Disseny de reactors fotoquímics: Descripció dels models d'emissió de llum per a reactors anulars. Part 2: Model de font extensa

Pere Fullana-i-Palmer¹, Rita Puig-Vidal², Daniel Sanjosé³, Pere J. Celma³ ¹Escola Superior de Comerç Internacional, Universitat Pompeu Fabra. Passeig Pujades 1, 08003 Barcelona, Spain. ²Escola Universitària d'Igualada (EUETII-Escola d'Adoberia), Universitat Politècnica de Catalunya. Plaça del rei 15, 08700 Igualada, Spain. ³Departament d'Enginyeria Química, Institut Químic de Sarrià, Universitat Ramon Llull. Via Augusta 390, 08017 Barcelona, Spain.

> Photoreactors design: Light emission models description for annular reactors. Part 2: Extense source models

Diseño de reactores fotoquímicos: Descripción de los modelos de emisión para reactores anulares. Parte 2: Modelos de fuenta extensa

Recibido: 25 de febrero de 2009; aceptado: 7 de mayo de 2009

RESUMEN

En el diseño de un reactor fotoquímico es imprescindible conocer la cantidad de luz que incide sobre cualquier punto del reactor, ya que ésta influirá mucho en la velocidad de reacción. Este artículo explica (con las ecuaciones matemáticas y el soporte gráfico necesario) los modelos denominados de fuente extensa usados para calcular la distribución de luz en el interior de un reactor anular en medio homogéneo con la lámpara centrada en el eje del reactor. Se describen también nuevas variaciones de estos modelos así como se mejoran otras ya publicadas: fuente lineal, superficial o volumétrica; medio transparente o absorbente; corrección de la longitud efectiva de la lámpara; y uso de diafragmas.

Palabras clave: reactor fotoquímico, modelos de emisión de luz, reactor anular, lámpara centrada, modelos de fuente extensa, diafragma.

ABSTRACT

In the design of a photochemical reactor it is necessary to know the quantity of incident light in any point of the reactor, since it has a major influence in the kinetics of the reaction. The present paper explains the so-called extense source models (with mathematical equations and the graphical necessary support) used to calculate the light distribution inside an annular reactor in an homogeneous media when the light source is centred in the reactor axis. It describes some new variations of these models and improves others already published: linear, superficial or volumetric source; transparent or absorbent media; the alteration of the effective length of the lamp; or the use of diaphragms.

Key words: photochemical reactor, light emission models, annular reactor, centred light source, extense source models, diaphragm.

RESUM

En el disseny d'un reactor fotoquímic és imprescindible conèixer bé la quantitat de llum que arriba a qualsevol punt del reactor, ja que aquesta influirà molt en la velocitat de la reacció. Aquest article explica (amb les equacions matemàtiques i el suport gràfic necessari) els models anomenats de font extensa utilitzats per a calcular la distribució de llum a l'interior d'un reactor anular en medi homogeni amb la làmpada centrada a l'eix del reactor. Es descriuen també noves variacions d'aquests models i es milloren d'altres ja publicades: font lineal, superficial o volumètrica; medi transparent o medi absorbent; correcció de la longitud efectiva de la làmpada; o l'ús de diafragmes.

Paraules clau: reactor fotoquímic, models d'emissió de llum, reactor anular, làmpada centrada, models de font extensa, diafragma.

1. OBJECTIU

En el disseny i optimització dels reactors fotoquímics és molt important conèixer la distribució de la radiació dins del reactor, perquè la cinètica de la reacció fotoquímica depèn fortament de la radiació incident a cada punt.

Tal com s'ha explicat en un article anterior¹, es poden definir dues estratègies per calcular la quantitat de llum que arriba a un punt del reactor. Aquestes estratègies depenen del sistema coordenat utilitzat: els models que integren la làmpada segons un sistema de coordenades cilíndric definit sobre aquesta; i els de font extensa*, que la integren mitjançant un sistema de coordenades esfèric, l'origen del qual és variable, ja que es troba sobre el punt receptor. L'objectiu d'aquest article és descriure aquests darrers models.

Els models de font extensa donen una representació més realista del fenomen d'emissió que la que donen els models de font lineal, tot i així són complicats d'utilitzar en algunes aplicacions i per això s'utilitzen moltes vegades els models clàssics de font lineal, perquè són més senzills i en molts casos ja donen uns resultats prou correctes.

A la bibliografia es troben descrites diferents variacions sobre aquests models de font extensa, fetes amb diferents objectius: simplificar el model²), incloure l'efecte de la presència de partícules en el medi^{3,4}), etc.

En aquest article es descriuen, amb el suport gràfic adequat, els models d'emissió de llum anomenats de font extensa, que es caracteritzen per utilitzar un sistema de coordenades esfèric situat en un punt del reactor a l'hora de trobar la llum que arriba en aquest punt. S'homogeneïtza la nomenclatura de tots aquests models d'acord amb la dels models de coordenades cilíndriques descrits en un article anterior¹.

Es descriuen també algunes de les variacions més usuals d'aquests models: considerant la font lineal, superficial o volumètrica, en medi transparent o medi absorbent i amb la correcció de la longitud efectiva de la làmpada (és a dir, variant els límits d'integració per incloure només les zones de la làmpada que realment irradien llum sobre el punt del reactor considerat).

2. MODELS DE FONT EXTENSA (FE)

2.1. Model original per a medis transparents

Per calcular la quantitat de radiació rebuda d'una font lluminosa, aquest tipus de model utilitza un sistema coordenat esfèric amb l'origen definit sobre el punt receptor. Considera la làmpada com un cilindre de dimensions finites en totes direccions, als límits del qual es troba una superfície transparent i de gruix nul. La primera proposta del model de FE fou publicada per Irazoqui et al.⁵ l'any 1973 i es refereix a una emissió volumètrica que utilitza el tipus d'emissió esfèrica o isotròpica (FEVEE, font extensa volumètrica d'emissió esfèrica), anomenat originalment ESM (Extense Source Model). També considera que els emissors de radiació estan repartits uniformement per tot el volum de la làmpada i que la potència emesa per qualsevol emissor és proporcional al seu volum. El model s'aplicà a un fotoreactor anular sense efectes d'absorció o dispersió i amb la làmpada centrada a l'eix del reactor.



Figura 1. Representació de les variables que intervenen al model de Font Extensa⁵.

Per verificar el model, aquests autors varen fer servir una termopila com a detector. La densitat de flux de radiació, q_{λ} , es calcula segons l'Equació 1, on $S_{V\lambda}$ és el flux fotònic emès per unitat de volum de làmpada (i es calcula dividint la potència de la làmpada W_{λ} entre el seu volum).

$$|\vec{q}_{\lambda}| = \frac{S_{V\lambda}}{4\pi} \int_{\phi_{I}}^{\phi_{2},\phi_{2},\rho_{2}} \sin\theta \ d\rho \ d\theta \ d\phi$$
(1)

De totes maneres, la magnitud que mesura la termopila no és la densitat de flux de radiació, sinó la seva normal a la superfície del detector (representada per dA a la Figura 1). Així doncs, si es considera la superfície del detector de dimensions infinitessimals o que la mesura al centre del detector és el valor mitjà a tota la seva superfície, la mesura del detector, Q_{λ} , ve donada per l'Equació 2. S'ha de dir que, perquè aquesta equació sigui correcta, la superfície receptora ha d'ésser plana i s'ha de col·locar de manera que la normal que passa pel seu centre també passi per l'eix principal de la làmpada i sigui perpendicular a aquest. Les variables que intervenen a les Equacions 1 i 2 es poden veure representades a la Figura 1.

$$Q_{\lambda} = \iiint_{\phi \ \theta \ \rho} dq_{\lambda} \quad \cos\theta_{n} \ d\rho \ d\theta \ d\phi = \frac{S_{V,\lambda}}{4\pi} \quad \iiint_{\phi \ \theta \ \rho} \sin^{2}\theta \ \cos\phi \ d\rho \ d\theta \ d\phi$$
$$\cos\theta_{n} = \sin\theta \ \cos\phi$$

El següent pas és el càlcul dels límits de les diferents variables d'integració: ϕ , θ i ρ . Els límits de ϕ venen definits a l'Equació 3 (Figura 2); els de θ , a l'Equació 4 (Figura 3); i els de ρ , a l'Equació 5 (Figura 4). Els límits de ρ són els punts de tall amb la superfície de la làmpada de la recta que defineix una direcció de radiació determinada que passa pel punt receptor. Per altra banda, els límits de θ són els definits a partir de les rectes que passen pel punt receptor, $P_o(r,z)$, amb un determinat angle ϕ i tallen les circumferències que defineixen les bases inferior i superior de la làmpada. Per a cada base hi ha dues rectes que compleixen aquestes condicions; s'han d'escollir les que donen el punt de tall més proper al punt receptor. Per últim, els límits de ϕ seran els valors d'aquest angle que corresponen a les rectes tangents a la làmpada. La condició de

^{*} Aquest nom prové del fet que el primer model proposat amb aquest tipus de coordenades era aplicable a una font volumètrica, que tenia extensió, front a d'altres que eren lineals i, per tant, només tenien una dimensió.

tangència exigeix que els dos punts de tall amb la làmpada siguin el mateix ($\rho_1 = \rho_2$), la qual cosa s'aprofita per al càlcul dels límits de ϕ .

$$-\phi_{I} = \phi_{2} = \sin^{-l} \left(\frac{R_{I}}{r} \right) \quad (3)$$

$$\theta_{I,2} = \tan^{-l} \left[\frac{r \cos \phi - \sqrt{R_{I}^{2} - r^{2} \sin^{2} \phi}}{H_{I} \pm \frac{L_{I}}{2} - z} \right] \quad (4)$$

$$\rho_{l,2} = \frac{\rho'_{l,2}}{\sin\theta} \quad ; \quad \rho'_{l,2} = r\cos\phi \mp \sqrt{R_l^2 - r^2 \sin^2\phi}$$
 (5)



Figura 2. Límits de la variable ϕ .



Figura 3. Límits de la variable θ .



Figura 4. Límits de la variable ρ .

$$Q_{\lambda} = \frac{S_{V\lambda}}{4\pi} \int_{\phi_{I}}^{\phi_{2}} 2\sqrt{R_{I}^{2} - r^{2} \sin^{2}\phi} \left(\cos\theta_{I} - \cos\theta_{2}\right) \cos\phi \, d\phi$$
(6)

Amb aquests valors dels límits, Irazoqui *et al.⁵⁾* varen resoldre analíticament part de l'Equació 2 i varen obtenir l'expressió que es presenta a l'Equació 6.

2.2. Models volumètrics, superficials i lineals amb un medi absorbent

Cerdá *et al.*⁶⁾ consideraren el cas que hi hagués una substància absorbent al medi de reacció. Si hi ha una barreja perfecta al si del reactor, es pot suposar que la quantitat de radiació present a qualsevol punt ha estat minvada segons la llei de Lambert i Beer (Equació 7):

$$\frac{\Phi_{p,\lambda}}{\Phi_{p,\lambda,\theta}} = \exp(-\mu_{\lambda} x(\theta, \phi))$$
(7)

on $x(\theta, \phi)$ és el camí òptic (Figura 5) i es calcula amb l'Equació 8.

$$x(\theta,\phi) = \frac{r \cos \phi - \sqrt{R_f^2 - r^2 \sin^2 \phi}}{\sin \theta}$$
 (8)



Figura 5. Representació del camí òptic x.

Si s'inclou el terme exponencial de l'Equació 7 a l'Equació 1 i s'integra analíticament la variable, s'obté l'expressió de la densitat de flux de radiació en medi absorbent (Equació 9).

$$|\vec{q}_{\lambda,FEVEE}| = \frac{S_{V\lambda}}{4\pi} \int_{\phi_{I}}^{\phi_{2}\theta_{2}} \int_{\phi_{I}}^{\phi_{2}\theta_{2}} \sin\theta \exp(-\mu_{\lambda}x(\theta,\phi)) d\rho \ d\theta \ d\phi =$$
$$= \frac{S_{V\lambda}}{2\pi} \int_{\phi_{I}}^{\phi_{2}\theta_{2}} \sqrt{R_{I}^{2} - r^{2}\sin^{2}\phi} \exp(-\mu_{\lambda}x(\theta,\phi)) d\theta \ d\phi$$
(9)

Stramigioli *et al.*⁷ proposaren l'any 1975 el model de font extensa superficial amb emissió esfèrica (FESEE). En aquest cas, no s'ha d'integrar la coordenada radial, ρ , i l'expressió resultant proposada apareix a l'Equació 10. Els límits d'integració de θ i ϕ i el camí òptic es calculen de la mateixa manera que per al model volumètric.

$$|\vec{q}_{\lambda,FESEE}| = \frac{S_{A\lambda}}{4\pi} \int_{\phi_{j}\theta_{j}}^{\phi_{2}\theta_{2}} \sin\theta \exp(-\mu_{\lambda}x) d\theta d\phi$$
(10)

Per altra banda, Yokota *et al*[®] proposaren la font superficial amb emissió difusa (FSED) amb un sistema coordenat cartesià centrat a la làmpada. Aquest model, expressat en coordenades esfèriques i centrat al punt receptor (FE-SED⁹) (Figura 6), ve donat per l'Equació 11, on θ_{e} és l'angle d'emissió i es calcula amb l'Equació 12.



Figura 6. Geometria dels models superficials.

Per últim, els models lineals també es poden expressar amb coordenades esfèriques⁹). Encara que siguin lineals, per analogia amb els anteriors, es podrien anomenar FE-LEE i FELED (Font Extensa Lineal amb Emissió Esfèrica i amb Emissió Difusa). La densitat de flux de radiació es calcula segons l'Equació 13, on es té en compte una expressió diferent per calcular el camí òptic, donada la naturalesa lineal de la font. Només són aplicables els límits de θ , que es calculen amb l'Equació 14, i s'han obtengut en substituir $R_i = 0$ i $\phi = 0$ a l'Equació 4.

$$\cos\theta_e = \frac{r\cos\phi_m - R_h}{\rho}$$

$$\cos\phi_{m} = \frac{(r^{2} - r\rho'\cos\phi - R_{i}^{2})\sin\theta}{R_{i}\rho'} \quad ; \quad \rho' = r\cos\phi - \sqrt{R_{i}^{2} - r^{2}\sin^{2}\phi} \quad ; \quad \rho = \frac{\rho'}{\sin\theta}$$
(12)

$$|\vec{q}_{\lambda,FELEE}| = \frac{S_{L\lambda}}{2\pi} r_{\theta_{I}}^{\theta_{2}} \exp(-\mu_{\lambda} x(\theta)) d\theta \quad ; \quad |\vec{q}_{\lambda,FELED}| = \frac{S_{L\lambda}}{\pi^{2}} r_{\theta_{I}}^{\theta_{2}} \cos\theta_{e} \exp(-\mu_{\lambda} x(\theta)) d\theta$$

$$x(\theta) = \frac{r - R_f}{\sin \theta} ; \cos \theta_e = \sin \theta$$
(13)
$$\theta_{1,2} = \tan^{-l} \left(\frac{r}{H_l \pm \frac{L_l}{2} - z} \right)$$
(14)

2.3. Correcció de la longitud efectiva de la làmpada De Bernárdez i Cassano¹⁰⁾ varen trobar que, quan s'avalua la densitat de flux de radiació pel model de font extensa, en qualcuns casos, es consideren zones inexistents de la làmpada i, en altres casos, no s'integra una part d'aquesta. A la Figura 7, es poden veure aquestes zones (en negre) per a tres situacions diferents del punt irradiat considerat, P_o . Aquest efecte és major quan el punt s'acosta a la font. A la figura esmentada, s'aprecien quatre límits possibles de l'angle θ , calculats a partir de les rectes que passen pel punt P_o i tallen les circumferències que defineixen les bases de la làmpada. En el cas 2 de la Figura 7, per exemple, el model utilitza sempre els angles θ_a i θ_o . Si es vol considerar l'emissió de tota la làmpada i el punt P_o està situat per sobre de la base superior, el límit superior (θ_a) serà θ_o enlloc de θ_a . De la mateixa manera, si el punt P_o es troba més avall de la base inferior, aleshores el límit que s'ha de substituir és l'inferior (θ_i): θ_c en lloc de θ_{cr} .



Figura 7. Zones de la làmpada mal avaluades pel model de font extensa.

En utilitzar aquests nous límits, s'està integrant més làmpada de la que en realitat hi ha (zones negres). Per corregir aquest efecte, De Bernárdez i Cassano proposen utilitzar la funció $\eta(\theta, \phi)$, que pren el valor d'1 quan θ es troba entre els dos angles interiors, i el de l'Equació 16 quan θ es troba entre els angles exteriors i els interiors. A l'Equació 15, es poden veure les expressions de càlcul de tots aquests angles. Finalment, a l'Equació 17, s'exposa l'expressió que permet el càlcul de la densitat de flux de radiació.

$$ab = \tan^{-1} \left[\frac{r \cos \phi \mp \sqrt{R_{l}^{2} - r^{2} \sin^{2} \phi}}{H_{l} + \frac{L_{l}}{2} - z} \right] \qquad ; \qquad \theta_{c,d} = \tan^{-1} \left[\frac{r \cos \phi \pm \sqrt{R_{l}^{2} - r^{2} \sin^{2} \phi}}{H_{l} - \frac{L_{l}}{2} - z} \right]$$
(15)

θ

$$\eta(\theta,\phi) = \frac{(z_j - z) \tan \theta - r \cos \phi + \sqrt{R_i^2 - \sin^2 \phi}}{2\sqrt{R_i^2 - \sin^2 \phi}} \quad ; \quad z_j = \begin{cases} H_i + \frac{L_i}{2} & \text{base superior} \\ H_i - \frac{L_i}{2} & \text{base inferior} \end{cases}$$
(16)

$$|\vec{q}_{\lambda}| = \frac{S_{\nu\lambda}}{2\pi} \int_{\phi_{I}\theta_{J}}^{\phi_{2}\theta_{2}} \eta(\theta,\phi) \sqrt{R_{I}^{2} - r^{2}\sin^{2}\phi} \exp(-\mu_{\lambda}x(\theta,\phi)) d\theta d\phi$$
(17)

Per resoldre el problema tractat en aquest apartat, es pot seguir una altra estratègia més fàcil de programar i més ràpida de càlcul⁹: definir diferents límits de ρ segons la zona que s'avalua (Figura 8). La densitat de flux de radiació es pot calcular amb l'Equació 18 i els límits de ρ es calculen segons la Taula 1 i l'Equació 19.



Figura 8. Correcció dels límits de p.

$$|\vec{q}_{\lambda}| = \frac{S_{I\lambda}}{4\pi} \int_{\phi_{1}\theta_{1}}^{\phi_{2}\theta_{2}} (\rho_{2} - \rho_{1}) \sin\theta \exp(-\mu_{\lambda}x(\theta, \phi)) d\theta d\phi$$
(18)

$$\rho_{a,b} = \frac{H_I \pm \frac{L_I}{2} - z}{\cos \theta} \quad ; \quad \rho_{c,d} = \frac{r \cos \phi \mp \sqrt{R_I^2 - r^2 \sin^2 \phi}}{\sin \theta} \quad (19)$$

	Cas 1		Cas 2		Cas 3	
	ρ ₁	ρ ₂	ρ ₁	ρ ₂	ρ ₁	ρ ₂
Base superior: θ (θ_a , θ_b)	ρ _a	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{a}	ρ _c	ρ_{a}
Zona central de la làmpada	ρ _c	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{d}
Base inferior: θ (θ_{c} , θ_{d})	ρ _c	ρ _b	ρ _c	ρ _b	ρ _b	ρ_{d}

Taula 1. Límits de la variable ρ segons la posició del punt receptor.

Encara hi ha una possible modificació sobre allò que s'ha dit: considerar opaques les bases o tapes de la làmpada. Vicente *et al.*¹¹⁾ varen pensar en aquesta opció. Si les tapes no són transparents, els punts situats per damunt i per sota de la làmpada, casos 1 i 3 de la Figura 9, no reben llum de tota la làmpada, sinó que hi ha zones (les quadriculades de la figura) que es troben ocultes darrera les tapes. El mètode de càlcul recomanat és el mateix que abans, només varien els valors dels límits de ρ , que es calculen segons el que s'indica a la Taula 2.



Figura 9. Zones a corregir (negre) i a omitir (quadriculat) en el càlcul amb tapes opaques.

	Ca	s 1	Ca	s 2	Cas 3		
	ρ ₁	ρ_2	ρ ₁	ρ_2	ρ ₁	ρ_2	
Base superior: θ (θ_a , θ_b)	ρ _c	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{a}	ρ _c	ρ_{a}	
Zona central de la làmpada	ρ _c	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{d}	ρ _c	ρ_{d}	
Base inferior: θ (θ_{c} , θ_{d})	ρ _c	ρ _b	ρ _c	ρ _b	ρ _c	ρ_{d}	

Taula 2. Límits de la variable ρ segons la posició del punt receptor quan les tapes no són transparents.

2.4. Ús de diafragmes per a evitar els efectes de punta Per tal d'evitar els efectes dels capçals del reactor (diferent geometria, agitació diferencial) es poden col.locar diafragmes a la seva paret interna (paret del filtre) (Figura 10). Segons Romero *et al.*¹²⁾, la porció de làmpada que irradia un determinat punt del reactor es pot calcular modificant els límits d'integració del model, concretament sobre la variable θ (veure Figura 11). Els angles limitants es calculen a partir de l'Equació 20, on *r*_i, *z*_i i *n*_i prenen els valors de la Taula 3.



Figura 10. Diafragmes per limitar la zona irradiada.

Taula 3. Càlcul dels sis	possibles valors	s limitants de θ
--------------------------	------------------	-------------------------

i	r,	z _i	n _i
1	R _f	$H_d + L_d/2^*$	1
2	R	H _i +L/2	1
3	R	H _i +L/2	2
4	R	H _I -L/2	2
5	R	H _I -L/2	1
6	R _f	H _d -L _d /2*	1

* A l'article original, aquests valors són incorrectes

$$\tan \theta_{i} = \frac{r \, \cos \phi + (-1)^{n_{i}} \sqrt{r_{i}^{2} - r^{2} \, \sin^{2} \phi}}{z_{i} - z}$$
(20)

Per a De Bernárdez i Cassano¹⁰, hi ha set casos diferents a considerar segons on es trobi el punt del reactor per al qual s'està avaluant la quantitat de radiació que hi arriba. Els casos esmentats es poden observar a la Figura 11, on les zones quadriculades corresponen al volum d'emissió efectiu de la làmpada i les negres són les que s'han d'eliminar del càlcul, és a dir, precisen correcció. A la Taula 4, es presenten les condicions que s'han de complir per aplicar cadascun dels casos i un resum dels límits a emprar i dels intervals de correcció.

	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5	Cas 6	Cas 7
Condició	$\theta_1 > \theta_5$	$\begin{array}{c} \theta_4 <= \theta_1 \ 0_1 <= \theta_5 \end{array}$	$\begin{array}{c} \theta_{3} <= \theta_{1} \ 0_{1} <= \theta_{4} \end{array}$	$\begin{array}{c} \theta_1 <= \theta_2 \ \mathbf{i} \\ \theta_6 >= \theta_5 \end{array}$	$\begin{array}{c} \theta_3 <= \theta_6 \ 0_6 <= \theta_4 \end{array}$	$\begin{array}{c} \theta_2 <= \theta_6 \ \mathbf{i} \\ \theta_6 <= \theta_3 \end{array}$	$\theta_6 < \theta_2$
Límit inferior	-	θ	θ	θ2	θ_2	θ_2	-
Límit superior	-	θ_5	θ_{5}	θ_5	$\theta_{_6}$	θ_6	-
Interval de correcció	-	$[\theta_1, \theta_5]$	$[\theta_4, \theta_5]$	$egin{aligned} [heta_2, heta_3] & \mathrm{i} \ [heta_4, heta_5] \end{aligned}$	$[\theta_2, \theta_3]$	$[\theta_2, \theta_6]$	-

Taula 4. Límits d'integració de θ i interval de correcció segons el cas considerat.

Sobre el treball de De Bernárdez i Cassano¹⁰, s'ha vist posteriorment⁹⁾ que no són set sinó quinze els possibles casos a considerar en el càlcul dels límits de θ i dels intèrvals de correcció de la funció que calcula la densitat de flux de radiació pel model de font extensa, quan es col·loquen diafragmes al reactor per tal d'evitar els efectes de punta.

	$\theta_1 \leq \theta_2$	$\theta_2 < \theta_1 \le \theta_3$	$\theta_3 < \theta_1 \le \theta_4$	$\theta_4 < \theta_1 \le \theta_5$	$\theta_5 < \theta_1$
$\theta_6 \leq \theta_2$	cas 7	-	-	-	-
$\theta_2 < \theta_6 \le \theta_3$	cas 6	cas 15	-	-	-
θ ₃ <θ ₆ ≤θ ₄	cas 5	cas 13	cas 12	-	-
$\theta_4 < \theta_6 \le \theta_5$	cas 10	cas 9	cas 11	cas 14	-
$\theta_5 < \theta_6$	cas 4	cas 8	cas 3	cas 2	cas 1

Taula 5. Definició dels casos possibles de posició relativa dels angles θ_{i} Els casos ombrejats corresponen als descrits a la bibliografia anterior.



Figura 12. Zones de càlcul dels límits de θ en què queda dividit el reactor en disposar-hi diafragmes.

A la Figura 12, es pot veure una secció longitudinal d'un reactor anular dividida en les diferents zones on s'aplica cadascun dels casos esmentats. Aquestes zones s'han trobat dibuixant les rectes que contenen els extrems de la làmpada i els extrems del diafragma. Per altra banda, a la Taula 5, es presenten les condicions que han de complir els angles perquè al punt considerat se li apliqui un cas o un altre. Com que la posició relativa de θ_2 , θ_3 , θ_4 i θ_5 és constant, els diferents casos vendran donats per la posició de θ_1 i θ_6 respecte als altres angles, tenint en compte que sempre es compleix que θ_1 és menor que θ_8 .

A la Taula 6, es poden veure els límits d'integració i els intervals de correció que cal aplicar en cada cas. Per últim, a la Figura 13, es representen la majoria dels casos no descrits a la bibliografia. Els casos 14 i 15 no s'han representat, ja que només es donen quan el radi de la làmpada és molt parescut a l'intern del reactor i el diafragma és molt estret.



Figura 11. Límits de θ segons la posició del punt receptor quan es posen diafragmes al reactor.



		Cas													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
Límits d'integració	-	$[\theta_1, \theta_5]$	$[\theta_1, \theta_5]$	$[\theta_2, \theta_5]$	$[\theta_2, \theta_6]$	$[\theta_2, \theta_6]$	-	$[\theta_1, \theta_5]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_2, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$
Límits de correcció	-	$[\theta_1, \theta_5]$	$[\theta_4, \theta_5]$	$\begin{matrix} [\theta_2, \theta_3] \\ [\theta_4, \theta_5] \end{matrix}$	$[\theta_2, \theta_3]$	$[\theta_2, \theta_6]$	-	$\begin{matrix} [\theta_1, \theta_3] \\ [\theta_4, \theta_5] \end{matrix}$	$\begin{matrix} [\theta_1, \theta_3] \\ [\theta_4, \theta_6] \end{matrix}$	$\begin{matrix} [\theta_2, \theta_3] \\ [\theta_4, \theta_6] \end{matrix}$	$[\theta_4, \theta_6]$	-	$[\theta_1, \theta_3]$	$[\theta_1, \theta_6]$	$[\theta_1, \theta_6]$

Taula 6. Límits d'integració de la variable θ i intervals de correcció quan s'utilitzen diafragmes.

NOMENCLATURA

Variables fotoquímiques

- Φ_{p} flux fotònic (einstein s⁻¹)
- M coeficient d'absorció (cm⁻¹)
- q densitat de flux de radiació (einstein cm⁻² s⁻¹, W cm⁻²)
 S flux fotònic emès per unitat d'extensió de la làmpada
- (S_L en W cm⁻¹; S_A en W cm⁻²; S_V en W cm⁻³)
- W Potència (W)
- λ subíndex que indica longitud d'ona

Variables que descriuen la geometria reactor-làmpada

- θ, ϕ, ρ coordenades esfèriques del punt emissor (rad, rad, cm)
- $\theta_{_1}, \, \phi_{_1}, \, \rho_{_1}$ límits inferiors d'integració de la làmpada (rad, rad, cm)
- $\theta_{_2},\, \phi_{_2},\, \rho_{_2}$ límits superiors d'integració de la làmpada (rad, rad, cm)
- θ_{e} angle d'emissió (rad)
- dĂ diferencial d'àrea
- dV diferencial de volum
- H ordenada del centre (cm)
- L longitud (cm)
- P₀ punt receptor del reactor
- r distància entre el punt receptor i l'eix de la làmpada (cm)
- R radi (cm)
- x camí òptic (cm)
- r, z coordenades del punt receptor (cm)
- X,Y,Z Eixos coordenats cartesians

Subíndex

- A àrea
- d diafragma
- f filtre o paret interna del reactor
- l làmpada
- L longitud
- r reactor

V volum

Variables auxiliars de càlcul

 $\begin{array}{l} \eta \text{ (adim.); } \theta_{1,2,3,4,5,6} \text{ (rad); } \theta_{a,b,c,d} \text{ (rad); } \theta_i \text{ (rad); } \theta_n \text{ (rad); } \rho' \text{ (cm); } \\ \rho_{a,b,c,d} \text{ (cm); } \varphi_m \text{ (rad); } n_i \text{ (adim.); } r_i \text{ (cm); } z_i \text{ (cm); } z_i \text{ (cm); } \end{array}$

REFERÈNCIES

- Fullana-i-Palmer, P.; Puig-Vidal, R.; Celma, PJ.; Vilaseca, J. Disseny de reactors fotoquímics: descripció dels models d'emissió de llum per a reactors anulars. Part 1. Models clàssics. *Afinidad*, **2009**, *66*(541), 205-212.
- Irazoqui, HA.; Isla, MA.; Cassano, AE. Simplified extense source model for photoreactor analysis and design. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2000, 39(11), 4260-4271.
- Romero, RL.; Alfano, OM.; Cassano, AE. Cylindrical photocatalytic reactors. Radiation absorption and scattering effects produced by suspended particles in an annular space. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **1997**, *36*(8), 3094-3109.
- Sellami, MH.; Hassen, A.; Sifaoui, MS. Modelling of UV radiation field inside a photoreactor designed for wastewater disinfection – Experimental validation. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **2003**, 78(3-4), 269-287.
- Irazoqui, H.A.; Cerdá, J.; Cassano A.E. Radiation profiles in an empty annular photoreactor with a source of finite spatial dimensions. *A.I.CH.E. Journal*. **1973**, *19*(3), 460-467.
- Cerdá, J.; Marchetti, J.L.; Cassano A.E. El uso de modelos simples de radiación para el caso de irradiación directa de reactores fotoquímicos. *Lat. Am. J. Heat Mass Transfer* **1978**, 8, 15-25.
- 7. Stramigioli, C.; Santarelli, F.; Foraboschi, F.P. Photosensitized reactions in an annular photoreactorIng. *Chim. Italy* **1975**, *11*, 143-147.
- Yokota, T.; Iwano, T.; Tadaki, T. 1976, , 298. Citada a: Alfano, O.M.; Romero, R.L.; Cassano, A.E. *Chem. Eng. Sci.* 1986, *41*(3), 421.
- 9. Fullana-i-Palmer, P. Introducció al disseny quantitatiu de reactors fotoquímics. Tesi doctoral **1995**, Institut Químic de Sarrià, Universitat Ramon Llull.
- 10. De Bernárdez, E.R.; Cassano, A.E. *J. Photochem.* **1985**, *30*, 285.
- Vicente, M.; Prat, C.; Esplugas, S. Determination of incidence effectiveness in annular photoreactors. *Afinidad* **1989**, 46(423), 384-388.
- 12. Romero, R.L.; Alfano, O.M.; Marchetti, J.L. Modelling and parametric sensitivity of an annular photoreactor with complex kinetics. *Chem. Engng. Sci.* **1983**, *38*(9), 1593-1605.