

[2020]



IBEROAMERICANA
CORPORACIÓN UNIVERSITARIA

Simulación de un reactor tipo batch con geometría 2D en Comsol con un ánodo de composición definida de aluminio y hierro para aumentar la deposición de Plomo (Pb^{2+}).

Byron Bonilla – Investigador Ppal.

Felipe Barreto – Coinvestigador.

Bryan Hidalgo – Coinvestigador.

Programa de Ingeniería Industrial

Facultad de Ingeniería

Corporación Universitaria

Iberoamericana



Título

Simulación de un reactor tipo batch con geometría axial 2D en Comsol con un ánodo de composición definida de aluminio y hierro para aumentar la deposición de Plomo (Pb^{2+})

Title (Inglés)

Batch type reactor simulation with a 2D geometry in Comsol with an anode of aluminium and iron definite composition to increase the deposition of Lead (Pb^{2+})

Nombre Autor/es

Ing. Byron Bonilla – Investigador Principal

Ing. Felipe Barreto – Coinvestigador

Brayan Hidalgo - Coinvestigador

29 de diciembre de 2020

Agradecimientos

Al comité de investigación de la facultad de ingeniería por su disposición en el
avance de este proyecto.

A nuestras familias por su paciencia en el desarrollo del proyecto.

Resumen

(Máximo 250 palabras, Arial 12, alineación justificada)

En la presente investigación, se pretende realizar un énfasis en el proceso de electrocoagulación, y sus variables críticas, teniendo en cuenta que es un proceso mediante el cual se pueden decantar metales disueltos en agua, que para futuras investigaciones permiten definir la mejor forma para remover algunos metales pesados de industrias en las cuales se generan este tipo de residuos.

Para este caso se escogerá un reactor tipo batch con electrodos monopolares conectados en paralelo, al cual se le definirá un corte axial 2D para analizar los fenómenos físicos, químicos y eléctricos presentes en el mismo, y de esta forma poder analizar las variables de corriente, voltaje y distancia de las placas óptimas por medio de la corrida de distintas simulaciones, mediante los cuales se pueda definir en cuales valores se puede obtener una mayor deposición del metal de interés que en este caso es el plomo.

El alcance de esta investigación es estudiar los valores máximos de deposición de con variación de la densidad de corriente aplicada en los ánodos para 3 momentos diferentes del tiempo y 3 configuraciones distintas de los electrodos.

La geometría a tratar durante la investigación es tipo 2D, en donde las ecuaciones físicas y químicas a tener en cuenta son la de una distribución de corriente secundaria, la cual no tiene en cuenta fuerzas electromotrices de retorno, como tampoco la turbidez del electrolito y finalmente que el único material contaminante a depositar es (Pb^{2+}).

Palabras Clave: Simulación, electrocoagulación y reactor.

Abstract

In the present research, it is intended to place an emphasis on the electrocoagulation process, and its critical variables, taking into account that it is a process by which dissolved metals can be decanted in water, which for future research allows defining the best way to remove some heavy metals from industries in which this type of waste is generated.

For this case, a batch type reactor with monopolar electrodes connected in parallel will be chosen, to which a 2D axial section will be defined to analyze the physical, chemical and electrical phenomena present in it, and in this way to be able to analyze the current variables, voltage and distance of the optimal plates by running different simulations, through which it can be defined in which values a greater deposition of the metal of interest can be obtained, which in this case is lead.

The scope of this research is to study the maximum values of deposition of with variation of the current density applied in the anodes for 3 different moments of time and 3 different configurations of the electrodes.

The geometry to be treated during the investigation is type 2D, where the physical and chemical equations to be taken into account are that of a secondary current distribution, which does not take into account return electromotive forces, as well as the turbidity of the electrolyte and finally that the only contaminating material to be deposited is (Pb^{2+}).

Key Words: Simulation, electrocoagulation and reactor.

Tabla de Contenido

Introducción

Capítulo 1 - Fundamentación conceptual y teórica

Capítulo 2 - Aplicación y Desarrollo

2.1 Tipo y Diseño de Investigación

2.2 Población o entidades participantes

2.3 Definición de Variables o Categorías

2.4 Procedimiento e Instrumentos

2.5 Alcances y limitaciones

Capítulo 3 - Resultados

Capítulo 4 - Discusión

Capítulo 5 - Conclusiones

5.1 Cumplimiento de objetivos y aportes

5.2 Producción asociada al proyecto

5.3 Líneas de trabajo futuras

Anexos

Referencias

Índice de Tablas

Tabla 1: Cantidad de documentos encontrados por tipo de documento.	22
Tabla 2: Estado del Arte de proyectos similares.	31

Índice de Figuras

Figura 1: Ejemplo de un proceso de electroquímica en donde se presenta una celda electroquímica. (Chang, 2002)-----	14
Figura 2: Reactor con electrodos monopolares conectados en paralelo (Arango, 2005)-----	15
Figura 3: Histórico de publicaciones encontradas por año, de acuerdo con las palabras clave y también teniendo en cuenta el rango de fechas 2006-2021 -----	18
Figura 4: Grafico de anillo en donde se observa el porcentaje de documentos publicados por tipo de publicación. -----	19
Figura 5: Grafico de tortas en donde se observa el porcentaje de documentos publicados por tipo área de investigación. -----	20
Figura 6: Grafico de barras horizontal en donde se observa la cantidad de documentos publicados por país. -----	21
Figura 7: Grafico de barras horizontal en donde se observa la cantidad de documentos publicados por autor. -----	22
Figura 8: Geometría del reactor batch de placas paralelas en donde se simulará el proceso de electrocoagulación de (Pb^{2+}). En Azul el electrolito de agua contaminada con (Pb^{2+}) y en gris los electrodos de placas paralelas. -----	34
Figura 9: Mallado del electrolito, dentro del reactor. -----	34
Figura 10: Tiempos en minutos en los cuales se simulará el proceso de electrocoagulación. -----	35
Figura 11: En la imagen de la izquierda se muestra el mismo reactor con las placas más separadas. En la imagen de la derecha se muestra el mismo reactor pero con las placas más unidas.-----	35
Figura 12: A continuación se definen las dimensiones del reactor y de los electrodos, los potenciales en el equilibrio, la conductividad del electrolito, la masa molar del plomo, la densidad del plomo, los intercambios de densidad de corriente del plomo y del hidrógeno, como también el tiempo de corrida del reactor como parámetros, mientras que la densidad de corriente aplicada desde el ánodo es variable. -----	36

Figura 13: Definición de la física para la geometría del electrolito y de los parámetros y variables presentes en el mismo proceso. En este caso se escogió una física que representa una Distribución de Corriente Secundaria. -----37

Figura 14: Definición de la geometría, de los parámetros y variables para el electrolito.-----37

Figura 15: Definición de la geometría, de los parámetros y variables para el aislamiento. -----38

Figura 16: Definición de variables iniciales en el proceso de electrocoagulación de (Pb^{2+}), teniendo en cuenta la distribución de corriente secundaria. -----38

Figura 17: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se define la reacción presente en el mismo. -----39

Figura 18: Definición de la geometría del otro ánodo. Los parámetros y las reacciones a definir son los mismos que los expuestos en la Figura 15. -----39

Figura 19: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se definen las reacciones presentes en el mismo. -----40

Figura 20: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se definen las reacciones presentes en el mismo. -----41

Figura 21: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4cm, para tres momentos diferentes de tiempo. -----43

Figura 22: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo. -----44

Figura 23: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo. -----45

Figura 24: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del

reactor con una distancia de 4 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia) -----46

Figura 25: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia) -----48

Figura 26: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia) -----49

Figura 27: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m²) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia) -----50

Figura 28: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m²) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia) -----51

Figura 29: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m²) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo. -----53

Figura 30: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable. -----54

Figura 31: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría

del reactor con una distancia de 4.5 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable. -----55

Figura 32: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable. -----56

Figura 33: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm, en donde se tomó como muestra representativa un tiempo de 15 minutos. -----58

Figura 34: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo. -----59

Figura 35: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm. -----61

Figura 36: Relación entre la corriente aplicada en el anodo y la superficie potencial del electrolito media para las tres distintas geometrías. Se puede observar que la relación entre ambas variables es de tipo lineal. -----62

Figura 37: Densidad de corriente de flujo máxima de acuerdo a la corriente aplicada para las tres distintas configuraciones del reactor. -----62

Figura 38: Relación entre la corriente aplicada en el ánodo y el potencial del electrolito externo máximo para las tres distintas geometrías. Se puede observar que la relación entre ambas variables es de tipo lineal. -----63

Índice de Anexos

Superficie Potencial de Electrolito (Media) Anexo A -----	66
Densidad de Corriente (Max) Anexo B-----	67
Potencial Electrico Ext (min) Anexo C-----	68
Essentials of Postprocessing and Visualization in COMSOL Multiphysics (http://www.addlink.es/images/pdf/COMSOL_HANDBOOK_SERIES_Essentials_of_Post processing_and_Visualization.pdf) Anexo D -----	69

Introducción

Contextualización:

La electrodeposición o electrocoagulación, es un proceso mediante el cual se hace el uso de la electricidad como también de un ánodo y un cátodo metálicos en un medio líquido conductor para generar una diferencia de potencial que induzca la reacción electroquímica inducida en favor de aumentar un ion de metal específico disuelto, el cual proviene del ánodo reduciendo la cantidad de este en forma sólida y la reducción de otro ion metálico que esté disuelta en dicho medio, el cual retorna a su estado sólido (Arango, 2005). La mejor manera de comprender este proceso es por medio de una celda electroquímica, la cual se muestra a continuación.

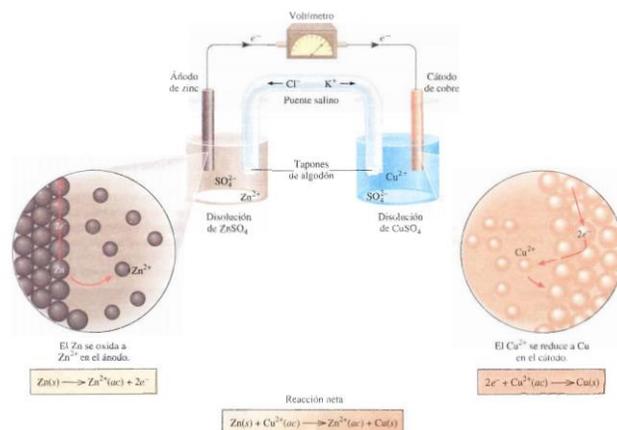


Figura 1: Ejemplo de un proceso de electroquímica en donde se presenta una celda electroquímica. (Chang, 2002)

Para realizar dicho proceso han existido varios tipos de reactores, entre los cuales se mencionan los siguientes: 1. Reactores tipo batch con electrodos monopolares conectados en paralelo. 2. Reactores tipo batch con electrodos monopolares conectados en serie. 3. Reactores tipo filtra-prensa. 4. Reactores de electrodo cilíndrico rotativo. 5. Reactor de lecho fluidizado (Arango, 2005).

La simulación de fenómenos de electroquímica tiene en cuenta todos los fenómenos físicos, químicos y eléctricos, los cuales se representan en forma de ecuaciones simultáneas, que pueden incluir ecuaciones diferenciales parciales y que deben tener en cuenta la geometría a estudiar, sus fronteras a las cuales se les debe definir un mallado; para poder solucionar las mismas por medio del método de elementos finitos. En este caso, dicha geometría y la simulación se llevarán a cabo por medio del software Comsol (módulo de electroquímica), el cual es la mejor herramienta para simular dichos fenómenos acoplados para representar de la mejor forma el proceso de electrocoagulación (Comsol, Sf).

Para este caso se escogerá un reactor tipo batch con electrodos monopolares conectados en paralelo, al cual se le definirá un corte axial 2D para analizar los fenómenos físicos, químicos y eléctricos presentes en el mismo, y de esta forma poder analizar las variables de corriente, voltaje y distancia de las placas óptimas por medio de la corrida de distintas simulaciones, mediante los cuales se pueda definir en cuales valores se puede obtener una mayor deposición del metal de interés que en este caso es el plomo.

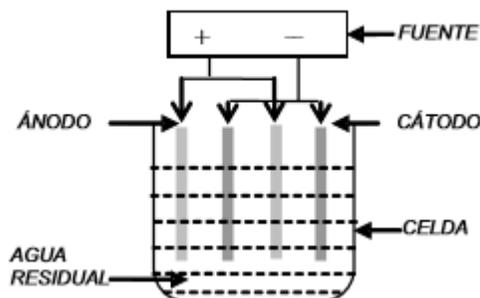


Figura 2: Reactor con electrodos monopolares conectados en paralelo (Arango, 2005)

En el presente artículo, se pretende realizar énfasis en el proceso de electrocoagulación, y sus variables críticas (corriente, voltaje y distancia entre placas), esto debido a que es un proceso mediante el cual se pueden decantar metales disueltos en agua, que para futuras investigaciones permiten definir la mejor forma para remover algunos metales pesados de industrias en las cuales se generan este tipo de residuos.

Planteamiento del problema:

Para los reactores en batch monopolares en paralelo, se han realizado gran cantidad de trabajos experimentales para encontrar los parámetros óptimos de corriente, voltaje y distancia entre placas para obtener la mayor cantidad de metal depositado proveniente de una solución contaminada con dicho metal; lo cual aumenta los costos debido a que es necesario estar reemplazando los ánodos como también de realizar una calibración del mismo para que en la replicación de cada corrida del experimento se lleve a cabo dicha corrida con el mismo peso de los ánodos y cátodos para cada corrida, así como calibrar los instrumentos de medición tales como las balanzas, los voltímetros y amperímetros y adicionalmente se debe contar con un buen equipo de espectrofotometría que sea capaz de medir la concentración de la solución contaminada antes y después de realizar la corrida experimental. Finalmente se debe asegurar que la medición de la distancia entre placas sea lo más precisa posible al realizar las variaciones de esta.

Por otro lado, al realizar este estudio por medio de un software de simulación que tenga en cuenta todos los fenómenos físicos, químicos y eléctricos presentes en el proceso de electrocoagulación, permite tener un grado de precisión y exactitud mucho mayor para cada corrida, debido a que estas dos variables dependen principalmente del tipo de mallado que se realice en la geometría del reactor a trabajar, que en este caso sería una geometría 2D. Esto permitiría aumentar la cantidad de corridas, cambiando los parámetros de corriente, voltaje y distancia entre placas, permitiendo obtener resultados de cada corrida en un lapso de tiempo máximo de 15 minutos (dependiendo de la capacidad de memoria RAM y tipo de procesador del equipo de cómputo que se tiene dispuesto para desarrollar cada corrida), debido a que al realizar las corridas en una geometría 2D, la velocidad con la cual se obtienen los resultados de dicha simulación es mucho más rápida que al realizarlo en una geometría 3D, en donde se podrían obtener resultados en lapsos entre 45 minutos y 1 hora y media por corrida (Barreto et al, 2010).

Entonces en este proyecto se pretende saber cómo determinar los parámetros óptimos de voltaje, corriente y distancia entre placas para una geometría 2D de un reactor de tipo batch, en donde se tienen electrodos monopolares en paralelo. Es muy importante que se defina que el tiempo en el cual se pretende realizar la corrida sea de 30 minutos de acuerdo con la literatura, ya que es un tiempo razonable en el cual se puede dejar actuando los electrodos para lograr la deposición de una cantidad razonable de Plomo (Pb^{2+}).

El objetivo general de este proyecto es determinar los parámetros óptimos de voltaje, corriente y distancia entre placas para una geometría 2D de un reactor tipo batch en donde se tienen electrodos monopolares en paralelo, por medio de una búsqueda local, comenzando primero con las variaciones de corriente normales de un reactor de este tipo, encontrando el parámetro de corriente óptimo (dejando fijas las distancias entre placas y el voltaje), luego con las variaciones de voltaje (dejando fijas la distancia entre placas y la corriente óptima), y finalmente variando la distancia entre placas (dejando fijas la corriente y el voltaje óptimos).

Los objetivos específicos para lograr dicho objetivo son: 1. Definir y elaborar la geometría 2D para un reactor tipo batch con 4 electrodos monopolares en paralelo. 2. Seleccionar el mallado más apropiado para dicha geometría 2D, teniendo en cuenta tiempos de simulación y resultados con menos posibilidad de errores. 3. Configurar los parámetros de corriente, voltaje y distancia entre placas en el módulo de electroquímica para una corrida inicial de partida (teniendo en cuenta condiciones normales). 4. Definir la concentración de plomo (Pb^{2+}) presente en el reactor inicialmente, como también la aleación de los ánodos presentes en el proceso de electrocoagulación. 5. Variar primero los parámetros de corriente, luego los de voltaje y finalmente la distancia entre las placas para encontrar los parámetros óptimos con mayor cantidad de electrodeposición de plomo, y desde otro punto de vista de remoción de plomo de la solución contaminada inicial de dicho material. Este último objetivo se desarrollará por medio del algoritmo de búsqueda local.

Capítulo 1 – Fundamentación conceptual y teórica

Bibliometría:

Se buscaron las palabras clave Simulation, Electrocoagulation y Reactor como también la frase clave Simulation model for electrocoagulation reactor, para un rango de fechas de publicación entre el año 2006 y el año 2021 en donde se encontraron los siguientes resultados en Scopus.

La cantidad de documentos encontrados fue de 21, de acuerdo con lo observado en la gráfica 1. La tendencia de publicaciones por año relacionadas con temáticas asociadas directamente a los modelos de simulación de reactores para procesos de electrocoagulación en las últimas dos décadas (ventana temporal seleccionada), tiene un incremento notorio a partir del año 2015; antes de este año, la publicación científica indexada en esta temática se mantenía constante con una presencia media de un artículo por año. Esta situación presenta la consolidación del uso de los modelos de simulación para este tipo de procesos.

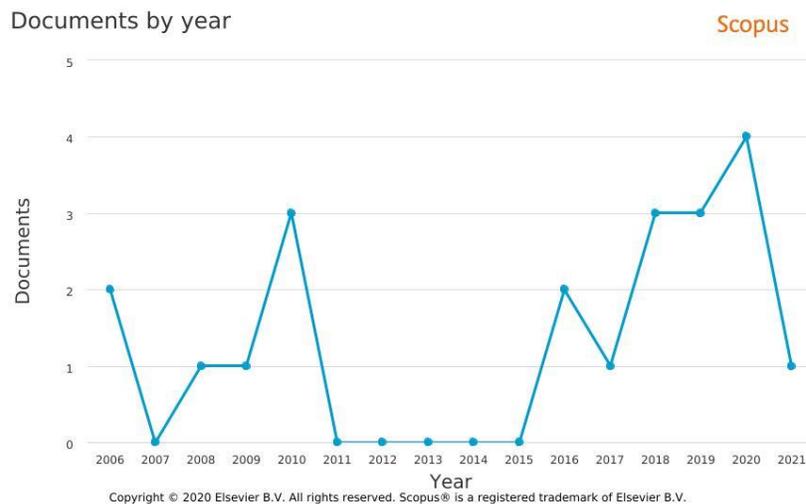


Figura 3: Histórico de publicaciones encontradas por año, de acuerdo con las palabras clave y también teniendo en cuenta el rango de fechas 2006-2021

Con respecto al total obtenido en la búsqueda, se reportan mayoritariamente documentos tipo artículo (57,1%), *conference papers* (28,6%), revisiones (9,5%) y *conference reviews* (4,8%) (ver gráfico 2). Este dato permite establecer que el área de publicaciones tipo revisión puede ser un campo de trabajo con mayor posibilidad de publicación en revistas indexadas en esta base de datos, en la medida en que no ha sido explorado con suficiencia. Por otro lado, tales revisiones son desde miradas europeas y africanas, sin que hasta el momento en estas bases de datos aparezcan iniciativas latinoamericanas que den cuenta de la evolución del fenómeno en la región, lo que hace mayormente atractivo el interés de construir revisiones de este tipo.

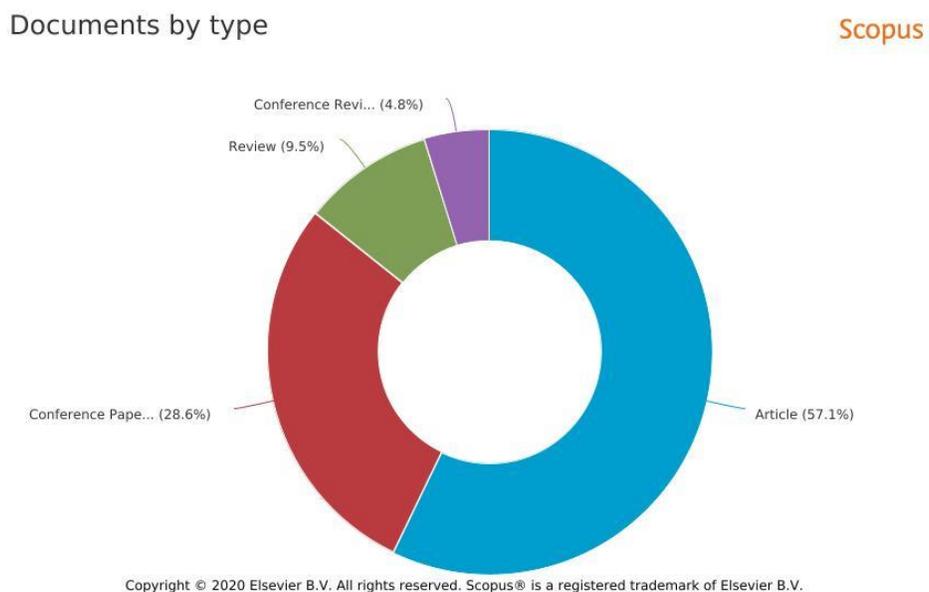


Figura 4: Gráfico de anillo en donde se observa el porcentaje de documentos publicados por tipo de publicación.

Como se observa en el gráfico 3, los trabajos reportados en la búsqueda empleando las palabras clave, se encuentran en su mayoría dentro del área de las ciencias ambientales (28,9%), seguido por trabajos enmarcados dentro de los estudios relacionados con Ingeniería (26,3%); las siguientes áreas que más publica trabajos relacionados con modelos de simulación para electrocoagulación, es Ingeniería Química (10,5%), Química (7,9%), ciencias de la computación (7,9%), ciencia de materiales (7,9%), matemáticas (5,3%), Tierra y Planeta (2,6%) y Ciencias Sociales (2,6%). Esto muestra que, si bien el nicho natural de la reflexión para los modelos de

simulación para electrocoagulación con reactores, se encuentra en el área de ciencias ambientales, un segmento de fundamental importancia es el estudio de los contenidos asociados al área de Ingeniería, sumando la química, la Ingeniería química y las ciencias de la computación, que engloban esa iniciativa de estudio económico (52,6%), lo cual supera el porcentaje correspondiente a las ciencias ambientales. Por este motivo, se hace relevante comprender que una variante de investigación clara estará asociada a las reflexiones de los modelos de simulación para electrocoagulación en aguas residuales como elementos propios de la Ingeniería y de las industrias.

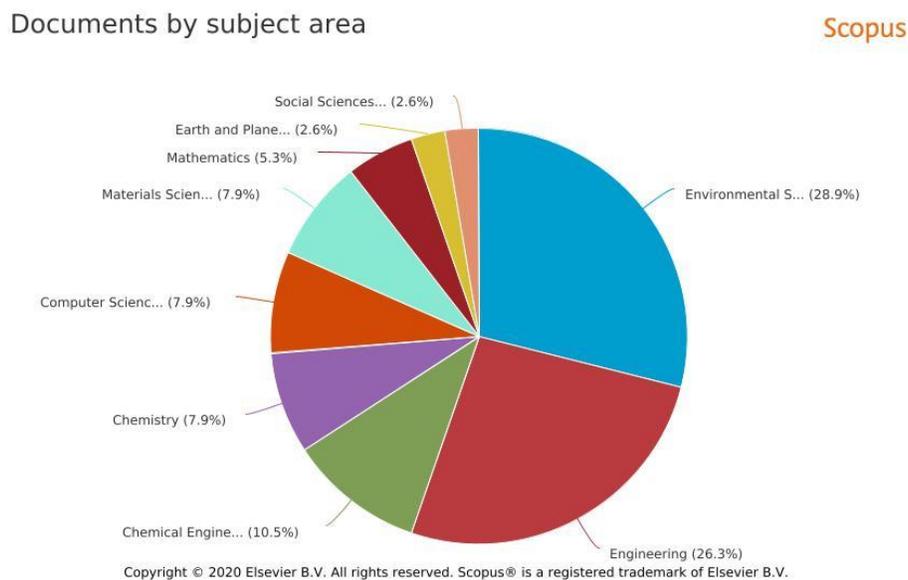


Figura 5: Grafico de tortas en donde se observa el porcentaje de documentos publicados por tipo área de investigación.

Clasificando los documentos según el país de origen dentro de la ventana temporal seleccionada, se encuentra que México lidera con 4 publicaciones relacionadas con el tema, seguido por Ucrania con 3 publicaciones, Brasil, Francia y Marruecos (con 2 publicaciones cada uno); y Canadá, Chile, China, Croacia e India (1 publicación cada uno).

Tal situación conlleva a poder posicionar el trabajo publicado en SCOPUS en esta área para el país, como un trabajo pionero en la materia que coadyuve a la consolidación de una tendencia de estudio a nivel regional, latinoamericana.

Documents by country or territory

Compare the document counts for up to 15 countries/territories.

Scopus

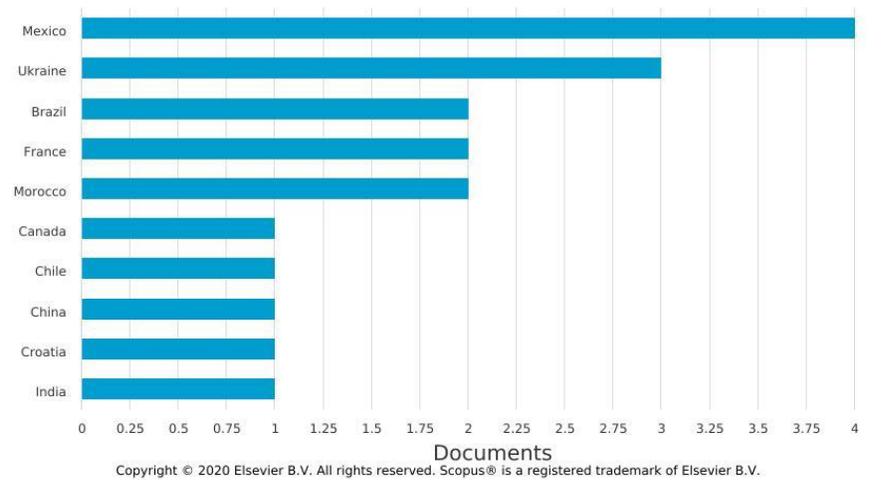


Figura 6: Grafico de barras horizontal en donde se observa la cantidad de documentos publicados por país.

Discriminando las publicaciones reportadas en la búsqueda por autor (Gráfico 5), se encuentra que el más publicado sobre la temática es el Ucraniano Andrii P. Safonyk (safonik@ukr.net) del Department of the Automation, Electrotechnical and Computer-Integrated Technologies, National University of Water and Environmental Engineering, Soborna Street, 11, Rivne 33028, Ukraine. Lo que confirma la relevancia de la aplicación de modelos matemáticos a los estudios asociados a las ciencias ambientales y a la preservación de recursos naturales no renovables como el agua.

Documents by author

Compare the document counts for up to 15 authors.

Scopus

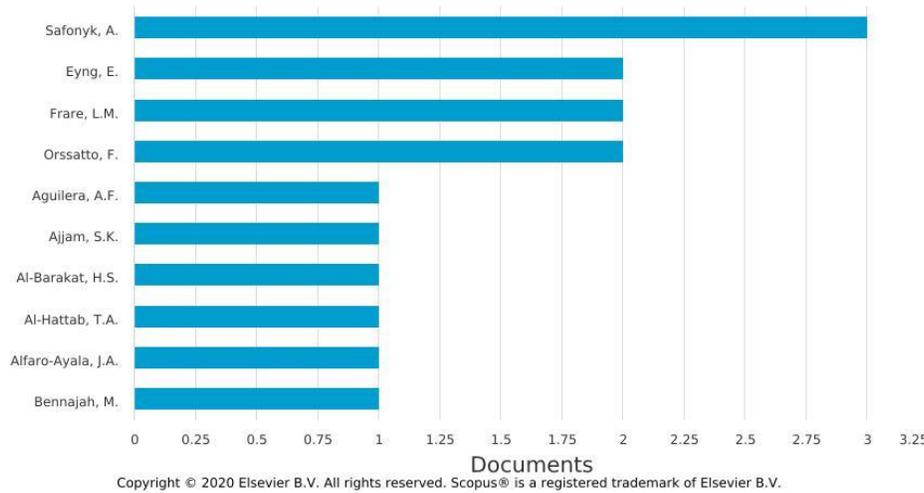


Figura 7: Grafico de barras horizontal en donde se observa la cantidad de documentos publicados por autor.

En resumen, se encontraron los siguientes estudios y/o investigaciones clasificadas por tipo de documento. Es importante aclarar que dos de estos documentos de esta bibliometría no se tuvieron en cuenta dos para el estado del arte, debido a que se encontraban en un idioma diferente al inglés o al español, idiomas que ninguno de los integrantes del equipo de investigación domina.

TIPO DE DOCUMENTO	CANTIDAD
Artículo	12
Conference Paper	6
Review	2
Conference Review	1
<i>Total</i>	<i>21</i>

Tabla 1: Cantidad de documentos encontrados por tipo de documento.

Estado del Arte:

A continuación, se expone un cuadro resumen mediante el cual se listan los documentos encontrados en el estudio bibliométrico en orden cronológico descendente, en donde se resaltan las técnicas más relevantes y los avances más significativos para definir el enfoque innovador de esta investigación, que haga un aporte en este campo para el campo de estudio en el cual se enfoca este estudio.

TÍTULO	ARTICULO REVISIÓN CONFERENCIA	AUTORES (AÑO)	TÉCNICAS UTILIZADAS	SIMULACIÓN EXPERIMENTAL AMBOS	AVANCES
Electrocoagulation as an affordable technology for decontamination of drinking water containing fluoride: A critical review	REVISIÓN	Locksley F. Castañeda, Juan F. Rodríguez, José L. Nava. (2020)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Es una revisión en donde desde la simulación, se estudia un artículo de Vásquez et al, en donde se analiza el proceso de remoción de flúor en un reactor de electrocoagulación, para una simulación CFD. 2. En una segunda revisión, se estudia el artículo de Lu et al, se utiliza el software COMSOL MULTIPHYSICS para una simulación 2D, en donde se estudiaron 2 electrodos de platos en donde la solución pasaba entre ellos, para la remoción de iones de Aluminio. 3. En una tercera revisión, se estudia el artículo de Song et al, en donde se lleva a cabo una SIMULACIÓN NUMÉRICA de un proceso de electrocoagulación para un reactor 3D de placas paralelas. 	AMBOS	<ol style="list-style-type: none"> 1. En la primera revisión se estudiaron la influencia de la velocidad de entrada, en la dispersión de la solución, en el transporte de masa, y en las distribuciones de corriente a través de los electrodos. 2. En la segunda revisión, al modificar las velocidades de entrada de fluido y a diferentes densidades de corriente iniciales, al final se obtienen una deposición de la mayoría del ion de aluminio presente en la solución. 3. Se contemplaron los perfiles de distribución de potencial, de flujo y de transferencia de masa. Se estudiaron los perfiles de velocidad de flujo a diferentes velocidades de entrada mostrando ausencia de zonas recirculación o de zonas de estancamiento. En conclusión, encontrar simulaciones para estudios específicos como el de esta revisión para la remoción de cloro, no son tan fáciles de conseguir.

Modeling and Simulation of Wastewater Electrocoagulation Reactor	ARTICULO	Huda Saeed. Al-Barakat, Falah Kaify. Matloub, Sata Kathum. Ajjam & Tahseen Ali. Al-Hattab. (2020)	Se realizó el modelamiento y la simulación de un reactor 3D para la deposición de plomo con un ánodo de aluminio. Se utilizó un reactor batch en donde se modificaron los parámetros de corriente, de voltaje y de revoluciones por minuto de agitación del reactor, se estudió la evolución a través del tiempo de los perfiles de concentración de hierro y aluminio. Al final se corroboraron los resultados desde el punto de vista experimental.	AMBOS	Se compararon los resultados teóricos y los experimentales, los cuales fueron muy similares. Se encontró un óptimo de remoción de plomo a unas revoluciones máximas.
Modeling, Analysis and Automation of Wastewater Treatment by Electrocoagulation Method	CONFERENCIA	Andrii Safonyk, Ivan Tarhonii, Andrii Rudyk , and Ivanna Hrytsiuk. (2020)	Se construyó desde el punto de vista teórico un sistema de tratamiento de aguas residuales, en base a un modelo generalizado propuesto del proceso. Se desarrolló un modelo de electrocoagulación considerando la configuración espacial de los platos. Se compararon los resultados teóricos con los de la simulación. Se tuvo en cuenta el cromo como contaminante del agua.	AMBOS	Se construyó una gráfica de la concentración del cromo en el agua residual a través del tiempo para diferentes corrientes de entrada a nivel experimental. Lo mismo se realizó para diferentes configuraciones de las placas del reactor. En el programa de SIMANTIC de SIEMMENS se desarrolló la simulación del mismo proceso y se replicó el experimento. Se corroboró que los resultados de las simulaciones no excedían el 6% en relación con los resultados experimentales.
Modeling and Automation of the Electrocoagulation Process in Water Treatment	ARTICULO	Andrii Safonyk, Andrii Bomba, and Ivan Tarhonii. (2019)	Se llevó a cabo una simulación desde el punto de vista eléctrico en donde se controlaron las variables de voltaje y de corriente para un sistema de control mediante Simulink. Por otro lado,	SIMULACIÓN	Se estudiaron las curvas de concentración de nickel como contaminante a través del tiempo, teniendo en cuenta diferentes inyecciones de corriente.

			la simulación CFD se llevó a cabo por medio de Matlab.		
Modeling and Simulation in Engineering Modeling of the Electrocoagulation Processes in Nonisothermal Conditions	ARTICULO	Andrii Safonyk and Olena Prysiashniuk. (2019)	Se realizó un modelamiento y simulación del proceso de electrocoagulación, bajo condiciones no isotérmicas. Se realizó esta simulación para una geometría 2D de placas paralelas.	SIMULACIÓN	Se estudiaron los perfiles de concentración y de temperatura en dicho reactor, en donde se evidenciaron zonas muertas en donde la deposición del hierro se ve afectada, debido a que la difusión se ve afectada por la temperatura.
A Hydrodynamic and Mass Transfer Study Based on Modeling and Numerical Simulation of an Electrocoagulation Process for Sulfate Ions Removal	ARTICULO	Gilberto Carreño, P. Vizguerra Morales, J. C. Baltazar Vera, M. J. Puy y Alquiza, X. V. Delgado Galván, J. J. Mora Rodríguez and A. F. Aguilera. (2018)	Elementos Finitos, Herramienta FLUENT. Reactor de Placas Paralelo continuo, para la geometría se utilizó el programa GAMBIT. Se utiliza el modelo de Euler.	SIMULACIÓN	Se revisaron los parámetros de presión, magnitud de la velocidad del fluido, velocidad, numero de reynolds, el análisis de la variación residual de la concentración de sulfato y finalmente el comportamiento simulado vs el experimental de la concentración de entrada y de salida de sulfatos para diferentes concentraciones iniciales de sulfato en relación con la velocidad de entrada del fluido.
Numerical simulation and exploration of electrocoagulation process for arsenic and antimony removal: Electric field, flow field, and mass transfer studies	ARTICULO	Peipei Song, Qianqian Song, Zhaohui Yang, Guangming Zeng, Haiyin Xu, Xin Li, Weiping Xiong. (2018)	Se realizó una simulación para un reactor continuo, en donde se estudiaron las distribuciones de potencial, de corriente, la velocidad de fluido para la remoción de Arsénico y Estaño por medio del software COMSOL Multiphysics. Se estudió un reactor de placas con distintos niveles de aislamiento, como también de la distancia de los electrodos. Por otro lado, se analizaron los tiempos de	SIMULACIÓN	Se determinaron las configuraciones y las variables en donde se presentarán mayores remociones de los metales contaminantes y que presentarán menos cantidad en volumen de zonas muertas

			residencia para dos tipos diferentes de reactores. Finalmente se revisaron las concentraciones de los metales contaminantes con diferentes tiempos de tratamiento.		
Optimization of the treatment of wastewater from a slaughterhouse and packing plant by the combination of electrocoagulation and tannin-based coagulant	ARTICULO	Fábio Orssatto, Maria Hermínia Ferreira Tavares, Flávia Manente da Silva, Eduardo Eyng, Leandro Fleck, Laercio Mantovani Frare. (2018)	En este estudio se realizó un proceso mixto de electrocoagulación y de adición de un coagulante para la remoción de contaminantes de un matadero. Se evaluaron las variables de la demanda química de oxígeno, turbidez, color, nitrógeno de Kjeldahl total, la combinación de electrocoagulación y coagulación orgánica, la corriente eléctrica óptima, el tiempo de retención hidráulico óptimo, y la concentración de coagulante óptima	EXPERIMENTAL	Se encontraron los parámetros óptimos para las variables mencionadas y se obtuvieron modelos matemáticos para el color y la remoción de la turbidez.

<p>Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches</p>	<p>REVISIÓN</p>	<p>Hakizimana, Jean Nepo Gourich, Bouchaib Chafi, Mohammed Stiriba, Youssef Vial, Christophe Drogui, Patrick Naja, Jamal. (2017)</p>	<p>Se mencionan los antecedentes y fundamentos teóricos de los procesos de electrocoagulación, los mecanismos de dicho proceso, la especificación de los electrodos de Aluminio y Hierro, los parámetros clave de los procesos de electrocoagulación (entre ellos el efecto de la corriente, pH y alcalinidad, geometría, disposición de los electrodos, distancia entre electrodos, diseño del reactor y conductividad del agua), el modelamiento de los procesos de electrocoagulación (estadístico, basado en conocimiento, basado en mecanismos detallados, modelamiento de la floculación, asentamiento y flotación, complejización y CFD (Modelamiento Dinámico de Fluidos).</p>	<p>AMBOS</p>	<p>Se menciona que COMSOL Multiphysics y ANSYS son de los mejores programas para desarrollar dichas simulaciones para un reactor de electrocoagulación. Advierte de sus limitaciones en cuanto la experticia para generar un mallado apropiado, y que pueden consumir gran cantidad de tiempo debido a que se deben resolver ecuaciones simultaneas que representan diferentes procesos físicos y químicos que consumen memoria RAM del computador. En algunas ocasiones es necesario despreciar ciertos fenómenos como la generación de las burbujas de hidrógeno en estos procesos que pueden hacer que la simulación sea muy difícil de llevar a cabo y que no aportan en los resultados ni las conclusiones del proceso de manera trascendente.</p>
--	-----------------	--	--	--------------	---

<p>Electrocoagulation process applied on pollutants treatment-experimental optimization and fundamental investigation of the crystal violet dye removal</p>	<p>ARTICULO</p>	<p>Mbacké, Maryam Khadim Kane, Cheikhou Diallo, Ndeye Oury Diop, Codou Mar Chauvet, Fabien Comtat, Maurice Tzedakis, Theo. (2016)</p>	<p>2016</p>	<p>Se estudió la remoción de Cristal Violeta como residuo en industrias generalmente de tintes, en un reactor batch de electrocoagulación, utilizando un ánodo de sacrificio de Aluminio, en donde se dio un tiempo de espera de 1 hora. Se utilizó el método de espectrofotometría para medir las concentraciones de Cristal Violeta durante la investigación desarrollada. Se utilizó un reactor simple de dos placas en paralelo para desarrollar dicho estudio.</p>	<p>AMBOS</p>	<p>Se propusieron modelos teóricos para predecir la velocidad de remoción de tintes. Se estudiaron diferentes perfiles de concentración de Cristal Violeta a diferentes pH, diferentes concentraciones iniciales de Cristal Violeta, distancia entre electrodos, densidades de corriente, conductividades de acuerdo con la salinidad del agua y se comparó con los perfiles que se pudieran obtener de acuerdo con la teoría.</p>
<p>Velocity Simulation of an Electrochemical Reactor for Textile Wastewater Treatment</p>	<p>ARTICULO</p>	<p>Claudia Luiza Manfredi Gasparovic¹, Eduardo Eyng², Laercio Mantovani Frare, Larissa de Bortolli Chiamolera Sabbi, Michelle Budke Costa, Fábio Orssatto. (2016)</p>	<p>2016</p>	<p>Se realizo la simulación de un reactor de electrocoagulación a escala piloto de la velocidad de flujo para aguas residuales provenientes del sector textil, para definir el mejor diseño de la celda que consiste en placas paralelas múltiples. que hacen las veces de electrodos. Se tuvieron en cuenta para el estudio la variación del ancho del electrodo y la cantidad de electrodos. Por último, se utilizó el software Comsol Multiphysics para tal fin.</p>	<p>SIMULACIÓN</p>	<p>Se determinó una configuración óptima para tal estudio en términos del ancho del electrodo y la cantidad de electrodos, en donde se obtuvieron los mejores resultados teniendo en cuenta las condiciones de una mezcla apropiada, bajos perfiles de velocidad y la menor cantidad de zonas muertas.</p>

Defluoridation Of Drinking Water By Electrocoagulation / Electroflotation: Kinetic Study	ARTICULO	Mounir Bennajah, Mostafa Maalmi, Yassine Darmane and Mohammed Ebn Touhami. (2010)	2010	Se utiliza un reactor experimental con una válvula de escape de líquido en donde se encuentran presentes dos fases (agua y un gas electrolítico), con recirculación en donde se pretende remover iones de flúor del agua.	EXPERIMENTAL	Se compararon los resultados experimentales de la adsorción de flúor contra tres modelos teóricos. Se revisó las curvas de cinética de reacción experimental para un intervalo de 30 minutos para diferentes intensidades de corriente como también para diferentes concentraciones iniciales de flúor utilizando un modelo de regresión lineal.
Investigation of Electrochemical Variables and Performance of a Continuous Upflow Electrocoagulation Process in the Treatment of Reactive Blue 140	ARTICULO	Chantaraporn Phalakornkule, Benjawan Karakat, Thanawin Nuyut, Tarworn Ruttithiwapanich. (2010)	2010	Se realizó la experimentación y la simulación de un reactor batch de electrocoagulación de flujo ascendente, en donde se utilizó un líquido de contraste. Se optimizaron los siguientes parámetros: El tipo de ánodo de hierro, la distancia entre los electrodos, la densidad de corriente, el tiempo de contacto.	AMBOS	Se obtuvo que para los parámetros óptimos tanto en el experimento como en la simulación fueron satisfactorios a nivel de desempeño, consumo de energía, teniendo en cuenta una distribución uniforme de los platos.
Factors influencing arsenic and nitrate removal from drinking water in a continuous flow electrocoagulation (EC) process	ARTICULO	N. Sanjeev Kumar Sudha Goel. (2009)	2009	Se utilizó un reactor continuo en donde se bombea agua proveniente de un tanque con un solo ánodo y cátodo y un filtro al final para terminar de purificar el agua. Se estudió la remoción de nitratos y de arsénico.	EXPERIMENTAL	Se estudiaron las curvas de remoción de contaminantes a través del tiempo a distintos voltajes, lo mismo se realizó para la turbidez. Se realizaron curvas de tiempos de residencia para la remoción en su totalidad de los contaminantes mencionados. Por último, se estudió el efecto de la concentración inicial en las curvas de concentración.
An empirical model for treatment of arsenic contaminated	ARTICULO	A. M. Garcia-Lara, C. Montero-Ocampo and F. Martinez-Villafañe. (2009)	2009	Se estudió el proceso de remoción del Arsénico de aguas subterráneas mediante la electrocoagulación empelando una configuración de una celda	EXPERIMENTAL	Se pudo descubrir el efecto que tiene la velocidad de flujo con los tiempos de tratamiento, y en los resultados del modelo de cinética propuesto. Se obtuvieron resultados óptimos para los

underground water by electrocoagulation process employing a bipolar cell configuration with continuous flow				bipolar de flujo continuo, utilizando electrodos de hierro. Se utilizó un modelo específico de cinética de reacción de Lagergren.		siguientes parámetros: Tiempos de tratamiento, velocidad de flujo y la densidad de corriente. El modelo cinético propuesto fue verificado y aceptado estadísticamente.
Simulation of a Parallel Plate Electrochemical Reactor Used to Reduce Cr(VI) Via Electrocoagulation Method	ARTICULO	Long Cai and R.E. White. (2008)	2008	Se desarrolló un modelo para simular un reactor de platos paralelos para depositar cromo mediante un ánodo de hierro. Se estudiaron los efectos de la geometría del reactor, la velocidad de entrada, la concentración del electrolito de soporte y el potencial de conversión.	SIMULACIÓN	De acuerdo con los resultados obtenidos, se recomendó un valor óptimo de los parámetros que se variaron dentro del estudio, para obtener la mayor deposición del metal contaminante. Las variables de interés más importantes fueron la concentración de hierro, de hidróxido, la distancia entre los platos, la densidad de corriente y el voltaje.
Optimization of the electrocoagulation process for the removal of copper, lead and cadmium in natural waters and simulated wastewater	ARTICULO	Claudio Escobar, César Soto-Salazar, M. Inés Toral. (2006)	2006	Se realizó el proceso de electrocoagulación, en donde se optimizaron las variables de pH, velocidad de flujo, y densidad de corriente para la remoción de Cobre, Plomo y Cadmio, en un reactor continuo de placas. Se definieron unas concentraciones determinadas de dichos metales.	EXPERIMENTAL	Se encontró desde el punto de vista estadístico una relación lineal entre la densidad de corriente y la cantidad de metal depositado.

<p>The use of artificial neural networks (ANN) for modeling of decolorization of textile dye solution containing C. I. Basic Yellow 28 by electrocoagulation process</p>	<p>ARTICULO</p>	<p>N. Daneshvar, A.R. Khataee, N. Djafarzadeh. (2006)</p>	<p>2006</p>	<p>Se realizó un proceso de electrocoagulación para la remoción de C. I. Basic Yellow 28, en donde se tuvieron las variables operacionales tales como la densidad de corriente, el pH inicial de la solución, el tiempo de la electrólisis, la concentración inicial del tinte, la distancia entre los electrodos, el tiempo de retención y la conductividad de la solución para determinar los parámetros óptimos de electrocoagulación.</p>	<p>EXPERIMENTAL</p>	<p>Se utilizó un modelo de Redes Neuronales Artificiales para predecir la eficiencia decoloración con información experimental proveniente de un reactor batch. Se realizó la comparación entre la información obtenido por el modelo y la experimental, teniendo resultados satisfactorios desde el punto de vista estadístico</p>
--	-----------------	---	-------------	---	---------------------	---

Tabla 2: Estado del Arte de proyectos similares.

Teniendo en cuenta los estudios previos, la mayoría de las investigaciones relacionadas con los procesos de electrocoagulación tienen en cuenta la simulación de los fenómenos físicos presentes en dicho proceso (ya sea como un estudio aislado, o un estudio mixto comparativo con un estudio experimental de validación). Por otro lado, la herramienta Comsol es una tendencia actual en los estudios más recientes. Adicionalmente, varios de dichos estudios tienen en cuenta un reactor de placas paralelas, que en su mayoría manejan un proceso continuo, por lo cual incluir un proceso Batch sería algo innovador. Además, en los procesos Batch de Electrocoagulación se han tenido en cuenta tiempos de residencia o de espera de 30 minutos dentro del reactor, para obtener una electrodeposición óptima. Finalmente, la remoción de plomo no ha sido tan ampliamente estudiada en el campo experimental, por lo que sería interesante incluir un estudio de este tipo.

De acuerdo con lo revisado en los artículos mencionados en el estado del arte, es viable poder revisar un reactor de placas paralelas, en el cual se estudie la deposición de (Pb^{2+}) como material contaminante en aguas residuales en

donde se modifiquen las variables de corriente y de distancia entre placas, para estudiar la deposición del metal contaminante. Por otro lado, se tendrá en cuenta una distribución de corriente secundaria, ya que tanto el líquido como el sólido juegan una parte fundamental en dicho proceso de electrocoagulación, en donde las placas de electrodos (compuestas de ánodos y de cátodos) van a jugar un papel esencial en este proceso, más sin embargo la turbidez del agua no se tendrá en cuenta para comenzar a trabajar en un estudio preliminar de la electrodeposición de (Pb^{2+}).

Capítulo 2 - Aplicación y Desarrollo

2.1 Tipo y Diseño de Investigación

En este tipo de investigación, se pretenden buscar los parámetros óptimos de corriente aplicada y de distancia entre placas para obtener la mayor cantidad de (Pb²⁺) depositado. Para este caso, se realizará un diseño de experimentos para encontrar los parámetros óptimos, en donde se definirá el efecto de ambas variables sobre la deposición del metal disuelto en la simulación de aguas residuales en donde esté presente dicho componente.

La física para escoger en Comsol Multiphysics es la de una distribución de corriente secundaria, en donde se puedan definir las reacciones y los parámetros de corriente, voltaje, y de densidad y peso molar tanto de los ánodos, cátodos y de la solución para poder definir en su totalidad todos los parámetros necesarios para correr este tipo de ecuaciones físicas.

Por otro lado, se realizarán curvas de acuerdo con la cantidad de corriente aplicada para cada una de las geometrías, en donde la variable respuesta será la cantidad de (Pb²⁺) depositado y en donde se determinará una relación estadísticamente significativa.

2.2 Definición de la geometría y el mallado

Se incluirá una geometría 2D de placas paralelas, en donde se tendrán en cuenta 2 ánodos y 2 cátodos de tipo batch, en el cual se incluirá una solución de agua con plomo la cual reaccionará por un tiempo determinado y en donde el plomo se depositará en los cátodos. Las dimensiones del reactor son de 30 cm x 50 cm. Por otro lado el grosor de las placas es de 2.25 cm y el largo es de 40 cm.

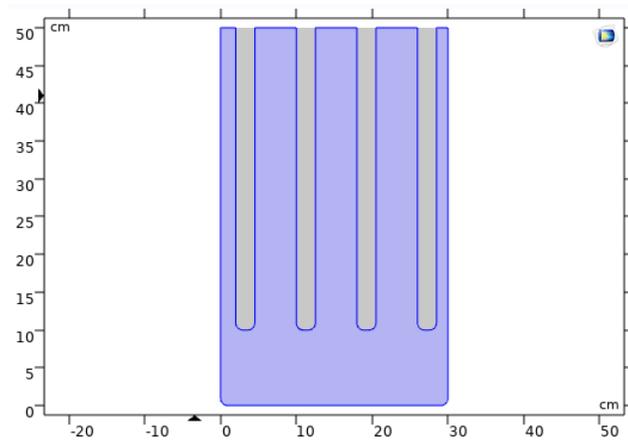


Figura 8: Geometría del reactor batch de placas paralelas en donde se simulará el proceso de electrocoagulación de (Pb^{2+}). En Azul el electrolito de agua contaminada con (Pb^{2+}) y en gris los electrodos de placas paralelas.

Inicialmente, se utilizará una distancia entre placas de 4cm. Por otro lado, se utilizará un mallado fino, el cual se puede configurar en Comsol y que se muestra a continuación.

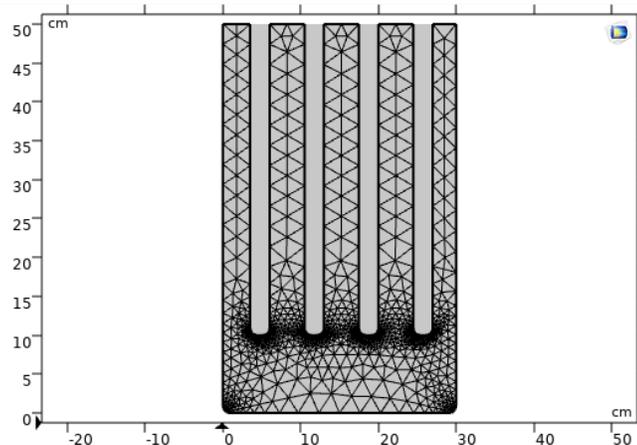


Figura 9: Mallado del electrolito, dentro del reactor.

Por otro lado, se realizarán 3 corridas a los 0 minutos, a los 15 minutos y a los 30 minutos, para poder estudiar el comportamiento de dicho reactor. La configuración en Comsol se puede observar en la siguiente imagen.

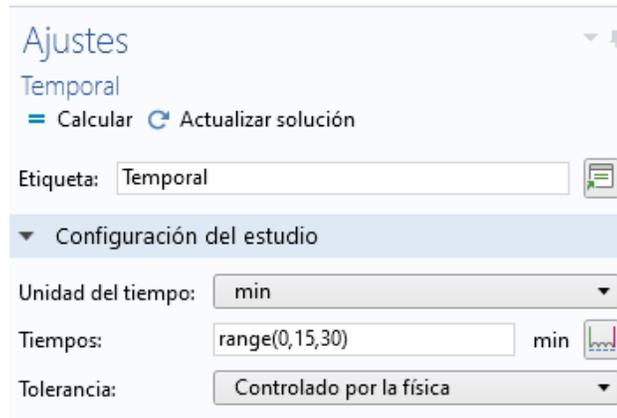


Figura 10: Tiempos en minutos en los cuales se simulará el proceso de electrocoagulación.

Las otras dos configuraciones que se tendrán en cuenta, en donde se modifica la separación entre placas de acuerdo con la Imagen 10 con distancias de 4.5 cm y de 2.5 cm respectivamente, las cuales se pueden apreciar a continuación:

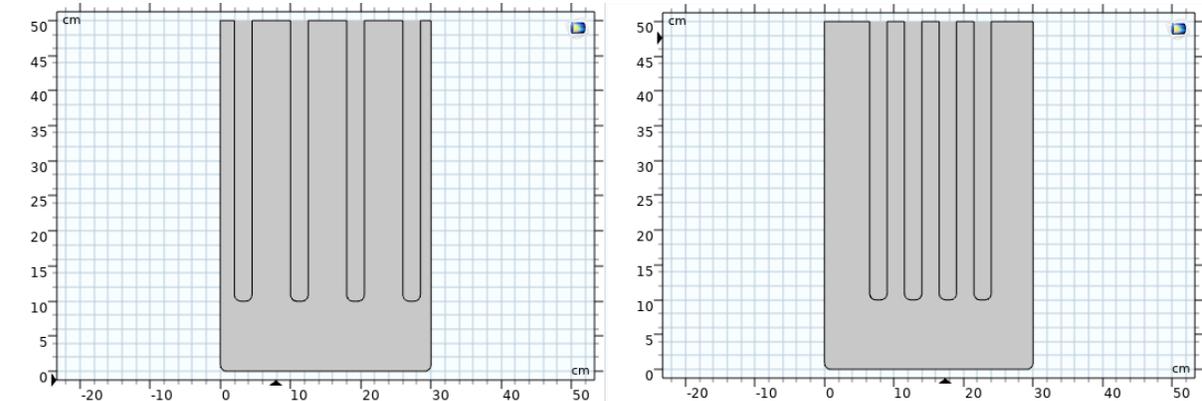


Figura 11: En la imagen de la izquierda se muestra el mismo reactor con las placas más separadas. En la imagen de la derecha se muestra el mismo reactor pero con las placas más unidas.

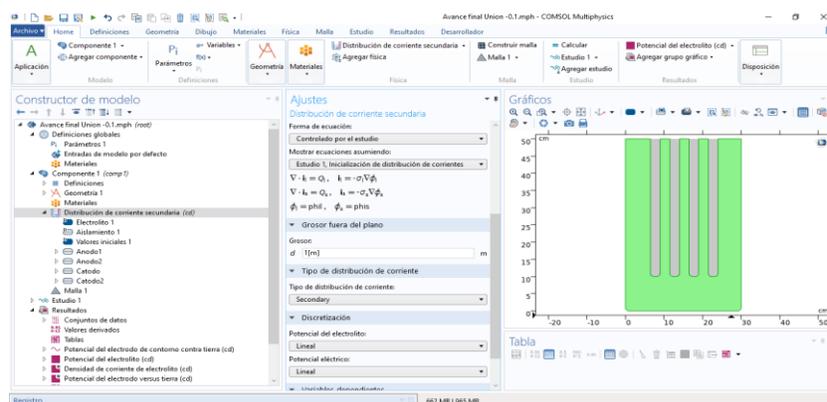
2.3 Definición de Parámetros, variables y ecuaciones físicas y químicas participantes.

Primero que todo, se deben definir los parámetros y las variables para las ecuaciones físicas y químicas, las cuales se definen a continuación.

Nombre	Expresión	Valor	Descripción
Reactor	30.0[cm]	0.3 m	Alto
Reactor2	50.0[cm]	0.5 m	Ancho
Anodo	2.5[cm]	0.025 m	Alto
Anodo2	40.0[cm]	0.4 m	Ancho
Eeq_Pb	-1.46[V]	-1.46 V	Potencial de equilibrio Pb
lavg	-0.00001[A/dm^2]	-0.001 A/m ²	DENSIDAD DE CORRIENT...
kappa	2[S/m]	2 S/m	Electrolito de conductivi...
M_Pb	207.19[g/mole]	0.20719 kg/mol	Masa molar Pb
Rho_Pb	11340[kg/m^3]	11340 kg/m ³	Densidad Pb
lo_Pb	0.000000000001[A/m^2]	1E-12 A/m ²	Intercambio de densidad...
lo_H	2e-5[A/m^2]	2E-5 A/m ²	Intercambio de densidad...
Tiempo	30[min]	1800 s	Tiempo de corrida

Figura 12: A continuación se definen las dimensiones del reactor y de los electrodos, los potenciales en el equilibrio, la conductividad del electrolito, la masa molar del plomo, la densidad del plomo, los intercambios de densidad de corriente del plomo y del hidrógeno, como también el tiempo de corrida del reactor como parámetros, mientras que la densidad de corriente aplicada desde el ánodo es variable.

Luego, se debe definir la física, en la cual se acordó una distribución de corriente secundaria. Las ecuaciones de potencial del electrolito y del potencial eléctrico se definen de forma lineal. Por otro lado, dichos potenciales son parámetros que se definen al inicio. La geometría en la cual se debe definir esta corriente es en el electrolito, el cual se puede apreciar de color verde. Las ecuaciones que gobiernan dicha física son las siguientes:



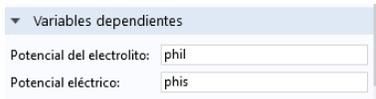


Figura 13: Definición de la física para la geometría del electrolito y de los parámetros y variables presentes en el mismo proceso. En este caso se escogió una física que representa una Distribución de Corriente Secundaria.

Por otro lado, es importante definir las fronteras y superficies que definen al electrolito (en color azul oscuro), como también el parámetro que define la conductividad del electrolito, la cual se puede observar en la Imagen 12.

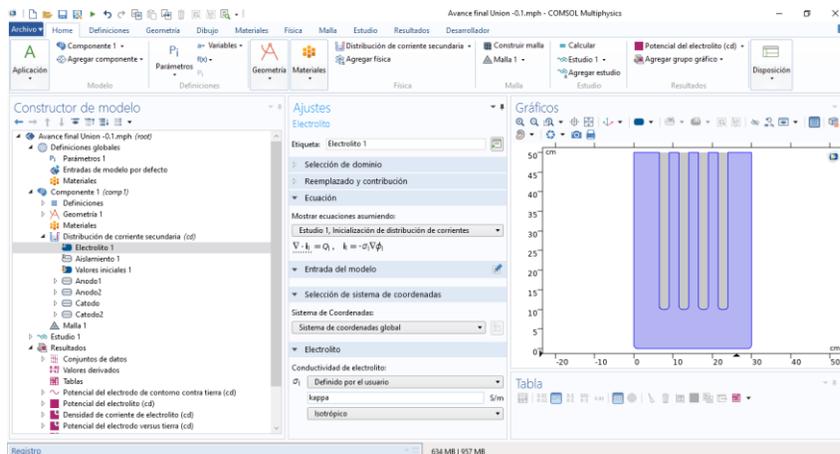


Figura 14: Definición de la geometría, de los parámetros y variables para el electrolito.

Además, el aislamiento permite definir las zonas en las cuales el proceso de electrocoagulación no va a tener ninguna interacción desde el punto de vista eléctrico. Las superficies en las cuales se define el aislamiento se pueden apreciar (de color azul en la imagen que se observaría a continuación).

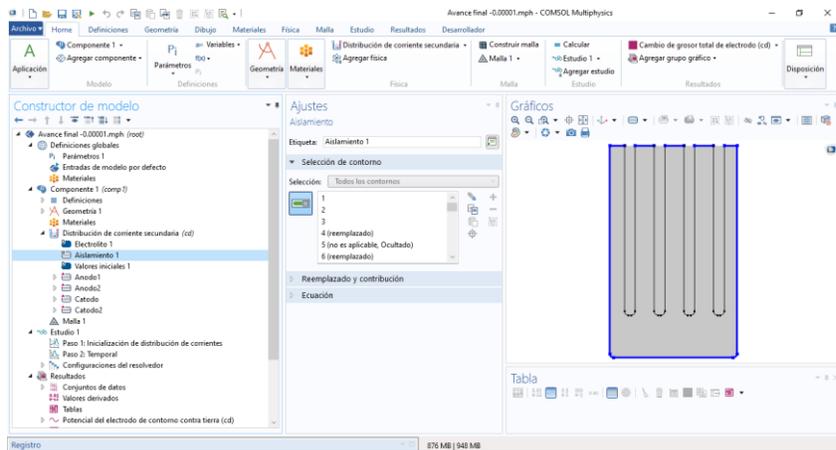


Figura 15: Definición de la geometría, de los parámetros y variables para el aislamiento.

Adicionalmente, es importante definir los valores iniciales del potencial del electrolito y del potencial eléctrico, que sean capaces de definir una diferencia de potencial para poder inducir la deposición del (Pb2+) por medio de una Fuerza Electromotriz Inducida (FEM)

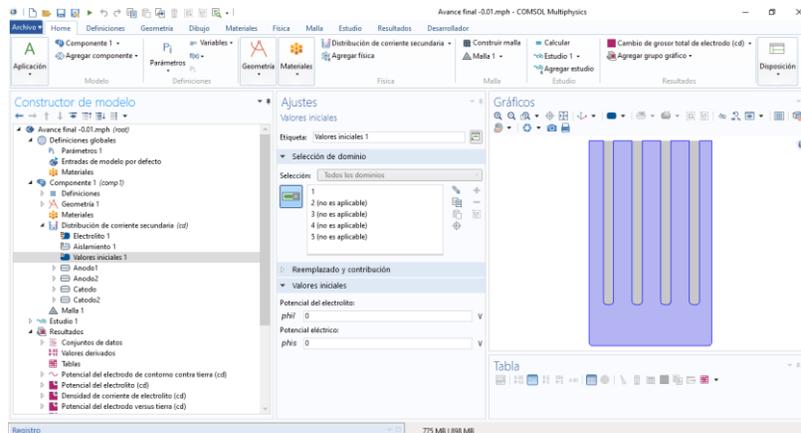
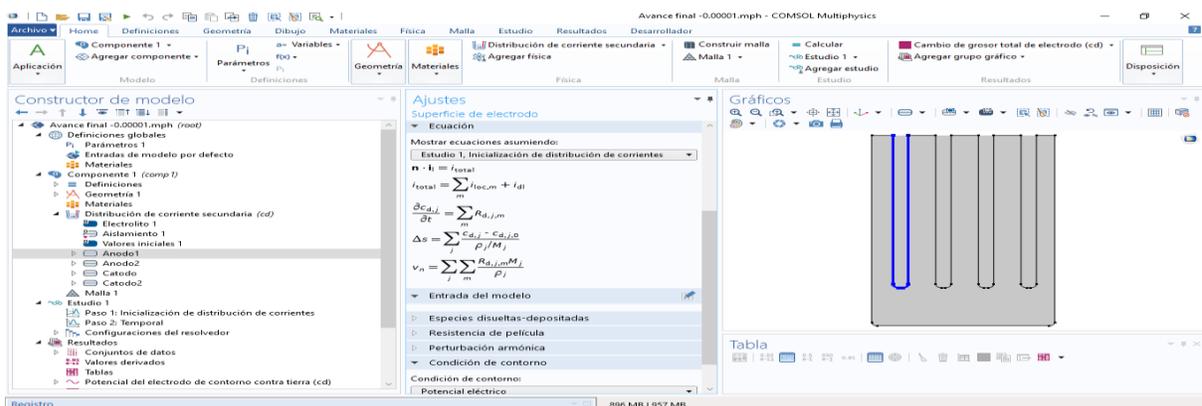


Figura 16: Definición de variables iniciales en el proceso de electrocoagulación de (Pb2+), teniendo en cuenta la distribución de corriente secundaria.

Finalmente se deben definir los electrodos presentes en el proceso, que para este caso se tienen cuatro platos configurados en paralelo, en donde se definen 2 ánodos y 2 cátodos, los cuales se pueden apreciar a continuación en las Imágenes 15 a 18.



Condición de contorno:
Potencial eléctrico

Potencial eléctrico externo:
 $\phi_{s,ext}$ 0[V]

Ecuación
Mostrar ecuaciones asumiendo:
Estudio 1, Inicialización de distribución de corrientes

$$\eta = E_{ct} - E_{eq}, E_{ct} = \phi_{s,ext} - \phi_i$$

$$R_{d,j} = \frac{-V_{d,j} i_{loc}}{nF}$$

Entrada del modelo

Temperatura:
T Common model input

Coefficientes estequiométricos
Número de electrones participantes:
n 2

Coefficientes estequiométricos para las especies de disolución:

Especie	Coefficiente estequiométrico
Pb	1

Reacción del electrodo

$$\sum_{ox} |v_{ox}| Ox + ne^- \rightleftharpoons \sum_{red} v_{red} Red$$

Potencial de equilibrio:
Potencial de equilibrio:
 E_{eq} Definido por el usuario
Eqq_Pb

Cinética de electrodo

Tipo de expresión cinética:
Butler-Volmer linealizado

Densidad de corriente de intercambio:
 i_0 i_0_{Pb} A/m²

Coefficiente de transferencia anódica:
 α_a 0.5

Coefficiente catódico de transferencia:
 α_c 0.5

$$i_{loc} = i_0 \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c F}{RT} \right) \eta$$

Densidad de corriente limitante

Calor de la reacción

Figura 17: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se define la reacción presente en el mismo.

Figura 18: Definición de la geometría del otro ánodo. Los parámetros y las reacciones a definir son los mismos que los expuestos en la Figura 15.

Condición de contorno:

Densidad de corriente media

$i_{l,average}$ A/m^2

Valor inicial de potencial eléctrico de contorno:

$\phi_{s,ext,init}$ V

Constructor de modelo

- Distribución de corriente secundaria (cd)
 - Electrolito 1
 - Aislamiento 1
 - Valores iniciales 1
 - Anodo1
 - Anodo2
 - Catodo
 - Reacción del electrodo 1
 - Reacción del electrodo 2
 - Catodo2
- Malla 1
- Estudio 1
 - Paso 1: Inicialización de distribución de corrientes
 - Paso 2: Temporal
 - Configuraciones del resolvidor
- Resultados
 - Conjuntos de datos
 - Valores derivados
 - Tablas
 - Potencial del electrodo de contorno contra tierra (cd)
 - Potencial del electrodo (cd)
 - Densidad de corriente de electrolito (cd)

Ajustes

Reacción del electrodo

Ecuaación

Mostrar ecuaciones asumiendo: Estudio 1, Inicialización de distribución de corrientes

$$\eta = E_{ct} - E_{eq}, E_{ct} = \phi_{s,ext} - \phi$$

$$R_{d,j} = \frac{-\nu_{d,j} i_{loc}}{nF}$$

Entrada del modelo

Temperatura: T Common model input

Coefficientes estequiométricos

Número de electrones participantes: n 2

Coefficientes estequiométricos para las especies de disolución:

Especies	Coefficiente estequiométrico
Pb	1

Reacción del electrodo

$$\sum_{ox} \nu_{ox} Ox + ne^- = \sum_{red} \nu_{red} Red$$

Potencial de equilibrio

Potencial de equilibrio: E_{eq} Definido por el usuario

Cinética de electrodo

Tipo de expresión cinética: Butler-Volmer linealizado

Densidad de corriente de intercambio: i_0 $i_{0,Pb}$ A/m^2

Coefficiente de transferencia anódica: α_a 0.5

Coefficiente catódico de transferencia: α_c 0.5

$$i_{loc} = i_0 \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c F}{RT} \right) \eta$$

Densidad de corriente limitante

Constructor de modelo

- Distribución de corriente secundaria (cd)
 - Electrolito 1
 - Aislamiento 1
 - Valores iniciales 1
 - Anodo1
 - Anodo2
 - Catodo
 - Reacción del electrodo 1
 - Reacción del electrodo 2
 - Catodo2
- Malla 1
- Estudio 1
 - Paso 1: Inicialización de distribución de corrientes
 - Paso 2: Temporal
 - Configuraciones del resolvidor
- Resultados
 - Conjuntos de datos
 - Valores derivados
 - Tablas
 - Potencial del electrodo de contorno contra tierra (cd)
 - Potencial del electrodo (cd)
 - Densidad de corriente de electrolito (cd)

Ajustes

Reacción del electrodo

Ecuaación

Mostrar ecuaciones asumiendo: Estudio 1, Inicialización de distribución de corrientes

$$\eta = E_{ct} - E_{eq}, E_{ct} = \phi_{s,ext} - \phi$$

$$R_{d,j} = \frac{-\nu_{d,j} i_{loc}}{nF}$$

Entrada del modelo

Temperatura: T Common model input

Coefficientes estequiométricos

Número de electrones participantes: n 1

Coefficientes estequiométricos para las especies de disolución:

Especies	Coefficiente estequiométrico
Pb	0

Reacción del electrodo

$$\sum_{ox} \nu_{ox} Ox + ne^- = \sum_{red} \nu_{red} Red$$

Potencial de equilibrio

Potencial de equilibrio: E_{eq} Definido por el usuario

Cinética de electrodo

Tipo de expresión cinética: Ecuación catódica de Tafel

Densidad de corriente de intercambio: i_0 $i_{0,H}$ A/m^2

Pendiente catódica de Tafel (<0): A_c [-118][mV]

$$i_{loc} = -i_0 \times 10^{\eta/A_c}$$

Densidad de corriente limitante

Figura 19: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se definen las reacciones presentes en el mismo.

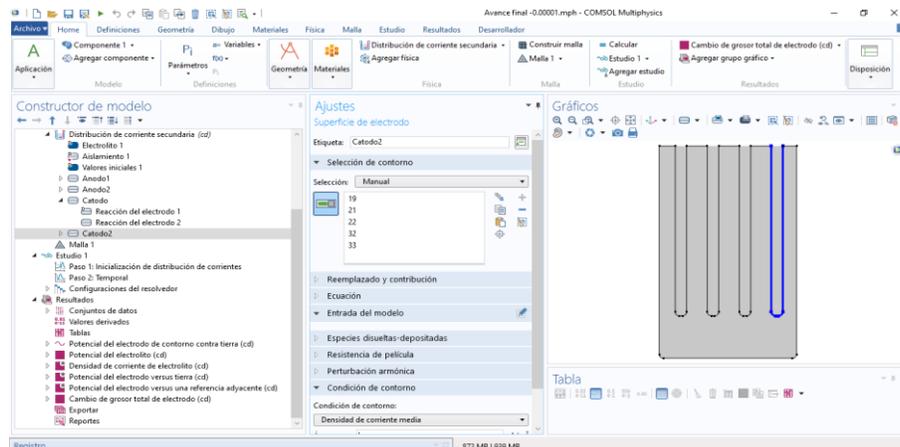


Figura 20: Definición de las variables, parámetros y ecuaciones para uno de los ánodos presentes en el reactor, como también de la geometría definida en el mismo. Así mismo se definen las reacciones presentes en el mismo.

2.4 Materiales e Instrumentos

Para este caso se utilizó un computador con un procesador de 4GB de RAM, con sistema operativo Windows, en donde se instaló el software Comsol Multiphysics, versión 5.5. Del software específicamente se utilizaron los siguientes módulos:

- Módulo de definiciones para los parámetros y variables del reactor.
- Módulo de geometría para las dimensiones del reactor y de los electrodos.
- Submódulo de física de “Distribución de corriente secundaria”, el cual se encuentra dentro del módulo de “Electroquímica”.
- Módulo para definir el mallado para electrolito, en donde se dará la solución de las ecuaciones físicas y químicas simultáneas por medio de técnicas de elementos finitos definida dentro del software
- Un módulo de solución temporal definido a las 0 minutos, 15 minutos y 30 minutos, luego de la aplicación de la corriente definida en el numeral de parámetros dentro del reactor batch.

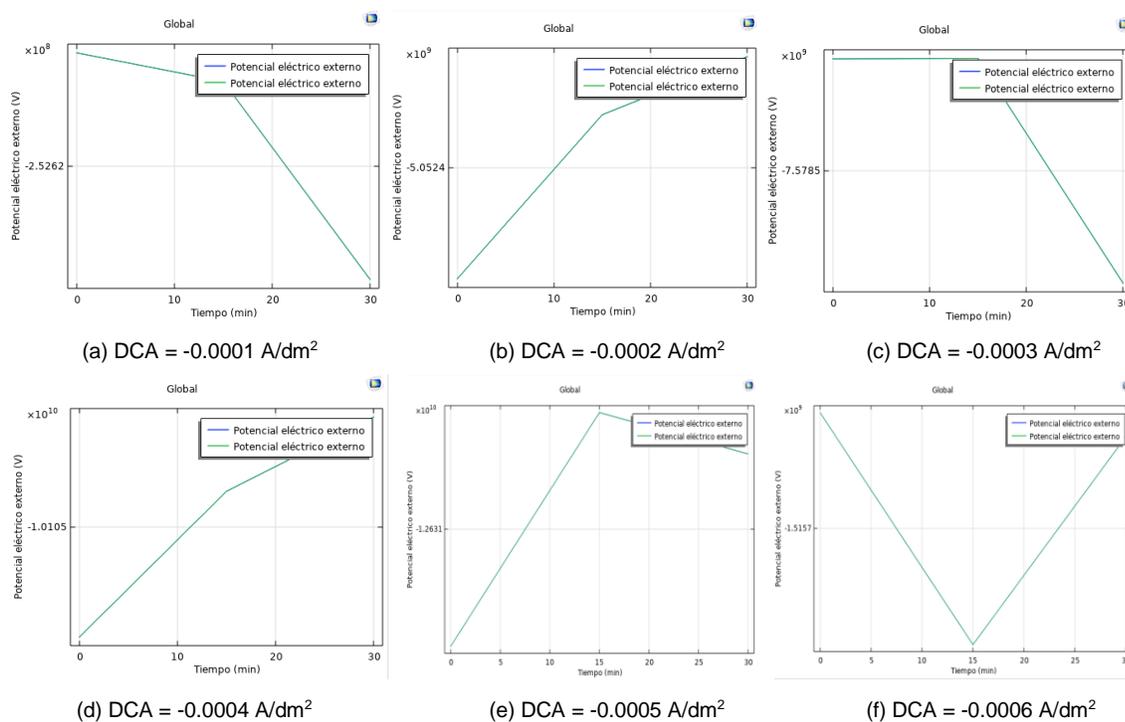
2.5 Alcances y limitaciones

El alcance de esta investigación es estudiar los valores máximos de deposición de (Pb^{2+}) con variación de la densidad de corriente aplicada en los ánodos para 3 momentos diferentes del tiempo y 3 configuraciones distintas de los electrodos. Las limitaciones de esta investigación, es que la geometría a tratar es una geometría 2D, en donde las ecuaciones físicas y químicas a tener en cuenta son la de una distribución de corriente secundaria, la cual no tiene en cuenta fuerzas electromotrices de retorno, como tampoco la turbidez del electrolito y finalmente que el único material contaminante a depositar es (Pb^{2+}).

Capítulo 3 - Resultados

Para tener como punto de referencia en los resultados, se tuvieron en cuenta 3 distintas separaciones de un reactor de placas paralelas con 4 electrolitos, compuestos por 2 ánodos y 2 cátodos en donde se configuraron 3 distancias entre las placas de 2.5 de 4 y de 4.5 cm, teniendo como punto de referencia la distancia entre los bordes más próximos entre cada electrodo. Por otro lado, se tuvieron en cuenta 9 corridas para cada una de estas configuraciones, en donde se tuvo en cuenta la densidad de corriente aplicada en el ánodo partiendo de -0.0001 A/dm^2 con disminuciones incrementales de -0.00001 A/dm^2 .

Los resultados obtenidos de potencial del electrolito externo vs el potencial del polo a tierra para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4 cm entre los electrodos.



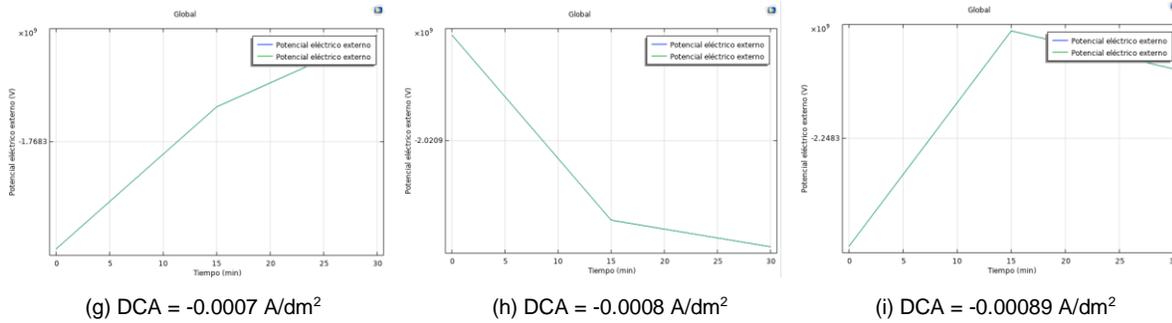
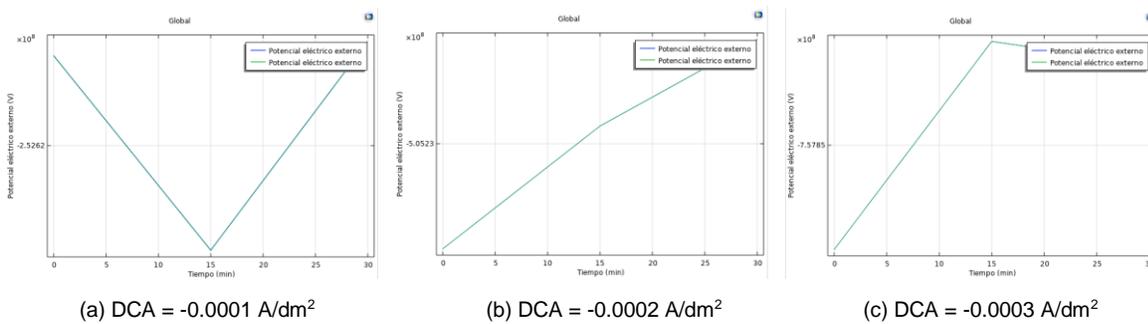


Figura 21: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4cm, para tres momentos diferentes de tiempo.

Como se puede observar, los potenciales del electrolito no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el potencial del electrolito aplicado desde el tiempo cero, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0009 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00089 A/dm^2 .

Por otro lado, los resultados obtenidos de potencial del electrolito externo vs el potencial del polo a tierra para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4.5 cm entre los electrodos.



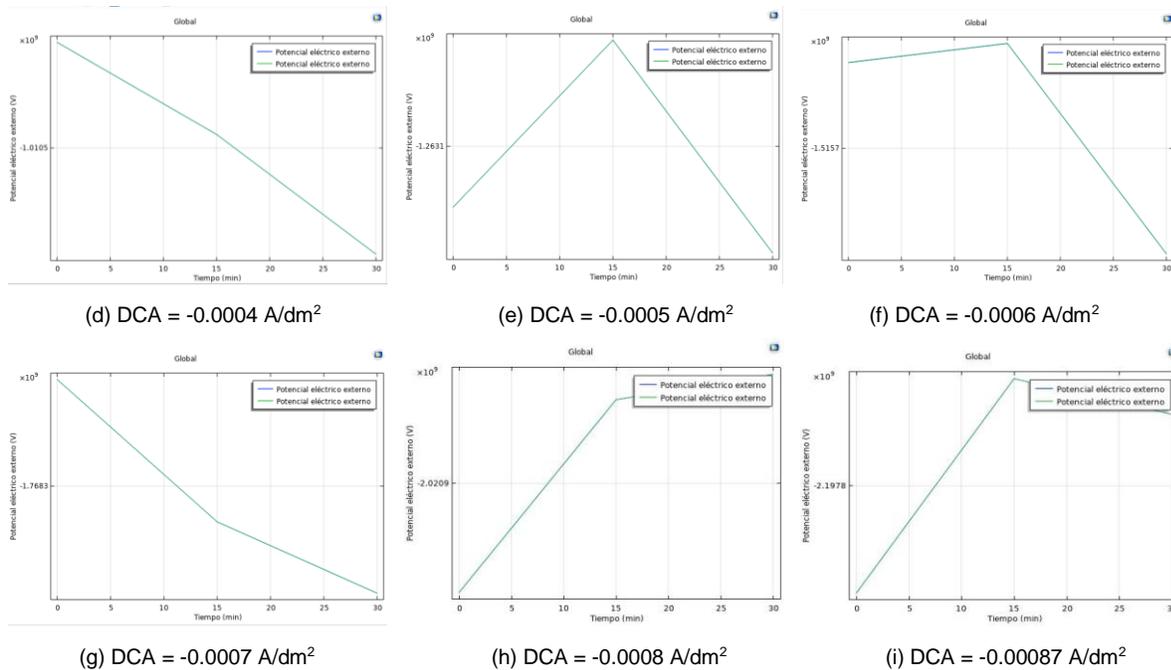


Figura 22: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo.

Como se puede observar, los potenciales del electrolito no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el potencial del electrolito aplicado desde el tiempo cero, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0009 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00087 A/dm^2 .

Por otro lado, los resultados obtenidos de potencial del electrolito externo vs el potencial del polo a tierra para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 2.5 cm entre los electrodos.

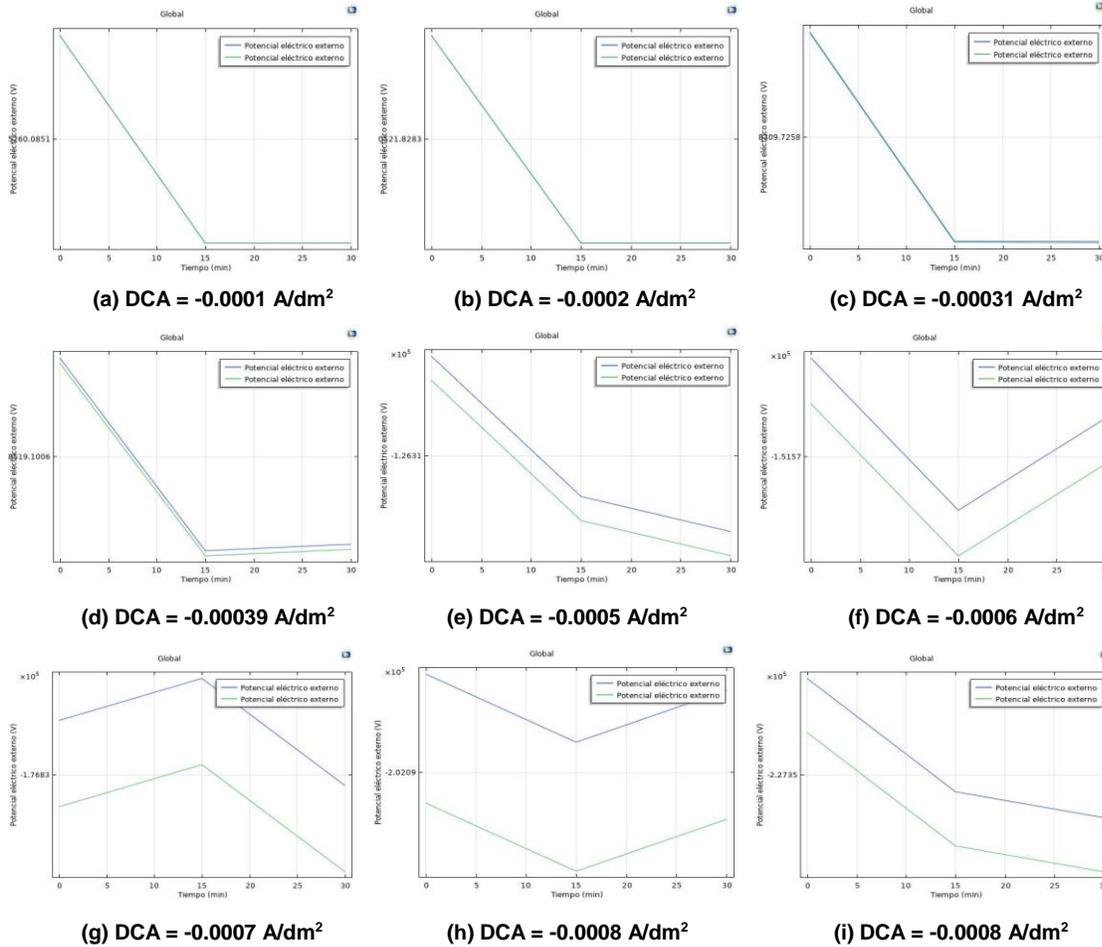


Figura 23: Variación del potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo.

Como se puede observar, los potenciales del electrolito no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el potencial del electrolito aplicado desde el tiempo cero, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0003 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más pequeño de -0.00031 A/dm^2 , igualmente para el DCA de -0.0004 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00039 A/dm^2 .

Los resultados obtenidos de la superficie del potencial del electrolito en Voltios y las líneas de flujo vectorial de densidad de corriente del electrolito para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4 cm entre los electrodos.

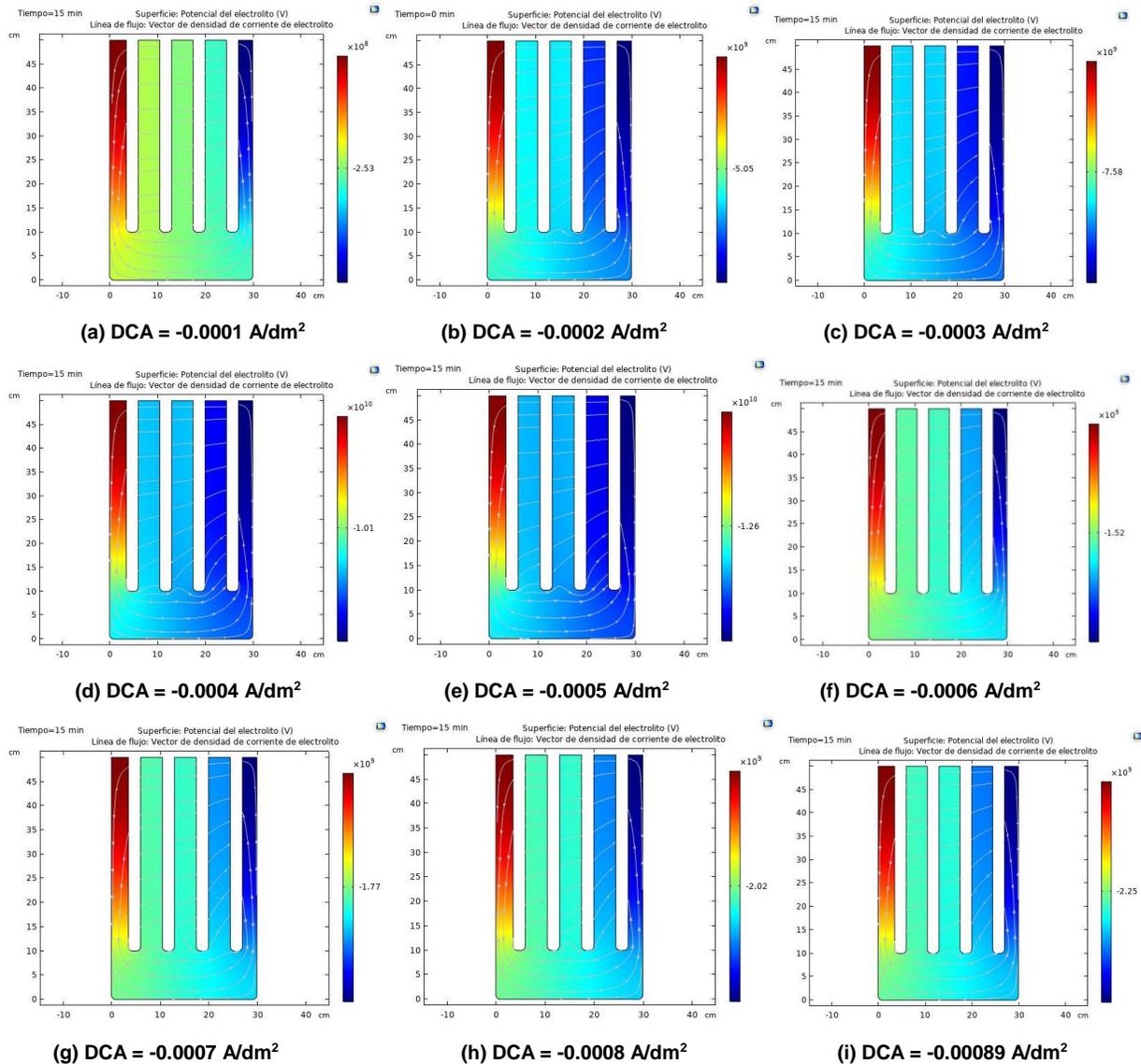


Figura 24: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia)

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, y es significativo ya que está en el orden de 10^8 y 10^{10} Voltios.

Por otro lado, los resultados obtenidos de la superficie potencial del electrolito en Voltios y las líneas de flujo vectorial de densidad de corriente del electrolito para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4.5 cm entre los electrodos.

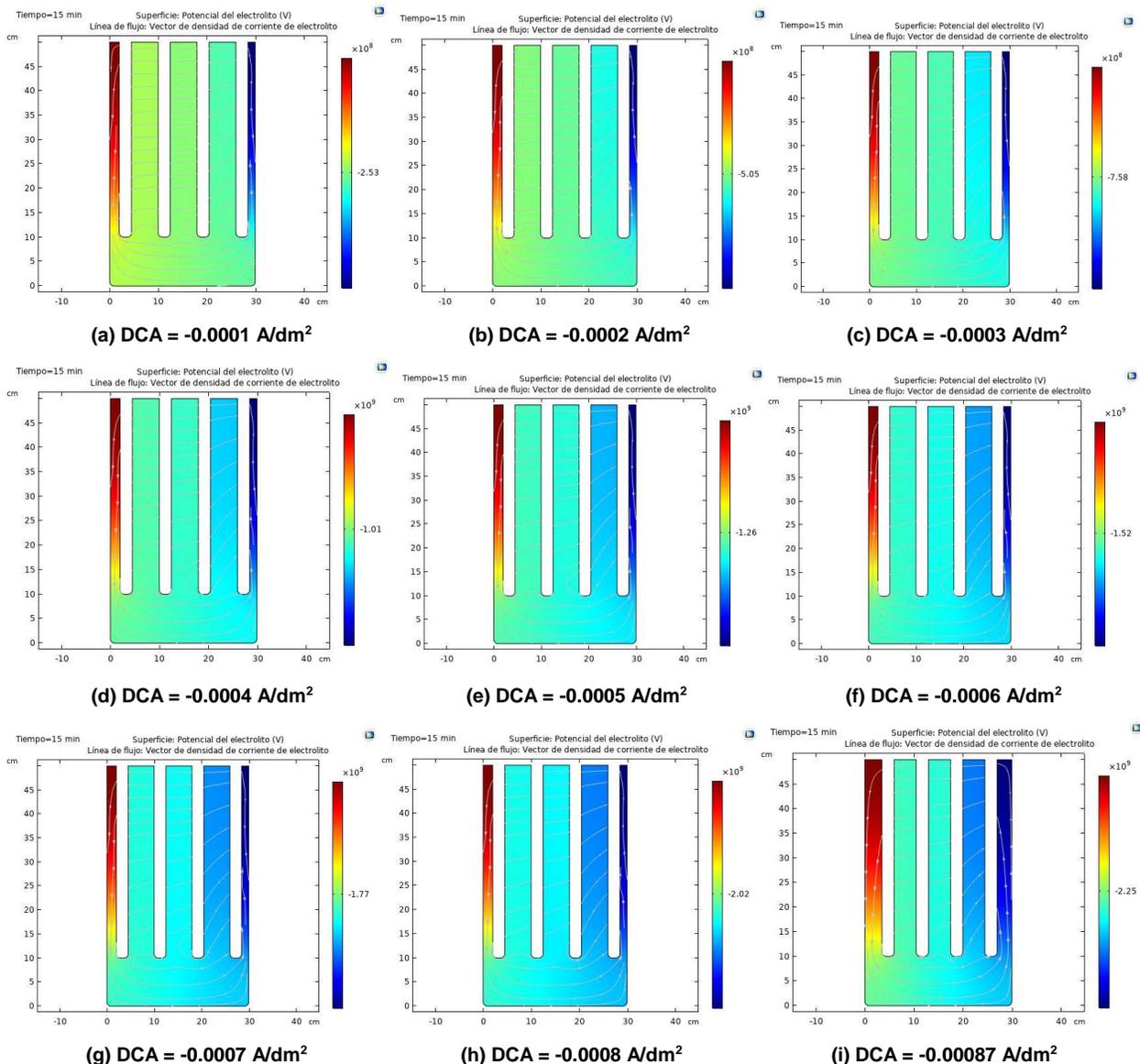
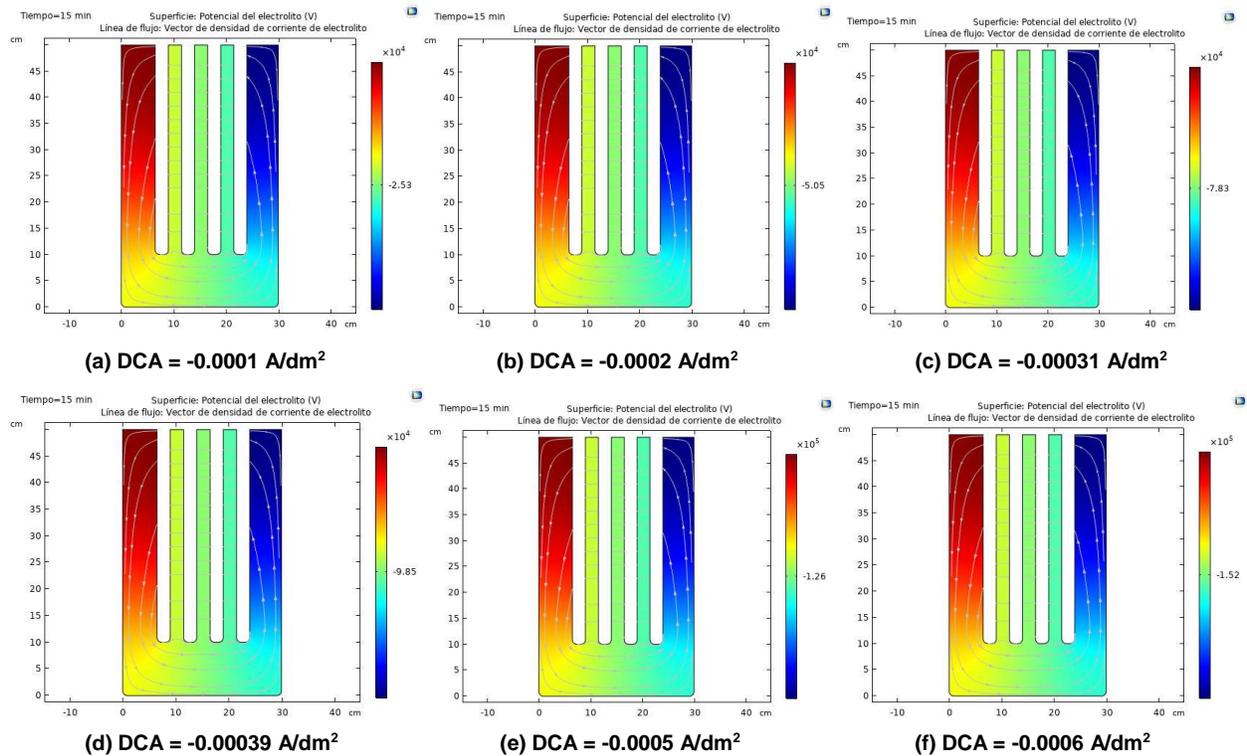


Figura 25: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia)

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, y es significativo ya que está en el orden de 10^8 y 10^{10} Voltios.

Finalmente, los resultados obtenidos de la superficie potencial del electrolito en Voltios y las líneas de flujo vectorial de densidad de corriente del electrolito para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 2.5 cm entre los electrodos.



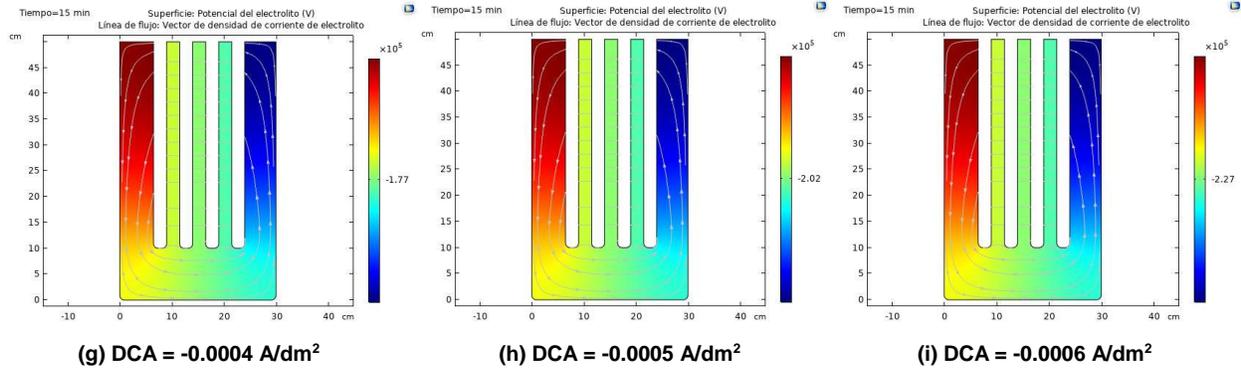


Figura 26: Variación de la superficie potencial del electrolito a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia)

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, y es significativo ya que está en el orden de 10^4 y 10^5 Voltios.

Los resultados obtenidos de las líneas de flujo densidad de corriente de electrolito en (A/m^2) para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4 cm entre los electrodos.

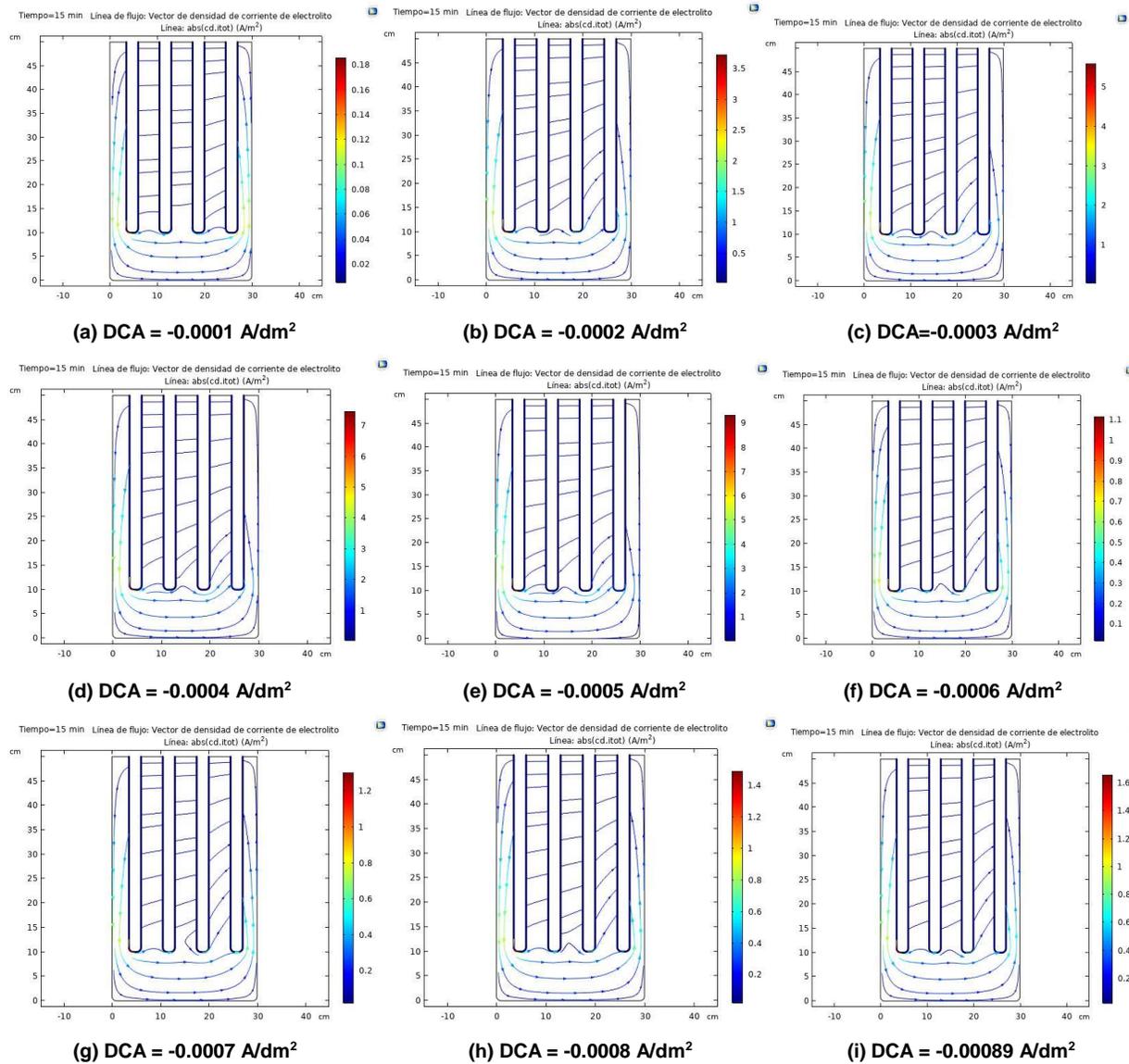


Figura 27: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m^2) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia)

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, y es significativo

ya que está en el orden de 0 y 10 (A/m²), más sin embargo esta densidad de corriente tiene a llegar a un valor óptimo máximo DCA en -0,0005 A/dm².

Por otro lado, los resultados obtenidos de las líneas de flujo densidad de corriente de electrolito en (A/m²) para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4.5 cm entre los electrodos.

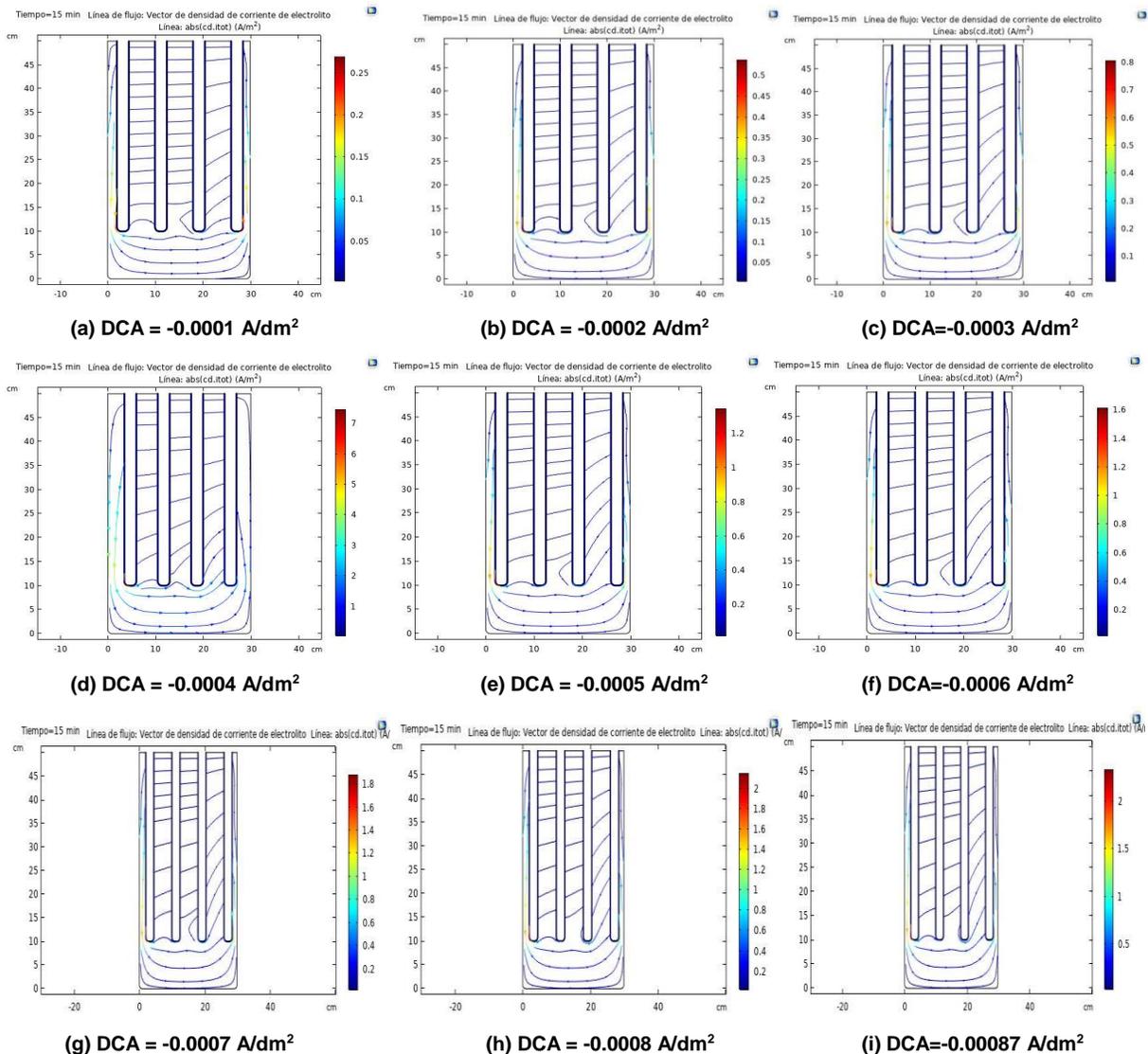


Figura 28: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m²) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm. (Los cambios a través del tiempo no fueron significativos, por lo que se tomó el tiempo de 15 minutos como referencia)

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, y es significativo ya que está en el orden de 0 y 10 (A/m²), más sin embargo esta densidad de corriente tiene a llegar a un valor óptimo máximo DCA en -0,0004 A/dm².

Finalmente, los resultados obtenidos de las líneas de flujo densidad de corriente de electrolito en (A/m²) para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 2.5 cm entre los electrodos.

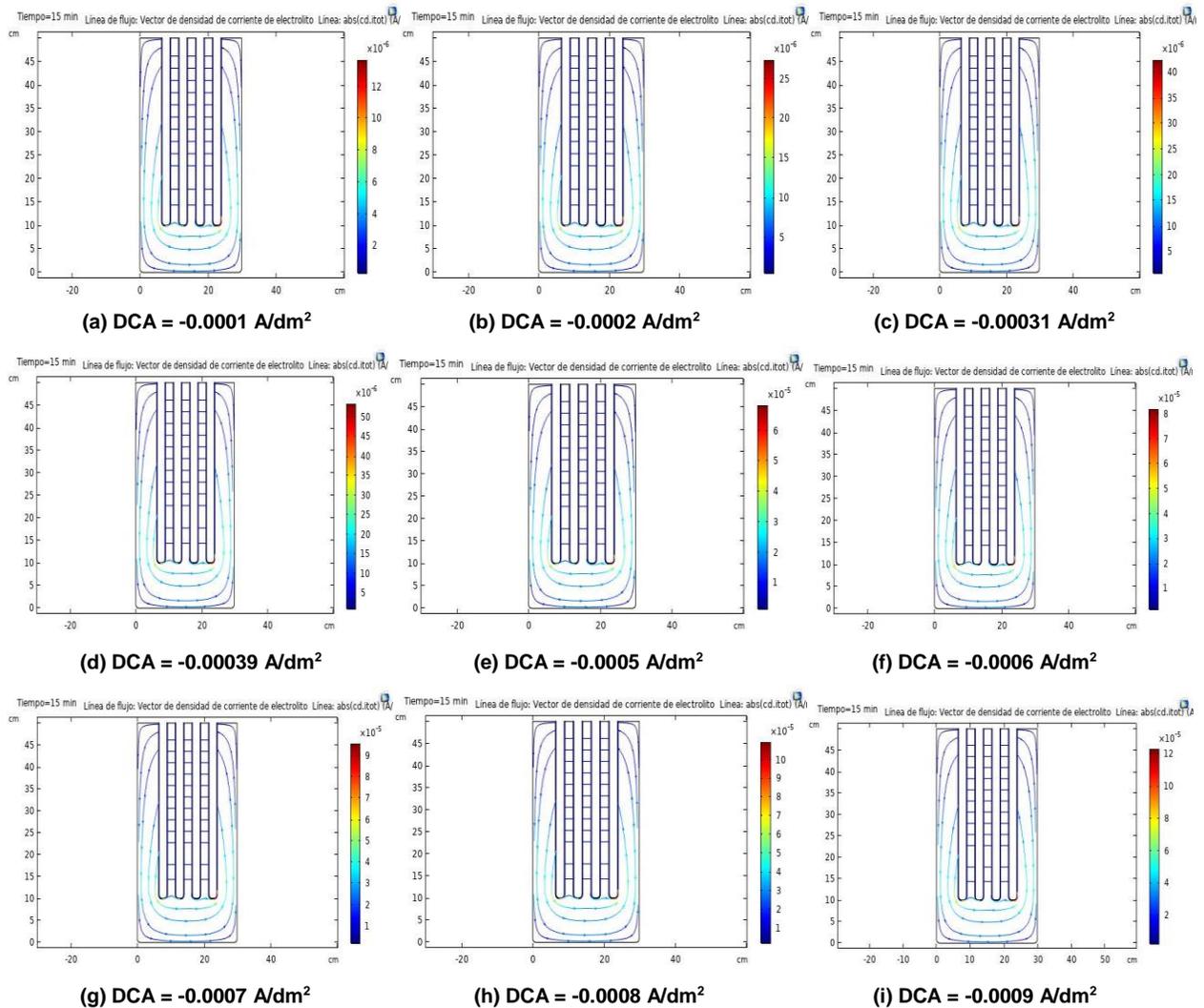
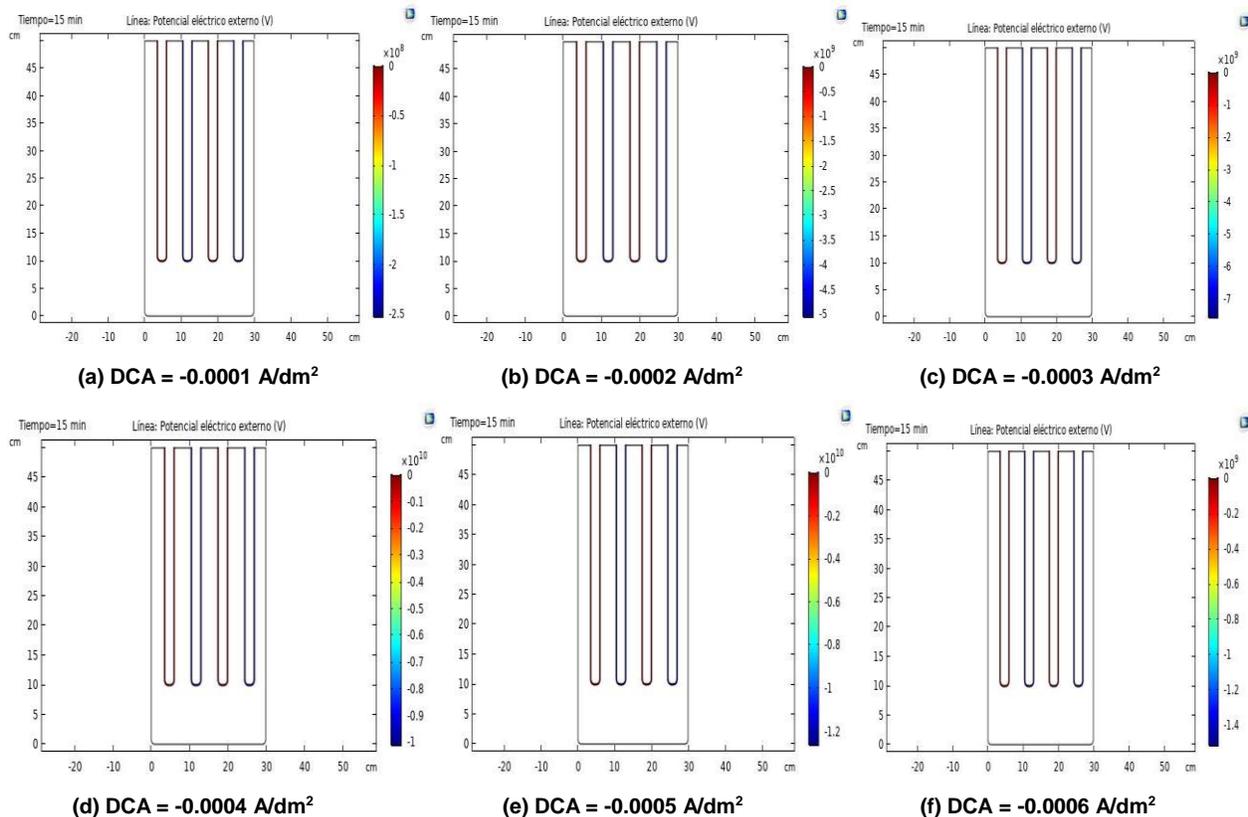


Figura 29: Variación del vector de densidad de corriente del electrolito en (A/m²) a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo.

Como se puede observar, la superficie potencial del electrolito en Voltios media va creciendo a medida que aumenta la corriente aplicada en los ánodos, no es significativo ya que está en el orden de 0 y 50×10^{-4} (A/m²), más sin embargo esta densidad de corriente tiene a llegar a un valor óptimo máximo DCA en $-0,00039$ A/dm²

Los resultados obtenidos del potencial del eléctrico externo medido en Voltios, para para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4 cm entre los electrodos.



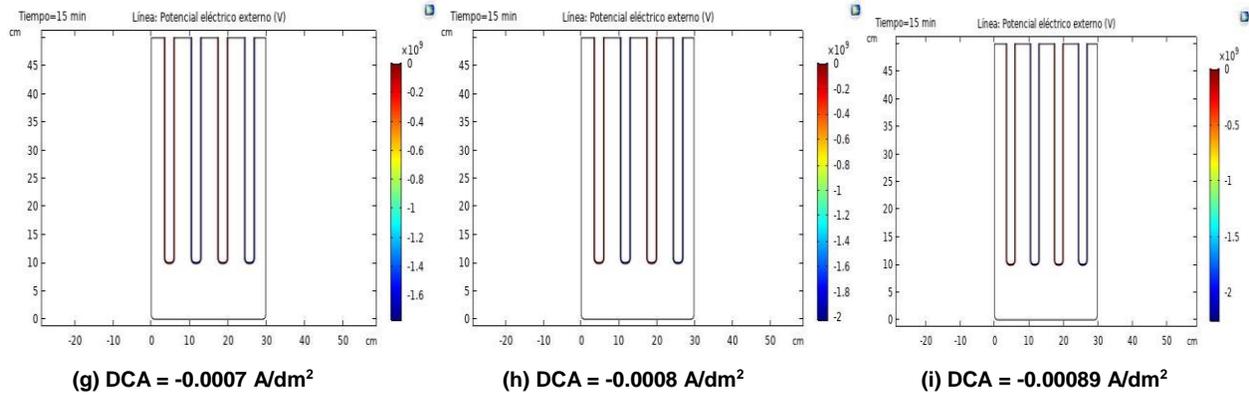
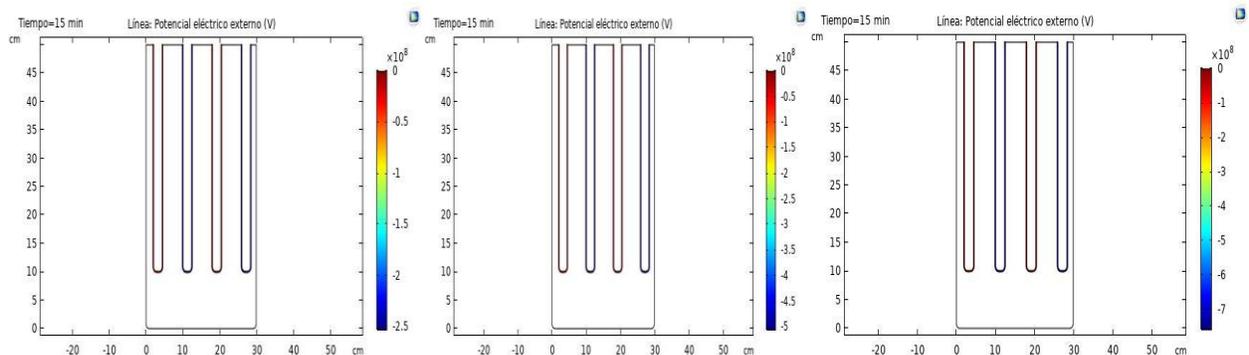


Figura 30: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable.

Como se puede observar, el potencial eléctrico externo máximo en Voltios va creciendo en magnitud a medida que la DCA va aumentando. Este hallazgo es importante resaltarlo, debido a que se puede revisar en un diagrama de puntos la correlación que existe entre ambas variables y como la DCA puede afectar o no el proceso de electrocoagulación.

Por otro lado, los resultados obtenidos del potencial del eléctrico externo medido en Voltios, para para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4.5 cm entre los electrodos. Si se comparan los resultados obtenidos entre esta configuración y la configuración previa, los cambios obtenidos son imperceptibles.



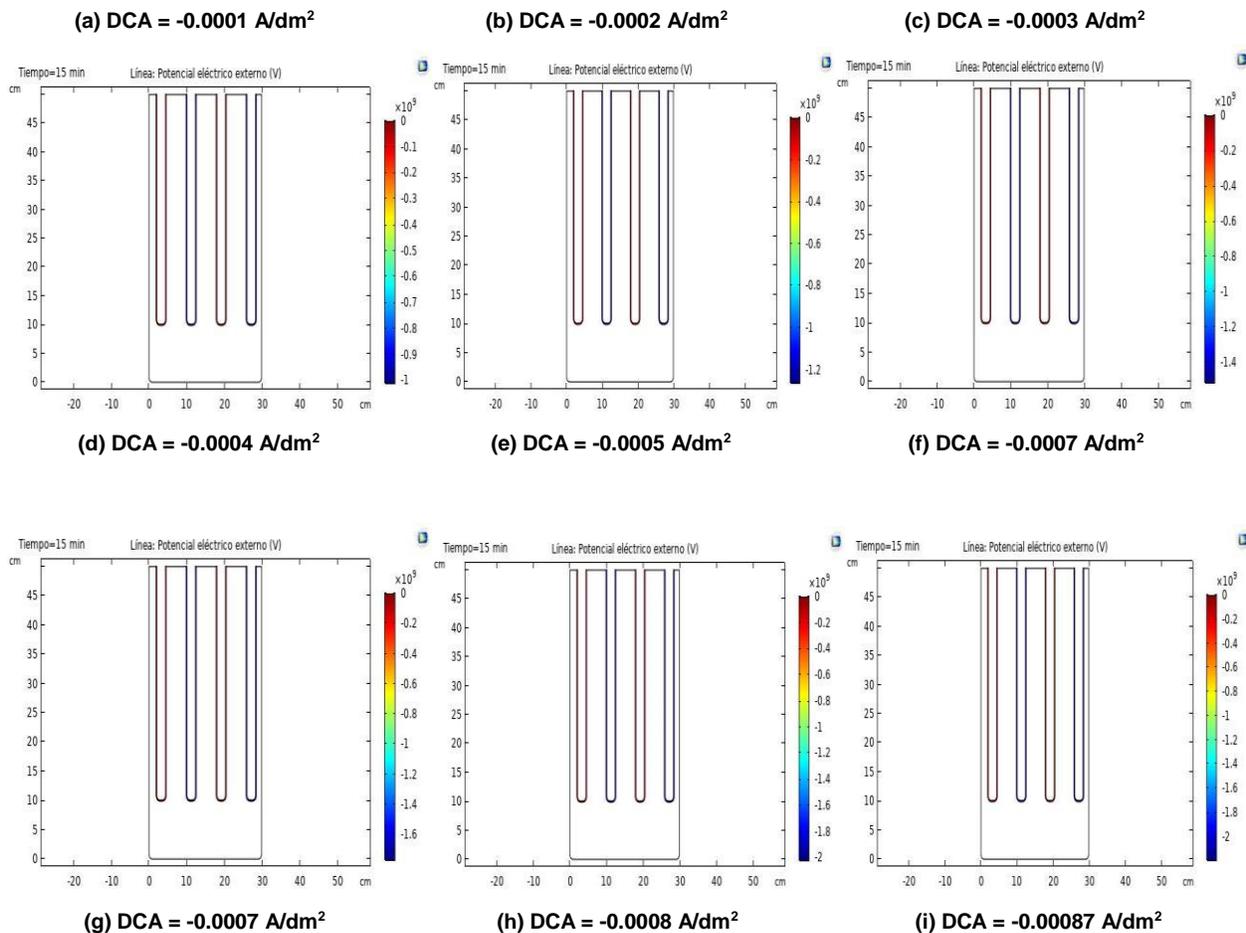


Figura 31: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable.

Se puede confirmar de nuevo que el potencial eléctrico externo máximo en Voltios va creciendo en magnitud a medida que la DCA va aumentando. Este hallazgo es importante resaltarlo, debido a que se puede revisar en un diagrama de puntos la correlación que existe entre ambas variables y como la DCA puede afectar o no el proceso de electrocoagulación.

Finalmente, los resultados obtenidos del potencial del eléctrico externo medido en Voltios, para para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 2.5 cm entre los

electrodos. Si se comparan los resultados obtenidos entre esta configuración y la configuración previa, los cambios obtenidos son imperceptibles.

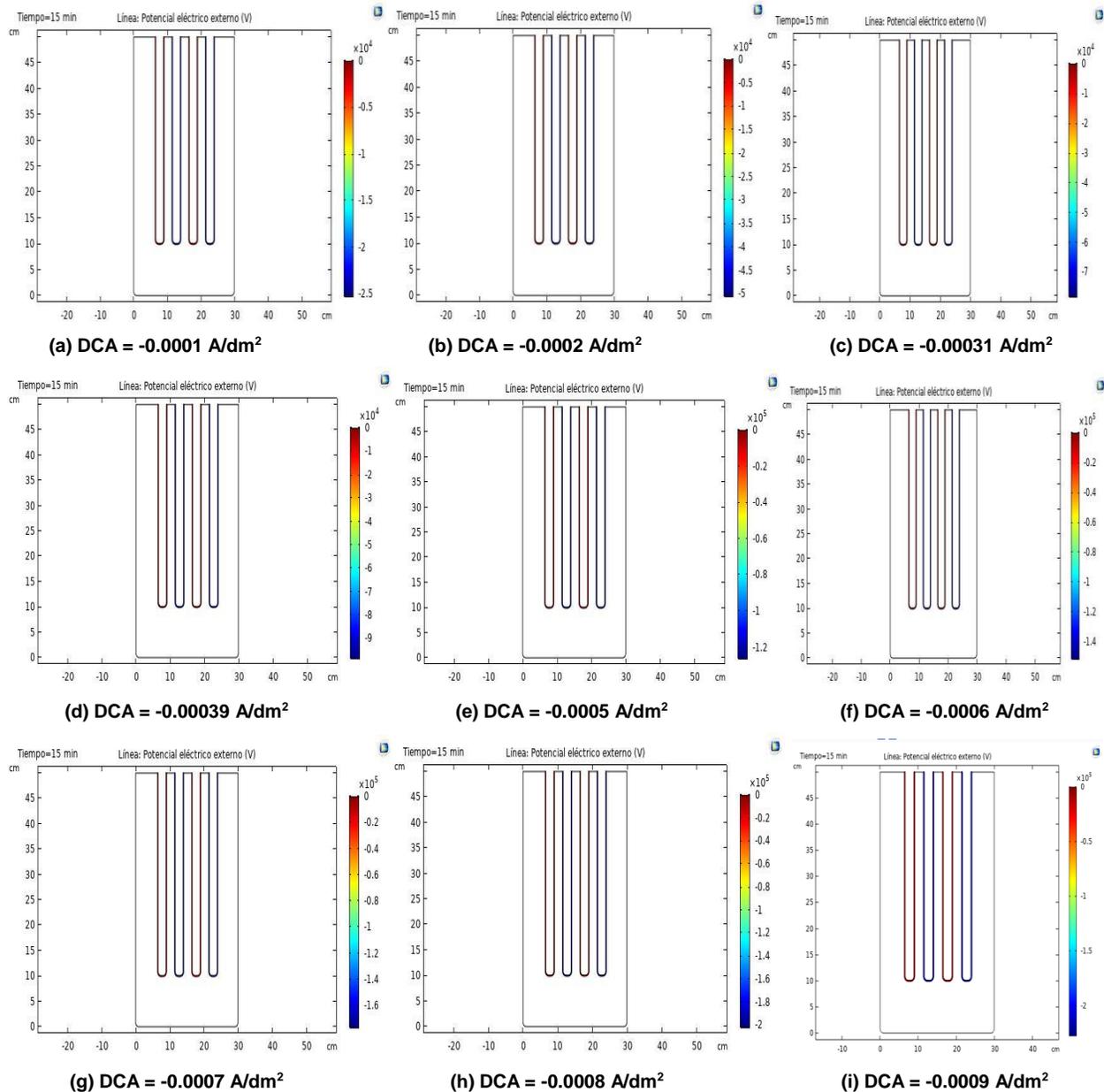
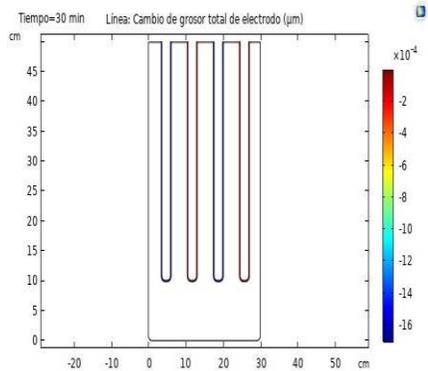


Figura 32: Variación del potencial del eléctrico externo en Voltios a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm. Se tomó un solo tiempo representativo, debido a que los cambios eran imperceptibles con el cambio de esta variable.

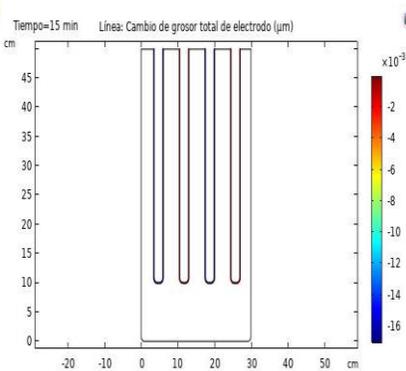
En este caso, al acercar los ánodos, si hay un cambio observable en el potencial eléctrico máximo en Voltios en relación con las otras dos geometrías estudiadas

previamente, y sobre todo cuando la magnitud de la corriente aplicada en el ánodo es mayor. Este resultado es relevante y se discutirá en el apartado que viene a continuación.

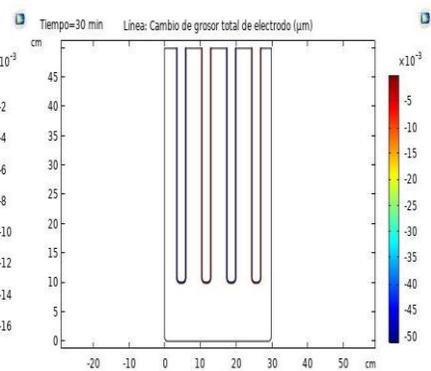
Los resultados obtenidos del cambio de grosor total del electrodo para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4 cm entre los electrodos.



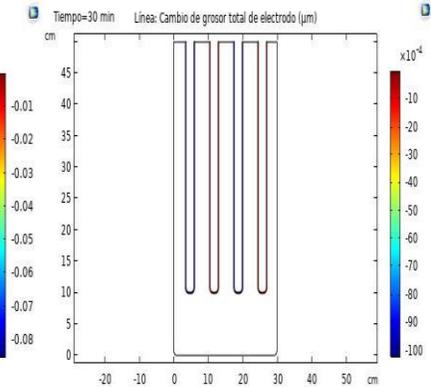
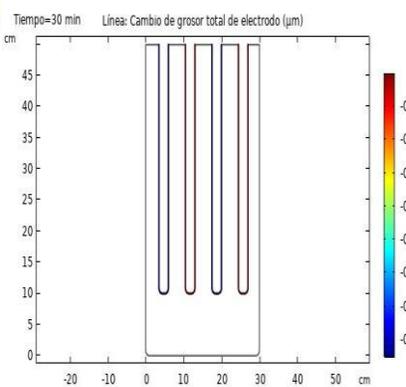
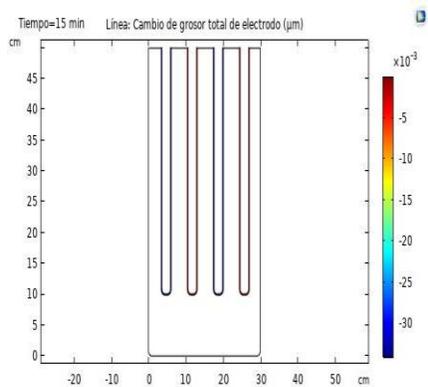
(a) DCA = -0.0001 A/dm^2



(b) DCA = -0.0002 A/dm^2



(c) DCA = -0.0003 A/dm^2



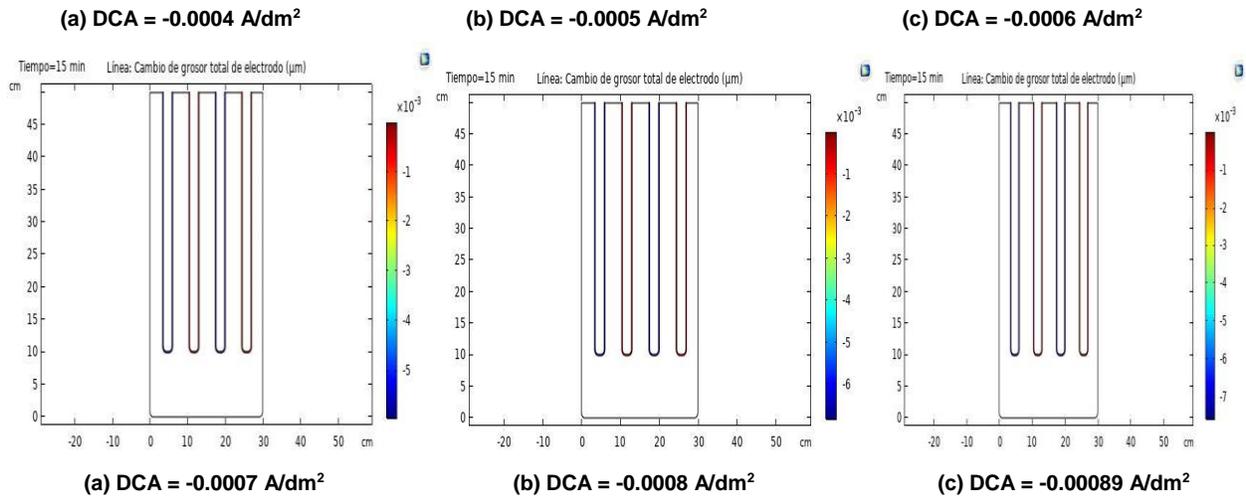


Figura 33: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4 cm, en donde se tomó como muestra representativa un tiempo de 15 minutos.

Como se puede observar, el cambio de grosor total del electrodo no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el cambio de grosor total del electrodo aplicado en el tiempo quince, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0009 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00089 A/dm^2 .

Por otro lado, los resultados obtenidos del cambio de grosor total del electrodo para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 4.5 cm entre los electrodos.

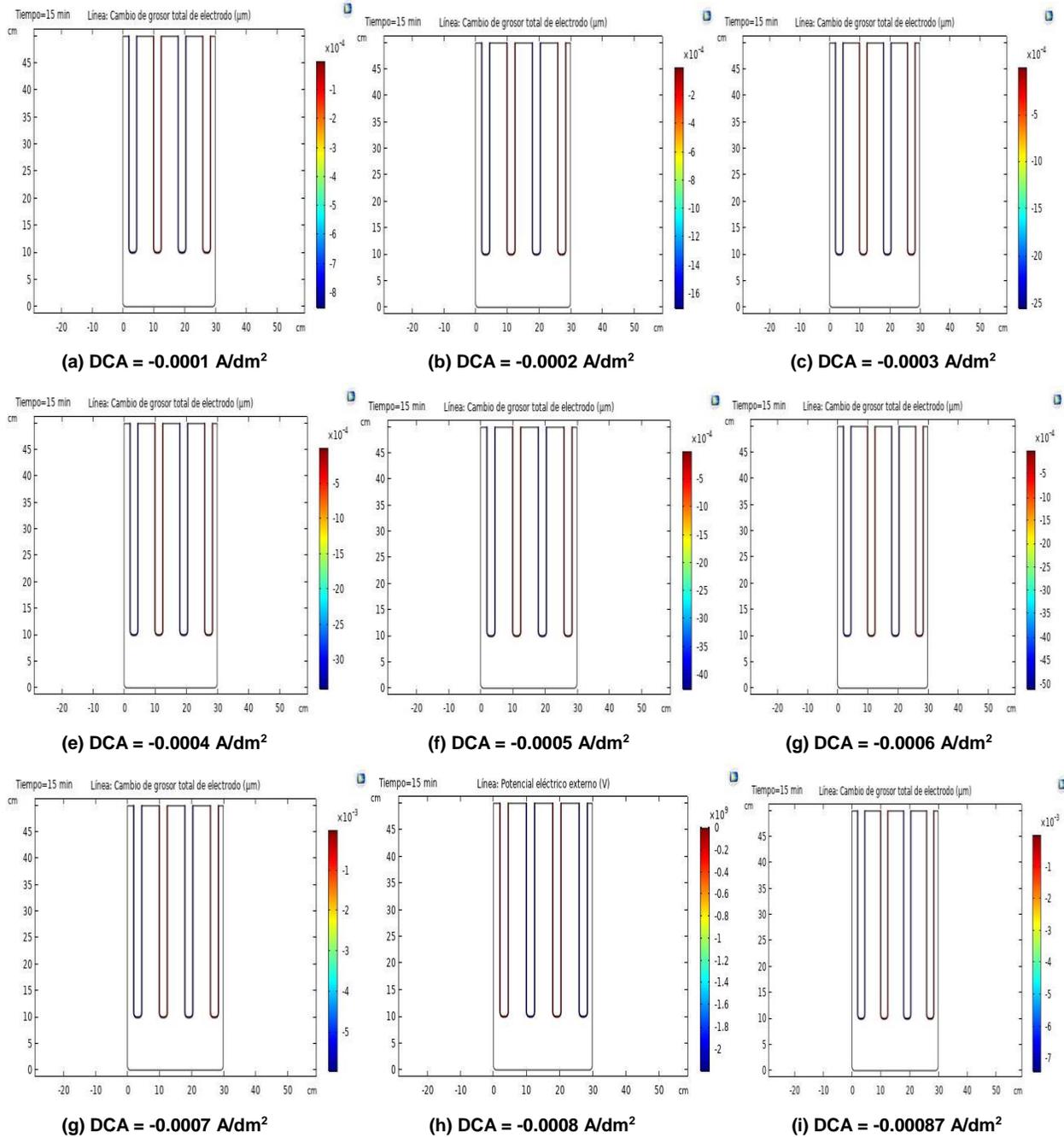
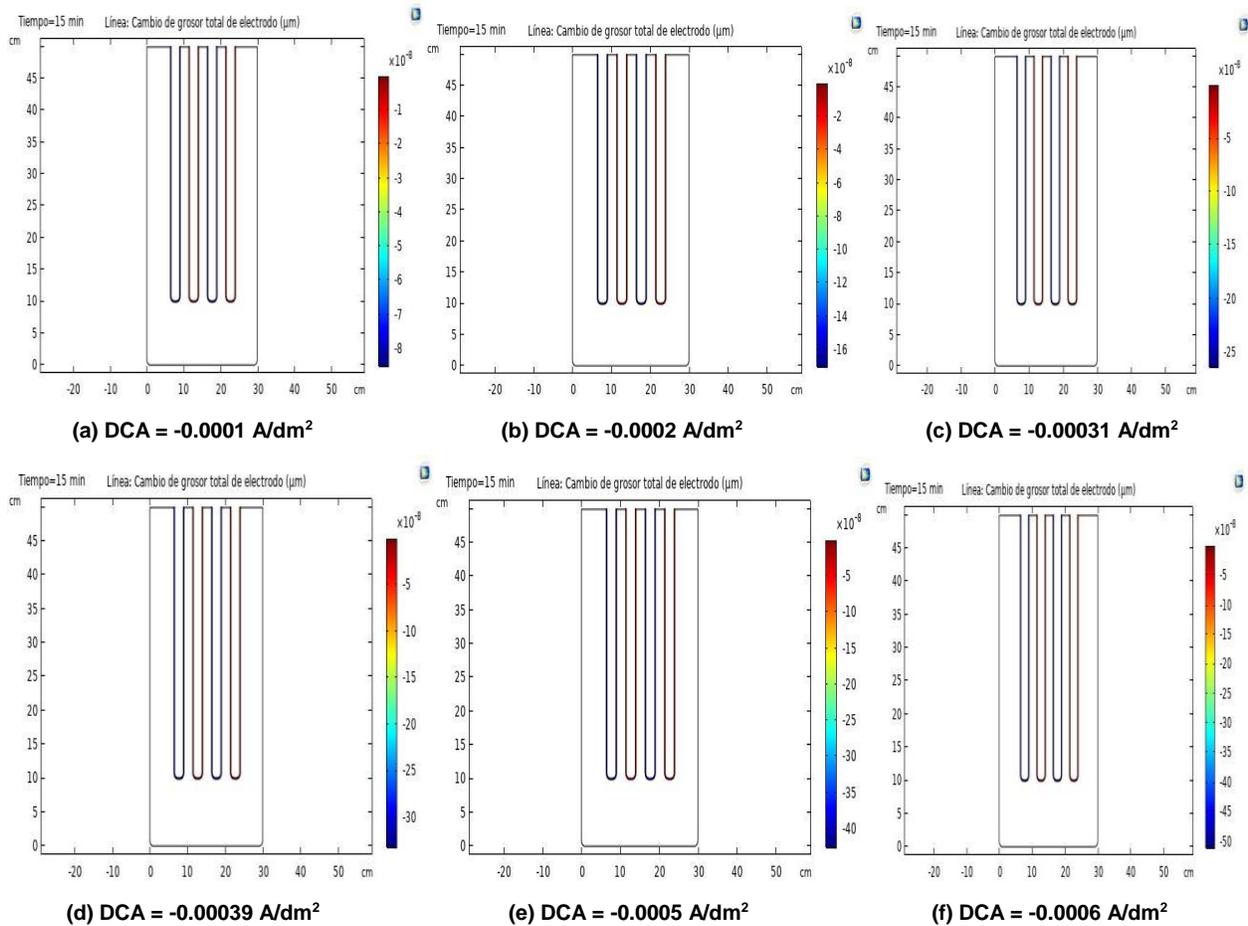


Figura 34: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 4.5 cm, para tres momentos diferentes de tiempo.

Como se puede observar, el cambio de grosor total del electrodo no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el cambio de grosor total del electrodo aplicado en el tiempo

quince, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0009 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00087 A/dm^2 .

Los resultados obtenidos del cambio de grosor total del electrodo para los tres diferentes tiempos para cada una de las densidades de corriente aplicadas (DCA) se pueden observar a continuación para la geometría con separación de 2.5 cm entre los electrodos.



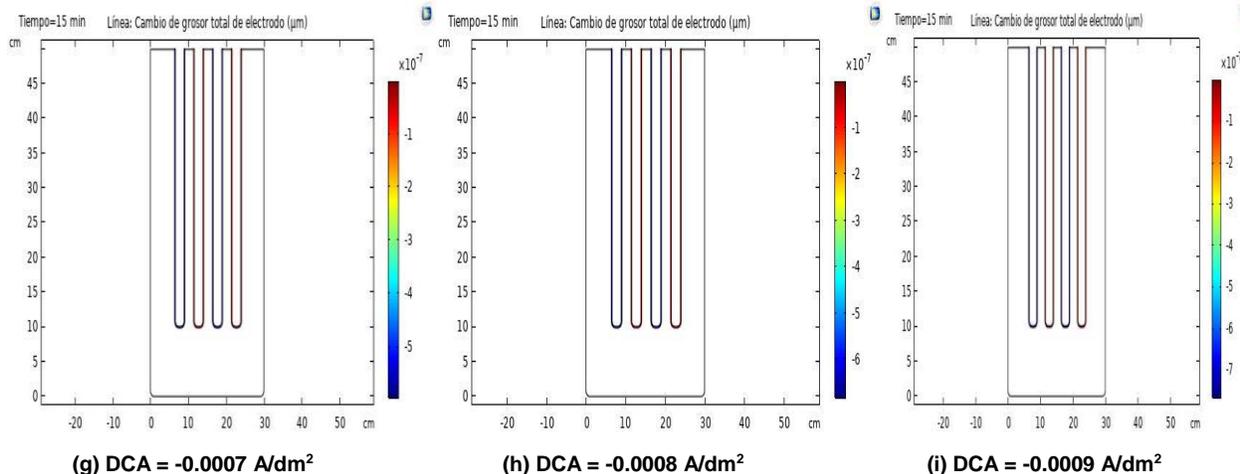


Figura 35: Variación el cambio de grosor total del electrodo a través del tiempo para 9 diferentes valores de densidad de corriente del ánodo aplicada para la geometría del reactor con una distancia de 2.5 cm.

Como se puede observar, el cambio de grosor total del electrodo no tienen un patrón definido de crecimiento o de disminución ya que para cada cambio aplicado, se incrementa o disminuye el cambio de grosor total del electrodo aplicado en el tiempo quince, por lo cual con estos resultados no se puede concluir un resultado de interés para esta investigación. Por otro lado para el DCA de -0.0003 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más pequeño de -0.00031 A/dm^2 y para el DCA de -0.0004 A/dm^2 el resultado no convergió, por lo cual fue necesario probar con un valor más grande de -0.00039 A/dm^2 .

Capítulo 4 - Discusión

Como se comentó anteriormente en los resultados, el potencial del electrolito a través del tiempo para cada una de las geometrías no tiene un comportamiento definido que se pueda predecir a través de las técnicas estadísticas clásicas, por lo cual no se profundizará en obtener resultados relevantes.

Por otro lado, al revisar la Superficie Potencial del Electrolito media en voltios versus la Corriente aplicada en el ánodo para las tres configuraciones de los electrodos definidas se pueden observar a continuación.

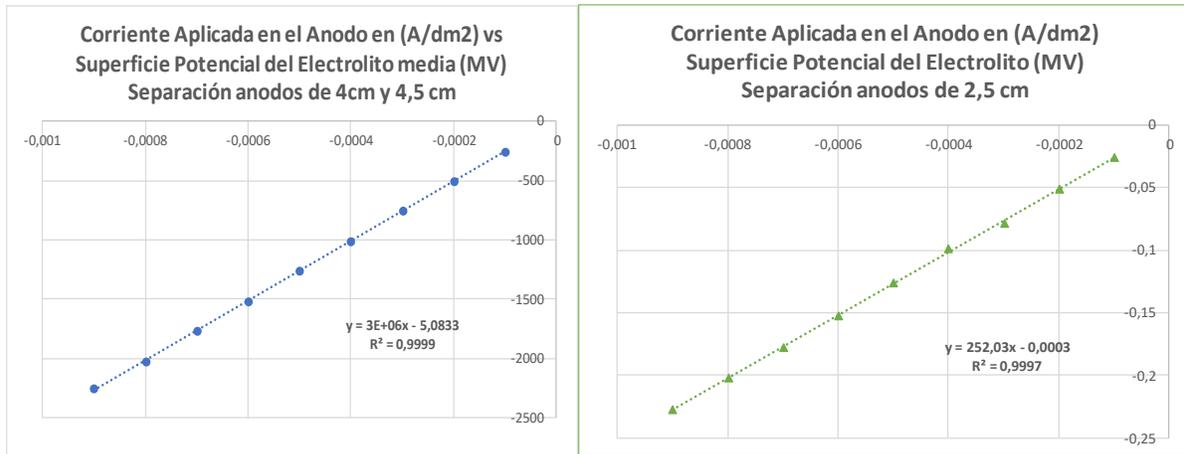


Figura 36: Relación entre la corriente aplicada en el anodo y la superficie potencial del electrolyto media para las tres distintas geometrías. Se puede observar que la relación entre ambas variables es de tipo lineal.

Adicionalmente, para el estudio de los perfiles de densidad de corriente, teniendo en cuenta la máxima corriente, se observa un punto de inflexión pronunciado entre -0.0005 y $-0,0003$ (A/dm²) para las geometrías con separaciones de los electrodos de 4 cm y de 4,5 cm de separación. Por otro lado la separación de 2.5 cm de separación no tiene un punto de inflexión,

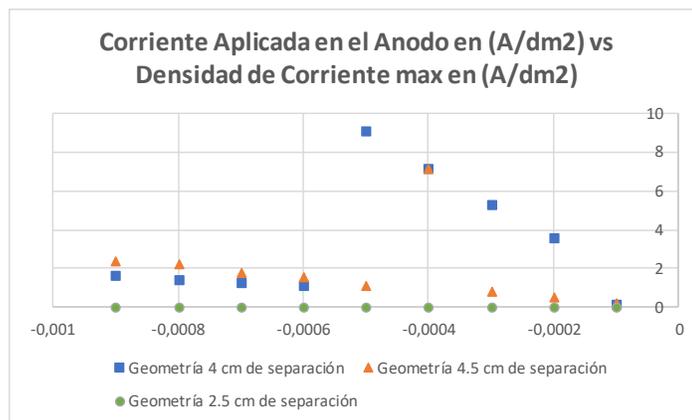


Figura 37: Densidad de corriente de flujo máxima de acuerdo a la corriente aplicada para las tres distintas configuraciones del reactor.

Además, al analizar el Potencial Eléctrico Externo máximo para cada una de las geometrías, se pudo detectar una relación lineal con los DCA aplicado en el reactor. Se puede observar que los resultados son idénticos para las configuraciones con

separaciones de 4cm y de 4.5 cm. Los resultados de dichas geometrías se pueden apreciar a continuación:

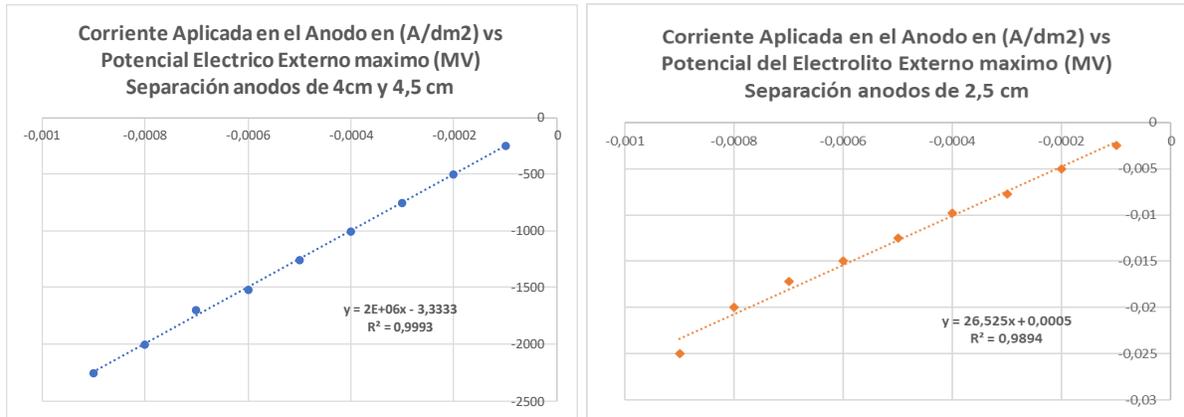


Figura 38: Relación entre la corriente aplicada en el ánodo y el potencial del electrolito externo máximo para las tres distintas geometrías. Se puede observar que la relación entre ambas variables es de tipo lineal.

Capítulo 5 - Conclusiones

5.1 Cumplimiento de objetivos y aportes a líneas de investigación de grupo

1. En este estudio se realizó una revisión bibliométrica en la cual se encontraron 19 artículos relacionados con el objeto de estudio, en donde la gran mayoría de estos se utilizan simulaciones y/o simulaciones combinadas con experimentación para estudiar este fenómeno.

2. Se elaboró una geometría 2D y se propuso un tipo de mallado para un reactor batch de placas paralelas en donde se tuvo en cuenta una distribución de corriente secundaria, ya que se contaban con electrodos (2 ánodos y 2 cátodos configurados en paralelo) y un medio de transporte de corriente (el electrolito, que en este caso es agua contaminada con Pb^{2+})

3. Se definieron los parámetros tales como la dimensión del reactor y el tamaño de los ánodos, de acuerdo con las investigaciones revisadas en el estado del arte, el potencial de equilibrio del Plomo, la conductividad del electrolito suponiendo que este solo tiene iones de Plomo disuelto y ningún material que genere algún tipo de turbidez en el mismo, la masa molar y densidad del Plomo, el intercambio de densidad de corriente del Plomo y el Hidrógeno. Por otro lado, la corriente aplicada en forma de densidad de corriente se definió como la variable con la cual se definiría este estudio.

4. Se optimizó el parámetro de la corriente aplicada para cada una de las geometrías, para obtener la mayor deposición máxima en el proceso de electrocoagulación.

5. Se generaron las curvas de Superficie Potencial del Electrolito media, Densidad de Corriente máxima, el Potencial Eléctrico Externo máximo, y la cantidad de Plomo depositada máxima en relación con la densidad de corriente (en este caso es la corriente aplicada), para cada una de las geometrías propuestas.

5.2 Producción asociada al proyecto

Se generaron 9 simulaciones en Comsol para cada configuración de electrodos propuesta, que en este caso fueron 3. En dichas simulaciones solo se utilizó la física de distribución de corriente secundaria. Por otro lado, se generaron unas gráficas en Excel con las relaciones de las variables estudiadas en relación con la corriente máxima. Para algunos de estos parámetros se identificó una relación lineal, mientras que para los otros parámetros se identificó un punto de inflexión. Por otro lado la geometría con espaciamiento de 2.5 cm presentó para algunas variables unos resultados distintos a los obtenidos en las otras 2 geometrías.

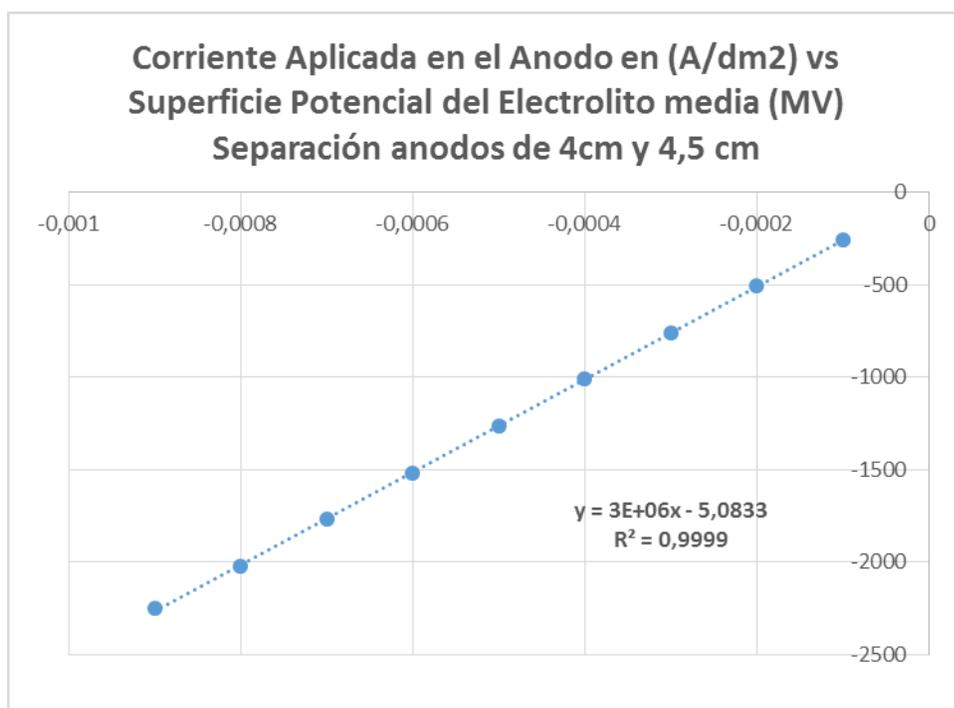
5.3 Líneas de trabajo futuras

Para trabajos futuros, se recomienda realizar este estudio en una geometría 3D, en donde se tengan en cuenta comportamientos físicos un poco más acercados a la realidad, tales como que el agua residual estará turbia, por lo cual se tendría en cuenta una distribución de corriente primaria, secundaria y terciaria. Adicionalmente se estudiarían más configuraciones de reactores en paralelo, como también el cambio de superficie resultante por el proceso de electrocoagulación para identificar mejoras en las geometrías propuestas.

Anexos

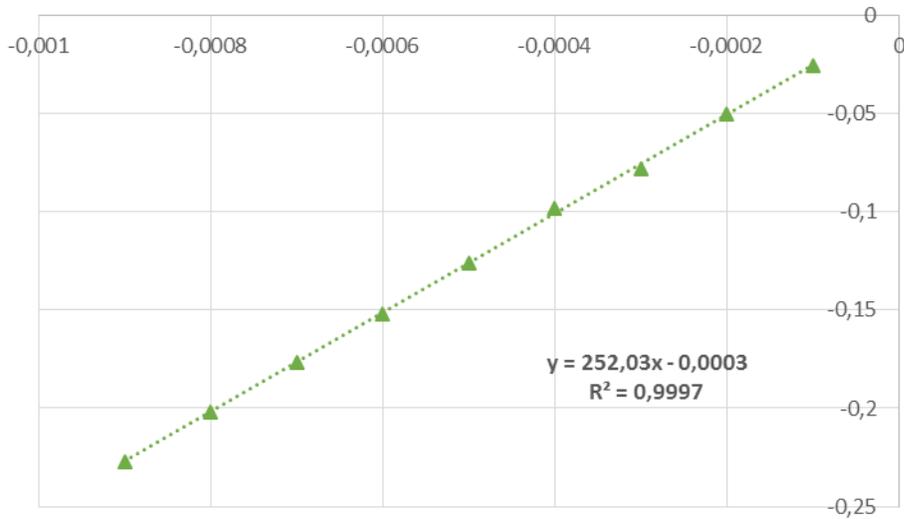
Superficie Potencial de Electrolito (Media) Anexo A

Corriente (A/dm ²)	Superficie Potencial del Electrolito (MV)
-0,0001	-253
-0,0002	-505
-0,0003	-758
-0,0004	-1010
-0,0005	-1260
-0,0006	-1520
-0,0007	-1770
-0,0008	-2020
-0,0009	-2250



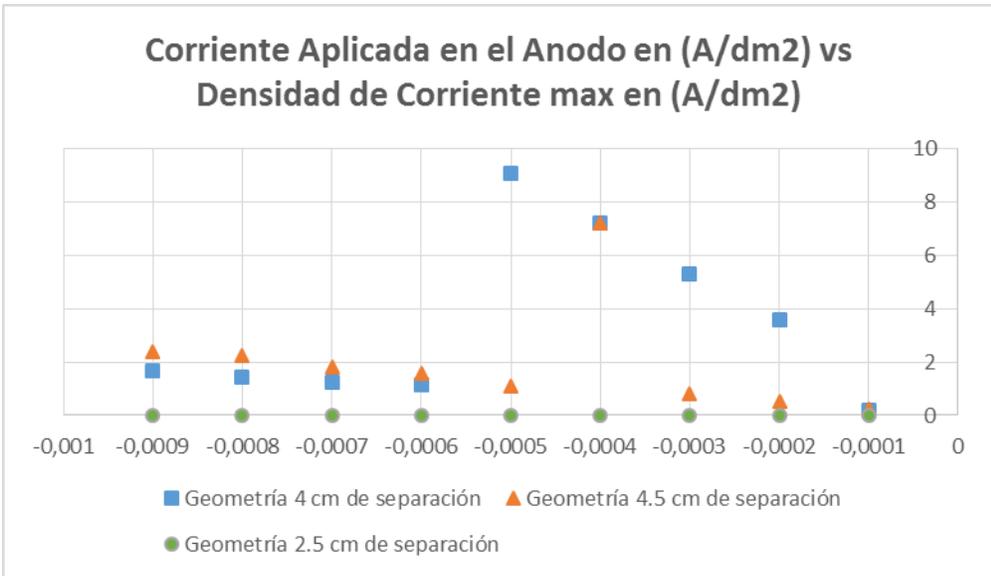
Corriente (A/dm ²)	Superficie Potencial del Electrolito (MV)
-0,0001	-0,0253
-0,0002	-0,0505
-0,0003	-0,0783
-0,0004	-0,0985
-0,0005	-0,126
-0,0006	-0,152
-0,0007	-0,177
-0,0008	-0,202
-0,0009	-0,227

**Corriente Aplicada en el Anodo en (A/dm²) vs
Superficie Potencial del Electrolito media (MV)
Separación anodos de 2,5 cm**

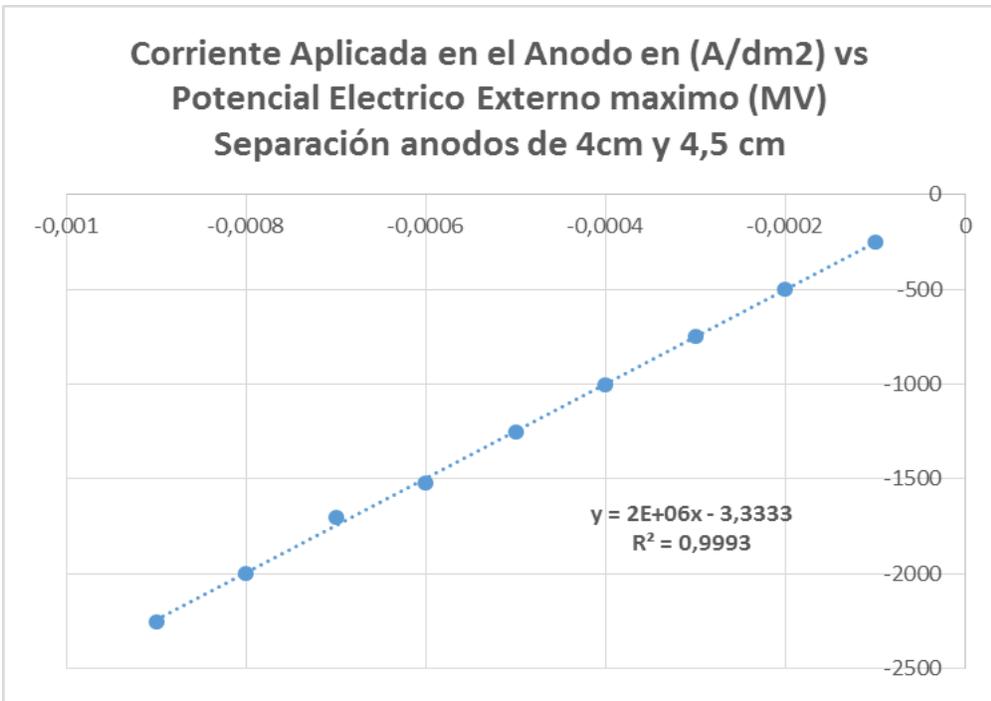


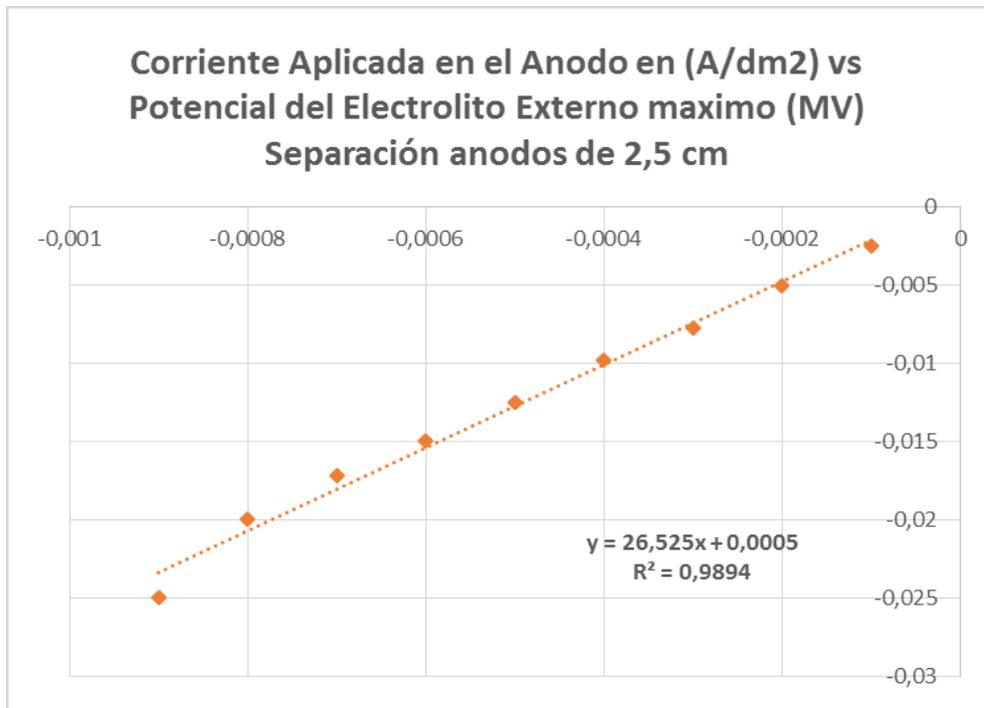
Densidad de Corriente (Max) Anexo B

Corriente (A/dm ²)	Geometría 4 cm de separación	Geometría 4.5 cm de separación	Geometría 2.5 cm de separación
-0,0001	0,182	0,26	0,0000132
-0,0002	3,6	0,52	0,0000265
-0,0003	5,3	0,8	0,0000425
-0,0004	7,2	7,2	0,0000525
-0,0005	9,1	1,1	0,0000675
-0,0006	1,15	1,6	0,000081
-0,0007	1,25	1,82	0,000092
-0,0008	1,45	2,25	0,000108
-0,0009	1,65	2,4	0,000121



Potencial Electrico Ext (min) Anexo C





Essentials of Postprocessing and Visualization in COMSOL Multiphysics
[http://www.addlink.es/images/pdf/COMSOL_HANDBOOK_SERIES Essentials of Postprocessing and Visualization.pdf](http://www.addlink.es/images/pdf/COMSOL_HANDBOOK_SERIES_Essentials_of_Postprocessing_and_Visualization.pdf) Anexo D

Referencias

- Al-Barakat, H. S.-H. (2020). Modeling and Simulation of Wastewater Electrocoagulation Reactor. En *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*.
- Arango Ruiz, Á. (2005). La electrocoagulación: una alternativa para el tratamiento de aguas residuales. En Á. Arango Ruiz, *La electrocoagulación: una alternativa para el tratamiento de aguas residuales*. Antioquia, Colombia: Revista Lasallista de Investigación.
- Babichev, S., Lytvynenko, V., & Wójcik, W. S. (2020). Lecture Notes in Computational Intelligence and Decision Making. En S. Babichev, V. Lytvynenko, & W. S. Wójcik. Springer Nature Switzerland AG.
- Bennajah, M. M. (2010). Defluoridation of drinking water by electrocoagulation/electroflotation: Kinetic study. En M. M. Bennajah, *Defluoridation of drinking water by electrocoagulation/electroflotation: Kinetic study* (págs. 37-45). Journal of Urban and Environmental Engineering.
- Carreño, G., Vizguerra Morales, P., Baltazar Vera, J. C., Puy y Alquiza, M. J., Delgado Galván, X. V., Mora Rodríguez, J. J., & Aguilera, A. F. (2018). A Hydrodynamic and Mass Transfer Study Based on Modeling and Numerical Simulation of an Electrocoagulation Process for Sulfate Ions Removal. En *ECS Transactions* (págs. 99-118).
- Castañeda, L. F. (2020). Electrocoagulation as an affordable technology for decontamination of drinking water containing fluoride: A critical review. En L. F. Castañeda, *Electrocoagulation as an affordable technology for decontamination of drinking water containing fluoride: A critical review* (pág. 84). Chemical Engineering Journal.
- Chang, R. (2002). Química General 7Th Edición. En R. Chang, *Química General 7Th Edición* (págs. 1-1004). McGrawHill.
- COMSOL. (2017). Electrodeposition Module. *COMSOL Multiphysics User Guide: Electrodeposition*.

- Daneshvar, N., Khataee, A. R., & Djafarzadeh, N. (2006). The use of artificial neural networks (ANN) for modeling of decolorization of textile dye solution containing C. I. Basic Yellow 28 by electrocoagulation process. En *Journal of Hazardous Materials* (págs. 1788-1795).
- Escobar, C., Soto-Salazar, C., & Inés Toral, M. (2006). Optimization of the electrocoagulation process for the removal of copper, lead and cadmium in natural waters and simulated wastewater. En *Journal of Environmental Management* (págs. 384-391).
- García-Lara, A. M.-O.-V. (2009). An empirical model for treatment of arsenic contaminated underground water by electrocoagulation process employing a bipolar cell configuration with continuous flow. En A. M.-O.-V. García-Lara. 2009: Saltillo Coah.
- Gasparovic, C. L., Manfredi, Eyng, E., Frare, L. M., Sabbi, D. B., Larissa, . . . Orssatto, F. (2016). Velocity simulation of an electrochemical reactor for textile wastewater treatment. En *Proceedings of the 6th IASTED International Conference on Modelling, Simulation and Identification, MSI 2016* (págs. 185-190).
- Hakizimana, J. N. (2017). Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches. En J. N. Hakizimana, *Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches* (págs. 1-21). Desalination.
- Hakizimana, J. N. (s.f.). Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches. En *Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches*.
- Kumar, N. S. (2010). Factors influencing arsenic and nitrate removal from drinking water in a continuous flow electrocoagulation (EC) process. En N. S. Kumar, *Factors influencing arsenic and nitrate removal from drinking water in a continuous flow electrocoagulation (EC) process* (págs. 528-533). Journal of Hazardous Materials.
- Mbacké, M. K. (2016). Electrocoagulation process applied on pollutants treatment-experimental optimization and fundamental investigation of the crystal violet dye removal. En M. K. Mbacké, *Electrocoagulation process applied on pollutants*

- treatment- experimental optimization and fundamental investigation of the crystal violet dye removal* (págs. 4001-4011). *Journal of Environmental Chemical Engineering*.
- Multiphysics, C. C. (s.f.). *Decorative Plating*.
- Orssatto, F., Tavares, M. H., da Silva, F. M., Eyng, E., Fleck, L., & Frare, L. M. (2018). Optimization of the treatment of wastewater from a slaughterhouse and packing plant by the combination of electrocoagulation and tannin-based coagulant. En *Desalination and Water Treatment* (págs. 82-92).
- Phalakornkule, C. B. (2010). Investigation of Electrochemical Variables and Performance of a Continuous Upflow Electrocoagulation Process in the Treatment of Reactive Blue 140. En C. B. Phalakornkule, *Investigation of Electrochemical Variables and Performance of a Continuous Upflow Electrocoagulation Process in the Treatment of Reactive Blue 140* (págs. 2325-2332). *Water Environment Research*.
- Plate, P., Reactor, E., Cr, R., Electrocoagulation, V., Long, M., Engineering, C., & Carolina, S. (2008). Simulation of a Parallel Plate Electrochemical Reactor Used to Reduce Cr(VI) Via Electrocoagulation Method. En *Simulation of a Parallel Plate Electrochemical Reactor Used to Reduce Cr(VI) Via Electrocoagulation Method* (págs. 151-165).
- Safonyk, A. A. (2019). Advances in Intelligent Systems and Computing. En *Modeling and Automation of the Electrocoagulation Process in Water Treatment* (págs. 451-463). *Advances in Intelligent Systems and Computing*.
- Safonyk, A. O. (2019). Modeling and Simulation in Engineering Modeling of the Electrocoagulation Processes in Nonisothermal Conditions. En *Modelling and Simulation in Engineering*.
- Song, P. Q. (2018). Numerical simulation and exploration of electrocoagulation process for arsenic and antimony removal: Electric field, flow field, and mass transfer studies. En P. Q. Song, *Journal of Environmental Management* (págs. 336-345).