro hidráulico entrada.
- $L [m]$: longitud del compartimiento previo a la alimentación.
- γ : relación de aspecto.

Resumen

Título: efecto del cambio de alimentación frontal a lateral sobre la reducción de Hg(II) en un reactor fotoelectroquímico tubular mediante CFD.

Autores: Alejandro Buelvas Noguera^{**}, Nafer Stevens Prada Jaimes^{**}

Palabras claves: alimentación lateral, hidrodinámica, reactor tubular, fotoelectroquímica, COMSOL, CFD.

Descripción:

En los últimos años, el número de fuentes hídricas que han venido presentando problemas de contaminación de sus aguas con metales pesados, ha aumentado considerablemente. Como alternativa de solución al problema mencionado, en este trabajo se hizo uso de la simulación de fluidos computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) con el fin de evaluar el impacto sobre la hidrodinámica y turbulencia del cambio de alimentación frontal a lateral del reactor fotoelectroquímico tubular UIS – GIMBA 2.2, y con ello determinar su influencia sobre la capacidad de reducción de mercurio.

Para el desarrollo del trabajo se usaron los softwares SolidWorks® y COMSOL Multiphysics®, donde se llevaron a cabo las fases de diseño y simulación CFD, respectivamente. La metodología usada para cumplir con los objetivos constó de tres pasos principales: el diseño del prototipo del equipo; la evaluación de la turbulencia, capacidad de reducción de mercurio e hidrodinámica del reactor; y finalmente la comparación de los resultados con el reactor con alimentación frontal.

Entre los resultados principales, se encontró una mejoría considerable en la turbulencia con la implementación del cambio en la alimentación; por otro lado, el tiempo de residencia del reactor con alimentación frontal fue ligeramente superior al obtenido luego de las modificaciones. Sin embargo, debido a que la reacción es controlada por la difusividad, una mayor turbulencia prima sobre la pequeña pérdida de tiempo de residencia.

Finalmente, se concluyó que los cambios implementados en el reactor UIS - GIMBA 2.2 favorecen a la reducción de mercurio, logrando una mejoría relativa del 25.51 % de reactivo convertido en un solo paso.

* Trabajo de grado para optar por el título de ingeniero químico.

* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

Abstract

Title: effect of changing feed from front to lateral on the reduction of Hg(II) in a tubular photoelectrochemical reactor using CFD.

Authors: Alejandro Buelvas Noguera**, Nafer Stevens Prada Jaimes**

Keywords: lateral feed, hydrodynamics, tubular reactor, photoelectrochemistry, COMSOL, CFD.

Description:

In recent years, the number of water sources experiencing contamination issues with heavy metals, including mercury, has significantly increased. As a solution to this problem, this study utilized computational fluid dynamics (CFD) to evaluate the impact of changing the feed from front to lateral in the UIS – GIMBA 2.2 tubular photoelectrochemical reactor, aiming to determine its influence on mercury reduction capacity.

For the development of this work, SolidWorks® and COMSOL Multiphysics® software were employed for the design and CFD simulation phases, respectively. The methodology used to achieve the objectives consisted of three main steps: the design of the equipment prototype; the evaluation of turbulence, mercury reduction capacity, and hydrodynamics of the reactor; and finally, the comparison of the results with the front-feed reactor.

Among the main results, a significant improvement in turbulence was observed with the implementation of the feed change; Conversely, the residence time of the front-feed reactor was slightly higher than that obtained after the modifications. However, since the reaction is diffusion-controlled, greater turbulence outweighs the little loss in residence time.

Finally, it was concluded that the changes implemented in the UIS - GIMBA 2.2 reactor favor mercury reduction, achieving a relative improvement of 25.51 % of reagent converted in a single step.

*Bachelor Thesis.

* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

1. Justificación y problema

En los últimos años, la minería mundial ha tenido un crecimiento acelerado y a plenitud. La incursión de empresas internacionales ha dinamizado el sector minero en países en vía de desarrollo, como es el caso de Colombia, mayormente influenciado por las inversiones de las multinacionales y el incremento de los precios de los productos de la industria minera (Cárdenas & Reina, 2018). En consecuencia al auge de la minería de oro en Colombia, se usaron y liberaron a efluentes naturales grandes cantidades de metales pesados como mercurio, cadmio, arsénico, plomo, entre otros, los cuales se caracterizan por ser nocivos para los seres vivos y el medio ambiente (Rubiano et al, 2020).

Partiendo de lo anterior, se tiene el caso puntual del río Suratá, uno de los principales raudales hídricos de Santander, el cual sufrió una fuerte contaminación por mercurio debido a la falta de regulaciones adecuadas en la industria minera hace algunas décadas. Actualmente, la concentración de mercurio en determinados tramos del río es superior a la concentración límite estipulada por los entes reguladores (1 [µg/L]), una cantidad de mercurio mayor al máximo legal en el río puede generar afectaciones graves a la salud de las comunidades que colindan con él (Rodríguez, 2018).

Por situaciones como la mencionada, el grupo de investigación en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente (GIMBA) ha desarrollado la serie de reactores fotoelectroquímicos UIS-GIMBA 2.X para estudiar la reducción de contaminantes en aguas y producción de hidrogeno. Por otra parte, estudios recientes acerca de la aplicación fotoelectrocatalisis para el tratamiento de aguas contaminadas con mercurio logra reducciones importantes de la concentración del metal en el agua (Panqueva & Albarracín, 2013).

Partiendo de los estudios del GIMBA en reactores tubulares fotoelectroquímicos y las investigaciones realizadas sobre el uso de fotoelectrocatalisis para reducción de mercurio, se propone modificar la alimentación frontal a lateral del reactor, esto con el fin de conseguir un efecto de giro del fluido en el equipo que mejore el tiempo de residencia y la turbulencia en el reactor, para finalmente evaluar: ¿cuál es el efecto del cambio de alimentación en la hidrodinámica y el campo de velocidad del reactor para reducción de mercurio?

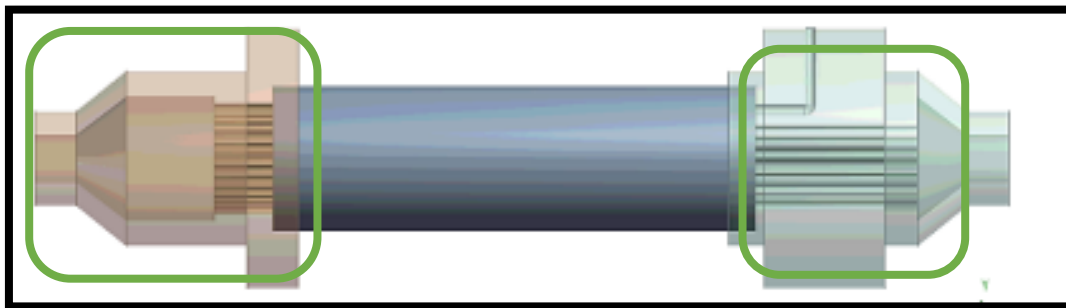
2. Estado del arte

Desde hace algunos años, el GIMBA se ha interesado en el tratamiento de aguas de producción provenientes de la industria del petróleo. En consecuencia con esto se desarrolló el reactor fotoelectroquímico tubular UIS-GIMBA 2.0, conformado por cabezales de entrada y salida, dos electrodos en forma de mallas concéntricas y el cilindro de vidrio que contiene a los electrodos y une los cabezales (Espinosa & Monsalve, 2015).

Posteriormente, se detectaron problemas en la hidrodinámica del prototipo anterior lo que conllevó al desarrollo del reactor UIS-GIMBA 2.1. para ello, se diseñaron nuevos cabezales de entrada y salida usando el módulo CAD de COMSOL Multiphysics®, que mejoraron los perfiles de flujo dentro del reactor. Las modificaciones realizadas al reactor dieron como resultado un flujo más homogéneo, además de una reducción significativa en las zonas muertas y de estancamiento (Ruíz & Sanabria, 2016).

Figura 1.

Reactor UIS-GIMBA 2.1



Nota. En la Figura 1 se muestra la geometría del reactor UIS – GIMBA 2.1, donde se observan resaltadas la entrada y salida frontales del equipo. Fuente: (Ruíz & Sanabria, 2016).

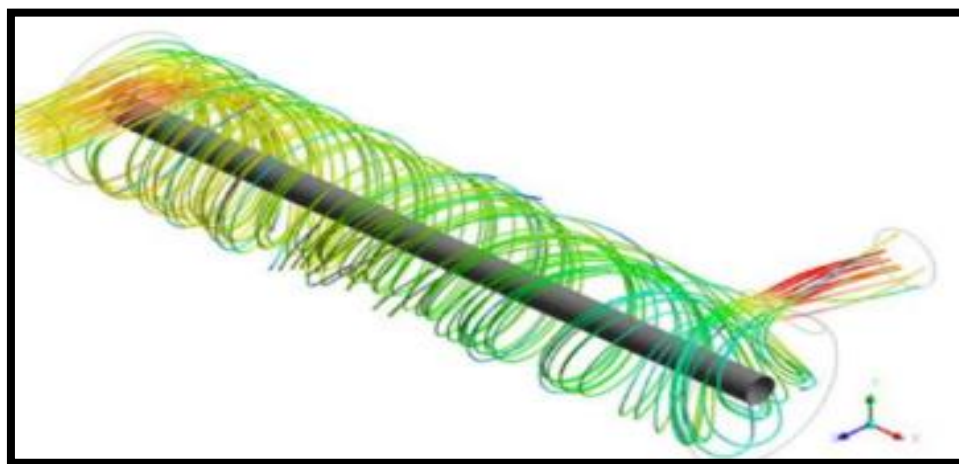
Siguiendo la línea anterior, se implementaron modificaciones finales en el diseño del UIS-GIMBA 2.1, como el alargamiento del cuerpo del reactor y el incremento en el número de distribuidores en el cabezal de entrada. Estas modificaciones fueron realizadas para el desarrollo del último prototipo creado por el grupo de investigación, el reactor UIS-GIMBA 2.2. En esta versión mejorada, se logró una mayor simetría en el flujo y se incrementó la intensidad de la turbulencia (García & Gómez, 2018).

Recientemente, se ha planteado el uso de reactores fotoelectroquímicos para la reducción de mercurio en aguas contaminadas. Según Panqueva & Albarracín, se obtuvieron reducciones superiores al 95 % en la cantidad de mercurio mediante el uso de un reactor fotoelectroquímico de cilindro rotatorio. El cátodo usado fue acero inoxidable AISI 304 y el fotoánodo está hecho del mismo material recubierto con dióxido de titanio dopado con nitrógeno ($\text{TiO}_2\text{-N}$) (Panqueva & Albarracín, 2013).

Otra línea de investigación que ha tomado fuerza en los últimos años es la implementación de la alimentación lateral, también llamada tangencial, en reactores tubulares electroquímicos y fotoelectroquímicos para optimizar su eficiencia e hidrodinámica. La alimentación lateral promueve un mayor tiempo de contacto entre el fluido, los electrodos y la radiación; adicionalmente, genera mayores intensidades de turbulencia e induce una mayor homogeneidad en los perfiles de flujo a través del reactor (Vilar & Espíndola, 2020).

Figura 2.

Flujo en reactor tubular con alimentación lateral



Nota. En la Figura 2 se muestra el efecto de giro que se consigue con la implementación de la alimentación lateral. Fuente: (Vilar & Espíndola, 2020).

La alimentación tangencial también se ha implementado para mejorar el rendimiento de reactores en procesos de remoción de metales pesados de fuentes hídricas contaminadas. Según el estudio realizado por Martínez et al en 2009, determinó que para la remoción del Cr (VI) hay una diferencia considerable en la concentración final de cromo si la alimentación es central o

tangencial, siendo esta última la mejor opción para el proceso. Adicionalmente, se determinó que, para obtener una reducción fija de Cr (VI), se requiere de un tiempo de residencia ligeramente menor en el caso de la alimentación tangencial respecto a las otras formas de entrada estudiadas (Martínez et al, 2010)

Considerando la similitud de los procesos de remoción de mercurio y cromo, se propone el uso de un reactor tubular fotoelectroquímico (UIS-GIMBA 3.0) que incorpore cabezales diseñados específicamente para alimentación y salida laterales. Con este cambio se espera observar mejoras en el tiempo de residencia y la turbulencia en el equipo, logradas por el efecto de giro que induce este tipo de entrada. El reactor estará compuesto por electrodos dispuestos en forma de mallas concéntricas, y utilizará $\text{TiO}_2\text{-N}$ o un catalizador de naturaleza similar impregnado en el fotoánodo para llevar a cabo la reducción de Hg(II).

3. Marco teórico

3.1. Reactor fotoelectroquímico tubular (T-PECR)

Los T-PECR parten del diseño ideal de un PFR, por sus siglas en inglés *Plug Flow Reactor*; la geometría de este tipo de reactores es cilíndrica e idealmente trabaja con flujos completamente desarrollados turbulentos. Las principales ventajas de los PFR son su capacidad de operar a altas condiciones de presión y temperatura, además de reducir los tiempos de residencia respecto a otro tipo de reactores (Katebah et al, 2022).

Un reactor fotoelectroquímico se basa en un diseño inicial de reactor de flujo pistón e incorpora elementos adicionales en su interior. Estos elementos incluyen electrodos dispuestos en formas diversas, como láminas, mallas o barras, entre otros. Además, el reactor fotoelectroquímico cuenta con conexiones a fuentes de energía eléctrica y, generalmente, se integran colectores solares como parte del sistema. (Jaramillo, 2019).

Actualmente, los reactores fotoelectroquímicos son usados principalmente para el tratamiento de aguas de producción, purificación de aire, producción de hidrogeno, reducción u oxidación de metales pesados y tratamiento de residuos peligrosos (Aydin et al, 2022).

3.2. Modelado de la hidrodinámica en el reactor

Antes de definir las ecuaciones que permiten modelar la hidrodinámica en el fluido, se debe tener en cuenta que para el correcto funcionamiento de un reactor de flujo pistón el régimen de

flujo debe ser turbulento. Adicionalmente, deben conocerse las propiedades fisicoquímicas de interés como la densidad y viscosidad del fluido de trabajo; en este caso, aguas contaminadas con mercurio. Considerando las propiedades del fluido en cuestión, es posible clasificarlo dentro del grupo de fluidos newtonianos. Esto implica que su comportamiento viscoso se rige por la ley de viscosidad de Newton (Bird, 2006).

3.2.1. Modelos de turbulencia

Los flujos en régimen turbulento tienen comportamientos característicos diferentes a los flujos en los demás regímenes, lo que dificulta el uso directo de ecuaciones convencionales como es el caso de la ecuación de Navier – Stokes (García & Gómez, 2018). Basado en lo anterior, se consideraron tres familias de modelos de turbulencia para ajustar el movimiento de fluidos en este régimen:

- *Reynolds Average Navier Stokes (RANS)*
- *Large-Eddy Simulation (LES)*
- *Direct Numerical Simulation (DNS)*

Teniendo en cuenta las características de cada uno de los modelos anteriores, se decidió usar la familia *Reynolds Average Navier Stokes* debido a que las ecuaciones resultan más sencillas respecto a los otros grupos de modelos, reduciendo así el requerimiento computacional. Adicionalmente, para sistemas similares al estudiado (geometrías tubulares y fluidos newtonianos), se encontró que los modelos más usados están clasificados dentro de la familia como RANS por su simplicidad y resultados satisfactorios.

Partiendo de la selección de modelos anterior, a partir de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento clásicas de Navier Stokes se llega a las siguientes expresiones respectivamente:

$$(\nabla \cdot \rho \bar{v}_i) = 0 \quad (\text{Ec. 1})$$

$$(\nabla \cdot \rho \bar{v}_i \bar{v}_j) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v}_i + (\nabla \bar{v}_j)^+ \right) + \rho \bar{v}_i \bar{v}_j \right] + \rho g_i \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde $i = x, y, z$ & $j = x, y, z$

En la Ecuación (2) se puede apreciar un nuevo término $(\rho \bar{v}_i \bar{v}_j)$ respecto a la ecuación de Navier-Stokes tradicional; este corresponde al tensor de esfuerzos de Reynolds. El tensor de Reynolds

aumenta el número de incógnitas en el sistema, por lo que en la mayoría de los modelos RANS es usada la energía cinética turbulenta " k " y la disipación de energía cinética turbulenta " ε " como parámetros base para la simulación y aproximación de las incógnitas generadas (Rodríguez, 2009).

En este caso particular, se tuvieron en cuenta tres posibles modelos que cumplen con los requerimientos del proyecto: modelo de k-épsilon-estándar ($k - \varepsilon - e$), k-épsilon-realizable ($k - \varepsilon - r$) y k-omega ($k - \omega$).

3.2.2. Modelo de k-épsilon-estándar

Es un modelo semi empírico cuyas consideraciones principales son flujo turbulento y efectos de viscosidad molecular despreciables; es decir, el modelo ($k - \varepsilon - e$) solo puede usarse mientras el régimen de flujo sea completamente desarrollado turbulento (Bird, 2006). Las expresiones matemáticas para la energía cinética turbulenta (3) y para la disipación de energía cinética turbulenta (4), se muestran a continuación:

$$\nabla \rho \bar{v} k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon - Y_M \quad (\text{Ec. 3})$$

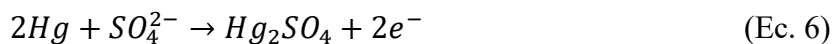
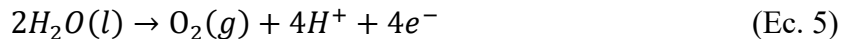
$$\nabla \rho \bar{v} \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} [P_K + C_{3\varepsilon} G_K] - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (\text{Ec. 4})$$

Para observar a detalle las ecuaciones del modelo k-épsilon-estándar ver Apéndice A.

3.3. Fundamentación química

En los reactores T-PECR se dan dos sistemas reaccionantes simultáneos: en el primer caso se dan reacciones oxidación las cuales ocurren en el ánodo, mientras que el otro sistema está conformado por reacciones de reducción que tienen lugar en el cátodo. A grandes rasgos, este sistema funciona liberando electrones en las reacciones de oxidación, los cuales son aprovechados en las reacciones de reducción. Las reacciones de oxidorreducción que se dan en este tipo de reactores son catalizadas tanto por energía eléctrica como por el aprovechamiento de la energía solar.

En cuanto a la reducción de mercurio en específico, uno de los sistemas reaccionantes más comunes que cumplen con esta función, el cual se usó en este trabajo, es el siguiente (Yan Du, 2022):

Oxidación – ánodo:**Reducción – cátodo:****3.4. Cinética química**

Como su nombre lo indica (la palabra cinética está íntimamente relacionado con el concepto de velocidad), es la rama de la química encargada de estudiar la velocidad a la que ocurre una reacción química, o dicho de otra manera, el cambio de concentración de un reactivo o producto durante un intervalo de tiempo determinado (Chang, 2002).

Para estudiar de la velocidad de las reacciones, la cinética se vale de distintos métodos que permiten encontrar una ecuación que describe velocidad en la que cambia la concentración de los reactivos y productos de las reacciones químicas. En este caso, se hizo necesario el uso del método de las ecuaciones integradas y el método diferencial para la determinación de la cinética de la reacción en cuestión.

3.4.1. Método de las ecuaciones integradas

Este método consiste en definir las ecuaciones cinéticas que describen el comportamiento de cada uno de los órdenes de reacción. Partiendo de esto, según los datos del comportamiento de la concentración a través del tiempo, se realiza el ajuste lineal de cada una de las ecuaciones integradas, aquel resultado con el valor de R^2 más cercano a 1 determina el orden aparente de la reacción estudiada. Las ecuaciones integradas para los órdenes de reacción típicos son las siguientes:

- Orden cero: $[A] = [A]_0 - kt$ (Ec. 5)

- Orden uno: $\ln [A] = \ln [A]_0 - kt$ (Ec. 6)

- Orden dos: $1/[A] = 1/[A]_0 - kt$ (Ec. 7)

- Orden tres: $1/[A]^2 = 1/[A]_0^2 - kt$ (Ec. 8)

Donde: $[A]$, es la concentración de reactivo; k , la constante de velocidad de reacción; y t , el tiempo (Chang, 2002).

3.4.2. Método diferencial

Consiste en ajustar, usando regresiones numéricas, una serie de datos experimentales de concentración contra tiempo a una ecuación cinética de reacción. La linealización de la ecuación se realizó como se muestra a continuación:

$$-r_A = kC_A^n \quad (\text{Ec. 9})$$

$$\ln (-r_A) = \ln k + n \ln C_A \quad (\text{Ec. 10})$$

Donde: C_A , es la concentración del reactivo; n , el orden de reacción; k , la constante de velocidad de reacción; y r_A , la velocidad de reacción.

Por lo tanto, disponiendo de la curva de concentración vs tiempo, es posible estimar el valor $-r_A$ calculando las pendientes entre un dato y otro. Posteriormente, se realiza la linealización de la Ecuación 10 con el objetivo de determinar el valor de la constante de velocidad de reacción k y el orden de reacción aparente n (Chang, 2002).

3.5. Factores adimensionales para diseño de cabezales

En el trabajo de Frías – Ferrer, 2004, se realizó la propuesta de dos parámetros adimensionales (Ψ y ζ) para determinar la influencia de los efectos de entrada/salida en reactores tubulares. Donde, entre menor sea el valor de Ψ y mayor el de ζ , los efectos de entrada/salida serán menos notorios en el desempeño del reactor. Los factores Ψ y ζ están dados por las ecuaciones 11 y 12 respectivamente:

$$\Psi = \frac{d_e * A_r * \gamma^2}{L * n_D * A_D} \quad (\text{Ec. 11})$$

$$\zeta = \frac{\text{Área total de los distribuidores}}{\text{Área de la sección transversal del reactor}} \quad (\text{Ec. 12})$$

Donde: d_e , es el diámetro hidráulico; A_r , el área transversal del reactor; γ^2 , la relación de aspecto (para formas tubulares es igual a 1); L , la longitud del compartimiento previo a la entrada; n_D , el número de distribuidores; y A_D , el área de los distribuidores.

3.6. Conceptos de modelado y simulación

Primero que todo, es importante mencionar que el modelado del equipo se realizó basado en los fenómenos, es decir, todas las predicciones realizadas por la simulación tienen su fuente en la resolución de un modelo matemático no empírico que describe el fenómeno en cuestión.

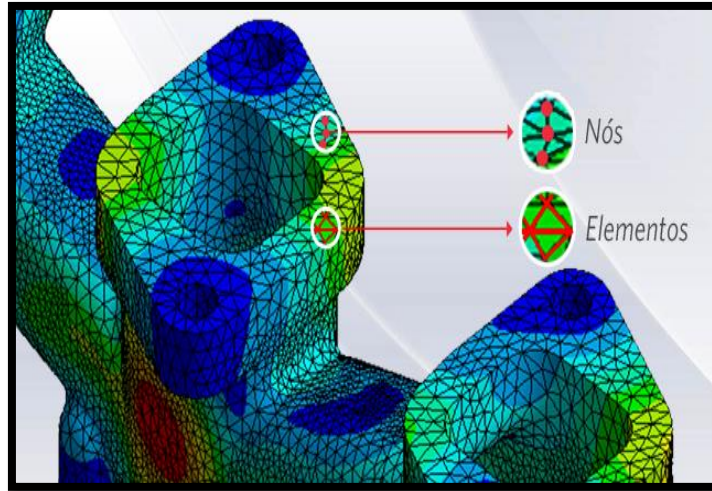
Por otro lado, el proceso de simulación se llevó a cabo en el software COMSOL Multiphysics® donde se usó del módulo de CFD: físicas de flujo turbulento, química y transporte de especies diluidas. Adicionalmente, se decidió realizar el estudio en estado estacionario debido a que el equipo está diseñado para una operación en continuo, por lo tanto permanecerá en estado estable la mayor parte del tiempo. Finalmente, se tiene que COMSOL resuelve las simulaciones y problemas usando el método de elementos finitos (FEM), en consecuencia es necesario conocer las bases del FEM para una mejor comprensión del trabajo.

3.6.1. Método de elementos finitos

Es una técnica numérica cuya función principal es resolver problemas que pueden ser descritos por un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales. El método consiste en realizar la discretización (similar a una segmentación) del dominio en un número finito de geometrías más pequeñas (elementos), en este caso tetraedros y hexaedros, las cuales tienen un determinado número de nodos (vértices). Partiendo de ello, los elementos finitos resuelven el conjunto de ecuaciones diferenciales que describen el fenómeno en cada uno de los nodos que se encuentran la discretización del dominio, dando así solución al problema requerido (González et al. 2019). En la Figura 3 se puede observar un ejemplo de discretización del dominio, elementos y nodos para la aplicación del FEM.

Figura 3.

Método de elementos finitos



Nota. En la Figura 3 se observan los elementos cuya geometría es triangular (poseen cada uno 3 nodos) y los nodos donde se resuelven en conjunto de ecuaciones. Tomado de (Rivera, 2022).

El equipo de cómputo empleado, los requerimientos de memoria y los tiempos de simulación se muestran en el Apéndice G.

4. Objetivos

4.1. Objetivo general

Evaluar “mediante simulación CFD” el efecto del cambio de alimentación frontal a lateral sobre la reducción de Hg(II) en un reactor fotoelectroquímico tubular.

4.2. Objetivos específicos

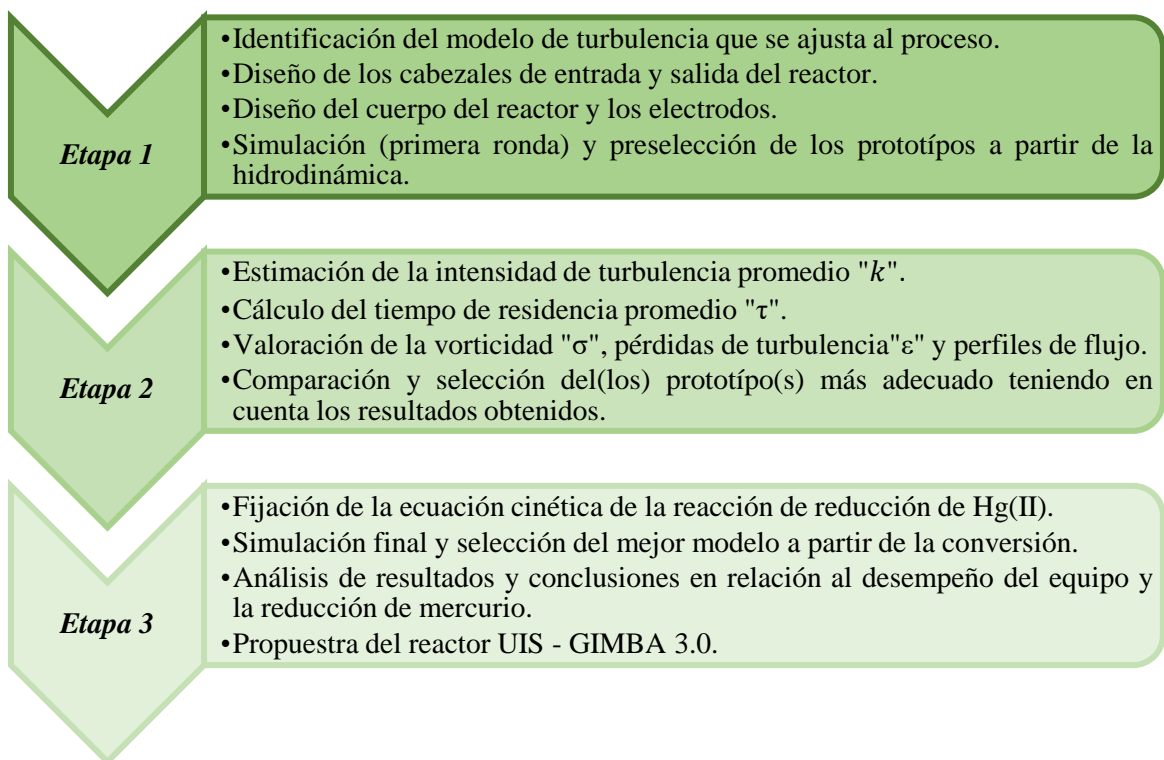
- Diseñar las diferentes geometrías del reactor, variando los ángulos de entrada y salida entre 0° y 90°.
- Seleccionar los mejores prototipos teniendo en cuenta la intensidad de turbulencia, el tiempo de residencia y los perfiles de flujo.
- Estimar el efecto del cambio de alimentación frontal a lateral sobre la reducción de Hg(II).

5. Metodología

Las etapas metodológicas que se siguieron en este proyecto se muestran en la Figura 4.

Figura 4.

Esquema de la metodología



5.1. Etapa 1: Construcción de los prototipos

En esta etapa se desarrollaron tres objetivos: fijación del modelo de turbulencia que describe el proceso, diseño de las diferentes geometrías variando los ángulos de entrada/salida y preselección de los prototipos más adecuados basado en las líneas de flujo observadas en la primera ronda de simulaciones.

Identificación del modelo de turbulencia: para el reconocimiento del modelo de turbulencia, se tuvo en cuenta la identificación de las propiedades básicas del fluido de trabajo, la geometría del equipo, el requerimiento computacional y realizar un análisis de ventajas y desventajas de cada una de las ecuaciones de turbulencia.

Diseño de las geometrías del reactor: en cuanto al diseño de la geometría, se partió por el diseño de los cabezales teniendo en cuenta los parámetros ψ' y ζ propuestos por Frías – Ferrer. Los parámetros mencionados permiten aproximar las afectaciones de los efectos de entrada/salida en función del número y área de los distribuidores respecto al área total de la pieza. Con base en ello, se seleccionó el diseño de cabezales propuesto con mayor similitud en los parámetros obtenidos del reactor de referencia (UIS-GIMBA 2.2) con alimentación frontal (teniendo en cuenta el factor de corrección dado por el área total de entrada), que a su vez tengan los menores efectos de entrada/salida.

Luego, se realizó el diseño de los electrodos para los cuales se trabajó con geometrías en forma de mallas con patrones en forma de círculos y rombos para el fotoánodo y el fotocátodo, respectivamente. Finalmente, se propuso la geometría del cuerpo del reactor variando en esta los ángulos donde se ensamblan los cabezales, de manera que se implemente el cambio en la inclinación de la alimentación y salida de cada uno de los prototipos, manteniendo los mismos diseños de cabezales y electrodos con un giro (0° , 45° y 90°) en las entradas de cada cuerpo del equipo.

Primera ronda de simulación y preselección: al igual que en la actividad anterior, se usó el software SolidWorks® para simular el comportamiento del fluido dentro del equipo. A partir de lo anterior, se observaron y analizaron las líneas de flujo con el fin de descartar los diseños que muestren problemas en el movimiento del fluido (zonas muertas, no se consigue el efecto de giro deseado o vórtices). Finalmente, se seleccionaron los prototipos que mostraron un desempeño, como mínimo, aceptable (buen efecto de giro y sin zonas muertas muy pronunciadas), y se exportaron para ser estudiados más a detalle en el módulo CFD de COMSOL Multiphysics® 5.6.

5.2. Etapa 2: Comparación y selección de los prototipos

Durante esta fase se trabajaron dos metas principales: estimación de la intensidad de turbulencia, tiempo de residencia, pérdidas de energía cinética turbulenta, índice de vorticidad y perfiles de flujo para cada uno de los prototipos y, finalmente, se realizó una comparación de las diferentes geometrías del reactor estudiadas, basado en los parámetros anteriormente calculados, para determinar cuál(es) es(son) la(s) que muestra(n) un mejor desempeño.

Estimación de los parámetros: para el desarrollo de esta actividad, primero se realizó la simulación de cada uno de los prototipos usando el módulo de CFD de COMSOL Multiphysics®.

Una vez culminada la ronda de simulación, se realizaron los estudios necesarios para obtener el valor promedio de cada uno de los parámetros de interés (τ , σ , ϵ , k) en el equipo y, finalmente, se construyeron los perfiles de flujo de cada geometría simulada.

Comparación y selección del prototipo: en esta actividad se hizo la comparación de los parámetros calculados asignando un valor numérico entre 1 y 4, donde 1 es muy malo y 4 muy bueno, a cada uno de ellos. A partir de lo anterior, se determinó cual(es) es(son) el(los) prototipo(s) con mejor desempeño para, en la siguiente fase, realizar el estudio completo evaluando la reacción de reducción de mercurio. Finalmente, se contrastaron los resultados obtenidos con la comparativa con los perfiles de flujo de cada uno de los prototipos con el fin de dar soporte a los resultados obtenidos.

5.3. Etapa 3: Evaluación de la capacidad de reducción de mercurio y conclusiones

En esta etapa final se desarrollaron tres metas principales: aproximación y fijación de la ecuación cinética de la reacción de reducción de mercurio, simulación final teniendo en cuenta el sistema reaccionante y conclusiones con relación a la capacidad de reducción de mercurio del reactor.

Ecuación cinética de reacción: primero, se realizó una revisión bibliográfica con el objetivo de recopilar datos del comportamiento de la concentración durante la reducción de mercurio, a partir de los cuales obtener la ecuación de la velocidad de reacción del proceso. Para ello, se usaron los métodos de la pendiente y ecuaciones integradas con el fin de obtener el orden aparente y la constante de velocidad de reacción.

Simulación final teniendo en cuenta el sistema reaccionante: partiendo de los prototipos con resultados más favorables de la etapa 2, se adicionó la ecuación cinética de la reacción a la simulación para determinar la geometría con una mayor conversión en un paso. Finalmente, se realizó la simulación del reactor con alimentación frontal, teniendo en cuenta la expresión matemática de la velocidad de reacción especificada anteriormente, y se realiza la comparación entre este y el reactor más adecuado con alimentación lateral, en función de la capacidad de reducción de mercurio.

Conclusiones y propuesta del reactor UIS-GIMBA 3.0: finalmente, se realizaron los análisis y conclusiones pertinentes en función de la factibilidad de la implementación de la alimentación

lateral respecto a la frontal con relación a la reducción de mercurio. Para concluir, se dieron las recomendaciones pertinentes y la propuesta del reactor terminado UIS-GIMBA 3.0.

6. Resultados

6.1. Construcción y preevaluación de los prototipos

6.1.1. Identificación del modelo de turbulencia

Primero, se determinaron las propiedades fisicoquímicas el fluido de trabajo: agua con mercurio diluido a una concentración alrededor de los $9 * 10^{-6}$ [mM]. Teniendo en cuenta lo anterior, se estipuló que las propiedades fisicoquímicas de interés (densidad y viscosidad) se pueden aproximar a las del agua pura; por lo tanto, se tomaron valores de 997 [kg/m^3] y 0.001 [$\text{pa}\cdot\text{s}$] para la densidad y la viscosidad dinámica, respectivamente.

Posteriormente, se clasificó el fluido de acuerdo con su comportamiento viscoso. A partir de su afinidad con el agua, se determinó que se encuentra dentro del grupo de los fluidos newtonianos (se comporta conforme a lo que dicta la ley de viscosidad de Newton), lo cual implica que su viscosidad se mantiene constante independientemente del esfuerzo que se le aplique (Méndez et al, 2010). Con base en el tipo de fluido y sus propiedades, se determinó que el proceso puede ser descrito satisfactoriamente por uno de los modelos de turbulencia de la familia de las *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS).

Finalmente, se hizo un análisis comparativo entre los modelos RANS que cumplen con los requerimientos del proyecto:

- *Modelo k-épsilon estándar* ($k - \varepsilon - e$)
- *Modelo k-épsilon realizable* ($k - \varepsilon - r$)
- *Modelo k-omega* ($k - \omega$)

El primer criterio de descarte fue la disponibilidad de la ecuación en el programa en el cual se desarrollaron las simulaciones, donde se encontró que solo estaban las ecuaciones $k - \varepsilon - e$ y $k - \omega$, por lo cual el modelo $k - \varepsilon - r$ se descartó. Para la selección entre las opciones restantes, se realizó la comparación entre los factores de interés (geometría del equipo, requerimiento computacional y ventajas/desventajas); los resultados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1.

Comparación entre los modelos $k - \varepsilon - e$ y $k - \omega$

	$k - \varepsilon - e$	$k - \omega$
	Buen ajuste a las geometrías tubulares	Buen ajuste a las geometrías tubulares
	Resultados satisfactorios a Reynolds altos	Establece una ecuación de transporte para la tasa de disipación.
Ventajas	Modelo más ampliamente validado	Buen desempeño cerca a la pared
	Menor requerimiento computacional	Permite establecer la tasa específica de disipación de turbulencia
	Buen desempeño lejos de la pared	
	Convergencia del mallado buena	
	Funcionamiento pobre en geometrías no circulares y áreas no confinadas	Funcionamiento pobre lejos de la pared
		Mayor requerimiento computacional
Desventajas	Supone la viscosidad del remolino isotrópica (independiente a la dirección examinada)	Convergencia del mallado baja
	Presenta menor precisión cerca a la pared	

Fuente: adaptado de (Bayona et al, 2015) y (Ranade, 2002).

Tomando en cuenta la comparación de la realizada, se decidió seleccionar el modelo de turbulencia $k - \varepsilon - e$, debido a que las ventajas que ofrece lo hacen más adecuado para el desarrollo del trabajo realizado.

6.1.2. Diseño de las geometrías del reactor

Diseño de cabezales: es importante recalcar que para los reactores con el tipo de alimentación lateral se recomienda reducir el área total en la entrada del reactor, esto con el fin de aumentar la velocidad de entrada del fluido y favorecer el efecto de giro. Esta reducción implica un aumento en los efectos de entrada/salida de manera inversamente proporcional al área; por lo tanto, se propuso un factor de ajuste para relacionar la influencia de los efectos entrada/salida (estimados por los parámetros propuestos por Frías – Ferrer) entre el reactor con entrada frontal y lateral, con el fin de mantener un rendimiento de los cabezales similar en ambos equipos, de tal manera que resalte principalmente la influencia del cambio de alimentación. Posteriormente, se realizó la

estimación del factor de ajuste definido como el cociente de las áreas totales de entrada, los resultados se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2.

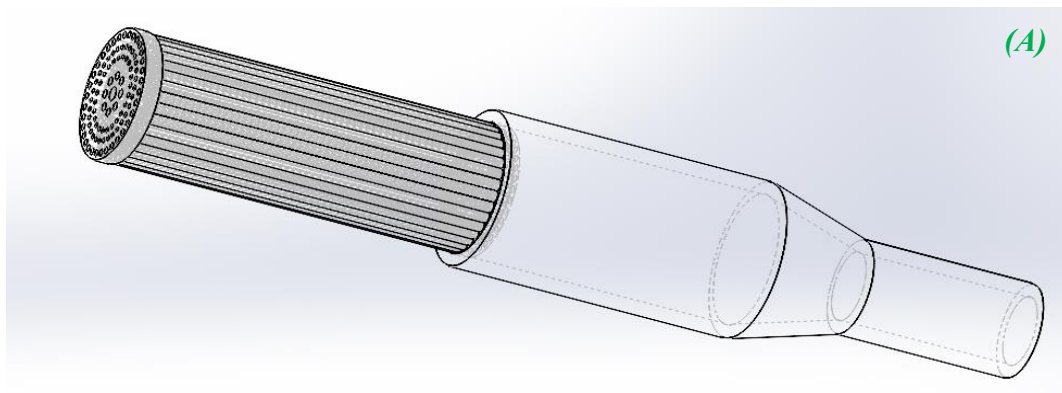
Factor de ajuste de efectos de entrada/salida

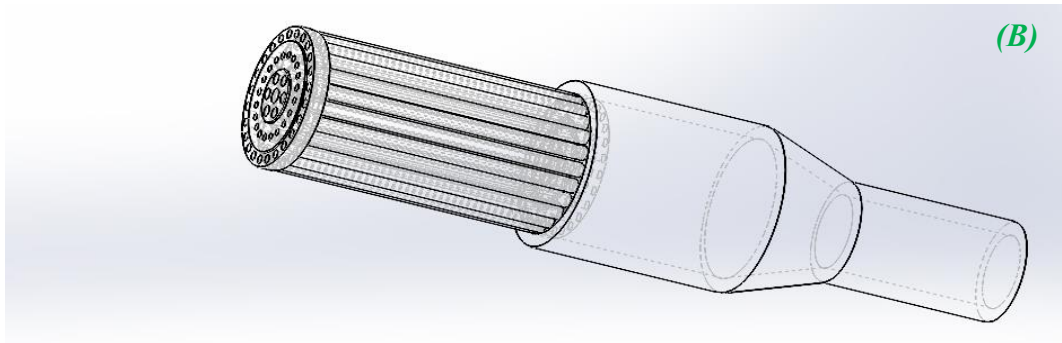
Relación de áreas	
Área _{ent lat} [mm ²]	283.53
Área _{ent frt} [mm ²]	4417.86
Factor	15.58

A partir del factor obtenido, se espera que los efectos de entrada/salida del nuevo reactor sean alrededor de 16 veces mayores; por lo tanto, cualquier valor menor al esperado se considera un resultado positivo. Posteriormente, se realizó el diseño de los cabezales de entrada y salida, los cuales cuentan con 99 y 51 distribuidores de flujo, respectivamente. para observar los planos detallados de los cabezales ver Apéndice B. Las geometrías finales se muestran en la Figura 5.

Figura 5.

Cabezales de entrada y salida del reactor: cabezal de entrada (A), cabezal de salida (B)





Finalmente, se realizó el análisis de los efectos de entrada/salida usando las ecuaciones (5) y (6); los resultados se muestran en las Tablas 3 y 4.

Tabla 3.

Efectos de entrada/salida cabezal de entrada

	Parámetros		Factor
	Cab. Ent. Lateral	Cab. Ent. Frontal	
ζ	0.0128	0.195	15.22
Ψ	0.187	0.017	11.01

Tabla 4.

Efectos de entrada/salida cabezal de salida

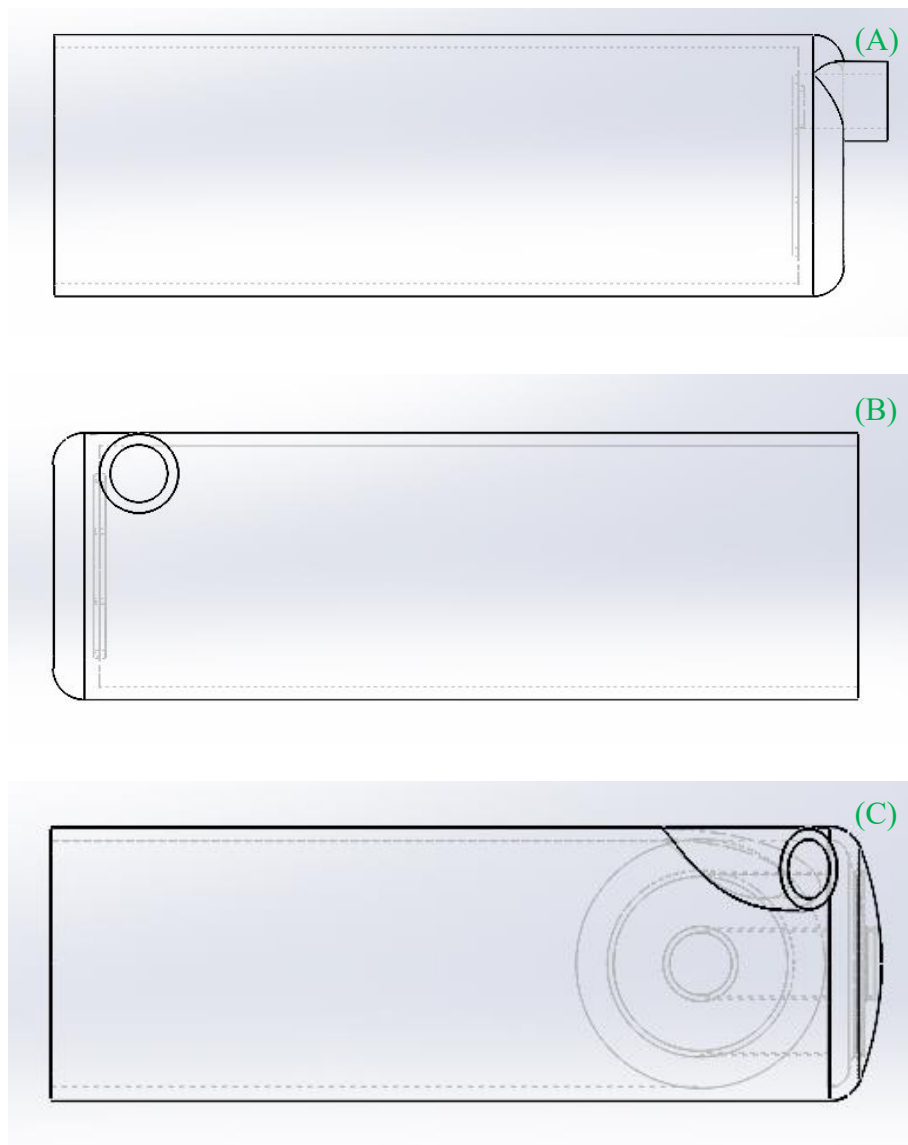
	Parámetros		Factor
	Cab. Ent. Lateral	Cab. Ent. Frontal	
ζ	0.011	0.11	10.36
Ψ	0.585	0.057	10.26

Teniendo en cuenta los parámetros ζ y Ψ obtenidos, se observó que los nuevos cabezales tienen un desempeño ligeramente mejor al esperado (todos presentan un factor de ajuste menor a 16), sin discrepar mucho del rendimiento de los cabezales originales del reactor con alimentación frontal. Por lo tanto, se determinó que el diseño de cabezales propuestos cumple con los requerimientos del trabajo.

Diseño del cuerpo del reactor: en cuanto al cuerpo del reactor, para mayor practicidad de diseño en dos partes que, al combinarlas, forman la geometría completa del reactor de 0.5 [m]; para ver los planos detallados ver Apéndice B. Las partes diseñadas constan de la parte central del reactor y los empalmes con los cabezales que fueron rotados 0° , 45° y 90° ; adicionalmente, para la orientación de 45° se implementó una cuña interna que reduce las zonas muertas y los vórtices formados a la entrada y salida del equipo. La geometría de las partes del cuerpo del reactor se muestra en la Figura 6.

Figura 6.

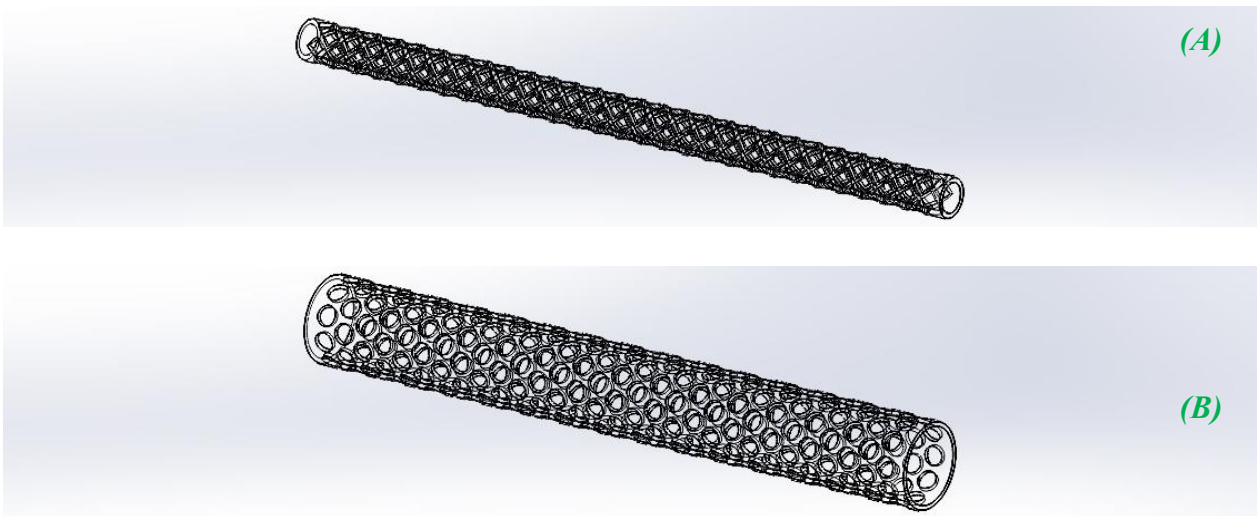
Cuerpo del reactor: empalme a 0° (A), 90° (B), 45° (C)



Diseño de los electrodos: los electrodos seleccionados para el reactor fueron con geometría en forma de mallas; para el cátodo se usó una malla de acero inoxidable AISI 304 de 0.023 [m] de diámetro, cuyo diseño está dado por rombos inscritos en circunferencias de 0.012 [m] de diámetro. En el caso del ánodo, la malla seleccionada fue de acero inoxidable, impregnado con dióxido de titanio dopado con nitrógeno con un diámetro de 0.058 [m], y el mallado muestra un patrón de circunferencias de 0.014 [m] de diámetro. La geometría de los electrodos se muestra en la Figura 7.

Figura 7.

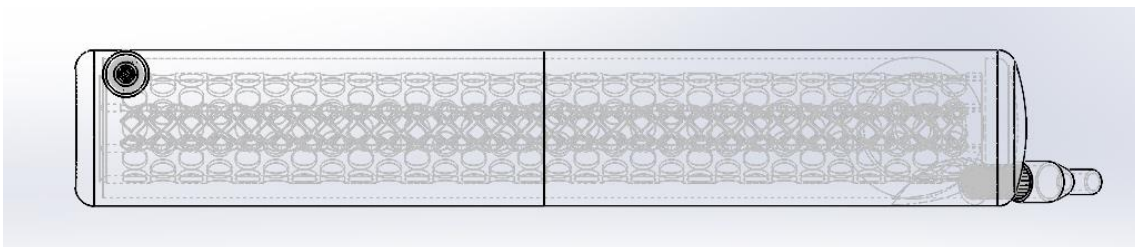
Electrodos: cátodo (A), ánodo (B)



Finalmente, se realizó el ensamblaje de los diferentes prototipos de reactor con alimentación lateral variando los ángulos de alimentación y salida. En la Figura 8 se muestra la geometría completa del reactor para uno de los prototipos.

Figura 8.

Prototipo 90°(e) – 45°(s)



6.1.3. Primera ronda de simulación y preselección

Inicialmente, se definieron las propiedades del fluido, valores iniciales (de entrada a la simulación) y las consideraciones requeridas para la simulación.

En cuanto a las condiciones límites, se definió la velocidad entrada en 3.2 [m/s] debido a que se garantiza el flujo completamente desarrollado turbulento en el equipo (requisito indispensable para este tipo de reactores); adicionalmente, el caudal que se consigue con esta velocidad es muy cercano al usado durante el diseño del reactor con alimentación frontal a comparar. Finalmente, se definió como última condición inicial la presión manométrica en la salida del reactor como $P = 0$ [Pa]. Por otro lado, se definieron 3 consideraciones para el correcto desarrollo de la simulación: **Condición de pared: no deslizamiento, flujo completamente desarrollado turbulento y flujo incompresible**. Los resultados obtenidos se encuentran resumidos en la Tabla 5.

Tabla 5.

Condiciones límite

Condiciones límite	
Densidad [kg/m ³]	998
Viscosidad [Pa*s]	0.001
Velocidad de entrada [m/s]	3.2
Presión de salida [Pa]	0
Condición de pared: no deslizamiento	
Flujo completamente desarrollado turbulento	
Flujo incompresible	

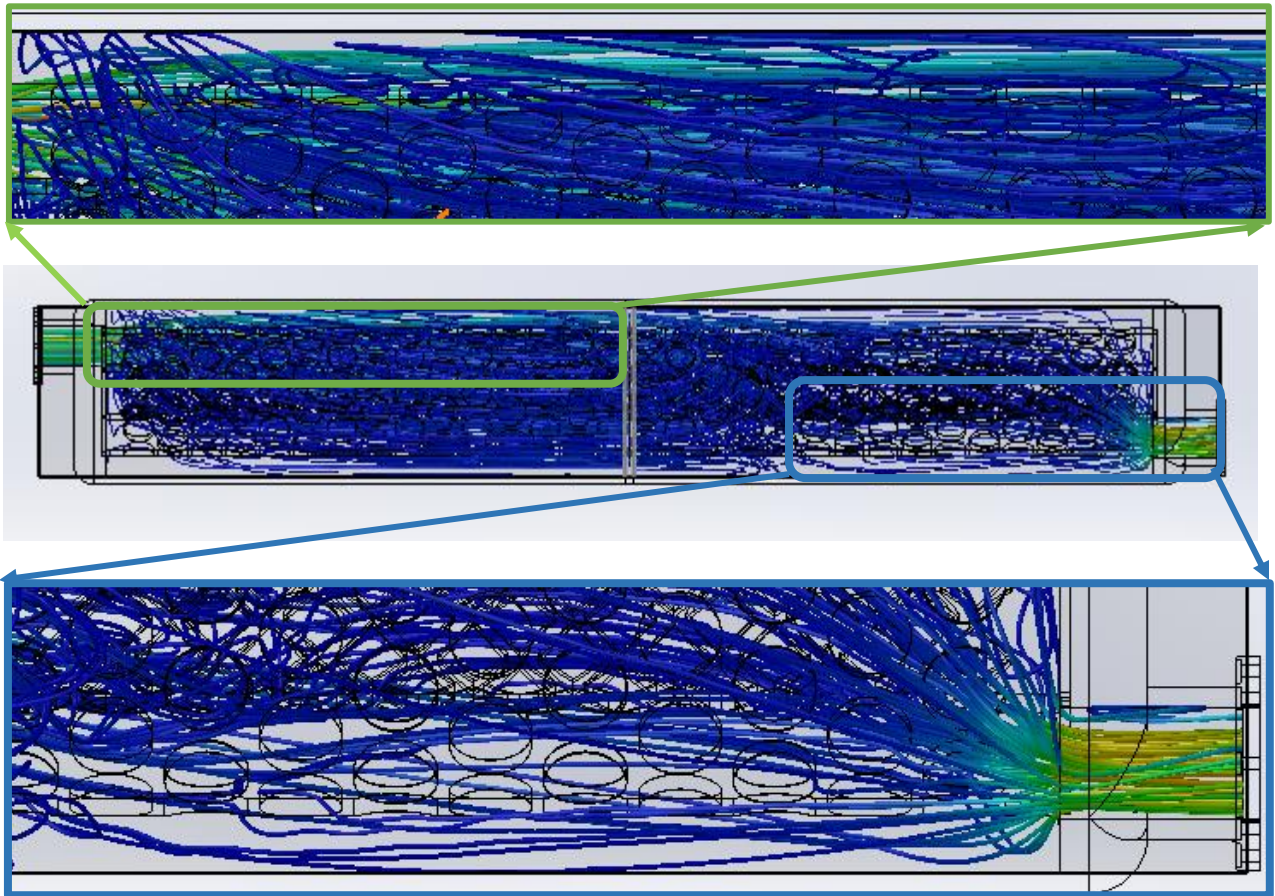
Posteriormente, se usó el paquete *Flow Simulation* de SolidWorks® para realizar la primera ronda de simulaciones. Se decidió de esta forma ya que el tiempo de simulación en este software es mucho menor a COMSOL Multiphysics® (debido a que es un software menos robusto y no ofrece todos los valores cuantitativos como el índice de vorticidad o la disipación de energía cinética de turbulencia); sin embargo, permite observar las líneas de flujo y una buena aproximación a la velocidad del fluido. A partir de esto, se realizó el descarte de los prototipos que no cumplieron con los estándares requeridos (el fluido no avanza describiendo en el reactor y

presenta zonas muertas de gran tamaño), permitiendo enfocar la totalidad de los esfuerzos, simulación y análisis detallado de los diseños con mejores proyecciones.

En la Figura 9 se muestra el resultado de la simulación de uno de los prototipos que no pasó la etapa de preselección.

Figura 9.

Simulación de prototipo $0^\circ(e) - 0^\circ(s)$



Inicialmente, se observó que el efecto esperado de giro no se consiguió satisfactoriamente en el prototipo con entradas y salidas a 0° ; por el contrario, se determinó que el reactor tiene problemas en su hidrodinámica como zonas muertas o con menor densidad de flujo y sectores donde se generan vórtices que fuerzan al fluido a devolverse dentro del equipo, afectando la velocidad, turbulencia y ,con esto, el rendimiento del reactor.

En la Figura 9, se puede apreciar uno de los vórtices formados (señalado con el recuadro verde); en esta parte se puede notar al fluido de semi estancado, describiendo una trayectoria semi ovalada

a una menor velocidad, desplazándose de una forma opuesta a la deseada en pequeñas partes donde se ve que su dirección está orientada a la entrada. Por otro lado, una de las zonas con menor cantidad de líneas de flujo, lo que indica una tendencia al estancamiento y una menor velocidad del fluido, se encuentra señalada por el cuadro azul; donde se muestra que la cantidad de líneas de flujo son considerablemente menores a la mayoría de las partes del reactor. Además se observó que en la parte inferior de la entrada y superior de la salida del reactor, se encuentran dos zonas muertas donde la presencia de las líneas de flujo es casi nula.

De igual manera se analizaron las simulaciones de cada uno de los prototipos a evaluar, donde se encontró que los cabezales a 0° son los causantes de los principales vórtices (si se ubican a la entrada) y zonas con densidad de flujo dispares (si se ubican a la salida). Por otro lado, con los cabezales orientados a 45° y 90° se obtuvieron resultados satisfactorios puesto que mostraron de forma clara el efecto de giro esperado en el equipo, y las zonas muertas se redujeron considerablemente. Sin embargo, se requiere de un estudio más minucioso de estos dos últimos ángulos de orientación, debido a que en algunos casos se observó la presencia de pequeños vórtices en los extremos del reactor.

Teniendo en cuenta el análisis de los resultados de la primera ronda de simulaciones, se realizó el descarte de los prototipos cuyo desempeño no cumplió con los estándares requeridos. En la Tabla 6 se muestran los prototipos descartados y los preseleccionados para ser evaluados de forma detallada.

Tabla 6.

Preselección de los prototipos con mejor rendimiento

Entrada ↓/salida →	0°	45°	90°
0°	✗	✗	✗
45°	✗	✓	✓
90°	✗	✓	✓

6.2. Simulación y evaluación de la hidrodinámica del reactor

6.2.1. Segunda ronda de simulación y determinación del campo de velocidad

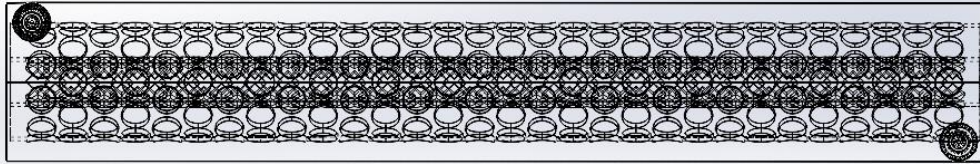
Durante esta etapa, se tomaron los 4 diseños que pasaron el proceso de preselección para ser estudiados más a detalle usando COMSOL Multiphysics®: módulo de flujo turbulento. Cabe

mencionar que las condiciones límite para esta ronda de simulación son las mismas mencionadas en la Tabla 5, con la única diferencia de la adición la concentración inicial de $9 * 10^{-6}$ [mM] de mercurio al fluido de trabajo.

Primero, se realizó la construcción del dominio del fluido en el equipo, con el fin del realizar el posterior mallado y simulación del proceso. En la Figura 10 se muestra el dominio del fluido en uno de los prototipos estudiados. Para observar el dominio de los demás prototipos ver Apéndice C.

Figura 10.

Dominio del fluido, prototipo $90^{\circ}(e)$ - $90^{\circ}(s)$



Para el proceso de discretización del dominio (mallado) se hizo uso de diferentes tipos de elemento, diferenciados principalmente por el número de nodos que componen a la geometría principal, entendiéndose que un mayor número de nodos permite una solución mucho más exacta; esto sucede debido a que el conjunto de ecuaciones diferenciales que describen el fenómeno se resuelve en cada uno de los nodos del elemento. Partiendo de lo anterior, se decidió usar tetraedros (4 nodos) en la mayor parte del volumen del reactor, y hexaedros (8 nodos) en las partes pequeñas o cercanas a la pared, donde se requiere una mayor exactitud para un resultado satisfactorio (Carrillo & Castillo, 2011). En la Figura 11 se muestra el mallado del dominio de fluido en uno de los prototipos estudiados, además, en la Tabla 7 se muestran las características completas del mallado. para observar el mallado de los demás prototipos ver Apéndice D.

Figura 11.

Mallado del prototipo 90°(e) - 90°(s)



Tabla 7.

Características e histograma del mallado, prototipo 90°(e) - 90°(s)

Características de la malla	
Vértices	6108961
Número de elementos	33388484
Calidad mínima	0.277
Calidad promedio	0.8364
Volumen de malla [mm ³]	2380000



Nota. El histograma de elemento indica que tan bien distribuidos están los tetraedros de buena calidad en el mallado; en caso de un resultado no satisfactorio, el histograma mostraría más de un pico alto y delgado indicando partes esenciales donde la malla no cumple los estándares de calidad requeridos.

Se encontró que la calidad promedio de elemento del mallado fue muy alta (0.84, aproximadamente) lo que da firmeza a los resultados de la simulación; un resultado bajo de la calidad de elemento indica que el tamaño de elemento seleccionado no es adecuado para realizar la discretización del dominio, porque significa que la cantidad de puntos donde se resuelve el conjunto de EDP's es muy bajo. Por otro lado, se determinó que los elementos con baja calidad (0.28, aproximadamente) se encuentran en las entradas y salidas de los microtubos más pequeños de los cabezales; por lo tanto, no afectan al modelado de la hidrodinámica dentro del cuerpo del reactor como tal.

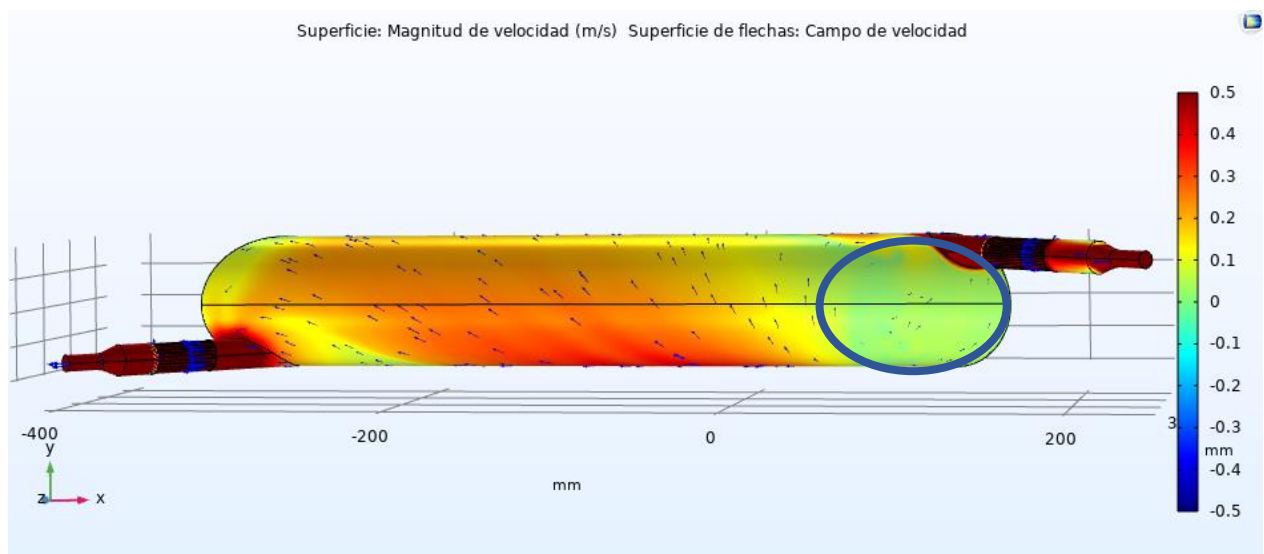
Posteriormente, se realizó la validación del mallado reduciendo el tamaño de la malla paulatinamente para verificar que el resultado de la simulación no se viese afectado por las

dimensiones de la malla. Del proceso anterior se encontró que la malla propuesta con un tamaño entre 0.0075 [mm] a 4.49 [mm] muestra resultados consistentes con una malla 10 veces más pequeña de 0.00075 [mm] a 0.449 [mm]; por lo tanto, se concluyó que la validación de la malla utilizada en la simulación fue satisfactoria.

Luego de haber completado el proceso de mallado, se realizó la segunda ronda de simulación donde se obtuvieron, inicialmente, los campos de velocidad de cada uno de los prototipos. Los resultados se muestran en las Figuras 12, 13, 14 y 15.

Figura 12.

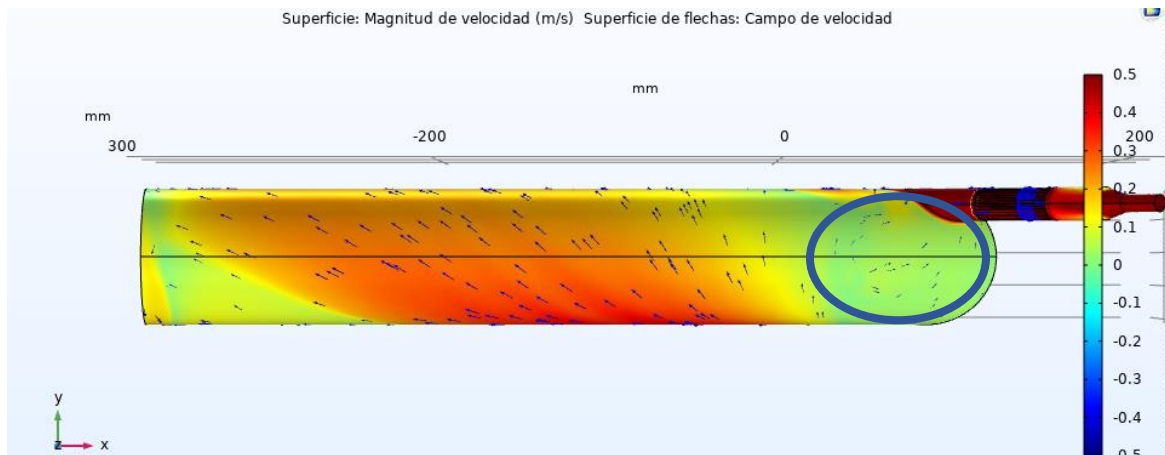
Campo de velocidad prototipo 45°(e) - 45°(s)



En el campo de velocidad del prototipo mostrado en la Figura 12 se puede observar que la velocidad dentro del reactor muestra un comportamiento medianamente uniforme; además, el efecto de giro buscado con este tipo de alimentación se puede evidenciar con facilidad. Sin embargo, se observó en la zona resaltada en el óvalo azul un vórtice de tamaño considerable en la entrada del reactor, que genera estancamiento de fluido, pérdidas de velocidad y de turbulencia.

Figura 13.

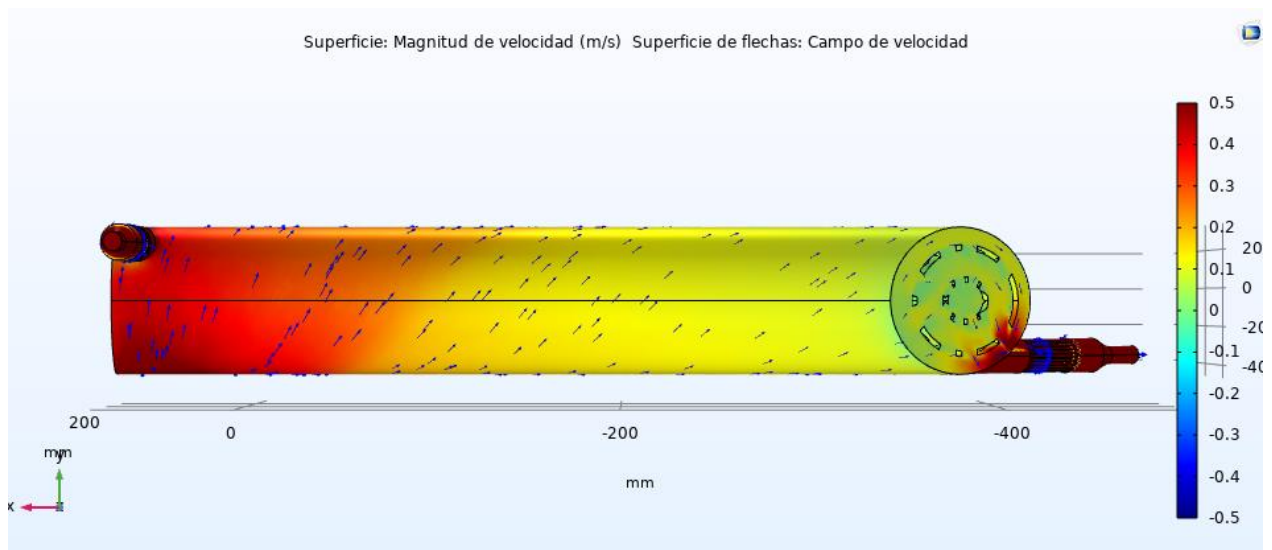
Campo de velocidad prototipo 45°(e) - 90°(s)



En la Figura 13, se puede observar que nuevamente se genera un vórtice a la entrada del reactor; por lo tanto, se puede inferir que este efecto está asociado a la alimentación con un ángulo de entrada de 45°. Debido a esto, se espera que los diseños con mejor rendimiento tengan entradas a 90° y el vórtice no aparezca y consigo los efectos negativos que acarrea. Adicionalmente, el efecto de giro y la velocidad del reactor se mantienen medianamente uniformes en las otras zonas del reactor.

Figura 14.

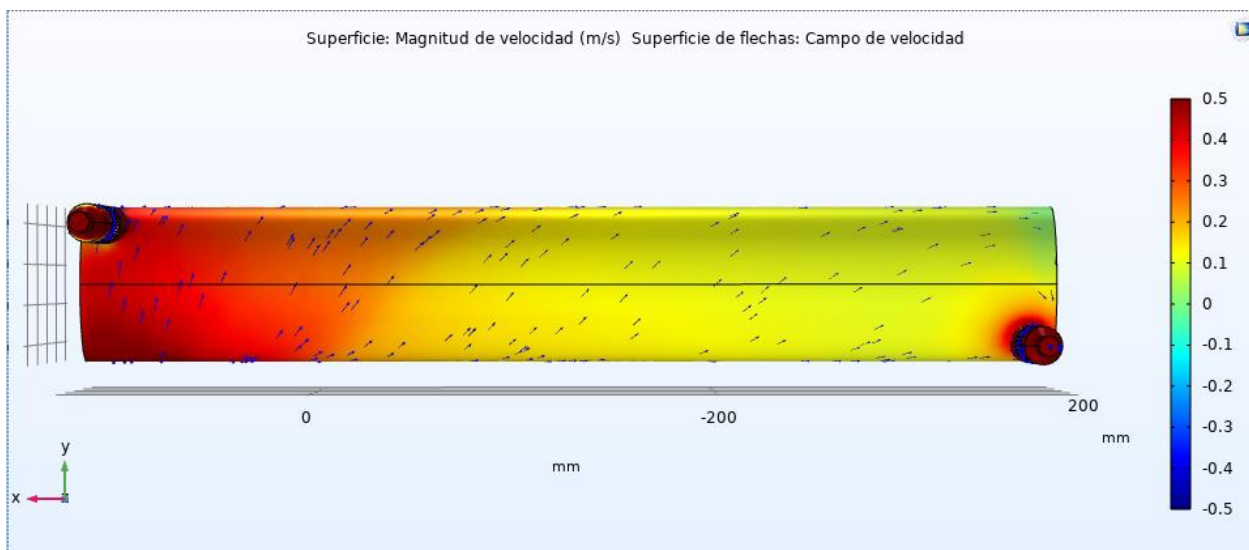
Campo de velocidad prototipo 90°(e) - 45°(s)



Como se esperaba, la implementación de la alimentación a 90° suprime completamente el vórtice evidenciado en los diseños anteriores; como resultado de esto se observa que se conserva una mayor velocidad a la entrada del reactor, lo que implica una mayor turbulencia en el flujo. En este prototipo se evidencian dos zonas marcadas donde el fluido avanza rápido el primer tercio del reactor, luego la velocidad baja hasta estabilizarse en los dos tercios finales. Adicionalmente, se encontró que en este prototipo el fluido da más giros a lo largo del reactor respecto a sus contrapartes con entradas a 45° , esto se ve directamente reflejado sobre el tiempo de residencia τ (ver Tabla 8, pág. 37).

Figura 15.

Campo de velocidad prototipo $90^\circ(e) - 90^\circ(s)$



En la Figura 15, se observa un comportamiento muy parecido al mostrado por el prototipo anterior con alimentación a 90° : en cuanto a la velocidad del fluido en el equipo se diferencian claramente dos partes en donde el fluido está muy acelerado (favoreciendo a la turbulencia), y una segunda zona donde la velocidad se reduce y estabiliza hasta llegar al final del equipo. Por otro lado, no se evidencian vórtices marcados dentro del equipo y el efecto de giro se consiguió satisfactoriamente.

6.2.2. Estimación de los parámetros requeridos para la selección del prototipo

Para el desarrollo de esta etapa, se extrajeron los datos de interés de COMSOL de las siguientes variables:

- *Energía cinética de turbulencia “k”.*
- *Índice de vorticidad “σ”.*
- *Disipación de energía cinética de turbulencia “ε”*
- *Número de Reynolds de celda*

Adicionalmente, se calculó el tiempo de residencia promedio del fluido a partir del volumen del reactor, y la velocidad promedio. Finalmente, se relacionó el tiempo de residencia obtenido con el volumen del reactor con el fin de obtener un factor que permita comparar los tiempos de residencia independientemente de las diferencias en el volumen del equipo. Posteriormente, se realizó la comparación de los resultados de cada prototipo, y se le asignó un valor a cada parámetro de 1 a 4 dependiendo del desempeño del prototipo en comparación a los otros. Los resultados se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8.

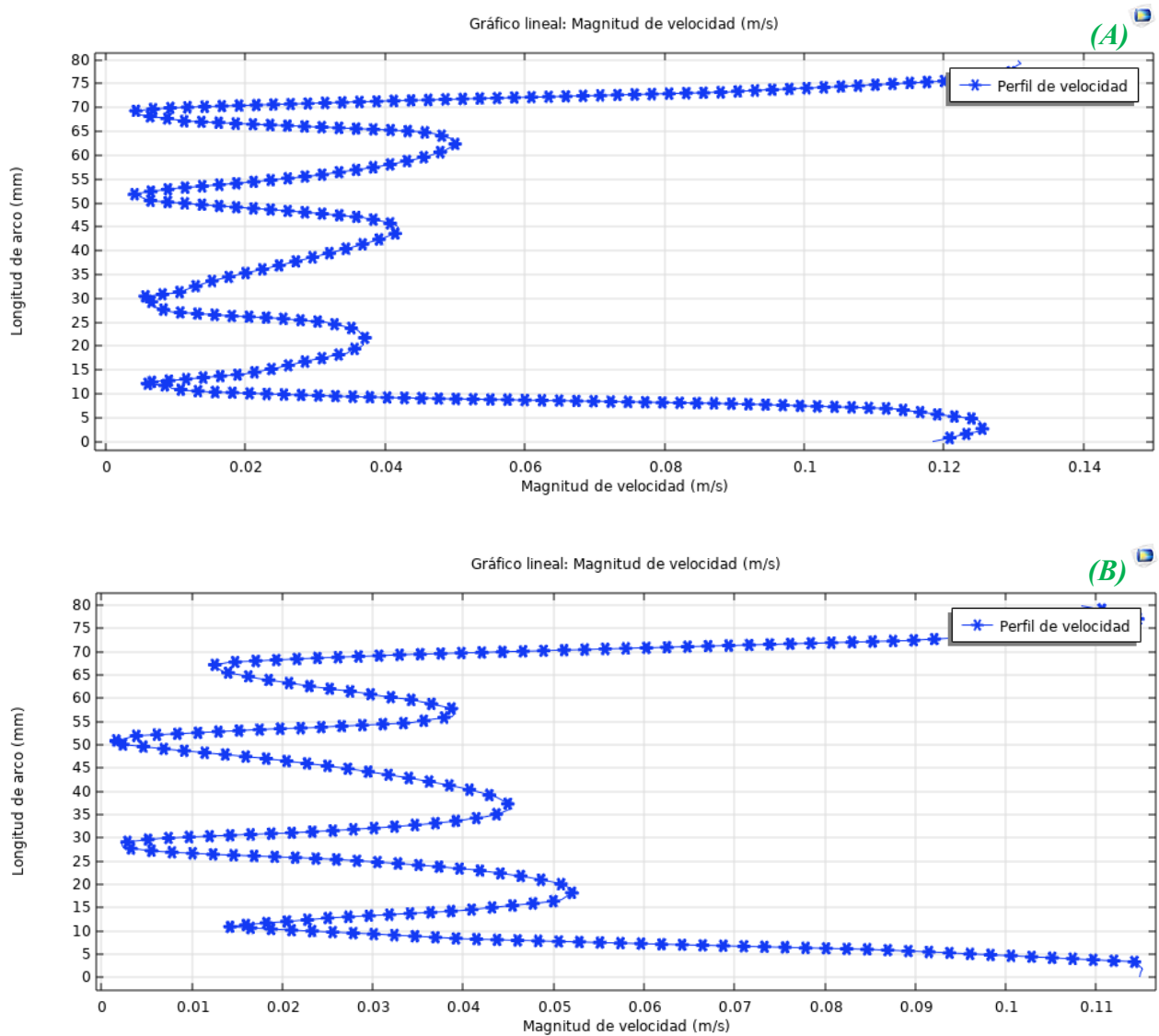
Evaluación de los prototipos teniendo en cuenta los parámetros turbulentos e hidrodinámicos

Orientación	E [m ³ /s ²]	# Reynolds de celda	k [m ² /s ²]	Índice vórtice	Relación τ-vol.	Calificación
45° - 45°	1.11 (1)	28.11 (4)	0.0036 (4)	35.68 (1)	7.29 * 10 ⁵ (1)	11.00
90° - 45°	1.00 (3)	27.90 (4)	0.0030 (3)	31.74 (3)	6.88 * 10 ⁵ (3)	16.00
90° - 90°	0.91 (4)	26.76 (3)	0.0027 (1)	29.36 (4)	6.46 * 10 ⁵ (4)	16.00
45° - 90°	1.01 (3)	26.80 (3)	0.0033 (4)	33.02 (2)	6.87 * 10 ⁵ (3)	15.00

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, se decidió mantener los prototipos con entradas y salidas a 90° - 45° y 90° - 90°. Como criterio de decisión final se tomó la capacidad de reducción de mercurio, evidenciada en el resultado de la ronda final de simulaciones implementada en la etapa 3. Finalmente, se compararon los perfiles de velocidad de los prototipos seleccionados, los resultados se muestran en la Figura 16.

Figura 16.

Perfil de velocidad en la zona central del reactor: 90°(e) - 45°(s) (A), 90°(e) - 90°(s) (B)



Nota. Para observar los perfiles de velocidad en dos dimensiones ver Apéndice H.

En cuanto a los perfiles de velocidad, se observó un comportamiento muy similar en ambos casos: se perciben claramente 4 picos en los cuales la velocidad es muy cercana a cero; esto sucede debido a que esa es la ubicación de los electrodos. Por otro lado, se encontró que la mayor velocidad se da en las partes cercanas a las paredes del reactor; esto se debe a que el efecto de giro conseguido con la alimentación lateral aumenta las fuerzas centrífugas experimentadas por el fluido, lo que conlleva a una mayor velocidad en las capas más externas. Finalmente, se encontró que en las capas

más internas del reactor se tiene una velocidad entre los 0.04 [m/s] y 0.06 [m/s], la cual tiende a disminuir proporcionalmente con la cercanía a los electrodos.

6.3. Evaluación de la capacidad de reducción de mercurio y propuesta del reactor

6.3.1 Determinación de la ecuación cinética de la reacción

Para realizar la aproximación de la velocidad de reacción se usaron dos métodos diferentes, donde se buscó que ambos llegaran a resultados muy similares para dar soporte y confiabilidad a los resultados. Los métodos usados fueron el método de las ecuaciones integradas y el método diferencial.

Para la realización de los cálculos fue necesario consultar en la literatura datos del comportamiento de la reacción a través del tiempo, por lo cual se tomaron los datos propuestos por Yan Du et al. En 2022 (*figura 5, gráfico (f), curva gris*). Los datos sustraídos se muestran en la Tabla 9.

Tabla 9.

Comportamiento de la concentración en la reacción de reducción de Hg

Tiempo [s]	C [mM]
0.00	0.03
7200.00	0.02
14400.00	0.02
21600.00	0.01
36000.00	0.01
86400.00	0.00

Fuente: Yan Du et al. 2022.

Posteriormente, se aplicó el método diferencial para determinar la ecuación de la velocidad de reacción, los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 10.

Tabla 10.*Método diferencial para determinar la ecuación cinética*

Orden	Log (k)	k
1.95	-2.70	0.00198

A partir de lo anterior, se obtuvo que la ecuación cinética es de orden de reacción aparente 2, con una constante de velocidad de $0.00198 \left[\frac{m^3}{mol \cdot s} \right]$. Sin embargo, se aplicó el método de las ecuaciones integradas con el fin de corroborar que el orden aparente de la reacción sea el indicado por el método diferencial. Los resultados se muestran en la Tabla 11.

Tabla 11.*Método de las ecuaciones integradas para determinar el orden de reacción aparente*

Orden 0		Orden 1		Orden 2		Orden 3	
0.00	0.02	0.00	-3.70	0.00	27.15	0.76	-5223.51
0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	4.41	0.07	2734.66
R ² : 0.67	0.01	R ² : 0.90	0.27	R ² : 0.99	7.78	0.97	4822.08
8.20	4.00	35.93	4.00	561.58	4.00	121.08	4.00
0.00	0.00	2.70	0.30	34023.57	242.34	2815486437.28	93009878.11

Como se esperaba, el método de las ecuaciones integradas arrojó que el mejor ajuste se tiene con una cinética de segundo orden aparente; por lo tanto, se puede afirmar que la cinética obtenida es válida y está dada por la Ecuación 13:

$$r = 1.98 * 10^{-3} * C_A^2 \quad (\text{Ec. 13})$$

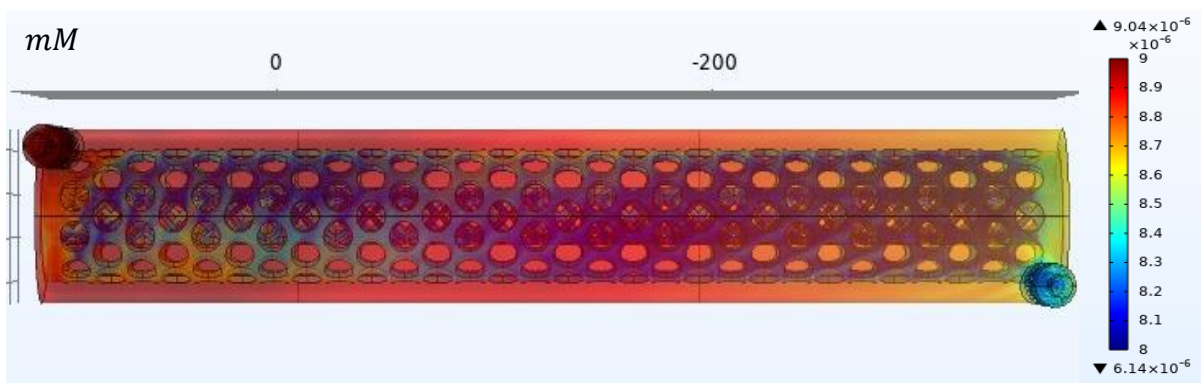
Para ver el desarrollo completo de los métodos anteriores, ver Apéndice E.

6.3.2 Ronda final de simulación y determinación de la reducción de mercurio

Posteriormente, se tomó la ecuación de la velocidad de reacción resultante y se añadió a la simulación junto con los módulos de química y transporte de especies diluidas de COMSOL Multiphysics®; con esto fue completada la última ronda de simulación, en la cual se obtuvo el campo de concentración de mercurio en el reactor y la concentración de este a la salida, con el fin de conocer la capacidad de reducción de mercurio de cada uno de los reactores. Los campos de concentración de los prototipos se muestran en las Figuras 17, 18.

Figura 17.

Campo de concentración prototipo 90°(e) - 90°(s)

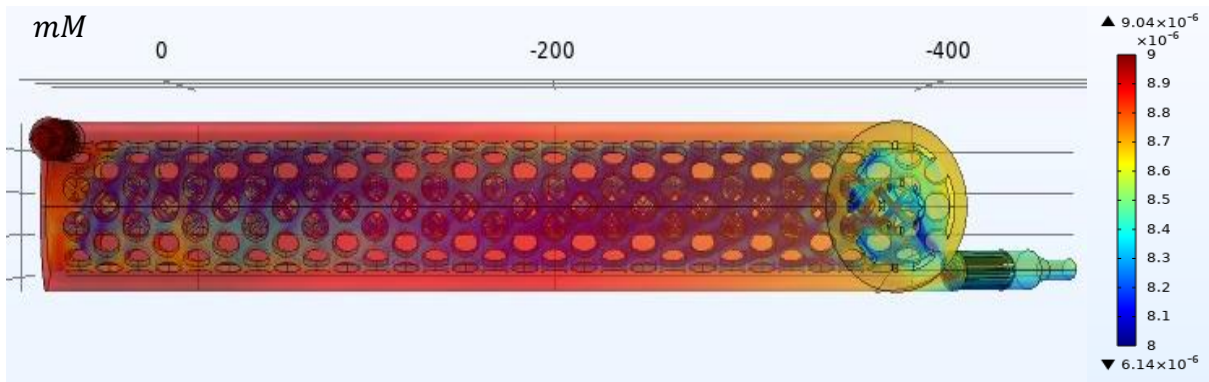


En la Figura 17 se muestra el campo de concentración del reactor, donde se observó cómo la reducción de mercurio ocurre uniformemente a medida que describe los giros esperados por el cambio de alimentación. Además, se encontró que la concentración de mercurio es más baja en la parte central del reactor respecto a las capas más externas; esto se explica debido a que la velocidad en las zonas centrales del equipo es menor como se mostró en la Figura 16, por lo tanto, el tiempo de residencia parcial en esas zonas es mayor permitiendo una mayor conversión de reactivo.

El resultado obtenido es muy cercano a lo esperado debido a que las reacciones en este tipo de reactores ocurren en los electrodos; por lo cual la concentración, de Hg^{2+} , en el volumen entre las mallas sea menor. Finalmente, se determinó que el reactor con orientación 90° - 90° disminuyó la concentración de mercurio desde 9×10^{-6} hasta 7.37×10^{-6} [mM], lo cual equivale, aproximadamente, a un 18.11 % de reducción de Hg^{2+} en un paso por el equipo.

Figura 18.

Campo de concentración prototipo 90°(e) - 45°(s)



En la Figura 18 se muestra el campo de concentración del reactor. En este caso, se encontró que la reducción de mercurio se da principalmente en las partes centrales del reactor (entre los electrodos), lugar donde la velocidad del fluido es más baja, aumentando el tiempo de residencia específico de esas zonas. Por otro lado, se determinó que la velocidad promedio en el reactor 90°(e) – 45°(s) es mayor a la del reactor 90°(e) – 90°(s), 0.137 y 0.128 [m/s] respectivamente; la diferencia de velocidades se da principalmente en las zonas más externas del reactor, (ver Figura 16) cerca de las paredes, lo que genera un menor aprovechamiento de esas zonas para la reducción de mercurio. Finalmente, se determinó que el reactor 90°(e) – 45°(s) disminuyó la concentración de mercurio desde 9×10^{-6} hasta 7.72×10^{-6} [mM], lo que corresponde a un 14.2 % de reducción.

Teniendo en cuenta la reducción de mercurio conseguida por cada uno de los prototipos, se determinó que el reactor con mejor desempeño fue el 90°(e) – 90°(s). Finalmente, se realizó la simulación del reactor con alimentación frontal y se comparó con el reactor de entrada lateral final. Los resultados se muestran en la Tabla 12; Para consultar los resultados completos ver Apéndice F.

Tabla 12.

Parámetros hidrodinámicos, turbulentos y reducción de Hg^{2+} alimentación frontal vs lateral

Alimentación	ϵ [m ³ /s ²]	# Reynolds de celda	k [m ² /s ²]	Índice vórtice	Relación τ -vol.	Reducción Hg
Frontal	0.02 (+)	22.78	0.000914	19.41 (+)	5.10×10^5 (+)	13.49 %
Lateral	0.91	26.78 (+)	0.002737 (+)	29.36	6.46×10^5	18.11 % (+)

Partiendo de los resultados que se muestran en la Tabla 12, se encontró que el reactor con entrada lateral, presenta una mejora en cuanto a la turbulencia en el equipo frente al reactor con alimentación frontal; sin embargo, el índice de vorticidad en el nuevo reactor es más alto debido a que el fluido se desplaza mostrando una trayectoria en espiral. Por otro lado, se encontró que el tiempo de residencia es mayor en el prototipo de alimentación frontal; esto se debe a que las pérdidas de velocidad en este reactor son mayores y más rápidas (evidenciadas en el número de Reynolds de celda y la energía cinética de turbulencia), por lo tanto, se espera que el tiempo de residencia promedio aumente ligeramente.

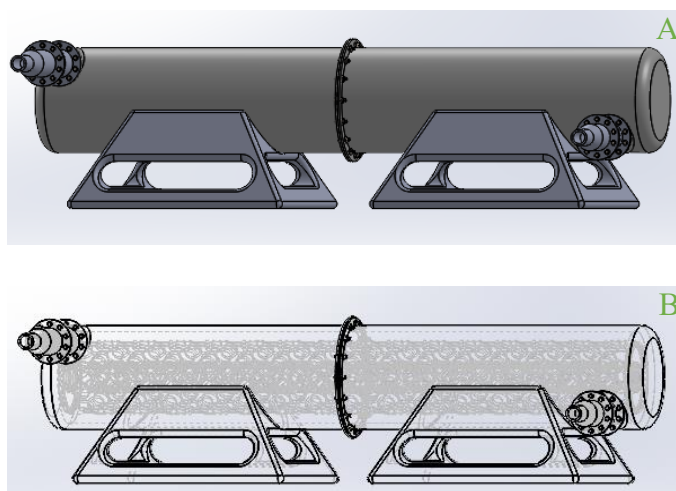
Adicionalmente, se encontró que la capacidad de reducción de mercurio en el reactor con alimentación lateral es un 4.62 % mayor frente al reactor con entrada frontal. Esto se explica debido a que, en las reacciones controladas por la difusividad, prima el transporte de las moléculas a través del solvente, lo cual se relaciona mayoritariamente con la turbulencia y así se garantiza el movimiento del reactivo hasta el sitio de reacción con mayor facilidad.

6.3.3 Propuesta del reactor UIS – GIMBA 3.0

Teniendo en cuenta los resultados de los 9 prototipos con alimentación lateral evaluados, en cuanto a factores turbulentos y reducción de mercurio, se determinó que el mejor desempeño se consigue con el reactor 90°(e) – 90°(s); por lo tanto, en la Figura 19 se muestra la geometría completa del reactor UIS – GIMBA 3.0.

Figura 19.

Reactor UIS – GIMBA 3.0 geometría completa: externa (A) e interna (B).



7. Conclusiones

En cuanto al proceso de construcción y preselección de los prototipos, se encontró que los cabezales propuestos tienen un buen desempeño, cumpliendo satisfactoriamente la función de reducir, en la medida de lo posible, los efectos de entrada/salida en el reactor. Por otro lado, se determinó en la evaluación previa de los prototipos que, las geometrías que cuentan con entrada o salida a 0° presentaron problemas en su hidrodinámica; por lo cual, no vale la pena su estudio detallado, descartando todos los prototipos con estas orientaciones.

En lo referente a los factores hidrodinámicos y turbulentos del reactor, destaca la intensidad de turbulencia, donde se encontró que el desempeño del reactor con alimentación lateral es mejor que su predecesor con alimentación frontal. Por otro lado, en el estudio del tiempo de residencia se observó un comportamiento ligeramente superior en el reactor con entrada frontal. Teniendo en cuenta lo anterior, se puede afirmar que el rendimiento del reactor UIS – GIMBA 3.0 será mejor en reacciones controladas por la difusión (como la reducción de mercurio), mientras que el reactor UIS – GIMBA 2.2 es ideal para reacciones controladas por la activación.

Finalmente, se observó en el campo de concentración del reactor con alimentación lateral que la concentración de Hg^{2+} es menor en las capas más cercanas al centro del reactor, un fenómeno explicado porque la magnitud de la velocidad en esa zona es menor, como se evidenció en el perfil de flujo del equipo, lo que promueve a que el fluido permanezca un mayor tiempo en contacto con los electrodos enriqueciendo la reacción; por lo tanto, se concluyó que la reducción de mercurio se ve favorecida con la implementación de la alimentación lateral, logrando una mejoría del 25.51 % respecto a la capacidad de reducción de mercurio del reactor con alimentación frontal en un paso.

8. Recomendaciones

Con el objetivo de seguir mejorando la turbulencia en el equipo y con ello la eficiencia de la reacción, se invita a la implementación de deflectores de flujo que favorezcan a la turbulencia en el equipo.

Por otro lado, se sugiere el estudio a profundidad del uso de electrodos con diferentes geometrías, como resortes o tornillos, que funcionen como direccionadores de flujo estáticos mejorando el efecto de giro obtenido con este tipo de alimentación. Con ello, se busca tener un mejor control y mejoría de la cantidad de giros que da el fluido en el equipo, y por consiguiente, alcanzar tiempos de residencia mayores.

Finalmente, se recomienda realizar la evaluación experimental del equipo con el fin de validar los resultados obtenidos mediante la simulación computacional; tanto de la hidrodinámica del reactor, como de su capacidad de reducción de mercurio.

Referencias bibliográficas

- Aydin, M., Selcuk, H., & Dincer, I. (2022). A photoelectrochemical reactor for ion separation and hydrogen production. *Elsevier*, 1-7.
- Bayona, C., Londoño, L. P., & Nieto, E. (2015). *Identificación del modelo de turbulencia más adecuado, usado dinámica de fluidos computacional, para el diseño del vehículo urbano de la competencia Shell Eco Marathon*. Bogotá: Universidad San Buenaventura.
- Bird, B., Stewart, W., & Lightfoot, E. (2006). *Fenómenos de transporte*. México: Limusa S.A.
- Cárdenas, M., & Reina, M. (2008). La minería en Colombia: impacto socioeconómico y fiscal. *Fedesarrollo*, 34-50.
- Castillo Elsitdié, J. G., & Carrillo Sánchez, J. M. (2011). *Consideraciones de mallado aplicadas al cálculo de flujos bifásicos con las técnicas de dinámica de fluidos computacional*. Cartagena (España): Grupo de investigación Hidr@m.
- Chang, R. (2002). Química. En R. Chang, *Química* (págs. 509 - 561). Ciudad de México: MCGRAW-HILL INTERAMERICANA EDITORES.
- Espinosa, S., & Monsalve, M. (2015). Evaluación de la degradación de un surfactante aniónico empleado en el recobro químico del petróleo con S-TiO₂ en suspensión y luz visible en un fotorreactor tubular. *Trabajo de investigación pregrado en Ingeniería Química*. Bucaramanga, Santander, Colombia: Universidad Industrial de Santander.
- Frías Ferrer, Á. (2004). *Optimización de la hidrodinámica de los reactores electroquímicos: empleo de métodos experimentales y numéricos*. Alicante: Universidad de Alicante.

- García, T., & Gómez, J. (2018). Efecto de los electrodos tipo malla en la hidrodinámica de un reactor fotoelectroquímico tubular mediante dinámica de fluidos computacional. *Trabajo de investigación pregado en Ingeniería Química*. Bucaramanga, Santander, Colombia: Universidad Industrial de Santander.
- González, O., González, C., & López, A. (2019). An Introduction to Finite Element Method: Soliworks and Matlab. *Ideas en ciencias de la ingeniería*, 29 - 37.
- Jaramillo, M. (2019). Modelado de un reactor fotoelectroquímico tubular. *Trabajo de investigación doctorado en Ingeniería Química*. Bucaramanga, Santander, Colombia: Universidad Industrial de Santander.
- Jiacheng Zhou, Yan Du, Jie Yang, Ye Liu, Limei Cao , & Ji Yang. (2022). Electrochemical reduction and kinetic analysis of oxidized mercury in wastewater by choosing titanium plate as cathode. *Elsevier*, 1 - 7.
- Katebah, M., Abousrafa, A., Al-Rawashdeh, M., & Linke, P. (2022). Hydrogen production using piston reactor technology: Process design and integration for CO2 emission reduction . *Elsevier*, 1-3.
- Martínez, S., Molliendo, H., Gutiérrez, M., Barceló, I., & Méndez, J. (2009). Performance of a tubular electrochemical reactor, operated with different inlets, to remove Cr(VI) from wastewater. *Elsevier*, 491-499.
- Martínez, S., Molliendo, H., Mendoza, V., & Barrera, C. (2010). Residence time distribution and back-mixing in a tubular electrochemical reactor operated with different inlet flow velocities, to remove Cr(VI) from wastewater. *Elsevier*, 776-783.

- Méndez Sánchez, A. F., Pérez Trejo, L., & Paniagua Mercado, A. M. (2010). *Determinación de la viscosidad de fluidos newtonianos y no newtonianos (una revisión del viscosímetro de Couette)*. Ciudad de Mexico: Escuela superior de física y matemáticas, Instituto Politécnico Nacional.
- Panqueva, N., & Albarracín, A. (2013). Construcción y operación de un reactor fotoelectroquímico para la reducción de mercurio y oxidación de cianuro. *Trabajo de investigación pregrado Ingeniería Metalúrgica* . Bucaramanga, Santander, Colombia: Universidad Industrial de Santander .
- Ranade, V. (2002). Computational flow modeling for chemical reactor engineering. *Academic Press*, 79.
- Rivera Muñoz, A. N. (2022). Laboratorio diseño avanzado de elementos de máquinas: Práctica No. 2, Análisis de tensión de una placa. *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica*.
- Rodríguez, C. (2018). *EVALUACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA DEL RÍO VETAS RELACIONADA CON LA MINERIA*. Bucaramanga: Unidades Tecnológicas de Santander.
- Rodríguez, N. (2009). ESTUDIO NUMÉRICO DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR CON FLUJO TURBULENTO EN UNA CAVIDAD ALARGADA CON VENTILACIÓN. *Trabajo de investigación Magister en Ciencias de la Ingeniería* . Hermosillo, Sonora, México: Universidad de Sonora.
- Rubiano, M., Rueda, X., & Veléz, M. (2020). *Minería de oro artesanal y de pequeña escala. Estrategias para su formalización y diferenciación de la minería ilegal*. Bogotá : Universidad de los Andes .

Ruiz, J., & Sanabria, L. (2016). Estudio hidrodinámico de un reactor fotoelectroquímico tubular mediante dinámica de fluidos computacional. *Trabajo de investigación pregrado en Ingeniería Química*. Bucaramanga, Santander, Colombia: Universidad Industrial de Santander.

Vilar, V., & Espíndola, J. (2020). Innovative light-driven chemical/catalytic reactors towards contaminants of emerging concern mitigation: A review. *Elsevier*, 2-22.

Apéndices

APÉNDICE A. Modelo de k-épsilon estándar detallado.

Para el modelo k-épsilon estándar y derivados se tiene que: μ_t es la viscosidad turbulenta, $C_{3\varepsilon}$ es un término dependiente de cada proceso debido a que depende de \bar{u} y \bar{v} , mientras que $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$ son constantes. También, σ_k y σ_ε son términos constantes que hacen referencia a Prandtl turbulento para las ecuaciones (3) y (4) (Rodríguez, 2009).

$$\nabla \rho \bar{u} \bar{v} k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon - Y_M \quad (3)$$

$$\nabla \rho \bar{u} \bar{v} \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} [P_K + C_{3\varepsilon} G_K] - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (4)$$

En las ecuaciones (3) y (4), el término P_K hace referencia a la generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad. El término P_K se representa con la siguiente expresión matemática:

$$P_k = -\rho \mu_t [(2(\nabla \bar{u})^2 + 2(\nabla \bar{v})^2 + (\nabla \bar{u} \bar{v})^2)]$$

Continuando, G_k representa la generación de energía cinética turbulenta debido a las fuerzas de flotación. El término G_k se determina mediante la siguiente expresión:

$$G_k = -\beta g_i \frac{\mu_t}{\sigma_\theta} \nabla \bar{T}$$

Finalmente, el término Y_M corresponde a la fluctuación en la dilatación en la turbulencia. Y_M se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$Y_M = 2\rho \varepsilon M_t^2$$

Para resolver las ecuaciones del modelo, se definen los coeficientes y se plantean las siguientes ecuaciones auxiliares:

$$\text{donde "a" equivale a la velocidad del sonido, } a = \sqrt{\gamma R \bar{T}}, M_t = \frac{\sqrt{k}}{a}, \mu_t = \frac{\rho C_\mu k^2}{\varepsilon}$$

$$\text{Coeficientes: } C_\mu = 0.09, C_{1\varepsilon} = 1.44, C_{2\varepsilon} = 1.92, \sigma_\varepsilon = 1.3, \sigma_k = 1, C_{3\varepsilon} = \tanh\left(\frac{\bar{v}}{\bar{u}}\right)$$

APÉNDICE B. Planos detallados de las piezas del reactor.

Figura 18.

Planos cabezal de entrada

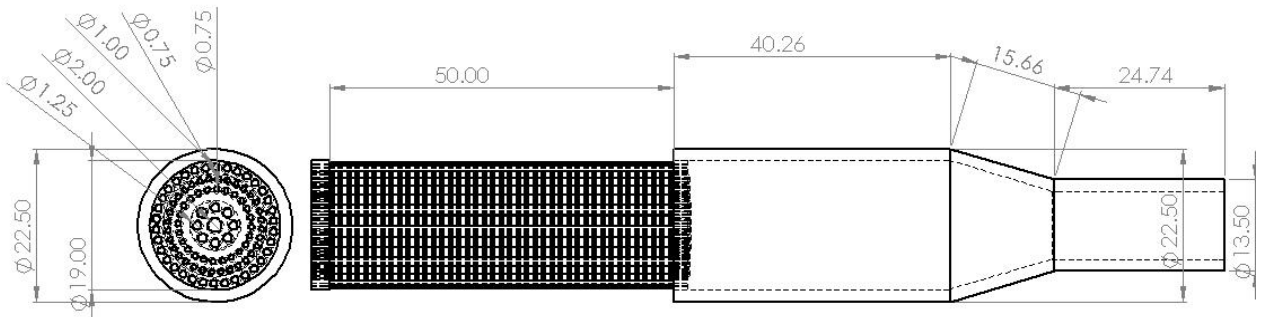


Figura 19.

Planos cabezal de salida

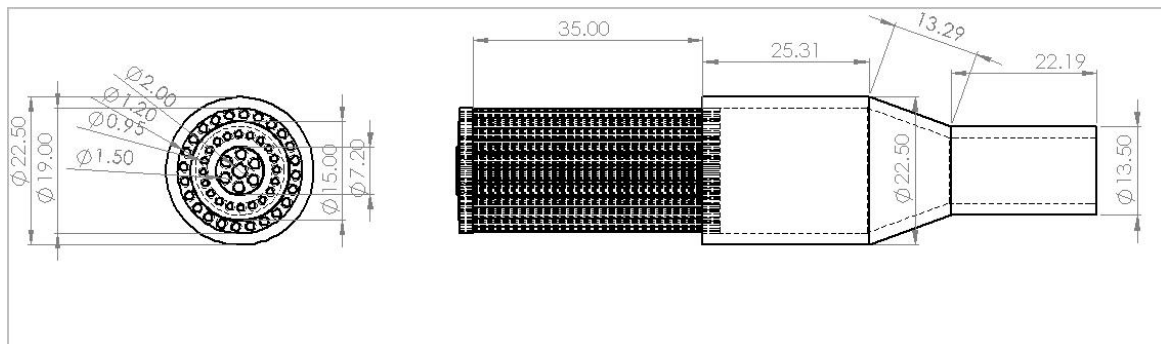


Figura 20.

Planos cuerpo del reactor 45°

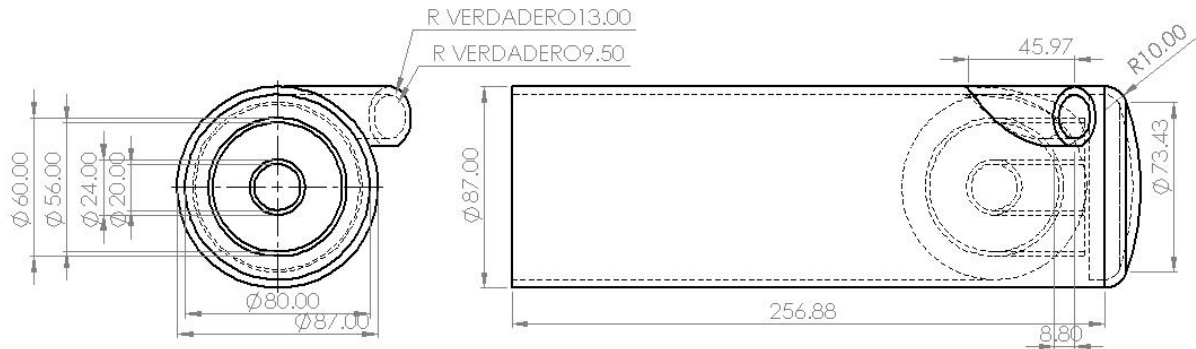


Figura 21.

Planos cuerpo del reactor 90°

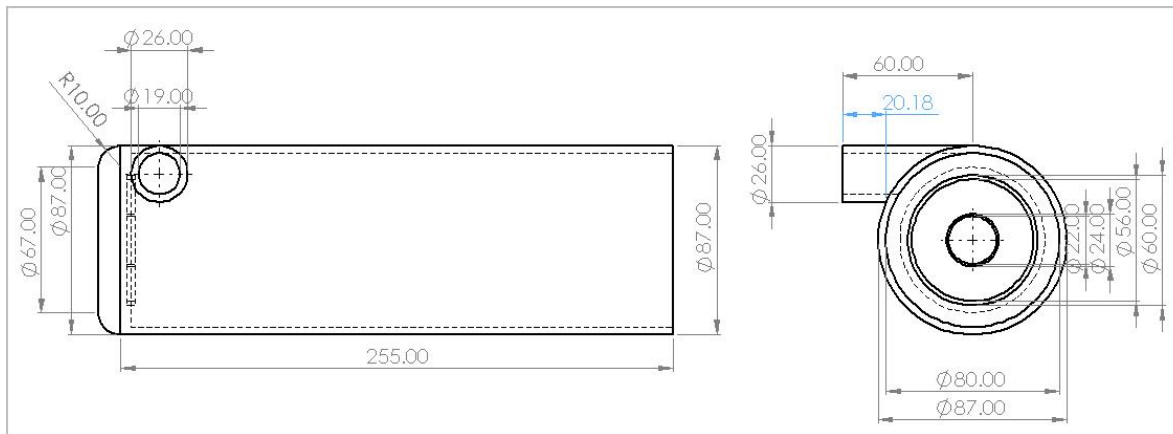


Figura 22.

Planos cuerpo del reactor 0°

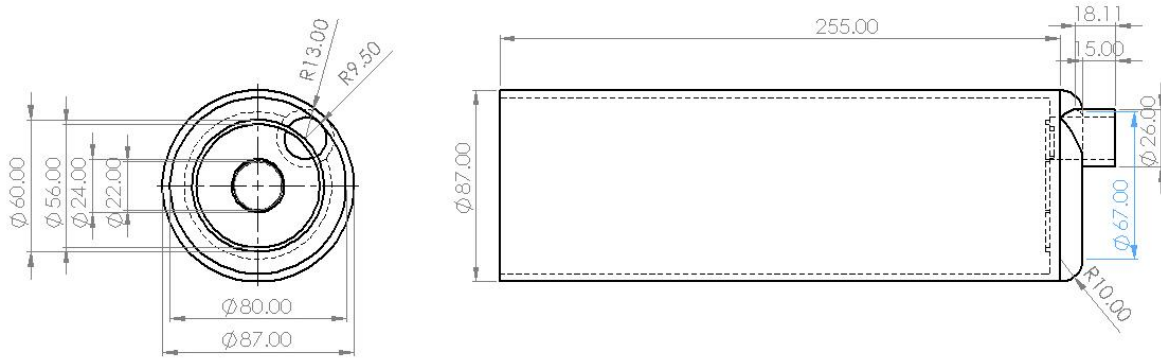


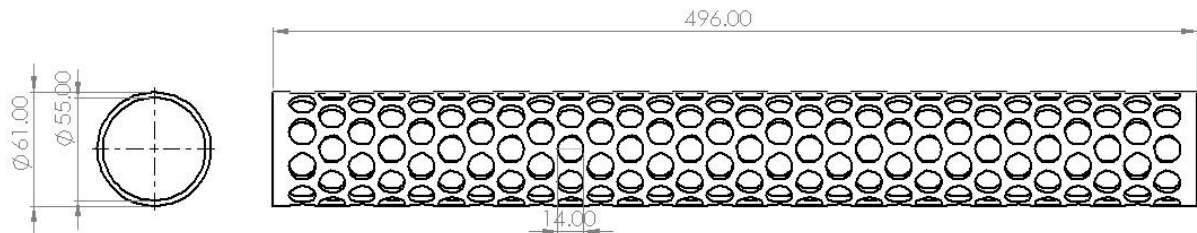
Figura 23.

Planos fotocátodo



Figura 24.

Planos fotoánodo



APÉNDICE C. Dominio del fluido de los prototipos.

Figura 25.

Dominio del fluido, prototipo $90^\circ(e) - 45^\circ(s)$

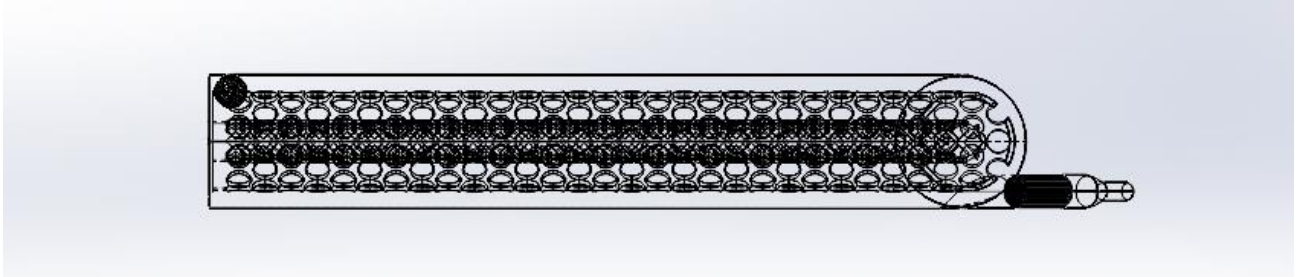


Figura 26.

Dominio del fluido, prototipo $45^\circ(e) - 90^\circ(s)$

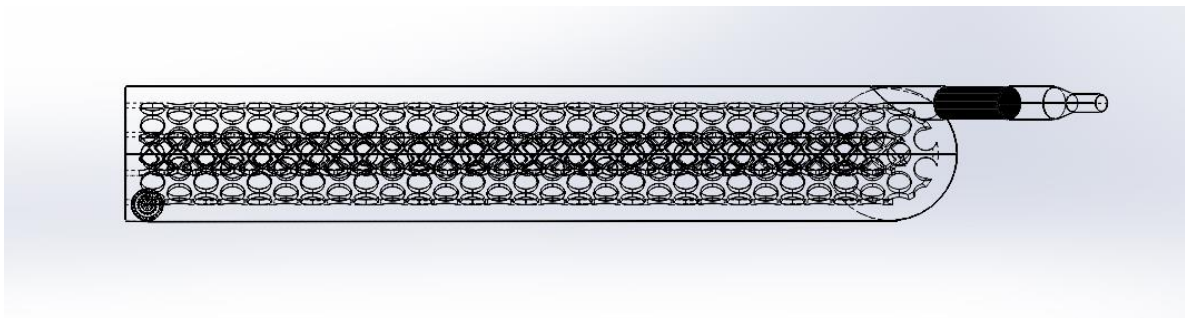
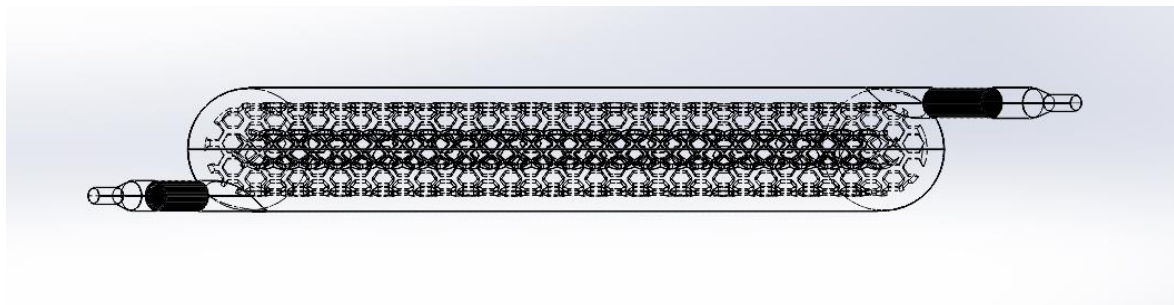


Figura 27.

Dominio del fluido, prototipo $45^\circ(e) - 45^\circ(s)$



APÉNDICE D. Mallado de los prototipos.

Figura 28.

Mallado del prototipo 45°(e) – 45°(s)

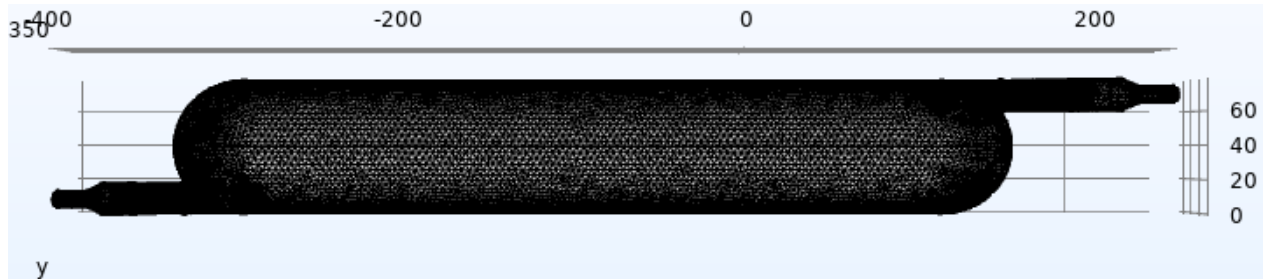


Tabla 13.

Características e histograma del prototipo 45°(e) - 45°(s)

Características de la malla	
Vértices	5756595
Número de elementos	31310988
Calidad mínima	0.181
Calidad promedio	0.8358
Volumen de malla [mm ³]	2003000



Figura 29.

Mallado del prototipo 45°(e) – 90°(s)

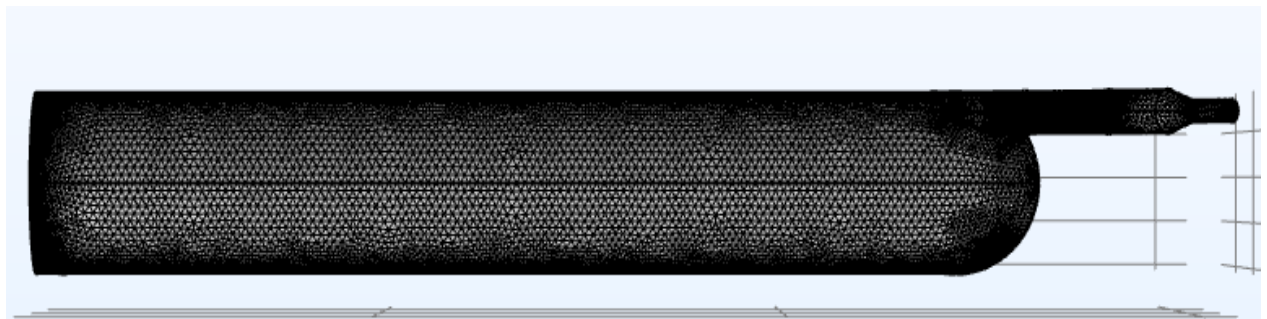


Tabla 14.

Características e histograma del prototipo 45°(e) - 90°(s)

Características de la malla	
Vértices	6190427
Número de elementos	33704459
Calidad mínima	0.06669
Calidad promedio	0.8359
Volumen de malla [mm ³]	2191000



Figura 30.

Mallado del prototipo 90°(e) - 45°(s)

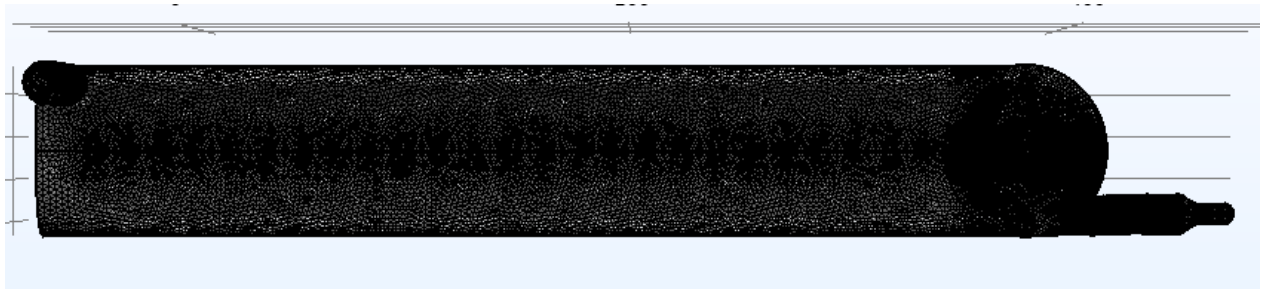


Tabla 15.

Características e histograma del prototipo 90°(e) - 45°(s)

Características de la malla	
Vértices	5943421
Número de elementos	32394409
Calidad mínima	0.08377
Calidad promedio	0.8366
Volumen de malla [mm ³]	2190000



Apéndice E. Resultados detallados de los métodos para la determinación de la cinética.

Método de las ecuaciones integradas.**Tabla 16.***Evaluación de las ecuaciones integradas para orden 0, 1, 2 y 3.*

Tiempo [h]	Tiempo [s]	C/C _o	C [mg/L]	C [mM]	Ln ([C])	1/C	1/C ²
0.00	0.00	1.00	10.00	0.03	-3.39	29.67	880.01
2.00	7200.00	0.67	6.74	0.02	-3.78	44.01	1937.18
4.00	14400.00	0.49	4.93	0.02	-4.10	60.17	3620.72
6.00	21600.00	0.38	3.78	0.01	-4.36	78.48	6158.93
10.00	36000.00	0.22	2.20	0.01	-4.90	134.84	18182.07
24.00	86400.00	0.12	1.18	0.00	-5.53	251.40	63201.11
Orden 0		Orden 1		Orden 2		Orden 3	
0.00	0.02	0.00	-3.70	0.00	27.15	0.76	-5223.51
0.00	0.00	0.00	0.16	0.00	4.41	0.07	2734.66
0.67	0.01	0.90	0.27	0.99	7.78	0.97	4822.08
8.20	4.00	35.93	4.00	561.58	4.00	121.08	4.00
0.00	0.00	2.70	0.30	34023.57	242.34	2815486437.28	93009878.11

Método diferencial.

Primero, el cálculo de la velocidad de reacción r_A se hizo del a siguiente manera:

$$r_{Ai} = -\frac{C_{A+i} - C_{A-i}}{T_{i+1} - T_{i-1}}$$

Partiendo del valor de r_A obtenido para cada uno de los datos, los resultados completos del método se muestran en la tabla 16:

Tabla 17.*Resultados completos método diferencial*

Tiempo [s]	C [mM]	r [mM]	Log ([C])	Log (r)	Orden	Log (k)	k
0.00	0.03				1.95	-2.70	0.00198
7200.00	0.02	1.19E-06	-1.64	-5.93			
14400.00	0.02	6.93E-07	-1.78	-6.16			
21600.00	0.01	4.26E-07	-1.89	-6.37			
36000.00	0.01	1.35E-07	-2.13	-6.87			
86400.00	0.00						

APÉNDICE F. Resultados completos reactor alimentación frontal.

Figura 31.

Campo de velocidad del reactor con alimentación frontal

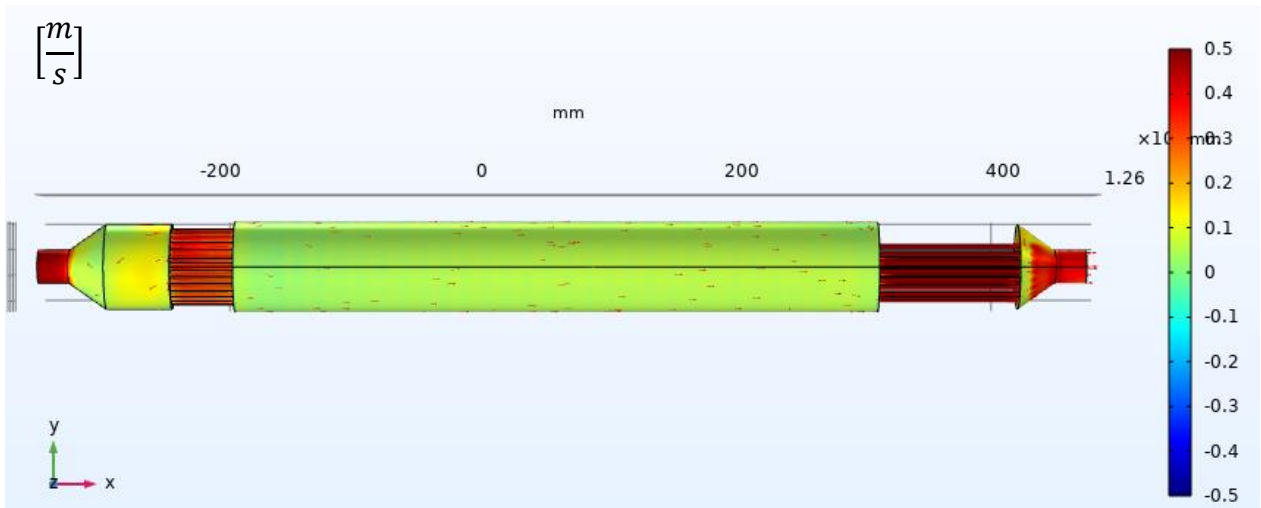
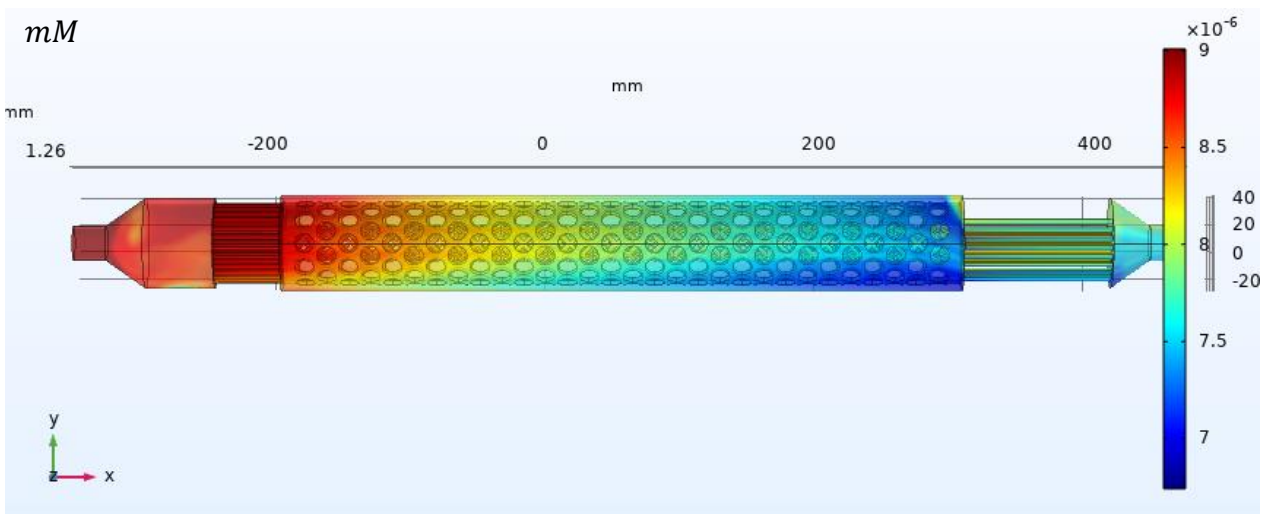


Figura 32.

Campo de concentración del reactor con alimentación frontal



APÉNDICE G. Equipo de cómputo empleado y tiempos de simulación.

Tabla 18.

Especificaciones del equipo de cómputo y requerimientos

Requerimientos de cómputo y tiempos de simulación	
Equipo de cómputo	Workstation con procesador Intel XEON Inside y 128 [GB] de RAM utilizable.
Consumo de RAM por simulación	Entre 70 - 105 [GB]
Tiempo de cómputo por simulación	Entre 8 - 10 [días]
Tiempo de cómputo total de simulación	79 [días] aproximadamente

APÉNDICE H. Perfiles de velocidad en dos dimensiones.

Figura 33.

Perfil de velocidad prototipo $90^\circ(e) - 45^\circ(s)$

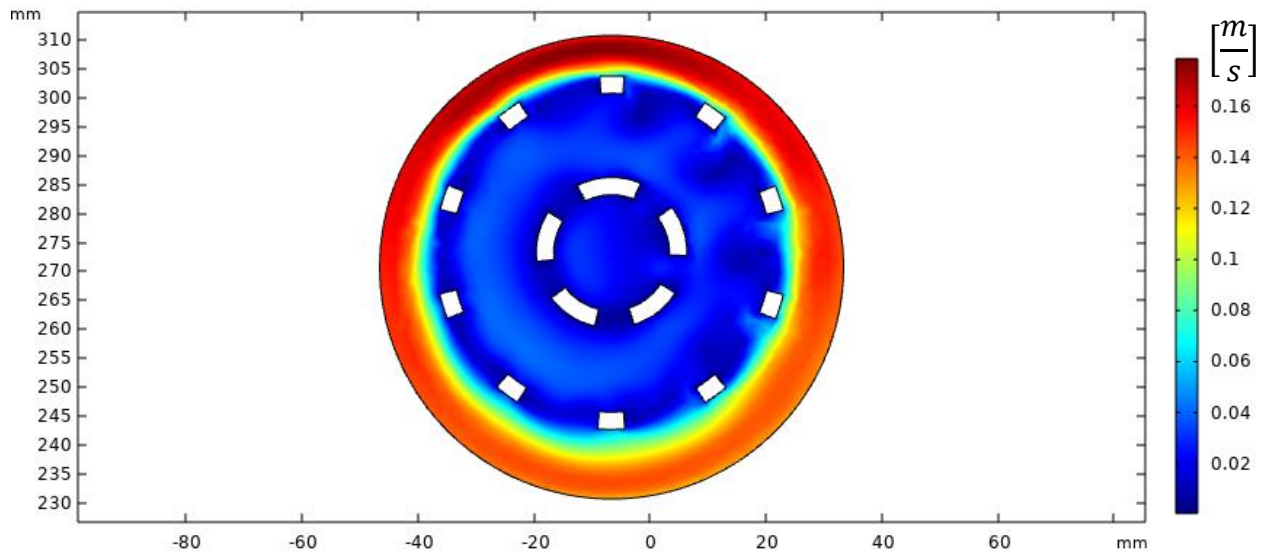


Figura 34.

Perfil de velocidad prototipo $90^\circ(e) - 90^\circ(s)$

