

Modelado y simulación de procesos de desinfección solar mediante un reactor tubular acoplado a un CPC

Ángela García Gil

Máster en Ingeniería Química



MÁSTERES
DE LA UAM
2017 - 2018

Facultad de Ciencias



MASTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA QUÍMICA

Curso académico 2017-18

Trabajo Fin de Master

MODELADO Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE DESINFECCIÓN SOLAR DE AGUA MEDIANTE UN REACTOR TUBULAR ACOPLADO A UN CPC

Autor: Ángela García Gil

Directores: Javier Marugán Aguado

Cristina Pablos Carro

Colaboradora: Cintia Casado Merino

Agradecimientos

Quería agradecer principalmente a mis directores, Javier Marugán Aguado y Cristina Pablos Carro, y también a mi coordinadora, Cintia Casado Merino, su implicación y dedicación en mi trabajo.

También quería dar las gracias a La Residencia de Estudiantes por haberme concedido la beca de estancia de la cual estoy disfrutando y la que ha facilitado el desarrollo de este Trabajo de Fin de Máster, y a Técnicas Reunidas S.A. por ser quien la financia.

Índice

1.	Resumen	1
2.	Introducción	3
2.1.	Colectores solares.....	5
2.2.	Modelos de desinfección mediante SODIS	7
2.3.	Simulación numérica y fluidodinámica computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD)	9
3.	Objetivos y plan de trabajo	10
3.1.	Objetivos	10
3.2.	Plan de trabajo y metodología experimental.....	11
3.2.1.	Modelado del proceso SODIS en CPC en función de la radiación.	11
3.2.2.	Modelado del proceso SODIS en CPC en función del efecto sinérgico de la radiación y la temperatura.....	11
4.	Solución técnica, resultados y discusiones	15
4.1.	Modelado del proceso SODIS en CPC en función de la radiación.....	15
4.1.1.	Diseño CAD del reactor tubular acoplado al CPC	15
4.1.2.	Mallado y optimización	17
4.1.3.	Modelado y validación de la distribución de la radiación	20
4.1.4.	Modelado y validación de la fluidodinámica.....	25
4.1.5.	Modelado y validación del modelo SODIS en función de la radiación	28
4.2.	Modelado del proceso SODIS en CPC en función del efecto sinérgico de la radiación y de la temperatura.....	32
4.2.1.	Modelado de la radiación, fluidodinámica y temperatura.....	32
4.2.2.	Modelado y validación del proceso SODIS en función del efecto sinérgico de radiación y temperatura	33
5.	Conclusiones	37
6.	Bibliografía.....	38

1. Resumen

El acceso a agua potable es un derecho fundamental y universal, sin embargo, una parte importante de la población mundial no está dotada de las vías necesarias para optar a dicho recurso. Las sociedades de países no desarrollados son las más afectadas, puesto que no disponen de la tecnología adecuada para obtener un agua de calidad.

Estos países, por lo general, se localizan en zonas ecuatoriales y tropicales. Una de las características propias de su clima, es la alta intensidad lumínica que reciben a lo largo de todo el año, por lo que la posibilidad de utilizar un proceso en el que el agua se desinfecte mediante su exposición al sol, como es el proceso SODIS (*solar disinfection*), se plantea como una alternativa de gran interés.

La captación de la energía solar se puede realizar a través de un colector solar parabólico compuesto (*compound parabolic collector, CPC*), capaz de captar y redirigir tanto la radiación directa como la difusa hacia una tubería central por la que circula el agua a tratar.

La eficiencia del proceso se ve determinada principalmente por la intensidad de la radiación solar recibida en la superficie de captación. La parte UV-B del espectro solar es absorbida directamente por las bacterias causando daños en el ADN y parando el proceso de replicación, mientras que la parte UV-A del espectro puede ser absorbida por determinados componentes celulares generando especies reactivas de oxígeno (ROS) que producen un estrés oxidativo en las bacterias. Además, los fotones provenientes de la radiación UV también son capaces de atacar a las enzimas catalasa (CAT) y superóxido dismutasa (SOD), las cuales son las encargadas de inhibir el efecto de las ROS. Estudios previos publicados en la bibliografía muestran la posibilidad de realizar el modelado cinético del proceso a partir de la descripción de la fotogeneración de ROS, así como el efecto sinérgico existente al introducir como variable la temperatura.

Este trabajo de fin de máster se centra en el desarrollo de un modelo de simulación que sea capaz de predecir la desinfección de aguas mediante el proceso SODIS en un reactor tubular acoplado a un colector solar CPC.

Para el desarrollo del modelo de simulación se ha empleado el programa ANSYS Fluent v14.5, el cual es capaz de modelar los diferentes fenómenos físicos involucrados en el proceso, como son el transporte de radiación, la fluidodinámica y el transporte y conservación de materia

mediante resolución numérica del sistema basada en la discretización del mismo por el método de los volúmenes finitos.

En primer lugar, se definió la geometría del CPC mediante su ecuación característica en Matlab y se importó a Autocad donde se acopló al reactor tubular. Esta geometría conjunta se importó a ANSYS donde se sometió a un proceso de optimización de mallado. Una vez seleccionada la malla menos compleja que garantizase resultados independientes del mallado, se procedió al desarrollo de los modelos de los fenómenos físicos. De forma independiente y en régimen estacionario, se resolvieron las ecuaciones de transporte de radiación para conocer la distribución de la misma dentro del reactor, la cual fue validada mediante actinometrías y datos de la bibliografía. Asimismo, se resolvieron las ecuaciones de transporte de fluidos para conocer la fluidodinámica, la cual fue validada frente al perfil teórico de velocidades para regímenes turbulentos. En los casos en los que el modelo incluye la descripción del efecto de la temperatura, las ecuaciones de balance de energía fueron calculadas junto con la fluidodinámica. Por último, se llevó a cabo la simulación del proceso de desinfección en régimen transitorio, utilizando los valores de velocidad, de radiación disponible (y si procede, de temperatura) a partir de los resultados obtenidos previamente en régimen estacionario. Para ello se desarrollaron dos modelos de simulación, uno incluyendo el efecto de la radiación sobre la velocidad del proceso y el otro incluyendo adicionalmente la sinergia con la temperatura. Las ecuaciones cinéticas correspondientes, al igual que las que consideran la recirculación del sistema fueron introducidas por una función de código propio definida por el usuario (*User defined function*, UDF), realizándose la validación de las predicciones de ambos modelos mediante datos experimentales obtenidos en una planta piloto.

Por un lado, el modelo SODIS que únicamente considera la variable de la intensidad de radiación, mostró una gran precisión a la hora de reproducir los experimentos realizados tanto en condiciones de luz solar simulada como de luz solar natural. Por otro lado, el modelo SODIS que considera tanto la radiación como la temperatura como variables, conduce a una predicción más amplia correspondiente al intervalo de trabajo entre la temperatura mínima y máxima del proceso. Como reto futuro se plantea el desarrollo de un modelo de simulación que considere la evolución de la temperatura de forma dinámica a lo largo del transcurso del proceso.

2. Introducción

Una de las principales premisas de la Declaración Universal de los Derechos Humanos [1], manifiesta el derecho a un nivel de vida adecuado que asegure tanto la salud como el bienestar de toda persona. En el año 2000, los países miembros de las Naciones Unidas firmaron los Objetivos de Desarrollo del Milenio (*Millennium Development Goals, MDGs*) [2]. El objetivo número 7 considera el reto de conseguir un desarrollo mundial que sea sostenible proponiendo como desafío reducir a la mitad en 2015 la población que no tiene acceso a agua potable y saneamiento. En 2010, mediante la Resolución 64/292 [3], la Asamblea General de las Naciones Unidas reconoció explícitamente el acceso a agua potable y saneamiento como un derecho esencial para el cumplimiento del resto de derechos humanos. El informe sobre la escasez de agua emitido en 2015 por Unicef y la OMS [4], publica que solo 95 de los 147 países comprometidos con la causa consiguieron llegar al objetivo propuesto en los *MDGs*.

Cabe destacar que los países que no han logrado superar dicho reto, son países en vías de desarrollo o subdesarrollados, los cuales no disponen de una tecnología que garantice la fácil conversión del agua disponible en agua potable.

La mayoría de estos países subdesarrollados están afectados por épocas de abundancia y de escasez de recursos hídricos debido a su clima ecuatorial y tropical [8] (Figura 1). Por otra parte, la localización de dichos países en la franja ecuatorial está ligada a la elevada radiación solar que reciben a lo largo de todo el año [9] (Figura 2).



Figura 1: Disponibilidad de agua [5]

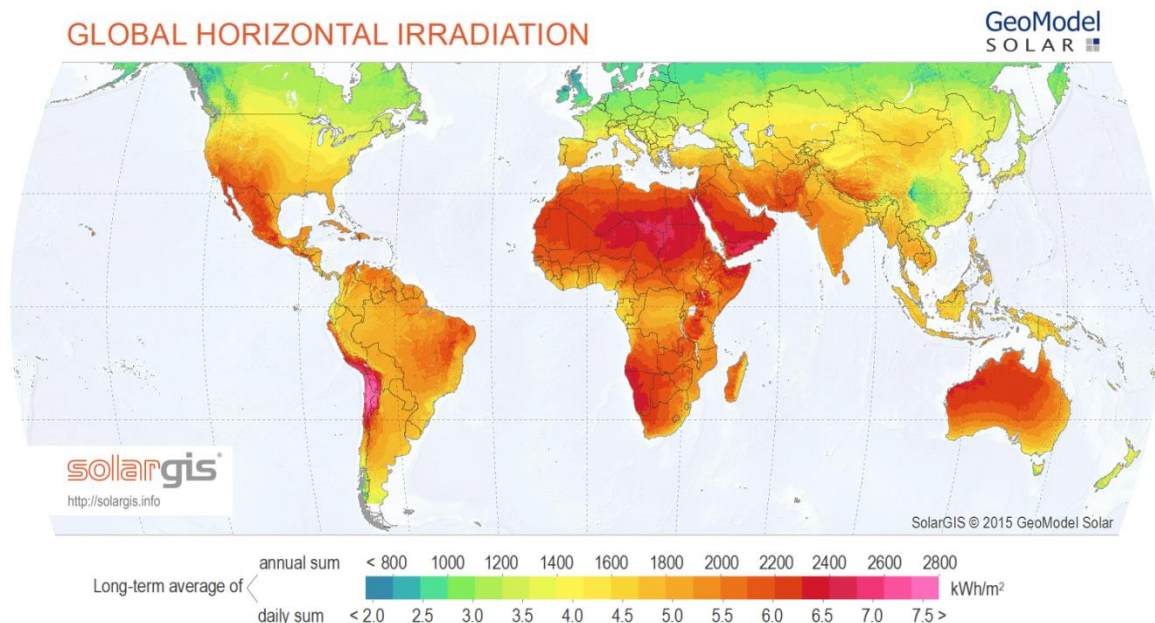


Figura 2: Radiación solar mundial [6]

Actualmente, existe una tecnología de desinfección directa de agua mediante radiación solar (*solar disinfection*, SODIS). Los patógenos contenidos en el agua contaminada son sensibles a la radiación UV y a las altas temperaturas, produciendo un efecto sinérgico de desinfección. Esta técnica se lleva a cabo en botellas de plástico (PET) expuestas al sol durante seis horas con agua de baja turbiedad. Sin embargo, si el agua alcanza una temperatura mayor de 50 °C durante una hora, se puede considerar que el agua ha sido desinfectada. Es posible mejorar la eficacia del proceso si las botellas se exponen al sol encima de superficies reflectoras. Dichas técnicas se están llevando a cabo en países de América Latina, Asia y de África [7]. En la imagen 3 se muestran los países donde el tratamiento SODIS se ha desarrollado [8].

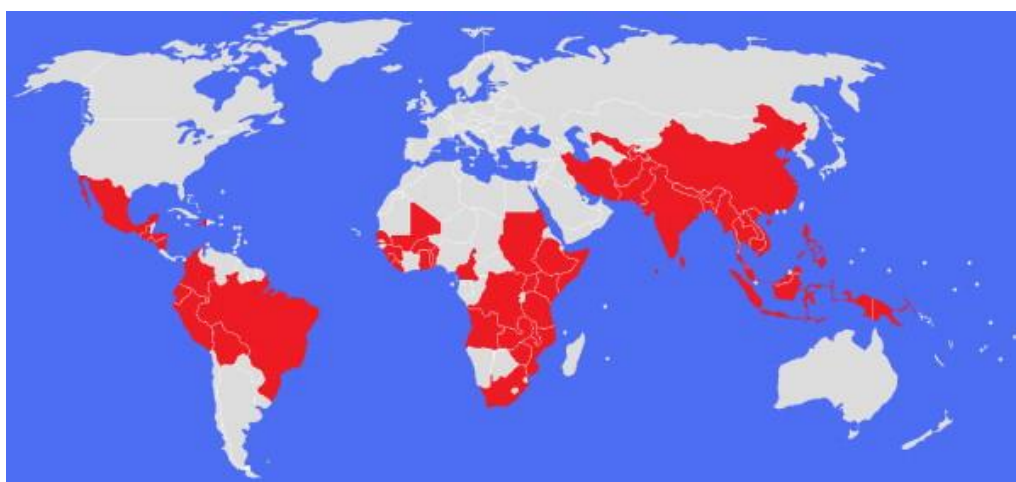


Figura 3: Países donde se aplicó el tratamiento SODIS en 2009 [8]

Por otro lado, existen ciertas limitaciones en el proceso SODIS: se recomienda una exposición al sol de las botellas de dos días completos en días nublados y que el volumen de agua a desinfectar no sea mayor de 2 L. Con el fin de reducir el tiempo de exposición y aumentar el volumen a tratar, se está empezando a considerar el uso de reactores acoplados a superficies colectoras de radiación en lugar de las botellas de PET.

2.1. Colectores solares

La radiación solar que llega a la Tierra es una gran fuente de energía renovable y no contaminante capaz de sustituir a fuentes de energía fósil, contribuyendo a la sostenibilidad del planeta. De forma general, el uso principal de la energía solar se destina a equipos de concentración con los que se aumenta la temperatura de un fluido para la generación de energía, en forma calorífica o incluso en forma eléctrica cuando es acoplado a una turbina. Entre los equipos de concentración de alta temperatura destaca los sistemas cilindro-parabólicos, de torre central y disco-parabólicos, los cuales aumentan la temperatura del fluido contenido 30-90 veces, 200-1000 veces y 1000-10000 veces respectivamente.

Otra de las variantes son los colectores solares de no concentración que se pueden usar como parte de reactores fotoquímicos. Una de las posibilidades es acoplar un reactor tubular con un colector parabólico compuesto (CPC), el cual es capaz de coleccionar la radiación solar como ventaja frente a los reactores planos, de mezcla perfecta o anulares. Dicha ventaja, está secundada por la existencia de una superficie de aluminio, llamada reflector, la cual es altamente reflectante y es capaz de centralizar la radiación que colecciona gracias a su geometría determinada.

La superficie de un colector parabólico compuesto está formada por dos secciones diferenciadas: una evolvente y un segmento de parábola, ambas secciones se repiten a cada lado.

La ecuación que define la evolvente del círculo en coordenadas cartesianas es [9]:

$$\begin{aligned}x &= r(\sin \varphi - \varphi \cos \varphi) \\y &= -r(\varphi \sin \varphi + \cos \varphi)\end{aligned}\tag{1}$$

Donde $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} + \theta_{max}$

De forma similar, la ecuación que define la parábola es [9]:

$$\begin{aligned} x &= r(\sin \varphi - B \cos \varphi) \\ y &= -r(B \sin \varphi + \cos \varphi) \end{aligned} \quad (2)$$

Donde $B = \frac{\frac{\pi}{2} + \theta_{max} + \varphi - \cos(\varphi - \theta_{max})}{1 + \sin(\varphi - \theta_{max})}$ y $\frac{\pi}{2} + \theta_{max} \leq \varphi \leq \frac{3\pi}{2} - \theta_{max}$.

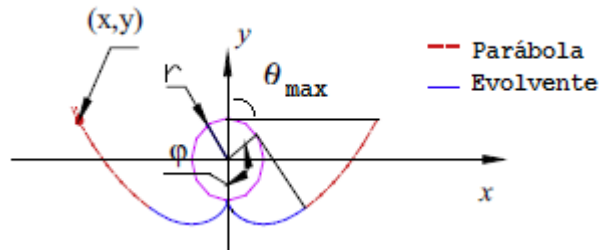


Figura 4: Diseño de un CPC

Para el diseño del colector también es preciso conocer el ángulo máximo de aceptación, que viene dado por la siguiente expresión [10]:

$$CR_{ideal} = \frac{1}{\sin(\theta)} \quad (3)$$

Donde, CR_{ideal} es la relación de concentración ideal, y θ es el ángulo de aceptación, el cual se define como el ángulo que forma el rayo que entra en el colector con mayor inclinación y pasa por la tubería central donde se quiere concentrar la radiación, con el eje vertical del colector.

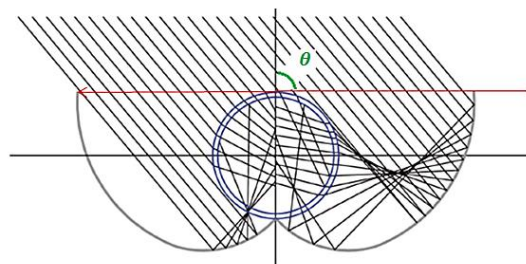


Figura 5: Representación de la dirección de los rayos dentro del colector y del ángulo de aceptación

La mayor parte de los colectores CPC destinados a reacciones fotoquímicas son diseñados para una relación de concentración de 1 sol, lo que significa que la relación entre el área de captación y el área de la superficie externa del reactor es igual a 1, es decir, el ángulo de aceptación alcanza un valor de 90°.

A pesar de que el 95% de la radiación UV-B que llega a la Tierra es absorbida por la capa de ozono, el 5% que llega a la superficie terrestre juega un importante papel en el proceso SODIS [11]. Por otra parte, la radiación UV-A llega en cantidades más altas que la UV-B, en proporciones similares de radiación directa y difusa, por lo que la captación de ambas partes es algo a tener en cuenta y por lo que se determina una relación de concentración igual a 1.

Hasta la fecha, se han desarrollado modelos mecánicos que describen el proceso de inactivación [12], [13], pero no existe un procedimiento sistemático que posibilite el diseño predictivo en CPC's, en los que se estudie el proceso de desinfección, tanto en función de la radiación incidente como en función de la temperatura.

2.2. Modelos de desinfección mediante SODIS

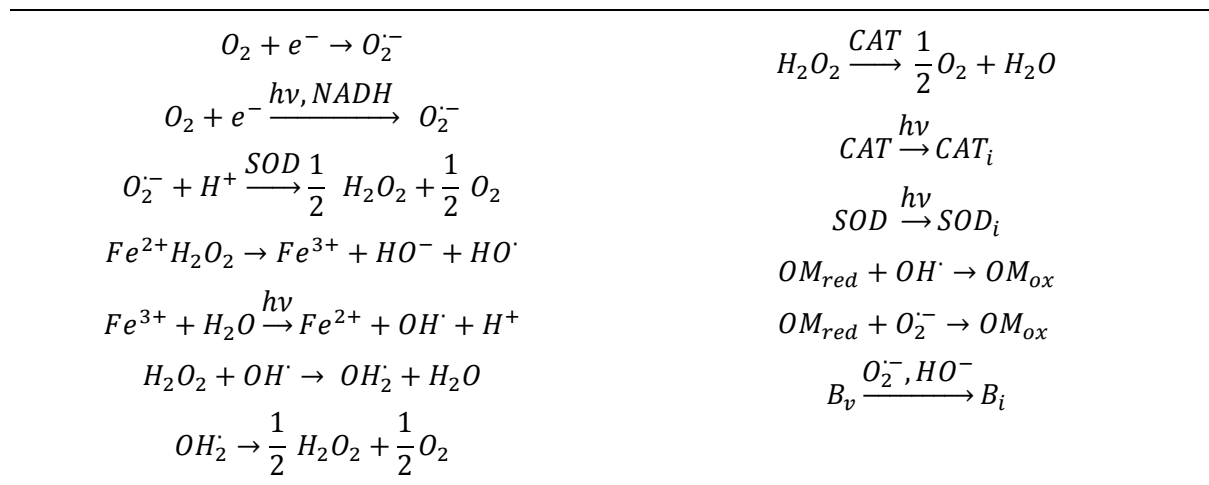
Como ya se ha dicho, el proceso SODIS se basa en la reducción de patógenos del agua por su exposición al sol mediante la acción combinada del calentamiento del agua y de la recepción de fotones del espectro UV por los microorganismos del agua, lo cual produce un efecto sinérgico. La parte UV-B del espectro es absorbida directamente por las células de bacteria causando daños en el ADN y parando el proceso de replicación del ADN [14]. La parte UV-A del espectro es absorbida por el oxígeno del medio generando especies reactivas de oxígeno (ROS) que atacan a las bacterias, dando lugar a su degradación [12]. Además, los fotones provenientes de la radiación UV también son capaces de atacar a las enzimas catalasa (CAT) y superóxido dismutasa (SOD), las cuales son las encargadas de inhibir el efecto de las ROS.

Existen numerosos factores que intervienen en la eficiencia del proceso SODIS que afectan directamente en el tiempo de exposición requerido para conseguir una desinfección de al menos 4 logaritmos de concentración de bacterias. Esta reducción logarítmica ha sido establecida por la OMS como medida protectora para la desinfección de agua potable a nivel doméstico. Entre los factores más importantes que afecta al proceso SODIS se encuentra el valor de irradiación solar, la dosis de radiación, la temperatura del agua durante el tratamiento, la turbidez del agua, la materia orgánica y el oxígeno disueltos en esa agua, y la naturaleza de los microorganismos [7], [15], [16].

Los modelos de desinfección de bacterias más utilizados durante los últimos años, han sido ecuaciones empíricas basadas en la ley de Chick [17]. Estos modelos utilizan la bacteria *Escherichia coli* como bacteria coliforme que representa la viabilidad de la diversidad de bacterias presentes en un agua infectada. Sin embargo, estos modelos no consideran la formación de las ROS ni de las reacciones intracelulares. Castro-Alfárez y col. [12] han

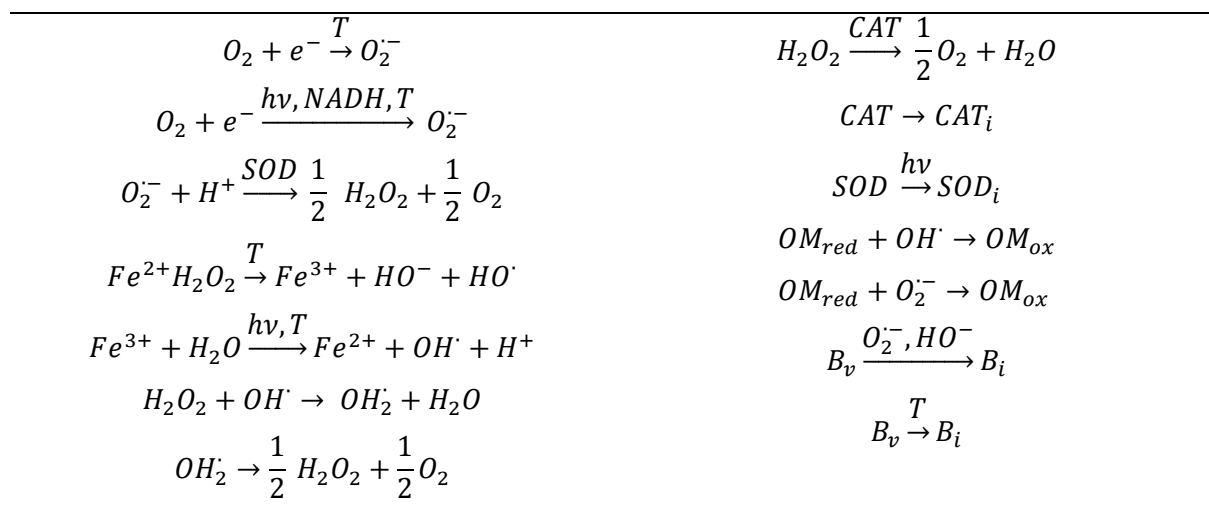
desarrollado un modelo cinético que se basa en la fotogeneración de ROS internas, del radical superóxido ($O_2^{\cdot-}$) y del radical hidroxilo (HO^{\cdot}), los cuales dañan a las células bacterianas e interfieren en el papel de las enzimas catalasa (CAT) y superóxido dismutasa (SOD). En la Tabla 1 se muestran las ecuaciones que describen el modelo cinético [12].

Tabla 1: Modelo cinético SODIS [12]



En un primer paso, este modelo cinético solo considera el efecto único de la radiación, pero en este último año, Castro-Alfárez y col. han conseguido modificar el modelo cinético introduciendo la variable de la temperatura con el que se considere el efecto sinérgico de la radiación y de la temperatura en el proceso de desinfección bacteriana [13]. En la Tabla 2 se muestra el modelo cinético mejorado.

Tabla 2: Modelo cinético efecto sinérgico: SODIS y temperatura [13]



Ambos modelos cinéticos serán considerados en este trabajo.

2.3. Simulación numérica y fluidodinámica computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD)

A partir de los años 70, los programas de simulación se convirtieron en una herramienta fiable, por lo que sustituyeron, en parte, la forma tradicional experimental de diseñar procesos, ya que resultaba ser más rápida y menos costosa. Sin embargo, los modelos teóricos utilizados tienen una gran complejidad y un gran número de parámetros, por lo que es importante destacar que la fiabilidad de las predicciones realizadas sólo puede garantizarse mediante la validación experimental de los resultados.

Dentro de los programas de simulación numérica, los programas basados en la dinámica de fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics, CFD*) son capaces de integrar en el modelo numerosos fenómenos físico-químicos que tienen lugar de forma simultánea en los reactores químicos, como transporte de fluidos, transporte de energía, transferencia de materia y reacción química. Entre los paquetes comerciales existentes, destaca por su fuerte implantación en el mercado el programa ANSYS Fluent. Este programa presenta la ventaja de disponer de modelos rigurosos para evaluar el transporte de radiación en el interior del reactor, e incluso dispone de modelos para la simulación de radiación solar. Por otra parte, es muy versátil a la hora de integrar funcionalidades adicionales a través de las denominadas funciones definidas por el usuario (*User Defined Functions, UDF*) que permiten modificar el código para simular recirculación o introducir la absorción de luz en las ecuaciones cinéticas que describen las reacciones químicas, posibilitando el cálculo diferencial riguroso de la velocidad de reacción en las diferentes zonas del reactor.

Dos de las ventajas de los programas CFD es la reducción de experimentos en el laboratorio, y el apoyo adicional en el proceso de escalado. El principal problema de dichos programas es su gran complejidad, lo que requiere curvas de aprendizaje prolongadas para la cualificación de los usuarios, además de ordenadores con gran capacidad para la resolución.

En los últimos años el desarrollo de metodologías predictivas para la simulación de fotorreactores para aplicaciones de tratamientos de agua han aumentado sustancialmente [18] como por ejemplo el desarrollo de la simulación del proceso de desinfección del agua mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) [19]–[22] o la pérdida de calor y los perfiles térmicos y de radiación en un CPC [23]–[25]. Sin embargo, no hay estudios de la simulación completa del proceso de desinfección SODIS con un fotorreactor tubular acoplado con CPC. Por lo tanto, el desarrollo de una herramienta que simule la desinfección del agua en un fotorreactor tubular acoplado con un CPC es una idea innovadora y prometedora para reducir los costes y el tiempo dedicado a las pruebas experimentales del proceso SODIS.

3. Objetivos y plan de trabajo

3.1. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo de fin de máster es modelar y realizar la simulación numérica mediante técnicas CFD de sistemas de desinfección de agua basados en el proceso SODIS en una planta piloto solar con colectores CPC. Para ello, será preciso alcanzar los siguientes objetivos específicos:

- Modelado y validación del proceso SODIS en un reactor tubular acoplado a un CPC que resuelva el campo de la radiación, así como la fluidodinámica y la reacción de desinfección en función de la radiación.
- Modelado y validación del proceso SODIS en un reactor tubular acoplado a un CPC que resuelva el campo de la radiación, así como la fluidodinámica y la reacción de desinfección en función del efecto sinérgico de la radiación y de la temperatura.

3.2. Plan de trabajo y metodología experimental.

A continuación, se detalla el plan de trabajo y la metodología experimental:

Plan de trabajo:

3.2.1. Modelado del proceso SODIS en CPC en función de la radiación.

En primer lugar, se realizará el modelado del reactor mediante fluidodinámica computacional (CFD), incluyendo la descripción de la geometría mediante una herramienta CAD y llevando a cabo un proceso de optimización de mallado de dicha geometría. Se modelará y verificará de forma independiente los procesos de flujo de fluidos y transporte de radiación. Por último, de forma conjunta con los resultados anteriores se modelará la transferencia de materia y la reacción de desinfección que aseguren una solución precisa. Para ello, se llevarán a cabo una batería de experimentos con diferentes fuentes de luz, que verifiquen los procesos predictivos obtenidos en las simulaciones. Por un lado, se considerará una lámpara de xenón, cuyo espectro de emisión representa el espectro solar, y que posibilita la modificación de la radiación incidente en el reactor de manera manual. Por otro lado, se considerará el sol como fuente de radiación. En esta línea de trabajo, el modelo cinético integrado en el simulador proporcionará la desinfección del agua para diferentes intensidades de radiación.

- 1. Diseño CAD del reactor tubular acoplado al CPC.*
- 2. Mallado y optimización.*
- 3. Modelado y validación de la distribución de la radiación.*
- 4. Modelado y validación de la fluidodinámica.*
- 5. Modelado y validación del proceso SODIS en función de la radiación.*

3.2.2. Modelado del proceso SODIS en CPC en función del efecto sinérgico de la radiación y la temperatura.

En segundo lugar, se realizará el modelado del reactor mediante fluidodinámica computacional (CFD), asegurando una solución precisa, de la misma forma que en el caso anterior, pero con un modelo cinético que también contemple la variable de la temperatura del agua infectada. Para ello, es necesario la introducción de la variable temperatura del agua infectada en la resolución del campo de la fluidodinámica, expuesto en el apartado anterior. Para verificar estos resultados, se utilizarán los experimentos realizados bajo la lámpara xenón en los que se midió la temperatura con el tiempo. Por lo tanto, el modelo cinético integrado en el simulador proporcionará la desinfección del agua para diferentes intensidades de radiación y temperaturas de contorno.

- 1. Modelado de la radiación, fluidodinámica y temperatura.*

2. Modelado y validación del proceso SODIS en función del efecto sinérgico de radiación y temperatura.

Metodología experimental:

Agua infectada

El agua que se utilizó en los experimentos fue agua pura con una concentración inicial de bacteria de 10^6 CFU (unidades formadoras de colonias)/mL que es la concentración habitual de *E. coli* en aguas sin tratar. La bacteria que se añadió fue *Escherichia coli*, bacteria coliforme que representa la infección de patógenos en un agua contaminada.

Procedimiento de reacción

Para llevar a cabo las reacciones de desinfección bacteriana son necesarios tres días, en los cuales se realizan una serie de operaciones que se describen a continuación:

➤ **Día 1: Preparación del cultivo bacteriano**

Se introducen 20 mL de medio de cultivo líquido en un Erlenmeyer de 100 mL. A continuación, se añaden 100 μ L de su cultivo madre correspondiente y se tapa el matraz con una lámina de Parafilm para evitar su contaminación a la vez que se favorece las condiciones adecuadas de oxígeno, y se incuba en una estufa a 37 °C durante 24 h con agitación constante.

➤ **Día 2: Reacción fotocatalítica.**

Los pasos que hay que seguir para llevar a cabo la reacción son los siguientes:

Centrifugación: se pipetea 5 mL del medio de cultivo a un tubo de centrifuga. El proceso de centrifugación tiene lugar a 3500 r.p.m durante 20 minutos. Transcurrido este tiempo se separa la fase sobrenadante por decantación y se resuspenden las bacterias en 5 mL de agua pura con un 0.9% de NaCl autoclavada.

Dilución: el tubo de centrifuga se agita y se pipetea 1 mL de su contenido sobre un matraz aforado de 1 L que contiene el agua a tratar. De esta forma, se obtiene una concentración bacteriana de partida 10^6 CFU/mL.

Puesta en marcha de la reacción fotocatalítica de desinfección:

Se añade la suspensión bacteriana de concentración 10^6 CFU/mL al depósito del reactor y se cubre el sistema con mantas negras para evitar la entrada incontrolada de radiación del laboratorio. Se activa el sistema de bombeo que recircula la suspensión a través del sistema y se deja homogeneizar durante 5 minutos. Durante este tiempo, se enciende la lámpara para que se caliente y proporcione un flujo de fotones constante. Transcurrido ese tiempo, se procede a la primera toma de muestra de la reacción que marca la concentración inicial de bacterias en el sistema. A continuación, se destapa el reactor quitando las mantas iniciándose así la reacción. Se toman muestras manuales en intervalos de tiempo previamente establecidos mediante una jeringa cuyo contenido se deposita en un tubo Eppendorf. Entre muestra y muestra la jeringa se enjuaga con etanol al 70% y agua desionizada.

Diluciones seriadas:

Las muestras recogidas se colocan en un tubo Eppendorf y se las identifica como d_0 . A continuación, se toman 100 μ L de dicha muestra y se transfieren a otro tubo Eppendorf sobre el que se habían añadido anteriormente 900 μ L de agua pura con NaCl al 0.9% autoclavada, previamente esterilizada. De esta forma, se diluye la muestra un orden de magnitud hasta alcanzar una concentración máxima de 10^5 CFU/mL. El proceso se repite dos veces más alcanzando en el primer paso una concentración máxima de 10^4 CFU/mL y en el último paso se llega a una concentración máxima final de 10^3 CFU/mL. Las muestras se identifican como d_1 , d_2 y d_3 respectivamente.

Siembra de las muestras: Para la siembra de las muestras se utilizan placas Petri con el medio de cultivo sólido LB Agar. Se toman los tubos Eppendorf y se agitan vigorosamente para conseguir la homogenización de las muestras. A continuación, con ayuda de una micropipeta electrónica se toman 80 μ L de la muestra que se repartirán sobre las placas en forma de 8 gotas de 10 μ L cada una. De esta forma, se reduce la cantidad de bacterias lo suficiente para realizar de forma visual el conteo bacteriano. Puesto que el progreso de la inactivación no es conocido, se siembran para un mismo tiempo varias muestras con diferente concentración máxima inicial con el fin de asegurar el conteo en alguna de las diluciones. En los tiempos en que la inactivación bacteriana es elevada y la cantidad de bacterias presentes mínima para poder detectar la presencia de alguna CFU, se siembran gotas de las muestras recogidas directamente del reactor de 100 μ L o incluso de 1 mL, estas muestras son identificadas como $d_{.1}$ y $d_{.2}$ respectivamente.

Una vez que las placas se han secado, se tapan y se introducen en la estufa a 37 °C para su incubación durante 24 horas.

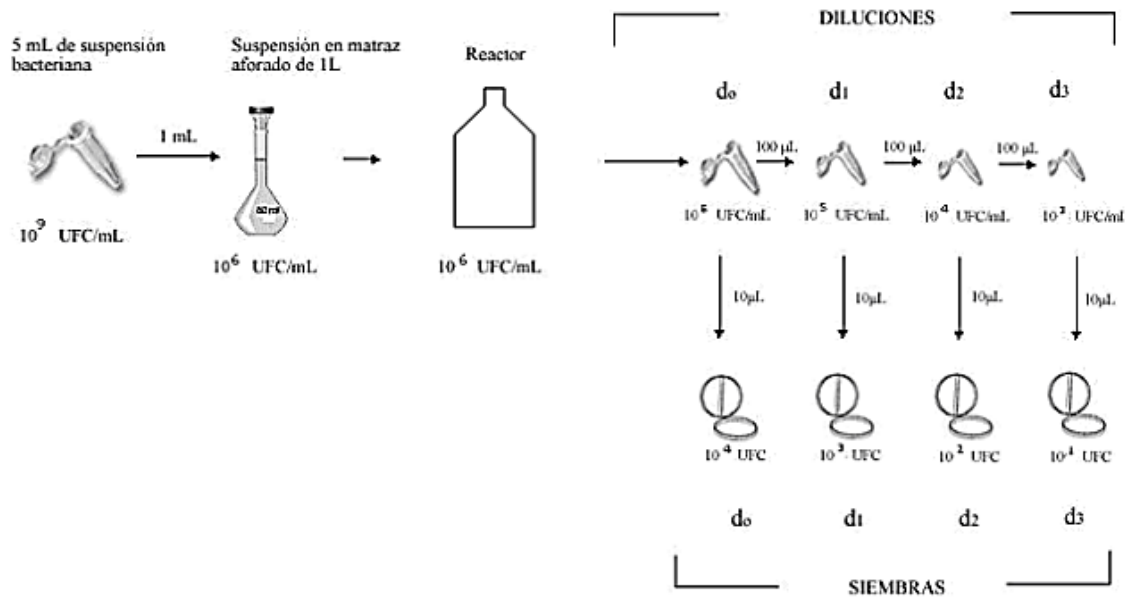


Imagen 1: Modelo de las diluciones seriadas

Parada, limpieza y desinstalación del reactor:

Finalizada la reacción, se vacía el depósito y se llena en primer lugar con una disolución de ácido nítrico que recircula 15 minutos eliminando los restos de materia orgánica, después se vacía el depósito y se llena con etanol al 70 % otros 15 minutos para asegurar la descontaminación bacteriana. Por último, se completa la limpieza con agua desionizada durante 10 minutos.

➤ Día 3: Conteo de colonias.

Transcurrido un período de incubación de 24 h en la estufa, se procede al recuento manual de bacterias viables con ayuda de una lupa. Dichos datos, son transferidos al ordenador donde se analizan.

4. Solución técnica, resultados y discusiones

El programa utilizado para la simulación CFD de los procesos de desinfección fue ANSYS Workbench, un programa que permite la simulación de distribución de la radiación, de la fluidodinámica y de procesos de reacción química (en este caso, la inactivación de las bacterias), entre otros efectos.

Dentro de los diferentes módulos de ANSYS Workbench, se trabajó con el módulo ANSYS Fluent para la simulación de todo el proceso que sucede en el colector.

En primer lugar, se debe dibujar el reactor y sobre esa geometría realizar un mallado. Además, el modelo seleccionado para la resolución del transporte de radiación, (modelo de Ordenadas Discretas) necesita una discretización angular de cada celda de la malla. A partir del mallado y de la discretización, se resolvió de forma independiente y en estado estacionario la distribución de la radiación en la geometría y la fluidodinámica en el reactor. Finalmente, considerando los resultados de las simulaciones de radiación y fluidodinámica, se resolvió la parte de la reacción química en estado transitorio.

A continuación, se irán describiendo cada uno de estos pasos para los dos modelos cinéticos considerados.

4.1. Modelado del proceso SODIS en CPC en función de la radiación.

4.1.1. Diseño CAD del reactor tubular acoplado al CPC

El diseño del reactor tubular acoplado a un CPC fue realizado a partir del CPC disponible en la planta piloto. El reactor puede ser iluminado de dos maneras diferentes. Por un lado, por un foco que simula la radiación solar (a la izquierda de Figura 6). Para simular el espectro solar, se ha utilizado una lámpara xenón XBO 5000W/H XL OFR con un color de temperatura de unos 6000 K. En este caso, el CPC fue colocado de forma frontal a la lámpara. Dicha lámpara se encuentra dentro de un proyector de cine que tiene la función de reflector. Mediante un espectralradiómetro se comparó el espectro de luz que emite la lámpara xenón con el espectro de la luz solar y se comprobó que en el rango del infrarrojo y de la luz visible difieren, pero que en el rango de la luz UV la lámpara es capaz de reproducir fielmente el espectro solar. Únicamente la radiación UV es la responsable de la desactivación de las bacterias en procesos SODIS, por lo que se considera válido como simulador de la radiación solar. Por otro lado, el CPC fue iluminado con luz solar natural el 22 de Septiembre de 2016 a las 13.00h en las instalaciones de la Universidad Rey Juan Carlos, donde la latitud es 40.33°, siendo este valor la inclinación óptima del CPC. Por lo tanto, de forma perpendicular a la

fuente de radiación se ubica una estructura metálica con cuatro CPC (imagen inferior de la Figura 6) en cuya línea focal se localizan cuatro tubos centrales de vidrio borosilicato 3.3 Duran que tienen un diámetro interior de 26 mm y una longitud de 380 mm. En los experimentos realizados, únicamente se utilizará el CPC inferior. La superficie del colector es de aluminio y debido a su geometría de doble parábola garantiza un 85% de reflexión de luz directa hacia la tubería central. El fluido es recirculado desde un tanque hasta las tuberías mediante una bomba centrífuga Model NX-50PX-X, Pan World Co., Ltd con un caudal de 12.12 L/min y una velocidad a través del tubo iluminado de 0.39 m/s. El volumen irradiado por tubo es de 0.2 L, y un volumen total a tratar de agua contaminada de 1 L.

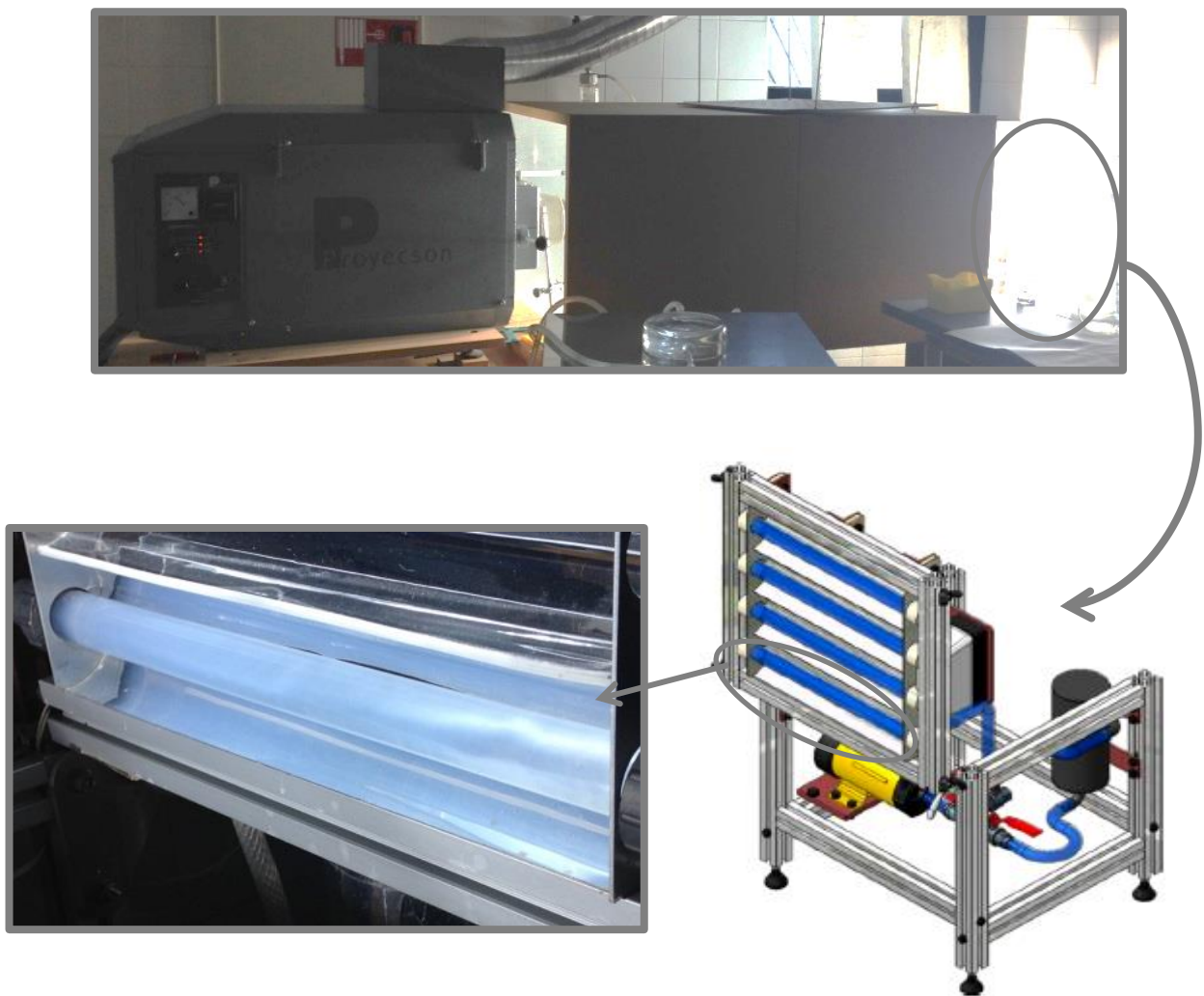


Figura 6: Planta piloto. De arriba abajo y de izquierda a derecha: a) Instalación completa, b) Estructura metálica de los CPC, c) CPC inferior

La fuente de emisión de luz emite a unos 2 metros de distancia del colector. Para simplificar los cálculos en ANSYS Fluent, se supuso que la parte frontal del colector es un área de captación, la cual emite la intensidad de luz que le llega. Mediante un espectrorradiómetro (*StellarNet Spectrometer UVIS-25*), se midió la radiación UV que llega a dicha superficie de captación. Las radiaciones que se consideraron fueron 15 W/m^2 , 20 W/m^2 y 25 W/m^2 de radiación UV.

Para el diseño del reflector, se siguió la ecuación (1) y (2) de una parábola mediante el programa Matlab con su consiguiente importación a AutoCad para la realización del resto de partes de la geometría. Una vez acabada, se importó, nuevamente, a la herramienta de dibujo de ANSYS Workbench llamada DesignModeler, para introducir los últimos retoques gráficos. En la Figura 7 se muestra la geometría diseñada.

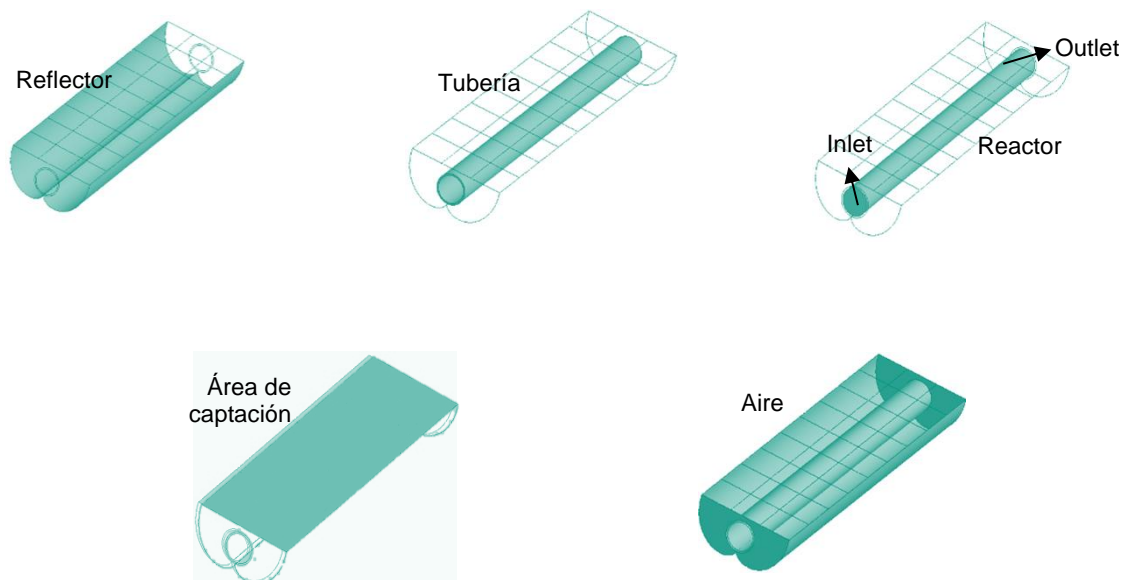


Figura 7: Partes del reactor en ANSYS

Por lo tanto, el conjunto del colector esta formado por: el reflector que es una superficie de aluminio con forma de doble parábola, por una tubería/reactor donde se concentran los rayos de luz por la que pasa la corriente de agua a tratar, con sus respectivos *inlet* y *outlet*, por una superficie/área de captación que funciona como lámpara y por la región comprendida entre el reflector, la tubería y el área de captación definida como aire.

4.1.2. Mallado y optimización

Como ya se ha dicho, ANSYS Fluent es un programa de resolución numérica, por lo que el método de cálculo necesita de un mallado de la geometría a estudiar. Debido a las características reflectoras de la superficie del reflector, la resolución de la distribución de la

radiación es la más compleja. Por lo tanto, la selección del mallado se llevó a cabo considerando dichos cálculos del campo de la radiación.

Para un flujo de emisión de luz constante de 20 W/m² en toda el área de captación se comparó la simetría de la distribución de la radiación en el interior del colector, lo que indica que el mallado que se ha utilizado es apropiado.

Además de las imágenes del interior de reactor de la radiación incidente, también se estudiaron dos flujos de radiación numéricos que devuelve el propio programa ANSYS Fluent [26].

- **Radiación incidente:** Indica la energía de radiación total en W/m², que llega a un punto, superficie o volumen. La radiación incidente es calculada por la siguiente ecuación:

$$G = \int_{\Omega=4\pi} I \cdot d\Omega \quad (4)$$

Donde I es la intensidad de radiación y Ω los ángulos sólidos considerados por el modelo DO. Estos conceptos serán explicados más adelante, en el apartado de la resolución del campo de la radiación.

- **Flujo de radiación neto:** es el caudal de transferencia de radiación, medido en W, a través de una superficie de control. Valores negativos indican que sale más radiación que entra, y viceversa cuando los valores son positivos.

Para determinar cuál es el mallado óptimo, se han estudiado diferentes niveles de complejidad, en los que varía la longitud máxima de la celda, y, por lo tanto, el número de celdas de la malla. Cuanto mayor sea el número de celdas, más certera será la resolución, pero, por otro lado, será más complejo de resolver. Es por ello que la malla óptima será aquella que sea más simple pero que cuyos resultados no varían si se aumenta la complejidad de la malla.

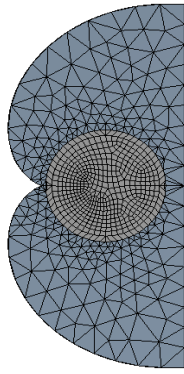


Figura 8: Malla 1
Longitud máx: 0.006
N° celdas: 235940

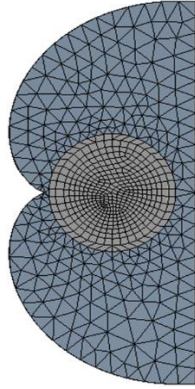


Figura 9: Malla 2
Longitud máx: 0.004
N° celdas: 413483

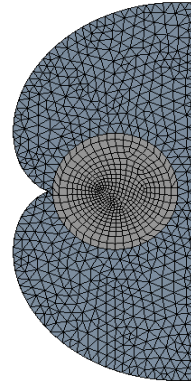


Figura 10: Malla 3
Longitud máx: 0.002
N° celdas: 585556

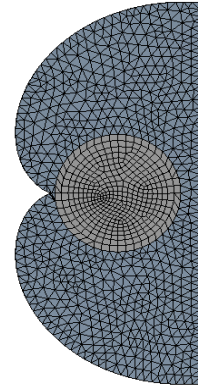


Figura 11: Malla 4
Longitud máx: 0.0019
N° celdas: 634149

Las Figuras 8-11 muestran el aspecto de las celdas cuando se varía la longitud máxima permitida para las celdas, y, por lo tanto, el número de celdas totales. Debido a la complejidad de la geometría de dicho colector, el número de celdas fue elevado, ya que para realizar un correcto mallado de las superficies cóncavas, las celdas deben ser pequeñas para que sea posible su ajuste en las zonas más angulosas de la superficie reflectora. El mallado mediante celdas triangulares facilita dicho ajuste, mientras que en la tubería cilíndrica ajusta de mejor forma que las superficies de las celdas sean paralelogramos.

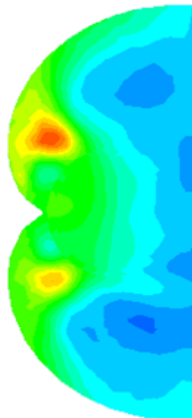
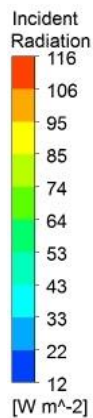


Figura 12: Malla 1
Longitud máx: 0.006
N° celdas: 235940

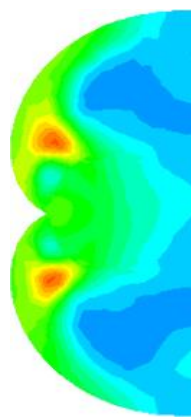


Figura 13: Malla 2
Longitud máx: 0.004
N° celdas: 413483

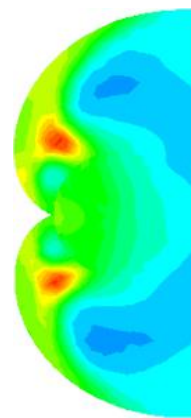


Figura 14: Malla 3
Longitud máx: 0.002
N° celdas: 585556

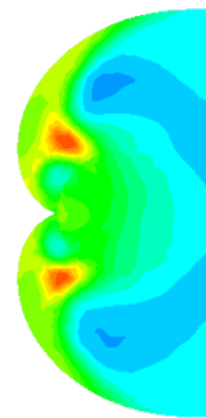


Figura 15: Malla 4
Longitud máx: 0.0019
N° celdas: 634149

En las Figuras 12-15 es posible apreciar que a medida que el número de celdas aumenta, el mapa de colores respecto al eje "y" se vuelve más simétrico, pudiendo considerar simétricos las mallas 3 y 4.

Mediante los valores de flujo de radiación incidente y radiación neto para cada malla, se estudió a partir de qué valor dicho valor no fluctúa, lo que indicó que, aunque se aumente la complejidad de la malla el error de medida no disminuye.

El valor de radiación incidente fue medido en todo el volumen de tubería, mientras que el flujo de radiación neto es la suma de todas las superficies externas del colector, por lo que, cumpliendo el balance de energía, el valor de flujo de radiación neto debe ser igual a 0.

Los valores obtenidos se muestran la Tabla 3.

Tabla 3: Valores obtenidos para la discretización del mallado

Malla	Número de celdas	Radiación incidente (W/m ²)	Flujo de radiación neto (W)
1	235940	50.39	-1.46·10 ⁻⁵
2	413483	50.48	-5.83·10 ⁻⁶
3	585556	50.57	7.06·10 ⁻⁶
4	634149	50.32	1.68·10 ⁻⁵

En la tabla 3 es posible comprobar que el valor de radiación incidente en todos los casos casi no varía, incluso fluctúa. Por otro lado, el flujo de radiación neto para todos los casos es aproximadamente igual a cero, siendo las mallas 2 y 3 las que tienen un error más bajo, del orden de 10⁻⁶.

Por lo tanto, considerando que las mallas 3 y 4 tienen un perfil simétrico de radiación y que las mallas 2 y 3 son las que tienen un error más bajo en el cálculo del flujo de radiación neto, se ha seleccionado la malla 3 como la óptima, la cual dispone de 585.556 celdas.

4.1.3. Modelado y validación de la distribución de la radiación

Modelo de resolución

El cálculo del campo de la radiación requiere de la resolución de la ecuación de transferencia de radiación (RTE) [26]:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (\kappa + \sigma_s) \cdot I(\vec{r}, \vec{s}) = \kappa \cdot n^2 \cdot \frac{\sigma \cdot T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \cdot \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \cdot \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (5)$$

Esta ecuación describe el transporte de los fotones considerando la dispersión y la absorción del medio, en la que \vec{r} es el vector de posición, \vec{s} el vector de la dirección, I la intensidad de radiación (dependiente de la posición y la dirección), κ el coeficiente de absorción, σ_s el coeficiente de dispersión, n el índice de refracción, \vec{s}' el vector de dirección del dispersión, s la longitud de la trayectoria, Φ función de la fase y Ω' el ángulo sólido.

En el caso de la simulación del proceso SODIS, únicamente las bacterias que hay en el agua infectada absorben y dispersan luz, pero se encuentran en una concentración tan baja que la absorción y la dispersión de radiación producidas por éstas pueden ser despreciadas, por lo que no fue necesaria la incorporación de una función de fase que predijera las direcciones de dispersión y solo fue necesario introducir una única banda de radiación. En cambio, el valor del coeficiente de absorción de las diferentes enzimas de la célula que absorben radiación UV jugará un papel muy importante en la velocidad de desinfección, lo cual se explicará detalladamente en el apartado de la simulación de la reacción química.

La resolución numérica de esta ecuación fue llevada a cabo mediante el Método de Ordenadas Discretas (*Discrete Ordinate Method, DOM*). Este método realiza una discretización angular la cual divide las direcciones del espacio en ángulos sólidos, y resuelve la intensidad de radiación para cada una de esas direcciones en cada celda de la malla. Para la selección de la discretización angular se siguió el mismo procedimiento que en la selección del número mínimo de celdas de la malla. En la Tabla 4, se muestran los resultados:

Tabla 4: Valores obtenidos para la discretización del ángulo sólido

Discretización	Radiación incidente (W/m ²)	Flujo de radiación neto (W)
5x5	50.52	8.66·10 ⁻⁵
10x10	49.69	3.39·10 ⁻⁵
15x15	50.57	7.06·10 ⁻⁶
20x20	50.38	8.90·10 ⁻⁶

El valor de radiación incidente sobre la tubería apenas varió con la discretización de los ángulos sólidos, por lo que se seleccionó una discretización de 15x15, valor suficientemente alto para la obtención de resultados precisos según la guía de ANSYS Fluent y que conduce al error más bajo.

Dentro de las simulaciones con el modelo DO, se tienen en cuenta las emisiones debidas al cuerpo negro descritas en la ley de Stefan-Boltzmann, y que sigue la siguiente ecuación:

$$Q_{rad} = \sigma \cdot T^4 \quad (6)$$

Siendo σ la constante de Stefan-Boltzmann ($5.669 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$), T la temperatura del cuerpo emisor (K) y Q_{rad} el caudal de radiación (W/m^2).

Debido a la ley de Stefan-Boltzmann, en el modelado de la radiación dentro del reactor se ha introducido un valor fijo de temperatura en el medio de 1 K, lo que anula este término de radiación. En cambio, en la parte de la simulación para la resolución de la fluidodinámica, se introdujo como condición de contorno la temperatura del fluido, si el modelo cinético lo requiere, para que este valor pueda ser tomado en la resolución de la reacción química.

Resultados

El campo de la radiación fue simulado para diferentes valores de emisión de radiación desde el área colectora del CPC. El reactor se encuentra enfrentado a la lámpara emisora por lo que se supone que los rayos de luz llegan de forma perpendicular al área colectora del CPC. En la Figura 16 se muestran dos distribuciones de radiación en el interior del CPC para unos valores de emisión desde el área de captación de $10 \text{ W}/\text{m}^2$ y $20 \text{ W}/\text{m}^2$. Como se puede observar, la radiación es simétrica respecto al eje "Y" y los puntos con mayor concentración de radiación coinciden, siendo, lógicamente, mayores en el caso de $20 \text{ W}/\text{m}^2$.

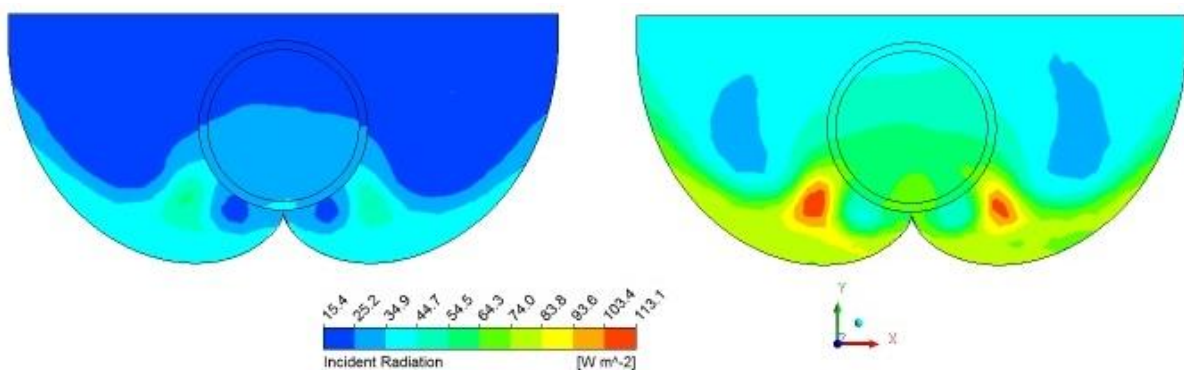


Figura 16: Radiación incidente en el plano transversal del reactor para una emisión de radiación del área colectora de $10 \text{ W}/\text{m}^2$ y $20 \text{ W}/\text{m}^2$.

Validación

- Comparación con resultados bibliográficos

Con el fin de validar las simulaciones del campo de la radiación, se comparó la distribución de la radiación en un plano central transversal del CPC con la distribución teórica mostrada por Robert y Malato [27] que describen el perfil de la radiación en un reactor tubular acoplado con un CPC cuando la radiación llega de forma perpendicular al área de captación y cuando llega con una inclinación de 35°. Utilizando el reactor del laboratorio dibujado en ANSYS, ambas simulaciones fueron llevadas a cabo con una emisión de 20 W/m² de radiación UV y fueron comparadas con la distribución teórica bibliográfica.

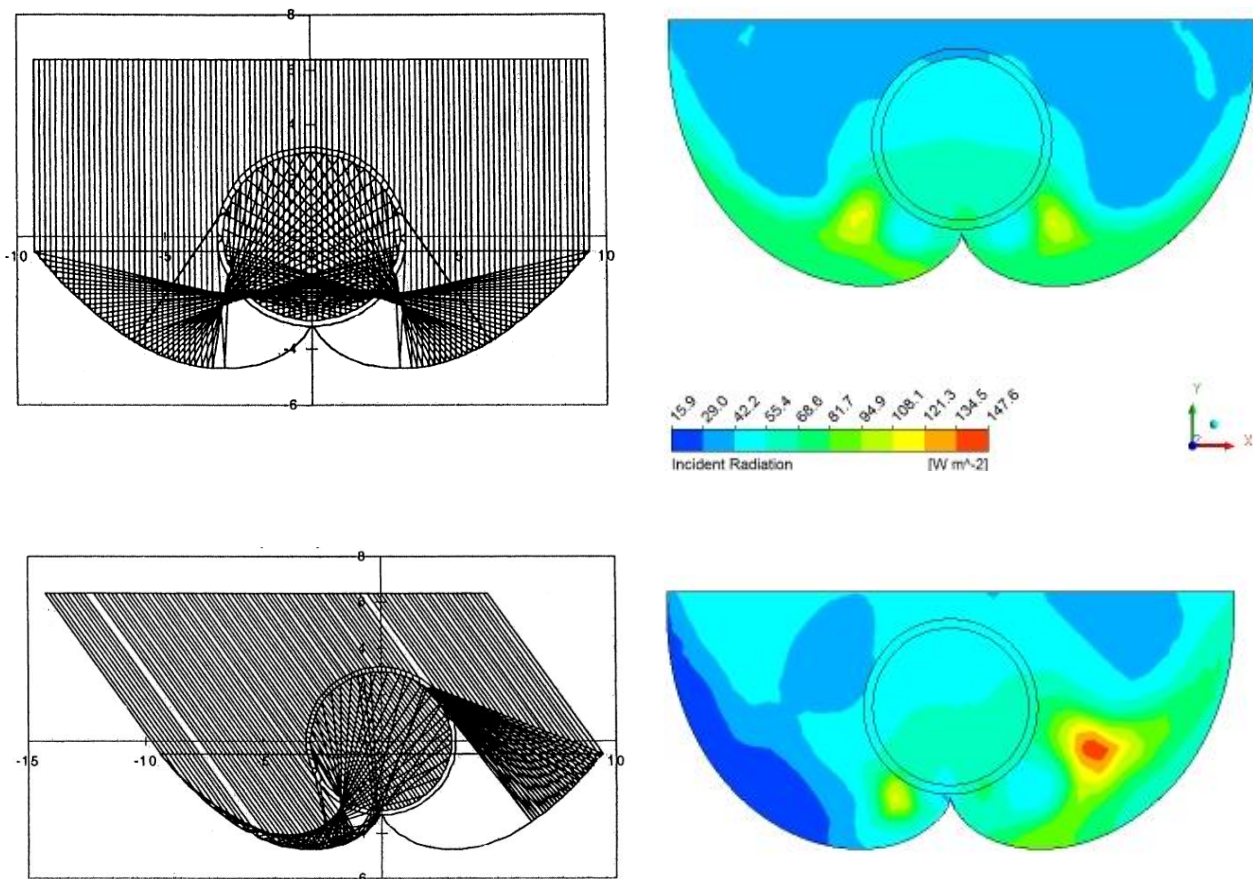


Figura 17: Distribución de la radiación teórica y simulada para una inclinación de 0° (perpendicular) y 35°.

Como se puede comprobar visualmente en la Figura 17, el mapa de colores de las simulaciones muestra que las zonas con máxima disponibilidad de radiación (zonas amarillas y rojas) coinciden con las zonas teóricas donde existe mayor radiación incidente (zonas donde las rectas se amontonan).

- Actinometrías

El CPC tiene la función de coleccionar la radiación que le llega y redirigirla al tubo central, aumentando así la radiación disponible en la tubería o reactor. Para conocer la radiación

disponible en el reactor se llevaron a cabo actinometrías para tres valores de emisión de radiación de la lámpara xenón. Estas actinometrías fueron llevadas a cabo con ferrioxalato de potasio según el procedimiento descrito por Mialocq y col. [28].

Por otro lado, la radiación incidente disponible en el reactor para las mismas intensidades de emisión de la lámpara, fueron obtenidas a partir de las simulaciones en ANSYS. El valor de la radiación incidente dentro del reactor no es homogéneo, por lo que se calculó una media volumétrica de este valor.

En la Tabla 5 se muestran los resultados de radiación disponible en el reactor para las simulaciones y los resultados de las actinometrías.

Tabla 5: Radiación disponible en el reactor calculada mediante experimentos y mediante simulaciones

Emisión lámpara (W/m ²)	Radiación reactor (W/m ²)	
	Actinometrías	ANSYS
14.9	40.05	42.55
18.6	50.10	50.42
22.1	59.40	57.78

Estos datos, se ven representados en la Figura 18:

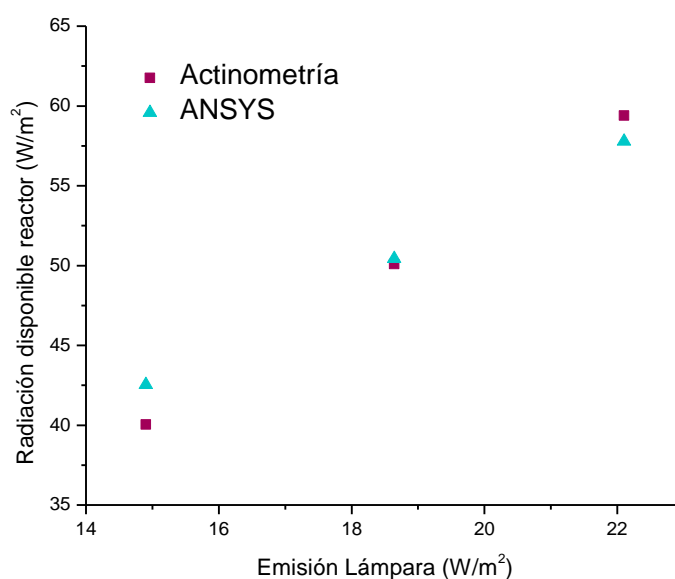


Figura 18: Radiación incidente disponible en el reactor

Como se puede observar los datos de radiación disponible obtenidos experimentalmente mediante actinometrías y los datos obtenidos mediante las simulaciones en ANSYS son muy similares. Junto con la comparación anterior del perfil de la distribución de la radiación en el interior del CPC, se puede concluir que la simulación del campo de la radiación es correcta, y que ha sido validada de dos maneras diferentes.

4.1.4. Modelado y validación de la fluidodinámica

Modelo de resolución

El campo de la fluidodinámica fue resuelto mediante la ecuación de continuidad y la ecuación de Navier-Stokes para régimen estacionario.

$$\nabla(\rho\bar{v})=0 \quad (7)$$

$$\rho \nabla \cdot (\rho\bar{v}\bar{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho\bar{g} \quad (8)$$

donde ρ , \bar{v} , P , $\bar{\tau}$ y \bar{g} son la densidad del fluido, el vector de velocidad, presión, tensor de esfuerzos viscosos y aceleración de la gravedad, respectivamente.

El régimen se determinó como turbulento (número de Reynolds igual a 10140). Dicho régimen fue resuelto mediante el modelo estándar k- ϵ , el cual es un modelo semi-empírico derivado de la anterior ecuación de Navier-Stokes. Típicamente, el modelo estándar k- ϵ se aplica para regímenes completamente turbulentos y se define mediante las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (10)$$

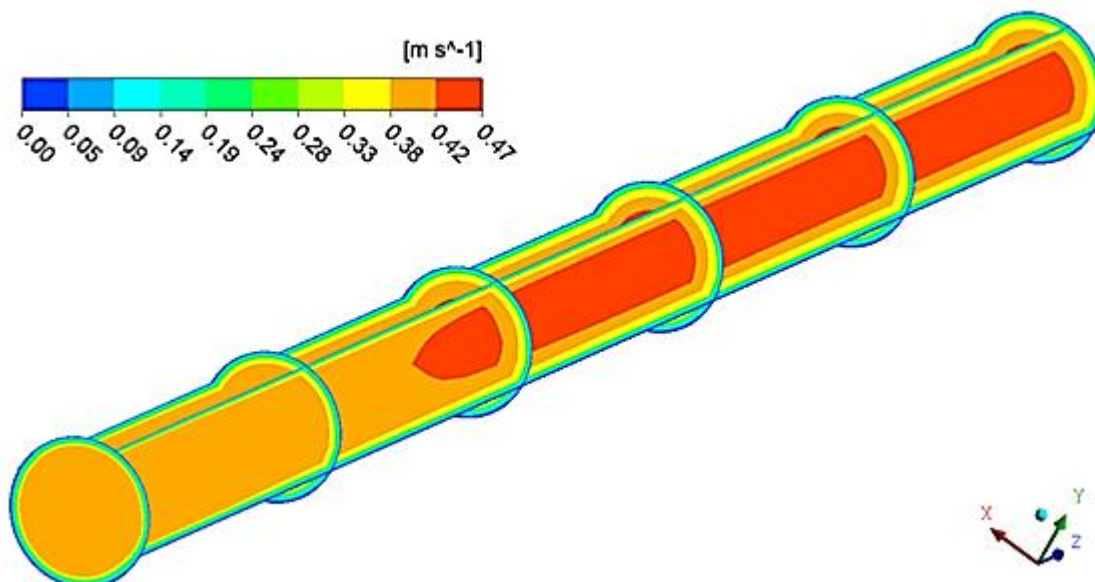
Estas expresiones calculan la energía cinética de turbulencia (k) y su disipación (ϵ). G_k es la generación de turbulencia cinética debida a los gradientes de velocidad, G_b es la generación de turbulencia a partir de la flotabilidad, ρ la densidad, Y_M la contribución de la variación de la turbulencia, $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, $C_{3\epsilon}$, S_k y S_ϵ constantes obtenidas de bibliografía [29] y σ_ϵ y σ_k los números de Prandtl.

El nivel de turbulencia fue evaluado mediante el diámetro (d_h) y la intensidad de turbulencia (I). Este último valor puede calcularse mediante la ecuación (11). En este reactor se obtuvo una intensidad de turbulencia del 5%, la cual coincide con el típico valor recomendado para tuberías cilíndricas [30].

$$I = 0.16 \cdot Re_{d_h}^{-\frac{1}{8}} \quad (11)$$

Resultados

Para poder realizar las simulaciones completas del proceso SODIS, es necesario estudiar el flujo y la velocidad del fluido a lo largo del reactor tubular. El fluido entra desde un tanque hasta el reactor a través de una tubería, donde sufre un cambio de sección. Debido a este cambio de sección, el fluido se va desarrollando a lo largo del reactor hasta que alcanza un flujo completamente desarrollado. La Figura 19 muestra el perfil de velocidades a lo largo de la tubería desde la entrada (a la izquierda) hasta la salida (a la derecha). Además, en la parte inferior de la Figura 19, se muestra el perfil de velocidades transversales para diferentes distancias de la entrada. Dichos perfiles muestran que a medida que el fluido avanza a lo largo de la tubería, el gradiente de velocidades va aumentando y que la velocidad del fluido en el centro de la tubería cada vez es mayor.



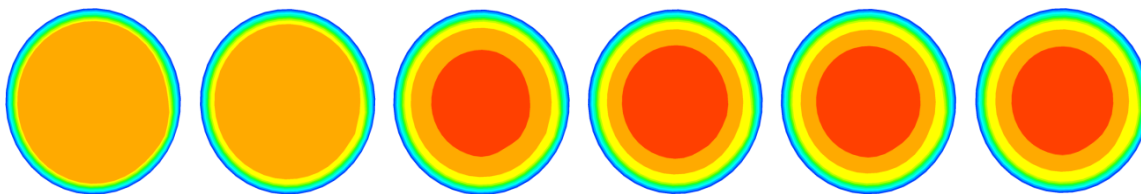


Figura 19: En la zona superior: perfil de velocidad completo en el reactor. En la zona inferior: perfiles transversales de velocidad para distancias desde la entrada (de izquierda a derecha) de: 0 cm, 7.56 cm, 15.14 cm, 22.704 cm, 30.272 cm y 38 cm

Validación

Con el fin de validar los resultados hidrodinámicos simulados, se ha comparado el perfil de velocidad al final de la tubería obtenido en la simulaciones con el perfil de velocidad teórico para regímenes turbulentos y completamente desarrollados. Dicho perfil teórico ha sido calculado a partir de las ecuaciones de Karman, las cuales se pueden encontrar en forma detallada en Costa y col. [31]. En el siguiente gráfico se puede ver representado el perfil de velocidad a lo largo del diámetro para las diferentes distancias representadas en el mapa de colores anterior. Al igual que en las imágenes, en la Figura 20 se puede observar cómo el perfil de velocidades se va redondeando y por lo tanto, el flujo desarrollándose a medida que el fluido avanza por la tubería.

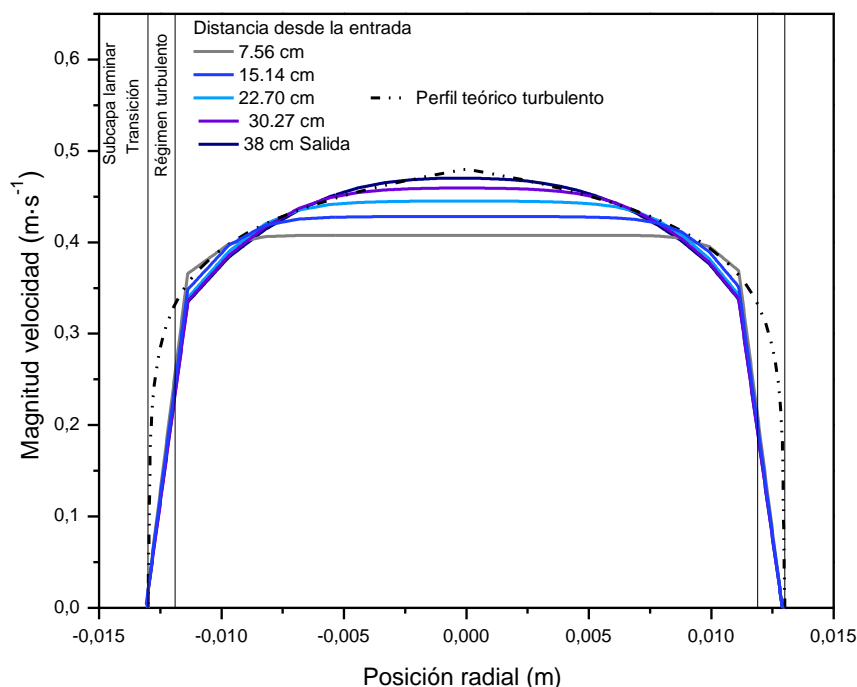


Figura 20: Perfil radial numérico de velocidades en el reactor

El perfil teórico de velocidades para flujo turbulento completamente desarrollado está representado en el gráfico con una línea discontinua. En las zonas próximas a la pared de la tubería, se pueden encontrar diferencias entre los perfiles de velocidades simulados y el teórico. Estas discrepancias son debidas a que la malla no es lo suficientemente fina para calcular puntos intermedios que convierta estas zonas de líneas rectas en líneas curvas. Aún así, la desviación con el perfil teórico puede considerarse baja, y asumirse que el efecto de esta subcapa es bajo comparado con la buena predicción de las velocidades en el núcleo de la tubería.

Por otra parte, el perfil de velocidades a la salida de la simulación es muy similar al perfil teórico calculado, por lo que se puede concluir con que el flujo ha sido completamente desarrollado para esta longitud de reactor.

Por lo tanto, existen diferencias entre el perfil teórico y el perfil simulado a la salida, pero estas diferencias pueden ser despreciadas y por lo tanto, es posible confirmar que la simulación de la fluidodinámica reproduce las condiciones experimentales en el reactor.

4.1.5. Modelado y validación del modelo SODIS en función de la radiación

Modelo de resolución

Por último, la simulación del proceso de desinfección requiere la resolución de los balances de materia de cada especie en estado no estacionario considerando la transferencia de materia por difusión y convección, así como el término de reacción química.

Para cada especie (i), la ecuación de conservación de la masa se puede expresar como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla(\rho \bar{v} Y_i) = \nabla J_i + R_i \quad (12)$$

Donde Y_i es la fracción de i en la mezcla, J_i es su flujo difusivo y R_i su velocidad de producción. El vector de velocidad \bar{v} , es obtenido a partir de los resultados del campo de la fluidodinamica, previamente cargados. El flujo por difusión se puede estimar usando la primera ley de Fick de la difusión:

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (13)$$

El coeficiente de difusión para el agua es de $2.88 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ mientras que el coeficiente de difusión para la bacteria *E. coli* es de $9.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ [32].

Al tratarse de un proceso fotoactivado, el término de reacción química debe calcularse a partir de un modelo cinético que incluya el término de absorción de la radiación. *ANSYS Fluent* solamente incorpora de forma original modelos cinéticos de reacciones termoactivadas, por lo que ha sido necesario desarrollar un código propio en el que se considere la velocidad de reacción de cada especie como función de la energía disponible en cada punto del reactor, entre otras cosas.

En la Tabla 6 se muestran las velocidades de reacción y el valor de las constantes cinéticas correspondientes obtenidas a través del modelo cinético bibliográfico [12]. (Los detalles de este modelo cinético se pueden encontrar en la referencia citada).

Tabla 6: Mecanismo de desinfección SODIS considerando la energía absorbida [12]

Reacción	Velocidad de reacción	Constantes cinéticas
Bacteria (14)	$r_B = k_{13} \cdot \frac{2 \cdot \gamma_3 [H_2O_2]}{k_6 [H_2O_2] + k_{11}} \cdot \frac{\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e_{NADH}^a}{k_3 [SOD] + k_{12}} \cdot (B)$ $CFU \text{ mL}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$k_3 = 10^9 M^{-1} s^{-1}$ $k_6 = 2.7 \cdot 10^7 M^{-1} s^{-1}$ $k_{11} = 2.04 \cdot 10^4 s^{-1}$ $k_{12} = 1.36 \cdot 10^5 s^{-1}$ $k_{13} = 8.03 \cdot 10^{15} M^{-2} s^{-1}$ $\gamma_1 = 5.4 \cdot 10^{-6} M s^{-1}$ $\gamma_2 = 1.14 \cdot 10^5 M \text{ cm}^3 \text{ Einstein}^{-1}$
H ₂ O ₂ (15)	$r_{H_2O_2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_3 [SOD] (\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e_{NADH}^a)}{k_3 [SOD] + k_{12}} \cdot \frac{\gamma_3 \cdot k_6 [H_2O_2]^2}{k_{11} + k_6 [H_2O_2] - (\gamma_3 + k_8 [CAT]) [H_2O_2]}$ $M s^{-1}$	$k_8 = 9 \cdot 10^5 M^{-1} s^{-1}$ $\gamma_3 = 1.4 \cdot 10^{-3} s^{-1}$
Enzima CAT (16)	$r_{CAT} = k_9 \cdot e_{CAT}^a \cdot [CAT]^2$ $M s^{-1}$	$k_9 = 1.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^3 \text{ Einstein}^{-1}$
Enzima SOD (17)	$r_{SOD} = k_{10} \cdot e_{SOD}^a \cdot [SOD]^2$ $M s^{-1}$	$k_{10} = 1.56 \cdot 10^6 \text{ cm}^3 \text{ Einstein}^{-1}$

La concentración inicial de bacterias (*E. coli*) determinada fue 10⁶ CFU/mL (*colony forming units*, unidades formadoras de colonia, por mililitro de disolución). El resto de concentraciones iniciales fueron obtenidas de bibliografía, y fueron 20 nM de H₂O₂ [33], 20 μM de SOD [33] y 92 μM de CAT [34],[35], referidas a moles existentes en el volumen de una bacteria.

Por otro lado, el reactor estudiado trabaja bajo recirculación y solamente fue dibujado el CPC acoplado al reactor en ANSYS, por lo que solamente el volumen del reactor fue considerado, ya que únicamente la parte del volumen total que es iluminado (el 20%) es la que reacciona. Sin embargo, debe introducirse en el programa un código de dilución que considere el 80% de volumen que se encuentra en cada instante en oscuridad, es decir, que relacione el valor de salida de cada especie con el valor de entrada en el reactor después de pasar por el tanque en oscuridad donde se diluye. Para ello se ha empleado la siguiente ecuación:

$$Y_i = \frac{Y_{i_out} \cdot \Delta t + \tau \cdot Y_{i_in}}{\Delta t + \tau} \quad (18)$$

donde Y_i es la fracción en la entrada de cada especie cada paso de tiempo en el tanque, τ es el tiempo espacial en el depósito reservorio y Δt es el intervalo de tiempo de cálculo en la simulación (1 s). El tiempo espacial (τ), es el tiempo que pasa el fluido en oscuro.

Resultados

Para una concentración inicial de *E. coli* de 10^6 CFU/mL, se realizaron diferentes simulaciones para diferentes intensidades de la fuente de radiación con espectro solar.

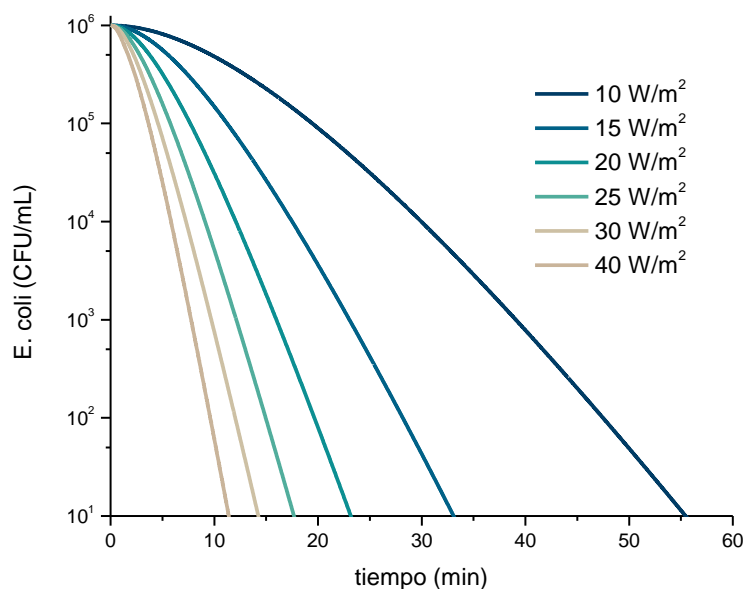


Figura 21: Simulaciones del proceso SODIS considerando diferentes intensidades de radiación

Como se puede observar en la Figura 21, a medida que la intensidad de radiación aumenta, la desinfección es más efectiva. Es posible apreciar, que el aumento de la velocidad de desinfección en el rango de intensidades de 10 W/m^2 a 20 W/m^2 es mayor que de 20 W/m^2 a 40 W/m^2 , tal y como reproduce el modelo obtenido bibliográficamente [12].

Validación

Con el fin de validar el proceso SODIS, se realizaron experimentos a diferentes intensidades de radiación o concentraciones de bacteria iniciales en el CPC de la planta piloto. Los experimentos fueron llevados a cabo de dos formas diferentes, la primera utilizando la lámpara xenón que reproduce el espectro solar y que iluminaba el CPC, y la segunda utilizando el sol como fuente de iluminación del CPC.

En el primer caso, se realizaron tres experimentos considerando 3 intensidades de radiación de la lámpara xenón de 15 W/m^2 , 20 W/m^2 y 25 W/m^2 . Por otro lado, se realizaron en la simulación desarrollada los mismos experimentos en las mismas condiciones. Por otro lado, se realizaron experimentos con diferentes concentraciones inicial de bacteria bajo radiación solar. La radiación solar media fue de unos 20 W/m^2 . A pesar de que se realizase en un día soleado, la radiación solar varía durante el tiempo de reacción, es por ello, que la desinfección se representa en función de la dosis de radiación UV que recibe el reactor y no en función del tiempo. Sin embargo, por simplificaciones en el tiempo y métodos de resolución en ANSYS, las simulaciones se realizaron para una radiación constante de 20 W/m^2 . Ambos resultados se comparan en las Figuras 22 y 23.

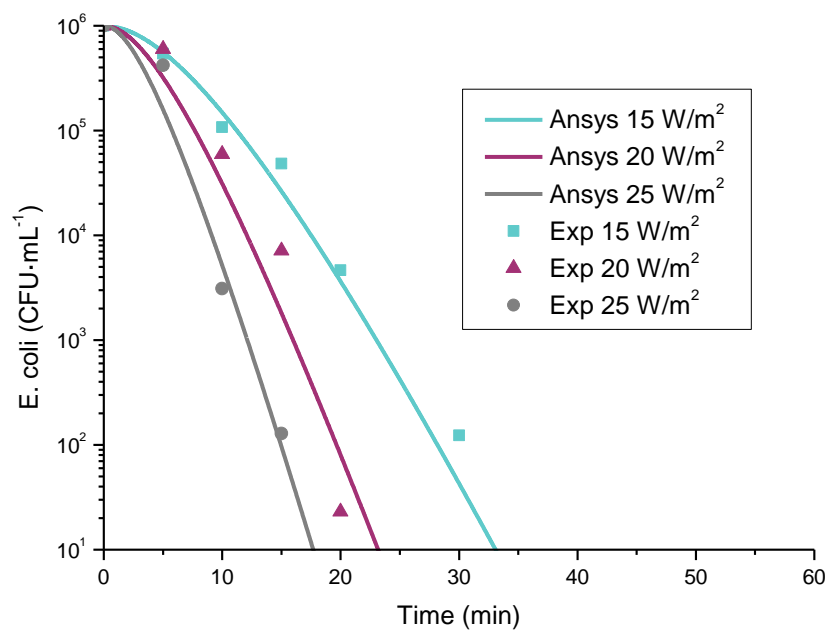


Figura 22: Simulaciones y experimentos realizados con la lámpara xenón

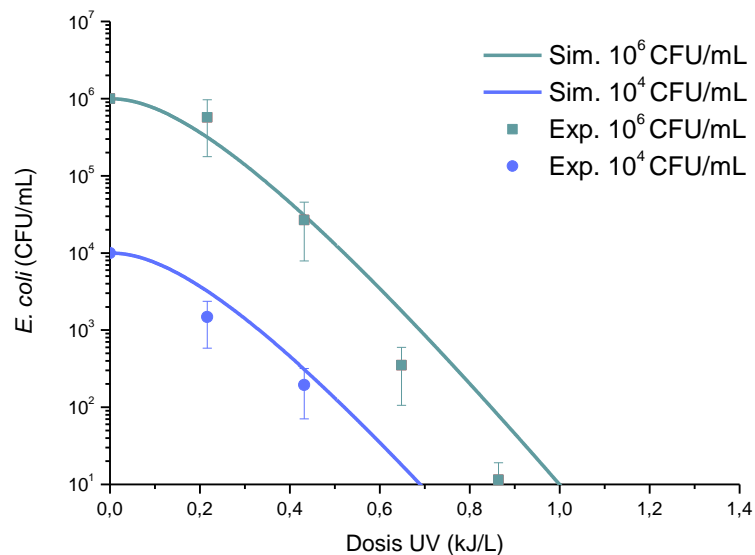


Figura 23: Simulaciones y experimentos realizados bajo luz sola

Los gráficos anteriores muestran que las simulaciones reproducen correctamente los ensayos en la planta piloto, tanto en condiciones de radiación solar simulada con la lámpara xenón, tanto en condiciones solares naturales. Es por ello, que se puede concluir con que el mecanismo de simulación del proceso SODIS desarrollado, considerando el modelado del campo de la radiación solar, de la fluidodinámica y de la reacción química considerando la radiación como variable principal del proceso SODIS, ha resultado ser exitoso.

4.2. Modelado del proceso SODIS en CPC en función del efecto sinérgico de la radiación y de la temperatura.

4.2.1. Modelado de la radiación, fluidodinámica y temperatura

Para este modelo cinético, se utilizó la misma geometría que en las simulaciones anteriores ya que el reactor es el mismo. Además, las simulaciones que predijeron la distribución de radiación en el interior del CPC y la fluidodinámica por el reactor tubular también fueron las mismas. Únicamente, se ha añadido en la resolución del campo del movimiento del fluido por el reactor tubular unas condiciones de contorno en las que se indique la temperatura del fluido, mediante la activación de las ecuaciones de energía junto con las de la hidrodinámica. Al igual que en el caso anterior, estos dos campos se resolvieron en estado estacionario, por lo que la distribución de radiación, la fluidodinámica y la temperatura del fluido fueron constantes con el tiempo. Estos resultados obtenidos de forma independiente se cargaron para la resolución del modelo cinético que necesita la velocidad del fluido, la temperatura del fluido y la radiación disponible en cada celda de la malla para su resolución.

4.2.2. Modelado y validación del proceso SODIS en función del efecto sinérgico de radiación y temperatura

Modelo de resolución

Al igual que en el modelo anterior, la simulación del proceso de desinfección requiere la resolución de los balances de materia de cada especie en estado no estacionario considerando la transferencia de materia por difusión y convección, así como el término de reacción química. Las ecuaciones que se utilizan para su cálculo son las mismas que en las simulaciones del modelo anterior. Sin embargo, el modelo cinético que se resuelve a partir de código propio es diferente. En este caso, se tiene en cuenta tanto la radiación incidente como la temperatura que alcanza el agua infectada, pero no considera ambas variables de forma independiente, sino que lo hace de manera sinérgica, siendo el efecto de ambas variables cuando actúan juntas más efectivo que la suma del efecto de cada una por separado.

Las ecuaciones cinéticas del nuevo modelo introducido son una ampliación y mejora del modelo cinético que sólo consideraba la variable radiación. Este modelo cinético fue obtenido de bibliografía [13]. En la Tabla 7 se muestran las velocidades de reacción y el valor de las constantes cinéticas. (Los detalles de este modelo cinético se pueden encontrar en la referencia citada).

Tabla 7: Mecanismo de desinfección SODIS considerando la energía absorbida y la temperatura [13].

Reacción	Velocidad de reacción	Constantes cinéticas
Bacteria (19)	$r_B = \left(k_{13} \cdot \frac{2 \cdot \gamma_3 [H_2O_2]}{k_6 [H_2O_2] + k_{11}} \cdot \frac{\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e_{NADH}^a}{k_3 [SOD] + k_{12}} + k_{14} \right) \cdot (B)$ $CFU \text{ mL}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$k_3 = 10^9 M^{-1} s^{-1}$ $k_6 = 2.7 \cdot 10^7 M^{-1} s^{-1}$ $k_{11} = 2.04 \cdot 10^4 s^{-1}$ $k_{12} = 1.36 \cdot 10^5 s^{-1}$ $k_{13} = 8.03 \cdot 10^{15} M^{-2} s^{-1}$ $k_{14} = A_{14} \cdot \exp\left(-\frac{Ea_{14}}{R \cdot T}\right)$ $A_{14} = 1.30 \cdot 10^{34} s^{-1}$ $Ea_{14} = 2.26 \cdot 10^5 J \cdot mol^{-1}$ $\gamma_1 = \delta_1 \cdot \exp\left(-\frac{Ea_1}{R \cdot T}\right)$ $\delta_1 = 8.53 \cdot 10^{-4} M s^{-1}$ $Ea_1 = 1.3 \cdot 10^4 J \cdot mol^{-1}$ $\gamma_2 = \delta_2 \cdot \exp\left(-\frac{Ea_2}{R \cdot T}\right)$ $\delta_2 = 1.91 \cdot 10^6 \text{ cm}^3 \cdot Einstein^{-1}$ $Ea_2 = 3.76 \cdot 10^3 J \cdot mol^{-1}$

H_2O_2 (20)	$r_{H_2O_2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{k_3[SOD](\gamma_1 + \gamma_2 \cdot e_{NADH}^a)}{k_3[SOD] + k_{12}} \cdot \frac{\gamma_3 \cdot k_6[H_2O_2]^2}{- (\gamma_3 + k_8[CAT])[H_2O_2]}$ $M s^{-1}$	$k_8 = 9 \cdot 10^5 M^{-1} s^{-1}$ $\gamma_3 = \delta_3 \cdot \exp\left(-\frac{Ea_4}{R \cdot T}\right)$ $\delta_3 = 3.84 \cdot 10^4 s^{-1}$ $Ea_4 = 4.68 \cdot 10^4 J \cdot mol^{-1}$
Enzima CAT (21)	$r_{CAT} = k_9 \cdot e_{CAT}^a \cdot [CAT]^2$ $M s^{-1}$	$k_9 = A_9 \cdot \exp\left(-\frac{Ea_9}{R \cdot T}\right)$ $A_9 = 9.05 \cdot 10^{16} cm^3 Eisntein^{-1}$ $Ea_9 = 5.31 \cdot 10^4 s^{-1}$
Enzima SOD (22)	$r_{SOD} = k_{10} \cdot e_{SOD}^a \cdot [SOD]^2$ $M s^{-1}$	$k_{10} = 1.56 \cdot 10^6 cm^3 Eisntein^{-1}$

Por último, se introdujo un código propio que calculó el factor de dilución del fluido cuando sale del reactor y pasa por el depósito antes de volver a entrar recirculado en el reactor, de la misma manera que en el caso anterior.

Resultados

Se llevaron a cabo 6 simulaciones en total. Tres de ellas a una radiación de fuente emisora de $11 W/m^2$, lo que corresponde a una radiación media disponible en el reactor tubular de $30 W/m^2$ aproximadamente, y otras tres de ellas a una radiación de la fuente emisora de $18 W/m^2$, es decir, una radiación media en el reactor de unos $50 W/m^2$.

Para cada radiación, las simulaciones se llevaron a cabo a tres temperaturas diferentes: $30^\circ C$, $40^\circ C$ y $50^\circ C$. Los resultados se muestran en la Figura 24.

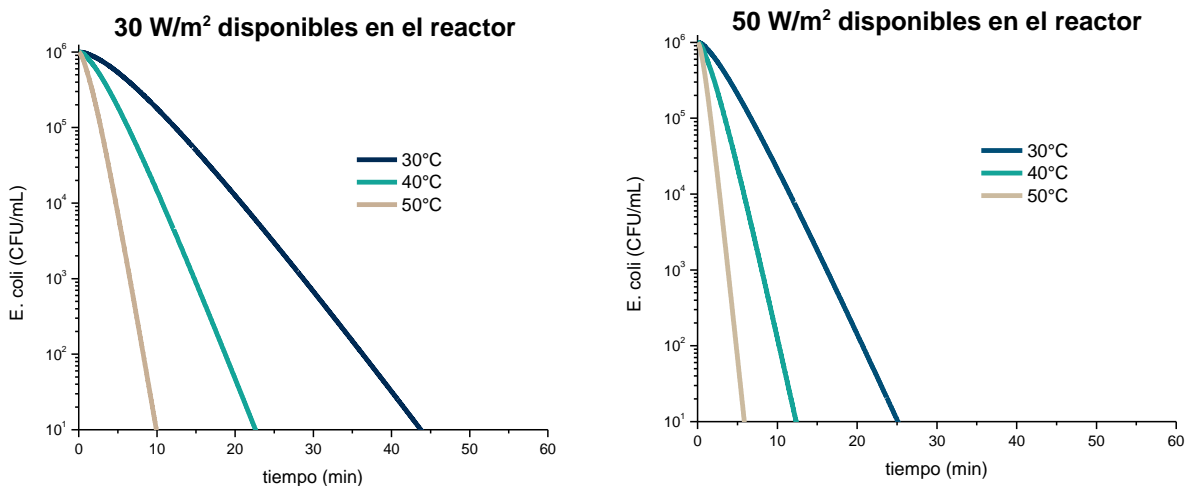


Figura 24: Resultados de las simulaciones del modelo SODIS que considera la variable radiación y temperatura

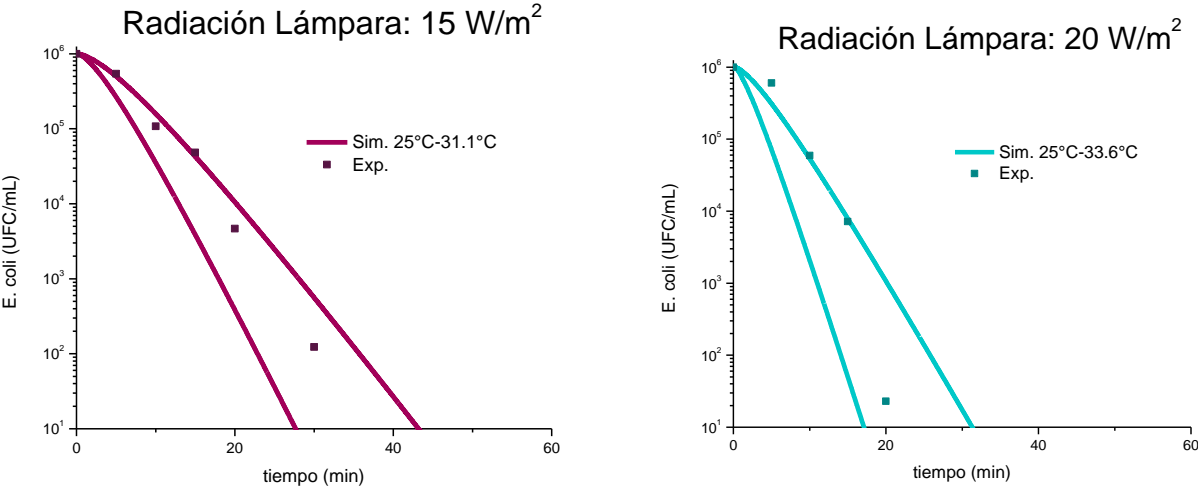
En los dos gráficos de la Figura 24 se puede ver cómo al aumentar la temperatura la desinfección se produce de forma más rápida y si comparamos el tiempo de desinfección para

diferentes radiaciones pero la misma temperatura, se puede observar que se necesita mayor tiempo en el caso de la emisión de radiación más baja, como cabía esperar.

Sin embargo, para confirmar que las simulaciones reproducen perfectamente las condiciones reales, es necesario comparar los resultados de las simulaciones con resultados de experimentos realizados en la planta piloto.

Validación

Para la validación de las simulaciones con este modelo cinético SODIS, se han escogido los experimentos realizados con la lámpara xenón como fuente de luz, en los que se midió la temperatura a medida que se realizaba el experimento. Estos experimentos son tres, realizados a una intensidad de radiación de 15 W/m², 20 W/m² y 25 W/m². Se pudo apreciar, que todos los experimentos empezaban con una temperatura ambiente de 25 °C, pero que a medida que transcurría el tiempo, la temperatura del fluido aumentaba de manera más rápida en los experimentos que tenían mayor radiación. Sin embargo, el modelado de las simulaciones sólo puede considerar una temperatura constante con el tiempo, por lo que se realizaron las simulaciones a la temperatura más alta y más baja que se alcanzó en cada experimento. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 25.



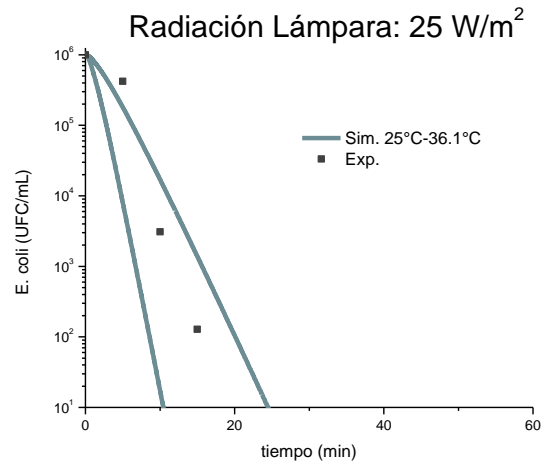


Figura 25: Validación de las simulaciones del proceso SODIS que considera las variables radiación y temperatura

En las gráficas de la Figura 25 se puede comprobar que los puntos se encuentran dentro del rango comprendido entre las dos temperaturas, que al comienzo de la reacción los puntos experimentales se aproximan más a la curva de la temperatura más baja y a medida que transcurre la reacción los puntos se van aproximando a la curva de la temperatura más alta. Es posible verificar el modelo mediante estos experimentos, aunque como paso futuro, se propone la resolución de la temperatura del fluido de forma transitoria. Esta forma de simulación supondrá una aproximación más real de las simulaciones a los experimentos reales, aunque conlleve la resolución de las ecuaciones de fluidodinámica y de energía en cada paso de tiempo (1 s), lo que dará lugar a un gran aumento de la capacidad computacional requerida del ordenador y un aumento en el tiempo de resolución.

5. Conclusiones

Los modelos de simulación desarrollados han mostrado ser capaces de reproducir de forma precisa las reacciones de desinfección solar realizadas en el reactor tubular acoplado a un colector parabólico compuesto.

Por un lado, el modelo SODIS que únicamente considera la variable de la intensidad de radiación, muestra una gran precisión a la hora de reproducir los experimentos realizados bajo condiciones de luz solar simulada mediante una lámpara xenón y bajo luz solar natural. Los experimentos se realizaron en una franja de temperaturas concreta (en torno a los 25 °C-30 °C) en la que dicha variable no altera en gran medida al proceso de desinfección. Sin embargo, si las condiciones de temperatura dentro del reactor fuesen más extremas (en torno a los 40° C-50° C), como lo son en los países en los que se quiere implantar dicha tecnología, el modelo no ajustaría correctamente a los experimentos realizados.

Como consecuencia, se desarrolló un modelo de simulación utilizando un modelo cinético que considerase tanto la intensidad de radiación como la temperatura como variables de la velocidad de desinfección. Este modelo de simulación también ha mostrado ser correcto a la hora de simular el proceso de desinfección, aunque el resultado de las simulaciones muestre una región de desinfección comprendida entre la temperatura mínima y máxima del experimento, y no sea tan exacto como el modelo anterior, en el que el resultado de la simulación del proceso de desinfección se mostraba en una única curva.

Debido a esta limitación, se plantea como paso futuro el desarrollo de un modelo de simulación en régimen dinámico que considere este último modelo cinético del proceso SODIS, pero que el valor de la temperatura del fluido vaya cambiando a medida que transcurre el tiempo de reacción, aunque suponga un mayor coste computacional para la resolución de las ecuaciones del modelo de la simulación.

6. Bibliografía

- [1] Naciones Unidas (UN), *Declaración Universal de Derechos Humanos*. 1948.
- [2] Naciones Unidas (UN), *The Millennium Development Goals*. 2000.
- [3] Naciones Unidas (UN), *Resolución 64/292*. 2010.
- [4] WHO/UNICEF, “2015 Update and MDG Assessment,” 2015.
- [5] U. S. F. Corporation, “Water Scarcity through 2020,” 1998. [Online]. Available: <http://www.sciperio.com/watertech/water-problem.asp>.
- [6] SolarGIS, “Maps of Global horizontal irradiation,” 2016. [Online]. Available: <http://solargis.info/doc/free-solar-radiation-maps-GHI>.
- [7] Sandec y Eawag., *Desinfección Solar del Agua. Guía de aplicación*. 2003.
- [8] K. G. McGuigan, R. M. Conroy, H.-J. Mosler, M. du Preez, E. Ubomba-Jaswa, y P. Fernandez-Ibañez, “Solar water disinfection (SODIS): A review from bench-top to roof-top,” *J. Hazard. Mater.*, vol. 235, pp. 29–46, 2012.
- [9] I. Salgado-Tránsito, A. E. Jiménez-González, M. L. Ramón-García, C. A. Pineda-Arellano, y C. A. Estrada-Gasca, “Design of a novel CPC collector for the photodegradation of carbaryl pesticides as a function of the solar concentration ratio,” *Sol. Energy*, vol. 115, pp. 537–551, 2015.
- [10] L. Saravia, “Diseño gráfico de concentradores tipo CP,” *Energías Renov. Medio Ambient.*, vol. 8, no. 8, pp. 25–30, 2004.
- [11] R. M. Tyrrell y S. M. Keyse, “New trends in photobiology the interaction of UVA radiation with cultured cells,” *J. Photochem. Photobiol. B Biol.*, vol. 4, no. 4, pp. 349–361, 1990.
- [12] M. Castro-Alfárez, M. I. Polo-López, J. Marugán, y P. Fernández-Ibañez, “Mechanistic model of the Escherichia coli inactivation by solar disinfection based on the photo-generation of internal ROS and the photo-inactivation of enzymes: CAT and SOD,” *Chem. Eng. J.*, vol. 318, pp. 214–223, 2017.
- [13] M. Castro-Alfárez, M. I. Polo-López, J. Marugán, y P. Fernández-Ibañez, “Mechanistic modeling of UV and mild-heat synergistic effect on solar water disinfection,” *Chem. Eng. J.*, vol. 316, pp. 111–120, 2017.
- [14] “Solar disinfection is an augmentable, in situ-generated photo-Fenton reaction—Part 1: A review of the mechanisms and the fundamental aspects of the process,” *Appl. Catal. B Environ.*, vol. 199, pp. 199–223, 2016.

- [15] E. Ubomba-Jaswa, C. Navntoft, M. Polo-López, P. Fernandez-Ibanez, y K. Mcguigan, "Solar disinfection of drinking water (SODIS): An investigation of the effect of UV-A dose inactivation efficiency," *Photochem. Photobiol. Sci.*, vol. 8, no. 5, pp. 587–595, 2009.
- [16] McGuigan, Joyce, Conroy, Gillespie, y Elmore-Meegan, "Solar disinfection of drinking water contained in transparent plastic bottles : characterizing the bacterial inactivation process," *J. Appl. Microbiol.*, vol. 84, no. 6, pp. 1138–1148, 1998.
- [17] O. K. Dalrymple, E. Stefanakos, M. A. Trotz, y D. Y. Goswami, "A review of the mechanisms and modeling of photocatalytic disinfection," *Appl. Catal. B Environ.*, vol. 98, no. 1, pp. 27–38, 2010.
- [18] M. A. Shannon, P. W. Bohn, M. Elimelech, J. G. Georgiadis, B. J. Marinas, y A. M. Mayes, "Science and technology for water purification in the coming decades," *Nature*, vol. 452, no. 7185, pp. 301–310, 2008.
- [19] B. A. Wols, J. A. M. H. Hofman, W. S. J. Uijttewaal, L. C. Rietveld, y J. C. van Dijk, "Evaluation of different disinfection calculation methods using CFD," *Environ. Model. Softw.*, vol. 25, no. 4, pp. 573–582, 2010.
- [20] A. Angeloudis, T. Stoesser, y R. A. Falconer, "Predicting the disinfection efficiency range in chlorine contact tanks through a CFD-based approach," *Water Res.*, vol. 60, pp. 118–129, 2014.
- [21] J. Chen, B. Deng, y C. N. Kim, "Computational fluid dynamics (CFD) modeling of UV disinfection in a closed-conduit reactor," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 66, no. 21, pp. 4983–4990, 2011.
- [22] T. Sultan, "Numerical study of the effects of lamp configuration and reactor wall roughness in an open channel water disinfection UV reactor," *Chemosphere*, vol. 155, pp. 170–179, 2016.
- [23] M. Antonelli, M. Francesconi, P. Di Marco, y U. Desideri, "Analysis of heat transfer in different CPC solar collectors: A CFD approach," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 101, pp. 479–489, 2016.
- [24] M. Antonelli, A. Baccioli, M. Francesconi, R. Lensi, y L. Martorano, "Analysis of a Low Concentration Solar Plant with Compound Parabolic Collectors and a Rotary Expander for Electricity Generation," *Energy Procedia*, vol. 45, pp. 170–179, 2014.
- [25] C. Reichl, F. Hengstberger, y C. Zauner, "Heat transfer mechanisms in a compound parabolic concentrator: Comparison of computational fluid dynamics simulations to particle image velocimetry and local temperature measurements," *Sol. Energy*, vol. 97, pp. 436–446, 2013.

- [26] I. Ansys, "ANSYS FLUENT Theory Guide," 2012.
- [27] D. Robert y S. Malato, "Solar photocatalysis: A clean process for water detoxification," *Sci. Total Environ.*, vol. 291, no. 1–3, pp. 85–97, 2002.
- [28] J. C. Mialocq, X. Armand, y S. Marguet, "A new sensitive chemical actinometer for time-resolved and continuous photochemistry: the DCM styrene dye," *J. Photochem. Photobiol. A Chem.*, vol. 69, no. 3, pp. 351–356, 1993.
- [29] N. C. Markatos, "The mathematical modelling of turbulent flows," *Appl. Math. Model.*, vol. 10, no. 3, pp. 190–220, 1986.
- [30] I. Ansys, "ANSYS FLUENT User's Guide," 2011.
- [31] E. Costa Novella, *Ingeniería Química. Vol 3: Flujo de Fluidos*. Alhambra U., 1985.
- [32] R. M. Ford y R. W. Harvey, "Role of chemotaxis in the transport of bacteria through saturated porous media," *Adv. Water Resour.*, vol. 30, no. 6–7, pp. 1608–1617, 2007.
- [33] J. A. Imlay, "Cellular defenses against superoxide and hydrogen peroxide," *Annu. Rev. Biochem.*, vol. 4.1-4.22, 2008.
- [34] L. C. Seaver y J. A. Imlay, "Alkyl hydroperoxide reductase is the primary scavenger of endogenous hydrogen peroxide in *Escherichia coli*," *J. Bacteriol.*, vol. 183, no. 24, pp. 7173–81, 2001.
- [35] L. C. Seaver y J. A. Imlay, "Hydrogen peroxide fluxes and compartmentalization inside growing *Escherichia coli*," *J. Bacteriol.*, vol. 183, no. 24, pp. 7182–9, 2001.