

**“OPTIMIZACIÓN Y ESCALAMIENTO DE UN
REACTOR ELECTROQUÍMICO DE PLACAS
PARALELAS”**

TESIS PRESENTADA POR:

I.Q. JOSÉ TRINIDAD LÓPEZ MALDONADO

PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRÍA EN ELECTROQUÍMICA

AGOSTO, 2018

Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica

REALIZADO POR:

I.Q. JOSÉ TRINIDAD LÓPEZ MALDONADO

DIRIGIDA POR:

DR. FEDERICO CASTAÑEDA ZALDÍVAR

SINODALES

Dr. Fernando Felipe Rivera Iturbe

Presidente

Firma

Dra. María Yolanda Reyes Vidal

Secretario

Firma

M. C. Jesús Cárdenas Mijangos

Vocal

Firma

Dr. German Orozco Gamboa

Vocal

Firma

DEDICATORIAS

A Dios.

Por darme la oportunidad de vivir y por estar conmigo en cada paso que doy, por fortalecer mi corazón e iluminar mi mente y por haber puesto en mi camino a aquellas personas que han sido mi soporte y compañía durante todo el periodo de estudio.

A mi esposa Ángela.

Por su apoyo, su amor, su cariño y ánimo que me brinda día con día para alcanzar nuevas metas, tanto profesionales como personales; eres mi inspiración y mi motivación.

A mis padres María Leticia y Felipe de Jesús.

Por apoyarme en todo momento, por sus consejos, sus ejemplos de perseverancia, sus valores, por la motivación constante que me ha permitido ser una persona de bien, por el valor mostrado para salir adelante, pero más que nada por su amor.

A mis hermanos Karina y Eduardo.

Por ser un buen ejemplo de hermanos mayores de los cuales aprendí aciertos y de momentos difíciles, gracias por estar conmigo y apoyarme siempre, los quiero mucho.

A mis familiares.

Mis abuelos, Julio, Rosa, Eva y Felipe (QEPD), por quererme y apoyarme siempre, esto también se lo debo a ustedes. A mis sobrinos y ahijados Eduardo, Ángel, Michelle, Itzel, Axel y Alejandra, para que vean en mi un ejemplo a seguir.

RESUMEN

La ingeniería electroquímica es una herramienta utilizada en procesos de almacenamiento de energía, remediación ambiental, así como en los procesos de síntesis orgánica e inorgánica, con la ventaja de realizar síntesis muy difíciles por métodos clásicos. No obstante, esta aplicación exige el continuo desarrollo, optimización y escalamiento de reactores electroquímicos. El progreso de estas unidades de proceso se realiza implementando dos herramientas: una que utiliza ecuaciones fundamentales (Dinámica Computacional de Fluidos o CFD, por sus siglas en inglés) y otra mediante la caracterización experimental. Sin embargo, estas herramientas tienen ciertas desventajas al ser utilizadas por separado, por lo que se propone en el presente trabajo la implementación de modelos teóricos-paramétricos que describan la hidrodinámica y el transporte de masa en un reactor electroquímico de placas paralelas.

La uniformidad del flujo en el área de reacción de los reactores tipo filtro prensa está fuertemente asociada al diseño de la entrada y salida del electrolito y al uso de promotores de turbulencia, estos efectos resultan críticos en su rendimiento. Visto esto, se implementaron tres geometrías de distribuidores de flujo (bifurcado, canalizado y peine III) con el fin de lograr optimizar la hidrodinámica y el transporte de masa de un reactor electroquímico comercial de placas paralelas. Estas geometrías, se evaluaron en régimen de flujo laminar ($50 \leq Re \leq 2000$) vía CFD y se analizó el efecto de cada geometría sobre la uniformidad del flujo, distribución de tiempos de residencia, transporte de masa y caída de presión.

Debido a la limitación de validez de las ecuaciones fundamentales en las que se basa el CFD, es necesario complementar con metodologías experimentales basadas en la generación de números adimensionales (Sh, Re, Sc y Pe). El reactor electroquímico comercial es de un volumen considerable, implicando el uso de grandes cantidades de reactivo en el proceso de validación, el cual se realizará en un trabajo posterior. Sin embargo, en el presente trabajo se planteó la necesidad de obtener los parámetros teóricos de escalamiento de la unidad de proceso (Scale Down, 1:2), con el fin de obtener un prototipo a nivel laboratorio que emplee menor volumen de disolución, pero que mantenga las características de operación y desempeño al considerar similitudes geométricas, hidrodinámicas y químicas.

ABSTRACT

Electrochemical engineering is a tool used in energy storage processes, environmental remediation, as well as in organic and inorganic synthesis processes, with the advantage of making very difficult syntheses by classical methods. However, this application requires the continuous development, optimization and scaling of electrochemical reactors. The progress of these units of the process is carried out by implementing two tools: one that uses fundamental equations (Computational Fluid Dynamics or CFD) and further by experimental characterization. However, these tools have certain disadvantages when they are used separately, so we propose in this work the implementation of theoretical-parametric models that describe hydrodynamics and mass transport in a parallel plate electrochemical reactor.

The uniformity of the flow in the reaction area of filter press type reactor is strongly associated with the use of turbulence promoters and the design of the electrolyte input and output, these effects are critical in their performance. Given this, three geometries of flow distributors (Bifurcated, canalized and comb III) were implemented to optimize the hydrodynamics and the mass transport of commercial parallel plate electrochemical reactor. These geometries were evaluated in laminar flow regime ($50 \leq Re \leq 2000$) via CFD. Analyzing the effect of each geometry on the uniformity of the flow, residence times distribution, mass transport, and pressure drop.

Due to the limitation of the validity of the fundamental equations on which the CFD is based, it is necessary to complement with experimental methodologies based on the generation of dimensionless numbers (Sh, Re, SC and Pe). To perform the validation, the commercial electrochemical reactor has a large volume, involving the use of large quantities of reagent. Therefore, the need to scale this process (Scale Down, 1:2) to a smaller volume was accomplished, to obtain a laboratory-level prototype that uses less volume of solution, but that maintains the characteristics of operation and performance when considering geometrical, kinematic and chemical similarity.

AGRADECIMIENTOS

Ha sido un periodo de aprendizaje intenso, no solo en el campo científico sino también a nivel personal. Escribir este trabajo ha tenido un gran impacto en mí, por ello agradezco a todas aquellas personas que me han ayudado y apoyado durante este proceso.

Antes que nada, quiero agradecer a mis padres María y Felipe, por darme la vida, por la formación y educación que con mucho esfuerzo e ímpetu lograron darme. Gracias por los regañones que merecía y no entendía. Gracias mamá y papá por estar al pendiente durante toda esta etapa.

A mi esposa Ángela, por compartir su vida con la mía, por darme su amor, por saber aguantarme en los momentos difíciles, por darme la confianza y no dejarme caer, por su apoyo incondicional.

A mis hermanos Karina y Eduardo, que con su amor me han enseñado a salir adelante. Gracias por su paciencia, gracias por preocuparse por su hermano menor.

A mi asesor de tesis el Dr. Federico Castañeda, por su esfuerzo y dedicación, quien con sus conocimientos, su experiencia, su paciencia y su motivación han logrado que yo pueda realizar esta tesis, por su apoyo y amistad que me han permitido aprender mucho más de lo estudiado en el proyecto.

De igual manera agradecer al Dr. Fernando Rivera, por su visión crítica, el conocimiento compartido y el apoyo fundamental para la realización de este proyecto. Gracias por su amistad y sus consejos que me han ayudado a formarme como persona e investigador.

A mis sinodales, la Dra. Yolanda Reyes, el Dr. German Orozco y el M.C. Jesús Cárdenas, gracias por brindarme sus enseñanzas, sus ideas, sus consejos y por el tiempo que han dedicado para leer este trabajo.

A mis compañeros de maestría, Víctor, Leticia, Oscar V., Miguel, Carlos, Perla, Alina, Edgar, Oscar A., Francy, Jesús y Marcos, gracias por su compañía, su paciencia y el apoyo brindado durante todo este tiempo.

Al Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica por brindarme la oportunidad de formarme y gracias a todas las personas que fueron partícipes de este proceso.

Al proyecto No. 246052 del Fondo CONACYT-SENER-Sustentabilidad Energética por el financiamiento otorgado para la realización de este proyecto.



**Este trabajo fue realizado en el Centro de
Investigación y Desarrollo Tecnológico en
Electroquímica (CIDETEQ), bajo la dirección de:**

Dr. Federico Castañeda Zaldívar

CONTENIDO

Hoja de aprobación	II
Dedicatorias	III
Resumen	IV
Abstract	V
Agradecimientos	VI
Contenido	VIII
Lista de Abreviaturas y Símbolos	XI
Lista de Figuras	XIII
Lista de Tablas	XV
1. Introducción	1
2. Marco Teórico	2
2.1. El reactor electroquímico tipo filtro prensa	2
2.2. Caracterización de reactores electroquímicos	4
2.2.1. Hidrodinámica	4
2.2.1.1. Visualización directa del flujo	4
2.2.1.2. Distribución de tiempos de residencia (RTD)	4
2.2.1.3. Estudio de la caída de presión en reactores	7
2.2.2. Transporte de masa por difusión-convección	8
2.2.3. Números y correlaciones adimensionales	11
2.2.4. Distribución de corriente	13
2.3. Dinámica computacional de fluidos (CFD)	14
2.4. Escalamiento de reactores electroquímicos	16
2.5.1. Criterios de escalamiento	17
2.5.1.1. Similitud geométrica	17
2.5.1.2. Similitud hidrodinámica	17
2.5.1.3. Similitud química	17
2.5.1.4. Similitud eléctrica	18
3. Antecedentes	18
3.1. Planteamiento del problema	18
3.2. Modelado de reactores electroquímicos	19
4. Justificación	20

5. Hipótesis	21
6. Objetivos	21
6.1. Objetivo general	21
6.2. Objetivos particulares	21
7. Metodología	21
7.1. Estudios CFD	21
7.1.1. Modelado hidrodinámico del reactor electroquímico en régimen de flujo laminar	22
7.1.1.1. Hidrodinámica	22
7.1.1.2. Modelado de un trazador en el reactor electroquímico	23
7.1.2. Modelado del transporte de masa en el reactor electroquímico en régimen de flujo laminar	24
7.2. Estudio de escalamiento (Scale Down) del reactor electroquímico	25
8. Resultados	26
8.1. Hidrodinámica	26
8.1.1. Evaluación de la geometría de los distribuidores de flujo	26
8.1.2. Simulación de la visualización de un trazador dentro del reactor electroquímico con distribuidores de flujo	29
8.1.3. Comparación de curvas RTD simuladas para distintos distribuidores de flujo	30
8.1.4. Obtención del número de Peclet simulados para distintos distribuidores de flujo	31
8.1.5. Caída de presión para distintos distribuidores de flujo, correlación tipo $\Delta P = cRe^d$	33
8.2. Estudio del transporte de masa en el reactor electroquímico	34
8.2.1. Modelado del transporte de masa, correlación tipo $Sh = aRe^bSc^{0.33}$ para distintos distribuidores de flujo	34
8.3. Estudio de escalamiento (Scale Down) del reactor electroquímico	37
8.3.1. Comparación del modelado hidrodinámico del reactor a escala real con el scale down	37
8.3.2. Simulación de la visualización del trazador en el scale down del reactor a escala real	39
8.3.3. Comparación de curvas RTD simuladas del reactor a escala real con el scale down	40

8.3.4. Comparación de números de Peclet simulados del reactor a escala real con el scale down -----	40
8.3.5. Comparación de la caída de presión del reactor a escala real con el scale down -----	41
8.3.6. Comparación del transporte de masa del reactor a escala real con el scale down -----	43
9. Conclusiones -----	44
10. Perspectivas-----	45
11. Bibliografía-----	45
Anexos -----	49
A.1. Escalamiento -----	49
A.1.1. Cálculos para la similitud geométrica -----	49
A.1.2. Cálculo para la similitud cinemática -----	51
A.1.3. Calculo para la similitud química -----	52

Lista de abreviaturas y símbolos

Abreviatura o símbolo	Definición	Unidades
ρ	<i>Densidad del fluido</i>	Kg/m^3
\mathbf{u}	<i>Vector de velocidad</i>	--
\mathbf{n}	<i>Vector normal a la superficie</i>	--
p	<i>Presión</i>	Pa
μ	<i>Viscosidad dinámica</i>	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
c	<i>Concentración</i>	mol/m^3
$c_{i,0}$	<i>Concentración de la especie i a la entrada</i>	mol/m^3
$c_{i,w}$	<i>Concentración de la especie i en la superficie del electrodo</i>	mol/m^3
D	<i>Coefficiente de difusión</i>	m^2/s
t	<i>Tiempo</i>	s
θ	<i>Tiempo adimensional</i>	--
τ	<i>Tiempo de residencia espacial</i>	s
Q	<i>Tasa volumétrica de entrada</i>	m^3
σ^2	<i>Varianza</i>	--
Pe_r	<i>Numero de Péclet</i>	--
σ^2_θ	<i>Varianza adimensional</i>	--
ΔP	<i>Caída de presión</i>	Pa
Sh	<i>Número de Sherwood</i>	--
Sc	<i>Número de Schmidt</i>	--
Re	<i>Número de Reynolds</i>	--
k_m	<i>Coefficiente de transporte de masa</i>	m/s
j_A	<i>Densidad de corriente</i>	A/m^2
D_{eq}	<i>Diámetro equivalente</i>	m
g	<i>Aceleración de la fuerza de gravedad</i>	m/s^2
l	<i>Longitud característica (espacio interelectrodo, radio o diámetro de un disco o cilindro, diámetro de poro medio de un electrodo tridimensional poroso)</i>	m
P	<i>Parámetro de polarización</i>	--
k	<i>Conductividad del electrolito</i>	S/m

Abreviatura o símbolo	Definición	Unidades
<i>E</i>	<i>Potencial de electrodo</i>	<i>V</i>
<i>E_s</i>	<i>Potencial de la disolución</i>	<i>V</i>
<i>i</i>	<i>Densidad de corriente</i>	<i>A/m²</i>
<i>F</i>	<i>Constante de Faraday</i>	<i>C/mol</i>

Lista de Figuras

Figura 1. Medición de la RTD. -----	6
Figura 2. Proceso de transformación de A en B en una celda electroquímica. -----	8
Figura 3. Geometrías del canal y distribuidores de flujo utilizados en la optimización hidrodinámica. a) canal de flujo sin modificación y b) distribuidores de flujo propuestos. -----	22
Figura 4. Dimensiones del canal de flujo del reactor electroquímico comercial a escala original y scale down (1:2). -----	26
Figura 5. Magnitud del campo de velocidad simulado en el reactor electroquímico a $Re=200$ al usar la celda original y con distribuidores de flujo del tipo bifurcado, canalizado y peine III. -----	27
Figura 6. Perfiles de velocidad simulados en el reactor electroquímico a $Re = 200$. Obtenidos para la celda original y utilizando distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III, evaluados en coordenadas $Y = 58, 160$ y 262 mm. -----	28
Figura 7. Líneas de flujo trazadas a $Re = 200$, utilizando la celda original y con distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III. -----	29
Figura 8. Comparación de la visualización del trazador simulado en el reactor electroquímico para $Re = 200$ a diferentes momentos (1, 5, 10, 20 y 40 s), utilizando la celda original y distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III. -----	30
Figura 9. Comparación de curvas RTD simuladas en el reactor electroquímico para $Re = 200$, utilizando un — celda original y distribuidores de flujo — bifurcado, — canalizado y — peine III. -----	31
Figura 10. Comparación del número de Pe obtenidos por simulación del ● celda original y utilizando distribuidores de flujo ● bifurcado, ● canalizado y ● peine III. Evaluados en $50 \leq Re \leq 2000$. -----	32
Figura 11. Gráfico logarítmico de la caída de presión frente a número de Re para el reactor electroquímico con distribuidores de flujo (— Bifurcado, — canalizado, — peine III y en — canal vacío). -----	33
Figura 12. Comparación del flujo difusivo sobre la superficie del cátodo estimado por simulación, $Re = 200$, $c_{i,0} = 15 \text{ mol/m}^3$ en el reactor electroquímico utilizando un canal vacío y distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III. -----	35
Figura 13. Ajuste lineal obtenido por simulación en el reactor electroquímico para $50 \leq Re \leq 2000$, usando un — celda original y distribuidores de flujo de tipo — bifurcado, — canalizado y — peine III. -----	36
Figura 14. Comparación de los campos de velocidad obtenidos a $Re = 200$ para el reactor a escala real y scale down usando la celda original y distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III. -----	37

Figura 15. Comparación de los perfiles de velocidad del reactor a escala real y scale down usando la celda original y distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III, obtenidos a $Re = 200$ y evaluando a $6 d_{eq}$ en la coordenada Y. -----	38
Figura 16. Comparación de la visualización del trazador en el reactor electroquímico escalado para $Re = 200$, utilizando la celda original y distribuidores de flujo bifurcado, canalizado y peine III. -----	39
Figura 17. Comparación de curvas RTD del reactor a escala real con el scale down, obtenidas a $Re = 200$ utilizando la — celda original y distribuidores de flujo — bifurcado, — canalizado y — peine III. -----	40
Figura 18. Comparación de número de Peclet simulado en función del número de Re del scale down y el reactor a escala real, usando la ● celda original y con distribuidores de flujo ● bifurcado, ● canalizado y ● peine III. Evaluados en $50 \leq Re \leq 2000$. -----	41
Figura 19. Gráfico logarítmico de la caída de presión frente a número de Re para el reactor electroquímico a escala real y scale down, usando la — celda original y distribuidores de flujo — Bifurcado, — canalizado, — peine III. -----	42
Figura 20. Comparación del ajuste lineal obtenido por simulación en el reactor electroquímico a escala real y scale down para $50 \geq Re \leq 2000$, usando la — celda original y distribuidores de flujo de tipo — bifurcado, — canalizado y — peine III. -----	43
Figura 21. Geometría del reactor electroquímico a escalar. -----	49

Lista de Tablas

Tabla 1. Grupos adimensionales utilizados en el transporte de materia electroquímico. -----	11
Tabla 2. Valores simulados para las constantes c y d de la correlación $\Delta P = cRe^d$ en el reactor electroquímico, utilizando la celda original y con distribuidores de flujo. -----	34
Tabla 3. Constantes obtenidas por simulación para la correlación de transporte de masa $Sh = aRe^bSc^{0.33}$ en el reactor electroquímico utilizando la celda original y con distribuidores de flujo. -----	36
Tabla 4. Valores simulados para las constantes c y d de la correlación $\Delta P = cRe^d$ en el reactor electroquímico scale down y original usando un canal vacío y con distribuidores de flujo. -----	42
Tabla 5. Constantes obtenidas por simulación para la correlación de transporte de masa $Sh = aRe^bSc^{0.33}$ en el reactor electroquímico a escala real y scale down, utilizando la celda original y con distribuidores de flujo. -----	44

1. Introducción

Los reactores electroquímicos tipo filtro prensa equipados con electrodos de placas paralelas se utilizan frecuentemente en la práctica industrial como celdas de uso multipropósito empleadas en una amplia gama de procesos electroquímicos [1]. Con esta geometría se obtiene un flujo uniforme y un elevado transporte de masa, lo que facilita la expansión modular y el escalamiento. La configuración filtro prensa es ampliamente utilizada en procesos electroquímicos a gran escala, como la producción de cloro-sosa, productos farmacéuticos y tratamiento de aguas residuales [2, 3].

El patrón de flujo del fluido afecta el rendimiento del reactor, dicho patrón depende principalmente del diseño de los distribuidores de flujo a la entrada y salida del reactor [4]. De acuerdo con esto, la caracterización de la dinámica de fluidos en reactores es esencial, a fin de obtener el perfil de velocidad del fluido y detectar zonas estancadas y los efectos de mezcla posterior en el último. La existencia de estas zonas se convierte en un problema para diferentes procesos electroquímicos tales como: 1) síntesis, ya que con la especie electroactiva agotada sin una regeneración adecuada de electrólito por corrientes frescas, pueden tener lugar reacciones secundarias, disminuyendo la pureza del producto final; 2) procesos con evolución de gas, donde el gas puede bloquear la superficie del electrodo activo, promoviendo su calentamiento y corrosión local [5–7].

Varios trabajos experimentales se encuentran en la literatura, relacionados con el estudio del comportamiento hidrodinámico y el transporte de masa dentro de los reactores electroquímicos tipo filtro prensa [8–13] como las mediciones de corriente límite o los estudios de distribución de tiempos de residencia (RTD, por sus siglas en inglés), entre otros procedimientos experimentales. Sin embargo, la información proporcionada por estas técnicas puede no ser suficiente para comprender el comportamiento hidrodinámico de los reactores filtro prensa. Por lo tanto, se deben usar otros métodos.

En los últimos años, el desarrollo de modelos de simulación de las unidades de reacción electroquímicas se convirtió en una herramienta útil para el diseño, evaluación y comprensión de lo que sucede dentro de dichas unidades de proceso. La simulación hidrodinámica visual determina las zonas que contribuyen a estancamientos dentro del reactor electroquímico [5]. En este caso los estudios RTD son la herramienta esencial

para analizar reactores electroquímicos, detectando desviaciones en el flujo ideal [14], esto involucra la evaluación hidrodinámica dentro del reactor después de la inyección de un trazador [14, 15].

La aplicación de modelos matemáticos acoplados a programas computacionales tiene gran aceptación, ya que reduce costos y tiempos de experimentación. Sin embargo, la simulación de geometrías intrincadas, así como la descripción matemática de fenómenos físicos complejos solicita recursos computacionales elevados. No obstante, ayuda a mejorar el planteamiento y la optimización de los experimentos físicos porque arroja una idea de lo que puede manifestarse, dando al usuario un amplio panorama de lo que se presenta en un experimento físico [16–18].

Visto esto, se propuso la optimización del canal de entrada de una celda comercial y la aplicación de tres geometrías de distribuidores de flujo (Bifurcado, Canalizado y Peine III) mejorando la respuesta hidrodinámica y el transporte de masa en el reactor electroquímico de placas paralelas.

El comportamiento hidrodinámico y el transporte de masa se evaluaron mediante dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) basada en la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes y convección-difusión en estado estacionario y transiente por el método de elemento finito. Obteniendo datos teóricos que describan y permitan mejorar el desempeño de un reactor electroquímico tipo filtro prensa.

Para validar experimentalmente los modelos propuestos en el reactor electroquímico, se realizó un estudio teórico de escalamiento (scale down, 1:2), con el fin de obtener un prototipo de celda a nivel laboratorio que emplee menos volumen de electrolito pero que mantenga las características de operación y desempeño del reactor original.

2. Marco teórico

2.1. El reactor electroquímico tipo filtro prensa

Existen diversos tipos de reactores electroquímicos, los cuales son utilizados en diferentes procesos, dentro de estos reactores se encuentran los reactores ElectroCell AB, FM01-LC y el FM21-SP, el primer reactor se utiliza para estudios de laboratorio, el

segundo a nivel planta piloto y el tercero se ha utilizado en escala industrial para la producción de cloro-sosa [3, 19, 20]. Estos reactores electroquímicos tipo filtro prensa son los más usados en laboratorio y a nivel industrial. La evolución del diseño de estos reactores se debe a la necesidad de tener cero efluentes en procesos industriales [10].

En este tipo de reactores electroquímicos, el patrón de flujo es aparentemente un flujo pistón al comienzo de la zona de reacción, pero a lo largo del área de reacción, el patrón de flujo se distorsiona. En este sentido, el estudiar los efectos de entrada/salida resulta ser un factor crítico a la hora de realizar el escalado. Por lo que, si se optimiza el diseño de la celda a escala laboratorio, lo más probable es que se presenten menos problemas a escala pre-piloto e industrial [21].

El reactor electroquímico tipo filtro prensa es el más utilizado, debido a factores como la alta disponibilidad de repuestos, su alta versatilidad o su fácil escalamiento. Este escalamiento resulta sencillo siempre y cuando el reactor se encuentre trabajando en condiciones de flujo totalmente desarrollado, sin embargo, dependiendo de la geometría, el tamaño de la celda y de las propiedades del fluido, es posible que el reactor se encuentre en condiciones hidrodinámicas de flujo laminar o turbulento [21, 22].

La configuración tipo filtro prensa es de las más utilizadas en reactores electroquímicos. Estos sistemas usualmente consisten en:

- Electrodo encajado en un montaje de platos paralelos.
- Marcos para sostener los electrodos.
- Membranas en caso de un sistema que trabaje en configuración dividida [23].

El desempeño del reactor electroquímico tipo filtro prensa se ve afectado por el modelo de flujo, dicho modelo es principalmente afectado por el diseño de la entrada y salida del electrólito [4] y por procesos secundarios los cuales tienen lugar en el seno de la disolución [24].

La hidrodinámica y el área electroactiva son importantes para el transporte de masa de especies electroactivas del seno de la disolución a la superficie del electrodo, donde la reacción electroquímica tiene lugar. La selección incorrecta del caudal y del área

electroactiva en el reactor electroquímico causan desviaciones en la hidrodinámica, afectando la velocidad del transporte de masa en la celda, que a menudo conduce a procesos ineficientes [25].

2.2. Caracterización de reactores electroquímicos

2.2.1. Hidrodinámica

2.2.1.1. Visualización directa del flujo

Las técnicas de visualización se clasifican en métodos experimentales y métodos de visualización asistida por computadora. Con el progreso computacional, su uso se ha mejorado mediante el procesamiento de imágenes.

El método más utilizado experimentalmente para visualizar el flujo dentro de un sistema es la inyección de un trazador (colorante), filmando el camino del trazador con una cámara digital [26].

2.2.1.2. Distribución de tiempos de residencia (RTD)

El tiempo de residencia t_r de los elementos líquidos en un compartimento de volumen V , posee una distribución alrededor del tiempo de residencia medio t_m , y esta distribución depende de la geometría y de la hidrodinámica del flujo en el interior de este compartimento. El tiempo de residencia t_r del elemento fluido es el tiempo total que este elemento ha permanecido en el volumen V ; en un instante dado un elemento fluido tiene cierta edad en V , y le falta aún cierto tiempo (esperanza de vida) antes de salir del compartimento.

La RTD se determina experimentalmente inyectando una sustancia, molécula o átomo inerte, llamado trazador, al reactor en cierto tiempo $t = 0$ y después midiendo la concentración del trazador, C , en la corriente del efluente en función del tiempo. Además de ser una especie no reactiva que se detecte con facilidad, el trazador debe tener propiedades físicas similares a las de la mezcla de reacción y ser completamente soluble en esa mezcla. Además, no debe adsorberse sobre las paredes u otras superficies del reactor. Estos últimos requisitos son necesarios para que el comportamiento del trazador refleje en realidad el del material que fluye por el reactor. El requisito principal para que un material sea utilizado como trazador, es que la respuesta de la señal sea proporcional

a la concentración. Los dos métodos de inyección más empleados son el de alimentación por pulso y el de alimentación por escalón.

En la alimentación por pulso, se inyecta una cantidad de trazador N_0 de manera repentina como carga a la corriente de alimentación que entra al reactor en un tiempo tan breve como sea posible. Después se mide la concentración a la salida en función del tiempo. La curva de concentración del efluente contra tiempo se conoce como curva C en el análisis RTD. Eligiendo un incremento de tiempo Δt suficientemente pequeño para que la concentración del trazador, $C(t)$, que sale entre el tiempo t y $t + \Delta t$, sea esencialmente la misma [27]. La cantidad de material de trazador ΔN , que sale del reactor entre el tiempo t y $t + \Delta t$, es por lo tanto (Fig. 1.),

$$\Delta N = C(t)Q\Delta t \quad (1)$$

Donde Q es el flujo volumétrico del efluente. En otras palabras, ΔN es la cantidad de material que sale del reactor y ha pasado una cantidad de tiempo entre t y $t + \Delta t$ dentro del reactor. Si ahora se divide entre la cantidad total de material inyectado al reactor N_0 , obtenemos,

$$\frac{\Delta N}{N_0} = \frac{QC(t)}{N_0} \Delta t \quad (2)$$

que representa la fracción del material que tiene un tiempo de residencia en el reactor entre t y $t + \Delta t$.

Para la inyección por pulso, definimos

$$E(t) = \frac{QC(t)}{N_0} \quad (3)$$

de modo que

$$\frac{\Delta N}{N_0} = E(t)\Delta t \quad (4)$$

La cantidad $E(t)$ se conoce como función de la distribución de tiempos de residencia, que describe de manera cuantitativa cuánto tiempo han pasado diferentes elementos del fluido dentro del reactor.

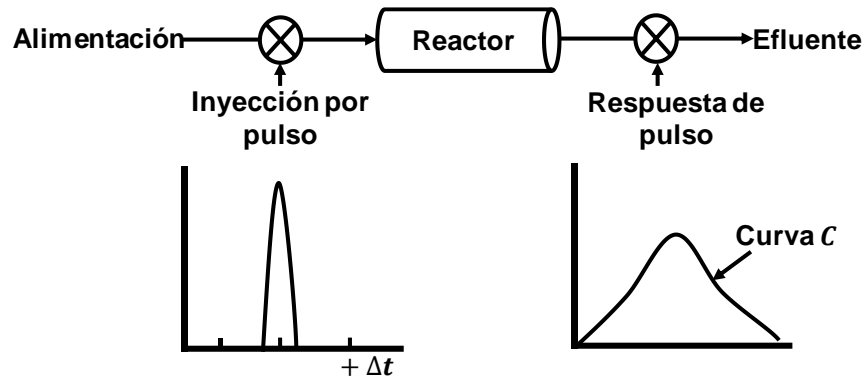


Fig. 1. Medición de la RTD.

Si N_0 se desconoce, puede obtenerse de medir la concentración a la salida sumando todas las cantidades del material, ΔN entre el tiempo cero y el tiempo infinito. Escribiendo de forma diferencial la ecuación (1), se tiene

$$dN = QC(t)dt \quad (5)$$

e integrando, obtenemos

$$N_0 = \int_0^{\infty} QC(t)dt \quad (6)$$

El flujo volumétrico, Q , suele ser constante, de modo que podemos definir $E(t)$ como sigue:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (7)$$

Se sabe que la fracción de todo el material que ha residido un tiempo t en el reactor entre $t = 0$ y $t = \infty$ es 1; por lo tanto,

$$\int_0^{\infty} E(t)dt = 1 \quad (8)$$

Un parámetro empleado con frecuencia es el tiempo espacial o tiempo medio de residencia, t_m que se define como V/Q . En ausencia de dispersión, y para flujo volumétrico constante ($Q = Q_0$), sin importar que tipo de RTD tenga un reactor el tiempo de residencia viene dado por:

$$t_m = \frac{\int_0^{\infty} tE(t)dt}{\int_0^{\infty} E(t)dt} = \int_0^{\infty} tE(t)dt \quad (9)$$

Con el fin de comparar las RTD, es común emplear momentos en lugar de emplear toda la distribución. Para tal finalidad, se emplea el primer momento que es el tiempo de residencia y el segundo en torno a la media y se llama varianza o cuadrado de la desviación estándar. Se define como:

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt \quad (10)$$

Frecuentemente se emplea la RTD normalizada, en lugar de la función $E(t)$ con el fin de comparar curvas obtenidas en diferentes tipos de reactores. Si definimos el parámetro θ como sigue

$$\theta \equiv \frac{t}{t_m} \quad (11)$$

se puede definir una función adimensional $E(\theta)$ así

$$E(\theta) \equiv t_m E(t) \quad (12)$$

y graficarla en función de θ [27].

2.2.1.3. Estudio de la caída de presión en reactores

Un elemento de interés en el análisis de flujo de reactores es la caída de presión ΔP , porque está directamente relacionada con la potencia necesaria para que la bomba mantenga el flujo. Note que $\frac{dP}{dx} = \text{constante}$ y cuando se integra de $x = x_1$, donde la presión es P_1 , hasta $x = x_1 + L$, donde la presión es P_2 , produce:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{P_2 - P_1}{L} \quad (13)$$

y sustituyendo la ecuación (13) en la expresión de la velocidad promedio:

$$v_{prom} = -\frac{R^2}{8\mu} \left(\frac{dP}{dx} \right) \quad (14)$$

la caída de presión se expresa como:

$$\text{Flujo laminar: } \Delta P = P_1 - P_2 = \frac{8\mu L v_{prom}}{R^2} \quad (15)$$

En dinámica de fluidos, ΔP se usa para designar una caída de presión, y por lo tanto es $P_1 - P_2$. Una caída de presión ocasionada por efectos viscosos representa una pérdida de presión irreversible llamada pérdida de presión ΔP_L para destacar que es una pérdida de carga. En la ecuación (15), se observa que la caída de presión es proporcional a la viscosidad μ del fluido y ΔP sería cero si no hubiera fricción. Por lo tanto, la caída de presión de P_1 a P_2 , en este caso se debe solo a efectos viscosos. [28].

2.2.2. Transporte de masa por difusión-convección

Considerándose el transporte de iones A en un medio isotermo desde el seno del electrolito hacia el electrodo, en nuestro caso el cátodo, donde reaccionan según la reacción indicada para producir el componente B (Fig. 2.).

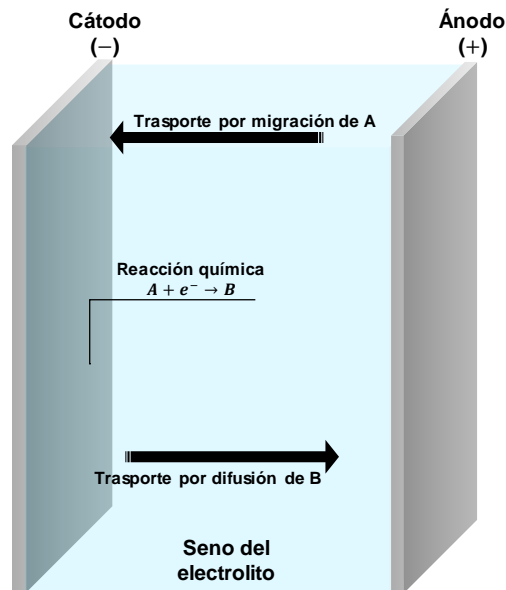


Fig. 2. Proceso de transformación de A en B en una celda electroquímica

Como se indica en el esquema, el proceso correspondiente a la transformación de A en B se descompone en tres etapas básicas, a saber:

- Una etapa del transporte de ion A desde el seno del electrolito hacia el electrodo.
- Una etapa de reacción electroquímica en el electrodo, produciéndose la conversión de A en B.
- Si el componente B es soluble, una etapa de transporte del ion B desde la interfase donde se produce hacia el seno del electrolito. El producto de la

reacción puede ser gaseoso; en este caso, las burbujas de gas se evacúan, abandonando el electrólito [29].

De estas etapas, aquella cuya velocidad sea la más lenta controlará el proceso de transformación de A en B. Se deben considerar a priori como posibles las dos situaciones extremas: de limitación o control por transporte de materia y reacción electroquímica.

En presencia de una concentración de electrólito soporte elevada, el transporte de materia de las especies es descrito por un flujo compuesto de un término de difusión y otro de convección:

$$\mathbf{N}_i = -D_i \nabla c_i + c_i \mathbf{u} \quad (16)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -[\nabla \cdot \mathbf{N}_i] + R_i \quad (17)$$

donde \mathbf{u} es el vector de velocidad del fluido, c_i es la concentración de las especies, D_i es el coeficiente de difusión. Esta es una forma de la ley de Fick con la adición de un término de flujo convectivo $c_i \mathbf{u}$. Un balance de materia para un elemento de volumen pequeño en el sistema nos conduce a una forma diferencial de la ley de conservación de masa. En los sistemas puramente electroquímicos, la velocidad de reacción es cero en el seno del electrólito, por tanto,

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = [-D_i \nabla c_i] \quad (18)$$

que describe el transporte de materia únicamente por difusión, sustituyendo esta relación en la ley de Fick (ecuación 17) en ausencia de transporte convectivo, se tiene:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i [\nabla \cdot \nabla c_i] = D_i \nabla^2 c_i \quad (19)$$

El acoplamiento de las ecuaciones (19) y (17) lleva a una expresión para la difusión-convección en términos de la velocidad de variación de la concentración con el tiempo:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot c_i \mathbf{u} + D_i \nabla^2 c_i \quad (20)$$

Esta es una versión de la segunda ley de Fick con un término adicional para la convección. Por otra parte, para fluidos Newtonianos, la variación de la velocidad con el tiempo viene dada por la ecuación de Navier-Stokes que representa la conservación del momento en el sistema. Para un fluido incompresible, la relación es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{V} = -[\nabla \cdot \rho \mathbf{V} \mathbf{V}] - \nabla P - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho g \quad (21)$$

En esta ecuación (21), ∇P es un vector denominado “gradiente del escalar P ”, y algunas veces se escribe como “grad P ”. El símbolo $[\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}]$ es un vector denominado “divergencia del tensor $\boldsymbol{\tau}$ ”, y $[\nabla \cdot \rho \mathbf{V} \mathbf{V}]$ es un vector denominado “divergencia del producto diádico $\rho \mathbf{V} \mathbf{V}$ ”. Por otro lado, la ley de conservación de materia en el electrólito también debe cumplirse, como se expresa por la ecuación de continuidad:

$$-\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (22)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales (20) - (22) define completamente todos los parámetros requeridos para cuantificar el transporte de materia por convección-difusión. En principio, estas ecuaciones deberían ser resueltas para cualquier geometría electrodo/electrólito bien definida. En la práctica, se han obtenido las soluciones analíticas de este sistema de ecuaciones para geometrías simples, en régimen laminar, tales como electrodo de disco rotatorio, electrodos de placas paralelas y el electrodo de gota de mercurio. Para situaciones complejas y para casos de flujo turbulento, es difícil especificar las condiciones de frontera para la ecuación de Navier-Stokes y la solución analítica es imposible. Como se presenta en el desarrollo de la presente tesis, en los últimos años se desarrollaron una serie de técnicas computacionales englobadas bajo las siglas CFD que permiten afrontar problemas de elevada complejidad.

Sin llegar a recurrir a estas nuevas técnicas computacionales, es posible adoptar una aproximación empírica donde las expresiones relacionen el transporte de materia observado con la geometría del electrodo/electrólito y con las condiciones de electrólisis. Esta aproximación normalmente hace uso de grupos adimensionales con el objetivo de reducir el número de variables [30, 31].

2.2.3. Números y correlaciones adimensionales

En el diseño y escalamiento de reactores electroquímicos es común utilizar los grupos adimensionales (Tabla 1). El número de tales grupos, usados en una correlación, viene dado por el teorema π de Buckingham de análisis dimensional, como el número de variables originales menos el número de dimensiones fundamentales.

Tabla 1. Grupos adimensionales utilizados en el transporte de materia electroquímico.

Grupo adimensional	Definición	Significado
Número de Sherwood, Sh	$= \frac{k_m d_{eq}}{D_i}$ (23)	Transporte de materia por convección forzada
Número de Staton, St	$= \frac{k_m}{v}$ (24)	Transporte de materia por convección forzada
Número de Reynolds, Re	$= \frac{\rho v d_{eq}}{\mu}$ (25)	Flujo de fluido por convección forzada
Número de Grashof, Gr	$= \frac{L^3 g \rho}{\mu^2} \Delta \rho$ (26)	Flujo de fluido por convección natural
Número de Schmidt, Sc	$= \frac{\mu}{D_i \rho}$ (27)	Propiedades de transporte
Número de Peclet	$= \frac{vl}{D_a}$ (28)	Transporte de materia por convección forzada

El número de Sherwood hace referencia al transporte de materia en condiciones de flujo convectivo forzado. La ecuación (23) puede ser rescrita recordando que el espesor de la capa de difusión de Nernst, δ , se define como

$$\delta = \frac{D_i}{k_m} \quad (29)$$

por lo que el número de Sherwood quedaría,

$$Sh = \frac{l}{\delta} \quad (30)$$

Lo que expresa la relación de la longitud característica en comparación con el espesor de la capa de difusión de Nernst. La longitud característica l , depende la geometría del electrodo, por ejemplo:

- Una dimensión perpendicular a la superficie del electrodo tal como espacio interelectrodo.
- El radio o diámetro de un disco o cilindro.
- El radio o diámetro de poro medio de un electrodo tridimensional poroso.
- El radio o diámetro medio de una partícula en un electrodo de lecho fluidizado.

El número de Staton (ecuación 24), que a veces se refiere al número de Sherwood, se define como la relación del coeficiente de transporte de materia respecto a la velocidad característica. Está relacionado con el número de Sherwood a través de la relación:

$$Sh = St \cdot Re \cdot Sc \quad (31)$$

El número de Reynolds (ecuación 25), caracteriza el flujo del fluido en sistemas de convección forzada y representa la relación de fuerzas de inercia asociadas al flujo, respecto de las fuerzas viscosas debido a la resistencia del electrólito en la superficie del electrodo.

El número de Grashof (ecuación 26), caracteriza el flujo de fluido bajo condiciones de convección natural donde las diferencias de presión debidas a las diferentes densidades proporcionan la fuerza motriz para el movimiento del fluido.

Estas correlaciones proporcionan expresiones para el transporte de materia (a través de Sh) en términos de condiciones de flujo de fluido (con Re , Gr o ambos) y de propiedades del electrólito (Sc). En el caso general de convección difusión,

$$Sh = a \cdot Re^b \cdot Gr^d \cdot Sc^c \quad (32)$$

donde a , b , c y d son constantes que se pueden ser obtenidas a través de una solución analítica de las ecuaciones de difusión-convección (en casos favorables). Habitualmente, se calculan por medio de un análisis empírico de datos experimentales. Existen dos casos límite para la ecuación (32), el primero cuando sólo está presente la convección libre, el efecto del valor de Re es despreciable, ya que el exponente b tiende a cero, y la expresión queda como,

$$Sh = a \cdot Gr^d \cdot Sc^c \quad (33)$$

El segundo caso es el más común cuando la convección forzada predomina, el Gr es despreciable, ya que el exponente d tiene a cero, y la correlación de transporte de materia se describe de la siguiente forma,

$$Sh = a \cdot Re^b \cdot Sc^c \quad (34)$$

Los valores de las constantes a , b y d dependen tanto de la geometría del electrodo como de las condiciones de flujo. Por ejemplo, el exponente de Re , b , tiende a ser mas grande en flujo turbulento que en flujo laminar. Es común considerar que el exponente del número de Schmidt, c , tiene un valor de $1/3$ [32].

2.2.4. Distribución de corriente

Los reactores electroquímicos muestran distribuciones no uniformes de potencial y densidad de corriente en la superficie del electrodo. Esto se debe a que las dimensiones de los electrodos, por grandes que sean, son finitas. Incluso en situaciones simples la no uniformidad ocurrirá en los bordes y discontinuidades de los electrodos. Los problemas de distribución de corriente se dividen en tres categorías de complejidad creciente.

1. La distribución de corriente primaria se produce en ausencia de reacción en el electrodo, cuando se ignora el exceso de potencial, es decir, se considera que la superficie del electrodo no es polarizada y no existen gradientes de concentración. La distribución de corriente primaria viene dada por la ecuación de Laplace:

$$\Delta^2 E_s = 0 \quad (35)$$

donde E_s es el potencial en la solución. La solución matemática depende de las condiciones a la frontera gobernadas por la geometría del reactor [33].

2. Cuando se produce una reacción electroquímica, la superficie del electrodo ya no se puede considerar un límite equipotencial y se debe superar la sobretensión de activación para provocar una reacción adicional. El cambio en el potencial del electrodo (la pendiente de la curva de potencial de electrodo/densidad de corriente se vuelve significativa) requerido para inducir un mayor flujo de corriente da lugar a una distribución secundaria de la corriente [33].
3. Cuando una diferencia de potencial causa cambios de concentración significativos de modo que el transporte de masa limita en cierta medida el flujo de corriente, se produce la distribución de corriente terciaria. La distribución terciaria existe

siempre que fluye la corriente, pero a una polarización relativamente baja el efecto puede ser ignorado [22].

2.3. Dinámica computacional de fluidos (CFD)

La dinámica computacional de fluidos (CFD, por sus siglas en inglés) es el análisis de sistemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos asociados a las reacciones químicas por medio de simulación basada en computadora. Esta técnica abarca una amplia gama de aplicaciones industriales y no industriales, algunos ejemplos son:

- Aerodinámica de aviones y vehículos.
- Hidrodinámica de barcos.
- Ingeniería de procesos químicos: mezclado, separación y moldeo de polímeros.
- Ingeniería ambiental: distribución de contaminantes y efluentes.
- Meteorología: predicción del clima.
- Ingeniería electroquímica: diseño y optimización de reactores electroquímicos [18].

El usuario de un modelo de simulación debe tener habilidades en diversas áreas. Antes de configurar un código y ejecutar una simulación CFD existe la etapa de identificación y formulación del problema de flujo en términos de los fenómenos físicos y químicos. Las decisiones por considerar son si modelar un sistema en dos o tres dimensiones, excluir efectos de temperatura y presión, elegir si resolver ecuaciones en flujo laminar o turbulento o si se trata de un sistema bifásico. Para tomar las decisiones correctas se requiere de buenas habilidades de modelado, ya que se necesita hacer suposiciones con el fin de reducir la complejidad a un nivel manejable, preservando las características principales del problema en cuestión [18].

El objetivo principal de los desarrollos en el campo CFD es proporcionar una capacidad comparable con los fenómenos físicos. La razón principal por la que CFD se ha retrasado es la tremenda complejidad del campo subyacente, que impide una descripción de flujos de fluidos que sea al mismo tiempo económica y suficientemente completa. La disponibilidad de hardware informático de alto rendimiento accesible y la

introducción de interfaces fáciles de usar han llevado a un reciente aumento de interés, y el CFD ha ingresado a la comunidad industrial en general [18].

Los códigos CFD están estructurados en torno a algoritmos numéricos que abordan problemas de flujo de fluidos. Con el fin de proporcionar un acceso fácil a su poder de resolución, todos los paquetes comerciales de CFD incluyen sofisticadas interfaces de usuario para ingresar los parámetros del problema y examinar los resultados. Por tanto, todos los códigos contienen tres elementos principales: 1) un procesador, 2) un solucionador y 3) un postprocesador [18].

- Procesador: Consiste en la entrada de un problema de flujo a un programa CFD por medio de una interfaz amigable y la posterior transformación de esta entrada en una forma adecuada para el uso del solucionador. Las actividades del usuario en esta etapa involucran:
 - Definición de la geometría en la región de interés: el dominio computacional.
 - Selección de fenómenos físicos y químicos a modelar: descripción matemática del fenómeno.
 - Definición de las propiedades del fluido.
 - Especificación de las condiciones a la frontera adecuadas en los límites del dominio.
 - Generación de mallas: la subdivisión del dominio en un número de subdominios más pequeños (volúmenes o elementos de control) [18].

La precisión de una solución CFD se rige por el número de celdas en la malla. En general, cuanto mayor es la cantidad de celdas mejor es la precisión de la solución. Tanto la precisión de una solución como su costo en términos de hardware necesario y tiempo de cálculo dependen en la finura de la malla.

- Solucionador: Existen tres técnicas diferentes para la solución numérica (diferencia finita, elemento finito, volumen finito y métodos espectrales). En resumen, el algoritmo numérico consiste en los siguientes pasos:

- Integración de las ecuaciones gobernantes de flujo de fluidos sobre todos los nodos de la malla generada.
 - Discretización: conversión de las ecuaciones integrales en un sistema de ecuaciones algebraicas.
 - Solución de las ecuaciones algebraicas mediante un método iterativo.
- Postprocesador: Consiste en el procesamiento de los resultados obtenidos por el solucionador, recientemente se han desarrollado avances en el campo del postprocesamiento debido a la creciente popularidad de las estaciones de trabajo de ingeniería, las cuales tienen capacidades gráficas excepcionales. Los principales paquetes de CFD están equipados con herramientas versátiles de visualización de datos. Estas incluyen:
 - Campos vectoriales.
 - Gráficos de líneas y sombras.
 - Campos de superficie 2D y 3D.
 - Seguimiento de partículas.
 - Manipulación (traducción, rotación, escalado, etc.).

Recientemente estas pueden incluir animaciones para la visualización dinámica de resultados, además todos los gráficos producen una salida alfanumérica para exportación de datos para una manipulación adicional [18].

Cada algoritmo numérico tiene sus propios patrones de error característicos, por lo cual el CFD no puede ser considerado un sustituto de la experimentación, sino una herramienta adicional para resolver problemas. La validación de un modelo CFD requiere de producir datos experimentales de un alcance similar.

2.4. Escalamiento de reactores electroquímicos

La filosofía de escalamiento hacia tamaños mayores o menores se basa en asegurarse que las unidades correspondientes sean similares tanto como sea posible en cuanto a su desempeño. Para guiar un escalamiento, es necesario definir algunos criterios de similitud. Estos criterios se centran en el uso de una variedad de grupos adimensionales que describen las características geométricas, cinemáticas y químicas.

Claramente para los sistemas electroquímicos también se debe considerar la similitud eléctrica.

2.4.1. Criterios de escalamiento

2.4.1.1. Similitud geométrica

La similitud geométrica de dos cuerpos se logra mediante la fijación de proporciones dimensionales. Un sistema heterogéneo tan complejo como un reactor electroquímico presenta objeciones a este procedimiento. La similitud geométrica, en la práctica se aplica solo a la forma y al área del electrodo. Se limita a especificar áreas equivalentes de electrodos. La ampliación se logra mediante el uso de múltiples pares de electrodos y unidades de reactor, ya que se pueden presentar problemas de distribución de potencial [22].

2.4.1.2. Similitud hidrodinámica

La similitud hidrodinámica o cinemática se relaciona con el movimiento de las fases dentro de un sistema y las fuerzas que inducen ese movimiento. Por ejemplo, en la formación de capas límite durante el flujo más allá de las placas planas y durante la convección forzada en canales de forma regular, generalmente hay tres fuerzas dominantes: presión, inercia y fuerzas viscosas. Si los puntos correspondientes en dos celdas de diferente tamaño muestran en los mismos momentos relaciones idénticas de velocidad de fluido, se dice que las dos unidades son cinemáticamente similares y los coeficientes de transporte de masa y calor tendrán una relación simple en las dos celdas. Se puede demostrar mediante análisis dimensional que para un sistema cerrado bajo convección forzada la ecuación de movimiento para un fluido se reduce a una función de Re . Para preservar la similitud cinemática bajo esas circunstancias, los números de Reynolds deben ser idénticos. Los efectos de entrada y salida causan irregularidades en el flujo de fluido y se debe tener cuidado al predecir las tasas de transporte de masa y calor en el aumento o disminución de escala [22].

2.4.1.3. Similitud química

La similitud química requiere del mantenimiento de los tiempos adimensionales adecuados constantes, tiempo de residencia o tiempos de reacción en reactores

discontinuos o continuos. El modo de operación del reactor es importante para definir estos grupos y debe ser el mismo en ambas unidades. En el contexto de números adimensionales, las condiciones que definen la similitud química han sido resueltas por Damkohler, que expresa la tasa de formación química dividida por la tasa del flujo volumétrico [22].

2.4.1.4. Similitud eléctrica

Los reactores electroquímicos, a diferencia de sus equivalentes catalíticos, requieren de similitud eléctrica. Esta es a menudo la consideración mas importante en el escalamiento de los reactores electroquímicos.

Existe similitud eléctrica entre dos unidades cuando el potencial correspondiente y las diferencias de densidad de corriente tienen una relación constante. Los dos tamaños de celdas requerirán el mismo voltaje de celda y la misma distribución de corriente. El criterio a menudo requiere un espacio interelectrodo constante en la ampliación o reducción de tamaño. Se han propuesto una variedad de grupos adimensionales como criterios de similitud. Uno por ejemplo es el llamado parámetro de polarización, P definido como:

$$P = \frac{k dE}{l di} \quad (36)$$

donde k es la conductividad del electrolito, l es la longitud característica de la celda, E es el potencial de electrodo y i es la densidad de corriente [22].

3. Antecedentes

3.1. Planteamiento del problema

El reactor electroquímico más utilizado, en los campos de síntesis orgánica e inorgánica y en la remediación de medios contaminados, es el reactor tipo filtro prensa [1]. No obstante, el desarrollo de la ingeniería electroquímica implica estudiar, optimizar y diseñar reactores electroquímicos más eficientes, con el objetivo de alcanzar condiciones hidrodinámicas sin gradiente de concentración (flujo pistón), además de una distribución de corriente y potencial uniforme que permita alcanzar altas velocidades de

transporte de masa, asimismo la facilidad de maniobrar con productos sólidos, líquidos y gaseosos.

3.2. Modelado de reactores electroquímicos

El modelado numérico es una rama de la ciencia y la ingeniería. En el área de ingeniería electroquímica se requieren de modelos matemáticos que describan el comportamiento de reactores electroquímicos en cuanto a la hidrodinámica, transporte de masa o carga, y la distribución de la corriente y el potencial. La capacidad de predecir dicho comportamiento tiene el objetivo de reducir costos y tiempos de experimentación, sin embargo, para obtener un modelo confiable se requiere la validación del CFD mediante la experimentación física [16, 34].

En cuanto al modelado de reactores electroquímicos, existen estudios de hidrodinámica y tiempos de residencia, realizados por Bengoa y col. [11] donde mediante modelado numérico obtuvieron curvas RTD y visualización del flujo. Utilizaron dos configuraciones, una con promotor de turbulencia y otra con una lámina de espuma. Usando estas configuraciones el electrólito fluye por un canal formado por dos electrodos de 296 mm de largo (dirección del flujo) y 140 mm de espesor. Los coeficientes de dispersión obtenidos a lo largo de la celda no son constantes, demostrando que el flujo no está totalmente desarrollado en la entrada de la zona de reacción, concluyendo que este depende de la geometría de la entrada.

Por otra parte, Colli y col. [9], presentaron resultados experimentales de la distribución del coeficiente local de transporte de masa a lo largo de la longitud del electrodo para una celda electroquímica con espacios interelectrodos de 1 y 2.2 mm, utilizando la reducción del ion ferricianuro como reactivo modelo. Analizaron el efecto de los promotores de turbulencia sobre la magnitud del transporte de masa evaluando números de Reynolds de 370 a 3700. Encontrando un transporte de masa significativo cuando se utiliza un canal vacío. Sin embargo, al usar promotores de turbulencia este se hace más uniforme (dependiendo del tipo de promotor) a lo largo del electrodo. Dejando como recomendación analizar el efecto de los distribuidores de flujo a la entrada y salida del reactor con el fin de evitar distorsiones en el transporte de masa.

Se encuentran reportados en la literatura, trabajos donde se utiliza CFD para el diseño y optimización de reactores electroquímicos. Cruz y col. [35], presentaron los resultados de un nuevo diseño geométrico de los distribuidores de flujo a la entrada y salida de la celda FM01-LC, utilizando CFD y su posterior validación. La geometría con curvas RTD fue evaluada usando la técnica de estímulo respuesta, aproximándose con el modelo de dispersión axial. La hidrodinámica y el transporte de masa para un reactor con espacio interelectrodo de 11 mm fueron resultados utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes y convección-difusión. El nuevo diseño presentó valores de dispersión axial menores, atribuidos al campo de velocidad homogéneo. Los resultados experimentales de las curvas RTD validaron los obtenidos por CFD.

Se estudió el efecto de la hidrodinámica sobre la tasa de transporte de masa local en un electrodo de placa plana en el reactor FM01-LC, utilizando simulaciones bajo régimen de flujo turbulento usando como modelo la reducción de ferricianuro de potasio. El modelo consta de ecuaciones de transporte de masa acopladas a la solución hidrodinámica obtenida de las ecuaciones de Navier-Stokes. Los resultados obtenidos describen las propiedades de flujo, los perfiles de concentración a lo largo de todo el volumen del reactor y el coeficiente de difusión local sobre el electrodo. Los coeficientes de transporte de masa fueron validados por CFD con un promedio de error de 1.85%, de acuerdo a lo reportado por E.P. Rivero y col. [8].

4. Justificación

La ingeniería electroquímica es una herramienta utilizada en los procesos de síntesis que involucran transformaciones electroquímicas, con la ventaja de realizar síntesis no alcanzables o muy difíciles por métodos clásicos. No obstante, esta aplicación exige un continuo diseño, optimización y desarrollo de diferentes tipos de reactores electroquímicos, entre ellos el tipo filtro prensa. Esto implica el estudio y creación de herramientas que permitan su caracterización a través de su comportamiento hidrodinámico y de su transporte de masa. Visto esto, se desarrollaron diversas geometrías de distribuidores de flujo con el fin de optimizar un reactor electroquímico tipo filtro prensa. Dichas geometrías se evaluaron mediante CFD permitiendo obtener la respuesta hidrodinámica y el transporte de masa. Logrando así optimizar y mejorar el reactor electroquímico comercial tipo filtro prensa.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.

Esta página fue eliminada debido a que su contenido es información clasificada como confidencial de acuerdo con el Artículo 113 Fracción II de la Ley Federal de Transparencia y Acceso a la Información Pública.