

Resumen de Tesis

***Título:* Diseño de reactores de burbujeo para el tratamiento de aguas residuales mediante ozono. Caracterización física, análisis cinético y optimización con redes neuronales artificiales.**

Programa de Doctorado: Programa de Doctorado en Ingeniería y Producción Industrial

Autor: Jesús Ferre Aracil

Directores: Javier Navarro Laboulais

Salvador C. Cardona Navarrete

Los procesos de ozonización de aguas ofrecen una serie de ventajas muy interesantes para la eliminación de ciertos compuestos orgánicos que resultan recalcitrantes a los procesos de tratamiento de aguas convencionales. El correcto diseño y control de los reactores gas-líquido necesarios para su implementación industrial precisa de adecuados modelos matemáticos que describan el comportamiento de los mismos. Sin embargo, la definición de modelos adecuados resulta compleja, ya que el rendimiento de estos reactores viene definido por la interacción de los procesos hidrodinámicos de las fases gas y líquida, los procesos de transferencia entre las fases y las reacciones químicas.

Con el presente trabajo se pretende la definición de modelos matemáticos adecuados de los reactores de burbujeo y de los esquemas reactivos del ozono. Para validarlos se realizan diseños experimentales para: i) la determinación de parámetros físicos de los reactores, como la fracción de gas y el coeficiente volumétrico de transferencia de materia; ii) la estimación de velocidades de reacción de la descomposición del ozono y de la eliminación de algunos contaminantes; y iii) el cálculo de propiedades del ozono, como el coeficiente de extinción molar o la solubilidad.

Los estudios de solubilidad del ozono realizados en esta tesis han demostrado que el coeficiente de extinción molar del ozono disuelto obtenido difiere del valor utilizado tradicionalmente en la bibliografía. Este hecho se ha verificado con diferentes metodologías analíticas.

El cálculo de constantes cinéticas por medio del ajuste de los modelos matemáticos a los resultados experimentales suele realizarse mediante optimización por algoritmos clásicos de gradiente, lo que resulta en ocasiones bastante complejo. Para facilitar estos procedimientos, en esta tesis se desarrolla un algoritmo basado en redes neuronales artificiales para estimar los parámetros de inicio de las metodologías clásicas. Se ha comprobado que el algoritmo desarrollado es sensible por sí mismo para estimar valores adecuados de las constantes cinéticas.

La metodología desarrollada ha permitido establecer un modelo de transferencia microscópico para reactores de burbujeo al que se le puede implementar cualquier tipo de mecanismo de reacción para el ozono. El análisis de sensibilidad de este modelo demuestra que conociendo la evolución de un substrato se puede determinar la constante cinética, y si también se conoce la evolución de la concentración de ozono en fase gas se puede determinar al mismo tiempo el coeficiente de transferencia de materia volumétrico.

Por otra parte, se ha desarrollado un modelo reactivo del proceso de descomposición química del ozono. La aplicación de un análisis de sensibilidad sobre este modelo demuestra que conociendo la evolución de la concentración de ozono y la concentración inicial y final de peróxido de hidrógeno se pueden determinar un máximo de 3 constantes cinéticas del mecanismo utilizado.

Finalmente, como ejemplo de aplicación de esta tecnología, se estudia la eliminación de compuestos citostáticos en aguas hospitalarias mediante ozono. A partir de los resultados experimentales se han determinado las constantes cinéticas de la reacción de alguno de estos compuestos con el ozono. Haciendo uso de estas constantes se realiza un estudio económico preliminar de los costes de operación de una planta de ozono para tratar aguas de estas características.