

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AGROINDUSTRIA

MODELADO Y SIMULACIÓN DE LA ABSORCIÓN DE ENERGÍA UV Y GAMMA EN UNA SOLUCIÓN DE AZUL DE METILENO

**PROYECTO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERA
QUÍMICA**

ANA CRISTINA CÁRDENAS BASTIDAS

DIRECTOR: ING. ROQUE ANTONIO SANTOS, PhD

Quito, septiembre 2022

© Escuela Politécnica Nacional (2022)
Reservados todos los derechos de reproducción

DECLARACIÓN

Yo Ana Cristina Cárdenas Bastidas, declaro que el trabajo aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.

La Escuela Politécnica Nacional puede hacer uso de los derechos correspondientes a este trabajo, según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normativa institucional vigente.

Ana Cristina Cárdenas Bastidas

CERTIFICACIÓN

Certifico que el presente trabajo fue desarrollado por Ana Cristina Cárdenas Bastidas bajo mi supervisión.

PhD. Roque Antonio Santos Torres

DIRECTOR DE PROYECTO

AUSPICIO

La presente investigación contó con el auspicio financiero del proyecto PIS-18-05 “Desarrollo de un sistema dosimétrico para absorción de energía UV en soluciones de azul de metileno para comparación con dosimetría de radiaciones ionizantes” que se ejecuta en el Departamento de Ciencias Nucleares de la Facultad de Ingeniería Química y Agroindustria.

AGRADECIMIENTOS

A mi madre, quién ha sido el pilar fundamental de mi vida, mi fuerza, mi motivación, mis ganas de seguir adelante en los momentos más difíciles. Me ha brindado su apoyo incondicional siempre, y ha sabido guiarme en cada paso que he dado durante todas las etapas de mi vida. Gracias por ser una mamá extraordinaria que me ha enseñado con su ejemplo a ser fuerte, valiente y luchadora.

A mis abuelitos, papi Jorge y mami Rosy, quienes han sido el más grande apoyo a lo largo de mi vida. Gracias por todo el amor, cuidado y abrigo que me han brindado. Dios me ha bendecido con abuelitos que han sido como padres para mí y que me han acompañado incondicionalmente durante todos estos años.

A mis tíos, tías, primos, primas y todos los miembros de mi familia con quienes siempre he podido contar y que me han brindado su amor y cariño inigualable. Especialmente, gracias, tío Marquito por acompañarme incondicionalmente durante toda mi vida académica y por estar ahí siempre que lo necesité, para proyectos, tareas, idas y venidas.

Muchas gracias a todos los ingenieros que fueron parte de mi educación en la EPN, por brindarme conocimientos y destrezas que podré aplicar en mi vida profesional. A mi tutor, Ing. Roque, gracias por compartir conmigo este Proyecto de Investigación tan interesante y desafiante.

A mis amigos, por aquellos con los que inicié, con los que cursé y con los que culminé esta etapa de mi vida; Dinamitas, Jefrys, Los Inges. Porque todos los buenos momentos, las risas y las anécdotas vividas hicieron más llevadera esta etapa académica. Cada proyecto, examen y trabajo fue más fácil con ustedes; y cada evento, celebración, fiesta y reunión fue también inolvidable gracias a ustedes. A mi Mike, por siempre sacarme una sonrisa en los momentos más estresantes. Y, especialmente Eduardo, sin tu apoyo incondicional, este trabajo se hubiese complicado muchísimo más, gracias por todas las noches en vela buscando respuestas, por siempre estar ahí y sobre todo por jamás dejar que me rinda.

DEDICATORIA

A mi madre, por todo lo que significas para mí, este trabajo y cada logro en mi vida te lo dedico a ti con todo mi amor y cariño.

A mis abuelitos, por su amor incondicional, por siempre darme fuerzas para seguir, este trabajo es para ustedes.

A Eduardo, porque sin tu apoyo, todo hubiese sido mucho más complicado, este trabajo también es tuyo.

Modelado y Simulación de la Absorción de Energía UV y Gamma en una Solución de Azul de Metileno

Resumen: La dosis UV se reporta como energía irradiada sobre área de exposición, esa definición implica que toda la energía impartida se absorbió. No obstante, un análisis más detallado demuestra que solo una parte es absorbida, y de esta, una fracción causa el efecto deseado y el resto se escapa del sistema. En el presente trabajo se desarrolló y simuló en Matlab un modelo matemático, a partir de la Ecuación RTE para dos geometrías. El objetivo fue validar el sistema dosimétrico UV obtenido experimentalmente para la degradación de azul de metileno en solución acuosa, y también comparar los efectos con radiación UV y gamma. En la superficie plana, la desviación de la intensidad UV absorbida simulada con la experimental fue de 10,18 %; mientras que en el fotorreactor fue de 69,18 %. La desviación entre dosis UV simuladas y experimentales fue de 7,02 %; estos resultados validaron el sistema dosimétrico experimental. En el fotorreactor tubular, con 50 Gy se alcanzó una degradación simulada de 38,45 % y experimental de 3,44 %. Esto se debe a que, en la simulación de la cinética de degradación se consideró únicamente la reacción de oxidación con los radicales hidroxilos, despreciándose las otras reacciones del mecanismo. Finalmente, al comparar los efectos sobre muestras equivalentes de azul de metileno irradiadas con radiación gamma y UV, se concluyó que se requiere analizar las condiciones óptimas de la experimentación para el azul de metileno o buscar otra molécula modelo que permita determinar una relación entre ambos tipos de radiación.

Palabras clave: Ecuación de Transferencia de la Radiación RTE, azul de metileno, dosimetría UV, radiación UV, radiación Gamma

Modeling and Simulation of UV and Gamma Energy Absorption in a Methylene Blue Solution

Abstract: Radiated energy on exposed area has been applied for report UV doses; this definition doesn't consider the absorbed amount of energy. A detailed analysis shows that a certain amount of energy is absorbed, and only a fraction is spent in the desired effect, while rest escapes from the system. The aim of this paper was the development of a mathematical model and simulated it on Matlab. This model was derived from RTE Equation. The objective was to validate experimentally dosimetric system for degradation of methylene blue solution by comparing simulated results. Moreover, both simulation and experimental results with UV radiation were compared with gamma radiation. On flat surface, deviation of simulated absorbed UV intensity from experimental one was 10.18 % While in UV photoreactor was 69.18 %. For simulated and experimental UV doses, deviation was 7.02 %. These results validated the dosimetric system obtained experimentally. From simulation of UV photoreactor, with 50 Gy, it was obtained a 38.45 % degradation of methylene blue solution. On the other hand, experimentally it was 3.44 %. Deviation with experimental values is because in simulation of methylene blue degradation kinetics, only oxidation reaction with hydroxyl radicals was considered. The other reactions of the mechanism were neglected. Finally, effects on equivalent irradiated samples of methylene blue with gamma and UV radiation was compared. It was concluded that optimal conditions of experimentation for methylene blue must be analyzed, or to define another model molecule that allows the determination of a relationship between gamma and ultraviolet radiation.

Keywords: Radiation Transfer Equation (RTE), methylene blue, UV dosimetry, UV radiation, Gamma radiation

1. INTRODUCCIÓN

En el tratamiento de efluentes, la fotocatalisis es una alternativa tecnológica comúnmente utilizada para la degradación de contaminantes.

La radiación UV (100 a 400 nm), provoca excitación a nivel molecular, que a su vez genera reacciones químicas que descomponen las moléculas de contaminantes (Giraldo, Pañuela y Mejía, 2014). Las moléculas orgánicas complejas y poco biodegradables se consideran de alto interés dentro de las posibles aplicaciones para degradación por radiación UV, debido a que requieren de tratamientos que produzcan su ruptura en moléculas más

simples como agua y dióxido de carbono. Por ejemplo, en los colorantes textiles, se ha estudiado su exposición a luz UV en procesos de fotorreacción a presión y temperatura ambiente, en diferentes arreglos de reactores (Rubiano, et al., 2005).

Se han desarrollado estudios de la aplicación de este tipo de radiación. En estos se reporta que se ha logrado degradar hasta 5,8 % de azul de metileno en 6 h de exposición en un sistema de reactor abierto con la lámpara UV directamente sobre la solución (Contreras, et al, 2009).

En cuanto al diseño de reactores empleados en tratamientos por radiación UV, la geometría de dos

cilindros concéntricos, con flujo continuo y lámpara UV en el medio, ha sido la más utilizada debido a que la homogeneidad y aireación que se logra en la solución del colorante permite una mejor eficiencia en el proceso (Li, et al., 2014).

Sin embargo, la radiación UV absorbida en soluciones acuosas coloreadas se reporta en términos de energía emitida sobre área de exposición, (Jm^{-2}) en el Sistema Internacional. El uso de estas unidades deja de lado los fenómenos de interacción con las moléculas del contaminante y no genera una noción precisa de cuanta energía se necesita entregar por unidad de masa para alcanzar un resultado esperado (Mills, 2009).

Para la fotocatalisis de aguas contaminadas se utiliza también radiaciones ionizantes, como por ejemplo rayos Gamma. Esta radiación presenta un alto potencial para su uso en tratamientos de remediación ambiental, ya que se puede considerar una tecnología limpia. Mediante radiación gamma, se generan especies oxidativas en el contaminante que son altamente reactivas. Estas especies interactúan con los compuestos orgánicos y producen dióxido de carbono y agua (Moreno y García, 2014). Se han desarrollado estudios de la aplicación de este tipo de radiación ionizante como un método de remediación de agua residual en los que se señala que al aplicar una dosis de 17,4 Gy es posible reducir hasta el 70 % de Demanda Química de Oxígeno (DQO) en un efluente (Huang y Chen, 2020; López, 2010). En cuanto a colorantes, Zheng et al. (2011) señala que obtuvo un 5 % de degradación de una solución de azul de metileno, de concentración inicial de 20 ppm, expuesta a 50 Gy de radiación Gamma.

Por otro lado, la dosis es la energía absorbida por unidad de masa. Esta magnitud varía en función de la naturaleza de la radiación y de las características del material. Mientras que, la dosimetría permite la medición de la energía absorbida por un material como consecuencia de su exposición a la radiación. (Estévez, 2018). Si bien la energía UV y Gamma se diferencian por su capacidad de ionizar o no los átomos, la naturaleza electromagnética de ambas radiaciones permite medir la dosis absorbida de forma similar. Sin embargo, en estudios realizados hasta el momento, la dosis de radiación UV se reporta en unidades de fluencia (Jm^{-2}), mientras que la radiación gamma se mide en grays (Jkg^{-1}), Sistema Internacional. Únicamente con las unidades de Gray se puede evaluar el efecto que la absorción de energía provoca en la materia, en un kilogramo de sustancia (Kozicki, et al., 2017; Oppenländer, 2003). Por este motivo, una comparación directa con los resultados obtenidos por radiación UV para el mismo fin no es posible, debido a que ambas tecnologías de tratamiento presentan sistemas de unidades diferentes.

Adicionalmente, la absorción de energía provoca interacciones físicas y químicas en la materia. Por un lado, aumenta la energía cinética de las partículas y provoca un fenómeno físico de incremento de temperatura. Mientras que, a su vez genera un fenómeno químico de cambio de concentración (Rivera, 2011). Si bien el cambio de concentración y el incremento de la temperatura son

fenómenos independientes, se dan de manera simultánea, por lo que deben ser estudiados de manera conjunta cuando se analiza la absorción de radiación no ionizante en un medio (Serrano, 2013).

Para el caso de interacciones de fotones de baja energía con la materia, se han desarrollado simulaciones en códigos de dinámica de fluidos computacional (CFD). Dichas simulaciones parten de modelos simplificados de la ecuación de transferencia de radiación (RTE por sus siglas en inglés), como la Ley de Lambert y Beer o el modelo de ordenadas discretas no grises (DO) integrada en un intervalo de longitud de onda específico (Keshavarzfathy y Taghipour, 2019; Siamak y Fariborz, 2010). Los CFD se utilizan en el desarrollo de fotorreactores de radiaciones no ionizantes, como la luz UV, debido a que proporciona resultados importantes acerca del comportamiento del fluido sin dejar de lado la absorción o emisión de fotones.

Sin embargo, de la revisión bibliográfica, únicamente se encontraron estudios de simulación de radiación UV para el tratamiento de aguas contaminadas con microorganismos patógenos (Ruiz, 2002) y no en otro tipo de contaminantes como los colorantes textiles, que también se pueden tratar eficientemente con este tipo de radiación. Por ejemplo, Darby, et al., (2005) partieron de un trabajo experimental para generar un modelo matemático que describa la tasa de inactivación de un microorganismo utilizando radiación UV. En este caso, no se consideró la hidrodinámica del fluido en el reactor. Por otro lado, Blatchley, et al., (2006) también realizaron un estudio en aguas contaminadas con microorganismos, pero este caso si consideraron en su modelo la hidrodinámica del fotorreactor UV, ya que la velocidad se midió por velocimetría láser Doppler.

En un trabajo previo, enmarcado en el mismo proyecto de investigación que cubre el presente estudio y que no ha sido aún publicado, se desarrolló una estimación entre la energía impartida por una lámpara UV y la dosis, media en Gy absorbida por azul de metileno en solución (Cabascango, 2021).

Dicho trabajo requirió la exposición de soluciones de azul de metileno en diferentes concentraciones a las mismas condiciones de dosis para radiación UV y para radiación gamma. Se realizaron cálculos teóricos con el fin de obtener el rendimiento químico de radiación UV. Para este fin, se obtuvieron dosis teóricas calculadas a partir de la medida de intensidad de fotones UV antes y después de todas las interacciones en el reactor construido. Se graficaron dichas dosis teóricas versus absorbancia como indica la norma ISO/ASTM (2009), Estándar Practice for Use of a Ceric-Cerous Sulfate Dosimetry System y se obtuvo la pendiente que representa el factor de rendimiento químico. Las dosis teóricas calculadas en este trabajo requieren validación, tanto por simulación de la radiación absorbida, como por la comparación con datos experimentales.

El presente trabajo tuvo como objetivo validar los cálculos realizados en la investigación experimental de Cabascango (2021), para determinar la dosis de radiación UV absorbida por una solución de azul de metileno; la comprobación se realizó a través de la simulación de intensidad de fotones UV absorbida en dos diferentes geometrías. Adicionalmente, los resultados validados se compararon con los resultados de soluciones similares expuestas a radiación gamma para confirmar su equivalencia.

2. METODOLOGÍA

2.1. Ecuación de Transferencia de la Radiación (RTE)

Para construir el modelo matemático que describe el comportamiento de la intensidad de fotones UV absorbida por la solución de azul de metileno, se partió de la ecuación general de transferencia de radiación (RTE por sus siglas en inglés) que se muestra en la Ec. [1].

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \vec{\nabla} I = -W^a + W^e + W^{s-in} - W^{s-out} \quad [1]$$

Dónde I es la intensidad de fotones UV de radiación; c es la velocidad de la luz; W^a es el flujo de fotones absorbidos debido a la exposición a la luz UV; W^e es el flujo de fotones emitidos, W^{s-in} flujo de fotones dispersos de entrada, W^{s-out} flujo de fotones dispersos de salida.

En la Ec. [2] se presenta con más detalle cada término de la Ec. [1]

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \vec{\nabla} I_{(x,s)} = -\alpha \times I_{(x,s)} + \alpha \times I_b(T) + \sigma_s \times \int \varphi_{(s,s')} \times I_{(x,s)} \times d\Omega_{(s)} - \sigma_s \times I_{(x,s)} \quad [2]$$

Dónde $\vec{\nabla} I_{(x,s)}$ es el gradiente de Intensidad de fotones UV; α es el coeficiente de absorción molar; σ_s es el coeficiente de dispersión; $I_b(T)$ es la Intensidad de fotones UV asociada con la temperatura.

2.2. Balance de Energía para la obtención el perfil de Temperatura en el Sistema

Como se indicó en la introducción del presente documento, el cambio de concentración y el incremento de la temperatura en un sistema expuesto a radiación UV se dan de manera simultánea, por lo que deben ser estudiados de manera conjunta cuando se analiza la radiación no ionizante (Serrano, 2013). Bajo esta premisa, se realizó un balance de energía en ambos sistemas geométricos: caja Petri y fotorreactor tubular UV, considerando las condiciones bajo las cuales se dio la experimentación en el trabajo de Cabascango (2021).

Se partió de la Ecuación General de Balance de Energía que se muestra en la Ec. [3].

$$\frac{dE}{dt} = E_{in} - E_{out} + \dot{E} - E_c \quad [3]$$

Dónde E_{in} es el flujo de energía que entra; E_{out} es el flujo de energía que sale; \dot{E} es la energía que se genera; E_c es la

energía que se consume y $\frac{dE}{dt}$ es la energía que se acumula. En los sistemas estudiados no existió generación ni consumo de energía por lo que se desprecian dichos términos, obteniéndose la Ec. [4]

$$\frac{dE}{dt} = E_{in} - E_{out} \quad [4]$$

a) Caja Petri

La caja Petri se consideró una geometría de superficie plana donde:

$\frac{dE}{dt}$ = Cantidad de energía que se emplea para incrementar la temperatura del sistema (vidrio de borosilicato-solución de azul de metileno).

E_{in} = Flujo de entrada de energía que corresponde al calor absorbido que aportan los rayos UV al sistema.

E_{out} = Flujo de salida de energía que corresponde al calor que se pierde a los alrededores por convección.

b) Fotorreactor

El fotorreactor tubular fue de una geometría de tubos concéntricos donde:

E_{in} = Flujo de entrada de energía que corresponde al calor absorbido que aportan los rayos UV al sistema. Sin embargo, en este caso también existe un aporte de energía por parte de la bomba centrífuga que permite el flujo de la solución de azul de metileno a través del reactor (E_{bomba}).

E_{out} = Flujo de salida de energía que corresponde al calor que se pierde a los alrededores por convección.

$\frac{dE}{dt}$ = Cantidad de energía que se emplea para incrementar la temperatura del sistema (vidrio de borosilicato-solución de azul de metileno).

Finalmente, con el fin de diferenciar la cantidad de energía UV absorbida que calentó la solución, de la cantidad de energía UV que la degradó, se probaron distintos escenarios. En cada escenario se representaba un porcentaje de intensidad de fotones, desde 0 % hasta 90 %, en pasos de 20 %, de la energía UV invertida en el calentamiento, y el complemento correspondía a la energía empleada en la degradación. En la simulación de la Ec. [2] se consideró los diferentes porcentajes planteados con el fin de encontrar el caso que más se acercó al comportamiento del sistema en el trabajo experimental realizado por Cabascango (2021).

2.3. Dosis de energía UV

Se determinaron las dosis de energía UV, en Grays (Jkg^{-1}), que se aplicaron al sistema de fotorreacción; se utilizó la Ec. [5], que relaciona la dosis con la intensidad de fotones UV absorbida.

$$D = I_{\text{abs}} \frac{t \times A_r}{m} \quad [5]$$

Dónde I_{abs} es intensidad de fotones UV absorbida simulada (J/mol); D es dosis (J/kg); t es tiempo de exposición (s); A_r es área de exposición (m^2); m es masa irradiada (kg).

La intensidad de fotones UV absorbida que se obtuvo a partir de modelo matemático simplificado de la Ec. [2], se utilizó para el cálculo de las dosis de radiación UV. La intensidad de fotones UV absorbida y las dosis calculadas por simulación se compararon con los valores obtenidos experimentalmente en el trabajo de Cabascango (2021) enmarcado en la misma investigación. Se calculó la desviación entre ambos valores por medio de la ecuación de error porcentual presentada en la Ec. FTI.1 de la Ficha Técnica I.

Como se observa en la Ec. [5], para el cálculo de la dosis se requiere conocer el área de exposición de las muestras expuestas a irradiación UV. Para el cálculo del área se utilizaron las dimensiones de la caja Petri y del fotorreactor UV utilizados en el trabajo de investigación de carácter experimental. Por otro lado, los tiempos de exposición de las muestras fueron: 2,50 h para la caja Petri y 7,25 h para el fotorreactor (Cabascango, 2021).

2.4. Cambio de concentración de la solución de Azul de Metileno

Se simuló el cambio de concentración de la solución de azul de metileno en el tiempo con el fin de comparar el perfil de concentración experimental con la cinética de degradación por fotólisis presentada en estudios bibliográficos para el mismo colorante.

En la Figura FTI.1 de la Ficha Técnica I, se muestra la configuración del fotorreactor UV utilizado en la experimentación. En el proceso experimental desarrollado por Cabascango (2021), se trató al reactor y al reservorio como un solo sistema en donde la alimentación no fue fresca, sino que provenía del reservorio. Por este motivo, la cantidad de solución de azul de metileno que ingresó al sistema permaneció un periodo de tiempo determinado, hasta alcanzar una concentración deseada (Levenspiel, 2004).

Debido a este comportamiento, en la simulación se llegó a la consideración de que el sistema experimental se comportó como un reactor discontinuo. Para la simulación del perfil de concentración de la solución de azul de metileno en el tiempo, se utilizó la Ec. [6] que proviene del balance de moles en un reactor discontinuo con volumen constante.

$$r_{\text{AM}} = - \frac{dC_{\text{AM}}}{dt} \quad [6]$$

Donde r_{AM} corresponde a la velocidad de reacción y C_{AM} corresponde a la concentración de la solución de azul de metileno en el tiempo.

En estudios de degradación de azul de metileno en soluciones acuosas por medio de fotocatalisis, Kuo y Ho (2001) y Peter, et al., (2017) señalan que, generalmente los procesos de oxidación fotocatalítica siguen una cinética de pseudo primer orden. Donde, si la concentración inicial de contaminante es baja, la expresión que describe la cinética se puede simplificar en la Ec. [7].

$$\frac{dC_{\text{AM}}}{dt} = -kC_{\text{AM}} \quad [7]$$

Donde k (s^{-1}) corresponde a la constante cinética de reacción de primer orden. Para el presente estudio se utilizó una constante cinética bibliográfica, obtenida de un estudio de degradación de azul de metileno en solución acuosa por medio de fotólisis. Kuo y Ho (2001) reportaron una constante cinética de reacción de $6.3 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ para la degradación fotocatalítica por radiación UV de azul de metileno en solución, a un pH de 7.

En la Tabla FTI.1 de la Ficha Técnica I, se presentan las concentraciones iniciales de las soluciones de azul de metileno en la caja Petri y Fotorreactor UV, además del peso molecular del azul de metileno obtenido de bibliografía.

2.5. Método Numérico de Euler

El modelo matemático que describe el comportamiento de la intensidad de fotones UV y que se obtuvo a partir de la Ec. [2], se resolvió por simulación a través del Software Matlab. Se implementó un código para evaluar la cantidad de fotones que son absorbidos en el medio y de esta manera determinar la cantidad de energía absorbida por la solución de azul de metileno.

Para resolver el modelo matemático se empleó el Método Numérico de Euler Explícito. Este método numérico considera el problema del valor inicial $y = f(x, y); y(x_0) = y_0$; y además es aplicable cuando existe una única solución en un intervalo determinado. Al cumplir estas consideraciones, es posible encontrar una solución aproximada a la solución analítica de una EDO (Chaidez, 2012).

En el caso de estudio del presente trabajo, la ecuación diferencial ordinaria fue la obtenida del modelo simplificado de la RTE (Ecuación de Transferencia de la Radiación) de la Ec. [2]. Mientras que el valor inicial correspondió a la Intensidad de fotones UV que ingresó a los sistemas estudiados, caja Petri y Fotorreactor UV, que fueron medidos experimentalmente con un radiómetro UV, marca NEWSWAN, modelo LS125 en el trabajo de investigación previo (Cabascango, 2021), y que se muestra en la Tabla FTI.1 de la Ficha Técnica I. Finalmente, se discretizó la ecuación diferencial ordinaria para aplicar el

Método de Euler en la simulación. El mismo método se implementó para simular el perfil de concentración de la solución de azul de metileno.

2.6. Análisis de datos de muestras de azul de metileno tratadas con Radiación Gamma

Se analizaron los datos obtenidos de degradación en soluciones de azul de metileno expuestas a diferentes dosis de radiación UV y gamma. Las irradiaciones de las muestras con fotones gamma se realizaron en el irradiador gamma Cell semi-automático Shepherd modelo 109, de la Subsecretaría de Control y Aplicaciones Nucleares (SCAN).

Se prepararon muestras de la solución de azul de metileno de concentración inicial de 12,57 ppm para cada dosis analizada. Por la naturaleza del azul de metileno, se prepararon las soluciones para irradiación de forma diaria, para cada requerimiento.

Las soluciones de azul de metileno se irradiaron a las siguientes dosis: 0 Gy, 94 Gy, 212 Gy, 332 Gy, 452 Gy y 572 Gy. Estos valores se seleccionaron para realizar una comparación directa con las dosis UV de la caja Petri obtenidas en el trabajo experimental previo. El tiempo de irradiación de cada muestra se calculó considerándose que la tasa de dosis del equipo utilizado fue de 121,215 Gy h⁻¹.

Una vez irradiadas las muestras de la solución de azul de metileno, se procedió con las lecturas de estas en un espectrofotómetro UV Vis, Thermo Scientific, Evolution 60s. Se midieron las absorbancias de los seis tubos de muestras irradiados; a una longitud de onda de 664 nm. Este proceso se lo realizó el mismo día de la irradiación de las muestras para evitar la degradación de las soluciones. Se trabajó en oscuridad y se usaron celdas de cuarzo de 3 mL para las lecturas. Se tomaron los datos referentes a la curva de calibración del azul de metileno del proyecto de investigación previo de Cabascango (2021).

3. RESULTADOS

3.1. Ecuación de Transferencia de la Radiación (RTE)

En primer lugar, se determinó la intensidad de fotones UV absorbida por los dos sistemas geométricos estudiados. A la Ec. [2], que corresponde a la ecuación de Transferencia de la Radiación (RTE), se le aplicaron las simplificaciones establecidas en la metodología obteniéndose la Ec. [8].

$$\frac{dI_x}{dx} = -\alpha \times I_x \quad [8]$$

La Ec. [8] permitió simular el perfil del paso de los fotones de energía UV a través del sistema. Se determinó la intensidad UV absorbida en cada sección del sistema: la tapa superior e inferior de la caja Petri y la solución de azul de metileno. Para este fin, se restó la intensidad UV que atravesó cada sección, de la energía UV que ingresó

como se detalla en la Ec. FTII.1 de la Ficha Técnica II.

De este modo se aplicó la Ec. [8] para simular tanto el perfil de intensidad UV en la solución de azul de metileno como en el vidrio de borosilicato, que corresponde al material de la caja Petri y el fotorreactor. Únicamente se consideraron los coeficientes de extinción molar propios de cada material.

Los coeficientes de absortividad y extinción molar para el vidrio de borosilicato y la solución de azul de metileno se obtuvieron bibliográficamente de trabajos de investigación similares para el mismo colorante, y se presentan en la Tabla FII.1 de la Ficha Técnica II.

a) Caja Petri

En la Figura 1 se puede evidenciar el comportamiento de la energía UV absorbida por el sistema. La primera parte de la curva, hasta aproximadamente 0,002 m, presenta la intensidad absorbida del vidrio de borosilicato de la tapa superior de la caja Petri; y a partir de 0,016 m, se muestra la absorción de la tapa inferior de la caja Petri. Entre estas dos secciones se muestra la energía UV absorbida netamente por la solución de azul de metileno. En este perfil se observa como el coeficiente de extinción molar del borosilicato, que es mayor al del azul de metileno, le permitió absorber mayor cantidad energía en una longitud menor.

Por otro lado, en el trabajo experimental se reportó que la intensidad de fotones UV absorbida exclusivamente para la degradación de la solución de azul de metileno en la caja Petri fue de 0,8520 Jm⁻²s⁻¹ (Cabascango, 2021). Mientras que, de la simulación de la Ec. [8], se calculó una intensidad de fotones UV absorbida de 0,9387 Jm⁻²s⁻¹.

La desviación porcentual entre la intensidad de fotones UV absorbida experimental y simulada fue de 10,18 %. La desviación, al igual que para todos los resultados fue calculada con la Ec. FTI.1 de la Ficha Técnica I. Se puede inferir que la mayoría de las simplificaciones consideradas permitieron que el modelo matemático se acerque a las condiciones de la experimentación.

A partir de la Ec. [8] se construyó la Figura 1, que muestra el cambio de la intensidad UV en función de la posición, es decir en el espesor de la caja Petri.

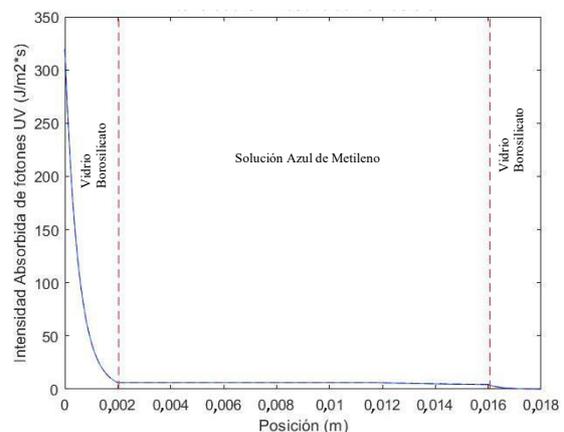


Figura 1. Intensidad Absorbida de fotones UV en función de la posición para caja Petri

a) Fotorreactor

En la Figura 2 se puede observar un comportamiento de energía UV absorbida similar al de la caja Petri. En este caso también se evidencia una mayor absorción de intensidad UV en el vidrio de borosilicato ya que el fotorreactor se construyó en el mismo material y espesor de la caja Petri. Además, se determinó que parte de la energía UV absorbida se pierde en el vidrio de borosilicato debido a que no es el material idóneo para la construcción de un fotorreactor UV; una opción mejor sería el cuarzo cuya transmitancia es mucho mayor.

Para el fotorreactor, en el trabajo experimental previo, se reportó que la intensidad experimental de fotones UV absorbida exclusivamente para la degradación de la solución de azul de metileno fue de $0,0172 \text{ Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$ (Cabascango, 2021). Mientras que, de la simulación de la Ec. [8], se obtuvo que la intensidad de fotones UV absorbida fue $0,029 \text{ Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$. La desviación porcentual con los datos experimentales fue de 69,18 %. La desviación con los datos experimentales, tanto para la caja Petri como en el fotorreactor UV, puede asociarse a que el coeficiente de extinción molar de la solución de azul de metileno varía en función, tanto de la longitud de onda, como de la temperatura (Turner, 2007). Sin embargo, para el modelo matemático desarrollado en el presente trabajo se tomó como único criterio de selección a la longitud de onda.

Entonces, el coeficiente de extinción molar de la solución de azul de metileno se consideró como una constante a 304 nm, ya que en las simplificaciones se planteó que la solución era homogénea, y por ende, no variaba con la temperatura. No obstante, si se produjo un cambio de temperatura en el sistema, por lo que se debería incluir en trabajos futuros una relación del coeficiente de extinción molar en función de la temperatura para lograr mejores resultados.

Al igual que en la caja Petri, a partir de la Ec. [8] se construyó la Figura 2, que expone el cambio de la intensidad en función de la posición, es decir en la sección anular del reactor.

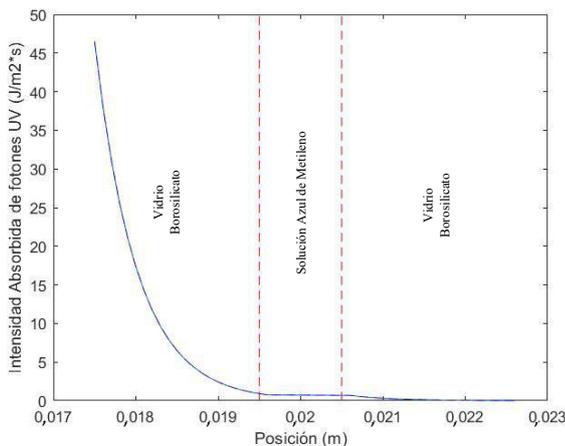


Figura 2. Intensidad Absorbida de fotones UV en función de la posición para fotorreactor tubular

3.2. Balance de Energía en el Sistema

Como se mencionó anteriormente, el cambio de concentración y el incremento de temperatura en la solución de azul de metileno sometida a radiación UV, son fenómenos paralelos. Por este motivo, se evaluó escenarios en los que la energía UV absorbida por el sistema se distribuyó en diferentes porcentajes para calentamiento y degradación del colorante.

Para encontrar el escenario simulado que más se asemejó al perfil de temperatura experimental presentado del trabajo de investigación desarrollado por Cabascango (2021), se probaron diferentes casos en los que se varió el porcentaje de energía UV utilizado para calentar la solución. Por ejemplo, en el primer escenario se estableció que el 10 % la intensidad UV se consumió en calentar el sistema y el 90 % restante en degradar la solución de azul de metileno. De esta misma manera se plantearon los 5 casos restantes de 30, 50, 70 y 90 % de energía UV para el calentamiento. Por otro lado, para obtener el perfil de temperatura en la caja Petri y en el fotorreactor UV, se partió de la Ec. [4] y de las consideraciones mencionadas en la metodología, obteniéndose las ecuaciones que describen el comportamiento de la temperatura en el tiempo.

En la Tabla FTIII.1 de la Ficha Técnica III se presentan los datos de densidades y capacidades calóricas empleados en la simulación para la solución de azul de metileno y el vidrio de borosilicato. Además, las temperaturas iniciales medidas experimentalmente para la caja Petri y el fotorreactor UV (Cabascango, 2021), y el coeficiente promedio de convección natural.

a) Caja Petri

De la Ec. [4]:

$$\frac{dE}{dt} = E_{in} - E_{out}$$

$$E_{in} - E_{out} = \left(\frac{dE}{dt}\right)_{VB} + \left(\frac{dE}{dt}\right)_s \quad [9]$$

Donde E_{in} es el flujo de energía que entra; E_{out} es el flujo de energía que sale; $\left(\frac{dE}{dt}\right)_{VB}$ es la acumulación de energía en el vidrio de borosilicato y $\left(\frac{dE}{dt}\right)_s$ es la acumulación de energía en la solución de azul de metileno.

El flujo de energía de entrada E_{in} corresponde a la intensidad aportada por la lámpara UV que se absorbe como calor en la solución, y se expresa en la Ec. [10].

$$E_{in} = Q_{RadUV} = I_{C\ abs} \times A \quad [10]$$

Donde Q_{RadUV} es el calor absorbido por la solución debido a la radiación UV; $I_{C\ abs}$ es la intensidad UV que se consume como calor y A es el área de exposición.

En las Tabla FTIII.2 y FTIII.3 de la Ficha Técnica III se detallan las dimensiones de la caja Petri y del fotorreactor UV utilizados en el trabajo de investigación de carácter experimental.

El flujo de salida E_{out} corresponde al calor de pérdidas por convección del sistema con los alrededores expresado en la Ec. [11].

$$E_{out} = Q_{Conv} = h \times A \times (T_{\infty} - T_{sistema}) \quad [11]$$

Donde Q_{conv} es el calor de pérdidas por convección con los alrededores (J/s); h es el coeficiente de transferencia de calor por convección (W/m^2); A es el área de exposición (m^2); T_{∞} es temperatura del medio y T_s es la temperatura del sistema (K).

La acumulación de energía en el vidrio de borosilicato y en la solución de azul metileno corresponde a la variación de entalpía de cada sistema, que relaciona la masa, capacidad calorífica y diferencial de temperatura como se muestra en la Ec. [12] y [13].

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_{VB} = m_{VB} \times cp_{VB} \times \frac{dT_{VB}}{dt} \quad [12]$$

$$\left(\frac{dE}{dt}\right)_s = m_s \times cp_s \times \frac{dT_s}{dt} \quad [13]$$

Donde m_{VB} es la masa del vidrio de borosilicato (kg); m_s es la masa de la solución de azul de metileno (kg); cp_{VB} es la capacidad calorífica del vidrio de borosilicato ($J/kg K$); cp_s es la capacidad calorífica de la solución de azul de metileno ($J/kg K$); $\frac{dT_{VB}}{dt}$ es la razón de cambio de temperatura de vidrio de borosilicato en el tiempo y $\frac{dT_s}{dt}$ es la razón de cambio de temperatura de la solución de azul de metileno en el tiempo.

Para el balance de energía, se asumió que la temperatura es la misma en todo el volumen la tapa superior de la caja Petri. Mientras que la tapa inferior, está a una temperatura diferente, en todo su volumen como se explica en la Ficha Técnica III. Esta suposición se realizó considerándose que el perfil de temperatura en el espesor de pared de la caja Petri (0,002 m) es despreciable al compararse con el gradiente de todo el sistema.

De este modo, el gradiente de temperatura del sistema se puede expresar como se muestra en la Ec. [14].

$$\frac{dT_{VB}}{dt} = \frac{dT_s}{dt} = \frac{dT}{dt} \quad [14]$$

Es decir, se supuso que la de temperatura es igual en el sistema vidrio-solución.

Al reemplazar las Ec. [10], [11], [12], [13] y [14] en la Ec. [9], se obtuvo la Ec. [15] que describe el perfil de temperatura en función del tiempo para la caja Petri.

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_{RadUV} - Q_{conv}}{m_{VB} \times cp_{VB} + m_s \times cp_s} \quad [15]$$

Dónde $\frac{dT}{dt}$ es el perfil de temperatura para todo el sistema.

En la Figura 3 se presenta el perfil de temperatura en función del tiempo para la caja Petri. Como se puede observar, se simularon los diferentes escenarios en los que se planteó que el porcentaje de energía UV utilizado para calentar la solución fue de 0 %, 10 %, 30 %, 50 %, 70 % y 90 %.

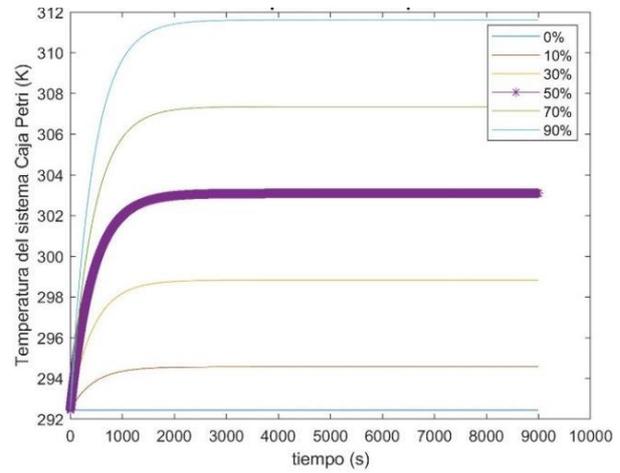


Figura 3. Perfil de Temperatura en función del tiempo para la solución de azul de metileno expuesta a radiación UV en caja Petri

En el trabajo experimental realizado por Cabascango (2021), se indica que, durante la experimentación en la caja Petri, la temperatura incrementó desde 292,43 K hasta 302,54 K. Como se puede observar en la Figura 3, la curva simulada que más se asemejó a la obtenida en la experimentación fue en la que un 50 % de radiación UV se utilizó para calentar la solución de azul de metileno; en esta se alcanzó 303,10 K al final de la irradiación UV (150 min). Por otro lado, la variación de temperatura obtenida en la experimentación fue de 10,11 K; mientras que en la simulación fue de 8,66 K. La desviación porcentual entre la variación de temperatura simulada con la experimental fue de 14,34 %.

3.3. Análisis de escenarios simulados

Al analizar los diferentes escenarios simulados, se determinó que el caso que permitió obtener un perfil de temperatura similar al de la experimentación fue el que consideró que un 50 % de la radiación UV se consumió en el calentamiento del sistema, y el otro 50 % provocó la degradación del colorante. Sin embargo, en el trabajo de investigación experimental se reporta que, el porcentaje de energía UV absorbida para degradar la solución fue de apenas 1,21 %, y el 98,89 % restante se utilizó para calentar la solución.

Esta diferencia entre los valores simulados y experimentales se asocia a que, en el balance de energía planteado para la simulación, se considera que una parte de energía UV absorbida para el calentamiento del sistema también se consume en el calentamiento del vidrio y en pérdidas por convección con el medio. Mientras que, en el trabajo experimental realizado por Cabascango (2021) se mide solo el incremento de temperatura de la solución. Esto que conlleva a que el valor de energía UV empleada para calentamiento que se reporta en el trabajo experimental, sea diferente al de simulación, ya que no se consideran todos los fenómenos de transferencia de calor contemplados en el balance de energía.

Además, al considerar los fenómenos de transferencia de calor por convección con los alrededores, se corroboró lo mencionado por Cabascango (2021), ya que, a pesar de llegar al equilibrio térmico, no existió un cambio en la

tendencia en la degradación de la solución de azul de metileno. Esto se debe a que, durante todo el proceso, la energía UV absorbida se consumió en degradación y calentamiento; sin embargo, al llegar al equilibrio térmico, dicha energía ya no se empleó en incrementar la temperatura de la solución, sino en mantener este equilibrio con los alrededores.

b) Fotorreactor

En el caso del fotorreactor UV, como parte del flujo de calor que entra, se considera también la energía que aporta la bomba centrífuga que hace circular a la solución a través del reactor.

$$E_{in} = Q_{RadUV} + Q_B \quad [16]$$

Donde,

$$Q_{RadUV} = I_{C\ abs} \times A \quad [17]$$

Por otro lado, el calor de la bomba (Q_B) corresponde al calor de pérdidas que se produce debido a que no todo el trabajo mecánico de la bomba se transforma en trabajo hidráulico, como se muestra en la Ec. [18].

$$Q_B = W_M - W_H \quad [18]$$

Donde W_M es trabajo mecánico (W) y W_H es trabajo hidráulico (W).

La eficiencia de la bomba (n) se define en la Ec. [19]

$$n = \frac{W_H}{W_M} \quad [19]$$

Despejándose W_H en la Ec. [19] y reemplazando en la Ec. [18] se obtiene el calor de pérdidas de la bomba por medio de la Ec. [20].

$$Q_B = W_M - (n \times W_M) \quad [20]$$

En el trabajo experimental previo enmarcado en el mismo proyecto de investigación, se utilizó una bomba centrífuga de 0,02 HP de potencia que corresponde al trabajo mecánico ($W_M = P$) y 80 % de eficiencia (n) (Cabascango, 2021).

Al igual que en la caja Petri, se asumió que la temperatura es la misma en todo el volumen de las tapas de la caja Petri; y en este caso, se incluyó además el calor aportado por la bomba en el flujo de energía de entrada. Con estas consideraciones, la ecuación que describe el perfil de temperatura en función del tiempo para el fotorreactor UV se muestra en la Ec. [21].

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_{RadUV} + Q_B - Q_{Conv}}{m_{VB} \times cp_{VB} + m_s \times cp_s} \quad [21]$$

En el fotorreactor también se consideró el escenario en que un 50 % de radiación UV se utilizó para calentar la solución de azul de metileno. En la Figura 4 se muestra el perfil de temperatura simulado y experimental.

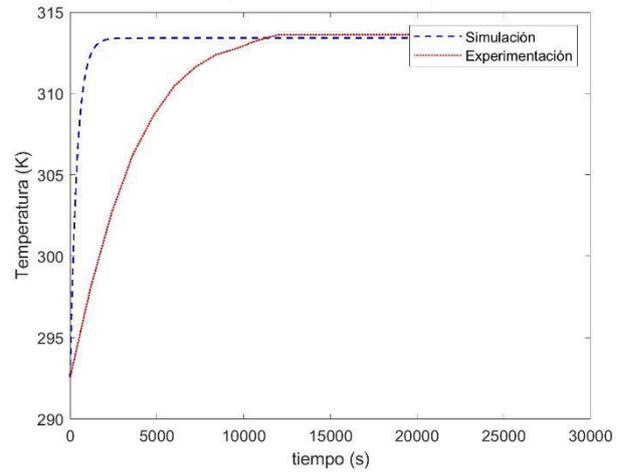


Figura 4. Perfil de Temperatura en función del tiempo para la solución de azul de metileno expuesta a radiación UV en Fotorreactor Anular

Como se puede observar en la Figura 4, los perfiles de temperatura simulado y experimental se estabilizan aproximadamente a 313 K. Sin embargo, la diferencia entre ambos perfiles es que, en la experimentación, la temperatura alcanza el equilibrio a las 3 h aproximadamente (Cabascango, 2021), mientras que, en la simulación, el equilibrio se alcanza a los 25 min. Esto se explica debido a que, para el balance de energía implementado en la simulación, fue necesario utilizar el coeficiente de convección natural, densidades y capacidades calóricas bibliográficas que más se acercaron a las condiciones experimentales. No obstante, el emplear datos bibliográficos deja abierta la posibilidad de que las magnitudes de calor por convección y de bomba obtenidas de la simulación sean lejanas a los fenómenos de transferencia de calor reales, lo que ocasiona que el equilibrio térmico experimental y simulado se haya alcanzado a diferentes tiempos.

Por otro lado, en la Figura 4 se muestra que el perfil de temperatura simulado alcanzó los 313,81 K al final de la irradiación UV en el fotorreactor (7,25 h); mientras que, durante la experimentación, la temperatura alcanzó los 313,62 K (Cabascango, 2021). La variación de temperatura obtenida en la experimentación fue de 21,04 K, mientras que en la simulación fue de 21,22 K. La desviación porcentual con los datos experimentales fue de 0,85 %, lo que permite concluir que en su mayoría las consideraciones del balance de energía planteado fueron acertadas.

3.4. Dosis de energía UV

Se determinó el perfil de dosis simulada en el tiempo a partir de la Ec. [5]. Para el cálculo, se partió de la intensidad UV absorbida para degradar la solución de azul de metileno, obtenida de la simulación. Esto con el fin de obtener las dosis UV en Gy (Jkg^{-1}), requeridas para un determinado cambio de concentración.

a) Caja Petri

En la Figura 5 se muestra el perfil simulado y experimental de dosis de radiación UV en función del tiempo para la caja Petri.

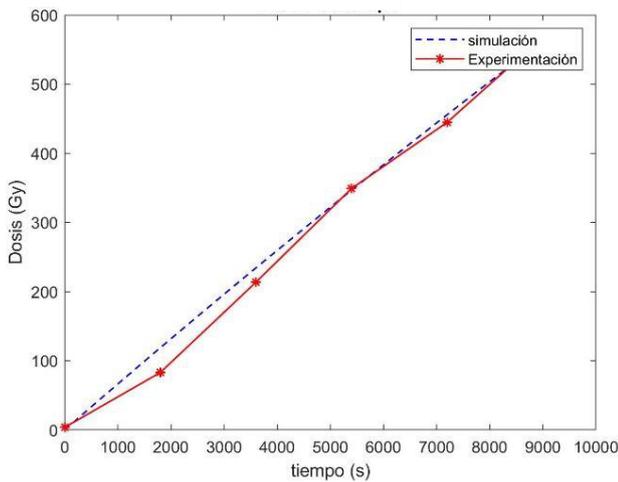


Figura 5. Perfil de dosis simulada y experimental en función del tiempo para la solución de azul de metileno expuesta a radiación UV en caja Petri

En la Figura 5 se observa que la curva de Dosis UV simulada es muy similar a la curva experimental para la caja Petri.

En la Tabla FTIV.1 de la Ficha Técnica IV se muestra la desviación porcentual de las dosis UV simuladas con las experimentales. La desviación fue de apenas 0,33 % a 7,02 %, por lo que se validó el procedimiento de cálculo de dosis realizado en el trabajo previo enmarcado en el mismo proyecto de investigación.

En dicho trabajo, Cabascango (2021) utilizó la metodología de norma ISO/ASTM (2009), Standard Practice for Use of a Ceric-Cerous Sulfate Dosimetry System para calcular el factor de rendimiento químico requerido para determinar las dosis de energía UV. En esta norma se establece que la pendiente de la gráfica de dosis versus absorbancia corresponde al factor de rendimiento químico, por lo que en el trabajo experimental se determinaron dosis a partir de la Ec. [5] y de las intensidades de fotones UV medidas experimentalmente con el radiómetro UV, marca NEWSWAN, modelo LS125. Se usó este método para la obtención del factor de rendimiento químico debido a que no existen datos bibliográficos de este parámetro para fotones de baja energía como la energía UV. Una vez que se calculó el valor de rendimiento químico para radiación UV, se determinó las dosis con la metodología del Dosímetro de Fricke de acuerdo con la norma ISO/ASTM (2015), Standard Practice for Using the Fricke Dosimetry System aplicándola para radiaciones no ionizantes.

b) Fotorreactor

Al igual que en la caja Petri, para el fotorreactor se utilizó la Ec. [5] y se partió de las intensidades UV absorbidas de simulación, con el fin de determinar el perfil simulado de dosis UV en el tiempo, como se muestra en la Figura 6.

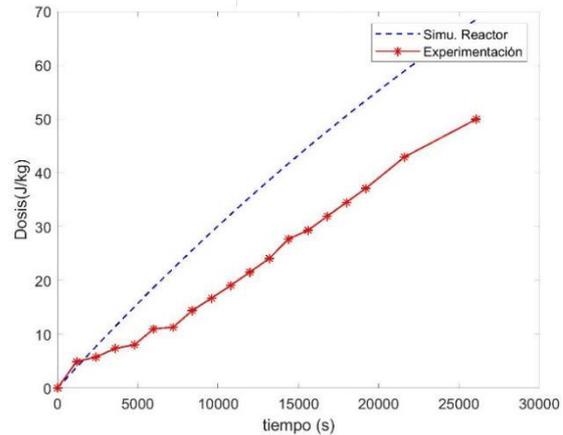


Figura 6. Perfil de dosis simulada y experimental en función del tiempo para la solución de azul de metileno expuesta a radiación UV en Fotorreactor

De la Figura 6 se determinó que la curva de Dosis UV simulada presentó la misma tendencia que la curva experimental, sin embargo, a partir de aproximadamente 27 min, las dosis experimentales fueron más bajas que las simuladas. En la Ec. [5] se muestra que la dosis UV depende de: la intensidad UV absorbida, el tiempo, el área de exposición y la masa irradiada. De estas, el único parámetro que varió entre la simulación y la experimentación fue la intensidad UV, ya que los demás fueron valores constantes que se obtuvieron del trabajo experimental. Por este motivo, la variación entre los perfiles de dosis UV se asocian la desviación porcentual de 69,18 % entre la intensidad UV absorbida experimental y simulada, que fue probablemente provocado por considerar constante al coeficiente de extinción molar. Por otro lado, en la Tabla FTIV.2 de la Ficha Técnica IV se presentan las dosis de radiación UV obtenidas por simulación y las dosis determinadas en el trabajo de investigación experimental, de Cabascango (2021) con sus respectivas desviaciones porcentuales. En la simulación se determinó que, para el rango de 0 a 50 Gy, la desviación con los datos experimentales fue de entre 25,37 % y 49,08 %. Esta variación se asocia con la desviación porcentual determinada entre las intensidades UV absorbidas experimentales y simuladas, ya que la dosis depende directamente de dichos valores. Además, todos los códigos desarrollados para el presente trabajo se presentan en la Ficha Técnica V.

3.5. Cambio de concentración de Azul de Metileno

Se determinó el cambio de concentración de la solución de azul de metileno en función del tiempo. Para este fin se utilizó la Ec. [7], que describe la cinética de degradación de azul de metileno en solución acuosa por medio de fotólisis con radiación UV.

a) Caja Petri

En la Figura 7 se muestra el perfil de concentración de la solución en función del tiempo, experimental y simulado para la caja Petri

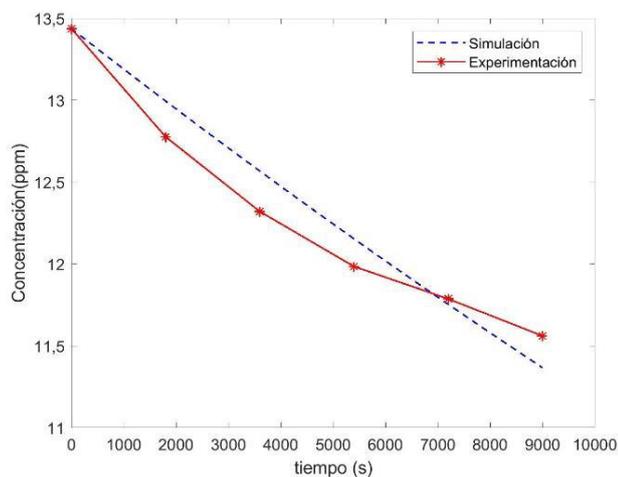


Figura 7. Perfil de concentración de la solución de azul de metileno simulada y experimental en función del tiempo para la caja Petri.

Como se puede observar en la Figura 7, la curva obtenida de la simulación tiene una tendencia similar a la curva experimental presentada en el trabajo de investigación de Cabascango (2021). Sin embargo, el perfil simulado se presenta como una recta hasta los 150 min (2,5 h), tiempo que se utilizó en la simulación para la comparación con el proceso experimental.

De la simulación de la cinética de reacción se encontró que, aproximadamente a las 70 h, la concentración de azul de metileno se mantuvo constante, llegándose a un equilibrio con una concentración final de 0,0968 ppm. La concentración final de la solución, después de 150 min de irradiación UV en la caja Petri, fue de 11,5611 ppm en la experimentación (Cabascango, 2021); mientras que, en la simulación, fue de 11,3667 ppm.

La desviación porcentual con los datos experimentales fue de 1,68 %, por lo que se pudo validar que la ecuación de cinética de degradación planteada y las consideraciones respectivas fueron adecuadas dentro del tiempo de experimentación evaluado. Sin embargo, se debería analizar el comportamiento de ambas curvas en un tiempo mayor, es decir cuando se alcance el equilibrio, con el fin de obtener una conclusión más amplia.

Además, con estos resultados se determinó que, para lograr una degradación de colorante casi completa en un menor tiempo, podrían utilizarse catalizadores que incrementen la cinética de reacción (Peter et al, 2017).

b) Fotorreactor

En la Figura 8 y se muestran los perfiles de concentración de la solución de azul de metileno simulados y experimentales. El perfil simulado se obtuvo de la Ec. [7] al igual que en la Caja Petri.

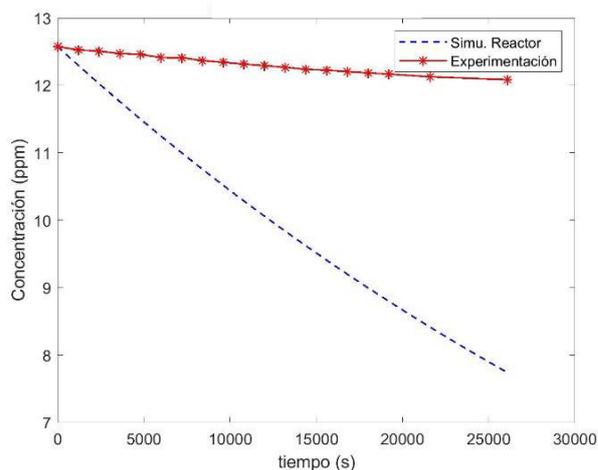


Figura 8. Perfil de concentración de la solución de azul de metileno simulada y experimental en función del tiempo para el Fotorreactor UV

La Figura 8 muestra que, para el mismo tiempo de reacción, el cambio de concentración de la solución de azul de metileno simulado fue mucho mayor que el experimental.

En el trabajo experimental se indica que, la concentración final de la solución después de 7,25 h fue de 12,0840 ppm para el fotorreactor UV (Cabascango, 2021). Mientras que de la simulación se obtuvo una concentración final de 7,7381 ppm. En este caso, la desviación con la concentración final experimental fue de 35,96 %.

La variación considerable entre ambos perfiles puede asociarse con las consideraciones realizadas para encontrar la constante de cinética de reacción bibliográfica para la degradación de azul de metileno. En primer lugar, se consideró una cinética de primer orden, sustentándose en varios estudios similares de degradación de este colorante en soluciones acuosas por medio de fotólisis (Peter et al, 2017; Wu Hsing y Chern, 2006).

La constante cinética se obtuvo del trabajo de investigación de Kuo y Ho (2001), quienes señalan que la degradación de azul de metileno con luz UV sigue mecanismos de reacción complejos que involucran reacciones en cadena, formación de productos intermedios y posibles reacciones secundarias. No obstante, estos pueden analizarse de forma simplificada, considerándose las principales reacciones del mecanismo de degradación del azul de metileno en solución acuosa: la formación de radicales libres, hidroxilos $[\cdot\text{OH}]$ y superóxidos $[\text{O}^{\cdot-}]$, y las reacciones de oxidación de estos radicales con la molécula del colorante.

En este mismo estudio se analizó el efecto de la concentración inicial de oxígeno disuelto en la degradación de azul de metileno, y se determinó que no afectó la cinética de reacción. Por este motivo, se concluyó que la influencia de la reacción con el radical superóxido $[\text{O}^{\cdot-}]$ es mucho menor que la del radical hidroxilo $[\cdot\text{OH}]$ para la degradación del colorante. Con estos resultados, los

autores asumieron que la reacción de oxidación con el radical $[\cdot\text{OH}]$ fue la predominante en el mecanismo.

Para la simulación en el presente trabajo de investigación, se seleccionó la constante cinética de reacción, considerándose un estudio de la misma molécula, el mismo tipo de radiación y un pH de 7. Sin embargo, en la experimentación realizada por Cabascango (2021) no se evaluó las condiciones de oxígeno disuelto bajo las cuales se dio la degradación del colorante; ni tampoco si estas fueron similares a las del estudio de Kuo y Ho (2001).

Por este motivo, probablemente el mecanismo de reacción en la experimentación no fue análogo al asumido en el estudio bibliográfico, en el que se despreció la reacción de oxidación del radical superóxido, por lo que la constante cinética bibliográfica fue lejana a la realidad. Además, en la experimentación pudo existir la formación de productos intermedios y reacciones secundarias que provocaron que el cambio de concentración del azul de metileno fuera mucho menor que en la simulación.

3.6. Cambio de Concentración vs Dosis UV

a) Caja Petri

Para la caja Petri, se comparó los perfiles de cambio de concentración de la solución de azul de metileno en función de la dosis impartida para radiación UV experimental, UV simulada y radiación Gamma. Para ambos casos, las unidades empleadas fueron energía absorbida por unidad de masa o Julio sobre kilogramo (Gy).

Se relacionó los perfiles simulados de dosis y concentración obtenidos de las Ec. [5] y [7] con el fin de determinar la cantidad de energía UV por unidad de masa que se requiere para lograr un determinado porcentaje de degradación del colorante de azul de metileno. La Figura 9 corresponde a la gráfica de cambio de concentración en función de dosis UV y Gamma.

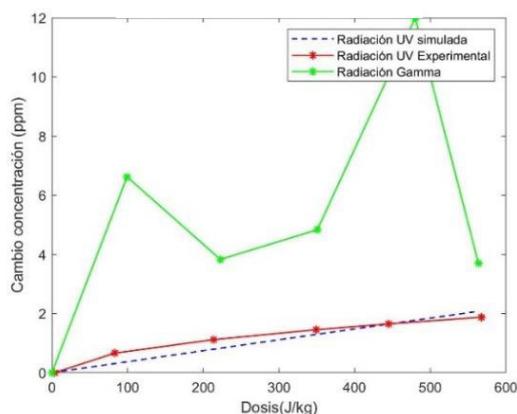


Figura 9. Perfil del cambio de concentración de la solución de Azul de Metileno en función de dosis Gamma y UV

Como se puede observar en la Figura 9, el perfil de cambio de concentración en función de la dosis Gamma no presenta la misma tendencia que con dosis UV. En realidad, dicho perfil muestra un comportamiento atípico del cual no se puede obtener resultados concluyentes para una comparación con la dosis UV.

Zheng et al. (2011) señala en su estudio que los contaminantes orgánicos disminuyen su concentración conforme se incrementa la dosis de radiación gamma; sin embargo, en este caso se observó el cambio de concentración de la solución de azul de metileno no siguió ninguna tendencia coherente con lo establecido en bibliografía. Tayade, et al., (2009) indican que el pH es un factor importante para la degradación de una solución de azul de metileno con radiación gamma, ya que obtuvieron resultados coherentes a un pH de 9. Esto se debe a que, a un pH básico, la mayoría de las especies formadas son los radicales $[\text{OH}]$, que son uno de los oxidantes más eficientes conocidos en la degradación de compuestos orgánicos (Almeida, et al, 2017). Por otro lado, este mismo autor señala que la compleja interacción de la molécula de azul de metileno con la radiación gamma puede ocasionar diversas especies reactivas que a su vez producen una serie de reacciones diferentes. El número y tipo de reacciones que se producen se ve influenciado por factores que afectan las interacciones de la radiación con la materia, como son: el tipo de radiación, el medio, el estado de agregación y la naturaleza propia de la molécula. Por este motivo, se determinó que se requiere analizar más a fondo las condiciones óptimas de la experimentación para el azul de metileno, o buscar otra molécula modelo que permita determinar una relación entre la relación gamma y UV. Por otro lado, en la Figura 9, se puede observar que el perfil simulado del cambio de concentración de la solución en función de dosis UV es muy similar al presentado en el trabajo de investigación experimental para la caja Petri. De la simulación de la caja Petri, se obtuvo que con 567 Gy de radiación UV, se alcanzó una degradación de la solución de azul de metileno de 15,4 %, considerándose una concentración inicial de 13,438 ppm. Mientras que, en el trabajo previo de investigación, se reporta que, experimentalmente para la misma dosis de radiación UV, se obtuvo un 13,98 % de degradación con la misma concentración inicial (Cabascango, 2021). Los porcentajes de degradación obtenidos en el presente trabajo se asemejan a los resultados de Kuo y Ho (2001), quienes en estudios similares de exposición de soluciones acuosas de azul de metileno con radiación UV, obtienen degradación de menos del 20 %. En dichos estudios se logra mayor degradación con el uso de catalizadores, ya que estos aceleran la cinética de reacción debido a la afinidad de la molécula de azul de metileno cargada positivamente, con la superficie de carga negativa.

b) Fotorreactor

Se construyó la misma gráfica para el fotorreactor como se muestran en la Figura 10.

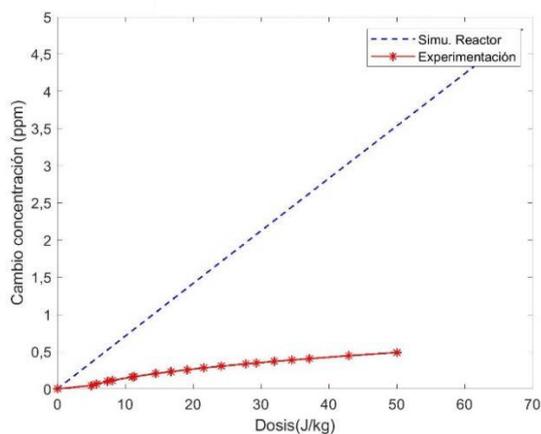


Figura 10. Perfil del cambio de concentración de la solución de Azul de Metileno en función de dosis UV simulada y experimental para el fotorreactor UV

De la simulación del fotorreactor, se obtuvo que con 50 Gy de radiación UV, se alcanzó una degradación de la solución de azul de metileno de 38,45 %, considerándose una concentración inicial de 12,5738 ppm. Mientras que, en el trabajo previo de investigación, se reporta que, experimentalmente para la misma dosis de radiación UV, obtuvo un 3,89 % de degradación para una solución de azul de metileno con la misma concentración inicial (Cabascango, 2021).

Se compararon los resultados de degradación con un estudio similar que trata el mismo colorante con radiación Gamma. Zheng et al. (2011) señala que obtuvo un 5 % de degradación de una solución de azul de metileno, de concentración inicial de 20 ppm, expuesta a 50 Gy de radiación Gamma. Se evidenció que los resultados de radiación UV simulados alcanzaron porcentajes de degradación de colorante más altos a los resultados del trabajo experimental, e incluso a los obtenidos por radiación Gamma en el estudio bibliográfico antes mencionado. Esta variación se asocia con el hecho de que, en la simulación, la cinética de degradación del azul de metileno se analizó de forma simplificada, considerándose una constante cinética para la reacción predominante de oxidación con el radical $[OH]$. Es decir, se despreció una serie de reacciones diferentes y productos intermedios asociados con el mecanismo complejo de reacción, que probablemente se produjeron durante la experimentación. Dicha simplificación pudo provocar que los resultados simulados se alejen de los experimentales para radiación UV y Gamma.

4. CONCLUSIONES

En la caja Petri, la intensidad UV absorbida simulada fue de $0,9387 \text{ Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$. La desviación porcentual con los datos experimentales fue de 10,18 %, por lo que se considera que el modelo matemático planteado fue una aproximación cercana a la realidad. Para el fotorreactor, la intensidad UV absorbida simulada fue de $0,0291 \text{ Jm}^{-2}\text{s}^{-1}$, con una desviación porcentual con la intensidad UV experimental de 69,18 %. Las consideraciones planteadas para predecir

la absorción de fotones de energía UV no se ajustaron a las interacciones reales de la experimentación.

En la caja Petri, la variación de temperatura simulada fue de 8,66 K; la desviación porcentual con el valor experimental fue de 14,34 %. En el fotorreactor, la variación de temperatura simulada fue de 21,22 K, con una desviación porcentual con el valor experimental de 0,85 %. El balance de energía planteado para la caja Petri y el fotorreactor fue válido únicamente en el caso en el que se consideró que el 50 % de la radiación UV calienta la solución y el otro 50 % lo descompone.

Para la caja Petri, la desviación entre las dosis UV simuladas y experimentales fue de 7,02 %. Los resultados de la simulación validaron el procedimiento de cálculo realizado para radiaciones no ionizantes con geometrías similares, en el trabajo experimental. Por otro lado, en el fotorreactor UV se determinó que, en la simulación, la desviación porcentual con los datos experimentales fue de entre 25,37 % y 49,08 %. En este caso, la variación se asocia con la desviación entre las intensidades UV absorbidas experimentales y simuladas, ya que la dosis depende directamente de dichos valores.

De la simulación del fotorreactor, se obtuvo que con 50 Gy de radiación UV, se alcanzó una degradación de la solución de azul de metileno de 38,45 %; mientras que experimentalmente fue de 3,44 %. En la simulación de la cinética de degradación del azul de metileno se consideró únicamente la reacción de oxidación con el radical hidroxilo y se despreció las demás reacciones y productos intermedios del mecanismo de reacción.

El perfil de cambio de concentración en función de la dosis Gamma muestra un comportamiento atípico del cual no se puede obtener resultados concluyentes para una comparación con la dosis UV. Por lo que se requiere analizar más a fondo las condiciones óptimas de la experimentación para el azul de metileno, o buscar otra molécula modelo que permita determinar una relación entre la relación gamma y UV.

AGRADECIMIENTOS

La presente investigación no hubiese sido posible de manera exitosa sin el apoyo del proyecto PIS- 18-05 "Desarrollo de un sistema dosimétrico para absorción de energía UV en soluciones de azul de metileno para comparación con dosimetría de radiaciones ionizantes" patrocinado por la Escuela Politécnica Nacional y sus colaboradores.

REFERENCIAS

- Almeida, D., Lindara, S., et al. (2017). Methylene Blue Oxidation Over Iron Oxide Supported on Activated Carbon Derived from Peanut Hulls. *Journal Catalysis Today*, 28 (9), 237-248. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.11.036>
- Blatchley, E., Shen, C., Nunovic, Z., et al. (2006). Dyed Microspheres for Quantification of UV Dose Distributions: Photochemical Reactor Characterization by Lagrangian Actinometr. *Journal*

- of *Environmental Engineering*, 132(11), 1390-1403. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2006\)132:11\(1390\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2006)132:11(1390))
- Cabascango, B. (2021). *Implementación de un Sistema de Fotorreacción para su Uso en Dosimetría UV*. [Trabajo de investigación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico, reservado]. Escuela Politécnica Nacional. Quito, Ecuador, 9-15.
- Chaidez, J. (2012). *Simulación Numérica del Modelo Fenton-Karma con Diferencias Finitas y Campo de Fase*. [Título previo a la obtención del título de Máster en Matemáticas]. Universidad de Sonora. Sonora, México, 10-13.
- Contreras, R., García, R., Sandoval, G., Burgueño, G., García, A., Moctezuma, E. y Perea, D. (2009). Degradación fotocatalítica de azul de metileno en aguas residuales utilizando TiO₂ como catalizador. *Revista Latinoamericana de Recursos Naturales*, 5 (2), 86-91.
- Darby, C., Heath, Y., Jacangelo, O., Loge, E., Swaim P., y Tchobanoglous, I. (2005). Desinfección de agua residual con luz UV. *United States Environmental Protection Agency*, 2-4. Obtenido de: <https://www3.epa.gov> (febrero, 2022)
- Ehrt, D. (2002). UV-absorption and radiation effects in different glasses doper with iron and tin in the ppm range. *Comptes Rendus Chimie*, 5(11) 679-692. [https://doi.org/10.1016/S1631-0748\(02\)01432-7](https://doi.org/10.1016/S1631-0748(02)01432-7)
- Estévez, R. (2018). *Dosimetría Radiológica*. 1era Ed. Quito, Ecuador: Edifarm. 10-72.
- Giraldo, L., Pañuela, G., y Mejía, A. (2014). Fotodegradación con dióxido de titanio del colorante Rojo Amaranto en aguas. *Revista Lasallista de Investigación*, 1 (2), 9-16.
- Huang, R., y Chen, H. (2020). Use of 254 nm Ultraviolet light for decontamination of fresh produce and wash water. *US Food Control*, 109(2020), 1-7. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2019.106926>
- Incropera, F. (2010). *Fundamentos de Transferencia de Calor*. 6ta Ed. México DF, México: Pretience Hall. 3-12.
- ISO/ASTM (2009). *Standard Practice for Use of a Ceric-Cerous Sulfate Dosimetry System*. (ISO/ASTM 51205:2009(E)). Génova, Suiza: ISO/ASTM. Descargado por Escuela Politécnica Nacional de conformidad con Acuerdo de Licencia (junio 2021).
- ISO/ASTM (2015). *Standard Practice for Using the Fricke Dosimetry System*. (ISO/ASTM 51026:2015(E)). Génova, Suiza: ISO/ASTM. Descargado por Escuela Politécnica Nacional de conformidad con Acuerdo de Licencia (junio 2021).
- Keshavarzfathy, M. y Taghipour, F. (2019). Radiation modeling of ultraviolet light-emitting diode (UV-LED) for water treatment. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 377 (1), 58-66. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2019.03.030>
- Kozicki, M., Sasiadek, E., Kadlubowski, S., Dudek, M., Maras, P., Nosal, A., y Gazicki-lipman, M. (2017). Flat foils as UV and ionising radiation dosimeters. *Journal of Photochemistry y Photobiology A: Chemistry*, 351, 179-196. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2017.10.028>
- Kuo, W y Ho, P (2001). Solar Photocatalytic Decolorization of Methylene Blue in Water. *Chemosphere*, 45(1), 77-83. [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(01\)00008-X](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(01)00008-X)
- Li, D., Zheng, H., Wang, Q., Wang, X., Jiang, W., Zhang, Z., y Yang, Y. (2014). A novel double-cylindrical-shell photoreactor immobilized with monolayer TiO₂-coated silica gel beads for photocatalytic degradation of Rhodamine B and Methyl Orange in aqueous solution. *Separation and Purification Technologies* 123(2014), 130-138. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2013.12.029>
- Levenspiel, O (2004) *Ingeniería de las Reacciones Químicas*. 2da Ed. México DF, México: Editorial REVERTÉ S.A, 170-175.
- López, J. (2010). Radiólisis: Una alternativa a los tratamientos convencionales de aguas urbanas y residuales. *Revista Nuevos Materiales y tecnologías para el tratamiento del agua*, 1 (1), 253-295.
- Mills, A., Grosshans, P., y Mcfarlane, M. (2009). UV dosimeters based on neotetrazolium chloride. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 201 (2-3), 136-141. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2008.10.010>.
- Moreno, A. y L. G. (2014). Aplicación de radiocatálisis en degradación de muestras orgánicas complejas. *Centro de Investigación Aplicada y Tecnología Avanzada-IPN*, 2-17. Obtenido de la base de datos del Centro de Investigación Aplicada y Tecnología Avanzada IPN. <https://inis.iaea.org> (febrero, 2022)
- Oppenländer, T. (2003). *Photochemical Purification of Water and Air*. Weinheim, Baden-Württemberg: WILEY-VCH Verlag GmbH y Co. KGaA. Vol.1, 8-10.
- Peter, A., Mihaly-Cozmata, A., Nicula, C., Mihaly-Cozmata, L., Jastrzbska, A., Olszyna, A. y Baia, L (2017). UV Light Assisted Degradation of Methyl Orange, Methylene Blue, Phenol, Salicylic Acid, and Rhodamine B: Photolysis Versus Photocatalysis. *Journal Water, Air & Soil Pollut*, 228 (41), 6-9. <https://doi.org/10.1007/s11270-016-3226-z>
- Prahl, S. (2015). Tabulated Molar Extinction Coefficient for Methylene Blue in Water. *ACS Publications*, 2-4. Obtenido de: <https://omlc.org> (febrero, 2022)
- Rivera, T. (2011). Termoluminiscencia en dosimetría médica. *Centro de Investigación Aplicada y Tecnología Avanzada-IPN*, 164-176. Centro de Investigación Aplicada y Tecnología Avanzada IPN. Obtenido de <https://inis.iaea.org> (febrero, 2022)
- Rubiano H., Laguna, C., Zapata, S., et al (2005). Estudio sobre las posibilidades de aplicación de la fotocatalisis heterogénea a los procesos de remoción de fenoles en medio acuoso. *Revista Gestión y Ambiente*, 8 (1), 105-121.
- Ruiz, V. (2002). *Análisis computacional hidráulico en un fotorreactor de flujo pistón*. [Trabajo de investigación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico]. Universidad de Los Andes. 6-9. Repositorio Institucional UNIANDES. <https://repositorio.uniandes.edu.co>.
- Serrano, D. (2013). *Fotodegradación de aguas de proceso de la industria textil*. [Trabajo de investigación previo a la obtención del título de Ingeniero Químico]. Universidad Carlos III de Madrid. Madrid, España, 15-17.
- Siamak O., y Fariborz L. (2010). Simulation of UV Photoreactor for Degradation of Chemical Contaminants: Model Development and Evaluation. *Journal Environmental Science y Technology*, 44 (6), 2056-2063. <https://doi.org/10.1021/es902391t>
- Tayade, R., Thillai, S., y Bajaj, H., (2009). Photocatalytic Degradation of Methylene Blue Dye Using Ultraviolet Light Emitting Diodes. Central Salt and Marine Chemicals. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48 (23), 10262-10267. <https://doi.org/10.1021/ie9012437>
- Turner, J. (2007). *Atoms, Radiation, and Radiation Protection*. Weinheim, Baden-Württemberg: WILEY-VCH Verlag GmbH y Co. KGaA, 60-72.
- Wu Hsing C., y Chern, J. (2006). Kinetics of Photocatalytic Decomposition of Methylene Blue. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45 (19), 6450-6457. <https://doi.org/10.1021/ie0602759>
- Zheng, B., Chunguang, L., Linyan, J., Lizheng, L., Weigong, P. y Junling, N. (2011). Degradation of Methylene Blue in Aqueous Solution by Gamma Irradiation. *5th International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering*, 1(5), 1-4 <https://doi.org/10.1109/icbbe.2011.5781120>

FICHAS TÉCNICAS

ÍNDICE DE FICHAS TÉCNICAS

FICHA TÉCNICA I

Cambio de concentración de la solución de azul de metileno expuesta a radiación UV en un fotorreactor tubular.....16

FICHA TÉCNICA II

Intensidad de fotones UV absorbidos en la caja Petri..... 18

FICHA TÉCNICA III

Perfil de temperatura en el sistema de caja Petri..... 20

FICHA TÉCNICA IV

Desviación porcentual entre las dosis UV obtenidas por simulación con las dosis experimentales para caja Petri y fotorreactor tubular..... 23

FICHA TÉCNICA V

Códigos desarrollados en el Software Matlab para los sistemas de caja Petri y fotorreactor tubular..... 25

FICHA TÉCNICA I

CAMBIO DE CONCENTRACIÓN DE LA SOLUCIÓN DE AZUL DE METILENO EXPUESTA A RADIACIÓN UV EN UN FOTORREACTOR TUBULAR

Objetivo: Simular el cambio de concentración de la solución de azul de metileno en el tiempo con el fin de comparar el perfil de concentración, obtenido en el trabajo experimental previo desarrollado por Cabascango (2021), con la cinética de degradación por fotólisis presentada en estudios bibliográficos para el mismo colorante. En la sección 2.2 se presenta el modelo planteado y sus consideraciones, de acuerdo con el sistema de la Figura FTI.1, para la cinética de degradación del azul de metileno en solución.

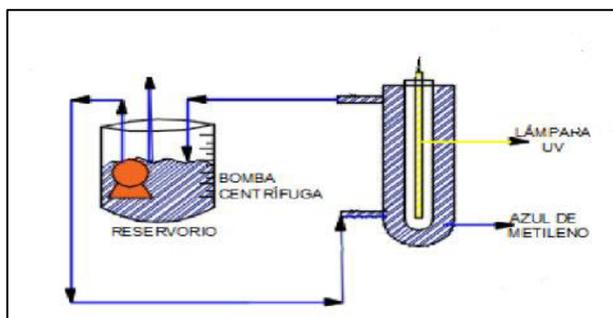


Figura FTI.1. Esquema del sistema experimental del fotorreactor tubular con lámpara UV (Cabascango, 2021)

La Figura FTI.1 muestra la configuración del fotorreactor UV utilizado en el trabajo de carácter experimental enmarcado en el mismo proyecto de investigación. Este sistema constó de un fotorreactor tubular con lámpara UV en el centro conectado a un reservorio que contenía la solución de azul de metileno. Dicha solución se recirculaba a través del sistema mediante una bomba centrífuga de 0,02 HP. Por otro lado, del reservorio se tomaba 4 mL de muestra cada 2 h con el fin de medir la absorbancia en un espectrofotómetro UV-Vis modelo EVOLUTION 60, marca THERMO SCIENTIFIC. En el proceso experimental, se trató al reactor y al reservorio como un solo sistema en donde la cantidad de solución de azul de metileno que ingresó al sistema permaneció un periodo de tiempo determinado, hasta alcanzar una concentración deseada.

En la Tabla FTI.1 se detallan las concentraciones iniciales de la solución de azul de metileno para la caja Petri y el fotorreactor tubular, además del peso molecular del azul de metileno obtenido bibliográficamente.

Tabla FTI. 1. Concentración inicial de la solución de azul de metileno en caja Petri y fotorreactor; y peso molecular del azul de metileno

Propiedad	Unidades	Magnitud
Concentración inicial solución azul de metileno en Caja Petri	m	13,4380
Concentración inicial solución azul de metileno en Fotorreactor	m	12,5738
Peso molecular azul de metileno	g mol ⁻¹	319,85

(Prahl, 2005; Cabascango, 2021)

Por otro lado, para el cálculo de la desviación porcentual entre los resultados experimentales y simulados del cambio de concentración de la solución de azul de metileno, se utilizó la Ec. FTI.1. Además, esta misma ecuación fue implementada para el cálculo de las desviaciones porcentuales de todos los resultados simulados en el presente trabajo.

$$\% \text{ Desviación} = \frac{\text{Valor}_{\text{experimental}} - \text{Valor}_{\text{simulado}}}{\text{Valor}_{\text{experimental}}} \quad [\text{FTI.1}]$$

FICHA TÉCNICA II

INTENSIDAD DE FOTONES UV ABSORBIDOS EN LA CAJA PETRI

Objetivo: Simular el paso de los fotones de energía UV a través del sistema de caja Petri (superficie plana) con el fin de compararlo con los resultados de intensidad UV medidos en el trabajo experimental previo mediante un radiómetro UV, marca NEWSWAN, modelo LS125. En el apartado 3.1 se determinó la intensidad UV absorbida en cada sección del sistema: vidrio de borosilicato de las tapas de la caja Petri y la solución de azul de metileno. Se consideró que el recorrido de la radiación UV fue como se muestra en la Figura FTII.1

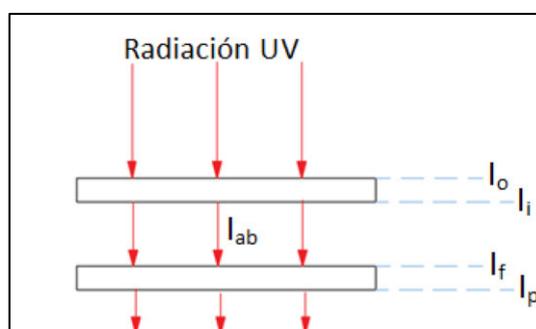


Figura FTII.1. Esquema de paso de fotones de energía UV en la caja Petri (Cabascango, 2021)

Para la comparación con los datos experimentales, se determinó la intensidad UV absorbida en cada sección del sistema. Para este fin, en la simulación se restó la intensidad UV que atravesó cada sección, de la energía UV que ingresó. Por ejemplo, la simulación de la intensidad UV absorbida solo por la solución de azul de metileno se calculó por medio de la Ec. FTII.1.

$$I_{ab} = I_i - I_f \quad [\text{FTII. 1}]$$

En la Tabla FTII.1 se detallan los coeficientes de absorptividad y extinción molar para el vidrio de borosilicato y la solución de azul de metileno obtenido de bibliografía, además de la intensidad inicial UV medida experimentalmente con un radiómetro UV, marca NEWSWAN, modelo LS125.

Tabla FTH.1. Coeficientes de absorptividad y extinción molar de la solución de azul de metileno y vidrio de borosilicato, e intensidad inicial medida para ambos sistemas

Propiedad	Unidades	Magnitud
Coeficiente de absorptividad molar Vidrio de borosilicato con 100 ppm de Fe*	m^{-1}	1800,00
Coeficiente de extinción molar Solución Azul de Metileno**	$m^2 mol^{-1}$	2100,5
Intensidad inicial medida	$Jm^{-2}s^{-1}$	319,700

(Ehrt, 2002; Prahl, 2015; Cabascango, 2021)

* $\lambda = 310$ nm; ** $\lambda = 304$ nm (UVA)

FICHA TÉCNICA III

PERFIL DE TEMPERATURA EN EL SISTEMA DE CAJA PETRI

Objetivo: Simular el perfil de temperatura del sistema de caja Petri (superficie plana) con el fin de compararlo con los resultados del trabajo experimental previo. En el apartado 3.2 se estableció el modelo para la simulación del perfil de temperatura en la caja Petri, considerándose una simplificación detallada en la Figura FTIII.1.

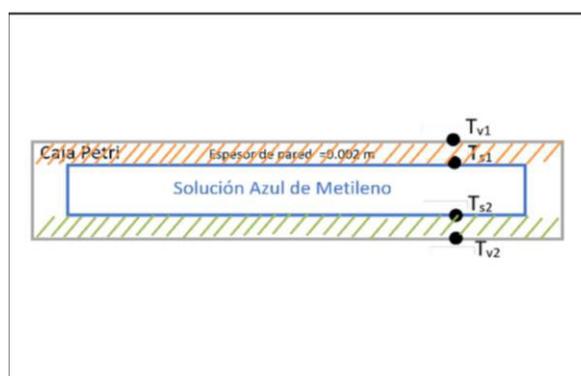


Figura FTIII.1. Esquema del perfil de temperaturas en el sistema de la caja Petri.

Para el balance de energía, se asumió la que la temperatura es la misma en todo el volumen de la sección naranja que corresponde a la tapa superior de la caja Petri. Mientras que la tapa inferior, es decir en la sección verde, está a una temperatura diferente, en todo su volumen.

Esta suposición se realizó considerándose que el perfil de temperatura en el espesor de pared de la caja Petri (0,002 m) es despreciable al compararse con el gradiente de todo el sistema. Por ende, la temperatura en el exterior del vidrio de borosilicato es la misma que en el interior para ambas tapas:

$$T_{V1} = T_{S1} \quad [\text{FTIII. 1}]$$

$$T_{V2} = T_{S2} \quad [\text{FTIII. 2}]$$

Donde T_{V1} es la temperatura de la tapa superior de la caja Petri, T_{V2} es la temperatura de la tapa inferior de la caja Petri, T_{S1} es la temperatura de la solución de azul de metileno en

contacto con la tapa superior y T_{S2} es la temperatura de la solución de azul de metileno en contacto con la tapa inferior.

En la Tabla FTIII.1 de la Ficha Técnica III se presentan los datos de densidades y capacidades calóricas empleados en la simulación para la solución de azul de metileno y el vidrio de borosilicato. Además, las temperaturas iniciales medidas experimentalmente para la caja Petri y el fotorreactor UV, y el coeficiente promedio de convección natural.

Tabla FTIII.1. Densidades y capacidades calóricas, temperaturas iniciales experimentales y coeficiente promedio de convección natural

Propiedad	Unidades	Magnitud
Densidad solución azul de metileno	kgm^{-3}	1000
Capacidad calórica solución azul de metileno	$\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$	4186
Densidad vidrio de borosilicato	kgm^{-3}	2230
Capacidad calórica vidrio de borosilicato	$\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$	800
Temperatura inicial caja Petri	K	292,45
Temperatura inicial Fotorreactor	K	292,58
Coeficiente de convección natural promedio.	$\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$	15

(Ehrt, 2002; Prahl, 2015; Incropera, 2010; Cabascango, 2021)

En las Tabla FTIII.2 y FTIII.3 de la Ficha Técnica III se detallan las dimensiones de la caja Petri y del fotorreactor UV utilizados en el trabajo de investigación de carácter experimental.

Tabla FTIII.2. Dimensiones de la caja Petri (superficie plana) utilizada en la experimentación

Propiedad	Unidades	Magnitud
Diámetro interno	m	0,0181
Diámetro externo	m	0,0897
Altura	m	0,0937
Espesor	m	0,0140

(Cabascango, 2021)

Tabla FTIII.3. Dimensiones del Fotorreactor Anular con lámpara UV en el centro, utilizado en la experimentación

Propiedad	Unidades	Magnitud
Diámetro interno	m	0,0350
Diámetro externo	m	0,0450
Altura	m	0,4400
Espesor	m	0,0020
Volumen reactor	m ³	0,0002
Volumen reservorio	m ³	0,0003

(Cabascango, 2021)

FICHA TÉCNICA IV

DESVIACIÓN PORCENTUAL ENTRE LAS DOSIS UV OBTENIDAS POR SIMULACIÓN CON LAS DOSIS EXPERIMENTALES PARA CAJA PETRI Y FOTORREACTOR TUBULAR

Objetivo: Determinar la desviación porcentual entre las dosis UV obtenidas por simulación y las dosis UV experimentales. Se calculó la desviación porcentual entre las dosis UV simuladas y experimentales con el fin de analizar, en el apartado 3.3 de la discusión de resultados, la validez del modelo matemático y las ecuaciones planteadas por medio de la Ec. [FTIV.1]

$$\% \text{ Desviación} = \frac{\text{Dosis UV}_{\text{experimental}} - \text{Dosis UV}_{\text{simulada}}}{\text{Dosis UV}_{\text{experimental}}} \times 100\% \quad [\text{FTIV.1}]$$

A los 1800 segundos:

$$\% \text{ Desviación} = \frac{117,2691 \text{ Gy} - 116,8729 \text{ Gy}}{117,2691 \text{ Gy}} \times 100\%$$

$$\% \text{ Error} = 0,3378\%$$

Tabla FTIV.1. Dosis UV simuladas, experimentales y desviación porcentual para cada tiempo en la caja Petri

Tiempo (s)	Dosis Experimental *(Gy)	Dosis Simulación (Gy)	Desviación Porcentual (%)
0	3,6615	3,6615	0
1800	117,2691	116,8729	0,3378
3600	229,6651	213,5397	7,0212
5400	340,5401	349,0422	2,4966
7200	450,0987	444,7089	1,1974
9000	556,1000	567,9195	2,1254

(*Cabascango, 2021)

Tabla FTIV.2 Dosis UV simuladas, experimentales y desviación porcentual para cada tiempo en el fotorreactor tubular

Tiempo (s)	Dosis Experimental *(Gy)	Dosis Simulación (Gy)	Desviación Porcentual (%)
0	0,0000	0,0000	0.0000
1200	4,9925	3,9077	27,7605
2400	5,7704	7,7325	25,3747
3600	7,4094	11.4758	35,4346
4800	8,0738	15.1393	46,6699
6000	11,0333	18,7246	41,0759
7200	11,3215	22,2339	49,0800
8400	14,4521	25,6671	43,6941
9600	16,7317	29,0277	42,3595
10800	19,1194	32,3158	40,8358
12000	21,5933	35,5338	39,2317
13200	24,1322	38,2148	36,8512
14400	27,7441	41,7646	33,5703
15600	29,3246	44,7800	34,5141
16800	31,9401	47,7303	33,0821
18000	34,5446	50,6176	31,7538
19200	37,1210	53,4427	30,5406
21600	42,9249	58,9120	27,1373
26100	50,0001	68,5467	27,0586

(*Cabascango, 2021)

FICHA TÉCNICA V

CÓDIGOS DESARROLLADOS EN EL SOFTWARE MATLAB PARA LOS SISTEMAS DE CAJA PETRI Y FOTORREACTOR TUBULAR

Objetivo: Simular la cantidad de fotones de radiación UV que son absorbidos por una solución de azul de metileno con el fin de obtener las dosis en unidades de Gy. Además, simular el perfil de temperatura del sistema y el cambio de concentración de la solución de azul de metileno con el fin de validar los resultados experimentales obtenidos en el trabajo de investigación de Cabascango (2021).

Código de Matlab desarrollado para el sistema caja Petri

```

clc
clear
close all
format long

%%datos
et=0.5;%Fracción de radiación que se pierde en calentar la solución
To=19.4358+273; %K (temperatura inicial de la solución)
T(1)=To;
Tamb=To;
h=15;%W/m2*K (coeficiente de convección promedio del aire)
r=0.096/2;%m (radio interno caja petri)
A=pi*((r)^2); %m2 (área caja petri)
Io=319.7; %J/m2 s (intensidad inicial que ingresa al sistema caja petri)
dt=0.1;
t(1)=0;
Iabs=0;
dens=1000; %kg/m3 (densidad solución azul de metileno)
PM=319.85; %g/mol (peso molecular azul de metileno)
Co=13.438/PM; %mol/m3 (concentración inicial azul de metileno)
Cm(1)=Co;

%%para una caja petri compuesta de pared borosilicato-solución AM-pared
%%borosilicato

Dp=0.00203;%m (espesor pared borosilicato)
Dmas=0.0042;%m
Dm=0.01403;%m
Dv=Dm-Dmas;%m
ms=dens*A*Dm; %kg (masa solución AM)
em=2100.5; % m2/mol
am=em*Cm(1); %1/m (absortividad solución AM)
ap=1800;%1/m (absortividad pared borosilicato)
cps=4186; %J/kg*K (capacidad calórica solución AM)
cpv=800; %J/kg*K (capacidades calórica borosilicato)

```

```

denv=2230; %kg/m3 (densidad vidrio borosilicato)
kr=1.86e-5; %1/s
Dosis(1)=(Iabs*t(1)*A)/ms; %J/kg (dosis absorbida por la solución AM)
I(1)=Io;
dx=0.0001;
x(1)=0;

for k=1:90000
i=1;
It=0;
Itv=0;

%%cambio de concentración AM
Cm(k+1)=Cm(k)-(kr*Cm(k)*dt);
am=em*Cm(k+1);

%%intensidad absorbida en la primera pared de borosilicato
while x(i)<(Dp-dx)
dItv=(et*(ap*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
Itv=Itv+(dItv);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
while x(i)<(Dp+Dv-dx)
I(i+1)=I(i);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
I1=I(i);

%%intensidad absorbida en la solución de AM
while x(i)<(Dp+Dm-dx)
dIt=(et*(am*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(am*I(i)*dx)+dIt);
It=It+(dIt);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
I2=I(i);

%%intensidad absorbida en la segunda pared de borosilicato
while x(i)<(((2*Dp)+Dm)-dx)
dItv=(et*(ap*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
Itv=Itv+(dItv);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
if k==1
figure(5)
plot(x,I)

xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',' '))
hold on
end
if k==45000
figure(5)
plot(x,I,'--b')

```

```

xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
    hold on
    xlabel('Posición (m)')
    ylabel('Intensidad Absorbida de fotones UV (J/m2*s)')
    title('Intensidad UV Absorbida vs Posición')
end
if k==90000
    figure (5)
    plot(x,I,'--b')

xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
    hold on
    xlabel('Posición (m)')
    ylabel('Intensidad Absorbida de fotones UV (J/m2*s)')
    title('Intensidad UV Absorbida vs Posición')
end

Iabs=I1-I2;

Iabs=Iabs-It;
if k==1
    %para la concentración inicial
    Iabsp=Iabs;
end

%Intensidad que se pierde en calentar la solución de AM
Itt=It+Itv;
Qir=Itt*A;
Qconv=h*A*(Tamb-T(k));

%perfil de temperatura en la caja petri
dT=(Qir+Qconv)/((ms*cps)+(denv*(2*A*Dp)*cpv));
T(k+1)=T(k)+dT;
dDosis=Iabs*dt*A/ms;
Dosis(k+1)=Dosis(k)+dDosis;
t(k+1)=t(k)+dt;

end

%gráfica temperatura vs tiempo
figure (1)
plot(t,T)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
xlabel('tiempo (s)')
ylabel('Temperatura (K)')
title('Temperatura vs tiempo')

%gráfica dosis vs tiempo
figure (2)
plot(t,Dosis,'b--','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))

hold on
Dexp= [3.66, 116.7, 213.54, 349.04, 444.71, 567.91];
texp=[0, 1800, 3600, 5400, 7200, 9000];

```

```

figure (2)
plot(texp,Dexp,'r*-','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
xlabel('tiempo (s)')
ylabel('Dosis (Gy)')
title('Dosis vs tiempo')
legend ('simulación','Experimentación')

```

```
Cm=Cm*319.85;
```

```
%gráfica concentración AM vs tiempo
```

```

figure (3)
plot(t,Cm,'b--','LineWidth',1)
yticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(yticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
hold on
Cmexp= [13.438, 12.777, 12.3206, 11.9849, 11.7868, 11.5611];
texp=[0, 1800, 3600, 5400, 7200, 9000];

```

```

figure (3)
plot(texp,Cmexp,'r*-','LineWidth',1)
yticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(yticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
xlabel('tiempo (s)')
ylabel('Concentración (ppm)')
title('Concentración vs tiempo')
legend ('Simulación','Experimentación')

```

```

Ci=13.438; %ppm;
dCf=Ci-Cm;

```

```
%gráfica cambio de concentración AM vs dosis
```

```

figure (4)
plot(Dosis,dCf,'b--','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
hold on
Dexp= [3.66, 116.71, 213.54, 349.04, 444.71, 567.91];
cCex=[0, 0.6610, 1.1174, 1.4531, 1.6512, 1.8769];

```

```

figure (4)
plot(Dexp,cCex,'r*-','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
hold on

```

```

DGamma= [0,99.35 , 222.49, 350.73, 480.04, 563.65];
cGamma=[0,6.6228, 3.8303, 4.8332,11.9923, 3.6948];

```

```

figure (4)
plot(DGamma,cGamma,'-*g','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))

```

```

ylabel('Cambio concentración (ppm)')
xlabel('Dosis (J/kg)')

```

```

title('Cambio Concentración vs Dosis UV')
legend ('Radiación UV simulada', 'Radiación UV Experimental', 'Radiación
Gamma')

```

Código de Matlab desarrollado para el sistema Fotorreactor UV

```

clc
clear
close all
format long

%%datos
et=0.5;%fracción de radiación que se pierde en calentar la solución
To=19.5834+273; %k (temperatura inicial de la solución AM)
T(1)=To;
Tr(1)=To;
Tamb=To; %k (temperatura ambiente)
hc=10;%W/m2*K (coeficiente de convección promedio del aire)

%%dimensiones fotorreactor
ri=0.0175;%m
re=0.0225;%m
anulo=re-ri;%m
h=0.45; %m
Ai=pi*2*ri*h; %m2
Af=pi*2*re*h; %m2
Aprom=(Ai+Af)/2; %m2

Io=319.7*0.0072/Ai; %J/m2s (intensidad inicial que ingresa al sistema)
dens=1000 kg/m3; (densidad solución azul de metileno)

%%masa solución AM en el fotorreactor
ms=dens*500/1000000;%kg

kreacc=1.86e-5; %1/s (constante cinética de reacción)
dt=0.1;
t(1)=0;
Iabs=0;
Dosis(1)=(Iabs*t(1)*Aprom)/ms; %J/kg

Co=12.5738/319.85; %mol/m3 Concentración solución AM
Cm(1)=Co;
cpv=800; %J/kg K (capacidad calórica borosilicato)
cps=4186; %J/kg K (capacidad calórica solución AM)
denv=2230; %kg/m3 (densidad borosilicato)
espared=0.002; %m (espesor pared fotorreactor)
dx=0.0001;%m
I(1)=Io;
i=1;

%%datos Calor de Bomba
potb=0.08;%HP (potencia de bomba)
eficb=0.8;% (eficiencia de la bomba)
Qpbomba=(potb*745.7) - (eficb*(potb*745.7));
flow=(500*dens)/(1000000*7.25*3600);
r(1)=ri;

em=2100.5; %m2/mol coeficiente extinción molar
Cm=12.5738/319.85; %mol/m3 concentración solución AM
am=em*Cm; %1/m absortividad solución AM

```

```

ap=1800; %1/m absortividad pared borosilicato

%%cambio de concentración de la solución en el reactor
for k=1:261000
i=1;
It=0;
Itv=0;

%%cambio de concentración AM
Cm(k+1)=Cm(k)-(kreacc*Cm(k)*dt);
am=em*Cm(k+1);

if Cm(k+1)<=0
    Cm(k+1)=0;
end

%%intensidad absorbida por el vidrio de borosilicato (pared interna)
while r(i)<(ri+espared)
    dItv=((et)*(ap*I(i)*dx));
    dI=((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
    r(i+1)=r(i)+dx;
    Aant=2*pi*r(i)*h;
    Adesp=2*pi*r(i+1)*h;
    dI=dI*Aant/Adesp;
    I(i+1)=I(i)-dI;
    Itv=Itv+(dItv);
    i=i+1;
end
I1=I(i);

%%intensidad abasorbida por la solución de azul de metileno
while r(i)<(re-espared)
    dIt=((et)*(am*I(i)*dx));
    dI=((1-et)*(am*I(i)*dx)+dIt);
    r(i+1)=r(i)+dx;
    Aant=2*pi*r(i)*h;
    Adesp=2*pi*r(i+1)*h;
    dI=dI*Aant/Adesp;
    I(i+1)=I(i)-dI;
    It=It+(dIt);
    i=i+1;
end
I2=I(i);

%%intensidad absorbida por el vidrio de borosilicato (pared externa)
while r(i)<(re)
    dItv=((et)*(ap*I(i)*dx));
    dI=((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
    r(i+1)=r(i)+dx;
    Aant=2*pi*r(i)*h;
    Adesp=2*pi*r(i+1)*h;
    dI=dI*Aant/Adesp;
    I(i+1)=I(i)-dI;
    Itv=Itv+(dItv);
    i=i+1;
end

%%gráfica Intensidad UV vs posición
if k==1

```

```

        figure (5)
        plot(r,I)
        hold on
end
if k==130500
    figure (5)
    plot(r,I,'--b')

xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
    hold on
    xlabel('Posición (m)')
    ylabel('Intensidad Absorbida de fotones UV (J/m2*s)')
    title('Intensidad UV Absorbida vs Posición')
end
if k==261000
    figure (5)
    plot(r,I,'--b')

xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
    hold on
    xlabel('Posición (m)')
    ylabel('Intensidad Absorbida de fotones UV (J/m2*s)')
    title('Intensidad UV Absorbida vs Posición')
end
Iabs=I1-I2;
Iabs=Iabs-It;
if k==1
    Iabsp=Iabs;
end

%intensidad que se pierde en calentar la solución de AM
Itt=It+Itv;
Qir=Itt*Aprom;
Qconv=hc*Af*(Tamb-T(k));

%perfil de temperatura en el fotorreactor
dT=(Qir+Qconv+Qpbomba)/((ms*cps)+(Ai*espared*denv*cpv)+(Af*espared*denv*cpv));
T(k+1)=T(k)+dT;
dDosis=Iabs*dt*Aprom/ms;
Dosis(k+1)=Dosis(k)+dDosis;
t(k+1)=t(k)+dt;

end

%gráfica temperatura vs tiempo
figure (1)
plot(t,T,'b--','LineWidth',1)
xticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(xticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
hold on

Texp=[292.5834, 298.1749, 302.7123, 306.2177, 308.6387, 310.4633,
311.6166, 312.3849, 312.7685, 313.2732, 313.6113, 313.6136, 313.6159,
313.6209, 313.6242, 313.6245, 313.6249, 313.6251, 313.6254];
texp=[0, 1200, 2400, 3600, 4800, 6000, 7200, 8400, 9600, 10800, 12000,
13200, 14400, 15600,16800,18000, 19200, 21600, 26100];

```

```

figure (1)
plot (texp, Texp, ':r', 'LineWidth' ,1)
xticklabels (strrep (cellfun (@num2str, num2cell (xticks), 'UniformOutput', false), '.', ', '))
xlabel ('tiempo (s)')
ylabel ('Temperatura (K)')
title ('Temperatura vs tiempo')
legend ('Simulación', 'Experimentación')

%%gráfica dosis vs tiempo
figure (2)
plot (t, Dosis, 'b--', 'LineWidth' ,1)
xticklabels (strrep (cellfun (@num2str, num2cell (xticks), 'UniformOutput', false), '.', ', '))
hold on

Dosisexp=[0, 4.9925, 5.7704, 7.4094, 8.0738, 11.0333, 11.3215, 14.4521,
16.7317, 19.1194, 21.5933, 24.1322, 27.7441, 29.3246, 31.9401, 34.5446,
37.1210, 42.9249, 50.0010];
texp=[0, 1200, 2400, 3600, 4800, 6000, 7200, 8400, 9600, 10800, 12000,
13200, 14400, 15600,16800,18000, 19200, 21600, 26100];

figure (2)
plot (texp, Dosisexp, 'r*-', 'LineWidth' ,1)
xticklabels (strrep (cellfun (@num2str, num2cell (xticks), 'UniformOutput', false), '.', ', '))
xlabel ('tiempo (s)')
ylabel ('Dosis (J/kg)')
title ('Dosis vs tiempo')
legend ('Simu. Reactor', 'Experimentación')

%%gráfica concentración AM vs tiempo
Cm=Cm*319.85; %ppm
figure (3)
plot (t, Cm, 'b--', 'LineWidth' ,1)
xticklabels (strrep (cellfun (@num2str, num2cell (xticks), 'UniformOutput', false), '.', ', '))
hold on

Cmexp=[12.5738, 12.5275, 12.5073, 12.4723, 12.4600, 12.4128, 12.4087,
12.3680, 12.3418, 12.3165, 12.2922, 12.2689, 12.2381, 12.2253, 12.2049,
12.1855, 12.1671, 12.1280, 12.0840];
texp=[0, 1200, 2400, 3600, 4800, 6000, 7200, 8400, 9600, 10800, 12000,
13200, 14400, 15600,16800,18000, 19200, 21600, 26100];

figure (3)
plot (texp, Cmexp, 'r*-', 'LineWidth' ,1)
xticklabels (strrep (cellfun (@num2str, num2cell (xticks), 'UniformOutput', false), '.', ', '))
xlabel ('tiempo (s)')
ylabel ('Concentración (ppm)')
title ('Concentración vs tiempo')
legend ('Simu. Reactor', 'Experimentación')

%% gráfica cambio concentración AM vs dosis
Ci=12.5738; %ppm
dCf=Ci-Cm;
figure (4)
plot (Dosis, dCf, 'b--', 'LineWidth' ,1)

```

```

yticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(yticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
hold on

Dosisexp=[0, 4.9925, 5.7704, 7.4094, 8.0738, 11.0333, 11.3215, 14.4521,
16.7317, 19.1194, 21.5933, 24.1322, 27.7441, 29.3246, 31.9401, 34.5446,
37.1210, 42.9249, 50.0010];
dCexp=[0, 0.0463, 0.0664, 0.1015, 0.1138, 0.1610, 0.1651, 0.2058, 0.2320,
0.2573, 0.2816, 0.3049, 0.3357, 0.3485, 0.3689, 0.3883, 0.4067, 0.4458,
0.4898];

figure (4)
plot (Dosisexp,dCexp,'r*-', 'LineWidth' ,1)
yticklabels(strrep(cellfun(@num2str,num2cell(yticks),'UniformOutput',false),'.',' ',''))
ylabel('Cambio concentración (ppm)')
xlabel('Dosis (J/kg)')
title('Cambio Concentración vs Dosis UV')
legend ('Simu. Reactor','Experimentación')

```

Código de Matlab desarrollado para perfil de temperatura del sistema: Análisis de casos para determinar el porcentaje de energía UV absorbida para calentamiento y degradación de la solución de azul de metileno

```

clc
clear
close all
format long

%%datos
etc=[0 0.1 0.3 0.5 0.7 0.9];%fracción de radiación que se pierde en
calentar la solución AM

for curv=1:6
    et=etc(curv);

To=19.4358+273; %k (temperatura inicial de la solución)
T(1)=To;
Tamb=To;
h=15;%W/m2*K (coeficiente de convección promedio del aire)
r=0.096/2;%m (radio interno caja petri)
A=pi*((r)^2); %m2 (área caja petri)
Io=319.7; %J/m2 s (intensidad inicial que ingresa al sistema)
dt=0.1;
t(1)=0;
Iabs=0;
dens=1000; %kg/m3 (densidad solución AM)
PM=319.85; %g/mol (PM azul de metileno)
Co=13.438/PM; %mol/m3 (concentración inicial AM)
Cm(1)=Co;

%%Para una caja petri compuesta de pared borosilicato-solución AM-pared
%%borosilicato
Dp=0.00203;%m (espesor pared borosilicato)
Dmas=0.0042;
Dm=0.01403; %m (espesor solución AM)
Dv=Dm-Dmas;
ms=dens*A*Dm; %kg (masa solución AM)
em=2100.5; %m2/mol (coeficiente de extinción molar)

```

```

am=em*Cm(1); %1/m (absortividad solución AM)
ap=1800;%1/m (absortividad pared borosilicato)
cps=4186; %J/kg*K (capacidad calórica solución AM)
cpv=800; %J/kg*K (capacidad calórica borosilicato)
denv=2230; %kg/m3 (densidad vidrio borosilicato)
Dosis(1)=(Iabs*t(1)*A)/ms; %J/kg (dosis absorbida por la solución AM)
I(1)=Io;
dx=0.0001;
x(1)=0;

%%Cambio de concentración
for k=1:90000
i=1;
It=0;
Itv=0;

%%Intensidad en la primera pared de borosilicato
while x(i)<(Dp-dx)
dItv=(et*(ap*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
Itv=Itv+(dItv);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end

%%Intensidad en la solución de AM
while x(i)<(Dp+Dv-dx)
I(i+1)=I(i);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
I1=I(i);
while x(i)<(Dp+Dm-dx)
dIt=(et*(am*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(am*I(i)*dx)+dIt);
It=It+(dIt);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
I2=I(i);

%%intensidad en la segunda pared de borosilicato
while x(i)<(((2*Dp)+Dm)-dx)
dItv=(et*(ap*I(i)*dx));
I(i+1)=I(i)-((1-et)*(ap*I(i)*dx)+dItv);
Itv=Itv+(dItv);
x(i+1)=x(i)+dx;
i=i+1;
end
Iabs=I1-I2;
Iabs=Iabs-It;

if k==1
    %para la concentración inicial
    Iabsp=Iabs;
End

%%Intensidad que se pierde en calentar la solución de AM
Itt=It+Itv;

```

```

Qir=Itt*A;
Qconv=h*A*(Tamb-T(k));
dT=(Qir+Qconv)/((ms*cps)+(denv*(2*A*Dp)*cpv));
T(k+1)=T(k)+dT;
dDosis=Iabs*dt*A/ms;
Dosis(k+1)=Dosis(k)+dDosis;
t(k+1)=t(k)+dt;
end

%gráfica temperatura vs tiempo
Cm=Cm*319.85;%ppm
if curv==4
    figure (1)
    plot(t,T,'*-')
    hold on
else

figure (1)
plot(t,T)

hold on

xlabel('tiempo (s)')
ylabel('Temperatura del sistema Caja Petri (K)')
title('Temperatura vs tiempo')
legend('0%', '10%', '30%', '50%', '70%', '90%', 'Experimental')
end
end
Itt
It
Itv
Iabsp

```