

Fecha de presentación del Informe: Día Mes Año **1. Datos generales del Proyecto**

Código del proyecto: 21022			
Título del proyecto: Estudio del efecto hidrodinámico y de transporte de energía radiante en el diseño y optimización de reactores fotocatalíticos heterogéneos solares			
Facultad o Instituto Académico: Facultad de Ingeniería			
Departamento o Escuela: Escuela de Ingeniería Química			
Grupo (s) de investigación: Grupo LICAP y Grupo GAOX			
Entidades: Universidad del Valle			
Palabras claves: Fotorreactor, Fotocatalizador, Propiedades Ópticas, Absorción de Energía Radiante, Six-Flux Model.			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	María Helena Pinzón	5	5
Coinvestigadores	Fiderman Machuca Martínez	2	2
Otros participantes	Raúl Acosta Herazo	5	5
	Jesús Monterroza Romero	5	5

2. Resumen ejecutivo:

Las tecnologías de origen fotocatalítico capaces de emplear la luz solar natural en la descontaminación de aguas presentan una notable prospectiva como procesos altamente sustentables con el medioambiente. Sin embargo, aún hay muchos aspectos por desarrollar para que estas tecnologías alcancen un verdadero potencial como una solución real a problemas a gran escala en el tratamiento de aguas. Uno de los principales puntos que limita su progreso es la falta de modelos matemáticos y métodos

¹ Todas las personas relacionadas en el informe y que participen en el proyecto deben haber suscrito el acta de propiedad intelectual de acuerdo con los formatos establecidos.

de cálculo que aborden los problemas típicos de un enfoque de ingeniería contribuyendo a avances significativos en el marco del diseño y optimización de reactores fotocatalíticos heterogéneos, en particular aquellos con capacidad de usar la luz solar y de tratar grandes volúmenes de agua contaminada. Actualmente, la construcción y puesta en marcha de los reactores fotocatalíticos se basa esencialmente en información empírica obtenida por ensayo y error, con la consecuente inversión de recursos que ello implica.

En este contexto, el objetivo general de este proyecto es establecer una metodología matemática genérica para la evaluación y optimización del diseño de reactores fotocatalíticos solares que incorpore los efectos del transporte de radiación y de las propiedades ópticas del fotocatalizador.

La metodología de trabajo desarrollada en el proyecto se encuentra dividida de la siguiente forma: i) una propuesta matemático-numérica para la estimación de las propiedades ópticas de fotocatalizadores en medio acuoso basada en el enfoque Six-Flux Model (SFM); ii) Análisis de los modelos y enfoques empleados para la descripción del campo de radiación en fotorreactores solares iii) La propuesta y validación de parámetros adimensionales que permitan una evaluación integral del desempeño de la absorción de radiación de los fotorreactores solares usados en la descontaminación de aguas.

Como resultado principal se obtuvo una metodología matemática rigurosa que permite la evaluación, optimización y diseño del desempeño de la absorción de radiación de fotorreactores solares. El enfoque desarrollado es un avance considerable a las alternativas propuestas en la literatura, ya que incluye de forma integral el efecto de las propiedades ópticas de los fotocatalizadores, las condiciones de irradiación solar, la carga de catalizador, las dimensiones del reactor y el efecto de la distribución de la energía absorbida. Así mismo los resultados obtenidos por esta metodología fueron validados satisfactoriamente con datos de la literatura.

Palabras clave: Fotorreactor, Fotocatalizador, Propiedades Ópticas, Absorción de Energía Radiante, Six-Flux Model.

The technologies of photocatalytic origin capable of using natural sunlight in the decontamination of water present a remarkable prospect as highly sustainable processes with the environment. However, there are still many aspects to develop for these technologies to reach their true potential as a real solution to large-scale problems in water treatment. One of the main points that limits its progress is the lack of mathematical models and calculation methods that address the typical problems of an

engineering approach, contributing to significant advances in the design and optimization of heterogeneous photocatalytic reactors, in particular those with capacity from using sunlight and treating large volumes of contaminated water. Currently, the construction and commissioning of photocatalytic reactors is essentially based on empirical information obtained by trial and error, with the consequent investment of resources that this implies.

In this context, the general objective of this project is to establish a generic mathematical methodology for the evaluation and optimization of the design of solar photocatalytic reactors that incorporates the effects of radiation transport and the optical properties of the photocatalyst.

The work methodology developed in the project is divided as follows: i) a mathematical-numerical proposal for the estimation of the optical properties of photocatalysts in aqueous medium based on the Six-Flux Model (SFM) approach; ii) Analysis of the models and approaches used to describe the radiation field in solar photoreactors iii) The proposal and validation of dimensionless parameters that allow a comprehensive evaluation of the radiation absorption performance of solar photoreactors used in water decontamination.

As the main result, a rigorous mathematical methodology was obtained that allows the evaluation, optimization and design of the radiation absorption performance of solar photoreactors. The approach developed is a considerable advance over the alternatives proposed in the literature, since it comprehensively includes the effect of the optical properties of the photocatalysts, the solar irradiation conditions, the catalyst load, the dimensions of the reactor and the effect of the distribution of absorbed energy. Likewise, the results obtained by this methodology were satisfactorily validated with data from the literature.

Keywords: Photoreactor, Photocatalyst, Optical Properties, Radiant Energy Absorption, Six-Flux Model.

3. Síntesis del proyecto:

Tema: Ingeniería de reactores fotocatalíticos heterogéneos

Los detalles del desarrollo del proyecto se encuentran en las publicaciones de los artículos relacionados con el cumplimiento de los objetivos. Ellos son:

Acosta-Herazo, R., Valadés-Pelayo, P.J., Mueses, M.A., Pinzón-Cárdenas, M.H., Arancibia-Bulnes, C., Machuca-Martínez, F. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. (2020) Chemical Engineering Journal, 395, art. no. 125065, DOI: 10.1016/j.cej.2020.125065

Acosta-Herazo, R., Cañaveral-Velásquez, B., Pérez-Giraldo, K., Mueses, M.A., Pinzón-Cárdenas, M.H., Machuca-Martínez, F. A MATLAB-based application for modeling and simulation of solar Slurry photocatalytic reactors for environmental applications (2020) Water (Switzerland), 12 (8), art. no. 2196, DOI: 10.3390/W12082196

Se relaciona a continuación los detalles metodológicos del proyecto y los resultados

Objetivo específico 1:	Proponer una metodología matemático-numérica para la estimación de las propiedades ópticas de fotocatalizadores sólidos en un medio acuoso.	
Porcentaje de avance técnico estimado del objetivo específico		(100)%
Actividades	Resultados y productos (especifique el indicador verificable del logro)	
Recolección de datos experimentales de medidas espectrofotométricas para estimación de las propiedades ópticas de catalizadores en medio acuoso.	Informe de resultados que es usado como base para artículo publicado en Chemical Engineering Journal. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065	

Formulación de la estructura numérica para el cálculo de los parámetros necesarios.	Informe de resultados que es usado como base para artículo publicado en Chemical Engineering Journal. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065
---	---

Objetivo específico 2:	Analizar la hidrodinámica en reactores fotocatalíticos heterogéneos solares tipo tubulares a través de herramientas de dinámica de fluidos computacional (CFD).	
Porcentaje de avance técnico estimado del objetivo específico		(100)%
Actividades	Resultados y productos (especifique el indicador verificable del logro)	

Simulación de la hidrodinámica de fotorreactores solares.	Informe de resultados que es usado como base para artículo publicado en Chemical Engineering Journal. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065

Objetivo específico 3:	Modelar la distribución espacial de la energía radiante en reactores fotocatalíticos heterogéneos operados con radiación solar considerando efectos hidrodinámicos.	
Porcentaje de avance técnico estimado del objetivo específico		(100)%
Actividades	Resultados y productos (especifique el indicador verificable del logro)	

Proponer un modelo Monte Carlo para determinar el campo de radiación en fotorreactores solare CPC.	Artículo publicado en Chemical Engineering Journal. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065
Implementar el modelo Monte Carlo desarrollado para evaluar diferentes parámetros de diseño y condiciones de operación de los fotorreactores CPC	Artículo publicado en Chemical Engineering Journal An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065

Objetivo específico 4:	Determinar un método basado en un enfoque adimensional que relacione las propiedades ópticas del catalizador con el diseño, optimización y escalado de reactores fotocatalíticos solares de geometría plana y tubular.
Porcentaje de avance técnico estimado del objetivo específico	(100)%

Actividades	Resultados y productos (especifique el indicador verificable del logro)
Elaboración de una metodología para la optimización de reactores planos y tubulares.	Artículo publicado en Chemical Engineering Journal. An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization. Chemical Engineering Journal 395 (2020) 125065
Desarrollo de una aplicación computacional en la interfaz gráfica de MATLAB para el modelamiento de fotorreactores solares	Artículo publicado en la revista Water. MATLAB-Based Application for Modeling and Simulation of Solar Slurry Photocatalytic Reactors for Environmental Applications. Water 2020, 12, 2196; doi:10.3390/w12082196

Principales conclusiones:

El enfoque propuesto en este trabajo proporciona un puente entre parámetros del sistema de interés experimental y los parámetros ópticos y radiativos de los fotorreactores solares. Los resultados obtenidos ayudan a mejorar la precisión del modelado en fotorreactores solares, la selección de los materiales adecuados del receptor y la optimización de la diseño y operación de las configuraciones de reactores más comunes para aplicaciones fotocatalíticas solares. Todas las consideraciones teóricas y el desarrollo de la metodología, así como la discusión de los resultados se encuentran en detalle en las publicaciones referidas y hacen parte de este informe.

4. Impactos actual o potencial:

El desarrollo del presente proyecto apoyó directamente la formación de un estudiante de maestría y de un estudiante de doctorado de la Escuela de Ingeniería Química. Los estudiantes pudieron desarrollar su trabajo investigativo satisfactoriamente y divulgar sus resultados en congresos internacionales de primer nivel en el área de trabajo. A su vez, también permitió la publicación de los resultados de investigación en revistas de primer nivel en Ingeniería Química como es el caso de la *Chemical Engineering Journal* (IF: 10.652, Q1) y *Water Journal* (IF: 2.544, Q1).

Por otra parte, el objetivo del presente proyecto apuntó a realizar aportes al avance de la fotocatálisis heterogénea solar como tecnología competitiva aplicada a la descontaminación de aguas. Debido a la falta de metodologías matemáticas que permitan evaluar y diseñar confiablemente los fotorreactores, el uso de dicha tecnología es percibido como costoso, debido a la puesta en marcha de una planta fotocatalítica solar requerirá en gran parte de ensayo y error. Este proyecto proporciona un método sistemático para la evaluación y diseño de los fotorreactores desde un punto de vista integral, permitiendo correlacionar las diferentes variables operativas y de diseño del proceso.

Finalmente, el proyecto realizó un aporte interesante al crear puentes amigables entre investigadores con enfoques de trabajo diferentes. El área de modelamiento de fotorreactores solares es percibida como un área compleja, especialmente para investigadores cuyo trabajo de investigación se basa en el desarrollo experimental, cuando deberían ser enfoques complementarios que permitan ampliar y enriquecer los resultados de la investigación. Por ello, en este proyecto se desarrolló una aplicación una aplicación computacional en la interfaz gráfica de MATLAB, la cual proporciona un entorno amigable para realizar el modelamiento y simulación de las configuraciones más comunes de fotorreactores solares. Esta aplicación tendrá un impacto en el desarrollo de trabajos experimentales mucho más sólidos y también facilitará la formación de los nuevos investigadores en el área de modelamiento de fotorreactores.

5. Productos:

Tabla No. 1. **Cantidad y tipo de productos pactados en el Acta de Trabajo y Compromiso y productos finalmente presentados**

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS				No. de PRODUCTOS PRESENTADOS			
Productos de nuevos conocimientos								
Artículo en revista ISI-SCOPUS:	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
			2		2			
Artículo completo publicado en revistas indexadas	A1	A2	B	C	A1	A2	B	C
Libros de autor que publiquen resultados de investigación								
Capítulos en libros que publican resultados de investigación								
Productos o procesos tecnológicos patentados o registrados								
• Prototipos y patentes								
• Software								
Productos o procesos tecnológicos usualmente no patentables o protegidos por secreto industrial								
Normas basadas en resultados de investigación								
Formación de recursos humanos	No. de estudiantes vinculados	No. de tesis			No. De estudiantes Vinculados	No. De tesis		
Estudiantes de pregrado								
Semillero de Investigación								
Estudiantes de maestría o	1				1	0		
Estudiantes de doctorado					1	0		
Joven investigador								
Productos de divulgación								

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS	No. de PRODUCTOS PRESENTADOS	
Publicaciones en revistas no indexadas	0	0	0
Ponencias presentadas en eventos (congresos, seminarios, coloquios, foros)	Ponencia en evento académico con memoria	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales
	1		3
Propuesta de investigación			
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.			

Tabla No. 2. Detalle de productos

Para cada uno de los productos obtenidos y relacionados en la tabla anterior, indique la información solicitada para cada uno, anexando copia de las respectivas constancias. Como anexo a este formato encontrará el instructivo para la revisión de informes finales y productos

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	(2020) Chemical Engineering Journal, 395, art. no. 125065. DOI: 10.1016/j.cej.2020.125065
Nombre Particular:	An optical and energy absorption analysis of the solar compound parabolic collector photoreactor (CPCP): The impact of the radiation distribution on its optimization
Ciudad y fechas:	https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85083288554&doi=10.1016%2fj.cej.2020.125065&partnerID=40&md5=d550465aa6eb6cab7a16dcef4aa44637
Participantes:	Acosta-Herazo, R., Valadés-Pelayo, P.J., Mueses, M.A., Pinzón-Cárdenas, M.H., Arancibia-Bulnes, C., Machuca-Martínez, F.
Sitio de información:	https://www.sciencedirect-com.bd.univalle.edu.co/science/article/pii/S1385894720310573?via%3Di%3Dhub

Formas organizativas:	LICAP, GAOX

Tipo de producto:	Artículo
Nombre General:	(2020) Water (Switzerland), 12 (8), art. no. 2196, DOI: 10.3390/W12082196.
Nombre Particular:	A MATLAB-based application for modeling and simulation of solar Slurry photocatalytic reactors for environmental applications
Ciudad y fechas:	https://www.mdpi.com/2073-4441/12/8/2196
Participantes:	Acosta-Herazo, R., Cañaveral-Velásquez, B., Pérez-Giraldo, K., Mueses, M.A., Pinzón-Cárdenas, M.H., Machuca-Martínez, F.
Sitio de información:	https://www.mdpi.com/2073-4441/12/8/2196
Formas organizativas:	LICAP, GAOX

Tipo de producto:	Memorias
Nombre General:	<i>IV IBEROAMERICAN CONFERENCE ON ADVANCED OXIDATION TECHNOLOGIES. IV CIPOA</i>
Nombre Particular:	<i>Selection of a meteorological database to study the solar potential in different cities of Colombia for the start-up of a solar photocatalytic reactor</i>
Ciudad y fechas:	Natal, Brazil, 18 to 22 November 2019
Participantes:	J. Monterroza-Romero, R. Acosta-Herazo, J. Díaz-Angulo, M. Pinzon-Cardenas, F. Machuca-Martinez
Sitio de información:	Memorias del evento
Formas organizativas:	LICAP, GAOX

Tipo de producto:	Memorias
Nombre General:	<i>IV IBEROAMERICAN CONFERENCE ON ADVANCED OXIDATION TECHNOLOGIES. IV CIPOA</i>
Nombre Particular:	<i>Impact of the reflection/refraction of the boundary walls on the absorbed energy distribution of solar tubular and CPC photoreactors for photocatalytic applications</i>
Ciudad y fechas:	Natal, Brazil, 18 to 22 November 2019
Participantes:	R. Acosta-Herazo, P. Valades-Pelayo, M. Mueses, C. Arancibia-Bulnes, F. Machuca-Martínez
Sitio de información:	Memorias del evento
Formas organizativas:	LICAP; GAOX

Tipo de producto:	de Memorias
Nombre General:	<i>IV IBEROAMERICAN CONFERENCE ON ADVANCED OXIDATION TECHNOLOGIES. IV CIPOA</i>
Nombre Particular:	<i>Technological Evolution of Electro-Oxidation Process for Wastewater Treatment</i>
Ciudad y fechas:	Natal, Brazil, 18 to 22 November 2019
Participantes:	F. Machuca- Martínez
Sitio de información:	Memorias del evento
Formas organizativas:	LICAP; GAOX

Tipo de producto:	Tesis Propuesta
Nombre General:	Propuesta de metodología para el diseño y optimización de reactores fotocatalíticos heterogéneos solares basada en efectos hidrodinámicos de transporte de energía radiante



Nombre Particular:	Propuesta doctoral
Ciudad y fechas:	Cali, 11 01 2019
Participantes:	Raul Acosta
Sitio de información:	Vicedecanatura de Investigación y Posgrados de la Facultad de Ingeniería
Formas organizativas:	LICAP. GAOX

Tipo de producto:	Tesis propuesta maestría
Nombre General:	Evaluación del desempeño de $UVC/S_2O_8^{2-}/UVC/H_2O_2$ en el tratamiento de aguas residuales reales
Nombre Particular:	Propuesta de maestría
Ciudad y fechas:	Cali, julio 31 2029
Participantes:	Jesús Monterroza
Sitio de información:	Coordinación Posgrado Escuela de Ingeniería Química
Formas organizativas:	LICAP, GAOX

La presente versión del informe contiene las observaciones de los evaluadores:

Firma del investigador principal

VoBo. Vicedecano de Investigaciones