



¹ Programas de Ingeniería Ambiental e Ingeniería Química de la Universidad Tecnológica de Bolívar. Cartagena, Colombia. dcastilla@utb.edu.co

² Escuela de Ingeniería Química, Universidad del Valle. Cali, Colombia. fiderman.machuca@correounivalle.edu.co

³ Facultad de Ingeniería, Universidad Tecnológica de Bolívar. Cartagena, Colombia. asmedina@utb.edu.co

⁴ Programa de Ingeniería Química, Universidad de Cartagena. Cartagena, Colombia. jcolinam@unicartagena.edu.co

*Autor para correspondencia: dcastilla@utb.edu.co

Recibido: 27/07/2023. Última revisión: 22/10/2023. Aceptado: 26/12/2023.

Modelamiento y simulación de reactores fotocatalíticos de película descendente: uso de la dinámica computacional de fluidos (CFD) para análisis del sistema multifásico

Resumen

La dinámica computacional de fluidos (CFD) se perfila como una herramienta apropiada para el modelamiento de procesos fotocatalíticos heterogéneos, pues permite considerar simultáneamente los diferentes fenómenos físicos trascendentes de los procesos. En el presente estudio se empleó el software COMSOL Multiphysics para modelar el régimen de flujo y determinar la distribución de las partículas de catalizador en un reactor fotocatalítico de película descendente, hecho relevante para determinar la eficiencia del reactor. Las simulaciones del reactor fueron realizadas con el módulo de Mezclas de COMSOL, en un régimen de flujo turbulento empleando el enfoque de RANS. Se detectaron siete zonas definidas con un perfil particular de concentración de catalizador en toda el área de la película, para las cuales se estimó la absorción fotónica en el reactor con el modelo de seis flujos (SFM). De ello se obtuvo que existe una diferencia de más del 20% entre el mayor y el menor valor del promedio de la absorción fotónica en el área reactiva, con lo que se puede esperar que la variación en la degradación de los contaminantes en estas zonas oscile entre el 10 y el 20%, lo cual debe tenerse en cuenta para la aplicabilidad de la tecnología.

Palabras clave: fotocatalísis; CFD; reactor de película descendente; sistema multifase.

Modeling and simulation of falling film photocatalytic reactors: use of computational fluid dynamics (CFD) for multiphase system analysis

Abstract

Computational fluid dynamics (CFD) is emerging as an appropriate tool for modeling heterogeneous photocatalytic processes, since it allows simultaneous consideration of the different physical phenomena involved in the processes. In the present study, COMSOL Multiphysics software was used to model the flow regime and to determine the distribution of catalyst particles in a falling film photocatalytic reactor, which is relevant to determine the reactor efficiency. The reactor simulations were performed with the COMSOL Mixture module in a turbulent flow regime using the RANS approach. Seven defined zones were detected having a particular catalyst-concentration profile over the entire film area, for which the photonic absorption in the reactor was estimated with the six-flux model (SFM). From this it was obtained that there is a difference of more than 20% between the highest and the lowest value of the average photonic absorption in the reactive area, so it can be expected that the variation in the degradation of pollutants in these zones ranges between 10 and 20%, which should be taken into account for the applicability of the technology.

Keywords: photocatalysis; CFD; falling film reactor; multiphase system.

Modelagem e simulação de reatores fotocatalíticos de filme descendente: uso da dinâmica de fluidos computacional (CFD) para análise de sistemas multifásicos

Resumo

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) surgiu como uma ferramenta adequada para modelar processos fotocatalíticos heterogêneos, pois permite que os diferentes fenômenos físicos dos processos sejam considerados simultaneamente. No presente estudo, o software COMSOL Multiphysics foi usado para modelar o regime de fluxo e determinar a distribuição de partículas de catalisador em um reator fotocatalítico de filme descendente, o que é relevante para determinar a eficiência do reator. As simulações do reator foram realizadas com o módulo COMSOL Mixtures, em um regime de fluxo turbulento usando a abordagem RANS. Sete zonas definidas com um perfil específico de concentração de catalisador foram detectadas em toda a área do filme, para as quais a absorção fotônica no reator foi estimada com o modelo de seis fluxos (SFM). A partir disso, verificou-se que há uma diferença de mais de 20% entre o valor mais alto e o mais baixo da absorção fotônica média na área reativa, de modo que a variação na degradação de poluentes nessas zonas pode variar entre 10 e 20%, o que deve ser levado em conta para a aplicabilidade da tecnologia.

Palavras-chave: fotocatalíse; CFD; reator de filme descendente; sistema multifásico.



Introducción

La fotocatalisis heterogénea se ha mostrado como una tecnología promisoría para la degradación de contaminantes emergentes presentes en aguas residuales, que son de alto riesgo para la salud pública mundial [1]. La aplicación de esta tecnología es efectiva gracias a que genera y usa especies altamente oxidantes, las cuales son muy reactivas, no selectivas y capaces de degradar componentes nocivos [2]. Este proceso también es aplicable a la remediación ambiental, a la síntesis orgánica, a la producción de hidrógeno, entre otras [3–5]. Para llevar a cabo la aplicación a gran escala de esta tecnología con mayor precisión y confiabilidad, se han hecho esfuerzos ingentes en el modelado de los sistemas fotocatalíticos [6–9]. Es importante realizar un modelamiento del sistema en el que se consideren los fenómenos físicos trascendentales del proceso, especialmente para aquellos reactores con presencia de catalizador particulado no soportado, los cuales presentan la dificultad de que las partículas producen efectos complejos asociados a la dispersión de la luz y a la transferencia fotónica y de masa [1, 5].

La dinámica computacional de fluidos (CFD) se ha estado perfilando como una herramienta útil para el modelamiento y simulación de sistemas complejos [10], en los que intervienen simultáneamente varios procesos físicos, como lo es el presente caso de estudio. Algunos trabajos relacionados con el modelamiento de los reactores fotocatalíticos tienen en cuenta ciertos supuestos, entre los que se destaca que hay una distribución isotrópica del material sólido catalítico en los reactores [11], que se pueden evitar al aplicar las herramientas de CFD. Por otra parte, se tiene la aplicación de las herramientas CFD para diferentes tipos de reactores, como se muestra en la **figura 1**, entre los cuales también se hace necesario incluir el reactor de película descendente, el cual tiene por ventaja que puede aprovechar la luz solar [11] y el oxígeno en campo abierto. Entender cómo se distribuyen las partículas del catalizador a lo largo y ancho de la placa de este tipo de reactores, por medio de herramientas CFD, permitiría tomar decisiones importantes asociadas al diseño y operación del reactor a escalas mayores, especialmente cuando algunos fenómenos presentes en el proceso son difíciles de analizar experimentalmente [10].

Año	Título del trabajo	Datos destacados
2023	Multiphysics computational fluid dynamics (CFD) modelling of diclofenac amide removal by photocatalytic oxidation on Fe-TiO ₂ /N-TiO ₂ thin films microreactor	Se empleó un reactor de micro-rrendija. Se predijo la constante adsorción y la constante cinética aparente.
	Photocatalytic degradation of ethylene in tubular microreactor coated with thin-film of TiO ₂ : Mathematical modeling with experimental validation and geometry analysis using computational fluid dynamics simulations	Se empleó un reactor cilíndrico convencional y un reactor cilíndrico anular. Se encontró que cambiar la geometría del reactor afecta el proceso cuando se desea un escalado u optimización. El modelo desarrollado permitió simular la degradación del etileno y obtener información sobre conversión y selectividad.
2020	CFD + DoE optimization of a flat plate photocatalytic reactor applied to NO _x abatement	Se realizó la optimización de un reactor de placa plana mediante CFD y DoE. Se simuló la distribución de la luz en el reactor de placa plana.
	Three-dimensional CFD modelling of a photocatalytic parallel-channel microreactor	Se empleó un micro-reactor de canales paralelos. Se estimaron la constante cinética y de adsorción.

Figura 1. Trabajos más recientes de dinámica computacional de fluidos (CFD) aplicada a sistemas fotocatalíticos.

En el presente trabajo se consideró como tema de estudio la distribución de las partículas de catalizador en un reactor fotocatalítico de película descendente. Este reactor es de gran utilidad para el tratamiento de muchos contaminantes, dado que es de fácil construcción, bajo costo y tiene una zona alta de iluminación con alta relación de superficie por unidad de volumen [11], lo que favorece el desarrollo de todas las reacciones claves del proceso. En la literatura se muestra que este tipo de reactor es atractivo para aplicaciones relevantes y actuales en la descontaminación de aguas [8, 12–16]. Por su parte, en la literatura se reporta cada vez más que el uso de las herramientas CFD para el modelado de sistemas fotocatalíticos heterogéneos es útil para la toma de decisiones asociadas a la geometría del sistema, conversión, constantes cinéticas y otros parámetros importantes, que mejoran el rendimiento del proceso (ver **figura 1**). De manera análoga, el análisis de reactores como el de película descendente con herramientas de la dinámica computacional de fluidos se considera pertinente, especialmente en la predicción de la distribución de las partículas en el reactor, la cual afecta la eficiencia de este.

En la **figura 2** se muestra el reactor de película descendente tomado como base para realizar las simulaciones. Este reactor consta de una placa plana alimentada por un sistema de tuberías que finaliza con un distribuidor perforado. La suspensión (contaminante + catalizador), expuesta al sol, recircula por el sistema hasta que se alcanza cierto grado de degradación del contaminante.

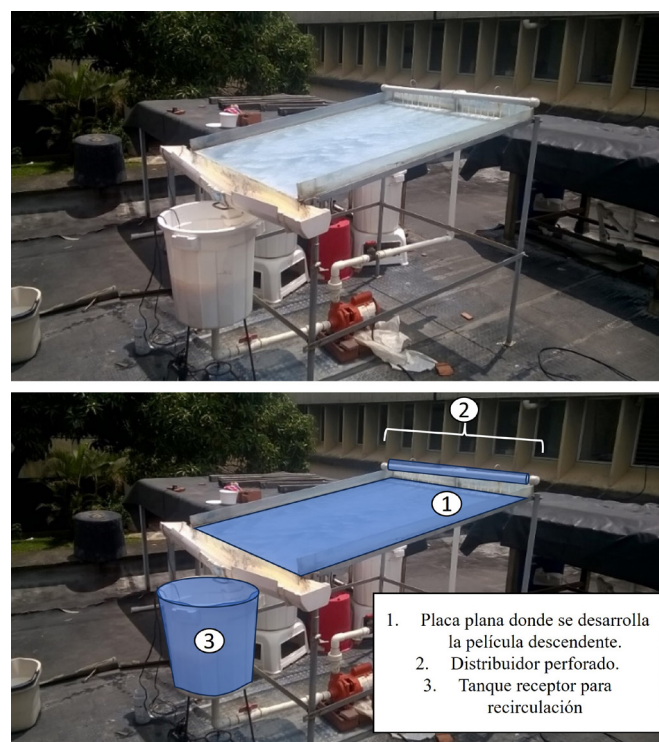


Figura 2. Componentes del reactor fotocatalítico solar de película descendente de la Universidad del Valle tomado para realizar las simulaciones.

En las estrategias de modelado que aparecen en algunos trabajos [17, 18], se supone que la concentración del catalizador es homogénea dentro del sistema debido a las condiciones de turbulencia en que suelen operar los reactores fotocatalíticos. La concentración del catalizador afecta directamente el perfil de absorción de fotones en el reactor, el cual define en gran manera la velocidad de la reacción fotocatalítica. De manera que, si no se estima correctamente la distribución del catalizador en el sistema, los parámetros cinéticos reportados no pueden ser definitivos a la hora de hacer el escalamiento de la tecnología.

En el presente trabajo se realizó la simulación del flujo hidrodinámico de un reactor fotocatalítico de película descendente, como el mostrado en la **figura 2**, empleando el software COMSOL Multiphysics. Este software tiene varios módulos que permiten simular sistemas multifásicos como el que se tiene en el presente trabajo (partículas de catalizador en agua), con lo cual se pudo estimar la distribución de las partículas de catalizador en la zona iluminada del reactor. Se empleó el enfoque de mezclas para tratar el sistema bifásico, el cual es adecuado para representar suspensiones formadas por partículas sólidas inmersas en un líquido. Finalmente, después de obtener el perfil de concentración en la película, se estimó la absorción fotónica en el reactor de película descendente mediante el acople de las herramientas de CFD con el modelo de seis flujos (SFM), el cual es nuestro objetivo principal.

Estrategia de modelado y simulación

Modelado matemático del campo hidrodinámico

Dentro de los paquetes que ofrece COMSOL para el modelado de sistemas multifásicos, se encuentran el módulo de Particle Tracing (rastreo de partículas), el Mixture Module (módulo de mezcla) y el Euler-Euler Module (modelo Euler-Euler). Como primera opción se optó por el módulo de Particle Tracing, con el cual se resolvió la segunda ley de Newton para cada partícula, teniendo en cuenta las diferentes fuerzas a las que se someten en el sistema (enfoque Lagrangiano). Sin embargo, debido a que el número de partículas de catalizador en un sistema como el que aparece en la **figura 2** suele ser extremadamente elevado (p. ej., para 20 L de suspensión con una carga común de 1 g/L de TiO_2 , se tienen aproximadamente $4,72 \times 10^{11}$ partículas), los tiempos computacionales para completar la simulación también son muy altos. Como alternativa aparece el modelo de tipo Euleriano, mediante el cual se consideran ambas fases como fluidos continuos e interpenetrantes, y a partir del cual se resuelven las ecuaciones de momento para cada una de las fases empleando modelos analíticos y empíricos para la estimación de la viscosidad de la mezcla bifásica. De igual manera, se encuentra el módulo de mezcla (Mixture module), el cual es una versión simplificada del modelo Euler-Euler. Este módulo tiene la ventaja de que requiere menos recursos computacionales debido a que resuelve una sola ecuación de momento para la mezcla. Además, permite determinar la concentración promedio de cada fase en el sistema, lo cual es uno de los objetivos del presente trabajo.

Para la simulación se consideraron dos sistemas: el distribuidor perforado y la placa plana. Se encontraron los perfiles de velocidades y de la concentración de catalizador en la salida del distribuidor, los cuales sirvieron como condiciones de entrada para la placa (ver **figura 2**). Debido a que el régimen de flujo en ambos equipos (distribuidor y placa) fue turbulento, y a que se empleó el modelo de mezcla para el tratamiento multifásico, se empleó el módulo de mezcla-turbulento de COMSOL para realizar las simulaciones, el cual permite emplear el enfoque RANS para calcular la contribución fluctuante asociada al flujo turbulento en cada una de las variables, mediante el bien conocido modelo κ - ϵ .

Con el enfoque del modelo de mezcla se resolvieron las ecuaciones

de Navier-Stokes para determinar el momento de la mezcla [10]; la velocidad de la fase dispersa (sólida en nuestro caso) se describe mediante un modelo de deslizamiento y los efectos de turbulencia se modelaron con el bien conocido enfoque κ - ϵ .

El modelo se basa en las siguientes suposiciones:

- La densidad de cada fase es aproximadamente constante.
- Ambas fases se encuentran bajo el mismo campo de presión.
- La velocidad relativa de ambas fases se determina asumiendo un balance entre el gradiente de presión y el arrastre viscoso.
- El tiempo de relajación es corto comparado con la escala de tiempo del flujo macroscópico.

Debido a las propiedades de las partículas del TiO_2 (relación de la densidad de la fase dispersa respecto a la del medio continuo: $\rho_d/\rho_c \approx 4$, y diámetro de las partículas (clusters): $d_d = 1,1 \times 10^{-6}$ m), se espera que la longitud característica de la aceleración de la partícula en el agua sea varios órdenes de magnitud menor que las dimensiones del sistema que estamos modelando (diámetro de la tubería: $2,8 \times 10^{-2}$ m, espesor de la película: $1 \times 10^{-3} - 1,5 \times 10^{-3}$, ancho de la placa: 0,5 m, largo de la placa: 1,25 m) [19]. Esta condición garantiza que se alcance un equilibrio local entre las fases en escalas de longitud espacial cortas [19]. Por lo tanto, teniendo en cuenta lo reportado por Ling et al., las asunciones del modelo de mezcla se justifican completamente [19].

La ecuación de momento para la mezcla en condiciones de estado estacionario es:

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{Gm} + \mathbf{F} - \nabla \cdot \left[\rho c_d(1 - c_d) \left(\mathbf{u}_{slip} - \frac{D_{md}}{(1 - c_d)\phi_d} \nabla \phi_d \right) \left(\mathbf{u}_{slip} - \frac{D_{md}}{(1 - c_d)\phi_d} \nabla \phi_d \right)^T \right] \quad (1)$$

En donde \mathbf{u} es el vector que representa la velocidad de la mezcla promediada en la masa (m/s); ρ es la densidad (kg/m^3); p es la presión (Pa); $\boldsymbol{\tau}_{Gm}$ es la suma de los esfuerzos turbulentos y viscosos ($\text{kg}/(\text{m} \times \text{s}^2)$); \mathbf{F} representa a las fuerzas volumétricas adicionales en el sistema, en este caso, se incluye la fuerza de la gravedad; c_d es la fracción másica de la fase dispersa (kg/kg); \mathbf{u}_{slip} es el vector de velocidad relativa entre las dos fases (m/s); ϕ_d simboliza la fracción volumétrica de la fase dispersa (m^3/m^3); T indica la traspuesta del vector; D_{md} es el coeficiente de dispersión turbulenta y ∇ es el operador gradiente. Cabe anotar que, para el caso del distribuidor, la fuerza de la gravedad se define de manera convencional; sin embargo, para el caso de la placa plana, debido a que esta cuenta con una inclinación respecto a la horizontal, la fuerza de gravedad por unidad de volumen se escribe como $\rho g \sin \theta$, en donde θ es el ángulo de inclinación de la placa respecto a la horizontal.

Por su parte, el vector \mathbf{u} se define a su vez como:

$$\mathbf{u} = \frac{\phi_c \rho_c \mathbf{u}_c + \phi_d \rho_d \mathbf{u}_d}{\rho} \quad (2)$$

En donde \mathbf{u}_c es el vector velocidad de la fase continua; \mathbf{u}_d es el vector velocidad de la fase dispersa; ϕ_c simboliza la fracción volumétrica de la fase continua (m^3/m^3) y ϕ_d , como se anotó anteriormente, representa la fracción volumétrica de la fase dispersa; mientras que ρ_c , ρ_d y ρ representan la densidad de la fase continua, de la fase dispersa y de la mezcla, respectivamente.

Por su parte, la relación entre las velocidades de las dos fases viene dada por:

$$\mathbf{u}_d - \mathbf{u}_c = \mathbf{u}_{slip} - \frac{D_{md}}{(1 - c_d)\phi_d} \nabla \phi_d \quad (3)$$

En donde \mathbf{u}_{slip} indica la velocidad relativa entre las dos fases y $D_{m,d}$ es el coeficiente de dispersión turbulenta, el cual representa la difusión adicional debida a los remolinos turbulentos.

La densidad (ρ) de la mezcla se expresa así:

$$\rho = \phi_c \rho_c + \phi_d \rho_d \quad (4)$$

Mientras que la fracción másica (c_d) de la fase dispersa es:

$$c_d = \frac{\phi_d \rho_d}{\rho} \quad (5)$$

La suma de los esfuerzos viscosos y turbulentos (τ_{Gm}) es:

$$\tau_{Gm} = (\mu + \mu_T) [\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T] \quad (6)$$

En donde μ es la viscosidad de la mezcla y μ_T es la viscosidad de remolino, las cuales tienen unidades de $\text{Pa} \times \text{s}$.

Por otra parte, teniendo en cuenta la suposición del modelo de mezcla de que las densidades de las fases son constantes, y considerando la ecuación de continuidad para la mezcla, la ecuación de transporte para la fracción volumétrica de la fase dispersa es:

$$(\rho_c - \rho_d) [\nabla \cdot (\phi_d (1 - c_d) \mathbf{u}_{\text{slip}} - D_{m,d} \nabla \phi_d)] + \rho_c (\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (7)$$

Por su parte, para estado estacionario, la velocidad relativa entre las fases \mathbf{u}_{slip} se puede estimar con la siguiente ecuación:

$$\frac{3}{4} \frac{C_d}{d_d} \rho_c |\mathbf{u}_{\text{slip}}| \mathbf{u}_{\text{slip}} = \frac{(\rho - \rho_d)}{\rho} \left(-(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \mathbf{g} + \frac{\mathbf{F}}{\rho} \right) \quad (8)$$

En donde C_d es el coeficiente de arrastre, d_d es el diámetro de la partícula (fase dispersa) y \mathbf{g} es la gravedad. Esta ecuación representa un balance entre la fuerza de arrastre y empuje que actúan sobre la fase dispersa. Además, el coeficiente de arrastre se puede estimar con el modelo de Schiller-Naumann, el cual es adecuado para mezclas bifásicas conformadas por partículas sólidas inmersas en un líquido, en las cuales el número de Re es elevado:

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_p} (1 + 0.15 \text{Re}_p^{0.687}), & \text{Re}_p < 1000 \\ 0.44, & \text{Re}_p \geq 1000 \end{cases} \quad (9)$$

Donde Re_p es el número de Reynolds de la partícula:

$$\text{Re}_p = \frac{d_d \rho_c |\mathbf{u}_{\text{slip}}|}{\mu} \quad (10)$$

Vale la pena mencionar que la correlación de Schiller-Naumann se ha empleado antes de manera satisfactoria en la simulación de reactores fotocatalíticos que emplean partículas sólidas de TiO_2 como catalizador [20]. Si bien el modelo de Morsi y Alexander es más completo para el coeficiente de arrastre [5], este no aparece en las opciones de COMSOL y no siempre parece representar bien los datos experimentales [21]. Por su parte, se han reportado mejores ajustes a los datos experimentales con la correlación de Schiller-Naumann, con respecto a la de Haider y Levenspiel, en condiciones bajas de fracción volumétrica y velocidades de flujo [22], los cuales, en el presente manuscrito, toman valores mucho más bajos.

El modelo de mezcla es una versión más sencilla del enfoque Euleriano-Euleriano, en el cual se consideran ambas fases como fluidos interpenetrantes. Sin embargo, en la literatura no se reportan datos de viscosidades newtonianas para fluidos interpenetrantes. En su lugar, se pueden encontrar modelos analíticos y empíricos para estimar la viscosidad dinámica de la mezcla bifásica, los cuales aparecen en función de la fracción volumétrica de la fase dispersa. Uno de los modelos más aceptados para la estimación de la viscosidad de la mezcla (μ) es el enfoque de Krieger, el cual se muestra a con-

tinuación:

$$\mu = \mu_c \left(1 - \frac{\phi_d}{\phi_{\text{máx}}} \right)^{-2.5 \phi_{\text{máx}} \mu^*} \quad (11)$$

En donde $\phi_{\text{máx}}$ es la concentración máxima de empaquetamiento y μ_c es la viscosidad de la fase continua. Para partículas sólidas, $\phi_{\text{máx}}$ y μ^* (el parámetro adimensional del modelo) toman los valores de 0,62 y 1, respectivamente.

Por otra parte, el fenómeno de la turbulencia se modela con el enfoque κ - ε , con el cual se resuelven dos ecuaciones adicionales, una para la energía cinética turbulenta (κ), con unidades de m^2/s^2 , y la otra para la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta (ε), con unidades de m^2/s^3 .

La ecuación de variación para κ es:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \kappa = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right) + P_\kappa - \rho \varepsilon \quad (12)$$

En donde ∇ , como se mencionó anteriormente, es el operador gradiente; μ_T es la viscosidad turbulenta o de remolino; σ_κ es el número de Prandtl turbulento para κ , que toma un valor de 1,0; mientras que el término de producción (P_κ) es:

$$P_\kappa = \mu_T \left(\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right) - \frac{2}{3} \rho \kappa \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (13)$$

Por su parte, la variación de ε se determina con:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad (14)$$

En donde σ_ε es el número de Prandtl turbulento para ε , que toma un valor de 1,3; mientras que $C_{\varepsilon 1}$ y $C_{\varepsilon 2}$ son coeficientes empíricos del modelo, cuyos valores son respectivamente 1,44 y 1,92. Además, la viscosidad turbulenta (μ_T) o de remolino, se estima con la siguiente expresión:

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (15)$$

En donde la constante C_μ toma el valor de 0,09.

Finalmente, el coeficiente de dispersión turbulenta ($D_{m,d}$) se define como:

$$D_{m,d} = \frac{\mu_T}{\rho \sigma_T} \quad (16)$$

En donde σ_T es el número de Schmidt turbulento de la partícula, para el cual se sugieren valores entre 0,35 y 0,7. Para la realización de las simulaciones de este manuscrito, se empleó el valor predefinido del software de 0,35 [23].

Modelado matemático del campo radiante

Por otra parte, para determinar la absorción fotónica dentro de la placa plana, se debe resolver la ecuación de transferencia radiante (ETR) en el sistema:

$$\frac{dI_{\Delta\lambda}(s, \Omega)}{ds} = -\kappa_{\Delta\lambda} I_{\Delta\lambda}(s, \Omega) - \sigma_{\Delta\lambda} I_{\Delta\lambda}(s, \Omega) + \frac{1}{4\pi} \sigma_{\Delta\lambda} \int_0^{4\pi} p(\Omega' \rightarrow \Omega) I_{\Delta\lambda}(s, \Omega') d\Omega' \quad (17)$$

En donde I representa la intensidad de radiación fotónica en el intervalo de longitudes de onda de interés, $\Delta\lambda$; s es la dirección y Ω el ángulo a través de los cuales viaja el haz de fotones. Por su parte, el primer sumando del lado derecho de la ecuación representa la cantidad de energía que se absorbe en el volumen de control, en el intervalo de longitudes de onda de interés, siendo κ el coeficiente de absorción; el segundo sumando indica la cantidad de energía que

se disipa por el fenómeno de dispersión hacia fuera (o *scattering*) del volumen de control, siendo $\sigma_{\Delta\lambda}$ el coeficiente de dispersión en el intervalo de longitudes de onda de interés; y el tercer sumando indica la cantidad de energía que gana el sistema por la dispersión hacia dentro del sistema, siendo $p(\Omega' \rightarrow \Omega)$ una función de fase que indica la probabilidad de incidencia de los fotones sobre el elemento de dirección ds.

La ETR se puede resolver mediante el bien conocido método de los seis flujos [24–26], el cual tiene los siguientes supuestos:

- El fluido no absorbe radiación de la longitud de onda de interés.
- El sistema heterogéneo no emite fotones.
- Sólo ocurren fenómenos de absorción y dispersión (*scattering*) al momento de interactuar los fotones con las partículas de catalizador.
- La dispersión ocurre a lo largo de las seis direcciones del plano cartesiano, de ahí el nombre de modelo de seis flujos (**figura 3**).

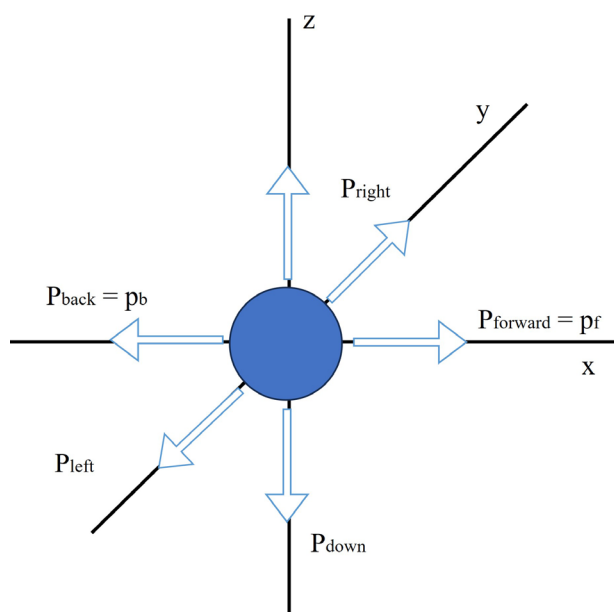


Figura 3. Direcciones de desviación de los fotones de acuerdo al SFM (modelo de seis flujos) para modelar el campo radiante. P_{up} , P_{down} , P_{right} , P_{left} , $P_{forward}$ y P_{back} representan respectivamente las probabilidades de dispersión de los fotones hacia arriba, abajo, derecha, izquierda, adelante y atrás, conforme a las direcciones del plano cartesiano. Tomado de [24], con permiso de John Wiley and Sons.

Estos supuestos se han validado previamente de manera satisfactoria en el modelado global de reactores fotocatalíticos de diferentes configuraciones [7, 27] y, teniendo en cuenta el planteamiento original del SFM, son especialmente válidos para reactores de placa plana como el que se estudia en el presente trabajo [24].

Las ecuaciones del SFM son:

$$LVRPA = \frac{I_0}{\lambda_{\omega_{corr}} \omega_{corr} (1 - \gamma)} \left[\left(\omega_{corr} - 1 + \sqrt{1 - \omega_{corr}^2} \right) e^{-x/\lambda_{\omega_{corr}}} + \gamma \left(\omega_{corr} - 1 - \sqrt{1 - \omega_{corr}^2} \right) e^{x/\lambda_{\omega_{corr}}} \right] \quad (18)$$

En donde LVRPA es la velocidad local de absorción de fotones; I_0 (en unidades de W/m^2) representa la intensidad de radiación que incide sobre la película en la placa; $\lambda_{\omega_{corr}}$ representa un tipo de longitud de extinción característica; x es la coordenada de dirección de los fotones entrantes; y ω_{corr} simboliza el albedo de dispersión corregido, el cual se define como:

$$\omega_{corr} = \frac{b}{a} \quad (19)$$

Donde

$$a = 1 - \omega p_f - \frac{4\omega^2 p_s^2}{1 - \omega p_f - \omega p_b - 2\omega p_s} \quad (20)$$

$$b = \omega p_b + \frac{4\omega^2 p_s^2}{(1 - \omega p_f - \omega p_b - 2\omega p_s)} \quad (21)$$

Donde ω es el albedo de dispersión y se define por medio de la Ec. (22); mientras que p_f , p_b y p_s representan las probabilidades de dispersión de los fotones hacia adelante, atrás y hacia los lados en el sistema, cuyos valores, respectivamente, se tomaron como 0,11; 0,710 y 0,045, considerando una función de fase del tipo esfera grande con reflexión difusa.

$$\omega = \frac{\sigma}{\sigma + \kappa} \quad (22)$$

En donde σ y κ son los coeficientes másicos de dispersión y absorción promediados en la zona del espectro electromagnético en la que catalizador es activo (385–295 nm para el TiO_2 Aeroxide-P25), los cuales tienen los siguientes valores: $\sigma = 1295,75 \text{ m}^2/\text{kg}$, $\kappa = 174,75 \text{ m}^2/\text{kg}$ [27]. γ es un parámetro adimensional, definido por la Ec. (23), el cual resulta de la agrupación de términos como el albedo de dispersión y el camino óptico aparente, en la solución de la ecuación diferencial resultante del SFM:

$$\gamma = \frac{1 - \sqrt{1 - \omega_{corr}^2}}{1 + \sqrt{1 - \omega_{corr}^2}} \exp(-2\tau_{app}) \quad (23)$$

Los otros parámetros del SFM se estiman como se muestra a continuación:

$$\lambda_{\omega_{corr}} = \frac{1}{a(\sigma + \kappa) c_{cat} \sqrt{1 - \omega_{corr}^2}} \quad (24)$$

$$\tau_{app} = a\tau \sqrt{1 - \omega_{corr}^2} \quad (25)$$

$$\tau = (\sigma + \kappa) c_{cat} \delta_{SFM} \quad (26)$$

En donde C_{cat} es la concentración del catalizador; τ y τ_{app} representan el espesor óptico y el espesor óptico aparente; mientras que δ_{SFM} es el espesor de la película líquida.

La LVRPA debe aparecer explícitamente en la ecuación cinética fotocatalítica, ya que la generación de los radicales oxidantes responsables de la degradación de los contaminantes, depende de la absorción fotónica por parte del catalizador.

Geometría

En el modelo se consideraron dos sistemas: la tubería y la placa plana, ambos se ilustran en las **figuras 4 y 5**. La tubería, de 1 pulgada nominal de diámetro (0,028 m), incluía una sección de entrada de 7 cm de largo, un codo de 90°, una sección de tubería de 14 cm de largo ubicada después del codo, y una tubería perforada de 50 cm, la cual tenía diez agujeros de 1/4" de diámetro (0,00635 m). Sólo se modeló medio sistema porque el plano xy es un plano de simetría (ver **figura 4**).

Cabe mencionar que las perturbaciones que se generan por la presencia de un codo y una tee (T) en la sección precedente al distribuidor perforado pueden afectar notablemente el campo de velocidades del fluido dentro del distribuidor. De esta manera, para modelar acertadamente la distribución del campo de velocidades en la entrada del mismo, fue necesario realizar un análisis en tres dimen-

siones en donde se consideraron estos accesorios. Además, debido a que al emplear un modelo de dos dimensiones se considera que la tubería es infinita en la dirección que va fuera del plano (fuera del papel), se tendrían problemas de continuidad en los agujeros del distribuidor, teniendo en cuenta que su área transversal es diferente a la de la sección de entrada del flujo.

Por otra parte, como el espesor de película para la operación de este tipo de reactores generalmente está entre 1 y 1,5 mm [28], se decidió hacer la simulación de la placa en dos dimensiones, considerando que, debido al flujo turbulento, las capas límites de velocidad y concentración que se encuentran de manera ortogonal a la placa tendrán un perfil más plano; mientras que a lo ancho de la placa es más difícil lograr un mezclado completo. Se tuvo en cuenta, además, que la velocidad y la fracción volumétrica del catalizador no son uniformes en los agujeros del distribuidor que alimentan a la placa, como se puede constatar con los resultados obtenidos (ver, por ejemplo, **tabla 1**).

Vale la pena mencionar que con la simulación 2D no es explícita la condición de no deslizamiento en la superficie de la placa ni los esfuerzos cortantes que pueda generar el viento encima de la placa. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, el régimen de flujo turbulento hace que el perfil de velocidades en el eje *y* (aquele asociado al espesor de la película líquida) no tenga gradientes tan pronunciados como en un perfil laminar, lo cual está acorde con lo reportado por otros investigadores [11, 29, 30]. De esta manera, y teniendo en cuenta que existe una mayor fuente de perturbación a lo ancho de la placa debido a la presencia de agujeros en el distribuidor que alimenta el fluido a la placa, con su respectiva variación de flujo; la física a lo ancho de la placa se considera más relevante.

Ahora bien, adicional al hecho de que con la simulación 2D se ahorran muchos esfuerzos computacionales, otros investigadores que han trabajado en películas descendentes han promediado la velocidad en la dirección *y* (aquella ortogonal a la superficie de la placa) y analizan el comportamiento de esta velocidad promediada a lo ancho de la placa, debido a que existen mayores gradientes en tal dirección [30]. Esto ocurre a pesar de que el mecanismo de alimento del fluido a la placa es más homogéneo en comparación con el nuestro, el cual tiene una distribución a partir de tubería perforada. Por ello, en este trabajo el análisis de la velocidad es especialmente importante a lo ancho de la placa. Finalmente, en cuanto a los esfuerzos cortantes del viento, vale la pena mencionar que se asume una atmósfera estancada para la realización de las simulaciones, condición que ha sido aceptable en el modelado de reactores fotocatalíticos [11].

Por lo tanto, la geometría para la placa plana consistió en una zona rectangular de 50 cm de ancho y 1,25 m de largo. En la parte superior cuenta con diez segmentos de líneas por medio de las cuales se asumió que ingresaba el fluido. En este caso, también se modeló medio sistema porque en $x = 0$ se tenía una línea de simetría (ver **figura 5**).

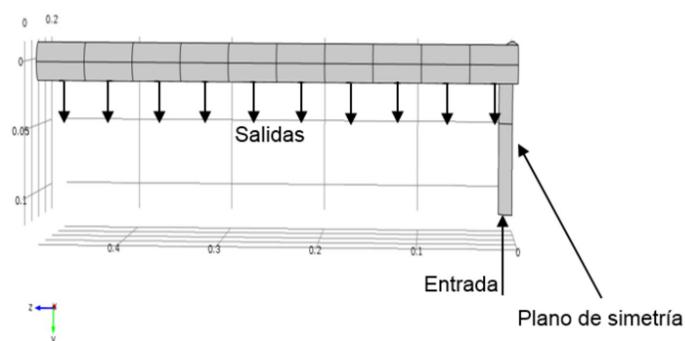


Figura 4. Geometría empleada para modelar el distribuidor perforado.

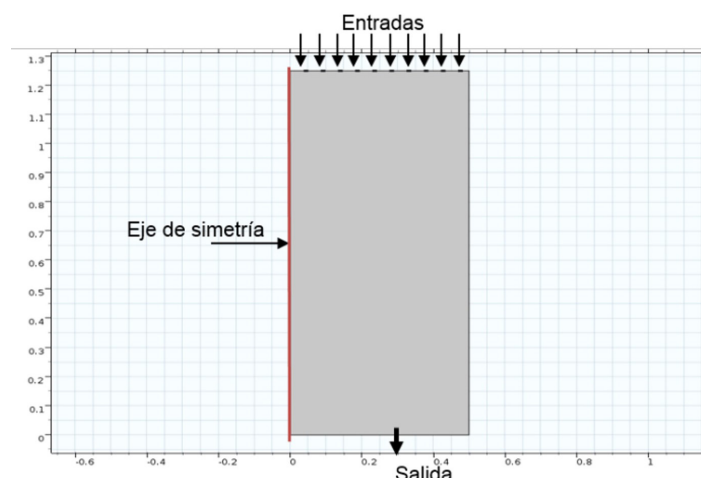


Figura 5. Geometría empleada para modelar el reactor de placa plana.

Condiciones de frontera

• Zona de entrada:

$$\mathbf{u} = -U_0 \mathbf{n} \quad (27)$$

$$\kappa = \frac{3}{2} (U_0 I_T)^2 \quad (28)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{L_T} \quad (29)$$

$$\Phi_d = \Phi_{d0} \quad (30)$$

En donde \mathbf{u} , κ y ε simbolizan el vector velocidad, la energía cinética turbulenta y la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta, como se mencionó anteriormente; U_0 es la velocidad promedio en la entrada de la tubería o en cada una de las entradas de la placa; \mathbf{n} es el vector normal unitario; I_T y L_T representan la intensidad de la turbulencia y la longitud de escala de la turbulencia, las cuales se definen más adelante; Φ_d es la fracción volumétrica de la fase dispersa y Φ_{d0} es la fracción volumétrica en la entrada.

• Zona de salida: para evitar dificultades en la convergencia, y teniendo en cuenta que para la condición de frontera en la entrada se especificó la velocidad; en el caso de la condición de frontera en la zona de salida se especificó, por su parte, la presión. De esta manera, la condición es que el esfuerzo normal se aproxima al valor de la presión, como se indica en la siguiente ecuación. Ahora bien, dado que la salida del fluido es hacia el ambiente exterior, la presión en la zona de salida es la presión atmosférica, en cuyo caso la presión manométrica es cero, como se muestra en la Ec. (31):

$$\mathbf{n}^T \left[-p\mathbf{I} + (\mu + \mu_T) \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \rho \kappa \mathbf{I} \right) \right] \mathbf{n} = 0 \quad (31)$$

• Zona de simetría: teniendo en cuenta la configuración del sistema, se añadió esta condición de frontera en la simulación en COMSOL, con la cual se garantiza la ausencia de penetración y la desaparición del esfuerzo tangencial:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (32)$$

$$-\mathbf{n} \cdot (\Phi_d \mathbf{u}_d) = 0 \quad (33)$$

$$\nabla \kappa \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (34)$$

$$\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (35)$$

• Paredes: en este caso, se empleó la opción “funciones de la pared”, que aparece por defecto en el modelado hidrodinámico turbulento con el modelo de mezcla. Por medio de esta opción,

se fija la condición de no deslizamiento en la pared sólida y funciones de la pared para describir la zona delgada con gradientes de flujo elevados en las zonas contiguas de la pared, así como ausencia de flux de fase dispersa, como se muestra a continuación:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (36)$$

$$\left[(\mu + \mu_T) \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right] \mathbf{n} = -\rho \frac{u_\tau}{\delta_w^+} \mathbf{u}_{\text{tang}} \quad (37)$$

$$\mathbf{u}_{\text{tang}} = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (38)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{N}_{\phi_d} = 0 \quad (39)$$

Para el cumplimiento del objeto del presente trabajo, primero fue necesario estimar la distribución de la velocidad y de la concentración de la fase dispersa (el catalizador) en los orificios del distribuidor, la cual serviría como condición de frontera de entrada para la película descendente en la placa plana. Estas variables corresponden respectivamente a los valores de \mathbf{u} y ϕ_d , mostrados anteriormente en el sistema de ecuaciones del modelo de mezclas (Ec. (1)-(16)).

En el reactor de placa plana de la Universidad del Valle, que se tomó como reactor real para análisis, se suele emplear un flujo de 20 L/min para garantizar un régimen de flujo turbulento. Por lo tanto, fue necesario emplear un módulo de COMSOL apropiado para este régimen. La tubería por la cual se conduce el fluido a la placa plana es de 1 pulgada nominal (0,028 m de diámetro real); por lo tanto, el área de la sección transversal es de $6,15 \times 10^{-4} \text{ m}^2$ y la velocidad promedio en la entrada se fijó en 0,54 m/s. Se consideró que el perfil de la velocidad en la entrada del sistema estaba completamente desarrollado debido a que la sección de la entrada se ubicó aproximadamente a 50 cm del último accesorio de la tubería que genera perturbaciones de flujo importantes (codo). Cabe recordar que para tuberías circulares por las que circula un flujo turbulento, la longitud de entrada es aproximadamente diez veces el diámetro de la misma [31]; es decir, en nuestro caso, es de aproximadamente 28 cm. Por lo tanto, se puede esperar que en la zona de entrada el perfil de velocidad esté completamente desarrollado.

Las propiedades del fluido se tomaron como las del agua a la temperatura ambiente, debido a que la suspensión estaba diluida. De esta manera, la densidad se fijó en 1000 kg/m^3 y la viscosidad dinámica en $1 \times 10^{-3} \text{ kg/(m} \times \text{s)}$. Para tuberías, el número de Reynolds (Re_T) se calcula como sigue:

$$Re_T = \frac{\rho V_{\text{prom}} D}{\mu} \quad (40)$$

En donde V_{prom} es la velocidad promedio; ρ es la densidad; μ es la viscosidad y D es el diámetro interno de la tubería. Con la Ec. (40) se obtuvo que el número de Re para la tubería es de 15.157, el cual está dentro del rango de flujo turbulento.

Por otra parte, las propiedades de la fase dispersa (TiO_2 P-25) necesarias para ejecutar la simulación son: densidad: 3800 kg/m^3 y diámetro de partícula: $1,1 \times 10^{-6} \text{ m}$ a pH neutro [32]. Cabe anotar que este diámetro corresponde a las partículas aglomeradas. Se empleó este valor para considerar los efectos de atracción por fuerzas electrostáticas y de Van Der Waals que ocurren entre las partículas de TiO_2 [33]. Se consideró una carga inicial de TiO_2 de 1 g/L, aplicados a 20 L de la suspensión, teniendo en cuenta las condiciones de carga del catalizador en la sección previa a la tubería, de manera que la fracción volumétrica de la fase dispersa se tomó como $2,6316 \times 10^{-4}$.

Para lograr una convergencia más rápida, primero se resolvió el problema de la tubería perforada, considerando el flujo como homogéneo y laminar. Posteriormente, los resultados obtenidos con estas

condiciones fueron usadas como valores de arranque (o iniciales) para nuestro caso de interés (flujo turbulento bifásico).

Por otra parte, el valor de la escala de longitud de la turbulencia se tomó como $1,96 \times 10^{-3}$, teniendo en cuenta que equivale al 7% del diámetro en una tubería circular [34, 35]. Este parámetro es una cantidad física que describe el tamaño de los remolinos que se generan en el flujo. De igual manera, la intensidad de la turbulencia, definida como la relación entre el promedio de las componentes fluctuantes de la velocidad y la velocidad media, se fijó en 5%, como se recomienda para flujos turbulentos [34]. Tanto la escala de la longitud de la turbulencia y la intensidad de la turbulencia son útiles para estimar las propiedades de la turbulencia en las fronteras de entrada, tales como la energía cinética turbulenta κ y su disipación ϵ .

Además, se hicieron varias simulaciones para determinar la independencia de los resultados respecto al tipo de malla que se empleó. Para ello, se analizaron tanto la velocidad de la mezcla como la fracción volumétrica del catalizador en la salida de cada uno de los orificios del distribuidor. Se seleccionaron estas dos variables para realizar este análisis de sensibilidad, porque el posterior estudio de la placa dependía directamente del valor que alcanzaban en los orificios. Vale la pena mencionar que el enmallado se hace más riguroso en zonas en donde la perturbación del fluido era importante, tales como los orificios en el distribuidor y la sección de ingreso del fluido en la placa.

Resultados y discusión

Distribuidor perforado

En la **figura 6** se muestra el detalle de la malla empleada para modelar el distribuidor perforado. El análisis de sensibilidad mostró que con una malla de 331.613 elementos la solución era un 2,33% diferente de la obtenida con una de 190.567 elementos de la misma clase. De esta manera, se tomaron los resultados de la malla de 331.613 elementos (conformada por 238.571 elementos tetraédricos, 89.545 en forma de prisma y 3497 piramidales), para establecer las condiciones de entrada de la placa plana.

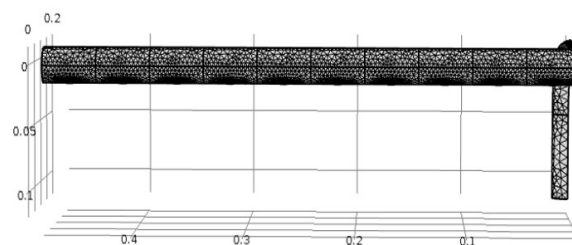


Figura 6. Detalle del enmallado del modelo del distribuidor perforado.

De esta manera, los perfiles de velocidad y distribución del catalizador en la tubería que se obtuvieron con el módulo de mezcla de COMSOL fueron los descritos en las **figuras 7 y 8**, respectivamente.

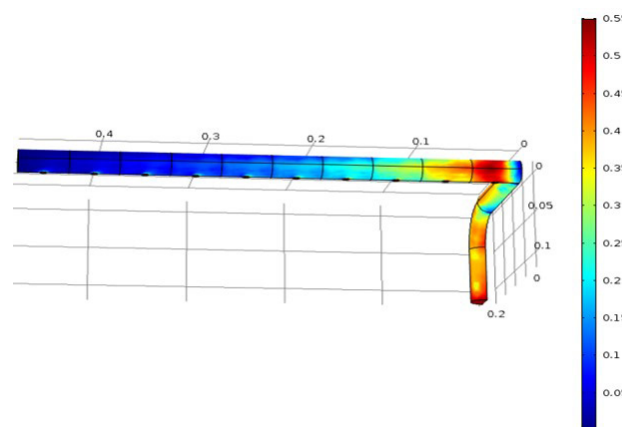


Figura 7. Perfil de velocidades (m/s) en el distribuidor perforado obtenido con la simulación CFD.

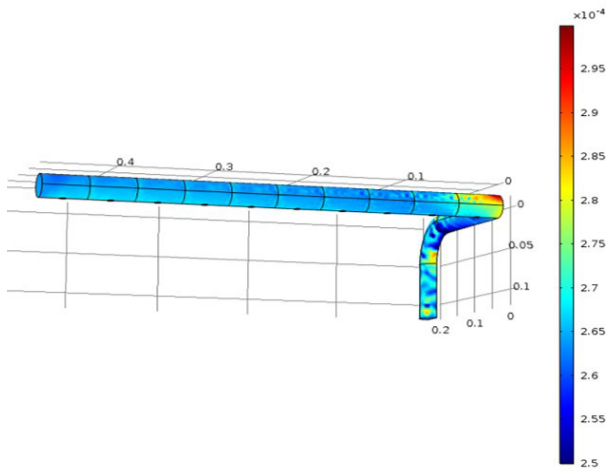


Figura 8. Perfil de fracción volumétrica (adimensional) del catalizador en el distribuidor perforado obtenido con la simulación CFD.

El promedio de la velocidad y la fracción volumétrica del catalizador que se alcanzó en la salida de cada agujero del distribuidor se muestra en la siguiente tabla, en la cual el orificio uno es el que está en el borde derecho de la figura 7 (a la entrada del sistema), y el orificio diez el que está en el borde izquierdo (extremo final):

Tabla 1. Velocidad y fracción volumétrica de catalizador en la salida de los orificios del distribuidor.

Orificio	Velocidad (m/s)	Fracción volumétrica × 10 ⁴
1	0,455	2,46
2	0,462	2,72
3	0,476	2,82
4	0,486	2,88
5	0,488	2,90
6	0,494	2,93
7	0,502	2,96
8	0,505	2,97
9	0,511	3,01
10	0,514	3,14

Como se nota en la figura 7, existe un gradiente pronunciado de la velocidad en la entrada del distribuidor. Esto se debe a la presencia del accesorio de bifurcación ubicado justo antes del mismo. Vale la pena anotar que con la geometría en 3D se obtuvieron valores razonables de la velocidad de flujo a la salida de los orificios de los distribuidores (ver tabla 1), de manera que se satisfizo la ecuación de continuidad. Esto se debe al principio de conservación de la materia, dado que el flujo volumétrico total saliente de los orificios (y el flujo másico, tomando la densidad constante) corresponde con razonable aproximación con el flujo de entrada al distribuidor. En la aproximación 2D que se realizó (resultados no presentados aquí), los valores de la magnitud de la velocidad eran de varios órdenes de magnitud menor. Sin embargo, como se nota en las figuras 7 y 8, la orientación de los accesorios y los orificios de la tubería no permiten realizar una aproximación completamente acertada a un modelo 2D.

Además, de acuerdo con la tabla 1 y la figura 7, el porcentaje de mala distribución definido como la variación porcentual del flujo entre el primer y último orificio del distribuidor es de aproximadamente 13%. Para el diseño de este tipo de accesorios usualmente se emplea un valor nominal de 5% para este parámetro, con el fin de que la distribución sea lo suficientemente uniforme en el sitio de interés [36]. De esta manera, se evidencia que debería mejorarse el diseño del mismo para aumentar la homogeneidad en el reactor de placa plana.

Placa plana

Después de haber resuelto el campo de velocidades y concentración del catalizador en la tubería, se tomó el promedio de la velocidad de la mezcla bifásica y la fracción volumétrica del catalizador, en cada uno de los orificios del distribuidor, como condiciones de frontera de entrada para el estudio en la placa plana.

Para películas descendentes que fluyen a través de una placa, el número de Reynolds (Re_p) se calcula como sigue [36, 37]:

$$Re_p = 4 \frac{Q\rho}{a\mu} \quad (41)$$

En donde Q es el flujo volumétrico y a es el ancho de la placa (aproximadamente 1 m). Por su parte, ρ y μ simbolizan respectivamente la densidad y la viscosidad, como se mencionó anteriormente. Aplicando la Ec. (41) se obtuvo que el número de Reynolds para el caudal de trabajo es aproximadamente 1370. En la literatura se muestra que con este valor el flujo se encuentra en régimen turbulento [37]. Por lo tanto, para el estudio de la placa también se empleó el módulo de mezcla para flujo turbulento de COMSOL.

En este caso, para las entradas del sistema, la intensidad de la turbulencia tuvo un valor de 5% y la escala de la longitud de la turbulencia se fijó en 0,09, tal como se recomienda para este tipo de configuraciones [34].

De igual forma, se realizó un examen de sensibilidad respecto al tipo de malla que se empleó para resolver el sistema. Se analizó el comportamiento del promedio de la concentración del catalizador, debido a que en el caso 2D esta era la variable de mayor interés. El promedio de la fracción volumétrica se realizó sobre 11 líneas de corte que se definieron en el modelo, las cuales atravesaban la totalidad del ancho de la placa y estaban ubicadas a ciertas alturas de la misma, como se indica en la figura 9.

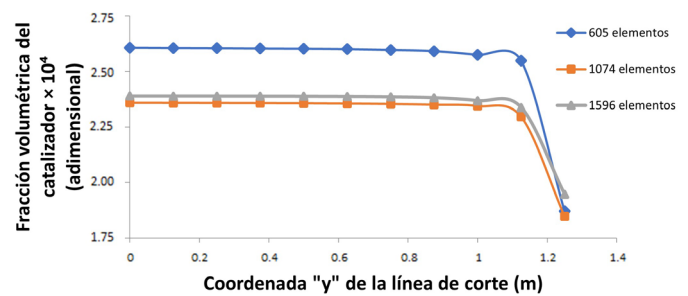


Figura 9. Análisis de sensibilidad de la malla para la simulación en la placa plana. Caso 2D.

Los resultados obtenidos con los tres tipos de mallas son similares en cuanto a la forma de la curva; sin embargo, los valores de la fracción volumétrica que arrojan las mallas de 1596 y 1074 elementos triangulares son muy similares tanto en forma como en magnitud. De hecho, la diferencia promedio entre los mismos es de 1,67%. De esta manera, se empleó la malla de 1596 elementos triangulares para realizar los cálculos subsiguientes. El detalle de la placa con el enmallado se muestra en la figura 10. Por otra parte, en la línea de

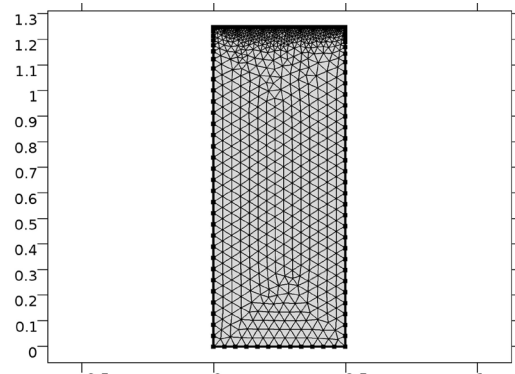


Figura 10. Detalle del enmallado de la placa plana empleado en la simulación.

corte ubicada en $y = 1,25$ se nota que la fracción volumétrica es mucho más baja. Esto se debe a que en esta zona se encuentran varias secciones que no son cubiertas por el catalizador, lo cual produce un descenso en la concentración promedio del mismo.

Los perfiles de velocidad y concentración del catalizador en toda la placa se muestran a continuación, en los cuales se ha proyectado la solución hacia el extremo izquierdo de la placa, teniendo en cuenta que en la línea $x = 0$ estaba la condición de frontera de simetría.

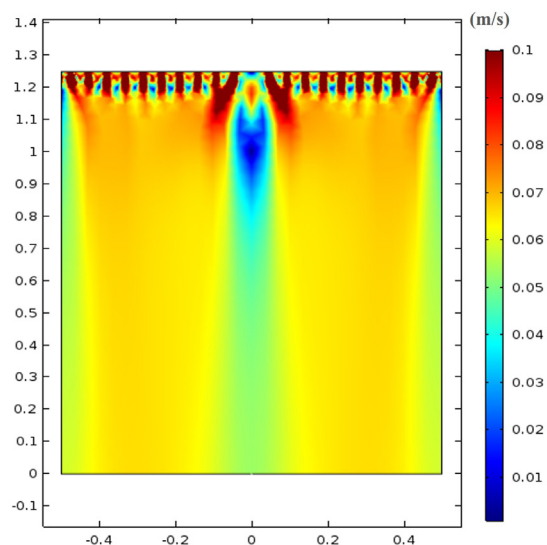


Figura 11. Perfil de velocidades en la placa de acuerdo con los resultados de la simulación CFD.

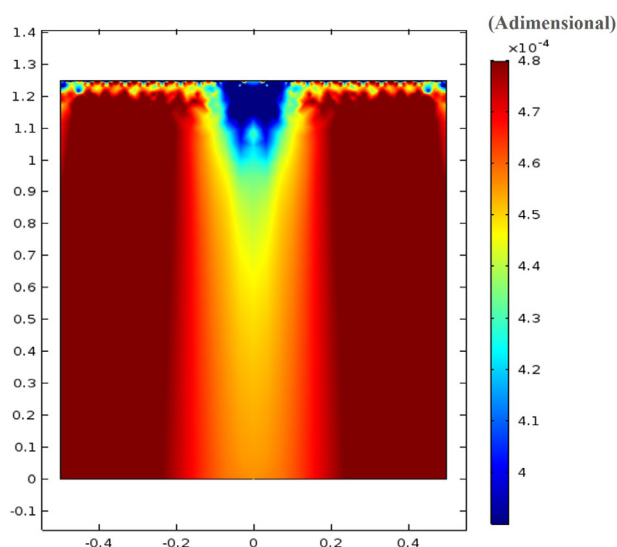


Figura 12. Perfil de concentraciones (fracciones volumétricas) en la placa de acuerdo con los resultados de la simulación CFD.

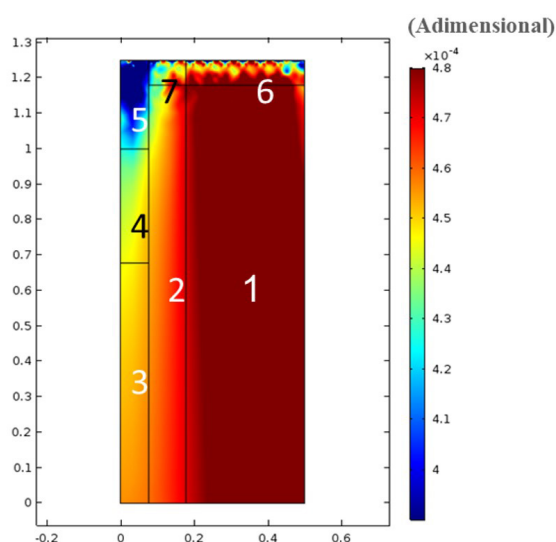


Figura 13. Placa con zonas de concentración (fracciones volumétricas) de catalizador similar delimitadas, de acuerdo con los resultados de la simulación CFD.

Tanto en la figura 11 como en la figura 12 se nota una zona en la que la magnitud de las variables es baja. Esta zona aparece porque justo en el plano central del distribuidor no hay agujeros; estos se encuentran a partir de, aproximadamente, 2,4 cm después de la bifurcación en la entrada del distribuidor.

En la figura 12 se evidencian varias zonas en las que la concentración del catalizador es diferente. En la figura 13 se muestran las siete divisiones que a juicio de los autores representan las zonas más importantes en donde la concentración del catalizador tiene un valor similar.

Con la opción de promedio sobre superficies de COMSOL, se calcularon los promedios de las fracciones volumétricas de las zonas que se muestran en la figura 13. Para ello, fue necesario definir un nuevo componente en el modelo de COMSOL y usar la opción “extrusión general”, con el que se pudieron realizar los cálculos sobre la base de los resultados obtenidos en la figura 12. De esta manera, las fracciones volumétricas correspondientes a las zonas demarcadas de la figura 13 son:

Tabla 2. Concentración promedio de la fracción volumétrica en las zonas demarcadas de la figura 13.

Zona	Ancho (m)	Largo (m)	Fracción volumétrica de catalizador $\times 10^4$
1	0,322	1,18	4,8843
2	0,101	1,18	4,612
3	0,077	0,678	4,5317
4	0,077	0,322	4,4287
5	0,077	0,25	3,963
6	0,322	0,07	4,624
7	0,101	0,07	4,3886

Para cada una de esas zonas se calculó el promedio de la absorción de fotones que se tendría para ciertas condiciones de intensidad de radiación.

Cálculo de la LVRPA

Después de haber determinado los perfiles de concentración dentro de la placa plana, se procedió a realizar la estimación de la velocidad local de absorción de fotones (conocida como LVRPA por sus siglas en inglés) en cada una de las zonas delimitadas en la figura 13. Para ello, la ecuación de transferencia radiante se resolvió mediante el SFM en una rutina de simulación con Visual Basic.

Queda para una posterior investigación el acople simultáneo en COMSOL de la determinación de la distribución del catalizador en el reactor (resultados que se obtuvieron en el presente trabajo) con la determinación de la absorción y dispersión de fotones (*scattering*) dentro del sistema. Por lo pronto, para cumplir el objetivo del presente estudio fue satisfactorio emplear el SFM, con el cual se pueden obtener resultados comparables a los que arrojan otros modelos más sofisticados [24, 38]. En este caso, por efectos de estudio, se simuló solamente la componente de la radiación directa, con una intensidad de radiación de 30 W/m^2 , la cual aparece como referencia en la mayoría de trabajos sobre fotocatalisis solar heterogénea [17, 27]. Por su parte, el valor de δ_{SFM} es aproximadamente un milímetro, conforme a lo reportado por Colina-Marquez *et al.* [28], dado que el flujo volumétrico considerado para el reactor de placa plana analizado fue de 20 L/min.

El catalizador seleccionado fue TiO_2 Degussa P-25 (80% anatasa, 20% rutilo), para el cual se considera una función de fase del tipo esfera grande con reflexión difusa, en la que las probabilidades de dispersión son: $p_f = 0,11$, $p_b = 0,710$ y $p_s = 0,045$ [24, 27]. Cabe anotar que en COMSOL se deben emplear polinomios de Legendre para definir la probabilidad de dispersión anisotrópica de las partículas

del catalizador. No aparece la opción explícita de esfera grande con reflexión difusa.

De esta manera, se calculó tanto el promedio de la LVRPA como la absorción global de fotones (OVRPA) en cada zona demarcada de la **figura 13**. Para ello, se hizo uso del SFM y de las siguientes definiciones, en donde z es la longitud perpendicular a la placa plana del reactor; mientras que A_{zona} y L_{zona} representan el ancho y el largo de las zonas delimitadas de la **figura 13**:

$$\text{LVRPA}_{\text{prom}} = \frac{1}{\delta_{\text{SFM}}} \int_0^{\delta} \text{LVRPA} \, dz \quad (42)$$

$$\text{OVRPA} = A_{\text{zona}} \times L_{\text{zona}} \int_0^{\delta} \text{LVRPA} \, dz \quad (43)$$

Los resultados se muestran en la **tabla 3**.

Tabla 3. Valores de la absorción fotónica en el reactor de placa plana.

Zona	LVRPA _{prom} (Wm ⁻³)	OVRPA (W)
1	3944,66	1,50
2	3742,97	0,45
3	3683,07	0,19
4	3605,95	0,09
5	3253,29	0,06
6	3751,91	0,08
7	3575,83	0,03

Como se puede observar en la **tabla 3**, existe una diferencia porcentual de más del 20% entre el mayor y el menor valor del promedio de la absorción fotónica en la placa. Debido a que el orden de la velocidad de reacción fotocatalítica respecto a la absorción fotónica suele tomar valores entre 0,5 y 1 [39], se puede esperar que la variación en la degradación de los contaminantes en estas zonas del reactor oscile entre el 10 y el 20%, lo cual implica que esta distribución afecta la eficiencia del reactor fotocatalítico.

Conclusiones

El diseño de distribuidor presentado en este trabajo, que simula un reactor de película descendente presente a escala piloto, produce gradientes pronunciados de velocidad y concentración de la fase dispersa a lo largo de los orificios por los que sale el fluido. Debido a ello, en el reactor se generan zonas con diferencias de hasta el 20% en la absorción fotónica; en las cuales, la degradación de los contaminantes puede variar entre el 10 y el 20%. Los focos de concentración observados en las diferentes zonas resultan de gran interés para la toma de decisiones en cuanto al diseño de futuros prototipos semejantes al simulado, de tal manera que al ponerlos en marcha estos puedan alcanzar mayor homogeneidad y mejores resultados de dispersión de las partículas suspendidas en el fluido. Se obtuvo que la distribución de partículas de catalizador en la película formada sobre la placa del reactor no es homogénea, en consecuencia, se identificaron siete zonas específicas con concentraciones similares. Para cumplir el objetivo del presente estudio fue satisfactorio emplear el SFM, con el cual se pueden obtener resultados comparables a los que arrojan otros modelos más sofisticados.

Las herramientas de dinámica de fluidos computacional mostraron ser muy útiles a la hora de estudiar este tipo de reactores fotocatalíticos. Para un futuro trabajo se puede considerar un análisis paramétrico para determinar una configuración más eficiente para operar los reactores fotocatalíticos de película descendente, así como el acople simultáneo en COMSOL de la determinación de la distribución del catalizador en el reactor (resultados que se obtuvieron en el presente trabajo) con la determinación de la absorción y dispersión de fotones (*scattering*) dentro del sistema.

Agradecimientos

Deyler Castilla Caballero agradece al profesor Jaime Lozano por su apoyo en el curso de Tópicos Avanzados III de la Universidad del Valle, relacionado con las herramientas de CFD para Ingeniería Química. Deyler Castilla Caballero y Astrid Medina Guerrero agradecen a El Shaddai por todos los recursos para adelantar la investigación.

Referencias

- [1] A. Yusuf y G. Palmisano, "Three-dimensional CFD modelling of a photocatalytic parallel-channel microreactor", *Chem Eng Sci.*, vol. 229, nro. 16, pp. 116051, ene. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.116051>
- [2] I. Garrido, P. Flores, P. Hellín, N. Vela, S. Navarro y J. Fenoll, "Solar reclamation of agro-wastewater polluted with eight pesticides by heterogeneous photocatalysis using a modular facility. A case study", *Chemosphere*, vol. 249, pp. 126156, jun. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.126156>
- [3] A. Yusuf, C. Garlisi, R. Peralta Muniz Moreira, G. Li Puma y G. Palmisano, "Multiphysics computational fluid dynamics (CFD) modelling of diclofenac amide removal by photocatalytic oxidation on Fe-TiO₂/N-TiO₂ thin films microreactor", *Chem Eng Sci.*, vol. 274, nro. 15, pp. 118662, jun. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.118662>
- [4] J.O.B. Lira, H.G. Riella, N. Padoin y C. Soares, "CFD + DoE optimization of a flat plate photocatalytic reactor applied to NO_x abatement", *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 154, pp. 107998, ago. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107998>
- [5] Y. Boyjoo, M. Ang y V. Pareek, "Some aspects of photocatalytic reactor modeling using computational fluid dynamics", *Chem Eng Sci.*, vol. 101, nro. 20, pp. 764–784, sep. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.06.035>
- [6] O. Alvarado-Rolon, R. Natividad, J. Ramírez-García, J. Orozco-Velazco, J.A. Hernandez-Servin y A. Ramírez-Serrano, "Kinetic modelling of paracetamol degradation by photocatalysis: Incorporating the competition for photons by the organic molecule and the photocatalyst", *J Photochem Photobiol A Chem.*, vol. 412, nro. 1, pp. 113252, may. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.JPHOTOCHEM.2021.113252>
- [7] D. Castilla-Caballero, F. Machuca-Martínez, C. Bustillo-Lecompte y J. Colina-Márquez, "Photocatalytic degradation of commercial acetaminophen: Evaluation, modeling, and scaling-up of photoreactors", *Catalysts*, vol. 8, nro. 5, pp. 1-15, 2018. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal8050179>
- [8] I. Grčić, L. Radetić, K. Miklec, I. Presečki, K. Leskovic, H. Meaški, M. Čizmić y I. Brnardić, "Solar photocatalysis application in UWWTP outlets - simulations based on predictive models in flat-plate reactors and pollutant degradation studies with in silico toxicity assessment", *J Hazard Mater.*, vol. 461, nro. 5, pp. 132589, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2023.132589>
- [9] M.A. Mueses, J. Colina-Márquez, F. Machuca-Martínez y G. Li Puma, "Recent advances on modeling of solar heterogeneous photocatalytic reactors applied for degradation of pharmaceuticals and emerging organic contaminants in water", *Curr Opin Green Sustain Chem.*, vol. 30, p. 100486, ago. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.COGSC.2021.100486>
- [10] M. Asgharian, B. Khoshandam, M. Mehdipourghazi y N. Keramati, "Photocatalytic degradation of tetracycline in a stirred tank: computational fluid dynamic modeling and data validation", *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, vol. 134, pp. 553–568, sep. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11144-021-02062-0>
- [11] J. Colina-Márquez, D. Castilla-Caballero y F. Machuca-Martínez, "Modeling of a falling-film photocatalytic reactor: Fluid dynamics for turbulent regime", *Appl Math Model.*, vol. 40, nros. 7–8, pp. 4812–4821, abr. 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.12.007>

- [12] S.M. Fouad, Y.M.S. El-Shazly, M.A. Alyoubi, S.A. Nosier y M. H. Abdel-Aziz, "Enhanced photocatalytic degradation of cationic dyes using slurry of anatase titania in a falling film reactor", *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, vol. 8, pp. 100518, dic. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.CSCEE.2023.100518>
- [13] K. Kouvelis, A.A. Ioannidi, A. Petala, M. Souliotis y Z. Frontistis, "Photocatalytic Degradation of Losartan with Bismuth Oxychloride: Batch and Pilot Scale Demonstration", *Catalysts*, vol. 13, nro. 8, pp. 1175, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal13081175>
- [14] F. de J. Silerio-Vázquez, C.M. Núñez-Núñez, M.T. Alarcón-Herrera y J.B. Proal-Nájera, "Comparative Efficiencies for Phenol Degradation on Solar Heterogeneous Photocatalytic Reactors: Flat Plate and Compound Parabolic Collector", *Catalysts*, vol. 12, nro. 6, pp. 575, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/CATAL12060575>
- [15] F. Biglar, A. Talaiekhosani, F. Aminshari, J. Park, A. Barghi y S. Rezaia, "Application of zno-nd nano-photocatalyst for the reactive red 198 dye decolorization in the falling-film photocatalytic reactor", *Toxics*, vol. 9, pp. 254, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/toxics9100254>
- [16] Z.Y. Shnain, M. Fadhil Abid, K.A. Sukkar y K.A. Sukkar, "Photodegradation of mefenamic acid from wastewater in a continuous flow solar falling film reactor", *Desalination and Water Treatment*, vol. 2010, pp. 22-30, ene. 2021. DOI: <https://doi.org/10.5004/dwt.2021.26581>
- [17] M.A. Mueses, F. Machuca-Martinez y G. Li Puma, "Effective quantum yield and reaction rate model for evaluation of photocatalytic degradation of water contaminants in heterogeneous pilot-scale solar photoreactors", *Chemical Engineering Journal*, vol. 215-216, nro. 15, pp. 937-947, ene. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.11.076>
- [18] G. Li Puma, J. Khor y A. Brucato, "Modeling of an annular photocatalytic reactor for water purification: oxidation of pesticides", *Environ Sci Technol.*, vol. 38, nro. 13, pp. 3737-3745, may. 2004. DOI: <https://doi.org/10.1021/es0301020>
- [19] J. Ling, P. V. Skudarnov, C.X. Lin y M. A. Ebadian, "Numerical investigations of liquid-solid slurry flows in a fully developed turbulent flow region", *Int J Heat Fluid Flow*, vol. 24, nro.: 3, pp. 389-398, jun. 2003. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0142-727X\(03\)00018-3](https://doi.org/10.1016/S0142-727X(03)00018-3)
- [20] N. Qi, H. Zhang, B. Jin y K. Zhang, "CFD modelling of hydrodynamics and degradation kinetics in an annular slurry photocatalytic reactor for wastewater treatment", *Chemical Engineering Journal*, vol. 172, nro. 1, pp. 84-95, ago. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.CEJ.2011.05.068>
- [21] X. Xu, S. Wang, C. Gong y Q. Yang, "Improvement of the bubble separation through eccentric planar cyclones: Experiments and CFD simulations", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 198, pp. 208-220, oct. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.CHERD.2023.06.047>
- [22] R. Silva, C. Cotas, F.A.P. Garcia, P.M. Faia y M.G. Rasteiro, "Particle Distribution Studies in Highly Concentrated Solid-liquid Flows in Pipe Using the Mixture Model", *Procedia Eng.* vol. 102, pp. 1016-1025, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/J.PROENG.2015.01.224>
- [23] "Turbulence Modeling in Mixture Models", 2023. [En línea]. Disponible: https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help/cfd/cfd_ug_fluidflow_multi.09.109.html [Último acceso: 2/11/2023].
- [24] A. Brucato, C. Grisafi, G. Montante, G. Rizzuti y G. Vella, "Estimating radiant fields in flat heterogeneous photoreactors by the six-flux model", *AIChE Journal*, vol. 52, pp. 3882-3890, sep. 2006. DOI: <https://doi.org/10.1002/aic.10984>
- [25] J. Colina-Márquez, F. Machuca-Martínez y G. Li Puma, "Radiation absorption and optimization of solar photocatalytic reactors for environmental applications", *Environ Sci Technol.*, vol. 44, nro. 13, pp. 5112-20, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1021/es100130h>
- [26] J. Colina-Márquez, F. Machuca-Martínez y G. Li Puma, "Photocatalytic mineralization of commercial herbicides in a pilot-scale solar CPC reactor: photoreactor modeling and reaction kinetics constants independent of radiation field", *Environ Sci Technol.*, vol. 43, nro. 23, pp. 8953-60. DOI: <https://doi.org/10.1021/es902004b>
- [27] J. Colina-Márquez, F. Machuca-Martínez y G. Puma, "Modeling the Photocatalytic Mineralization in Water of Commercial Formulation of Estrogens 17- β Estradiol (E2) and Noregestrol Acetate in Contraceptive Pills in a Solar Powered Compound Parabolic Collector", *Molecules*, vol. 20, nro. 7, pp. 13354-13373, 2015. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules200713354>
- [28] J. Colina-Marquez, D. Castilla-Caballero y F. Machuca-Martinez, "Modeling of a falling-film photocatalytic reactor: Fluid dynamics for turbulent regime", *Appl Math Model.*, vol. 40, nro. 7-8, pp. 4812-4821, abr. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apm.2015.12.007>
- [29] G. Karimi y M. Kawaji, "An experimental study of freely falling films in a vertical tube", *Chem Eng Sci.*, vol. 53, nro. 20, pp. 3501-3512, 1998. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00159-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00159-6)
- [30] Z. Wei, Y. Wang, Z. Wu, X. Peng, G. Yu y F. Wang, "Flow Characteristics of the Vertical Turbulent Falling Film at High Reynolds Numbers", *Ind Eng Chem Res.*, vol. 60, nro. 1, pp. 678-696, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c03557>
- [31] F.P. Incropera y D.P. DeWitt, *Fundamentos de transferencia de calor*, Pearson Educación, 1999.
- [32] A.M. Horst, Z. Ji y P.A. Holden, "Nanoparticle dispersion in environmentally relevant culture media: a TiO₂ case study and considerations for a general approach", *Journal of Nanoparticle Research*, vol. 14, pp. 1014, jul. 2012. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11051-012-1014-2>.
- [33] R. Tsekov, E. Evstatieva, K.W. Stockelhuber y P.G. Smirniotis, "Stability of TiO₂ suspensions in reactors for degradation of toxic pollutants", *Progr Colloid Polym Sci.*, vol. 126, pp. 117-120, nov. 2004. DOI: <https://doi.org/10.1007/b94005>.
- [34] Comsol, "Comsol User's Guide-CFD Module". V. 5.2, 2015.
- [35] H.K. Versteeg y W. Malalasekera, *An introduction to Computational Fluid Dynamics*, Prentice Hall, 1995.
- [36] D. Green y R. Perry, *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, Eighth Edition, McGraw-Hill Education, 2007.
- [37] R.B. Bird, W.E. Stewart y E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, Wiley, 2007.
- [38] L. Hurtado, R. Natividad, E. Torres-García, J. Farias y G. Li Puma, "Correlating the photocatalytic activity and the optical properties of LiVMoO₆ photocatalyst under the UV and the visible region of the solar radiation spectrum", *Chemical Engineering Journal*, vol. 262, pp. 1284-1291, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.10.052>.
- [39] B. Bayarri, J. Giménez, M.I. Maldonado, S. Malato y S. Esplugas, "2,4-Dichlorophenol degradation by means of heterogeneous photocatalysis. Comparison between laboratory and pilot plant performance", *Chemical Engineering Journal*, vol. 232, pp. 405-417, oct. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.07.102>.

Citación del artículo:

D. R. Castilla Caballero, A. del R. Medina Guerrero, F. Machuca Martínez y J. A. Colina Márquez, "Modelamiento y simulación de reactores fotocatalíticos de película descendente: uso de la dinámica computacional de fluidos (CFD) para análisis del sistema multifásico", *Rev. Colomb. Quim.*, vol. 52, nro. 2, pp. 43-53, 2023. DOI: <https://doi.org/10.15446/rev.colomb.quim.v52n2.110351>