



UNIVERSIDAD DEL MAR

CAMPUS PUERTO ÁNGEL

INGENIERÍA AMBIENTAL

**MODELADO Y VALIDACIÓN DE LA DEGRADACIÓN DE  
2-CLOROFENOL EN UNA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO  
PRENSA VÍA DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL DE

INGENIERA AMBIENTAL

PRESENTA

ABRIL CRUZ LÓPEZ

DIRECTOR

DR. ALEJANDRO REGALADO MÉNDEZ

## **DEDICATORIA**

*Para mis padres Martha y Alfredo, quienes con su amor incondicional me han brindado la oportunidad de vivir esta maravillosa experiencia y darme la fuerza para seguir adelante cada día. Gracias por todo el sacrificio que han hecho para que yo logre mis objetivos.*

*LOS AMO.*

*Para Iván, quien a lo largo de esta etapa ha sido mi motivación y felicidad, gracias por todo lo que he vivido junto a ti, las palabras no me alcanzan para decirte lo que significas*

*para mí. TE AMO.*

*Para mi familia que siempre me ha apoyado y aconsejado buscando siempre lo mejor para mí, a pesar de la distancia entre nosotros siempre estarán en mi mente y mi corazón.*

## **AGRADECIMIENTO**

Al Programa para el Desarrollo Profesional Docente (PRODEP) por el financiamiento del proyecto “Simulación y Control de Una Celda Electroquímica Tipo Filtro Prensa en la Degradación de Contaminantes” (No. de Oficio DSA/103.5/16/10242 y CUP: 2II1605).

A mi Director, el Dr. Alejandro Regalado, mi más sincero agradecimiento por haber confiado en mis capacidades para desarrollar este trabajo, sobre todo por su paciencia y apoyo ante diversas situaciones, gracias por la oportunidad de explorar nuevos campos de investigación.

A mis asesores, Dr. Ever Peralta, Dr. Juan Mentado Morales, M. en C. Gianpaolo Fontana Llerandi y al Dr. Mario Edgar Cordero Sánchez, por su colaboración en la revisión de este documento y por sus aportaciones que me permitieron mejorar este trabajo de investigación.

A los profesores, que durante mi formación profesional compartieron conmigo su conocimiento y a la institución, que me otorgó las herramientas necesarias para cumplir mis objetivos académicos.

A mis amigos, que han sido parte de esta etapa de mi vida, compartiendo conmigo muchos momentos de alegría, de aprendizaje y crecimiento personal; Iván, Alejandra, Juan Luis, Noé, Eduardo, Jared, Diana, Vicente y a mis compañeros de la universidad que junto a ellos adquiriré diversos conocimientos necesarios para mi formación profesional y que en su momento compartieron conmigo diversas experiencias.

## **PRODUCTOS DE INVESTIGACIÓN**

### **1. Congreso presentado**

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química (AMIDIQ 2018), San José del Cabo, Baja California Sur, México, 1 al 4 de mayo del 2018.

Título: Modelo Hidrodinámico de una Celda Electroquímica Tipo FM01-LC por Análisis DTR y el Modelo de Wolf-Resnick.

### **2. Artículo enviado**

Revista: Journal of Applied Electrochemistry

Título: Mathematical Modeling of de Electrochemical Degradation of 2-chlorophenol Using a Filter-Press Type Electrochemical Reactor with BDD Electrodes.

## ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS .....	vi
ÍNDICE DE TABLAS.....	vii
RESUMEN.....	viii
CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN.....	1
1. ANTECEDENTES .....	2
1.1. MÉTODOS DE DEGRADACIÓN .....	2
1.1.1. PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA .....	3
1.1.2. PROCESO DE ELECTROOXIDACIÓN .....	3
1.2. MODELADO HIDRODINÁMICO Y SIMULACIÓN CFD.....	5
1.2.1. DEFINICIÓN DE UN MODELO .....	5
1.2.2. ETAPAS DEL MODELADO .....	6
1.2.3. MODELADO DE UN PROCESO ELECTROQUÍMICO.....	7
2. ESTADO DEL ARTE .....	8
3. JUSTIFICACIÓN.....	14
4. HIPÓTESIS .....	15
5. OBJETIVOS.....	15
5.1. OBJETIVO GENERAL.....	15
5.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	15
CAPÍTULO II. METODOLOGÍA .....	16
6. CELDA ELECTROQUÍMICA FM01-LC.....	16
7. MODELADO Y SIMULACIÓN .....	17
7.1. DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS (CFD).....	17
7.1.1. CÓDIGO CFD.....	18
7.1.1.1. PRE-PROCESO.....	18
7.1.1.2. SOLUCIÓN .....	18
7.1.1.3. POS-PROCESO.....	18
7.1.2. MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO.....	18
7.2. COMSOL MULTIPHYSICS®.....	19
7.3. DESARROLLO DEL MODELO .....	20
7.3.1. GEOMETRÍA.....	21
7.3.2. MATERIALES.....	23

7.3.3.	DEFINICIONES GLOBALES.....	23
7.3.4.	FÍSICA Y CONDICIONES DE FRONTERA.....	23
7.3.5.	MALLADO.....	24
7.3.6.	POS-PROCESAMIENTO.....	24
8.	MODELO MATEMÁTICO DE LA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO PRENSA Y SOLUCIÓN NUMÉRICA.....	25
8.1.	MODELADO DE LA CELDA ELECTROQUÍMICA TIPO FILTRO PRENSA Y DE UN TANQUE CONTINUO DE MEZCLA PERFECTA.....	26
8.2.	SOLUCIÓN NUMÉRICA.....	27
8.3.	VALIDACIÓN EXPERIMENTAL.....	28
	CAPÍTULO III. DISCUSIÓN Y RESULTADOS.....	29
9.	MODELO CINÉTICO DEL 2-CLOROFENOL.....	29
10.	MODELADO DE LA DEGRADACIÓN ELECTROQUÍMICA DE 2-CF.....	30
10.1.	MODELO DE DEGRADACIÓN DE 2-CF EN UN SOLO PASO.....	31
10.2.	MODELADO Y VALIDACIÓN EXPERIMENTAL DE LA DEGRADACIÓN DE 2-CF.....	42
	CAPÍTULO IV. CONCLUSIONES.....	44
ANEXO A.	CÓDIGO MATLAB®.....	45
ANEXO B.	PRODUCTOS DE INVESTIGACIÓN.....	47
ANEXO C.	PERMISOS ADAPTACIÓN, REIMPRESIÓN Y TRADUCCIÓN DE IMÁGENES.....	52
	REFERENCIAS.....	55

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Gráfica porcentual de la distribución de los volúmenes de agua en México para usos agrupados consuntivos del 2016. ....	1
Figura 2. Diseño de reactores electroquímicos. a) reactor de mezcla perfecta por lotes, b) reactor de tanque continuo de mezcla perfecta (CSTR), c) reactor de flujo pistón (PFR). ....	4
Figura 3. Clasificación de los reactores de acuerdo al patrón de flujo: ideales y no ideales. ....	5
Figura 4. Diagrama de flujo de las etapas del modelado. ....	6
Figura 5. Trabajo multidisciplinario en el diseño de un proceso electroquímico. ....	8
Figura 6. Geometría del electrodo de placa plana de níquel, área de $4 \times 16 \text{ cm}^2$ [14]. ....	9
Figura 7. Geometría del electrodo 3D carbón vítreo reticulado, área de canal rectangular 0.1 m de largo x 0.05 m de ancho x 0.012 m de profundidad [16]. ....	11
Figura 8. Celda del reactor FM01-LC, con un canal rectangular 0.16 m de largo x 0.04 m de ancho x 0.0055 m de profundidad [18]. ....	12
Figura 9. a) Configuración 3D del reactor electroquímico FM01-LC. b) Geometría del electrodo y la malla promotora de turbulencia [19]. ....	13
Figura 10. Arreglo y geometría de la celda electroquímica tipo filtro prensa FM01-LC para este trabajo. ....	14
Figura 11. Diagrama de la celda electroquímica tipo filtro prensa. ....	16
Figura 12. Módulos que integran COMSOL Multiphysics® 5.3 ....	20
Figura 13. Asistente de Modelo. (a) Icono correspondiente a la selección del Asistente de modelo. (b) Iconos para la selección de las dimensiones del espacio de trabajo. ....	21
Figura 14. Esquema de la celda electroquímica FM01-LC, nueva configuración propuesta [23]. ....	22
Figura 15. Representación gráfica 3D de la celda electroquímica FM01-LC. ....	23
Figura 16. Simulación numérica con LiveLink™ para MATLAB®. ....	28
Figura 17. Modelo cinético de la degradación 2-CF en la celda electroquímica tipo filtro prensa FM01-LC, con $C_{2\text{-CF},0} = 1 \text{ mol m}^{-3}$ , $\text{pH} = 7.3$ , $j = 0.14 \text{ A cm}^{-2}$ y $Q = 1 \text{ L min}^{-1}$ . ....	30
Figura 18. (a) Gráfica de contorno de la distribución de la presión, sobre todo el reactor electroquímico. (b) Cortes en el plano XY sobre el comportamiento de la presión a diferente longitud de la entrada, $t = 10 \text{ s}$ . ....	31
Figura 19. Perfiles de velocidad (a) Gráfico de cortes superficie de la magnitud de la velocidad (b) Gráfica de contornos de la velocidad a $z_0 = 0 \text{ m}$ , $z_1 = 0.04 \text{ m}$ , $z_2 = 0.07 \text{ m}$ , $z_3 = 0.10 \text{ m}$ , $z_4 = 0.13 \text{ m}$ y $z_5 = 0.16 \text{ m}$ a lo largo de la celda. ....	32

Figura 20. Campo de la velocidad corte trasversal de la celda electroquímica tipo filtro prensa .....	33
Figura 21. Perfiles de la magnitud de la velocidad a lo ancho del canal (a) 0 m, (b) 0.04 m, (c) 0.07 m, (d) 0.10 m, (e) 0.13 m y (f) 0.16 m de la entrada de la celda. ....	36
Figura 22. Perfiles de la magnitud de la velocidad a (a) 0 m, (b) 0.04 m, (c) 0.07 m, (d) 0.10 m, (e) 0.13 m y (f) 0.16 m de la entrada de la celda.....	40
Figura 23. Concentración promedio del 2-CF ( $C_{2-CF}$ ) a la salida de la celda electroquímica. ....	41
Figura 24. Avance de la degradación del 2-CF a $t = 0$ s, 2 s, 4 s, 8 s, 10 s y 15 s. ....	42
Figura 25. Validación del modelo matemático de degradación del 2-CF.....	43

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Parámetros y dimensiones geométricas del modelo FM01-LC. ....	22
Tabla 2. Número de elementos y calidad de mallado. ....	24

## RESUMEN

El presente trabajo tiene por objetivo el desarrollo y resolución del modelo matemático de la degradación de 2-clorofenol (2-CF) implementando electrodos de Diamante Dopados con Boro (BDD) en una celda electroquímica tipo filtro prensa (FM01-LC) con acoplamiento a un tanque continuo de mezcla perfecta con recirculación. Esto a través del modelado matemático que describe el comportamiento hidrodinámico y la solución de las ecuaciones que describe el fenómeno de transferencia de masa y el modelo cinético de reacción. El estudio se llevó a cabo mediante la técnica de Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). La solución numérica se llevó a cabo en dos paquetes computacionales de uso comercial; COMSOL® Multiphysics para resolver las ecuaciones de hidrodinámica y las ecuaciones del fenómeno de transporte de masa, mientras que en MATLAB® se resolvió la ecuación de tanque continuo de mezcla perfecta (CST) acoplado en modo de recirculación, que posteriormente se validaron con datos experimentales. El proceso electroquímico se llevó a cabo bajo condiciones galvanostáticas, con  $j = 0.14 \text{ A cm}^{-2}$ ,  $Q = 1 \text{ L min}^{-1}$  y  $pH = 7.3$ . Los resultados muestran que el modelo matemático propuesto tiene un alto grado de ajuste con los datos experimentales ( $R^2 = 0.9847$ ,  $RMS = 0.4041$ ) y la degradación electroquímica de 2-CF ha sido exitosa con  $C_{2-CF}^{Teo}$  de  $0.0013 \text{ mol m}^{-3}$  y  $C_{2-CF}^{Exp}$  de  $0.0001 \text{ mol m}^{-3}$ .

El contenido de este trabajo está distribuido en cuatro capítulos. En el capítulo I, se presenta un breve panorama sobre la situación ambiental que genera la contaminación por compuestos fenólicos, enfocado al 2-CF, así como a los diferentes procesos que se han estudiado para combatir esta problemática. Adicionalmente, se describen brevemente diversas investigaciones realizadas sobre el modelado de la celda electroquímica tipo filtro prensa, la justificación y objetivos de este trabajo. En el capítulo II se desarrolla la metodología propuesta para alcanzar los objetivos del trabajo y la propuesta del modelo matemático de la celda electroquímica tipo filtro prensa. Mientras que en el capítulo III corresponde a los resultados y discusión de la investigación. Finalmente, en el capítulo IV se presentan las conclusiones este trabajo.