



METODOLOGÍA Y PLAN DE TRABAJO

OBJETIVOS

- ✓ Formular y analizar un modelo matemático no estacionario para procesos de ozonización que incluya transferencia gas-líquido.
- ✓ Determinación experimental de las propiedades físico-químicas del sistema ozono-agua (absorción, descomposición, efecto del pH, etc.).
- ✓ Eliminación de sustancias tipo mediante ozonización para verificar los modelos matemáticos.
- ✓ Desarrollo de procesos de optimización basados en redes neuronales para la determinación de parámetros de los modelos matemáticos.

RESUMEN

El presente proyecto de Tesis pretende ahondar en el conocimiento de los procesos que tienen lugar en los reactores de burbujeo y su utilización para la ozonización de aguas. Se desarrollarán modelos matemáticos que permitan describir adecuadamente los procesos hidrodinámicos, reactivos y de transferencia de materia que interactúan en este tipo de reactores gas-líquido. Con este fin se caracterizarán las propiedades del sistema ozono-agua en el reactor de trabajo. Después se incorporará al sistema diferentes sustancias tipo a degradar, con el fin de obtener las cinéticas de reacción.

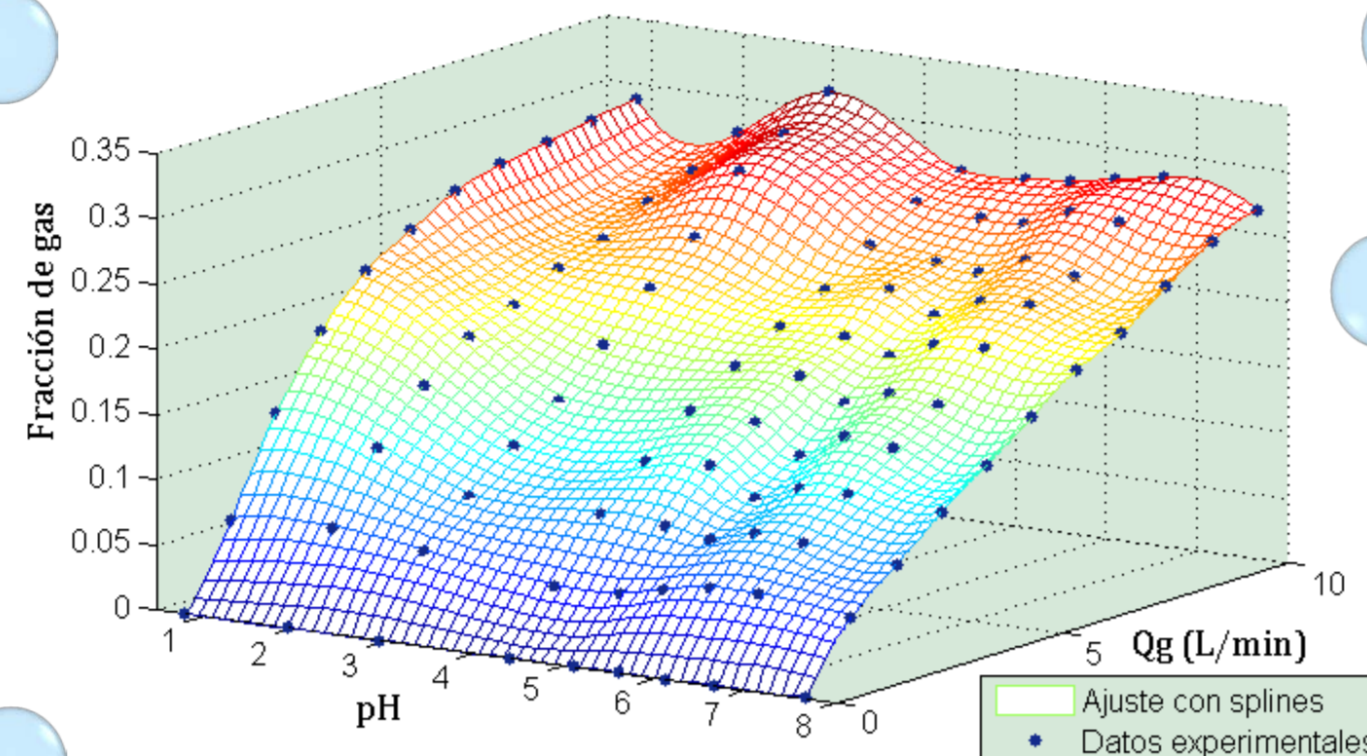
Los datos experimentales se ajustan a los modelos matemáticos para el cálculo de las constantes cinéticas y otros parámetros de diseño. Para ello se desarrollará una metodología que, utilizando redes neuronales, predecirá el valor de inicio para utilizar algoritmos tradicionales de optimización por gradiente.

AGRADECIMIENTOS

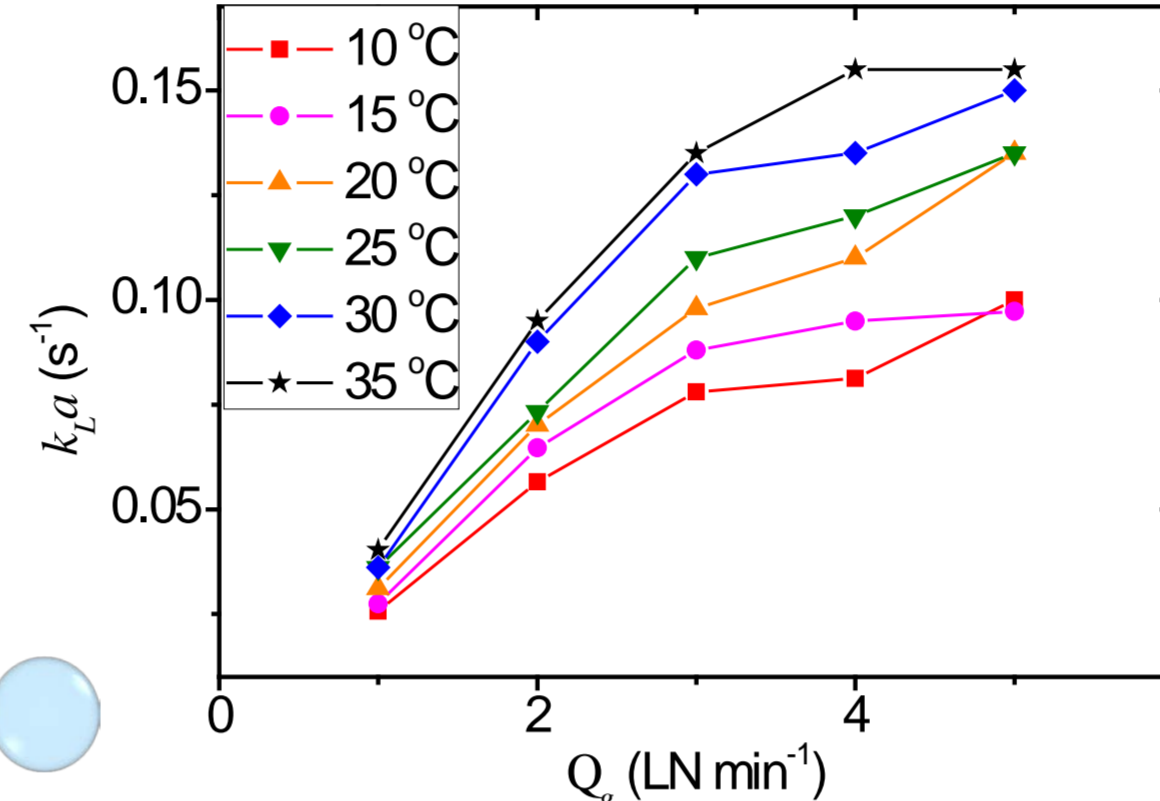
J. Ferre-Aracil desea agradecer al Programa de Ayudas de Investigación y Desarrollo (PAID) de la Universitat Politècnica de València (UPV-PAID-FPI-2010-04).

Tarea 1: Caracterización de las Propiedades Físicas del Sistema Ozono-Agua particularizadas en el Reactor de Burbujeo

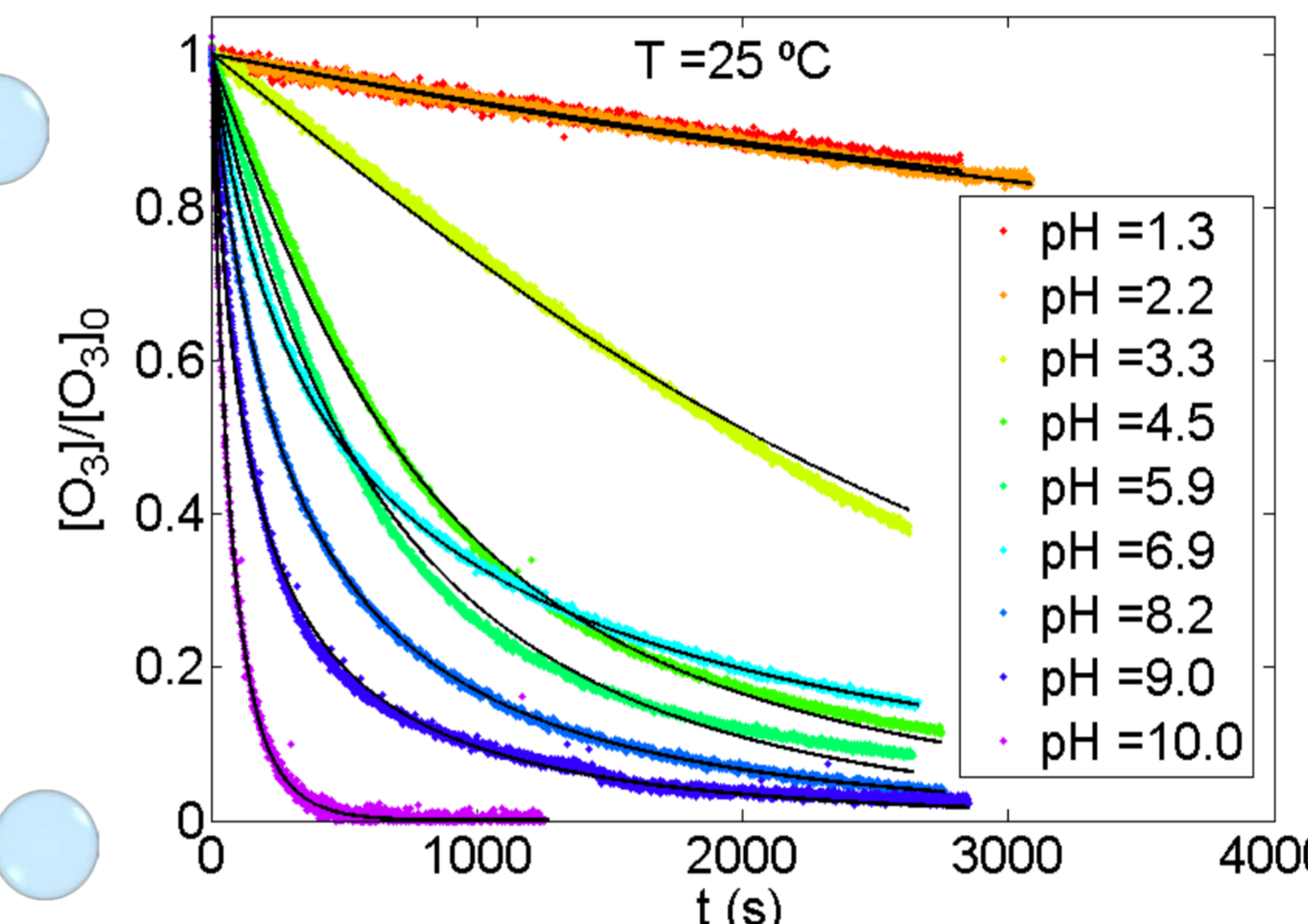
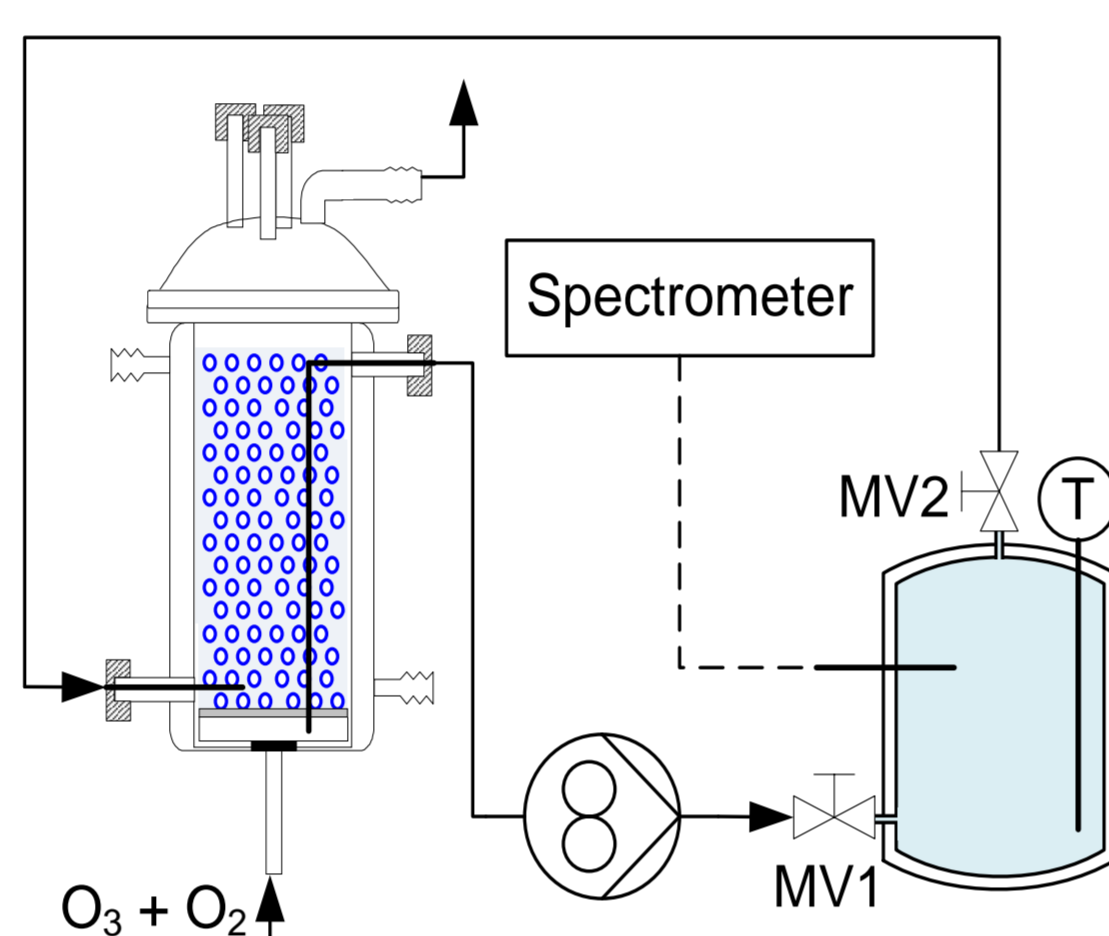
a) Estudio de la fracción de gas



b) Transferencia de materia G-L



c) Descomposición del ozono disuelto

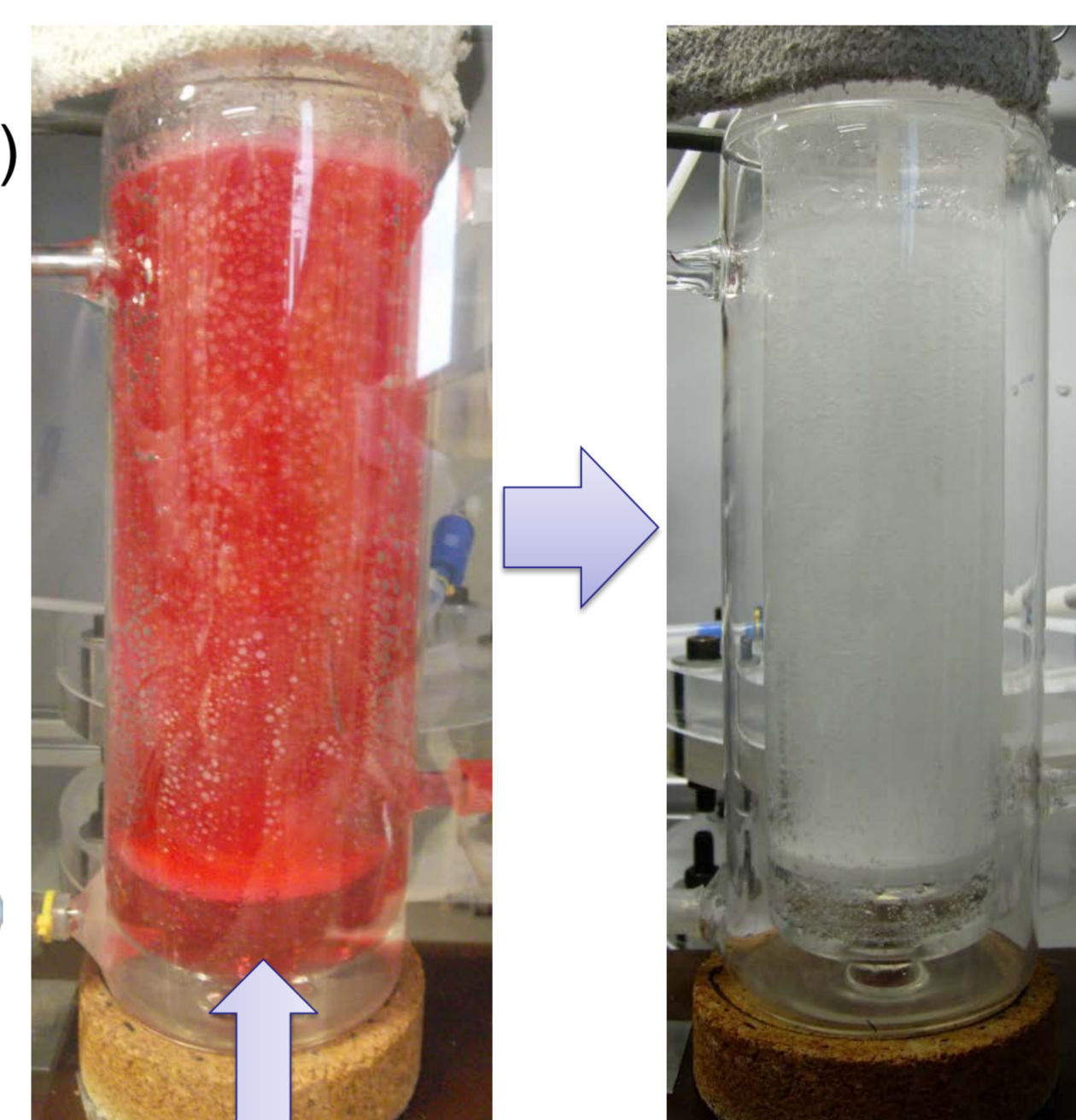
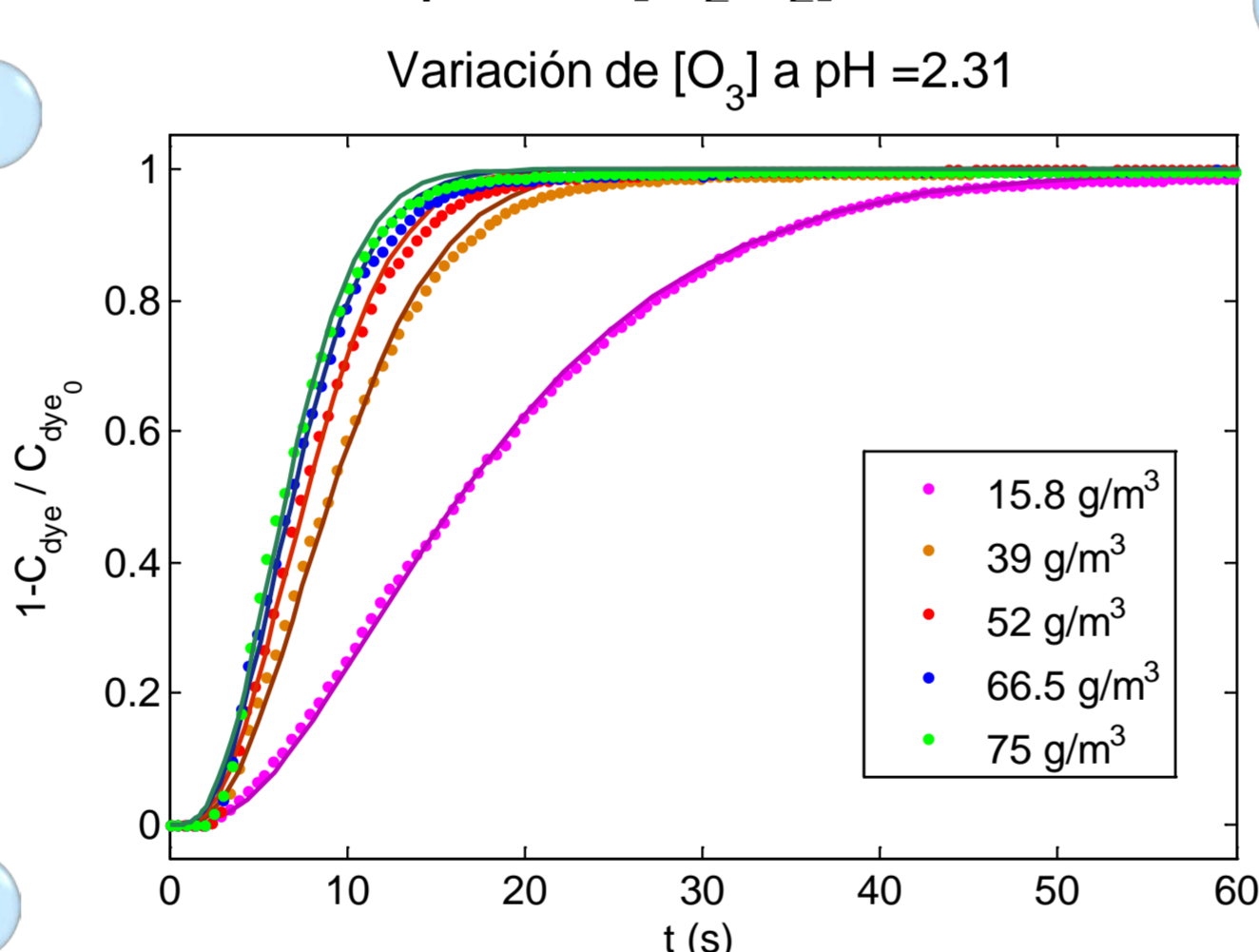


Tarea 2: Estudio de la Cinética de Ozonización de Distintas Substancias Tipo en Estado No Estacionario

Estudio de la cinética de eliminación de:

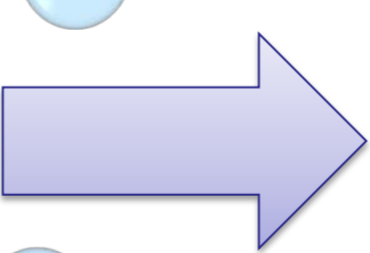
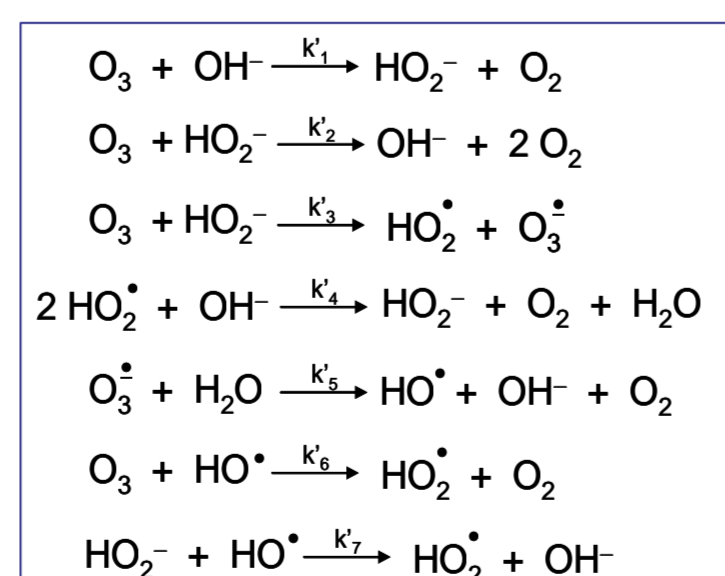
- Colorantes (Acid Red 27, Acid Orange...)
- Citostáticos de aguas hospitalarias

En función de pH, T, [H₂O₂]...



Tarea 3: Modelización del Sistema Gas-Líquido Reactivo. Diseño y Análisis de Redes Neuronales Artificiales (RNA)

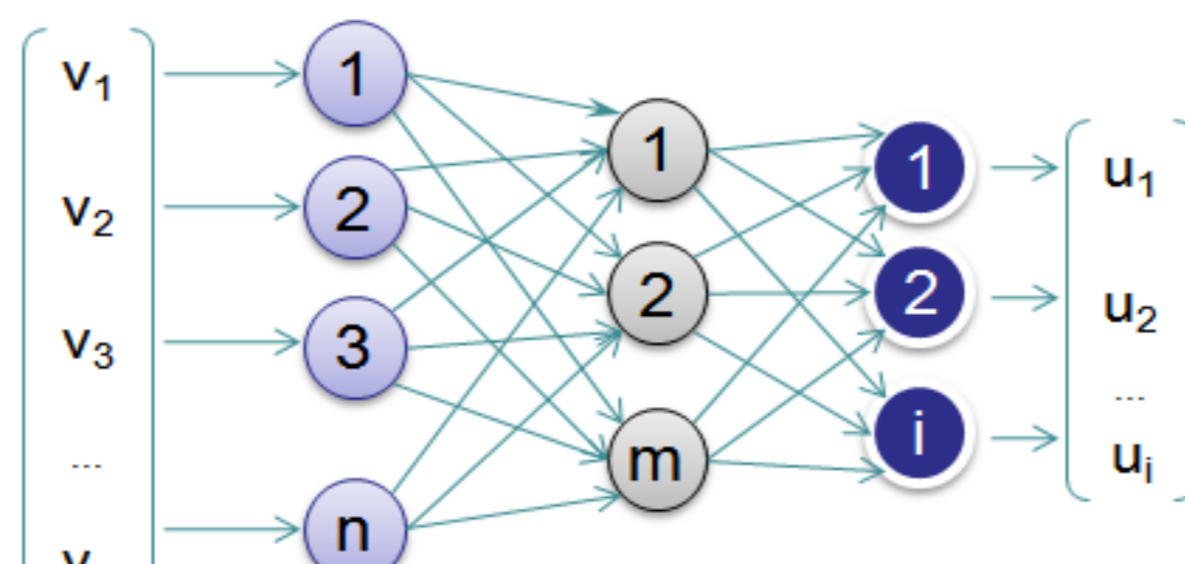
- Modelización de la transferencia gas-líquido, los esquemas reactivos y la hidrodinámica



$$\begin{cases}
 \frac{dx_1}{dt} = -k'_1 x_1 - (k'_2 + k'_3) x_1 x_2 - k'_3 k'_6 \frac{x_1^2 x_2}{k'_6 x_1 + k'_7 x_2} \\
 \frac{dx_2}{dt} = k'_1 x_1 - k'_2 x_1 x_2 - k'_3 k'_7 \frac{x_1 x_2^2}{k'_6 x_1 + k'_7 x_2} \\
 \frac{dx_3}{dt} = k'_1 x_1 + 2(k'_2 + k'_3) x_1 x_2 + k'_3 k'_6 \frac{x_1^2 x_2}{k'_6 x_1 + k'_7 x_2}
 \end{cases}$$

- Utilización de Redes Neuronales Artificiales para:

- Pre-optimización y estimación de parámetros
- Análisis de sensibilidad de modelos matemáticos



RESULTADOS ESPERADOS

- Algoritmo para la estimación de parámetros de modelos matemáticos dinámicos a partir de datos experimentales utilizando redes neuronales como metodología de pre-optimización. Estos parámetros se utilizarán como valores de inicio en algoritmos tradicionales basados en el gradiente.
- Herramienta para la utilización de las de redes neuronales artificiales como modelo no paramétrico de ajuste.
- Herramienta para análisis de sensibilidad de variables de estado frente a parámetros en modelos teóricos.
- Un modelo matemático para reactores Gas-Líquido que describa, en una misma escala de tiempo, los procesos de transferencia gas-líquido, la hidrodinámica de las diferentes fases y las diferentes reacciones.
- Modelo matemático generalizado de descomposición del ozono por las diferentes vías de reacción.

APLICACIONES

- Diseño eficiente de los equipos de ozonización.
- Funcionamiento y control óptimo de plantas de tratamiento de agua.
- Eficiencia energética.
- Ahorro de consumibles químicos.
- Estudios de aplicación de la tecnología de ozonización en función de la naturaleza del efluente de agua.