



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

TRACTAMENT D'AIGÜES



Memòria i Annexos

Autor: Emma Roselló Gené
Director: Montserrat Pérez Moya
Convocatòria: Gener 2022

Resum

En aquest projecte, s'estudia el procés foto-Fenton per eliminar la contaminació que produeix un fàrmac, el paracetamol.

Es cerca un model de principis bàsics que permeti simular i predir l'evolució del peròxid d'hidrogen (reactiu del procés) i del carboni orgànic total d'un grup d'assaig limitat realitzat al laboratori. Un cop s'han ajustat les dades experimentals del paracetamol com a contaminant model, la concentració del qual és de 40 mg/L, s'han obtingut els paràmetres del model per cada experiment i s'ha calculat la mitjana d'aquests per obtenir uns únics valors per a qualsevol de les condicions experimentals dins del rang d'estudi: 7,5 mg/L pel catalitzador del procés, el Fe(II), i 71.6 -873 mg/L pel peròxid d'hidrogen. El model global s'ha validat amb èxit amb nous experiments dins d'aquests rangs.

També s'ha estudiat l'efecte de la força iònica. Per fer-ho s'han analitzat les dades experimentals de diferents contaminants (paracetamol, carbamazepina i cafeïna) i la mescla dels mateixos tractats amb el procés foto-Fenton amb la presència de diferents sals i sense aquesta. Per poder veure l'efecte de les sals i/o la força iònica, s'han ajustat les dades experimentals a un model semi-empíric que té únicament dos paràmetres indicadors del comportament del procés: la velocitat de mineralització (k) i la conversió màxima assolida (ξ^{\max}). S'ha vist que la presència de clorurs presenta una tendència negativa sobre la conversió màxima independentment del tipus de contaminant i de la mescla. No s'ha vist un efecte clar de les sals, independentment de quina es tracti, ni de la força iònica en general sobre la velocitat de mineralització.

Finalment, s'ha utilitzat el model global de principis bàsics amb dades experimentals en presència de sals per analitzar si cal determinar de nou els paràmetres del model si hi ha presència de sals a la matriu. Els resultats obtinguts permeten predir l'evolució de la mineralització sense que calgui refer l'ajust del model.

Resumen

En este proyecto, se estudia el proceso foto-Fenton para eliminar la contaminación que produce un fármaco, el paracetamol.

Se busca un modelo de principios básicos que permita simular y predecir la evolución del peróxido de hidrógeno (reactivo del proceso) y del carbono orgánico total de un grupo de ensayo limitado realizado en el laboratorio. Una vez se han ajustado los datos experimentales del paracetamol como contaminante modelo, cuya concentración es de 40mg/L, se han obtenido los parámetros del modelo para cada experimento y se ha realizado la media de los mismos para obtener unos únicos valores para cualquiera de las condiciones experimentales dentro del rango de estudio: 7.5mg/L para el catalizador del proceso, el Fe(II), y 71.6 -873mg/L para el peróxido de hidrógeno. El modelo global se ha validado con éxito con nuevos experimentos dentro de estos rangos.

También se ha estudiado el efecto de la fuerza iónica. Para ello se han analizado los datos experimentales de diferentes contaminantes (paracetamol, carbamazepina y cafeína) y la mezcla de los mismos tratados con el proceso foto-Fenton con y sin la presencia de diferentes sales. Para poder ver el efecto de las sales y/o la fuerza iónica, se han ajustado los datos experimentales a un modelo semi-empírico que tiene únicamente dos parámetros indicadores del comportamiento del proceso: la velocidad de mineralización (k) y la conversión máxima alcanzada (ξ_{max}). Se ha visto que la presencia de cloruros presenta una tendencia negativa sobre la conversión máxima independientemente del tipo de contaminante y de la mezcla. No se ha visto un efecto claro de las sales, independientemente de cuál se trate, ni de la fuerza iónica en general sobre la velocidad de mineralización.

Finalmente, se ha utilizado el modelo global de principios básicos con datos experimentales en presencia de sales para analizar si es necesario determinar de nuevo los parámetros del modelo si hay presencia de sales en la matriz. Los resultados obtenidos permiten predecir la evolución de la mineralización sin necesidad de rehacer el ajuste del modelo.

Abstract

In this project, the photo-Fenton process is studied to eliminate the contamination produced by a drug, paracetamol.

A first principles model allows the simulation and prediction of the evolution of hydrogen peroxide (process reactive) and total organic carbon from a limited test group performed in the laboratory. Once the experimental data of paracetamol as a model contaminant have been adjusted, whose concentration is 40mg/L, the parameters of the model for each experiment have been obtained and the average of them has been made to obtain unique values for any of the experimental conditions within the study range: 7.5mg/L for the catalyst of the process, Fe(II), and 71.6 -873mg/L for hydrogen peroxide. The global model has been successfully validated with new experiments within these ranges.

The effect of ionic strength has also been studied. The experimental data of different contaminants (paracetamol, carbamazepine and caffeine) and the mixture of the same treated with the photo-Fenton process with and without the presence of different salts have been analyzed. To see the effect of salts and/or ionic strength, the experimental data have been adjusted to a semi-empirical model that has only two parameters that indicate the behavior of the process: the rate of mineralization (k) and the maximum conversion achieved (ξ_{max}). It has been seen that the presence of chlorides presents a negative trend on the maximum conversion regardless of the type of contaminant and the mixture. No clear effect of salts, regardless of which salts, or of the ionic force in general on the rate of mineralization has been seen.

Finally, the global model of basic principles with experimental data in the presence of salts has been used to analyze if it is necessary to determine again the parameters of the model if there is presence of salts in the matrix. The results obtained allow predicting the evolution of mineralization without the need to redo the adjustment of the model.



Agraïments

A la meva tutora, Montserrat Pérez Moya, per la seva disposició i per aconsellar-me i guiar-me durant la realització d'aquest treball.

Al Kourosh, per ajudar-me i resoldre tots els dubtes que m'han anat sorgint.

Als meus pares i a la meva germana, per tot el suport i confiança que m'han transmès, no només en la realització d'aquest treball sinó al llarg de tot el grau.

I per últim, als meus amics, que en els moments d'estrès i nervis sempre han estat animant-me i recolzant-me.

Índex

RESUM	II
RESUMEN	III
ABSTRACT	IV
AGRAÏMENTS	VI
1. INTRODUCCIÓ	9
1.1 Motivació	9
1.2 Objectius	9
1.3 Etapes del projecte	10
2 FONAMENTS TEÒRICS	11
2.1 Tractament d'aigües residuals	11
2.2 Processos d'oxidació avançada.....	11
2.2.1 Processos Fenton i Foto-Fenton.....	12
2.3 Força iònica	18
2.4 Contaminants emergents	18
2.4.1 Paracetamol.....	19
2.4.2 Carbamazepina	20
2.4.3 Cafeïna	21
2.5 Indicadors de la qualitat de l'aigua	22
2.6 Mètodes analítics	23
2.6.1 Determinació del Carboni Orgànic Total (TOC).....	23
2.6.2 Determinació del H ₂ O ₂ per espectrofotometria UV-Visible	26
3. MODELITZACIÓ DEL PROCÉS FOTO-FENTON AMB EL PARACETAMOL COM A CONTAMINANT	28
3.1 Fonament del model.....	28
3.2 Disseny d'experiments.....	32
3.3 Ajust i simulació	33
3.4 Validació.....	39
4. MODELITZACIÓ DEL PROCÉS FOTO-FENTON AMB PRESENÇA DE SALS	42
4.1 Model semi empíric	42
4.2 Condicions experimentals.....	43
4.3 Dades experimentals	47

4.4	Efecte de la força iònica en el procés foto-Fenton	49
4.5	Simulació en el model de principis bàsics pel PCT en presència de sals a la matriu	58
5.	CONCLUSIONS	61
6.	ANÀLISI ECONÒMICA	63
7.	BIBLIOGRAFIA	65
8.	ANNEX	70
8.1.	Annex apartat 3	70
8.1.1	Dades experimentals	70
8.1.2	Iteracions funció objectiu i estimació de paràmetres	75
8.1.3	Taules de dades obtingudes de la simulació i representacions.	78
8.1.4	Funció interpolació i dades interpolades	100
8.2	Annex apartat 4	105
8.2.1	Taula resum	105
8.2.2	Dades i simulacions dels experiments amb presència de sals en el model de principis bàsics	106

1. Introducció

1.1 Motivació

L'aigua és un recurs escàs i imprescindible per a la vida. És un dels ecosistemes més importants del planeta i el component més abundant en els éssers vius. És necessària en tota activitat humana i està present en gairebé tots els processos industrials. Tot i que la major part de la terra és aigua, només una petita part és potable.

És per aquest motiu, que cal que la seva qualitat sigui la màxima possible, cosa cada cop més complicada pel mal ús que se'n fa, els residus que s'hi generen i la contaminació d'aquesta.

Aquest treball, es centra en un mecanisme capaç d'eliminar aquests tipus de contaminants presents en l'aigua, el procés foto-Fenton, que pertany als processos d'oxidació avançada (POAs).

A més, s'ha decidit estudiar l'efecte dels ions clorur i sulfat, ja que es troben presents en l'aigua i s'ha vist que interfereixen, en determinada mesura, en l'eficàcia del procés foto-Fenton.

1.2 Objectius

Els objectius que es plantegen per aquest projecte son els següents:

- Estudiar i conèixer el procés foto-Fenton
- Escollir un model de principis bàsics pel procés foto-Fenton
- Determinar els paràmetres del model (utilitzant els programes Matlab i Simulink) per un contaminant determinat, el paracetamol, a partir de dades experimentals.
- Simular i validar el model de principis bàsics.
- Estudiar l'efecte de sals a la matriu del procés foto-Fenton, fixant dos paràmetres indicadors, la velocitat de mineralització i la conversió màxima assolida:
 - Analitzar si l'efecte de la força iònica és independent de les sals (sulfats i clorurs) presents a la matriu.
 - Analitzar si l'efecte de la força iònica és independent del contaminant (paracetamol, carbamazepina, cafeïna i mescla).
- Avaluar si els paràmetres del model foto-Fenton son vàlids amb dades experimentals obtingudes en presència de sals a la matriu del sistema d'estudi.

1.3 Etapes del projecte

Per tal de veure amb més claredat el procés de realització del projecte, s'ha elaborat un diagrama de blocs (Figura 1) amb cada una de les etapes que s'han anat seguint.

Primer de tot, es va realitzar una recerca bibliogràfica per tal de conèixer el procés foto-Fenton. En què consisteix el mètode, les variables que afecten a la mineralització del contaminant i la detecció posterior del carboni orgànic total.

En la primera part, es van ajustar les dades experimentals en un model de principis bàsics configurat amb el programari de Matlab i del qual es van estimar uns determinats paràmetres per cada experiment.

Després, es va realitzar la mitjana d'aquests paràmetres per veure com s'ajustaven les dades experimentals simulades.

Es va calcular l'error entre les dades simulades i les experimentals i, finalment, es va validar per comprovar-ne l'ajust.

En la segona part, es va partir d'un model empíric i d'unes dades experimentals amb presència de sulfats i clorur. Es van analitzar els efectes de la força iònica amb la dependència de sals i de contaminant respecte dos paràmetres indicadors, la mineralització i la conversió màxima.

Finalment, es va avaluar si els paràmetres del model de principis bàsics pel procés foto-Fenton eren vàlids amb les dades experimentals en presència de sals.

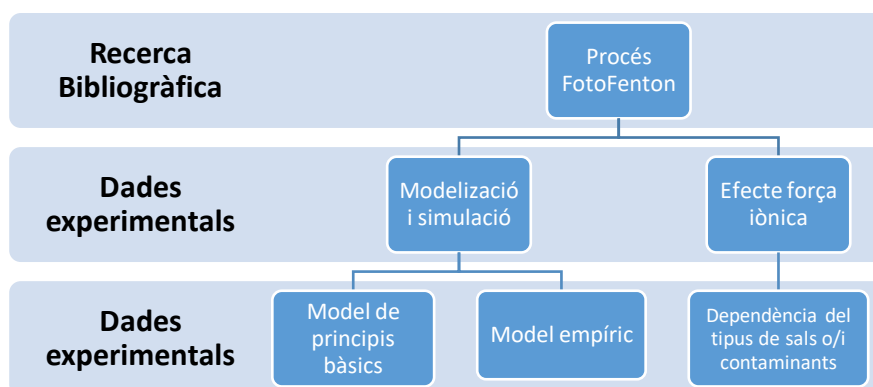


Figura 1. Diagrama de blocs de les etapes del projecte.

2 Fonaments teòrics

2.1 Tractament d'aigües residuals

L'objectiu del tractament d'aigües residuals és l'eliminació de tot tipus de contaminants, fisicoquímics i biològics presents en l'aigua efluent per l'ús humà. Aquest tractament, es desglossa en tres de més específics. El tractament primari, on intervenen processos fisicoquímics per reduir la concentració d'oli, grassa i sòlids; el tractament secundari, on es tracta biològicament la matèria orgànica dissolta transformant-la en sòlids en suspensió de fàcil extracció; i el tractament terciari, en el qual es dona l'oxidació dels contaminants orgànics persistents dissolts en l'aigua. Els mètodes utilitzats en aquest últim tractament son anomenats processos d'oxidació avançada (POAs).

2.2 Processos d'oxidació avançada

Els processos d'oxidació avançada (POAs) son l'opció més favorable pel tractament d'aigües contaminades amb substàncies tòxiques difícilment biodegradables i per l'eliminació de microorganismes nocius (Pignatello et al., 2006).

Els POAs estan basats en la generació de radicals oxidants forts, com per exemple, els radicals hidroxil (-OH) que s'encarreguen d'oxidar els contaminants orgànics. El radical hidroxil, pot ser generat per mitjans fotoquímics (inclosa la llum solar) o bé per altres formes d'energia (no fotoquímics) (Ghime & Ghosh, n.d.)

En la següent taula en podem veure alguns exemples de cada un:

Taula 1. Classificació dels processos d'oxidació avançada (Font: (Doménech et al., 2004)

Fotoquímics	No fotoquímics
Ozonització en medi alcalí (O_3/OH^-)	Oxidació en aigua sub/supercrítica
Ozonització amb peròxid d'hidrogen (O_3/H_2O_2)	Processos fotoquímics
Fenton	Fotòlisis de l'aigua en l'UV de buit
Oxidació electroquímica	UV/ H_2O_2
Radiòlisis i tractament amb feix d'electrons	UV/ O_3
Plasma no tèrmic	Foto-Fenton
Descàrrega electrohidràulica - ultraso	Fotocatàlisi heterogènia

Els avantatges d'aquest tipus de tractament sobre els mètodes convencionals són:

1. Els contaminants no només canvien de fase sinó que es transformen químicament.
2. Generalment, s'aconsegueix una mineralització completa del contaminant.
3. No es generen fangs que a la vegada requereixin un procés de tractament posterior.
4. Son útils per contaminants refractaris que necessiten altres mètodes de tractament, principalment biològics.
5. Serveixen per tractar contaminants a molt baixa concentració.
6. Gairebé no es formen subproductes de reacció i si és així, es formen en baixa concentració.
7. Son ideals per disminuir la concentració de compostos formats per pretractaments alternatius, com la desinfecció.
8. Milloren les propietats organolèptiques de l'aigua tractada.
9. Consumeixen menys energia que altres mètodes.
10. Eliminen efectes sobre la salut de desinfectants i oxidants residuals com el clor.

Tot i els beneficis que presenten aquests tipus de processos, tenen un inconvenient, l'elevat cost en comparació a altres tractaments convencionals. Aquest problema, es pot resoldre mitjançant la combinació d'ambdós tractaments (Ghime & Ghosh, 2020).

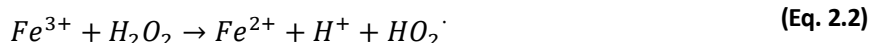
2.1.1 Processos Fenton i Foto-Fenton

H.J. Fenton (1894) va descobrir que el peròxid d'hidrogen (H_2O_2) podia ser activat per sals ferroses (Fe^{2+}) per oxidar l'àcid tartàric. Però no va ser fins a finals de la dècada del 1960 que es va començar a aplicar com a procés d'oxidació per destruir la matèria orgànica tòxica.

El procés foto-Fenton es va utilitzar principalment per tractar aigües residuals mitjançant l'oxidació radical i la floculació. El H_2O_2 és catalitzat per ions ferrosos per descompondre's en radicals hidroxils ($HO\cdot$). Aquests, tenen una forta capacitat d'oxidació ($E^0=2,8V$) respecte a l'elèctrode d'hidrogen estàndard i pot oxidar eficaçment els contaminants orgànics refractaris en les aigües residuals i inclús mineralitzar-los completament en CO_2 , aigua i sals inorgàniques (Xu et al., 2019).

Reacció Fenton

Les dues reaccions principals involucrades en el procés són les següents:



En la primera, el Fe^{2+} s'oxida a Fe^{3+} i reacciona amb el H_2O_2 per formar radicals hidroxils en medi àcid ($pH < 3$). Aquesta reacció es coneix amb el nom de Haber-Weiss (Coha et al., 2021). La segona reacció, coneguda com a "Fenton-like", té lloc quan hi ha un excés de peròxid d'hidrogen i en la qual el Fe^{3+} es redueix a Fe^{2+} formant protons i radicals perhidroxils. Com que s'ha recuperat el Fe^{2+} , es torna a donar la primera reacció, formant més radicals hidroxils, i per tant, augmentant la degradació del contaminant (Jiang et al., 2010).

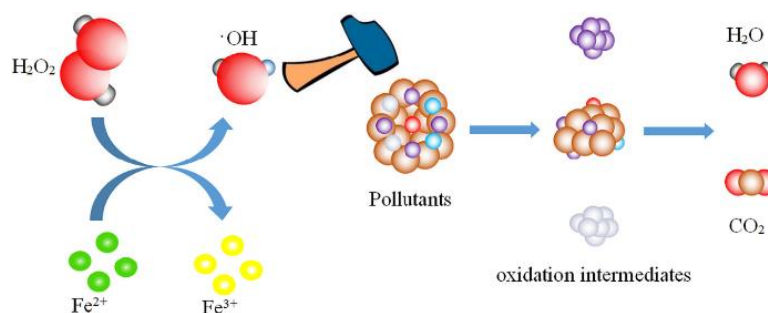
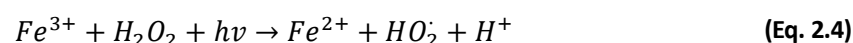


Figura 2. Mecanisme de reacció pel procés Fenton (Font: Zhang et al. 2019)

La reacció Fenton té molts avantatges, com el seu alt rendiment, la simplicitat (operat a temperatura ambient i a pressió atmosfèrica) per l'oxidació de compostos orgànics i que no presenta cap toxicitat. Cal dir també que té alguns inconvenients, com ara, el rang estricte de pH, l'alt consum de H_2O_2 i l'acumulació de llocs fèrrics que afecten l'eficiència d'oxidació. Aquests inconvenients han atret l'atenció de molts investigadors per la millora del procés Fenton (Xu et al., 2019).

Reacció Foto-Fenton

La combinació de peròxid d'hidrogen i radiació UV amb el ió Fe^{2+} o el ió Fe^{3+} produeix més radicals hidroxils, augmentant la taxa de degradació dels contaminants orgànics. La reacció Fenton acumula ions Fe^{3+} al sistema i la reacció no continua un cop consumits tots els ions Fe^{2+} . La regeneració fotoquímica de ions Fe^{2+} per foto-reducció dels ions Fe^{3+} es produeix en la reacció foto-Fenton. Els ions Fe^{2+} recentment generats, reaccionen de nou amb el peròxid d'hidrogen generant radicals hidroxils i ions fèrrics, i d'aquesta manera, el cicle continua:



El procés foto-Fenton ofereix un millor rendiment a pH àcid (≈ 3), quan els complexos hidroxil- Fe^{3+} són capaços d'absorbir gran radiació UV i/o visible, patint una foto-reducció i produint radicals hidroxils.

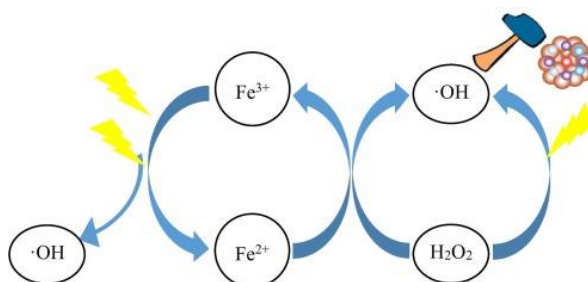


Figura 3. Mecanisme de reacció del procés foto-Fenton (Font: Zhang et al. 2019)

Es va veure que el procés foto-Fenton era més eficient que el tractament Fenton i, en alguns casos, l'ús de llum solar en lloc de radiació UV, va permetre reduir els costos del procés. Tanmateix, això ofereix una menor taxa de degradació dels contaminants (Ameta et al., 2018).

2.2.1.1 Factors que influeixen en el procés foto-Fenton

Hi ha diferents factors que afecten al rendiment del procés foto-Fenton. A continuació, se'n mencionen alguns i l'efecte que tenen sobre aquest.

- **pH**

Diversos estudis sobre la dependència del pH en la reacció foto-Fenton, han demostrat que el valor de pH òptim és, aproximadament, de 3. La raó d'aquesta dependència de pH es fa evident quan s'observa l'especiació de Fe(II) en funció del pH (Figura 4). A $\text{pH} < 2$, l'espècie predominant és l'hexaquoiron(III), $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$, que absorbeix feblement per sobre dels 300 nm en la regió ultraviolada. En canvi, a pH 3, l'espècie predominant és el $\text{Fe}(\text{OH})^{2+}$ que absorbeix a gran part de la regió espectral UV i experimenta una fotòlisi relativament eficient per produir Fe^{2+} i radicals hidroxils, els quals són els responsables de la degradació de la matèria orgànica (Machulek et al., 2012).

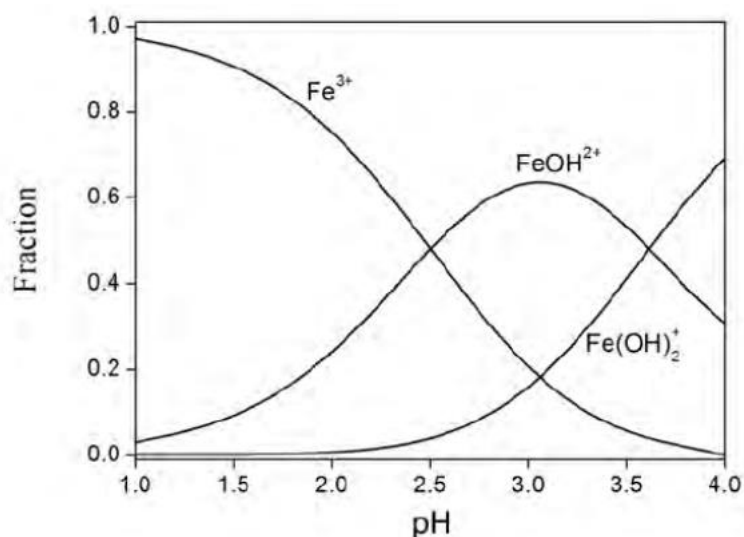


Figura 4. Especiació a 0.5mM Fe(III) entre pH 1 i 4 a 25°C (Font: Machulek et al. 2012)

- **Temperatura**

L'eficiència del procés (més mineralització en menys temps) augmenta gradualment amb la temperatura, ja que la generació de ions fèrrics (Fe^{3+}) a ions ferrosos (Fe^{2+}) és més ràpida a temperatures altes (Zapata et al., 2010).

Tanmateix, a temperatures per sobre dels 50 °C, disminueix l'estabilitat del H_2O_2 que es descompon en aigua i oxigen. Per sobre d'aquesta temperatura, també s'observa una disminució del ferro dissolt, perquè aquest precipita i fa que disminueixi dràsticament la taxa de degradació del contaminant (Gou et al., 2021). Per tant, el més recomanable és treballar a temperatures entre 10 i 40 °C (Ortega-Gómez et al., 2012).

- **Concentració de peròxid d'hidrogen i sal de ferro**

Tant la concentració de sal de ferro (catalitzador) com la del peròxid d'hidrogen (reactiu), són factors de gran importància en la mineralització del contaminant, ja que el primer afecta la cinètica del procés i el segon a l'eficàcia.

El H_2O_2 requereix grans quantitats de Fe^{2+} per la seva descomposició en radicals hidroxils. Tot i això, la velocitat de degradació no augmenta a mesura que ho fa la concentració de l'oxidant i del catalitzador com s'és esperat, sinó que grans quantitats d'aquestes substàncies redueixen l'eficiència del procés. (Neyens & Baeyens, 2003). Això passa perquè un augment de la concentració de H_2O_2 pot promoure la captació de radicals i la posterior formació d'un nou radical (HO_2) amb un potencial d'oxidació considerablement menor que el del radical hidroxil (Domínguez et al., 2012).

Cal dir que és necessari conèixer el contaminant que es vol eliminar i la caracterització de l'aigua a tractar per conèixer les quantitats de peròxid d'hidrogen i sals de ferro a utilitzar.

- **Ions inorgànics**

Les oxidacions de les reaccions Fenton i foto-Fenton dels compostos orgànics són inhibides en diferents graus pels ions fosfat, sulfat, fluor, bromur i clorur, depenent de les seves concentracions. Aquests anions estan presents en les aigües residuals o bé formats com a productes finals a partir dels compostos que s'estan degradant. La inhibició d'aquestes espècies pot ser deguda a la precipitació de ferro, l'eliminació d' OH^- o la formació d'un complex menys reactiu amb el Fe(III) dissolt (Pignatello et al., 2006).

En aquest treball, s'ha posat èmfasis en els ions clorurs i sulfats els quals es troben en les aigües residuals en uns rangs de concentració de 133-538 mg/L i 161-641 mg/L, respectivament (Soriano-Molina et al., 2019).

- Sulfats

A pH 3, el pas fotoquímic de la reacció foto-Fenton pot ser fortament inhibida per concentracions relativament baixes de ions sulfat, que formen complexos amb els ions ferrosos i fèrrics, $FeSO_4$ i $FeSO_4^+$ respectivament:



Els ions sulfat també són capaços d'eliminar radicals hidroxils de manera competitiva, cosa que afecta encara més la reactivitat general.

Dues fonts comunes de ions sulfat en els sistemes foto-Fenton són l'ús d'una sal de sulfat fèrric o ferrós com a font de ferro agregada al sistema, o d'àcid sulfúric, H_2SO_4 , per ajustar el pH de la solució (Machulek et al., 2012).

- Clorurs

L'addició de clorurs a una solució aquosa que conté ions fèrrics i radicals hidroxils, dona lloc a la formació de complexos menys reactius.

A continuació, es mostren les diferents reaccions que poden tenir lloc entre els ions Fe^{3+} i Fe^{2+} amb el ió clorur (Devi et al., 2013):



El ió clorur, juntament amb els radicals hidroxils, també genera espècies amb menys poder oxidatiu, com podem veure en les reaccions següents (Rommozzi et al., 2020):



2.3 Força iònica

La força iònica d'una dissolució, és una mesura de la concentració de ions en aquesta. Els compostos iònics, quan es dissolen en aigua, es dissocien en ions. La concentració total d'electròlits en dissolució, afectarà propietats importants com la constant de dissociació o la solubilitat de diferents sals.

El concepte de força iònica va ser introduït l'any 1921, per G.N Lewis i M. Randall en descriure els coeficients d'activitat dels electròlits forts (Sastre de Vicente, 2004).

La força iònica (F.I) és una mesura de la concentració total de ions, i es defineix amb la següent equació:

$$F.I = \frac{1}{2} \sum_i m_i \cdot z_i^2 \quad (\text{Eq. 2.12})$$

on m_i i z_i són la molalitat i la càrrega, de cada espècia iònica, respectivament. Tots els cations i anions presents en la solució s'inclouen en el càlcul. Òbviament, per cada càrrega positiva hi haurà una càrrega negativa (Gary, 2009).

2.4 Contaminants emergents

Un grup de contaminants potencialment perillosos són els anomenats contaminants emergents, entre els quals es troben els fàrmacs, els productes d'ús personal, els surfactants, els retardants de foc, els additius industrials, els esteroides, les hormones, així com els subproductes de desinfecció de l'aigua. La característica principal d'aquest grup de contaminants és que degut a la seva alta producció i consum, i, per tant, la consegüent introducció continua en l'ambient, no necessiten persistir en aquest per ocasionar efectes negatius (Barceló, 2003).

Diverses investigacions han mostrat que s'observa una diferència significativa en la degradació dels contaminants presents en les aigües residuals amb diferents càrregues orgàniques. Així doncs, la concentració és un paràmetre important que afecta l'eficiència de degradació dels contaminants orgànics. La majoria dels processos d'optimització de Fenton, poden obtenir una alta eficiència de degradació amb contaminants orgànics de baixa concentració. Un augment d'aquesta, condueix a una menor eficiència de degradació en un interval de temps més gran (Zhang et., al 2019).

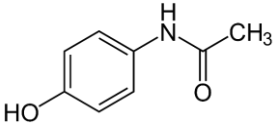
En aquest treball, s'han estudiat les dades experimentals de la degradació tres contaminants, el paracetamol, la carbamazepina i la cafeïna, emprant el procés foto-Fenton.

2.4.1 Paracetamol

El paracetamol, o també anomenat acetaminofèn, és un dels analgèsics i antipirètics receptats amb més freqüència en tot el món. Es va començar a comercialitzar l'any 1956 en el Regne Unit. Des de llavors, ha esdevingut popular en l'àmbit de la medicina.

En aquesta taula, podem veure algunes de les característiques fisicoquímiques del paracetamol:

Taula 2. Estructura i propietats fisicoquímiques del paracetamol (Font: National Center for Biotechnology Information - NCBI)

Descripció		Propietats fisicoquímiques	
Estructura		Massa molar	151,17 g/mol
		Temperatura de fusió	169-170,5 °C
		Temperatura d'ebullició	420°C
Formula	$C_8H_9O_2$	Densitat (20°C)	1,293 g/cm ³
Nomenclatura IUPAC	N-(4-hidroxifenil)etanamida	Solubilitat en aigua (20°C)	1,4 g/100ml
Número CAS	103-90-2	pka	9,4

En les dosis terapèutiques apropiades, no s'han observat efectes adversos greus, però el consum continuat i perllongat del medicament pot ocasionar reaccions secundàries, especialment en el fetge (Jozwiak-Bebenista & Nowak, 2014).

En cas de sobredosis, hi ha risc d'intoxicació. Això pot passar si es consumeixen 7,5 g de paracetamol en una sola dosi, en adults, o 140 mg/kg en nens. La conseqüència podria ser una hepatitis citolítica, que pot induir a una necrosi hepàtica completa i irreversible, resultant en una insuficiència hepàtica aguda, insuficiència hepatocel·lular, acidosi metabòlica i encefalopatia que poden conduir al coma i a la mort (Kingsley Ogemdi, 2019).

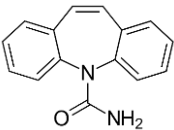
Pel que fa a la presència de paracetamol en les aigües residuals, se n'han detectat concentracions fins a 11,3 µg/L en afluents d'EDARs europees però també en aigües naturals, amb concentracions superiors a 65 µg/L (Audino et al., 2019).

2.4.2 Carbamazepina

La carbamazepina, o també coneguda sota el nom de Tegretol, va ser descoberta a Suècia l'any 1953 per Walter Schindler i va començar a ser comercialitzada l'any 1962. La carbamazepina és un medicament anticonvulsiu utilitzat pel control de l'epilèpsia i el dolor neuropàtic. També forma part del tractament de l'esquizofrènia i el desordre bipolar (Tolou-Ghamari et al., 2013).

En aquesta taula, podem veure l'estructura i algunes de les característiques fisicoquímiques de la carbamazepina:

Taula 3. Estructura i propietats fisicoquímiques de la carbamazepina. (Font: PubChem)

Descripció		Propietats fisicoquímiques	
Estructura		Massa molar	236,27 g/mol
		Temperatura de fusió	189-192 °C
		Temperatura d'ebullició	399,6 ± 45 °C
Formula	$C_{15}H_{12}N_2O$	Densitat (25°C)	1,28 g/cm ³
Nomenclatura IUPAC	Benzo[b][1]benzazepamina-11-carboxamida	Solubilitat en aigua (25°C)	1,8g/100ml
Número CAS	298-46-4	pKa	13,9

En adults, les dosis de més de 24 grams poden causar alteracions neuromusculars i per sobre dels 60 grams, es pot desenvolupar una disfunció cardíaca greu (Maan et al., 2021).

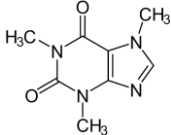
Pel que fa a la presència de la carbamazepina en les aigües residuals, a Alemanya, se n'han detectat concentracions superficials de fins a 1075 ng/L. En el riu Ebre, el valor mesurat correspon a 30 ng/L. Diversos investigadors han determinat que al seu pas pel sistema de tractament d'aigües residuals, no és eliminat de manera significativa (Tejada et al., 2014).

2.4.3 Cafeïna

La cafeïna és un constituent natural present en més de 60 espècies de plantes. La podem trobar en molts dels aliments i begudes que consumim en el nostre dia a dia; com ara el cafè, el te, la xocolata i alguns refrescos. Els seus efectes principals són psicoestimulants, respiratoris, múscul-esquelètics i cardiovasculars (Pardo et al., 2007).

En aquesta taula, podem veure l'estructura i algunes de les característiques fisicoquímiques de la cafeïna:

Taula 4. Característiques fisicoquímiques de la cafeïna. (Font: International Chemical Safety Cards – ICSCs)

Descripció		Propietats fisicoquímiques	
Estructura		Massa molar	194,19 g/mol
		Temperatura de fusió	235 °C
		Temperatura d'ebullició	178 °C
Formula	$C_8H_{10}N_4O_2$	Densitat (25°C)	1,23 g/cm ³
Nomenclatura IUPAC	1,3,7-trimetilpurina-2,6-diona	Solubilitat en aigua (25°C)	2,17g/100ml
Número CAS	58-08-2	pKa	14

La cafeïna s'absorbeix ràpidament, produint el màxim efecte 30 minuts després d'haver estat consumida i si se'n consumeix grans quantitats, pot donar lloc a una intoxicació. Tot i això, en algunes persones, es pot produir quan se'n consumeixen 250 mg al dia. Els símptomes poden ser: insomni, nerviosisme, excitació, augment de la diüresi i problemes gastrointestinals. La dosi letal mitjana estimada de la cafeïna és de 10 g, que equivaldria a unes 100 tasses de cafè (Ortweiler et al., 1985).

Pel que fa a la presència de cafeïna en les aigües residuals, superficials i potables d'Espanya, se n'han trobat els valors màxims a la província de Madrid, amb una concentració de 13,17 ng/L en aigües superficials i de 75 ng/L en aigües potables (Dafouz Ramírez & Valcárcel Rivera, 2017).

2.5 Indicadors de la qualitat de l'aigua

Els indicadors de la qualitat de l'aigua són paràmetres que suggereixen, proporcionen informació o descriuen l'estat de la qualitat de l'aigua que s'està estudiant.

Segons consta en l'Annex V, apartat 1.1 de la Directiva Marc de l'Aigua (DMA), s'estableixen paràmetres representatius dels indicadors de qualitat biològica, hidromorfa i fisicoquímica rellevants per rius, llacs, masses d'aigua superficials, artificials i modificades. A més, se segueixen els criteris establerts en les diferents legislacions d'aplicació pel que fa a la secció de paràmetres a controlar. Seguidament, es mostra una llista dels indicadors de qualitat establerts per l'avaluació de cada element de qualitat:

- **Biològics:**
 - Bacteris
 - Virus
 - Fongs
 - Algues

- **Hidromorfològics:**
 - Règim hidrològic
 - Continuitat del riu
 - Condicions morfològiques

- **Químics i fisicoquímics:**
 - Temperatura
 - pH
 - Conductivitat
 - Turbidesa
 - Salinitat i duresa
 - Matèria orgànica (DBO, DQO, TOC i OD)

2.6 Mètodes analítics

2.6.1 Determinació del Carboni Orgànic Total (TOC)

El carboni orgànic total és un paràmetre que s'utilitza per valorar la qualitat de l'aigua en un determinat lloc, concretament, és el carboni que forma part de les substàncies orgàniques en l'aigua.

En general, el carboni està present en dues formes: carboni inorgànic (IC) i carboni orgànic (OC). Els minerals com la calcita i la dolomita són els predominants del carboni inorgànic dels sòls; i el diòxid de carboni, l'àcid carbònic i els seus productes de dissociació, representen el carboni inorgànic de les aigües.

La suma del carboni orgànic (TOC) i del carboni inorgànic (IC) representa el carboni total (TC) que hi ha en una mostra.

Hi ha diferents mètodes per la determinació del TOC. Els mètodes més emprats són: l'oxidació del carboni orgànic mitjançant combustió humida o seca i per productes químics.

La mesura del TOC es pot aconseguir mitjançant dos mètodes, el directe o l'indirecte. La idea és convertir les diferents formes de carboni en una forma simple, CO₂, que és fàcil de mesurar quantitativament.

En el mètode directe, el carboni orgànic present en la mostra es mesura de dues maneres. La primera consisteix a eliminar el IC mitjançant un tractament àcid i després mesurar el TOC. El segon mètode, no elimina el IC i utilitza l'oxidació química per determinar el TOC.

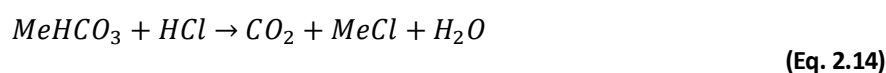
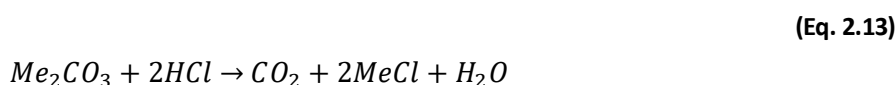
En el mètode indirecte, el contingut de TOC s'obté mitjançant la resta del contingut de IC del TC. El TC es mesura per oxidació de tot el carboni present i el IC es mesura en el gas de purga del tractament àcid o per descomposició després de l'eliminació del TOC (Bisutti et al., 2004).

Equip de mesura

L'equip de mesura que hi ha als laboratoris és el TOC-V_{CSN}, de la marca *Shimadzu* i amb el qual s'han realitzat els experiments que es presentaran més endavant. Aquest, treballa amb el mètode indirecte comentat anteriorment i és utilitzat en mostres que generen espuma durant el procés de borbolleig.

En el procés de mesura del TC, primer hi té lloc un procés de combustió a 680 °C per formar diòxid de carboni. El gas portador transporta el CO₂ i altres productes de combustió fins al deshumidificador, on serà refredat i deshidratat. Seguidament, el gas portador passa pel depurador halogen fins a arribar al detector de gasos infraroig no-dispersiu (NDIR) on es detecta el diòxid de carboni generat anteriorment. El senyal que detecta el NDIR forma un pic, l'àrea del qual és proporcional a la concentració de TC de la mostra. A partir de les rectes de calibratge de l'equip, aquest és capaç de calcular la concentració de TC a través de l'àrea generada pel pic.

En el procés de mesura del IC, es produeix l'acidificació de la mostra mitjançant àcid clorhídric per poder assolir un pH de 3. És a aquest pH on els carbonats que estan presents a la mostra generen diòxid de carboni mitjançant les reaccions següents:



El diòxid de carboni produït pels carbonats i el dissolt a la mostra són volatilitzats per mitjà del bombolleig amb aire o gas. El gas transporta el CO₂ al detector NDIR, on es generarà un pic a partir del qual, de la mateixa manera que s'ha mesurat anteriorment el TC, es calcularà la concentració d'IC.

A la figura següent es pot veure el diagrama de flux de l'equip de mesura del TOC on estan representats els aparells utilitzats en el procés.

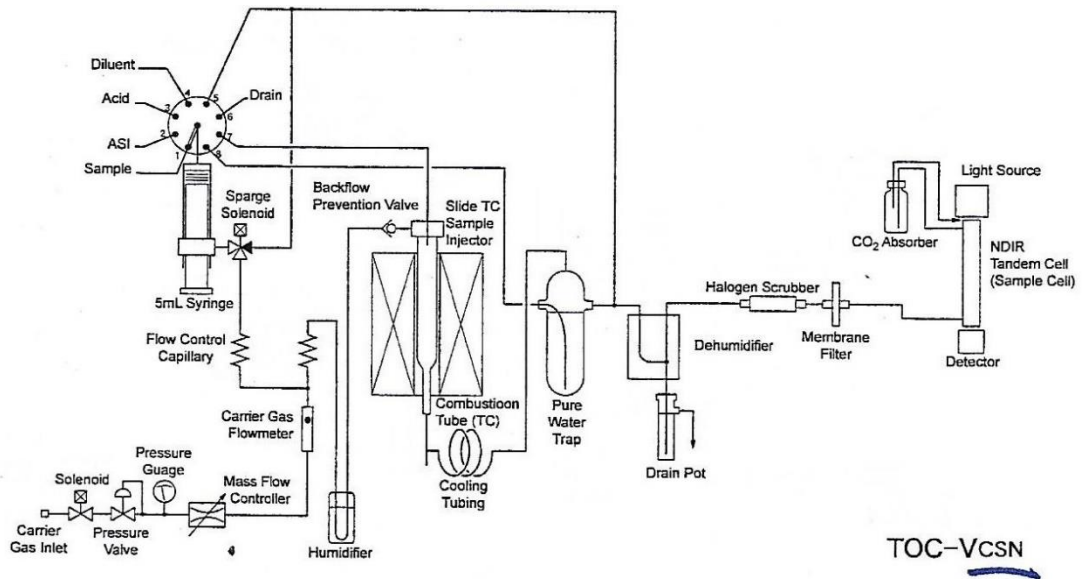


Figura 5. Diagrama de flux del TOC-V_{CSN}. Font: TOC-V_{CSH/CSN} User's Manual.

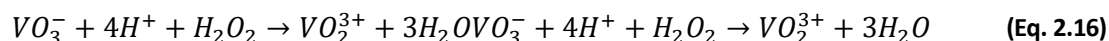
Abans de començar el procés de detecció, cal determinar quines de les rectes de calibratge que disposa l'aparell s'adapten millor al TOC de la substància que es vol analitzar. Per això, primer cal calcular el TOC teòric mitjançant la següent equació:

$$[TOC]_{inicial\ teòric} = \frac{[Contaminant \left(\frac{mg}{l}\right)] \cdot 12 \cdot n^{\circ} de\ C\ del\ contaminant}{Pes\ molecular\ del\ contaminant \cdot Puresa} \quad (Eq. 2.15)$$

Seguidament, s'escollirà el rang que millor s'ajusti a les concentracions dels contaminants i se seleccionarà el nombre d'injeccions mínimes i màximes que volem que faci l'equip. A partir d'aquí, ja es pot introduir la mostra i iniciar el procés de detecció.

2.6.2 Determinació del H₂O₂ per espectrofotometria UV-Visible

El procés d'aturada de la degradació de contaminant es basa en la reacció entre el peròxid d'hidrogen i el metavanadat amònic en medi àcid. En aquesta reacció hi té lloc l'oxidació del ió vanadat (VO₃⁻) que forma el catió peroxovanadi (VO₂³⁺) i l'oxidació del H₂O₂ a aigua:



Perquè reaccionin tot el peròxid d'hidrogen que hi ha a la mostra, cal que hi hagi un excés de vanadat amònic. D'aquesta manera, com que la relació estequiomètrica entre el peròxid d'hidrogen i el ió peroxovanadi és d'1 a 1, quantificant la concentració de peroxovanadi final sabrem la concentració de peròxid d'hidrogen inicial ([VO₂³⁺] = [H₂O₂]).

El catió VO₂³⁺ presenta un màxim d'absorbància a 450 nm de longitud d'ona, per tant, la seva concentració es podrà quantificar mitjançant l'espectrofotòmetre UV-Visible.

Espectrofotometria UV-Visible

L'espectrofotometria Ultraviolada-Visible és la branca de l'espectrofotometria que treballa en la regió de l'UV-visible de l'espectre de radiació electromagnètica. La regió ultraviolada (UV), va des de longituds d'ona de 190 nm a 380 nm i la regió visible (vis), de 380 nm a 780 nm. Aquesta segona regió, comprèn les longituds d'ona que pot veure l'ull humà, és a dir, on la llum apareix com a color.

El fonament de l'espectrofotometria, es deu a la capacitat de les molècules per absorbir radiacions. Aquestes, poden absorbir energia lluminosa i emmagatzemar-la en forma d'energia interna. Quan la llum (considerada com energia) és absorbida per una molècula, s'origina un salt des d'un estat energètic fonamental, E1, a un estat de major energia (estat excitat), E2. L'energia absorbida serà la necessària per fer el salt a l'estat excitat. Per últim, la molècula excitada allibera l'energia absorbida fins a l'estat energètic fonamental (EF).

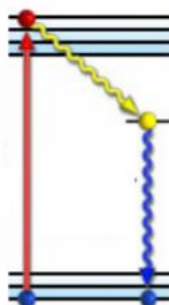


Figura 6. Diagrama de nivells d'energia en una molècula. (Font: Abril Díaz et al., 2010)

Cal destacar que cada molècula té una sèrie d'estats excitats o bandes que les distingeixen de la resta, i l'absorció que presenten a diferents longituds d'ona és un senyal d'identitat d'aquesta.

Aquesta tècnica es basa en la llei de Lambert-Beer, que relaciona l'absorció detectada per l'espectrofotòmetre amb la concentració de la mostra irradiada:

$$A = \varepsilon \cdot b \cdot c \quad (\text{Eq. 2.17})$$

On A és l'absorbància, ε és el coeficient molar d'absorció de la molècula, b és la longitud que recorre la llum al medi i c és la concentració de la molècula absorbent del medi.

Equip

El funcionament de l'espectrofotòmetre consta de diferents fases. En la primera, es genera la radiació electromagnètica mitjançant dues làmpades de descàrrega, una de Deuteri i l'altra de Tungstè. Seguidament, la llum passa per un monocromador on es selecciona la longitud d'ona desitjada. Posteriorment, el feix es divideix en dos: un travessa el blanc i l'altre la mostra. Finalment, la radiació no absorbida és detectada pels fotodíodes (detectors).

A partir de l'absorbància mesurada, es pot calcular la concentració d' H_2O_2 mitjançant una recta de calibratge. Les concentracions obtingudes ens diran en quin moment de la reacció ens trobem, si s'ha esgotat el reactiu i, per tant, deixaran de formar-se radicals hidroxils. A més, com a conseqüència, s'aturarà la mineralització dels compostos.

3. Modelització del procés foto-Fenton amb el Paracetamol com a contaminant

Es proposa un model de principis bàsics (Cabrera, et al. 2012) per estudiar l'evolució del contaminant (PCT). El model escollit utilitza reaccions simplificades del procés foto-Fenton per simular l'evolució del TOC i del peròxid d'hidrogen. Un cop escollit el model, per tal de fer l'estimació dels paràmetres que el caracteritzen i posteriorment poder simular i validar el procés, s'utilitza el programa *Matlab* i l'extensió *Simulink*.

S'han fet servir les dades experimentals realitzades en el Treball de Final de Grau del Javier Yus (2016). Aquest conjunt d'experiments emprava 40 mg/L de PCT, 7,5 mg/L de Fe(II) i el reactiu peròxid d'hidrogen de 71,6-873,4 mg/L. Es troben resumits en l'Annex 8.1.1.

A més, s'han simulat tres ajustos diferents per cada experiment. El primer, amb els paràmetres inicials del model; el segon, amb els paràmetres ajustats per l'experiment; i el tercer, amb la mitjana dels paràmetres obtinguts de cada experiment.

3.1 Fonament del model

En aquest model, el procés d'oxidació foto-Fenton està representat per quatre grans grups de reaccions: el cicle foto-Fenton en si; la generació/consum d'oxigen com a resultat de les reaccions que hi tenen lloc; l'oxidació de la matèria orgànica, així com la formació de l'intermedi i la mineralització final que completa el tractament del contaminant.

El model proposat assumeix nou processos i vuit estats, que són: les dues espècies fèrriques (Fe^{2+} i Fe^{3+}); el peròxid d'hidrogen, H_2O_2 ; els radicals formats a partir del peròxid, R; l'oxigen dissolt, OD; i tres estats que representen la matèria orgànica: dos tipus d'orgànics parcialment oxidats i el compost original present al començament de la reacció, anomenats MX_1 , MX_2 i M, respectivament.

A la Figura 6 es pot veure l'esquema de reacció esmentat:

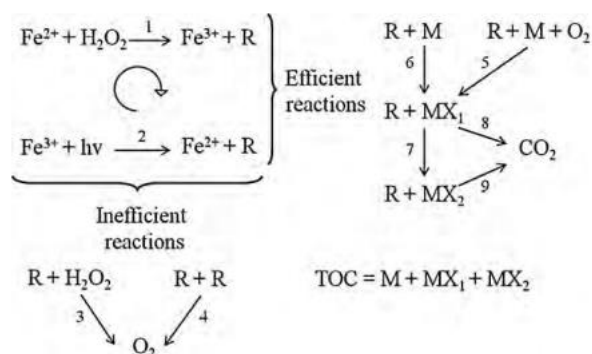


Figura 7. Esquema de reacció. (Font: Cabrera et al., 2012)

Aquests, són els responsables del TOC mesurat. Una vegada iniciat el procés foto-Fenton, el carboni orgànic mesurat resulta del balanç de massa de les espècies constituents del carboni: carboni orgànic no reaccionat, material orgànic parcialment oxidat i espècies inertes que tenen temps de mineralització llargs o no són mineralitzables. Les expressions cinètiques proposades es presenten a continuació:

$$r_1 = k_1 \cdot [\text{Fe}^{2+}] \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \quad (\text{Eq. 3.1})$$

$$r_2 = k_2 \cdot [\text{Fe}^{2+}] \cdot [I] \quad (\text{Eq. 3.2})$$

$$r_3 = k_3 \cdot [R] \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \quad (\text{Eq. 3.3})$$

$$r_4 = k_4 \cdot [R] \cdot [R] \quad (\text{Eq. 3.4})$$

$$r_5 = k_5 \cdot [M] \cdot [R] \cdot [\text{O}_2] \quad (\text{Eq. 3.5})$$

$$r_6 = k_6 \cdot [M] \cdot [R] \quad (\text{Eq. 3.6})$$

$$r_7 = k_7 \cdot [\text{MX}_1] \cdot [R] \quad (\text{Eq. 3.7})$$

$$r_8 = k_8 \cdot [\text{MX}_1] \cdot [R] \quad (\text{Eq. 3.8})$$

$$r_9 = k_9 \cdot [\text{MX}_2] \cdot [R] \quad (\text{Eq. 3.9})$$

El factor llum s'ha considerat com un paràmetre més a ajustar, ja que no se'n coneix el valor en unitats de W/m^2 i no s'utilitza la mateixa intensitat en tots els experiments.

Abans que s'alliberi CO_2 del procés, se suposa que hi ha un compost intermedi oxidat. En l'esquema de reacció proposat anteriorment (Figura 6), s'ha suposat un consum de radicals en totes les etapes d'alliberació de CO_2 . Els radicals formats en les dues primeres reaccions poden tenir una via útil reaccionant amb la matèria orgànica, es poden perdre en reaccions ineficients amb el peròxid d'hidrogen o es troben entre ells. Això porta a la generació d' O_2 , que es reflecteix com un augment de l'oxigen dissolt (OD) (reaccions 3 i 4 de la Figura 6). La resta de reaccions estan relacionades amb l'oxidació o formació d'intermedis (reaccions 5, 6 i 7) i mineralització dels compostos orgànics (reaccions 8 i 9).

El model dinàmic del procés de degradació foto-Fenton es basa en balanços de massa per un mode d'operació "batch" dels components rellevants del model:

$$\frac{d[Fe^{2+}]}{dt} = -r_1 + r_2 \quad (\text{Eq. 3.10})$$

$$\frac{d[Fe^{3+}]}{dt} = r_1 - r_2 \quad (\text{Eq. 3.11})$$

$$\frac{d[H_2O_2]}{dt} = -r_1 - r_3 \quad (\text{Eq. 3.12})$$

$$\frac{d[R]}{dt} = r_1 + r_2 - r_3 - 2 \cdot r_4 - r_5 - r_6 - r_7 - r_8 - r_9 \quad (\text{Eq. 3.13})$$

$$\frac{d[M]}{dt} = -r_5 - r_6 \quad (\text{Eq. 3.14})$$

$$\frac{d[MX_1]}{dt} = r_5 + r_6 - r_7 - r_8 \quad (\text{Eq. 3.15})$$

$$\frac{d[MX_2]}{dt} = r_7 - r_9 \quad (\text{Eq. 3.16})$$

$$\frac{d[O_2]}{dt} = g_1 \cdot r_3 + g_2 \cdot r_4 - c_1 \cdot r_5 + K_L a \cdot (O_2^* - O_2) \quad (\text{Eq. 3.17})$$

Els quatre coeficients estequiomètrics (g_1 , g_2 , c_1 i K_{La}), relacionats amb el balanç d'oxigen, les nou constants cinètiques ($k_1 - k_9$) de les reaccions considerades en l'esquema i la intensitat de llum (I) són els paràmetres del model que cal ajustar a partir del conjunt de dades experimentals.

Per poder obtenir els paràmetres, s'optimitza una funció quadràtica ponderada mitjançant la caixa d'eines d'optimització de Matlab. La funció es defineix de la següent manera:

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^n \alpha \cdot (H_x(i) - H_s(i))^2 + \beta \cdot (TOC_x(i) - TOC_s(i))^2 + \gamma \cdot (DO_x(i) - DO_s(i))^2 \quad (\text{Eq. 3.18})$$

On el subíndex x representa dades i s simulació.

Els valors inicials dels paràmetres s'han agafat d l'article (Cabrera et al., 1012):

Taula 5. Paràmetres inicials del model.

Paràmetres	Inicials
I	36
K_{La}	2,7
c_1	0,1
g_1	0,75
g_2	0,47
k_1	8,81
k_2	5,63
k_3	75,8
k_4	42798
k_5	2643
k_6	257
k_7	2865
k_8	271
k_9	107

3.2 Disseny d'experiments

Els experiments utilitzats per la modelització, presenten unes concentracions inicials de paracetamol i Fe^{2+} de 40 mg/L i 7,5 mg/L, respectivament. Les concentracions de peròxid d'hidrogen i la intensitat de llum, varien per cada experiment. És per això que s'ha establert una codificació per referir-nos a cada un d'ells:

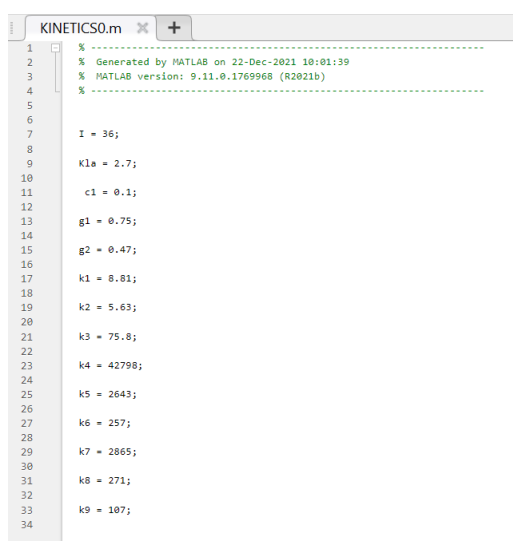
Taula 6. Codificació i condicions inicials de cada experiment.

Codificació experiment	Concentració Fe^{2+} (mg/L)	Concentració H_2O_2 (mg/L)	Intensitat de llum (W)
71,6_ON9	7,5	71,6	9
189_ON5	7,5	189	5
189_ON14	7,5	189	14
472,5_ON9	7,5	472,5	9
756_ON5	7,5	756	5
756_ON14	7,5	756	14
873,4_ON9	7,5	873,4	9

3.3 Ajust i simulació

En aquest apartat, s'explicaran els passos que s'han seguit per ajustar els paràmetres del model i després poder-ne simular les dades de TOC i H_2O_2 en els respectius valors de temps. Així com el càlcul d'errors entre les dades simulades i les experimentals. Com que hi ha 7 experiments, s'ha agafat com a exemple l'experiment que té una concentració de peròxid d'hidrogen de 756 mg/L i una intensitat de llum de 14 W per indicar els passos que s'han seguit.

Primer, cal executar els paràmetres determinats en el model inicial en l'editor del Matlab.



```

1 % -----
2 % Generated by MATLAB on 22-Dec-2021 10:01:39
3 % MATLAB version: 9.11.0.1769968 (R2021b)
4 % -----
5
6
7 I = 36;
8
9 K1a = 2.7;
10
11 c1 = 0.1;
12
13 g1 = 0.75;
14
15 g2 = 0.47;
16
17 k1 = 8.81;
18
19 k2 = 5.63;
20
21 k3 = 75.8;
22
23 k4 = 42798;
24
25 k5 = 2643;
26
27 k6 = 257;
28
29 k7 = 2865;
30
31 k8 = 271;
32
33 k9 = 107;
34

```

Figura 8. Paràmetres inicials en la finestra del Matlab.

Per poder seguir amb la simulació, cal executar l'extensió que ens brinda Matlab anomenada Simulink. Un cop obrim l'arxiu on està configurat el model que simula el procés foto-Fenton (Figura 8), cal entrar les condicions inicials de l'experiment que volem ajustar en mmol/L de Fe^{2+} , H_2O_2 i TOC. Pel que fa al valor de la intensitat de llum (I), s'ha deixat com a incògnita, ja que com s'ha esmentat abans, no se'n coneix el valor en unitats de W/m^2 . La concentració d'oxigen dissol, s'ha fixat en 0,64 mmol/L en tots els experiments perquè no s'ha tingut en compte en el laboratori. Un cop tenim entrades les concentracions de l'experiment que volem ajustar (Figura 9), cal executar-lo.

AOP TREATMENT

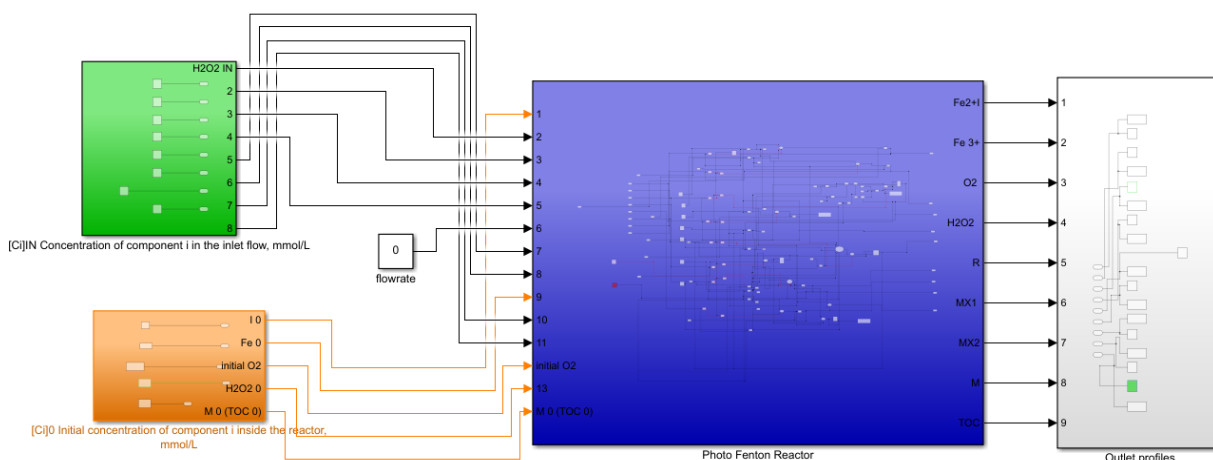


Figura 9. Model establert per simular el procés foto-Fenton.

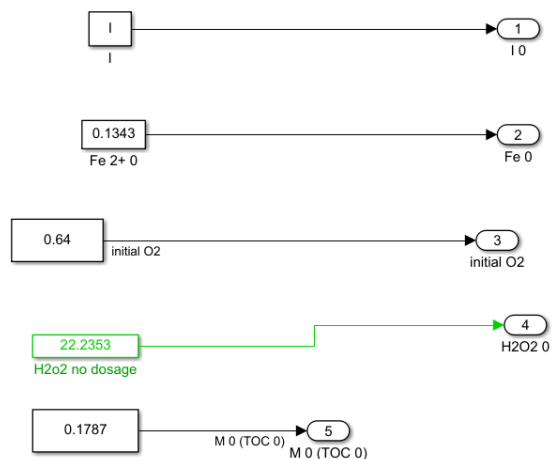


Figura 10. Condicions inicials de l'experiment.

Seguidament, cal obrir l'aplicació *Parameter Estimation* de l'extensió Simulink de Matlab per poder definir els paràmetres que volem estimar i definir el rang en el qual volem que estiguin. En aquest cas, tots els paràmetres han de ser positius i per això configurem com a límit inferior el 0.

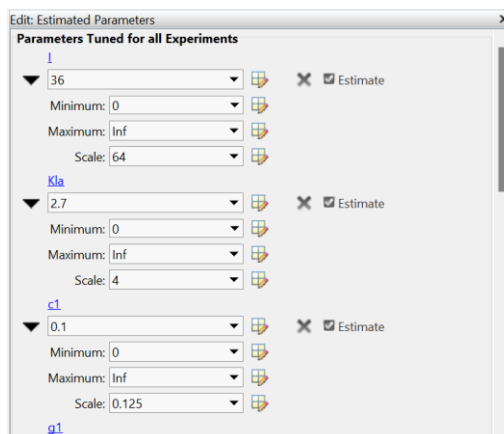


Figura 11. Ajust dels paràmetres per tots els experiments.

A més, també cal indicar quins son els senyals de sortida que volem i entrar els punts de dades experimentals, temps-H₂O₂ per una banda i temps-TOC per l'altra:

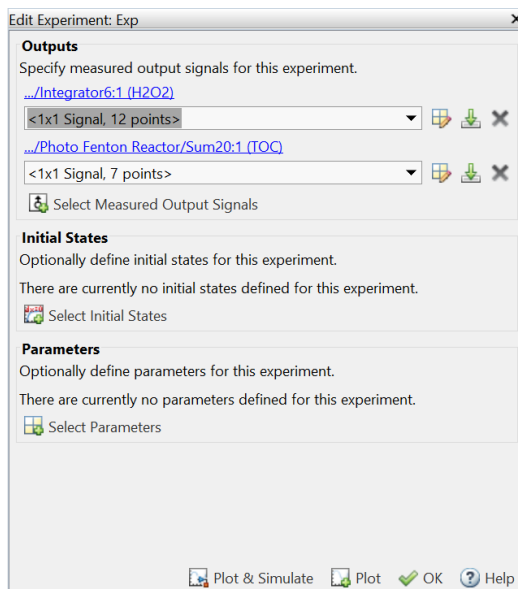


Figura 12. Selecció de dades experimentals pel H₂O₂ i pel TOC.

Un cop definits els paràmetres i entrades les dades experimentals, ja es pot iniciar l'estimació dels paràmetres del model mitjançant un conjunt d'iteracions que minimitzen la funció objectiu descrita anteriorment (Eq 4.18).

Les taules amb les dades experimentals, la funció objectiu minimitzada per cada iteració i la representació de l'evolució dels paràmetres de cada experiment, es poden veure en els annexos 8.1.1 i 8.1.2.

Taula 7. Iteracions i valor F.O

Iteration	Minimize
0	0,4633
1	0,0603
2	0,0603
3	0,0405
4	0,0405
5	0,038
6	0,036
7	0,036
8	0,0358
9	0,0353
10	0,0346

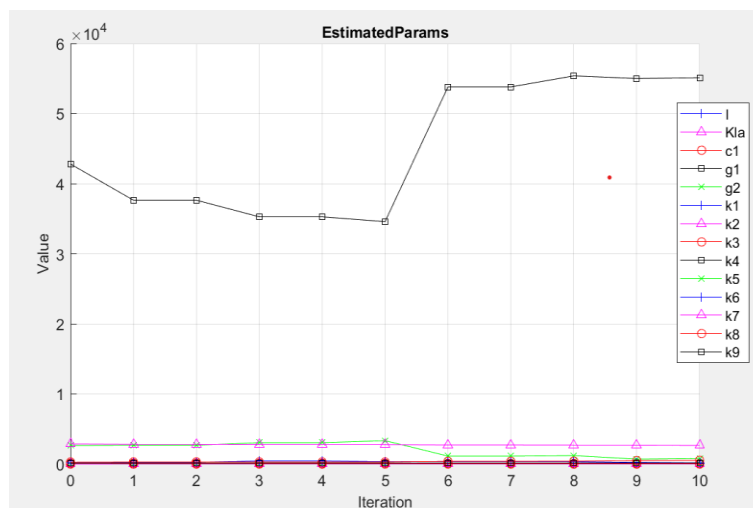


Figura 13. Evolució dels valors dels paràmetres pe cada iteració.

Aquest procés es realitza per cada experiment i dels paràmetres obtinguts, se'n calcula la mitjana.

Taula 8. Paràmetres ajustats per cada experiment i mitjana.

	189_ON5	189_ON14	71,6_ON9	756_ON14	756_ON5	472,5_ON9	873,4_ON9	Mitjana
I	224,62	54,91	53,13	50,59	36,55	46,49	72,93	77,03
K1a	0,0014	3,64	5,42	3,99	2,92	1,83	6,03	3,40
c1	0,103	0,0985	0,0364	0,4780	0,0995	0,12	0,15	0,16
g1	0,99	0,76	0,34	1,36	0,75	1,29	0,18	0,81
g2	0,35	0,52	0,87	0,18	0,47	0,47	0,89	0,53
k1	13,23	26,79	42,37	14,49	7,88	14,51	10,55	18,55
k2	7,77	15,35	30,84	13,07	5,14	7,63	19,13	14,13
k3	79,58	89,77	260,18	71,47	71,09	74,09	46,15	98,90
k4	30330	15255	4441	55106	45271	37458	78027	37984,01
k5	2519,80	2742,30	1948,30	785,81	2635,90	2551,90	4282,80	2495,26
k6	340,53	280,56	650,84	166,76	258,82	528,83	165,14	341,64
k7	3964,50	2489,60	5226,40	2660,30	2868,70	2750,80	2262,80	3174,73
k8	285,36	299,67	248,25	530,34	269	259,51	127,36	288,50
k9	163,79	171,78	156,09	151,50	107,78	148,55	131,49	147,28

S'han simulat les dades experimentals en el model cinètic utilitzant 3 valors de paràmetres diferents:

1. Paràmetres del model inicial (model sense ajustar).
2. Paràmetres del model ajustat a un únic experiment.
3. Paràmetres obtinguts del càlcul de la mitjana dels paràmetres de cada experiment (model ajustat global).

Per cada un, hi ha uns valors de temps entre 1 i 2 hores que corresponen a valors de H_2O_2 (mmol/L) i TOC (mmol/L). Es poden veure les dades de cada simulació en l'Annex 8.1.3. Si representem aquests valors en forma de gràfica, obtenim les següents gràfiques pel que fa a l'exemple:

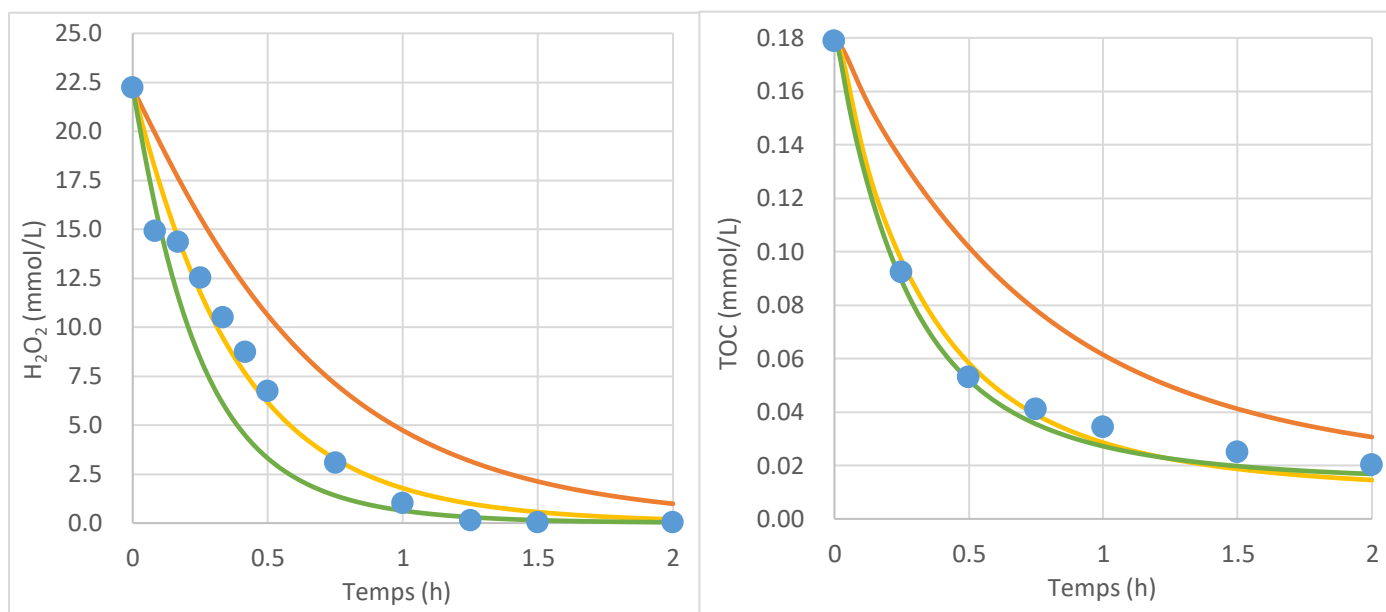


Figura 14. Dades experimentals i simulades de H_2O_2 i TOC vs. temps per l'experiment 756_ON14. Les dades experimentals es representen en punts de color blau. El model amb els paràmetres no ajustats representa amb línia contínua taronja. El model ajustat amb les dades experimentals es representa de color groc i la simulació verda és la del model utilitzant la mitjana de tots els paràmetres estimats.

A més, per cada experiment s'han calculat els errors quadràtics mitjans (RMSE) entre els valors simulats i les dades experimentals. Com que hi ha molts més punts de dades simulades que no pas experimentals, s'ha definit una funció a Excel per poder interpolar ambdós valors i calcular l'error. La macro utilitzada i el resultat de les interpolacions per cada experiment es poden veure en l'Annex 8.1.4.

L'equació utilitzada per calcular el RMSE és la següent:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Simulats_i - Experimentals_i)^2}{N}} \quad (\text{Eq. 3.19})$$

On N és el nombre de punts que s'han fet servir per realitzar el càlcul.

Els errors obtinguts de H₂O₂ i TOC de tots els experiments respecte al model ajustat i respecte al model ajustat global, es recullen a les taules 9 i 10:

Taula 9. RMSE pel H₂O₂ i el TOC per cada experiment respecte les dades simulades del model ajustat.

	185_ON5	189_ON14	71,6_ON9	756_ON14	756_ON5	472,5_ON9	873,4_ON9
H ₂ O ₂ (mmol/L)	0,3878	0,1501	0,0484	1,1087	1,5733	0,8060	1,5715
TOC (mmol/L)	0,0115	0,0025	0,0192	0,0047	0,0013	0,0019	0,0104

Taula 10. RMSE pel H₂O₂ i el TOC per cada experiment respecte les dades simulades del model ajustat global.

	185_ON5	189_ON14	71,6_ON9	756_ON14	756_ON5	472,5_ON9	873,4_ON9
H ₂ O ₂ (mmol/L)	0,5084	0,4862	0,5070	2,5412	5,8180	1,6495	4,6360
TOC (mmol/L)	0,0113	0,0305	0,0260	0,0043	0,0362	0,0047	0,0150

Els errors obtinguts del model ajustat, són gairebé tots més petits que els del model ajustat global. Aquest fet és d'esperar, ja que en el primer cas s'utilitzen els paràmetres estimats per l'experiment en concret i, en canvi, en el segon cas, s'utilitza la mitjana que té en compte tots els paràmetres assolits. De totes maneres si l'error no s'incrementa en excés té més sentit tenir un únic paràmetre per tot el rang d'estudi, ja que això ens permetrà predir el comportament del sistema.

Pel peròxid d'hidrogen, l'error màxim és de 5,818 mmol/L per l'experiment 756_ON5 del model ajustat global, i un error mínim de 0,048 mmol/L per l'experiment 71,6_ON9 del model ajustat.

Pel TOC, l'error màxim és de 0,0362 mmol/L per l'experiment 756_ON5 del model ajustat global, i un error mínim de 0,0104 mmol/L per l'experiment 873,4_ON9.

Veiem que els errors màxims coincideixen per l'experiment 756_ON5. Això podria ser degut a algun error a l'hora de realitzar l'experiment.

A més, en el model ajustat, veiem que com més concentració de peròxid d'hidrogen, més error hi ha.

3.4 Validació

Un cop hem verificat que els paràmetres globals ajustats simulen bé el comportament de tots els experiments realitzats amb 40 mg/L de PCT, 7.5 mg/L de Fe(II) i el reactiu peròxid d'hidrogen de 71,6-873,4 mg/L (conjunt de dades experimentals escollides), es pretén validar el model amb dades experimentals noves. Aquesta validació ens permetria verificar que el model pot predir el comportament del sistema foto-Fenton en el rang d'estudi escollit.

Els dos experiments escollits per la validació formen part del Treball de Final de Grau de la Noemi Fradejas (2016) i han estat els que presenten valors intermedis en el rang de concentracions de peròxid d'hidrogen (71,6 - 873,4 mg/L). Es troben resumits en l'Annex 8.1.1.

Les condicions inicials de H₂O₂ i llum d'aquests experiments, són les següents:

Taula 11. Condicions inicials de H₂O₂ i intensitats de llum dels experiments utilitzats com a validacions. Les concentracions de PCT i de Fe(II) es mantenen a 40mg/L i 7,5mg/L, respectivament.

	Validació 1	Validació 2
H ₂ O ₂ (mg/L)	236	378
Llum (W)	14	14

En la Figura 15 podem veure els ajustos pel que fa a la primera validació:

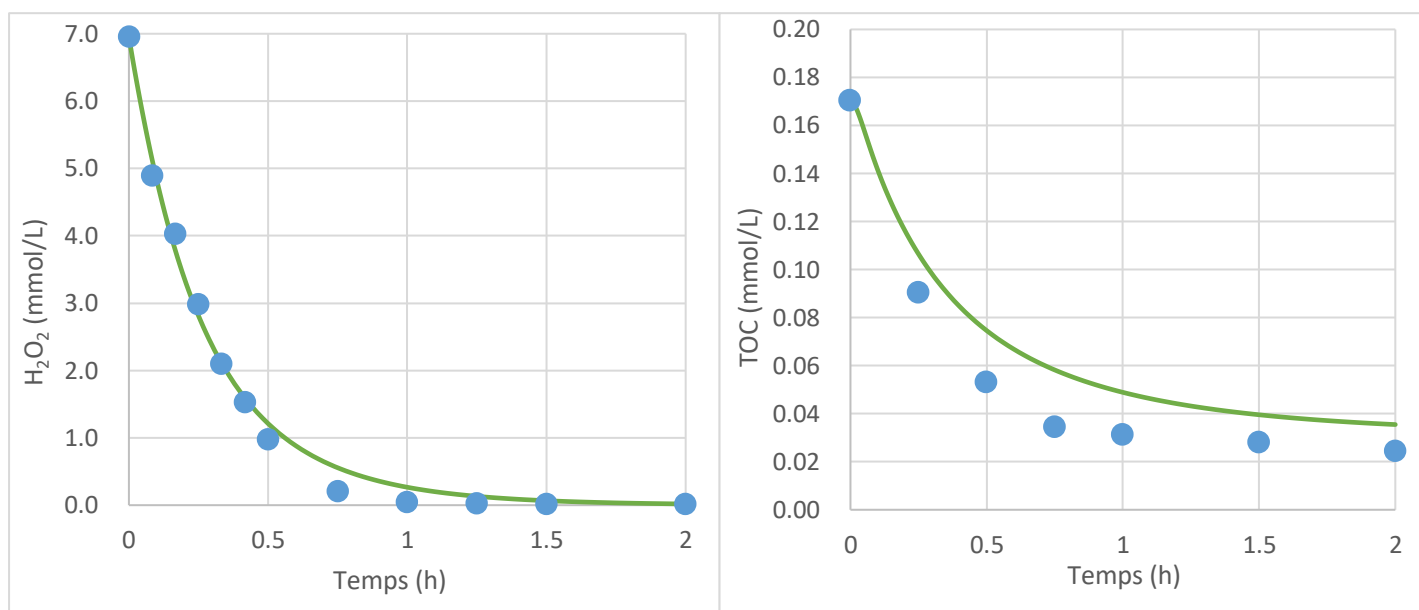


Figura 15. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per la validació 1.

Les dades obtingudes de la simulació del TOC veiem que s'ajusten bastant bé respecte als punts obtinguts experimentalment, amb un error aproximadament del 2% (RMSE = 0,018 mg/L) pel TOC i un error del 18% (RMSE = 0,18 mg/L) pel peròxid d'hidrogen. L'error del TOC és més petit tot i que en la representació gràfica sembla no ajustar-se tan bé com el peròxid d'hidrogen. Això podria ser degut al fet que el nombre de punts experimentals és menor, i, per tant, hi ha menys probabilitat de diferir amb els valors de la simulació.

En la Figura 16 podem veure la simulació pel que fa a la segona validació:

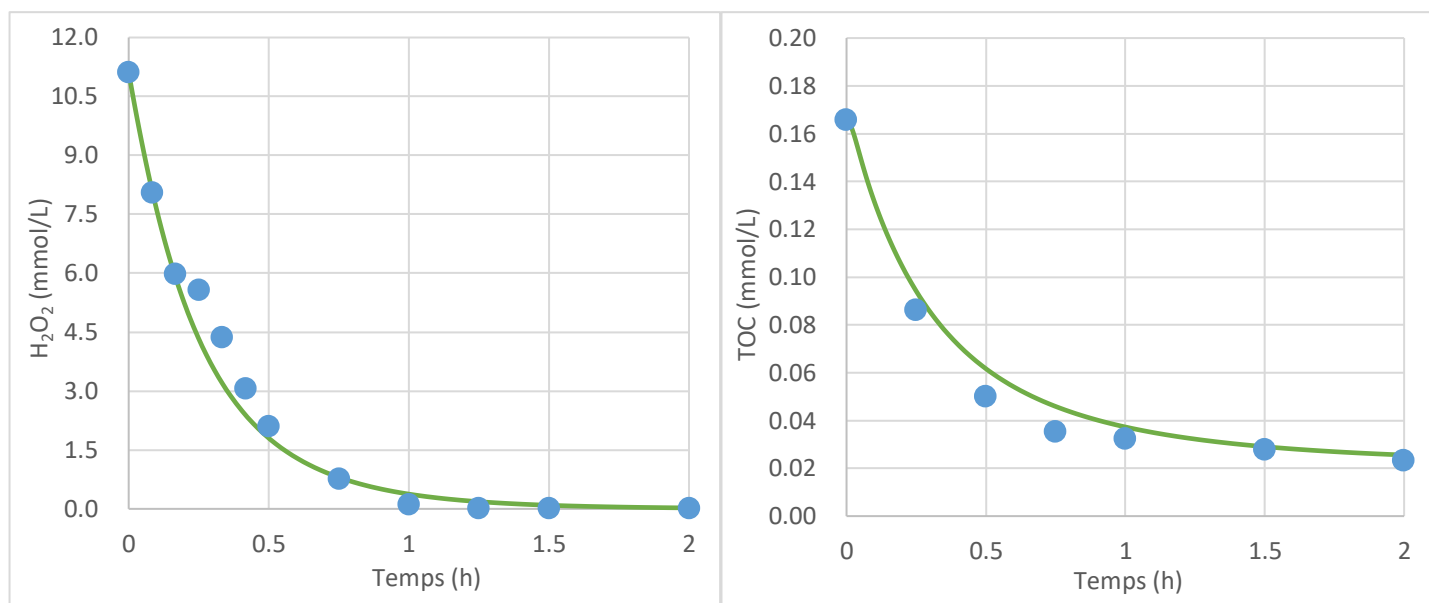


Figura 16. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per la validació 2.

En aquest cas, l'ajust pel peròxid d'hidrogen no és tan bo com abans, ja que hi ha uns 4 punts experimentals que s'allunyen bastant de la simulació i això pot haver provocat un error del 54% (RMSE = 0,5416 mg/L). Pel que fa al TOC, l'error és més petit de l'1% (RMSE = 0,0071 mg/L), això vol dir que l'ajust s'adapta molt bé a la realitat i, per tant, podríem predir altres condicions experimentals dins d'aquest rang experimental sense que calgués realitzar els experiments.

El conjunt de dades simulades i les respectives interpolacions, es troben en l'annex 8.1.3 i 8.1.4, respectivament.

4. Modelització del procés foto-Fenton amb presència de sals

En aquesta segona part, s'han recuperat les dades experimentals dels Treballs de Final de Grau del Sergi Cordero i del Sergi Espinosa (2021) de la degradació de diferents contaminants amb la presència de sals mitjançant el procés foto-Fenton. El que es pretén estudiar ara és com afecten aquestes sals envers dos paràmetres, la mineralització (k) i la conversió màxima i si la diferenciació de contaminants i/o de sals juga algun paper important en l'evolució de la força iònica.

Primer de tot, s'ha estudiat el model empíric utilitzat, les condicions inicials de cada experiment i el disseny d'experiments realitzat. Després, s'han ordenat les dades experimentals obtingudes per posteriorment, dur a terme els càlculs pertinents. Aquests, seran plasmat de manera gràfica per finalment, poder ser discutits.

4.1 Model semi empíric

El següent model semi-empíric qualifica el progrés de degradació de la matèria orgànica a través del TOC. S'anomena semi-empíric perquè representa un enfocament equilibrat entre el modelatge detallat de primers principis i el modelatge empíric pur. Per una banda, el model descriu la degradació del contaminant model mesurant un paràmetre agrupat com és la concentració de carboni orgànic total. Per altra banda, el model s'ha expressat en termes de factors físicament significatius amb l'objectiu de superar les limitacions del modelatge estadístic pur (Audino et al., 2019).

El model descriu la degradació de la següent manera:

$$\frac{d[TOC]}{dt} = -k ([TOC] - [TOC]^\infty) \quad (\text{Eq. 5.1})$$

On k és una constant cinètica (min^{-1}) i $[TOC]^\infty$ representa la concentració límit (mmol/L) a partir de la qual, independentment del temps de reacció i en condicions específiques, no es pot aconseguir una major degradació de la matèria orgànica.

En integrar l'equació 4.1, es pot derivar l'expressió analítica de l'evolució del TOC sota condicions inicials donades i dona com a resultat:

$$[TOC] = [TOC]^\infty + k([TOC]^0 - [TOC]^\infty)e^{-kt} \quad (\text{Eq. 5.2})$$

On $[TOC]^0$ representa la concentració inicial de TOC (mmol/L).

L'equació d'evolució del TOC també es pot expressar en termes de conversió (ξ):

$$\xi = \xi^{max} (1 - e^{-kt}) \quad (\text{Eq. 5.3})$$

$$\xi = \frac{[TOC]^0 - [TOC]}{[TOC]^0} \quad (\text{Eq. 5.4})$$

$$\xi^{max} = \frac{[TOC]^0 - [TOC]^\infty}{[TOC]^0} \quad (\text{Eq. 5.5})$$

Per tant, això permet caracteritzar el rendiment del procés mitjançant la determinació de dos paràmetres: la conversió màxima (ξ^{max}) la constant cinètica (k).

4.2 Condicions experimentals

Com a tot experiment, abans de tot, cal establir les condicions inicials en les quals es durà a terme el procés. En els següents apartats s'explica alguns dels paràmetres que s'han fixat i modificat en cada experiment.

- **Llum:** 14W.
- **Concentracions de contaminant, peròxid d'hidrogen i ió ferrós.**

En la següent taula es recullen les concentracions dels diferents contaminants i les concentracions de H_2O_2 i Fe^{2+} que s'han utilitzat per a cada contaminant:

Taula 12. Concentracions inicials de contaminant, oxidant i catalitzador per cada contaminant.

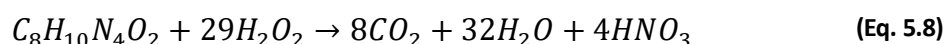
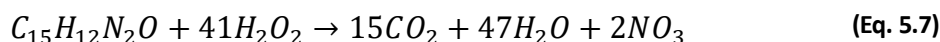
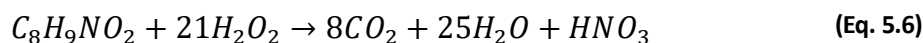
	Concentració contaminant (mg/l)				
	Paracetamol	Carbamazepina	Cafeïna	[H_2O_2] (mg/l)	[Fe^{2+}] (mg/l)
Paracetamol	40	--	--	189	10
Carbamazepina	--	20	--	118	10
Cafeïna	--	--	30	300	10
Mescla	13,33	6,67	10	202,33	10

Pel que fa a les concentracions de contaminant, s'ha treballat amb 40 mg/L de paracetamol; 20 mg/L de carbamazepina; 30 mg/L de cafeïna i per la barreja, s'ha dividit entre 3 la concentració de cada contaminant.

La concentració de Fe^{2+} utilitzada ha estat de 10 mg/L en tots els experiments.

Pel que fa a la concentració del peròxid d'hidrogen, és diferent en cada contaminant. Pel paracetamol i la carbamazepina, es va decidir afegir la concentració de H_2O_2 estequiomètrica (Eq 4.6 i 4.7) i, en canvi, per la cafeïna se'n va afegir aproximadament el doble (Eq 4.8).

Aquí podem veure les reaccions del paracetamol, la carbamazepina i la cafeïna amb el peròxid d'hidrogen, respectivament:



Per obtenir la concentració de H_2O_2 estequiomètrica amb els mols de paracetamol (PCT), es realitza el següent càlcul:

$$PM(C_8H_9NO_2) = 151,163 \frac{g}{mol}$$

$$40 \frac{mg \text{ PCT}}{L} \times \frac{1 \text{ mmol PCT}}{151,163 \text{ mg PCT}} \times \frac{21 \text{ mmol } H_2O_2}{1 \text{ mmol PCT}} \times \frac{34,0147 \text{ mg } H_2O_2}{1 \text{ mmol } H_2O_2} = 189 \frac{mg \text{ } H_2O_2}{L}$$

En el cas de la carbamazepina, es realitza el mateix càlcul sabent que la concentració inicial és de 20 mg/L i que la seva massa molecular és de 236,27 g/mol. S'obté un valor de peròxid d'hidrogen igual a 118 mg/L.

Per la cafeïna, que té una concentració inicial de 30 mg/L i una massa molecular de 194,19 g/mol, s'obté una concentració de peròxid d'hidrogen de 152 mg/L. Com ja s'ha dit anteriorment, se n'ha utilitzat aproximadament el doble i, per tant, la concentració serà de 300 mg/L.

Per la mescla, de la mateixa manera que s'ha dividit entre 3 les concentracions de cada contaminant, s'ha fet el mateix pel peròxid d'hidrogen i el Fe^{2+} :

Taula 13. Concentracions de peròxid d'hidrogen i ferro per cada contaminant i per la mescla.

Substància	$[H_2O_2]$ (mg/L)	$[Fe^{2+}]$ (mg/L)
Paracetamol	63,00	3,33
Carbamazepina	39,33	3,33
Cafeïna	100,00	3,33
Total (mescla)	202,33	10,00

- **Temperatura i pH**

S'ha treballat a una temperatura de 25 °C i a un pH, aproximadament, de 2,8. Els dos paràmetres es van fixar tenint en compte algunes de les evidències mencionades en l'apartat 2.2.1.1.

- **Agitació:** 200 rpm.

- **Concentracions dels ions inorgànics:**

Les concentracions dels ions inorgànics es troben en un rang que va des de 0 mg/L fins a 700 mg/L. Aquestes concentracions, es van calcular mitjançant un disseny d'experiments aplicant un model factorial del tipus 2^2 en estrella amb punt central triple.

Aquest disseny consta de 4 assajos amb coeficients codificats que van des de -1 a 1 passant per 0. S'anomena punt triple perquè es realitzen tres assajos centrals per validar el disseny estadísticament, és a dir, que l'error experimental no sigui massa elevat i la repetibilitat sigui bona. També es duen a terme 4 assajos de coeficients $-\sqrt{2}$ i $\sqrt{2}$ per ampliar la zona d'estudi.

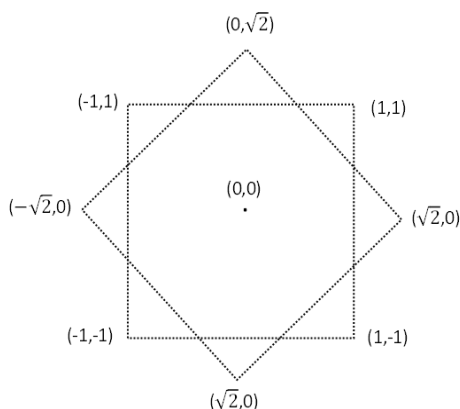


Figura 17. Representació del disseny 2^2 en estrella (Font: Treball Fi de Grau del Sergi Cordero , 2021)

Per transformar aquests coeficients en valors de concentració de sulfats i clorurs, primer cal assignar els valors mínims (-1) i màxims (1) de concentracions de sals en les quals es treballarà. Aquestes seran de 100 i 600 mg/L respectivament, i el valor central (0) serà de 350 mg/L.

L'expressió que s'aplica per calcular les concentracions és la següent:

$$\frac{\text{mín} + \text{màx}}{2} + \frac{\text{màx} - \text{mín}}{2} \times i \tag{Eq. 5.9}$$

On i representa el número de codificació corresponent (-1,1,0, $-\sqrt{2}$ o $\sqrt{2}$).

En la següent taula, es poden veure els resultats d'aplicar l'equació 4.9 segons la codificació establerta:

Taula 14. Concentració de les variables segons la seva codificació.

Codificació		Concentració	
[Cl ⁻]	[SO ₄ ²⁻]	[Cl ⁻]	[SO ₄ ²⁻]
-1	-1	100	100
-1	1	100	600
1	-1	600	100
1	1	600	600
0	0	350	350
0	1	350	600
1	0	600	350
$-\sqrt{2}$	0	-4	350
$\sqrt{2}$	0	704	350
0	$-\sqrt{2}$	350	-4
0	$\sqrt{2}$	350	704

Els valors de -4 es substitueixen per 0 perquè no existeix una concentració en valor negatiu, i els valors de 704 s'arrodoneixen a 700 per simplificar-ne la lectura.

Per tant, un cop calculades les concentracions, el disseny 2² en estrella quedaria de la següent manera:

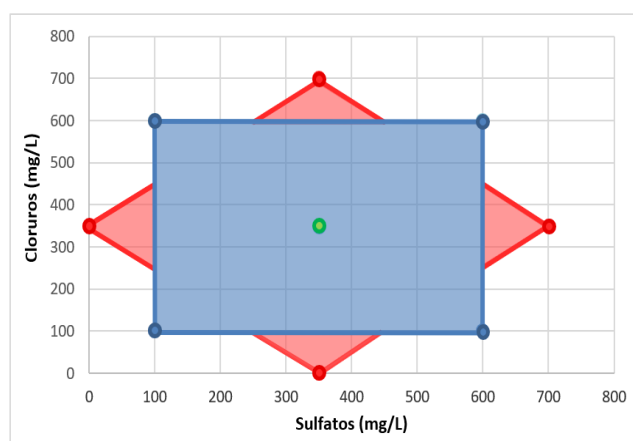


Figura 18. Representació del disseny 2² en estrella dels experiments realitzats. (Font: Treball de Fi de Grau del Sergi Espinosa, 2021).

Cal destacar que el compost que aporta els ions Cl⁻ és el clorur de potassi, KCl i els dos compostos que aporten els ions SO₄²⁻ són el sulfat de calci, CaSO₄ i el sulfat de magnesi, MgSO₄.

4.3 Dades experimentals

Els valors de la velocitat de mineralització (k) i de la conversió màxima (ξ^{\max}) que s'han obtingut d'aplicar el model semi-empíric (Eq. 4.2 i 4.5) es presenten en la Taula 16, pel paracetamol, la carbamazepina, la cafeïna i la mescla. La figura 18 mostra com es calculen en cada cas els dos paràmetres que caracteritzen el model empíric.

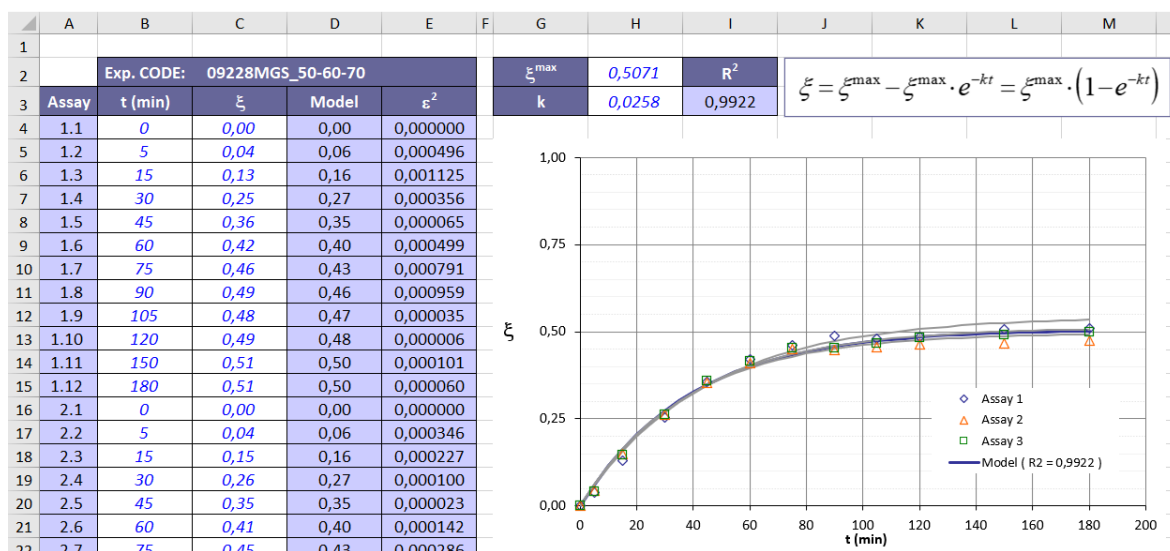


Figura 19. Plantilla que es va utilitzar per la modelització mitjançant Solver de l'Excel.

A més, per facilitar la lectura de les concentracions de clorurs i sulfats utilitzades en cada experiment, s'ha establert una codificació que és la següent:

Concentració de clorurs (mg/L)_Concentració total de sulfats (mg/L)

El valor total de la concentració de sulfats és el resultat de la suma del 50% dels ions del compost $MgSO_4$ i el 50% dels ions del compost $CaSO_4$.

La resta de valors dels paràmetres llum, concentració de contaminant, concentració de peròxid d'hidrogen i concentració de ió ferrós, són les mencionades en l'apartat anterior.

La Taula 15 recull les dades obtingudes d'aplicar el model semi-empíric. Cal ressaltar que l'ajust és molt bo, ja que els factors de correlació R^2 tenen valors més grans de 0,9.

Taula 15. Resultats per cada contaminant.

	Codificació	[Cl ⁻] (mg/L)	[SO ₄ ²⁻](mg/L)	[SO ₄ ²⁻](mg/L)	ξ^{max}	k (min ⁻¹)	R ²	
PARACETAMOL	0_0	0	0	0	0,8956	0,0449	0,9928	
	100_100	100	50	50	0,7634	0,0428	0,9973	
	100_600	100	300	300	0,7760	0,0425	0,9987	
	600_100	600	50	50	0,6315	0,0370	0,9946	
	600_600	600	300	300	0,5980	0,0289	0,9943	
	350_350	350	175	175	0,6602	0,0354	0,9963	
	350_0	350	0	0	0,6859	0,0461	0,9968	
	350_700	350	350	350	0,6789	0,0411	0,9985	
	0_350	0	175	175	0,9008	0,0381	0,9989	
	600_350	600	175	175	0,6117	0,0387	0,9962	
	600_300	600	150	150	0,6032	0,0401	0,9983	
	0_600	0	300	300	0,8814	0,0383	0,9997	
	600_0	600	0	0	0,6365	0,0453	0,9986	
CARBAMAZEPINA	0_0	0	0	0	0,8342	0,0782	0,9989	
	100_100	100	50	50	0,7507	0,0471	0,9984	
	100_600	100	300	300	0,7662	0,0432	0,9974	
	600_100	600	50	50	0,5972	0,0380	0,9915	
	600_600	600	300	300	0,5917	0,0387	0,9871	
	350_350	350	175	175	0,6783	0,0402	0,9933	
	350_0	350	0	0	0,7187	0,0382	0,9953	
	350_700	350	350	350	0,6918	0,0294	0,9887	
	0_300	0	175	175	0,8338	0,0418	0,9923	
	700_350	700	175	175	0,5209	0,0423	0,9898	
	0_500	0	250	250	0,6270	0,0218	0,9855	
	CAFÈINA	0_0	0	0	0	0,8342	0,0782	0,9989
		100_100	100	50	50	0,7507	0,0471	0,9984
100_600		100	300	300	0,7662	0,0432	0,9974	
600_100		600	50	50	0,5972	0,0380	0,9915	
600_600		600	300	300	0,5917	0,0387	0,9871	
350_350		350	175	175	0,6783	0,0402	0,9933	
350_0		350	0	0	0,7187	0,0382	0,9953	
350_700		350	350	350	0,6918	0,0294	0,9887	
0_300		0	175	175	0,8338	0,0418	0,9923	
700_350		700	175	175	0,5209	0,0423	0,9898	
0_500		0	250	250	0,6270	0,0218	0,9855	
MESCLA		0_0	0	0	0	0,7524	0,0344	0,9976
		100_100	100	50	50	0,6551	0,0265	0,9976
	100_600	100	300	300	0,6807	0,0217	0,9979	
	600_100	600	50	50	0,4331	0,0274	0,9943	
	600_600	600	300	300	0,4562	0,0267	0,9933	
	350_350	350	175	175	0,5071	0,0258	0,9922	
	350_0	350	0	0	0,5157	0,0322	0,9915	
	350_700	350	350	350	0,5182	0,0265	0,9969	
	0_350	0	175	175	0,7762	0,0216	0,9984	
	700_350	700	175	175	0,3764	0,0156	0,9803	
	0_500	0	250	250	0,4681	0,0238	0,9974	
	600_1200	600	600	600	0,4592	0,0243	0,9946	

4.4 Efecte de la força iònica en el procés foto-Fenton

Amb les dades anteriors, s'estava treballant amb els contaminants i les sals per separat. Ara, es realitzarà un seguit de càlculs per considerar si totes les sals afecten de la mateixa manera o no i les agruparem en un paràmetre, la força iònica.

Per calcular el valor de la força iònica, primer cal tenir en compte que partim d'una concentració de 100 mg/L de Cl⁻. Això significa que s'han afegit 100 mg de KCl en un litre d'aigua. Com que el compost no és 100% pur, cal multiplicar la massa del compost per la seva pureza (98%).

Com ja sabem, la densitat de l'aigua és 0,997 kg/L, per tant, podem dir que un litre d'aigua, aproximadament, equival a un kilogram d'aigua. Vol dir que tenim 100 mg de KCl en un kg de dissolució.

Per convertir els mg en mols, només cal dividir-los per la massa molecular del compost:

$$PM(KCl) = 74,5513 \frac{g}{mol}$$

$$100 \frac{mg\ KCl}{kg} \times 0,98 \times \frac{1\ mol\ KCl}{74,5513\ g \times \frac{1mg}{1000g}} = 0,001315 \frac{mol}{kg}$$

Aquest càlcul el farem igual pels sulfats provinents dels compostos MgSO₄ i CaSO₄. Per exemple, partint de 50 mg/kg de MgSO₄ i 50 mg/kg de CaSO₄ obtenim:

$$PM(MgSO_4) = 120,366 \frac{g}{mol}$$

$$50 \frac{mg\ MgSO_4}{kg} \times 0,98 \times \frac{1\ mol\ MgSO_4}{120,366g \times \frac{1mg}{1000g}} = 0,000407 \frac{mol}{kg}$$

$$PM(CaSO_4) = 172,2 \frac{g}{mol}$$

$$50 \frac{mg\ CaSO_4}{kg} \times 0,98 \times \frac{1\ mol\ CaSO_4}{172,2g \times \frac{1mg}{1000g}} = 0,000285 \frac{mol}{kg}$$

La suma d'aquests dos valors, serà la molalitat dels sulfats en la dissolució.

Ara, ja es pot calcular la força iònica amb l'equació 2.12. Els valors de les càrreges (Z) es defineixen en les reaccions de dissociació de cada compost que són les següents:

Taula 16. Reaccions de dissociació, càrregues de cada ió i càrrega total per l'equació de la força iònica

Reacció	Z cations	Z anions	Z ² cations	Z ² anions	$\sum Z^2$
$KCl \rightarrow K^+ + Cl^-$	+1	-1	1 ²	(-1) ²	4
$MgSO_4 \rightarrow Mg^{2+} + SO_4^{2-}$	+2	-2	2 ²	(-2) ²	8
$CaSO_4 \rightarrow Ca^{2+} + SO_4^{2-}$	+2	-2	2 ²	(-2) ²	8

Per tant, per l'exemple mencionat, serà:

$$I = \frac{1}{2} \times (0,001315 \cdot 4) + (0,000407 \cdot 8 + (0,000285 \cdot 8)) = 0,0041 \frac{mol}{kg}$$

En les següents taules podem veure la molalitat de clorurs, la molalitat de sulfats totals i la força iònica de cada experiment i per cada contaminant.

Taula 17. Molalitat de clorurs i sulfats i força iònica pel Paracetamol.

Codificació	[Cl ⁻] (mol/kg)	[SO ₄ ²⁻]total (mol/kg)	F.I (mol/kg)
0_0	0	0,	0
100_100	0,0013	0,00069	0,0041
100_600	0,0013	0,0042	0,018
600_100	0,0079	0,00069	0,011
600_600	0,0079	0,0042	0,024
350_350	0,0046	0,0024	0,014
350_0	0,0046	0	0,0046
350_700	0,0046	0,0048	0,024
0_350	0	0,0024	0,0097
700_350	0,0092	0,0024	0,019
600_300	0,0079	0,0021	0,016
0_600	0	0,0042	0,017
600_0	0,0079	0	0,0079

Taula 18. Molalitat de clorurs i sulfats i força iònica per la Carbamazepina.

Codificació	[Cl ⁻] (mol/kg)	[SO ₄ ²⁻]total (mol/kg)	F.I (mol/kg)
0_0	0	0	0
100_100	0,0013	0,00028	0,0041
100_600	0,0013	0,0017	0,018
600_100	0,0079	0,00028	0,011
600_600	0,0079	0,0017	0,024
350_350	0,0046	0,0010	0,014
350_0	0,0046	0	0,0046
350_700	0,0046	0,0020	0,024
0_300	0	0,0010	0,0097
700_350	0,0092	0,0010	0,019
0_500	0	0,0014	0,014

Taula 19. Molalitat de clorurs i sulfats i força iònica per la cafeïna.

Codificació	[Cl ⁻] (mol/kg)	[SO ₄ ²⁻]total (mol/kg)	F.I (mol/kg)
0_0	0	0	0
100_100	0,00132	0,00069	0,0041
100_600	0,00132	0,0042	0,018
600_100	0,0079	0,00069	0,011
600_600	0,0079	0,0042	0,024
350_350	0,0046	0,00242	0,014
350_0	0,0046	0	0,0046
350_700	0,0046	0,0048	0,024
0_350	0	0,0024	0,0097
700_350	0,0092	0,0024	0,019
0_500	0	0,0035	0,014
600_1200	0,0079	0,0083	0,041

Taula 20. Molalitat de clorurs i sulfats i força iònica per la mescla.

Codificació	[Cl ⁻] (mol/kg)	[SO ₄ ²⁻]total (mol/kg)	F.I (mol/kg)
0_0	0	0	0
100_100	0,0013	0,00069	0,0041
100_600	0,0013	0,0042	0,018
600_100	0,0079	0,00069	0,011
600_600	0,0079	0,0042	0,024
350_350	0,0046	0,0024	0,014
350_0	0,0046	0	0,0046
350_700	0,0046	0,0048	0,024
0_350	0	0,0024	0,0097
700_350	0,0092	0,0024	0,019

Tenint en compte el model semi-empíric que hem seleccionat, basarem l'estudi en els dos indicadors del procés, la velocitat de mineralització k i la conversió màxima. Per dur-lo a terme, s'han plantejat una sèrie d'hipòtesis per cada indicador.

Conversió màxima

Hipòtesis 1: L'efecte de la força iònica és independent de quina sal la produeix i afecta de la mateixa manera a tots els contaminants estudiats i a la seva mescla

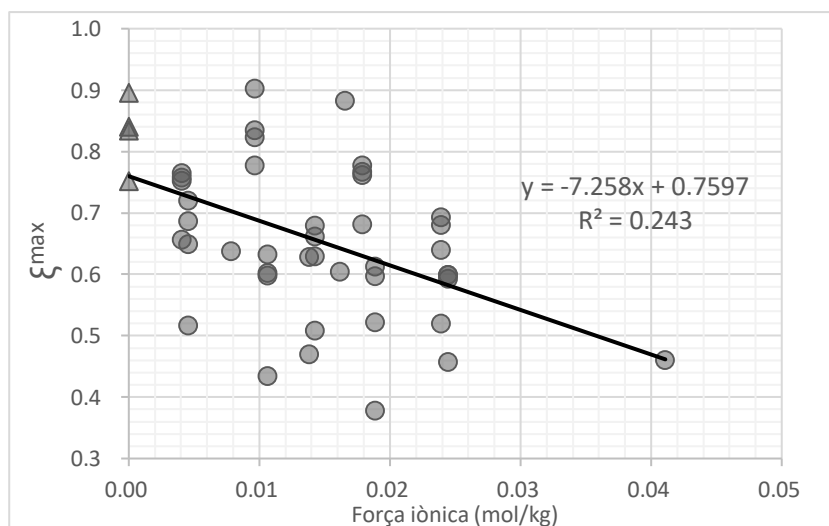


Figura 20. Conversió màxima vs. Força iònica sense diferenciació de sals ni contaminants.

En aquesta primera hipòtesis no hi ha diferenciació de sals ni de contaminants. Hi podem veure una tendència descendent, com més sal present a la matriu, menys conversió. Tot i que aquest efecte és clar, no tenim una correlació clara que ens permeti predir per qualsevol força iònica quina conversió obtindrem el coeficient de correlació és molt baix ($R^2=0,243$).

Hipòtesis 2: L'efecte de la força iònica és independent de quina sal la produeix però l'efecte és diferent segons el contaminant estudiat.

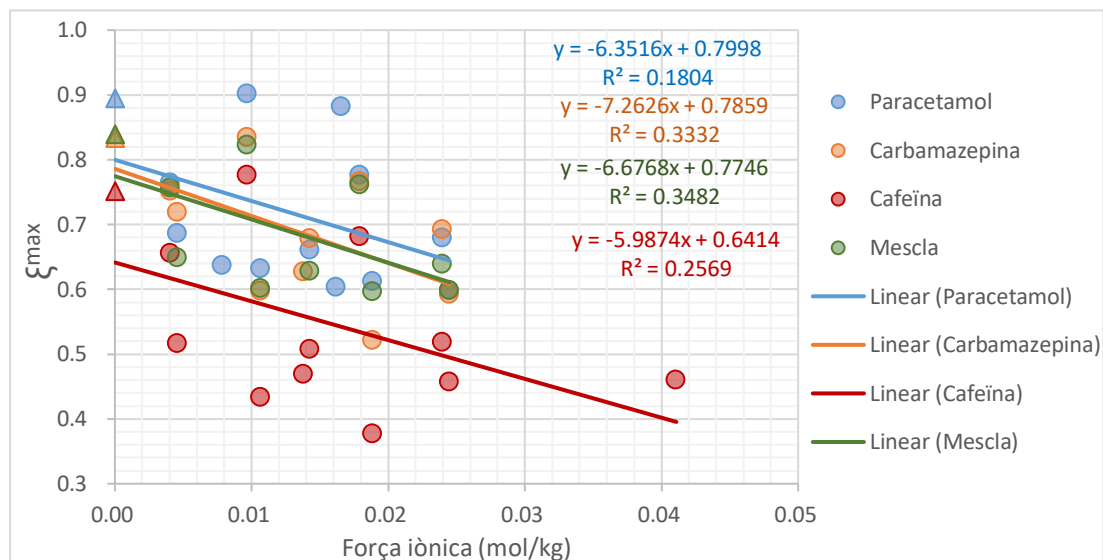


Figura 21. Conversió màxima vs. Força iònica sense diferenciació de sals però sí de contaminants.

També hi veiem una disminució de la conversió a mesura que augmenta la força iònica. La carbamazepina és el contaminant que presenta un pendent negatiu més gran, però no presenta suficient diferència pel que fa a la resta per treure'n conclusions clares. Els ajustos no són prou bons, ja que els coeficients de correlació són més petits de 0,4.

Hipòtesis 3: L'efecte de la força iònica dependent de quina sal la produeix i a més l'efecte és diferent segons el contaminant estudiat.

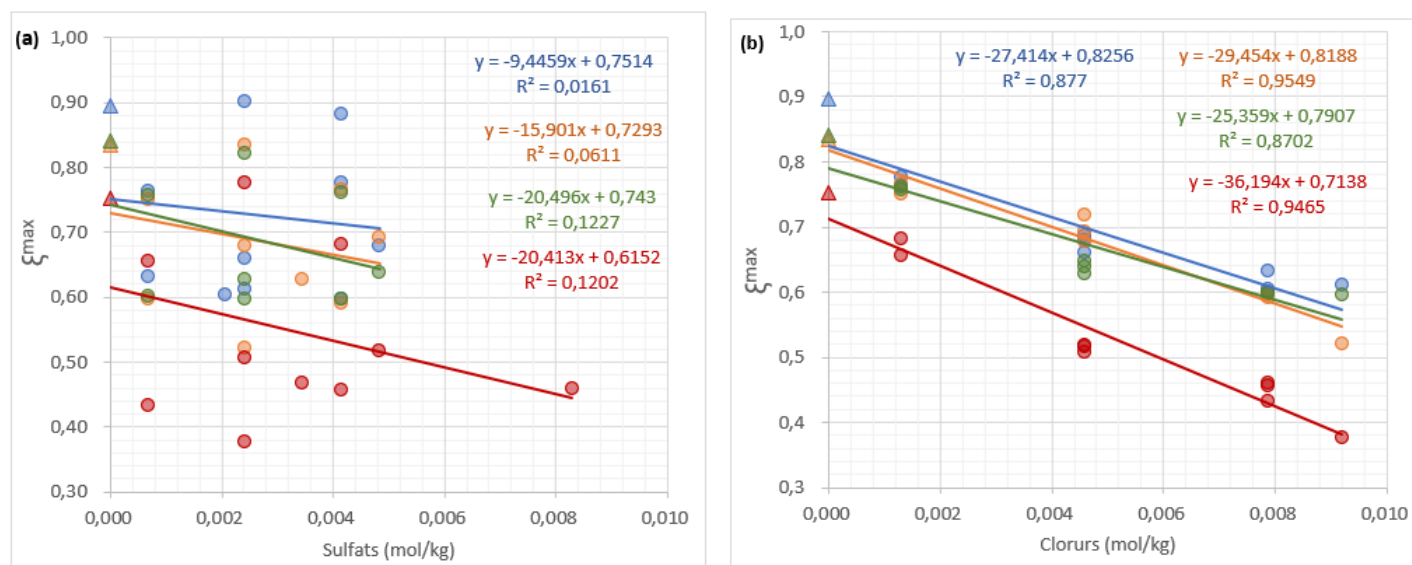


Figura 22. Conversió màxima vs. Molalitat. Amb diferenciació de sals (a) clorurs, (b) sulfats i de contaminants.

En les dues imatges podem veure que l'augment de la molalitat de sulfats i clorurs, afecta negativament a la conversió. Tot i això, en la presència de clorurs, veiem uns coeficients de correlació més alts ($R^2 > 0,8$) que no pas en els sulfats ($R^2 < 0,2$). Per tant, podríem dir que malgrat la presència de qualsevol de les sals, decreix la mineralització. A més, podem predir amb una certa confiança el comportament del sistema en funció dels clorurs afegits.

Velocitat de mineralització k

Hipòtesis 1: L'efecte de la força iònica és independent de quina sal la produeix i afecta de la mateixa manera a tots els contaminants estudiats i a la seva mescla.

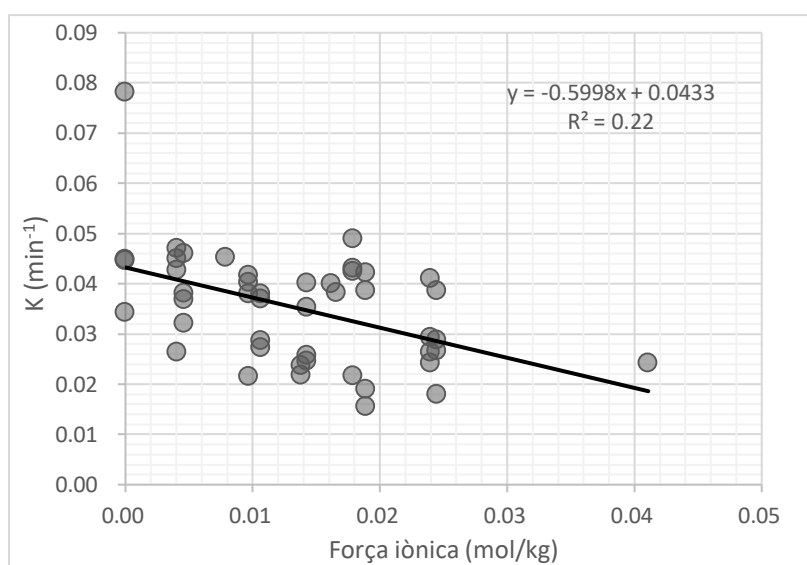


Figura 23. Velocitat de mineralització vs. Força iònica. Sense diferenciació de sals ni de contaminants.

En aquest cas, passa el mateix que el que hem vist amb la conversió. La presència de sals afecta de manera negativa a la velocitat de mineralització, però la correlació és molt petita i, per tant, no podem dir amb claredat què és el que està passant.

Hipòtesis 2: L'efecte de la força iònica és independent de quina sal la produeix però l'efecte és diferent segons el contaminant estudiat.

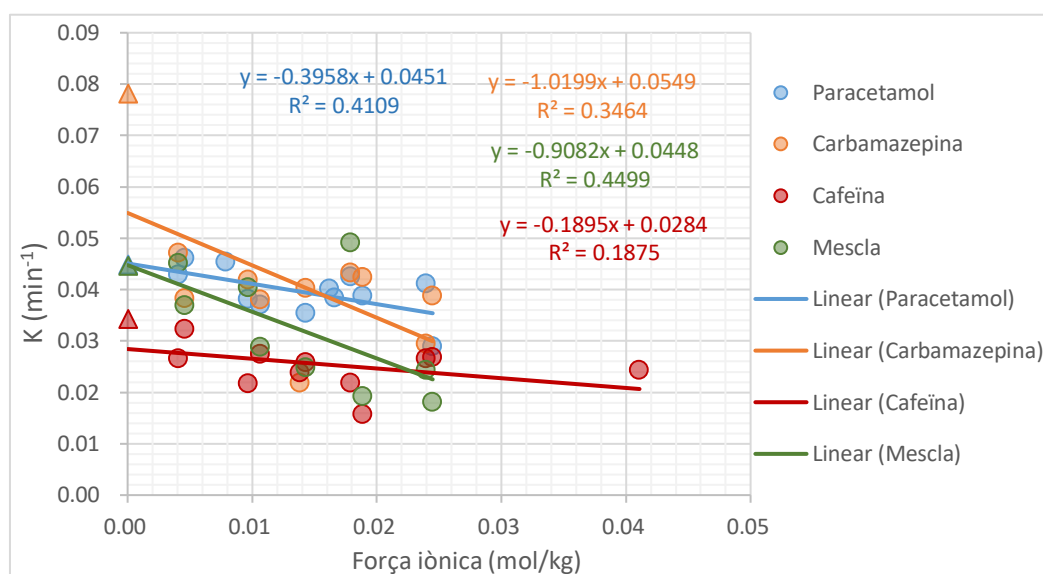


Figura 24. Velocitat de mineralització vs. Força iònica. Sense diferenciació de sals però sí de contaminants.

Si mirem què passa per cada tipus de contaminant, veiem que pel paracetamol i la cafeïna, el pendent no és tan gran en valor negatiu ($m_{paracetamol} = -0,395$ i $m_{cafeïna} = -0,1875$) com si ho és per la carbamazepina i la mescla ($m_{carbamazepina} = -1,0199$ i $m_{mescla} = -0,9082$). Tot i això, no en podem treure conclusions clares, ja que els coeficients de determinació (R^2) són molt petits.

Hipòtesis 3: L'efecte de la força iònica dependent de quina sal la produeix i a més l'efecte és diferent segons el contaminant estudiat.

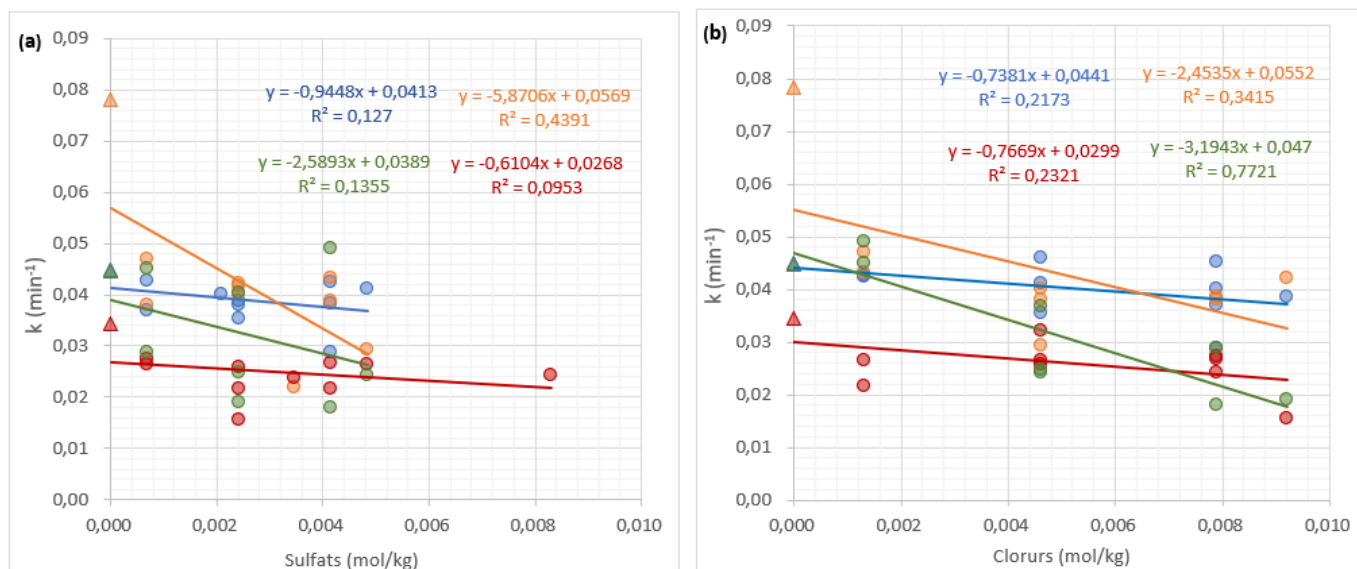


Figura 25. Velocitat de mineralització vs. Molalitat. Amb diferenciació de sals (a) clorurs, (b) sulfats) i de contaminants.

Si analitzem el que passa quan diferenciem les sals, no veiem gairebé cap diferència entre sulfats i clorurs i l'ajust en ambdós casos és dolent.

4.5 Simulació en el model de principis bàsics pel PCT en presència de sals a la matriu

Per tal de verificar que cal repetir tot el procés d'ajust de paràmetres, ja que els paràmetres globals determinats a l'apartat 3.3 eren per aigua desionitzada sense presència de sals, es realitza la simulació d'un experiment en el qual només hi ha la presència de clorurs (600_0), un on hi ha només sulfats (0_600) i per últim, un on hi ha les dues sals (100_100). Els experiments escollits son a la taula 20.

Taula 21. Experiments escollits per la simulació en el model sense la presència de sals.

Codificació	[Cl ⁻] (mg/L)	[SO ₄ ²⁻](mg/L)	[SO ₄ ²⁻](mg/L)
600_0	600	0	0
0_600	0	300	300
100_100	100	50	50

El resum de les dades experimentals dels tres experiments i les dades obtingudes després de la simulació es recullen en l'annex 8.2.2.

Les figures 25, 26 i 27 ens mostren els resultats.

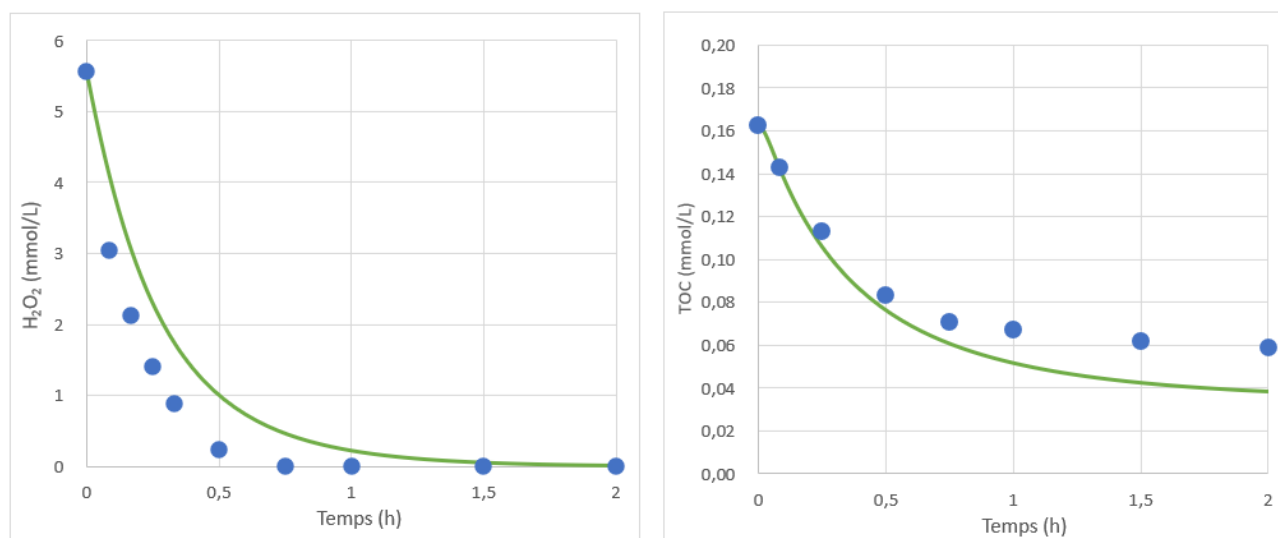


Figura 26. Dades experimentals i simulades per l'experiment 600_0.

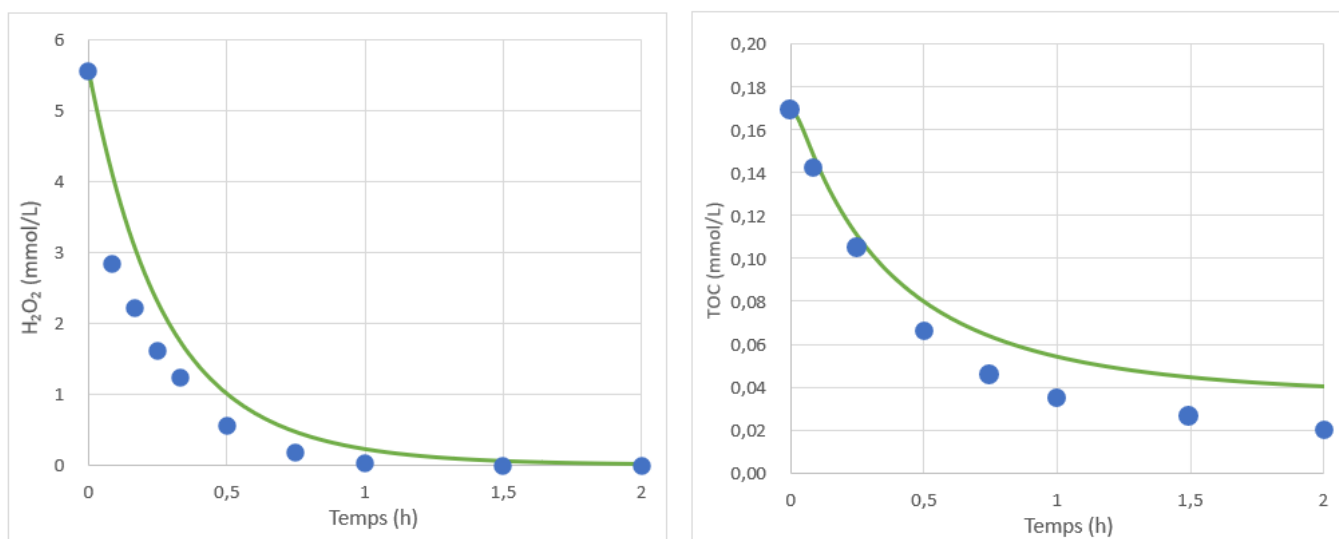


Figura 27. Dades experimentals i simulades per l'experiment 0_600

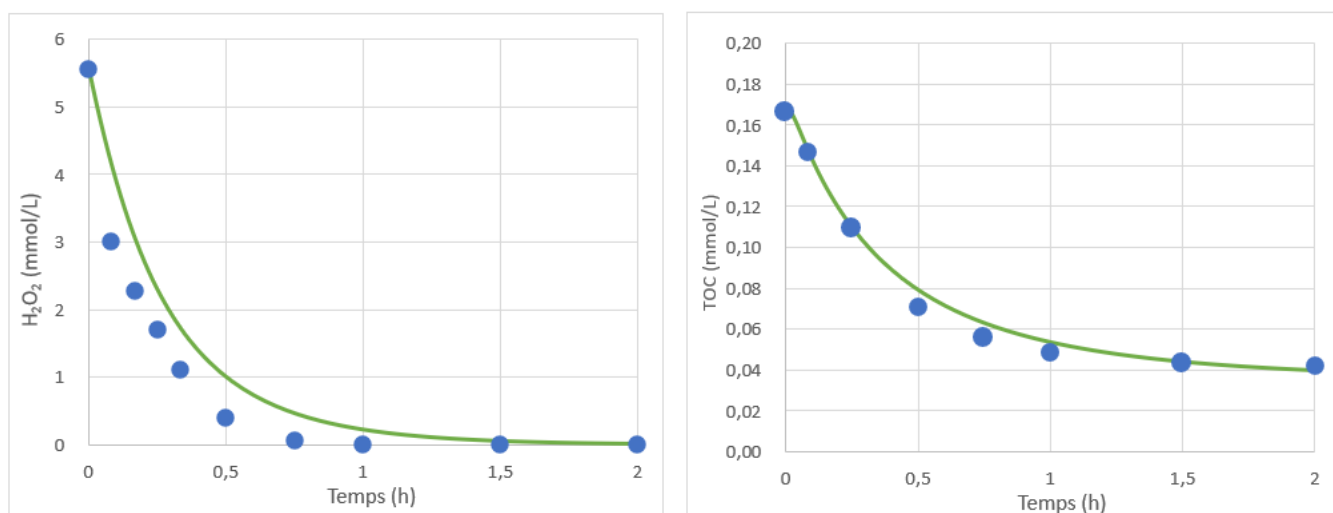


Figura 28. Dades experimentals i simulades per l'experiment 100_100

Els errors obtinguts entre les dades simulades i les experimentals es recullen a la taula 22:

Taula 22. RMSE pel H2O2 i pel TOC per cada experiment simulat.

	600_0	0_600	100_100
H2O2 (mmol/L)	0,6054	0,5362	0,5166
TOC (mmol/L)	0,0123	0,0145	0,0041

Podem veure que els errors pel TOC són més petits que pel peròxid d'hidrogen, per tant, les dades simulades s'ajusten millor en el cas del TOC. L'experiment amb la presència de les dues sals, és el que té valors d'error més petits, concretament un 51,66% pel peròxid d'hidrogen i un 0,4% pel TOC. Aquest resultat és lògic a causa del fet que és l'experiment en el qual la quantitat de sals afegides és menor. Respecte al fet que només hi hagi una de les sals, l'error és molt similar en els dos casos. Per tant, podríem concloure que malgrat que hi hagi presència de sals, si aquesta no és molt elevada podem continuar utilitzant els paràmetres del model determinats a l'apartat 3.3 sense haver de refer tot el procés d'ajust de paràmetres.

Tot i aquests resultats, evidentment si es refà la metodologia d'ajust de paràmetres amb dades experimentals amb presència de sals, segur que s'obtenen prediccions amb menys errors.

5. Conclusions

D'acord amb els objectius plantejats a l'inici del treball, s'ha arribat a les següents conclusions:

- S'ha estudiat el procés foto-Fenton i els factors que afecten al mecanisme.
- S'han determinat els paràmetres del model de principis bàsics utilitzant els programes Matlab i Simulink pel paracetamol, a partir de dades experimentals.
- S'han simulat les dades experimentals amb els paràmetres ajustats i s'ha vist que l'error màxim que s'ha obtingut pel peròxid d'hidrogen ha estat de 1,57 mmol/L i pel TOC de 0,019 mmol/L.
- S'han simulat les dades experimentals amb els paràmetres obtinguts de calcular la mitjana de tots els experiments i s'ha vist que l'ajust no és tan bo com el model ajustat, però s'han obtingut uns resultats bastant satisfactoris, sent l'error màxim pel peròxid d'hidrogen de 5,82 mmol/L i pel TOC de 0,362 mmol/L.
- S'han validat els paràmetres globals per dos experiments nous i s'ha vist que:
 - L'ajust pel TOC s'adapta bé a la realitat sent els errors quadràtics mitjans de 0,018 i 0,0071 mmol/L, per cada validació i per tant, es podrien predir altres condicions experimentals dins d'aquest rang d'estudi sense refer l'ajust.
 - Pel peròxid d'hidrogen, els errors han estat de 0,18 i 0,54 mmol/L i en aquest cas, no es podria predir l'evolució de les dades experimentals al llarg del procés.
- S'ha estudiat l'efecte de sals a la matriu del procés foto-Fenton, mitjançant dos paràmetres indicadors, la velocitat de mineralització i la conversió màxima assolida.
- Per la velocitat de mineralització, no es veu un efecte clar respecte la distinció de sals ni de la força iònica en general.
- Per la conversió màxima assolida s'ha vist que l'efecte de la força iònica de les sals presents a la matriu afecta de manera negativa, sobretot en la presència de clorurs independentment del contaminant o de la mescla, obtenint uns coeficients de correlació més grans de 0,8.
- S'ha vist que les dades simulades en el model de principis bàsics pel paracetamol en presència de sals a la matriu permeten predir l'evolució de la mineralització sense que calgui refer tot el procés d'ajust dels paràmetres.

6. Anàlisi Econòmica

En aquest apartat es troben descrites les despeses derivades de l'execució del projecte. Com que no s'han realitzat experiments en el laboratori, no s'inclouen les despeses de reactius i materials només es tenen en compte les despeses del personal involucrat en la realització del projecte. Es considera que el projecte s'ha dut a terme per una empresa on hi haurà un director i un enginyer tècnic.

Els costos de personal s'han calculat a partir de la següent fórmula:

$$Cost = Hores\ dedicades = \frac{Salari\ Brut\ Anual + Seguretat\ Social}{Hores_{any}} \quad (\text{Eq. 6.1})$$

La fracció que ha de pagar l'empresa en concepte de Seguretat social i impostos dels treballadors sobre el seu salari brut anual (SBA) és d'un 35%.

Es consideren 1200 hores totals anuals i com que s'han diferenciat dues categories professionals, cadascuna de les quals pertany a un grup de cotització diferent, el SBA també és diferent. Segons el BOE-A-2021-4477, un director té un salari base de 30.864 € i un enginyer de 25.195 €.

Taula 23. Cost personal.

	Enginyer tècnic	Director projecte
Hores dedicades	144	100
Sou brut anual	25195	30864
Seguretat social i impostos	8818,25	1082,4
Hores/any	1500	1500
Cost (€)	3265,27	2777,76
TOTAL (€)	6043,03	

Per tant, el cost del projecte és de 6.043,03€.

7. Bibliografia

- Abril Díaz, N., Antonio Bárcena Ruiz, J., Fernández Reyes, E., Galván Cejudo, A., Jorrín Novo, J., Peinado Peinado, J., Toribio Meléndez-Valdés, F., & Túnez Fiñana, I. (2010). *Espectrofometría: Espectros de absorción y cuantificación colorimétrica de biomoléculas*. https://www.uco.es/dptos/bioquimica-biol-mol/pdfs/08_ESPECTROFOTOMETRIA.pdf
- Ameta, R., Chohadia, A. K., Jain, A., & Punjabi, P. B. (2018). Fenton and Photo-Fenton Processes. *Advanced Oxidation Processes for Wastewater Treatment: Emerging Green Chemical Technology*, 49–87. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-810499-6.00003-6>
- Audino, F., Santamaria, J. M. T., del Valle Mendoza, L. J., Graells, M., & Pérez-Moya, M. (2019). Removal of Paracetamol Using Effective Advanced Oxidation Processes. *International Journal of Environmental Research and Public Health* 2019, Vol. 16, Page 505, 16(3), 505. <https://doi.org/10.3390/IJERPH16030505>
- Barceló, D. (2003). Emerging pollutants in water analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 22(10), xiv–xvi. [https://doi.org/10.1016/S0165-9936\(03\)01106-3](https://doi.org/10.1016/S0165-9936(03)01106-3)
- Bisutti, I., Hilke, I., & Raessler, M. (2004). Determination of total organic carbon – An overview of current methods. *TrAC – Trends in Analytical Chemistry*, 23(10–11). <https://doi.org/10.1016/j.trac.2004.09.003>
- Cabrera Reina, A., Santos-Juanes Jordá, L., García Sánchez, J. L., Casas López, J. L., & Sánchez Pérez, J. A. (2012). Modelling photo-Fenton process for organic matter mineralization, hydrogen peroxide consumption and dissolved oxygen evolution. *Applied Catalysis B: Environmental*, 119–120, 132–138. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2012.02.021>
- Configuración Hidrográfica Del Segura. *Elementos de calidad e indicadores*. [en línea]. <https://www.chsegura.es/es/cuenca/redes-de-control/calidad-en-aguas-superficiales/elementos-de-calidad-e-indicadores/>
- Cordero, S. (2021). Estratègies de millora de l'eficiència del procés de degradació foto-Fenton. Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona. <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/358780>

- Dafouz Ramírez, R., & Valcárcel Rivera, Y. (2017). Cafeína como contaminante ambiental. *Revista de Toxicología*, 34(2). ISSN: 0212-7113. <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=91954641014>.
- Devi, L., Munikrishnappa, C., Nagaraj, B., Rajashekhar, K. (2013). Effect of chloride and sulfate ion son the advanced photo Fenton and modified photo Fenton degradation process of Alizarin Red S. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, 125-131, 374-375. <https://doi.org/10.1016/j.molcata.2013.03.023>
- Doménech, X., Jardim, W. F., & Litter, M. (2004). Eliminación de Contaminantes por Fotocatálisis Heterogénea: Procesos Avanzados de Oxidación para la eliminación de contaminantes. *Procesos avanzados de oxidación para la eliminación de contaminantes*. https://www.researchgate.net/publication/237764122_Procesos_avanzados_de_oxidacion_para_la_eliminacion_de_contaminantes
- Domínguez, Joaquín R.; González, Teresa; Palo, Patricia; Cuerda-Correa, Eduardo M. (2012). *Fenton + Fenton-like Integrated Process for Carbamazepine Degradation: Optimizing the System*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(6), 2531–2538. Doi:10.1021/ie201980p
- Espinosa, S. (2021). Efecto de los iones cloruro y sulfato en el proceso de degradación foto-Fenton de contaminantes. Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona. <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/358682>
- Fradejas, N. Estudi del tractament de fàrmacs mitjançant el procés foto-Fenton (2016). Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona. <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/82968>
- Gary, C. (2009). Química Analítica Sexta Edición. *Mc Graw Hill University of Washington, Vol 6*. ISBN: 978-970-10-7234-9.
- Ghime, D., & Ghosh, P. (n.d.). *Advanced Oxidation Processes: A Powerful Treatment Option for the Removal of Recalcitrant Organic Compounds*. Doi:10.5772/intechopen.90192
- Gou, Y., Chen, P., Yang, L., Li, S., Peng, L., Song, S., & Xu, Y. (2021). Degradation of fluoroquinolones in homogeneous and heterogeneous photo-Fenton processes: A review. *Chemosphere*, 270, 129481. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2020.129481>
- Jiang, C., Pang, S., Ouyang, F., Ma, J., & Jiang, J. (2010). A new insight into Fenton and Fenton-like processes for water treatment. *Journal of Hazardous Materials*, 174(1–3), 813–817. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2009.09.125>
- Jozwiak-Bebenista, M., & Nowak, J. Z. (2014). Paracetamol: Mechanism of action, applications and safety concern. *Acta Poloniae Pharmaceutica – Drug Research*, 71(1). PMID: 24779190.

- Kingsley Ogemdi, I. (2019). A Review on the Properties and Uses of Paracetamol. *International Journal of Pharmacy and Chemistry*, 5(3). <https://doi.org/10.11648/j.ijpc.20190503.12>
- Maan, J. S., Duong, T. vi H., & Saadabadi, A. (2021). Carbamazepine. *The Essence of Analgesia and Analgesics*, 301–305. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511841378.073>
- Machulek, A., H., F., Gozzi, F., O., V., C., L., & F. Moraes, J. E. (2012). Fundamental Mechanistic Studies of the Photo-Fenton Reaction for the Degradation of Organic Pollutants. In *Organic Pollutants Ten Years After the Stockholm Convention – Environmental and Analytical Update*. InTech. <https://doi.org/10.5772/30995>
- National Center for Biotechnology Information (2022). PubChem Compound Summary for CID 2554, Carbamazepine. Recuperat de: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Carbamazepine>.
- National Center for Biotechnology Information (2022). PubChem Compound Summary for CID 1983, Acetaminophen. Recuperat de: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Acetaminophen>.
- Neyens, E., & Baeyens, J. (2003). A review of classic Fenton's peroxidation as an advanced oxidation technique. In *Journal of Hazardous Materials* (Vol. 98). Doi: 10.1016/s0304-3894(02)00282-0.
- Ortega-Gómez, E., Fernández-Ibáñez, P., Ballesteros Martín, M. M., Polo-López, M. I., Esteban García, B., & Sánchez Pérez, J. A. (2012). Water disinfection using photo-Fenton: Effect of temperature on *Enterococcus faecalis* survival. *Water Research*, 46(18), 6154–6162. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2012.09.007>
- Ortweiler, W., Stein, G., Simon, H. U., Siegert, C., Splinter, F. K., & Traeger, A. (1985). Elimination of caffeine and 67aboratori for in vivo characterization of cytochrome P-450 dependent biotransformation reactions in old aged men. *Pharmazie*, 40(11). PMID: 4095131.
- Pardo Lozano R, Alvarez García Y, Barral Tafalla D, Farré Albaladejo M. Cafeína: un nutriente, un fármaco, o una droga de abuso [Caffeine: a nutrient, a drug or a drug of abuse]. *Adicciones*. 2007;19(3):225-38. Spanish. PMID: 17724925.
- Pignatello, J. J., Oliveros, E., & MacKay, A. (2006). Advanced oxidation processes for organic contaminant destruction based on the fenton reaction and related chemistry. In *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* (Vol. 36, Issue 1). <https://doi.org/10.1080/10643380500326564>
- Rommozzi, E., Giannakis, S., Giovannetti, R., Vione, D., & Pulgarin, C. (2020). Detrimental vs. beneficial influence of ions during solar (SODIS) and photo-Fenton disinfection of *E. coli* in

- water: (Bi)carbonate, chloride, nitrate and nitrite effects. *Applied Catalysis B: Environmental*, 270, 118877. <https://doi.org/10.1016/J.APCATB.2020.118877>
- Sastre de Vicente, M. E. (2004). The Concept of Ionic Strength Eighty Years after Its Introduction in Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 81 (5), 750. <https://doi.org/10.1021/ed081p750>
- Soriano-Molina, P., Plaza-Bolaños, P., Lorenzo, A., Agüera, A., García Sánchez, J. L., Malato, S., & Sánchez Pérez, J. A. (2019). Assessment of solar raceway pond reactors for removal of contaminants of emerging concern by photo-Fenton at circumneutral pH from very different municipal wastewater effluents. *Chemical Engineering Journal*, 366, 141–149. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.02.074>
- Tejada, C., Quiñonez, E., & Peña, M. (2014). Contaminantes Emergentes en Aguas: Metabolitos de Fármacos. Una Revisión. *Revista Facultad de Ciencias Básicas*, 10(1), 80–101. <https://doi.org/10.18359/RFCB.341>
- Tolou-Ghamari, Z., Zare, M., Habibabadi, J. M., & Najafi, M. R. (2013). A quick review of carbamazepine pharmacokinetics in epilepsy from 1953 to 2012. *Journal of Research in Medical Sciences*, 18(SPL.1). PMID: 23961295.
- Xu, M., Wu, C., & Zhou, Y. (2020). Advancements in the Fenton Process for Wastewater Treatment. *Advanced Oxidation Processes – Applications, Trends, and Prospects*. Doi:[10.5772/intechopen.90256](https://doi.org/10.5772/intechopen.90256)
- Yus, J. (2016). Aplicació del procés foto-Fenton a escala 68laboratorio a aigües contaminades. Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona. <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/87403>
- Zapata, A., Oller, I., Rizzo, L., Hilgert, S., Maldonado, M. I., Sánchez-Pérez, J. A., & Malato, S. (2010). Evaluation of operating parameters involved in solar photo-Fenton treatment of wastewater: Interdependence of initial pollutant concentration, temperature and iron concentration. *Applied Catalysis B: Environmental*, 97(1–2), 292–298. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2010.04.020>
- Zhang, M., Dong, H., Zhao, L., Wang, D., Meng, D. (2019). A review on Fenton process for organic wastewater treatment based on optimization perspective. *Science of The Total Environment*, 670, 110–121. Doi:10.1016/j.scitotenv.2019.03.180

8. Annex

8.1. Annex apartat 3

8.1.1 Dades experimentals

Taula 24. Dades de l'experiment 189_ON5 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

189_ON5					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	189	25,7993	0	5,5588	0,1707
5	114,6119	-	0,0833	3,3709	-
10	104,2618	-	0,1667	3,0665	-
15	93,3029	17,4423	0,25	2,7442	0,1154
20	82,7245	-	0,3333	2,4331	-
25	70,1674	-	0,4167	2,0637	-
30	57,0015	11,6623	0,5	1,6765	0,0771
45	35,3881	8,2773	0,75	1,0408	0,0548
60	22,4505	6,0607	1	0,6603	0,0401
75	15,2207	-	0,4477	-	0,4477
90	13,0898	4,4360	0,3850	0,0293	0,3850
120	10,1979	3,3703	0,2999	0,0223	0,2999

Taula 25. Dades de l'experiment 189_ON14 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

189_ON14					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	189,0000	26,0120	0	5,5588	0,1721
5	108,2192	-	0,0833	3,1829	-
10	86,5297	-	0,1667	2,5450	-
15	57,7626	10,5100	0,25	1,6989	0,0695
20	37,6712	-	0,3333	1,1080	-
25	23,9726	-	0,4167	0,7051	-
30	14,3836	6,0000	0,5	0,4230	0,0397
45	2,7397	4,5300	0,75	0,0806	0,0300
60	0,9132	3,9000	1	0,0269	0,0258
75	0,9132	-	0,4477	0,0269	-
90	0,9132	3,5650	0,3850	0,0269	0,0236
120	0,9132	3,1940	0,2999	0,0269	0,0211

Taula 26. Dades de l'experiment 71,6_ON9 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

71,6_ON9					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	71,6000	25,9490	0	2,1059	0,1717
5	24,4292	-	0,0833	0,7185	-
10	14,1553	-	0,1667	0,4163	-
15	5,2511	15,4220	0,25	0,1544	0,1020
20	1,8265	-	0,3333	0,0537	-
25	0,9132	-	0,4167	0,0269	-
30	0,4566	11,3040	0,5	0,0134	0,0748
45	1,3699	9,6230	0,75	0,0403	0,0637
60	0,6849	8,4090	1	0,0201	0,0556
75	0,6849	-	0,4477	0,0201	-
90	0,6849	7,2630	0,3850	0,0201	0,0480
120	0,6849	6,5500	0,2999	0,0201	0,0433

Taula 27. Dades de l'experiment 756_ON14 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

756_ON14					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	756,0000	27,0170	0	22,2353	0,1787
5	507,2298	-	0,0833	14,9185	-
10	487,4429	-	0,1667	14,3366	-
15	425,7991	13,9530	0,25	12,5235	0,0923
20	356,5449	-	0,3333	10,4866	-
25	296,4231	-	0,4167	8,7183	-
30	229,0715	8,0200	0,5	6,7374	0,0531
45	105,0228	6,1890	0,75	3,0889	0,0409
60	34,2466	5,1630	1	1,0073	0,0342
75	4,9467	-	0,4477	0,1455	-
90	1,5221	3,7500	0,3850	0,0448	0,0248
120	1,1416	3,0490	0,2999	0,0336	0,0202

Taula 28. Dades de l'experiment 756_ON5 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

756_ON5					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	756,0000	26,7860	0	22,2353	0,1772
5	539,9543	-	0,0833	15,8810	-
10	533,4855	-	0,1667	15,6908	-
15	506,0883	20,6370	0,25	14,8849	0,1365
20	490,8676	-	0,3333	14,4373	-
25	456,6210	-	0,4167	13,4300	-
30	421,2329	15,8580	0,5	12,3892	0,1049
45	323,4399	11,8790	0,75	9,5129	0,0786
60	211,5677	-	1	6,2226	-
75	141,5525	-	0,4477	4,1633	-
90	73,0594	6,4070	0,3850	2,1488	0,0424
120	24,3531	5,0220	0,2999	0,7163	0,0332

Taula 29. Dades de l'experiment 472,5_ON9 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

472,5_ON9					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	472,5000	25,8750	0	13,8971	0,1712
5	306,2215	-	0,0833	9,0065	-
10	288,5274	-	0,1667	8,4861	-
15	257,1347	15,6720	0,25	7,5628	0,1037
20	227,4543	-	0,3333	6,6898	-
25	190,0685	-	0,4167	5,5902	-
30	152,9680	9,2020	0,5	4,4991	0,0609
45	79,9087	6,2400	0,75	2,3503	0,0413
60	35,6735	5,2590	1	1,0492	0,0348
75	10,8447	-	0,4477	0,3190	-
90	1,4269	3,3210	0,3850	0,0420	0,0220
120	-	-	0,2999	-	-

Taula 30. Dades de l'experiment 873,4_ON9 en unitats de minuts i mg/L, i la conversió a h i mmol/L.

873,4_ON9					
Temps (min)			Temps (h)		
H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)		H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)	
873,4000	24,7840	0	25,6882	0,1639	0
588,4703	-	5	17,3080	-	0,0833
563,3562	-	10	16,5693	-	0,1667
528,5388	15,3180	15	15,5453	0,1013	0,25
477,1689	-	20	14,0344	-	0,3333
431,5068	-	25	12,6914	-	0,4167
373,8584	9,5420	30	10,9958	0,0631	0,5
248,2877	7,4900	45	7,3026	0,0495	0,75
155,8219	6,1170	60	4,5830	0,0405	1
87,3288	-	75	2,5685	-	0,4477
45,6621	4,0030	90	1,3430	0,0265	0,3850
23,4018	2,6260	120	0,6883	0,0174	0,2999

Taula 31. Dades de l'experiment 236,3_ON14 utilitzat per la validació 1.

VALIDACIÓ 1					
Temps (min)			Temps (h)		
H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)		H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)	
236,3000	25,7310	0	6,9500	0,1702	0
166,2100	-	5	4,8885	-	0,0833
136,7580	-	10	4,0223	-	0,1667
101,1416	13,6360	15	2,9748	0,0902	0,25
71,0046	-	20	2,0884	-	0,3333
51,8265	-	25	1,5243	-	0,4167
32,8767	8,0100	30	0,9670	0,0530	0,5
6,8493	5,2000	45	0,2015	0,0344	0,75
1,3699	4,7200	60	0,0403	0,0312	1
0,6849	-	75	0,0201	-	0,4477
0,4566	4,2380	90	0,0134	0,0280	0,3850
0,2283	3,6460	120	0,0067	0,0241	0,2999

Taula 32. Dades de l'experiment 378_ON14 utilitzat per la validació 2.

VALIDACIÓ 2

Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)
0	378,0000	25,0290
5	273,2877	-
10	203,4247	-
15	189,4977	13,0340
20	148,1735	-
25	104,1096	-
30	71,0046	7,5600
45	25,7991	5,3100
60	3,4247	4,8770
75	0,1598	-
90	0,1142	4,2020
120	0,0685	3,5130

Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	11,1176	0,1656
0,0833	8,0379	-
0,1667	5,9831	-
0,25	5,5735	0,0862
0,3333	4,3580	-
0,4167	3,0620	-
0,5	2,0884	0,0500
0,75	0,7588	0,0351
1	0,1007	0,0323
0,4477	0,0047	-
0,3850	0,0034	0,0278
0,2999	0,0020	0,0232

8.1.2 Iteracions funció objectiu i estimació de paràmetres

- **Experiment 189_ON5**

Taula 33. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5.

Iteration	Minimize
0	0,5255
1	0,1177
2	0,0689
3	0,0689
4	0,0665
5	0,0641
6	0,0641
7	0,0617
8	0,0592
9	0,058
10	0,0574

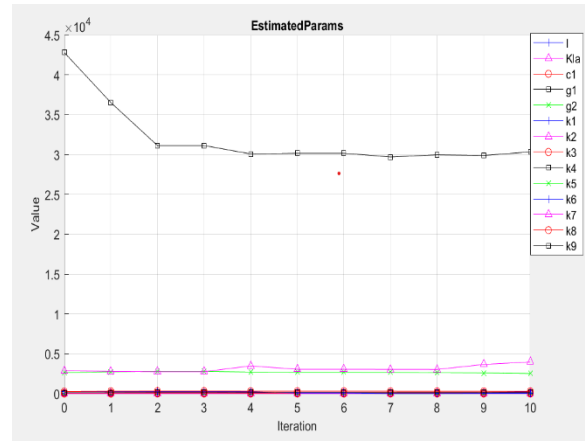


Figura 29. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

- **Experiment 189_ON14**

Taula 34. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON14

Iteration	Minimize
0	1,6662
1	0,3001
2	0,0374
3	0,0139
4	0,0139
5	0,0139
6	0,0128
7	0,0111
8	0,0102

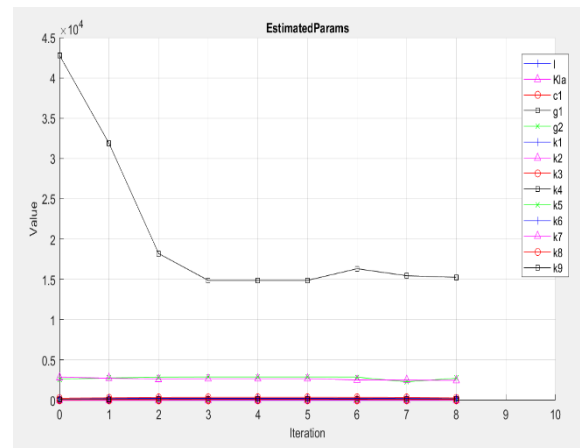


Figura 30. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

• **Experiment 71,6_9**

Taula 35. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5

Iteration	Minimize
0	25.651
1	0,7609
2	0,2277
3	0,2125
4	0,1183
5	0,0687
6	0,0217
7	0,0217
8	0,0189
9	0,0179
10	0,0179
11	0,0179
12	0,0177
13	0,0176
14	0,0176
15	0,0176
16	0,0176
17	0,0176

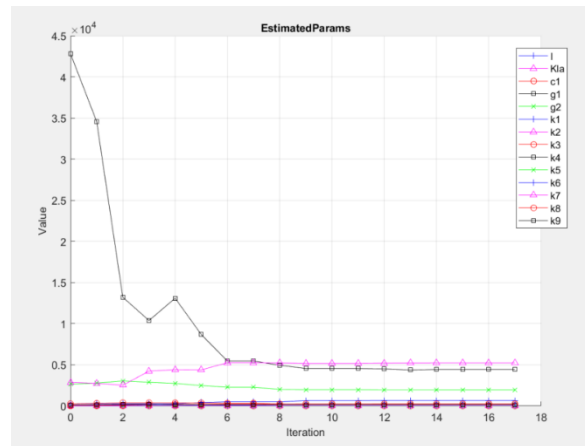


Figura 31. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

• **Experiment 756_14**

Taula 36. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5

Iteration	Minimize
0	0,4633
1	0,0603
2	0,0603
3	0,0405
4	0,0405
5	0,038
6	0,036
7	0,036
8	0,0358
9	0,0353
10	0,0346

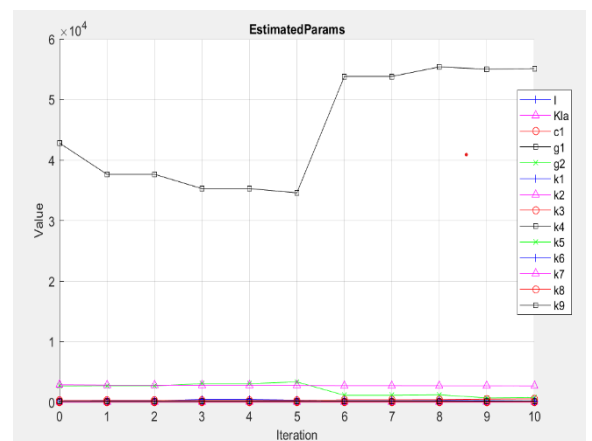


Figura 32. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

• Experiment 756_5

Taula 37. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5

Iteration	Minimize
0	0,0719
1	0,0611
2	0,0611
3	0,0611
4	0,0604

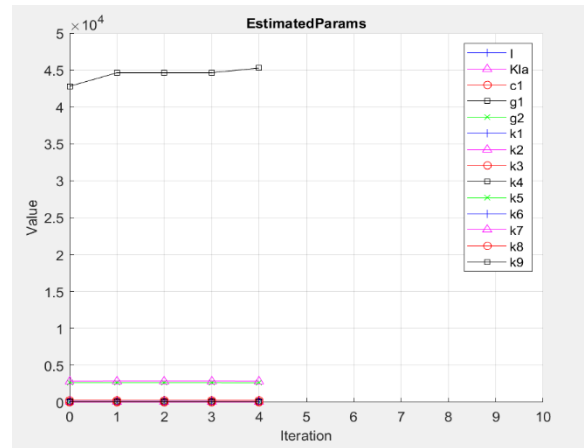


Figura 33. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

• Experiment 472,5_9

Taula 38. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5

Iteration	Minimize
0	0,3837
1	0,0559
2	0,0423
3	0,0423
4	0,042
5	0,0412

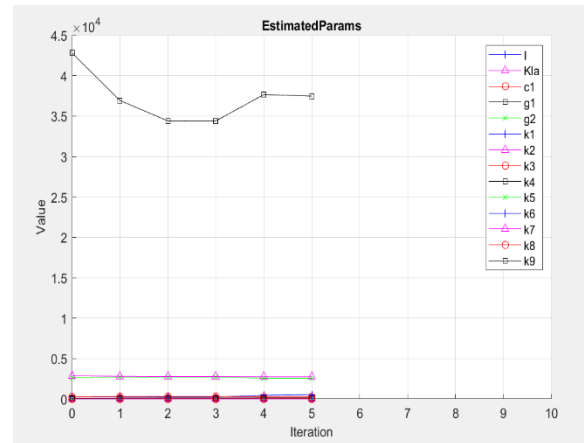


Figura 34. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

• Experiment 873,4_9

Taula 39. Número d'iteracions i valor minimitzat de la funció objectiu per l'experiment 189_ON5

Iteration	Minimize
0	0,1892
1	0,0659
2	0,0613
3	0,0613
4	0,0577
5	0,0532
6	0,051
7	0,0499
8	0,0499
9	0,049
10	0,0479
11	0,1892

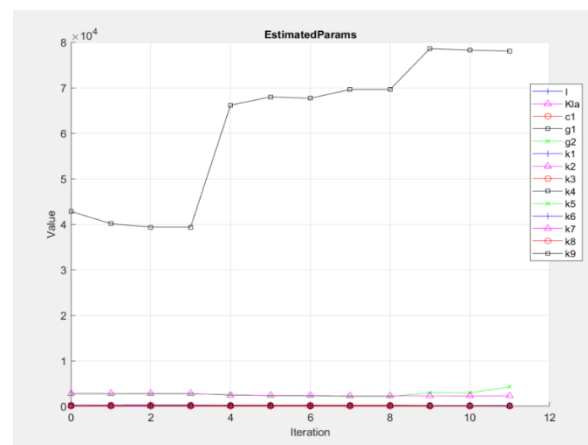


Figura 35. Evolució dels valors dels paràmetres per cada iteració.

8.1.3 Taules de dades obtingudes de la simulació i representacions.

Taula 40. Dades simulades de l'experiment 189_ON5 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 189_ON5								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	5,5588	0,1707	0	5,5588	0,1707	0	5,5588	0,1707
1,7988E-05	5,5587	0,1707	8,437E-06	5,5587	0,1707	8,798E-06	5,5587	0,1707
3,5977E-05	5,5586	0,1707	1,687E-05	5,5586	0,1707	1,760E-05	5,5586	0,1707
5,3965E-05	5,5584	0,1707	2,531E-05	5,5585	0,1707	2,639E-05	5,5584	0,1707
1,1762E-04	5,5580	0,1707	7,031E-05	5,5581	0,1707	6,386E-05	5,5579	0,1707
1,8128E-04	5,5576	0,1707	1,153E-04	5,5576	0,1707	1,013E-04	5,5574	0,1707
2,4494E-04	5,5571	0,1707	1,603E-04	5,5572	0,1707	1,388E-04	5,5568	0,1707
3,0860E-04	5,5567	0,1707	2,053E-04	5,5567	0,1707	1,763E-04	5,5563	0,1707
4,4674E-04	5,5556	0,1707	2,982E-04	5,5557	0,1707	2,590E-04	5,5550	0,1707
5,8488E-04	5,5546	0,1707	3,910E-04	5,5546	0,1707	3,418E-04	5,5537	0,1707
7,2302E-04	5,5535	0,1707	4,839E-04	5,5535	0,1707	4,246E-04	5,5524	0,1707
8,6116E-04	5,5524	0,1707	5,768E-04	5,5524	0,1707	5,073E-04	5,5510	0,1707
0,001072	5,5507	0,1707	6,696E-04	5,5513	0,1707	5,901E-04	5,5496	0,1707
0,001282	5,5490	0,1707	8,169E-04	5,5494	0,1707	7,311E-04	5,5471	0,1707
0,001493	5,5472	0,1707	9,643E-04	5,5474	0,1707	8,722E-04	5,5446	0,1707
0,001704	5,5454	0,1707	0,001112	5,5454	0,1707	0,001013	5,5420	0,1707
0,001914	5,5436	0,1707	0,001259	5,5434	0,1707	0,001154	5,5394	0,1707
0,002246	5,5408	0,1707	0,001406	5,5413	0,1707	0,001295	5,5367	0,1707
0,002577	5,5380	0,1707	0,001641	5,5379	0,1707	0,001539	5,5320	0,1707
0,002909	5,5352	0,1707	0,001875	5,5345	0,1707	0,001783	5,5273	0,1707
0,003240	5,5323	0,1707	0,002109	5,5310	0,1707	0,002026	5,5225	0,1707
0,003572	5,5295	0,1707	0,002344	5,5275	0,1707	0,002270	5,5178	0,1707
0,003903	5,5267	0,1707	0,002578	5,5241	0,1707	0,002514	5,5130	0,1707
0,004543	5,5212	0,1707	0,002912	5,5191	0,1707	0,002852	5,5063	0,1707
0,005183	5,5158	0,1707	0,003245	5,5141	0,1707	0,003191	5,4997	0,1707
0,005823	5,5104	0,1707	0,003579	5,5092	0,1707	0,003530	5,4930	0,1706
0,006463	5,5050	0,1706	0,003913	5,5042	0,1706	0,003869	5,4864	0,1706
0,007103	5,4996	0,1706	0,004246	5,4993	0,1706	0,004207	5,4797	0,1706
0,007743	5,4942	0,1706	0,004985	5,4883	0,1706	0,004836	5,4674	0,1706
0,009136	5,4825	0,1706	0,005724	5,4774	0,1706	0,005465	5,4551	0,1705
0,01053	5,4709	0,1705	0,006463	5,4665	0,1705	0,006093	5,4429	0,1705
0,01192	5,4593	0,1705	0,007202	5,4557	0,1705	0,006722	5,4307	0,1704
0,01332	5,4477	0,1704	0,007941	5,4449	0,1704	0,007351	5,4185	0,1704
0,01471	5,4362	0,1703	0,009431	5,4232	0,1703	0,008745	5,3916	0,1702
0,01689	5,4183	0,1702	0,01092	5,4016	0,1701	0,01014	5,3649	0,1701
0,01906	5,4005	0,1701	0,01241	5,3802	0,1700	0,01153	5,3383	0,1699
0,02123	5,3827	0,1699	0,01390	5,3588	0,1698	0,01293	5,3119	0,1697
0,02341	5,3650	0,1697	0,01539	5,3376	0,1696	0,01432	5,2857	0,1694
0,02558	5,3474	0,1696	0,01880	5,2895	0,1691	0,01763	5,2241	0,1689
0,02954	5,3153	0,1692	0,02220	5,2420	0,1685	0,02093	5,1633	0,1682
0,03350	5,2835	0,1688	0,02560	5,1949	0,1679	0,02423	5,1032	0,1674
0,03747	5,2519	0,1684	0,02901	5,1482	0,1672	0,02753	5,0438	0,1666
0,04143	5,2204	0,1679	0,03241	5,1020	0,1665	0,03083	4,9851	0,1658
0,04539	5,1891	0,1675	0,03813	5,0253	0,1652	0,03654	4,8851	0,1643
0,05448	5,1178	0,1663	0,04385	4,9497	0,1638	0,04225	4,7870	0,1626
0,06357	5,0473	0,1651	0,04956	4,8750	0,1623	0,04796	4,6907	0,1609
0,07266	4,9774	0,1638	0,05528	4,8014	0,1607	0,05367	4,5962	0,1592
0,08175	4,9083	0,1624	0,06100	4,7287	0,1591	0,05938	4,5035	0,1574
0,09084	4,8399	0,1610	0,06918	4,6264	0,1567	0,06701	4,3823	0,1550
0,1035	4,7455	0,1591	0,07736	4,5260	0,1543	0,07464	4,2642	0,1527
0,1162	4,6525	0,1572	0,08554	4,4275	0,1518	0,08226	4,1491	0,1503
0,1289	4,5609	0,1552	0,09372	4,3310	0,1493	0,08989	4,0370	0,1481

0,1416	4,4706	0,1533	0,1019	4,2364	0,1469	0,09752	3,9280	0,1458
0,1543	4,3817	0,1515	0,1130	4,1113	0,1436	0,1080	3,7828	0,1429
0,1712	4,2651	0,1490	0,1241	3,9899	0,1404	0,1185	3,6431	0,1400
0,1882	4,1511	0,1467	0,1352	3,8722	0,1373	0,1290	3,5088	0,1372
0,2052	4,0399	0,1444	0,1463	3,7581	0,1343	0,1395	3,3798	0,1346
0,2222	3,9314	0,1422	0,1574	3,6476	0,1313	0,1500	3,2558	0,1320
0,2392	3,8258	0,1401	0,1765	3,4660	0,1265	0,1681	3,0530	0,1278
0,2738	3,6185	0,1360	0,1956	3,2944	0,1220	0,1863	2,8639	0,1238
0,3085	3,4226	0,1321	0,2146	3,1322	0,1177	0,2044	2,6876	0,1201
0,3432	3,2375	0,1284	0,2337	2,9789	0,1136	0,2225	2,5230	0,1166
0,3778	3,0627	0,1249	0,2528	2,8340	0,1097	0,2407	2,3695	0,1133
0,4125	2,8977	0,1216	0,2773	2,6588	0,1051	0,2649	2,1804	0,1091
0,4513	2,7242	0,1180	0,3019	2,4956	0,1007	0,2891	2,0078	0,1052
0,4900	2,5615	0,1146	0,3265	2,3437	0,09669	0,3133	1,8500	0,1016
0,5288	2,4091	0,1115	0,3511	2,2020	0,09289	0,3375	1,7058	0,0982
0,5676	2,2662	0,1084	0,3756	2,0698	0,08934	0,3617	1,5738	0,0951
0,6064	2,1323	0,1055	0,4156	1,8728	0,08402	0,4017	1,3797	0,0903
0,6464	2,0028	0,1027	0,4556	1,6965	0,07922	0,4417	1,2115	0,0860
0,6864	1,8817	0,1000	0,4956	1,5385	0,07487	0,4817	1,0654	0,0822
0,7264	1,7684	0,09748	0,5356	1,3967	0,07094	0,5217	0,9384	0,0787
0,7664	1,6623	0,09506	0,5756	1,2694	0,06736	0,5617	0,8276	0,0755
0,8064	1,5630	0,09275	0,6156	1,1550	0,06411	0,6017	0,7309	0,0727
0,8464	1,4700	0,09056	0,6556	1,0519	0,06114	0,6417	0,6464	0,0701
0,8864	1,3829	0,08847	0,6956	0,9588	0,05842	0,6817	0,5723	0,0677
0,9264	1,3012	0,08647	0,7356	0,8747	0,05592	0,7217	0,5073	0,0655
0,9664	1,2247	0,08458	0,7756	0,7987	0,05363	0,7617	0,4502	0,0635
1,0064	1,1530	0,08277	0,8156	0,7298	0,05152	0,8017	0,3999	0,0617
1,0464	1,0858	0,08104	0,8556	0,6674	0,04957	0,8417	0,3556	0,0600
1,0864	1,0227	0,07939	0,8956	0,6107	0,04777	0,8817	0,3165	0,0585
1,1264	0,9636	0,07782	0,9356	0,5592	0,04610	0,9217	0,2819	0,0571
1,1664	0,9081	0,07631	0,9756	0,5124	0,04456	0,9617	0,2513	0,0558
1,2064	0,8560	0,07488	1,0156	0,4698	0,04312	1,0017	0,2242	0,0545
1,2464	0,8071	0,07350	1,0556	0,4310	0,04179	1,0417	0,2002	0,0534
1,2864	0,7612	0,07219	1,0956	0,3956	0,04054	1,0817	0,1789	0,0524
1,3264	0,7180	0,07093	1,1356	0,3634	0,03938	1,1217	0,1600	0,0514
1,3664	0,6775	0,06973	1,1756	0,3340	0,03830	1,1617	0,1431	0,0505
1,4064	0,6394	0,06857	1,2156	0,3071	0,03729	1,2017	0,1281	0,0497
1,4464	0,6036	0,06747	1,2556	0,2825	0,03635	1,2417	0,1147	0,0489
1,4864	0,5700	0,06641	1,2956	0,2600	0,03546	1,2817	0,1028	0,0481
1,5264	0,5383	0,06539	1,3356	0,2394	0,03463	1,3217	0,09214	0,0474
1,5664	0,5085	0,06442	1,3756	0,2206	0,03385	1,3617	0,08264	0,0468
1,6064	0,4805	0,06348	1,4156	0,2033	0,03311	1,4017	0,07416	0,0462
1,6464	0,4541	0,06259	1,4556	0,1874	0,03242	1,4417	0,06657	0,0457
1,6864	0,4292	0,06172	1,4956	0,1728	0,03177	1,4817	0,05978	0,0451
1,7264	0,4058	0,06089	1,5356	0,1594	0,03115	1,5217	0,05371	0,0446
1,7664	0,3837	0,06010	1,5756	0,1472	0,03057	1,5617	0,04829	0,0442
1,8064	0,3629	0,05933	1,6156	0,1359	0,03003	1,6017	0,04343	0,0437
1,8464	0,3434	0,05859	1,6556	0,1255	0,02951	1,6417	0,03908	0,0433
1,8864	0,3249	0,05788	1,6956	0,1159	0,02902	1,6817	0,03516	0,0430
1,9264	0,3075	0,05720	1,7356	0,1071	0,02856	1,7217	0,03165	0,0426
1,9664	0,2910	0,05654	1,7756	0,09903	0,02812	1,7617	0,02849	0,0423
2,0000	0,2779	0,05601	1,8156	0,09159	0,02770	1,8017	0,02566	0,0419
			1,8556	0,08472	0,02731	1,8417	0,02311	0,0416
			1,8956	0,07838	0,02694	1,8817	0,02082	0,0414
			1,9356	0,07252	0,02658	1,9217	0,01876	0,0411
			1,9756	0,06712	0,02624	1,9617	0,01691	0,0408
			2,0000	0,06404	0,02605	2,0000	0,01531	0,0406

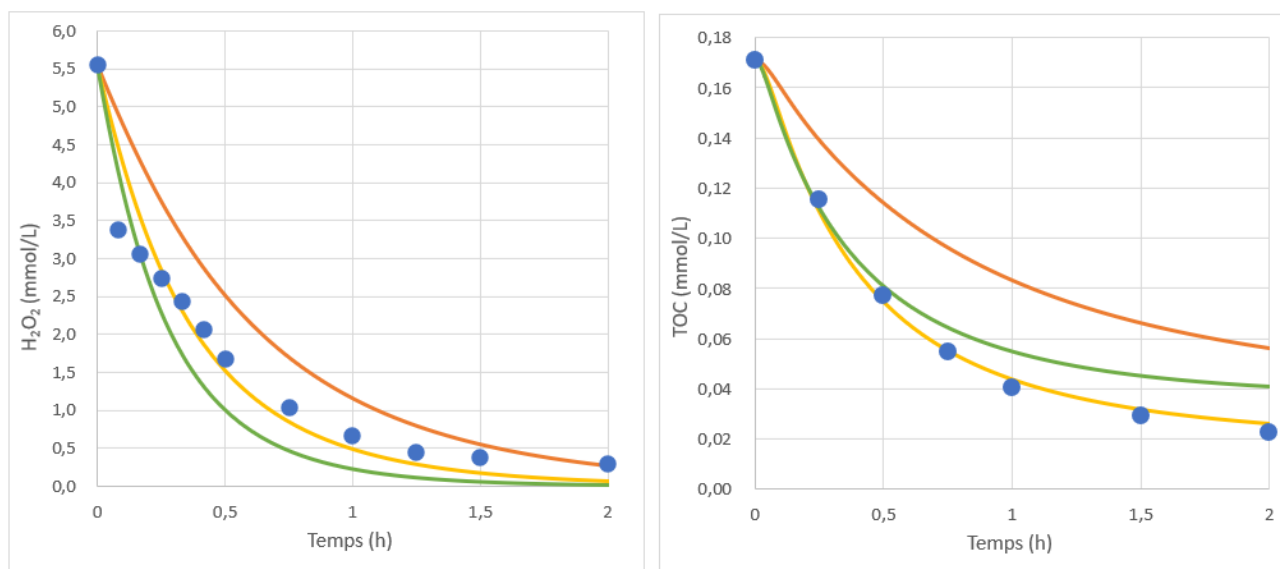


Figura 36. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per l'experiment 189_ON5

Taula 41. Dades simulades de l'experiment 189_ON14 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 189_ON14								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	5,5588	0,1721	0	5,5588	0,1721	0	5,5588	0,1721
1,7948E-05	5,5587	0,1721	8,019E-05	5,5586	0,1721	8,798E-05	5,5587	0,1721
3,5895E-05	5,5586	0,1721	1,604E-05	5,5585	0,1721	1,760E-05	5,5586	0,1721
5,3843E-05	5,5584	0,1721	2,406E-05	5,5583	0,1721	2,639E-05	5,5584	0,1721
1,1749E-04	5,5580	0,1721	6,137E-05	5,5576	0,1721	6,385E-05	5,5579	0,1721
1,8113E-04	5,5576	0,1721	9,869E-05	5,5568	0,1721	1,013E-04	5,5574	0,1721
2,4477E-04	5,5571	0,1721	1,360E-04	5,5560	0,1721	1,387E-04	5,5568	0,1721
3,0841E-04	5,5567	0,1721	1,733E-04	5,5552	0,1721	1,762E-04	5,5563	0,1721
4,4603E-04	5,5556	0,1721	2,545E-04	5,5535	0,1721	2,589E-04	5,5550	0,1721
5,8365E-04	5,5546	0,1721	3,357E-04	5,5517	0,1721	3,417E-04	5,5537	0,1721
7,2126E-04	5,5535	0,1721	4,169E-04	5,5499	0,1721	4,244E-04	5,5524	0,1721
8,5888E-04	5,5524	0,1721	4,981E-04	5,5480	0,1721	5,071E-04	5,5510	0,1721
0,001069	5,5507	0,1721	5,793E-04	5,5461	0,1721	5,899E-04	5,5496	0,1721
0,001280	5,5490	0,1721	7,485E-04	5,5420	0,1721	7,309E-04	5,5471	0,1721
0,001490	5,5472	0,1721	9,177E-04	5,5378	0,1721	8,719E-04	5,5446	0,1721
0,001701	5,5455	0,1721	0,001087	5,5335	0,1721	0,001013	5,5420	0,1721
0,001911	5,5437	0,1721	0,001256	5,5291	0,1721	0,001154	5,5394	0,1721
0,002242	5,5409	0,1721	0,001425	5,5246	0,1721	0,001295	5,5367	0,1721
0,002574	5,5380	0,1721	0,001710	5,5170	0,1721	0,001539	5,5320	0,1721
0,002905	5,5352	0,1721	0,001994	5,5093	0,1721	0,001782	5,5273	0,1721
0,003236	5,5324	0,1721	0,002278	5,5015	0,1720	0,002026	5,5226	0,1721
0,003567	5,5295	0,1721	0,002562	5,4937	0,1720	0,002270	5,5178	0,1721
0,003898	5,5267	0,1721	0,002847	5,4859	0,1720	0,002513	5,5130	0,1721
0,004537	5,5213	0,1721	0,003235	5,4753	0,1720	0,002852	5,5063	0,1721
0,005176	5,5159	0,1721	0,003624	5,4646	0,1719	0,003191	5,4997	0,1720
0,005814	5,5105	0,1721	0,004012	5,4540	0,1719	0,003529	5,4930	0,1720
0,006453	5,5051	0,1720	0,004401	5,4433	0,1718	0,003868	5,4864	0,1720

0,007092	5,4997	0,1720	0,004789	5,4327	0,1717	0,004207	5,4797	0,1720
0,007731	5,4943	0,1720	0,005502	5,4133	0,1716	0,004836	5,4674	0,1720
0,008928	5,4843	0,1720	0,006214	5,3940	0,1715	0,005464	5,4552	0,1719
0,01013	5,4743	0,1719	0,006926	5,3747	0,1713	0,006093	5,4429	0,1719
0,01132	5,4643	0,1719	0,007639	5,3555	0,1711	0,006722	5,4307	0,1718
0,01252	5,4544	0,1718	0,008351	5,3364	0,1709	0,007350	5,4185	0,1718
0,01372	5,4444	0,1718	0,009851	5,2964	0,1704	0,008745	5,3917	0,1716
0,01492	5,4345	0,1717	0,01135	5,2568	0,1699	0,0101	5,3650	0,1715
0,01701	5,4173	0,1716	0,01285	5,2174	0,1693	0,0115	5,3384	0,1713
0,01911	5,4001	0,1714	0,01435	5,1782	0,1687	0,0129	5,3121	0,1711
0,02120	5,3830	0,1713	0,01585	5,1394	0,1680	0,0143	5,2858	0,1708
0,02330	5,3660	0,1711	0,01891	5,0611	0,1665	0,0176	5,2242	0,1702
0,02539	5,3490	0,1710	0,02196	4,9838	0,1649	0,0209	5,1634	0,1696
0,02935	5,3171	0,1706	0,02501	4,9074	0,1631	0,0242	5,1033	0,1688
0,03330	5,2853	0,1702	0,02807	4,8320	0,1613	0,0275	5,0439	0,1680
0,03725	5,2537	0,1698	0,03112	4,7575	0,1595	0,0308	4,9852	0,1672
0,04121	5,2223	0,1693	0,03566	4,6484	0,1567	0,0366	4,8851	0,1656
0,04516	5,1910	0,1689	0,04020	4,5412	0,1538	0,0423	4,7870	0,1640
0,05420	5,1202	0,1677	0,04474	4,4361	0,1509	0,0480	4,6907	0,1622
0,06324	5,0500	0,1665	0,04929	4,3330	0,1481	0,0537	4,5962	0,1605
0,07228	4,9806	0,1652	0,05383	4,2319	0,1453	0,0594	4,5034	0,1587
0,08132	4,9118	0,1638	0,05837	4,1330	0,1426	0,0670	4,3821	0,1563
0,09036	4,8438	0,1625	0,06534	3,9852	0,1385	0,0747	4,2639	0,1539
0,1030	4,7495	0,1605	0,07231	3,8424	0,1346	0,0823	4,1487	0,1516
0,1157	4,6566	0,1586	0,07929	3,7046	0,1309	0,0899	4,0366	0,1493
0,1284	4,5650	0,1566	0,0863	3,5719	0,1273	0,0976	3,9275	0,1470
0,1410	4,4749	0,1547	0,09323	3,4440	0,1239	0,1081	3,7822	0,1440
0,1537	4,3861	0,1528	0,1002	3,3209	0,1206	0,1186	3,6426	0,1411
0,1706	4,2696	0,1504	0,1117	3,1280	0,1155	0,1291	3,5082	0,1384
0,1876	4,1559	0,1480	0,1232	2,9470	0,1107	0,1396	3,3792	0,1357
0,2045	4,0448	0,1457	0,1347	2,7771	0,1063	0,1501	3,2552	0,1331
0,2215	3,9365	0,1435	0,1462	2,6178	0,1021	0,1682	3,0523	0,1288
0,2384	3,8310	0,1414	0,1577	2,4683	0,09813	0,1864	2,8631	0,1249
0,2724	3,6273	0,1373	0,1692	2,3279	0,09442	0,2045	2,6867	0,1211
0,3064	3,4345	0,1334	0,1873	2,1239	0,08901	0,2227	2,5221	0,1175
0,3404	3,2521	0,1298	0,2055	1,9391	0,08409	0,2408	2,3685	0,1142
0,3745	3,0797	0,1263	0,2236	1,7717	0,07959	0,2650	2,1795	0,1100
0,4085	2,9168	0,1230	0,2417	1,6199	0,07549	0,2892	2,0069	0,1061
0,4469	2,7435	0,1194	0,2599	1,4822	0,07173	0,3134	1,8492	0,1024
0,4854	2,5810	0,1160	0,2999	1,2217	0,06451	0,3376	1,7050	0,09902
0,5238	2,4286	0,1128	0,3399	1,0105	0,05850	0,3618	1,5731	0,09584
0,5622	2,2857	0,1097	0,3799	0,8384	0,05346	0,4018	1,3790	0,09104
0,6007	2,1516	0,1068	0,4199	0,6976	0,04919	0,4418	1,2109	0,08673
0,6407	2,0210	0,1040	0,4599	0,5821	0,04556	0,4818	1,0649	0,08284
0,6807	1,8987	0,1012	0,4999	0,4870	0,04245	0,5218	0,9379	0,07934
0,7207	1,7843	0,09866	0,5399	0,4085	0,03977	0,5618	0,8273	0,07616
0,7607	1,6772	0,09620	0,5799	0,3434	0,03745	0,6018	0,7306	0,07328
0,8007	1,5769	0,09385	0,6199	0,2893	0,03543	0,6418	0,6461	0,07065
0,8407	1,4830	0,09162	0,6599	0,2442	0,03366	0,6818	0,5721	0,06826
0,8807	1,3951	0,08950	0,6999	0,2066	0,03211	0,7218	0,5071	0,06607
0,9207	1,3127	0,08748	0,7399	0,1750	0,03074	0,7618	0,4500	0,06407
0,9607	1,2355	0,08555	0,7799	0,1485	0,02952	0,8018	0,3997	0,06223
1,0007	1,1631	0,08372	0,8199	0,1262	0,02844	0,8418	0,3554	0,06054
1,0407	1,0952	0,08196	0,8599	0,1073	0,02747	0,8818	0,3163	0,05899
1,0807	1,0316	0,08029	0,8999	0,09137	0,02661	0,9218	0,2818	0,05755
1,1207	0,9719	0,07869	0,9399	0,07788	0,02583	0,9618	0,2512	0,05622
1,1607	0,9159	0,07717	0,9799	0,06646	0,02513	1,0018	0,2241	0,05500

1,2007	0,8633	0,07571	1,0199	0,05677	0,02451	1,0418	0,2001	0,05386
1,2407	0,8140	0,07431	1,0599	0,04854	0,02394	1,0818	0,1788	0,05281
1,2807	0,7676	0,07298	1,0999	0,04154	0,02342	1,1218	0,1599	0,05183
1,3207	0,7241	0,07171	1,1399	0,03559	0,02296	1,1618	0,1431	0,05091
1,3607	0,6832	0,07048	1,1799	0,03053	0,02253	1,2018	0,1280	0,05007
1,4007	0,6448	0,06931	1,2199	0,02620	0,02215	1,2418	0,1147	0,04928
1,4407	0,6087	0,06819	1,2599	0,02251	0,02180	1,2818	0,1027	0,04854
1,4807	0,5747	0,06712	1,2999	0,01934	0,02147	1,3218	0,09211	0,04785
1,5207	0,5428	0,06609	1,3399	0,01663	0,02118	1,3618	0,08262	0,04720
1,5607	0,5127	0,06510	1,3799	0,01430	0,02091	1,4018	0,07413	0,04660
1,6007	0,4844	0,06415	1,4199	0,01230	0,02067	1,4418	0,06655	0,04603
1,6407	0,4578	0,06324	1,4599	0,01059	0,02044	1,4818	0,05976	0,04551
1,6807	0,4327	0,06236	1,4999	0,009116	0,02023	1,5218	0,05369	0,04501
1,7207	0,4091	0,06152	1,5399	0,007854	0,02004	1,5618	0,04827	0,04455
1,7607	0,3868	0,06071	1,5799	0,006770	0,01987	1,6018	0,04342	0,04411
1,8007	0,3659	0,05994	1,6199	0,005838	0,01970	1,6418	0,03906	0,04370
1,8407	0,3461	0,05919	1,6599	0,005036	0,01956	1,6818	0,03515	0,04331
1,8807	0,3275	0,05847	1,6999	0,004346	0,01942	1,7218	0,03164	0,04295
1,9207	0,3099	0,05778	1,7399	0,003750	0,01929	1,7618	0,02848	0,04261
1,9607	0,2933	0,05711	1,7799	0,003236	0,01917	1,8018	0,02565	0,04229
2,0000	0,2779	0,05648	1,8199	0,002793	0,01907	1,8418	0,02310	0,04199
			1,8599	0,002410	0,01897	1,8818	0,02081	0,04170
			1,8999	0,002091	0,01888	1,9218	0,01875	0,04143
			1,9399	0,001817	0,01880	1,9618	0,01690	0,04118
			1,9799	0,001579	0,01872	2,0000	0,01531	0,04095
			2,0000	0,001469	0,01869			

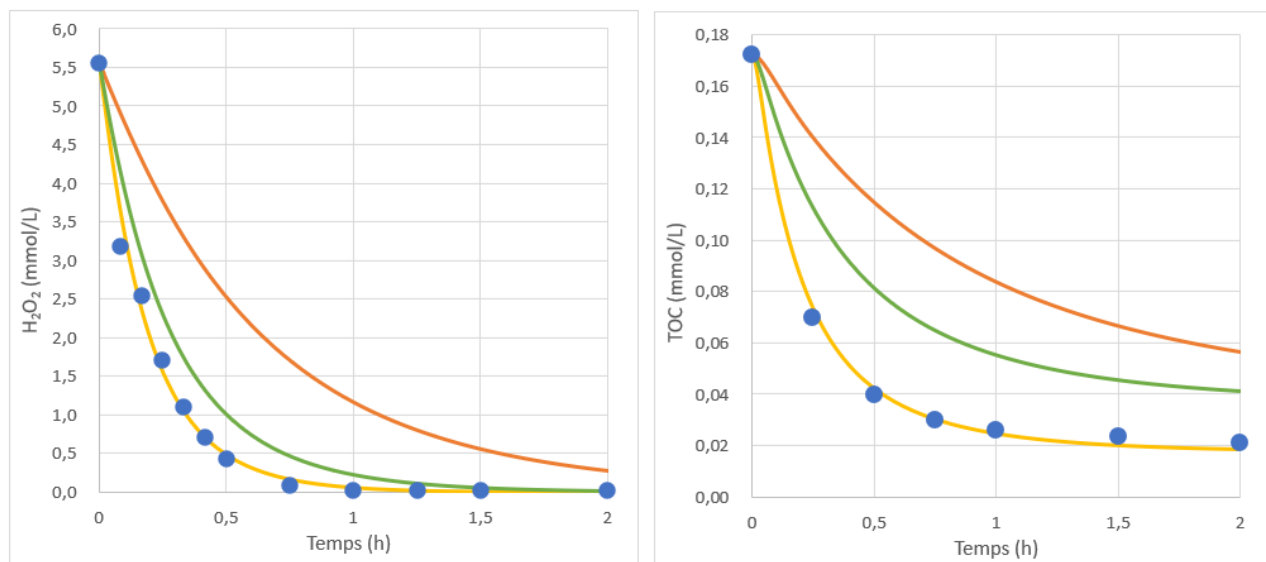


Figura 37. Dades experimentals i simulades de H_2O_2 i TOC vs. temps per l'experiment 189_ON14

Taula 42. Dades simulades de l'experiment 71,6_ON9 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 71,6_ON9								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	2,1059	0,1717	0	2,1059	0,1717	0	2,1059	0,1717
3,9185E-05	2,1058	0,1717	7,849E-06	2,1058	0,1717	1,469E-05	2,1058	0,1717
7,8370E-05	2,1057	0,1717	1,570E-05	2,1057	0,1717	2,939E-05	2,1057	0,1717
1,1756E-04	2,1056	0,1717	2,355E-05	2,1056	0,1717	4,408E-05	2,1057	0,1717
2,4496E-04	2,1053	0,1717	7,120E-05	2,1050	0,1717	1,099E-04	2,1053	0,1717
3,7236E-04	2,1049	0,1717	1,188E-04	2,1044	0,1717	0,0001757	2,1050	0,1717
4,9976E-04	2,1046	0,1717	1,665E-04	2,1038	0,1717	0,0002414	2,1046	0,1717
6,2716E-04	2,1043	0,1717	2,141E-04	2,1032	0,1717	0,0003072	2,1042	0,1717
8,5609E-04	2,1037	0,1717	3,156E-04	2,1018	0,1717	0,0004392	2,1035	0,1717
0,001085	2,1030	0,1717	4,171E-04	2,1004	0,1717	0,0005711	2,1027	0,1717
0,001314	2,1024	0,1717	5,185E-04	2,0989	0,1717	0,0007030	2,1020	0,1717
0,001543	2,1017	0,1717	6,200E-04	2,0973	0,1717	0,0008349	2,1012	0,1717
0,001907	2,1007	0,1717	7,214E-04	2,0957	0,1717	0,000967	2,1004	0,1717
0,002271	2,0996	0,1717	8,924E-04	2,0928	0,1717	0,001172	2,0991	0,1717
0,002635	2,0985	0,1717	0,001063	2,0898	0,1717	0,001377	2,0978	0,1717
0,002999	2,0975	0,1717	0,001234	2,0866	0,1717	0,001583	2,0965	0,1717
0,003362	2,0964	0,1717	0,001405	2,0834	0,1717	0,001788	2,0952	0,1717
0,003930	2,0947	0,1717	0,001576	2,0800	0,1717	0,001993	2,0938	0,1717
0,004498	2,0930	0,1717	0,001830	2,0749	0,1717	0,002347	2,0915	0,1717
0,005066	2,0913	0,1717	0,002084	2,0696	0,1717	0,002700	2,0891	0,1717
0,005634	2,0895	0,1717	0,002338	2,0643	0,1717	0,003054	2,0867	0,1717
0,006202	2,0878	0,1717	0,002592	2,0588	0,1717	0,003407	2,0844	0,1717
0,006770	2,0861	0,1717	0,002846	2,0534	0,1716	0,003761	2,0820	0,1717
0,008283	2,0815	0,1717	0,003245	2,0447	0,1716	0,004242	2,0787	0,1717
0,009531	2,0778	0,1716	0,003644	2,0361	0,1716	0,004723	2,0755	0,1717
0,0108	2,0740	0,1716	0,004043	2,0274	0,1716	0,005204	2,0723	0,1716
0,0120	2,0703	0,1716	0,004443	2,0188	0,1715	0,005685	2,0691	0,1716
0,0133	2,0665	0,1716	0,004842	2,0103	0,1715	0,006166	2,0658	0,1716
0,0145	2,0628	0,1716	0,005470	1,9969	0,1714	0,007174	2,0591	0,1716
0,0158	2,0590	0,1715	0,006098	1,9836	0,1713	0,008183	2,0524	0,1715
0,0180	2,0523	0,1715	0,006726	1,9705	0,1712	0,009191	2,0458	0,1715
0,0203	2,0456	0,1714	0,007354	1,9575	0,1711	0,01020	2,0391	0,1714
0,0225	2,0390	0,1713	0,007982	1,9446	0,1710	0,01121	2,0325	0,1714
0,0248	2,0323	0,1712	0,009411	1,9157	0,1708	0,01381	2,0156	0,1712
0,0270	2,0257	0,1711	0,01084	1,8873	0,1705	0,01641	1,9988	0,1710
0,0311	2,0137	0,1710	0,01227	1,8594	0,1702	0,01900	1,9822	0,1708
0,0352	2,0018	0,1708	0,01370	1,8319	0,1698	0,02160	1,9657	0,1706
0,0393	1,9900	0,1706	0,01512	1,8049	0,1694	0,02420	1,9494	0,1703
0,0434	1,9782	0,1703	0,01763	1,7585	0,1688	0,02936	1,9175	0,1697
0,0475	1,9665	0,1701	0,02013	1,7132	0,1680	0,03452	1,8861	0,1691
0,0576	1,9378	0,1694	0,02263	1,6689	0,1672	0,03967	1,8552	0,1684
0,0677	1,9095	0,1687	0,02513	1,6257	0,1663	0,04483	1,8249	0,1676
0,0779	1,8816	0,1679	0,02763	1,5834	0,1654	0,04999	1,7951	0,1669
0,0880	1,8541	0,1671	0,03133	1,5225	0,1640	0,05844	1,7472	0,1655
0,0981	1,8269	0,1662	0,03503	1,4635	0,1626	0,06689	1,7007	0,1641
0,1139	1,7852	0,1648	0,03873	1,4065	0,1610	0,07534	1,6553	0,1626
0,1298	1,7443	0,1634	0,04243	1,3513	0,1594	0,08379	1,6112	0,1611
0,1456	1,7042	0,1619	0,04613	1,2980	0,1578	0,09224	1,5682	0,1596
0,1614	1,6649	0,1605	0,05144	1,2248	0,1554	0,1041	1,5099	0,1575
0,1772	1,6265	0,1590	0,05675	1,1553	0,1529	0,1159	1,4538	0,1554
0,1990	1,5748	0,1570	0,06206	1,0896	0,1505	0,1277	1,3997	0,1533
0,2208	1,5245	0,1550	0,06737	1,0275	0,1480	0,1396	1,3477	0,1512
0,2426	1,4758	0,1530	0,07267	0,9689	0,1455	0,1514	1,2977	0,1491

0,2644	1,4285	0,1510	0,07798	0,9137	0,1431	0,1692	1,2259	0,1461
0,2862	1,3827	0,1492	0,08657	0,8312	0,1392	0,1870	1,1583	0,1432
0,3199	1,3148	0,1463	0,09516	0,7566	0,1355	0,2048	1,0945	0,1404
0,3535	1,2503	0,1436	0,1037	0,6894	0,1319	0,2226	1,0345	0,1377
0,3872	1,1889	0,1410	0,1123	0,6287	0,1285	0,2404	0,9779	0,1351
0,4208	1,1307	0,1385	0,1209	0,5739	0,1253	0,2723	0,8850	0,1308
0,4545	1,0754	0,1361	0,1341	0,5000	0,1206	0,3041	0,8015	0,1267
0,4945	1,0133	0,1333	0,1474	0,4368	0,1163	0,3359	0,7264	0,1229
0,5345	0,9550	0,1307	0,1606	0,3826	0,1123	0,3677	0,6589	0,1195
0,5745	0,9003	0,1282	0,1738	0,3360	0,1086	0,3995	0,5980	0,1162
0,6145	0,8489	0,1258	0,1870	0,2958	0,1052	0,4395	0,5300	0,1124
0,6545	0,8006	0,1235	0,2123	0,2335	0,09945	0,4795	0,4702	0,1090
0,6945	0,7552	0,1214	0,2376	0,1859	0,09447	0,5195	0,4176	0,1058
0,7345	0,7125	0,1193	0,2629	0,1491	0,09014	0,5595	0,3713	0,1029
0,7745	0,6724	0,1173	0,2882	0,1204	0,08638	0,5995	0,3304	0,1002
0,8145	0,6347	0,1153	0,3135	0,0977	0,08309	0,6395	0,2943	0,09777
0,8545	0,5992	0,1135	0,3535	0,0712	0,07868	0,6795	0,2623	0,09550
0,8945	0,5659	0,1117	0,3935	0,0526	0,07505	0,7195	0,2340	0,09339
0,9345	0,5345	0,1101	0,4335	0,0392	0,07202	0,7595	0,2089	0,09143
0,9745	0,5050	0,1084	0,4735	0,0295	0,06947	0,7995	0,1866	0,08962
1,0145	0,4772	0,1069	0,5135	0,0223	0,06733	0,8395	0,1668	0,08794
1,0545	0,4510	0,1054	0,5535	0,0170	0,06551	0,8795	0,1491	0,08638
1,0945	0,4263	0,1039	0,5935	0,0129	0,06397	0,9195	0,1335	0,08493
1,1345	0,4031	0,1026	0,6335	0,0099	0,06265	0,9595	0,1195	0,08357
1,1745	0,3813	0,1012	0,6735	0,0076	0,06152	0,9995	0,1071	0,08231
1,2145	0,3606	0,1000	0,7135	0,0059	0,06056	1,0395	0,09597	0,08113
1,2545	0,3412	0,09872	0,7535	0,0046	0,05972	1,0795	0,08607	0,08003
1,2945	0,3229	0,09754	0,7935	0,0036	0,05901	1,1195	0,07723	0,07900
1,3345	0,3056	0,09640	0,8335	0,0028	0,05839	1,1595	0,06933	0,07804
1,3745	0,2893	0,09530	0,8735	0,0022	0,05786	1,1995	0,06226	0,07714
1,4145	0,2739	0,09425	0,9135	0,0017	0,05741	1,2395	0,05593	0,07629
1,4545	0,2594	0,09323	0,9535	0,0014	0,05701	1,2795	0,05027	0,07550
1,4945	0,2456	0,09225	0,9935	0,0011	0,05667	1,3195	0,04521	0,07476
1,5345	0,2327	0,09130	1,0335	0,0008	0,05637	1,3595	0,04067	0,07407
1,5745	0,2205	0,09039	1,0735	0,0007	0,05612	1,3995	0,03660	0,07341
1,6145	0,2089	0,08951	1,1135	0,0005	0,05590	1,4395	0,03294	0,07280
1,6545	0,1980	0,08866	1,1535	0,0004	0,05571	1,4795	0,02966	0,07222
1,6945	0,1877	0,08784	1,1935	0,0003	0,05555	1,5195	0,02671	0,07168
1,7345	0,1779	0,08705	1,2335	0,0003	0,05541	1,5595	0,02407	0,07116
1,7745	0,1687	0,08629	1,2735	0,0002	0,05529	1,5995	0,02169	0,07068
1,8145	0,1600	0,08555	1,3135	0,0002	0,05519	1,6395	0,01955	0,07023
1,8545	0,1517	0,08484	1,3535	0,0001	0,05511	1,6795	0,01762	0,06980
1,8945	0,1439	0,08415	1,3935	0,0001	0,05503	1,7195	0,01588	0,06940
1,9345	0,1365	0,08348	1,4335	0,0001	0,05498	1,7595	0,01432	0,06902
1,9745	0,1295	0,08284	1,4735	0,0001	0,05493	1,7995	0,01292	0,06866
2,0000	0,1253	0,08244	1,5135	0,0001	0,05488	1,8395	0,01165	0,06833
			1,5535	0,0000	0,05485	1,8795	0,01052	0,06801
			1,5935	0,0000	0,05481	1,9195	0,00949	0,06771
			1,6335	0,0000	0,05479	1,9595	0,00857	0,06743
			1,6735	0,0000	0,05477	1,9995	0,00773	0,06716
			1,7135	0,0000	0,05475	2,0000	0,00772	0,06716
			1,7535	0,0000	0,05473			
			1,7935	0,0000	0,05472			
			1,8335	0,0000	0,05471			
			1,8735	0,0000	0,05470			
			1,9135	0,0000	0,05470			
			1,9535	0,0000	0,05469			
			1,9935	0,0000	0,05469			

2,0000 0,0000 0,05469

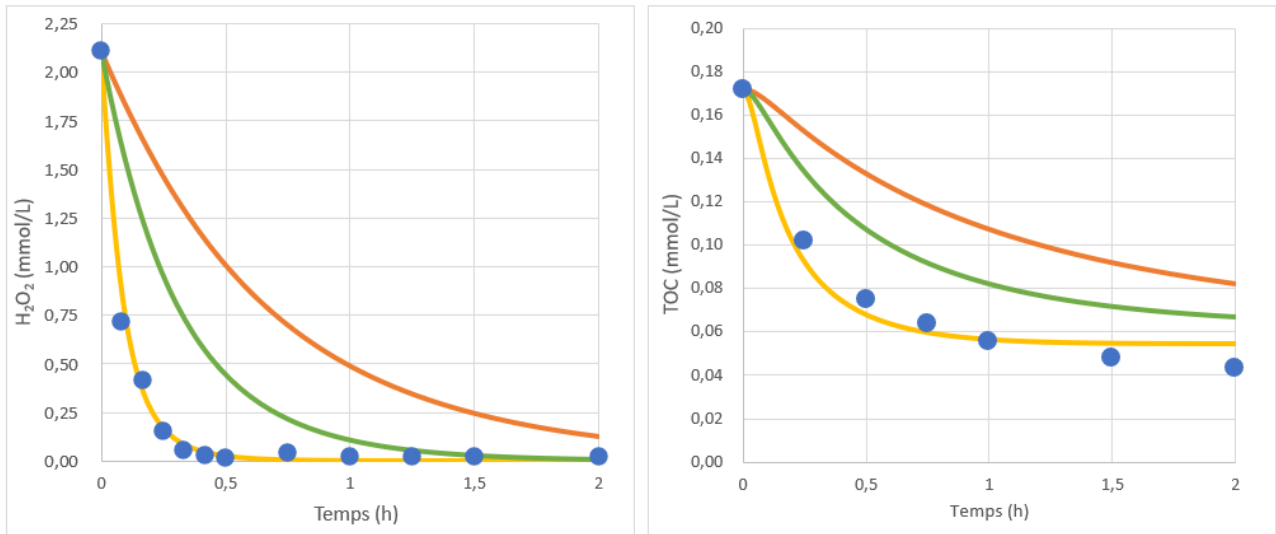


Figura 38. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per l'experiment 71,6_ON9

Taula 43. Dades simulades de l'experiment 756_ON14 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 756_ON14								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	22,2353	0,1787	0	22,2353	0,1787	0	22,2353	0,1787
4,90E-06	22,2352	0,1787	4,64E-06	22,2351	0,1787	3,51E-06	22,2351	0,1787
9,80E-06	22,2350	0,1787	9,29E-06	22,2349	0,1787	7,03E-06	22,2349	0,1787
1,47E-05	22,2349	0,1787	1,39E-05	22,2347	0,1787	1,05E-05	22,2347	0,1787
3,60E-05	22,2343	0,1787	2,97E-05	22,2340	0,1787	2,43E-05	22,2339	0,1787
5,73E-05	22,2337	0,1787	4,54E-05	22,2333	0,1787	3,81E-05	22,2331	0,1787
7,86E-05	22,2331	0,1787	6,12E-05	22,2326	0,1787	5,19E-05	22,2323	0,1787
9,99E-05	22,2325	0,1787	7,69E-05	22,2318	0,1787	6,57E-05	22,2315	0,1787
1,60E-04	22,2307	0,1787	1,13E-04	22,2301	0,1787	1,07E-04	22,2288	0,1787
2,20E-04	22,2287	0,1787	1,49E-04	22,2283	0,1787	1,49E-04	22,2261	0,1787
2,80E-04	22,2267	0,1787	1,86E-04	22,2264	0,1787	1,91E-04	22,2232	0,1787
3,40E-04	22,2246	0,1787	2,22E-04	22,2245	0,1787	2,32E-04	22,2202	0,1787
4,36E-04	22,2212	0,1787	2,93E-04	22,2207	0,1787	2,97E-04	22,2154	0,1787
5,31E-04	22,2178	0,1787	3,63E-04	22,2168	0,1787	3,62E-04	22,2105	0,1787
6,27E-04	22,2142	0,1787	4,34E-04	22,2128	0,1787	4,27E-04	22,2054	0,1787
7,22E-04	22,2107	0,1787	5,05E-04	22,2088	0,1787	4,91E-04	22,2002	0,1787
0,0008	22,2071	0,1787	6,19E-04	22,2021	0,1787	5,56E-04	22,1949	0,1787
0,0010	22,2021	0,1787	7,33E-04	22,1955	0,1787	6,62E-04	22,1863	0,1787
0,0011	22,1971	0,1787	8,48E-04	22,1888	0,1787	7,68E-04	22,1775	0,1787
0,0012	22,1921	0,1787	9,62E-04	22,1821	0,1787	8,74E-04	22,1687	0,1787
0,0014	22,1871	0,1787	0,0011	22,1755	0,1787	9,80E-04	22,1599	0,1787
0,0015	22,1822	0,1787	0,0012	22,1673	0,1787	0,0011	22,1510	0,1787
0,0016	22,1774	0,1787	0,0014	22,1592	0,1787	0,0012	22,1379	0,1787
0,0020	22,1660	0,1787	0,0015	22,1511	0,1787	0,0014	22,1248	0,1787
0,0023	22,1549	0,1787	0,0016	22,1430	0,1787	0,0016	22,1117	0,1787

0,0026	22,1440	0,1787	0,0018	22,1350	0,1787	0,0017	22,0987	0,1787
0,0029	22,1333	0,1787	0,0021	22,1176	0,1787	0,0019	22,0856	0,1787
0,0032	22,1228	0,1787	0,0024	22,1003	0,1787	0,0022	22,0600	0,1786
0,0036	22,1124	0,1787	0,0027	22,0832	0,1787	0,0025	22,0344	0,1786
0,0041	22,0940	0,1786	0,0030	22,0661	0,1786	0,0028	22,0089	0,1786
0,0047	22,0760	0,1786	0,0033	22,0490	0,1786	0,0031	21,9834	0,1786
0,0053	22,0583	0,1786	0,0038	22,0209	0,1786	0,0034	21,9580	0,1785
0,0059	22,0408	0,1786	0,0044	21,9928	0,1786	0,0039	21,9171	0,1785
0,0065	22,0235	0,1786	0,0049	21,9649	0,1785	0,0044	21,8764	0,1784
0,0070	22,0064	0,1785	0,0054	21,9369	0,1785	0,0049	21,8357	0,1783
0,0081	21,9748	0,1785	0,0059	21,9091	0,1784	0,0054	21,7952	0,1782
0,0092	21,9435	0,1784	0,0068	21,8611	0,1784	0,0059	21,7548	0,1781
0,0103	21,9124	0,1783	0,0077	21,8133	0,1783	0,0070	21,6641	0,1779
0,0113	21,8815	0,1782	0,0085	21,7656	0,1782	0,0081	21,5738	0,1776
0,0124	21,8506	0,1782	0,0094	21,7181	0,1780	0,0093	21,4840	0,1773
0,0142	21,7986	0,1780	0,0103	21,6706	0,1779	0,0104	21,3947	0,1770
0,0160	21,7468	0,1778	0,0126	21,5456	0,1775	0,0115	21,3057	0,1766
0,0179	21,6952	0,1776	0,0150	21,4214	0,1770	0,0144	21,0755	0,1755
0,0197	21,6437	0,1774	0,0173	21,2980	0,1765	0,0173	20,8476	0,1743
0,0215	21,5923	0,1771	0,0197	21,1753	0,1759	0,0202	20,6215	0,1729
0,0243	21,5136	0,1768	0,0220	21,0533	0,1752	0,0232	20,3972	0,1714
0,0271	21,4351	0,1763	0,0286	20,7103	0,1730	0,0261	20,1744	0,1699
0,0299	21,3568	0,1759	0,0353	20,3726	0,1704	0,0306	19,8305	0,1673
0,0327	21,2786	0,1754	0,0419	20,0400	0,1675	0,0352	19,4902	0,1648
0,0355	21,2007	0,1749	0,0486	19,7121	0,1644	0,0397	19,1537	0,1622
0,0436	20,9751	0,1733	0,0552	19,3887	0,1612	0,0442	18,8212	0,1597
0,0517	20,7502	0,1716	0,0646	18,9425	0,1567	0,0488	18,4930	0,1573
0,0598	20,5260	0,1698	0,0739	18,5046	0,1522	0,0544	18,0963	0,1544
0,0679	20,3023	0,1679	0,0832	18,0750	0,1478	0,0599	17,7068	0,1516
0,0761	20,0790	0,1661	0,0926	17,6536	0,1436	0,0655	17,3247	0,1489
0,0887	19,7326	0,1632	0,1019	17,2405	0,1396	0,0711	16,9500	0,1464
0,1013	19,3880	0,1604	0,1133	16,7473	0,1351	0,0767	16,5829	0,1439
0,1139	19,0457	0,1577	0,1247	16,2666	0,1308	0,0822	16,2233	0,1415
0,1266	18,7062	0,1552	0,1360	15,7983	0,1269	0,0916	15,6380	0,1376
0,1392	18,3702	0,1527	0,1474	15,3424	0,1232	0,1009	15,0734	0,1338
0,1518	18,0380	0,1504	0,1588	14,8988	0,1197	0,1102	14,5289	0,1302
0,1664	17,6599	0,1478	0,1702	14,4673	0,1164	0,1196	14,0041	0,1268
0,1809	17,2875	0,1453	0,1875	13,8351	0,1117	0,1289	13,4983	0,1234
0,1955	16,9211	0,1429	0,2048	13,2296	0,1073	0,1382	13,0109	0,1202
0,2101	16,5607	0,1405	0,2220	12,6499	0,1031	0,1545	12,2057	0,1148
0,2246	16,2063	0,1382	0,2393	12,0950	0,0991	0,1707	11,4514	0,1098
0,2392	15,8581	0,1360	0,2566	11,5642	0,0954	0,1869	10,7451	0,1050
0,2537	15,5159	0,1338	0,2814	10,8421	0,0903	0,2032	10,0839	0,1006
0,2817	14,8768	0,1296	0,3062	10,1649	0,0856	0,2194	9,4651	0,0964
0,3096	14,2597	0,1256	0,3310	9,5302	0,0812	0,2459	8,5367	0,0900
0,3375	13,6642	0,1218	0,3558	8,9354	0,0771	0,2725	7,7039	0,0842
0,3654	13,0900	0,1180	0,3806	8,3782	0,0733	0,2990	6,9572	0,0790
0,3933	12,5367	0,1144	0,4206	7,5535	0,0678	0,3255	6,2877	0,0742
0,4212	12,0039	0,1109	0,4606	6,8120	0,0628	0,3655	5,4073	0,0679
0,4609	11,2806	0,1062	0,5006	6,1456	0,0583	0,4055	4,6601	0,0623
0,5006	10,5965	0,1017	0,5406	5,5467	0,0543	0,4455	4,0244	0,0575
0,5403	9,9501	0,0974	0,5806	5,0085	0,0507	0,4855	3,4825	0,0533
0,5800	9,3399	0,0933	0,6206	4,5249	0,0475	0,5255	3,0196	0,0496
0,6197	8,7646	0,0894	0,6606	4,0902	0,0446	0,5655	2,6233	0,0464
0,6597	8,2185	0,0858	0,7006	3,6995	0,0419	0,6055	2,2834	0,0435
0,6997	7,7048	0,0823	0,7406	3,3480	0,0395	0,6455	1,9915	0,0409
0,7397	7,2219	0,0790	0,7806	3,0318	0,0374	0,6855	1,7402	0,0386
0,7797	6,7682	0,0758	0,8206	2,7471	0,0354	0,7255	1,5236	0,0366

0,8197	6,3425	0,0729	0,8606	2,4907	0,0336	0,7655	1,3363	0,0348
0,8597	5,9430	0,0701	0,9006	2,2597	0,0320	0,8055	1,1735	0,0332
0,8997	5,5686	0,0674	0,9406	2,0513	0,0305	0,8455	1,0319	0,0317
0,9397	5,2176	0,0649	0,9806	1,8633	0,0292	0,8855	0,9086	0,0303
0,9797	4,8890	0,0626	1,0206	1,6936	0,0279	0,9255	0,8011	0,0291
1,0197	4,5812	0,0603	1,0606	1,5402	0,0268	0,9655	0,7074	0,0280
1,0597	4,2932	0,0582	1,1006	1,4016	0,0257	1,0055	0,6254	0,0270
1,0997	4,0236	0,0562	1,1406	1,2760	0,0248	1,0455	0,5536	0,0261
1,1397	3,7714	0,0543	1,1806	1,1623	0,0239	1,0855	0,4906	0,0253
1,1797	3,5356	0,0525	1,2206	1,0593	0,0230	1,1255	0,4354	0,0245
1,2197	3,3150	0,0508	1,2606	0,9659	0,0223	1,1655	0,3868	0,0238
1,2597	3,1086	0,0492	1,3006	0,8812	0,0215	1,2055	0,3440	0,0232
1,2997	2,9156	0,0477	1,3406	0,8044	0,0209	1,2455	0,3062	0,0226
1,3397	2,7351	0,0462	1,3806	0,7347	0,0203	1,2855	0,2728	0,0221
1,3797	2,5663	0,0449	1,4206	0,6713	0,0197	1,3255	0,2432	0,0216
1,4197	2,4084	0,0436	1,4606	0,6137	0,0192	1,3655	0,2169	0,0211
1,4597	2,2608	0,0424	1,5006	0,5613	0,0187	1,4055	0,1937	0,0207
1,4997	2,1227	0,0412	1,5406	0,5136	0,0182	1,4455	0,1730	0,0203
1,5397	1,9936	0,0401	1,5806	0,4701	0,0178	1,4855	0,1547	0,0199
1,5797	1,8728	0,0390	1,6206	0,4305	0,0174	1,5255	0,1384	0,0195
1,6197	1,7598	0,0380	1,6606	0,3943	0,0170	1,5655	0,1238	0,0192
1,6597	1,6540	0,0371	1,7006	0,3613	0,0166	1,6055	0,1109	0,0189
1,6997	1,5551	0,0362	1,7406	0,3312	0,0163	1,6455	0,0994	0,0186
1,7397	1,4624	0,0353	1,7806	0,3037	0,0160	1,6855	0,0891	0,0184
1,7797	1,3756	0,0345	1,8206	0,2786	0,0157	1,7255	0,0800	0,0181
1,8197	1,2944	0,0337	1,8606	0,2556	0,0154	1,7655	0,0718	0,0179
1,8597	1,2182	0,0330	1,9006	0,2346	0,0151	1,8055	0,0645	0,0177
1,8997	1,1468	0,0323	1,9406	0,2154	0,0149	1,8455	0,0579	0,0175
1,9397	1,0798	0,0316	1,9806	0,1979	0,0146	1,8855	0,0520	0,0173
1,9797	1,0170	0,0310	2,0000	0,1899	0,0145	1,9255	0,0467	0,0171
2,0000	0,9867	0,0306				1,9655	0,0420	0,0169
						2,0000	0,0384	0,0168

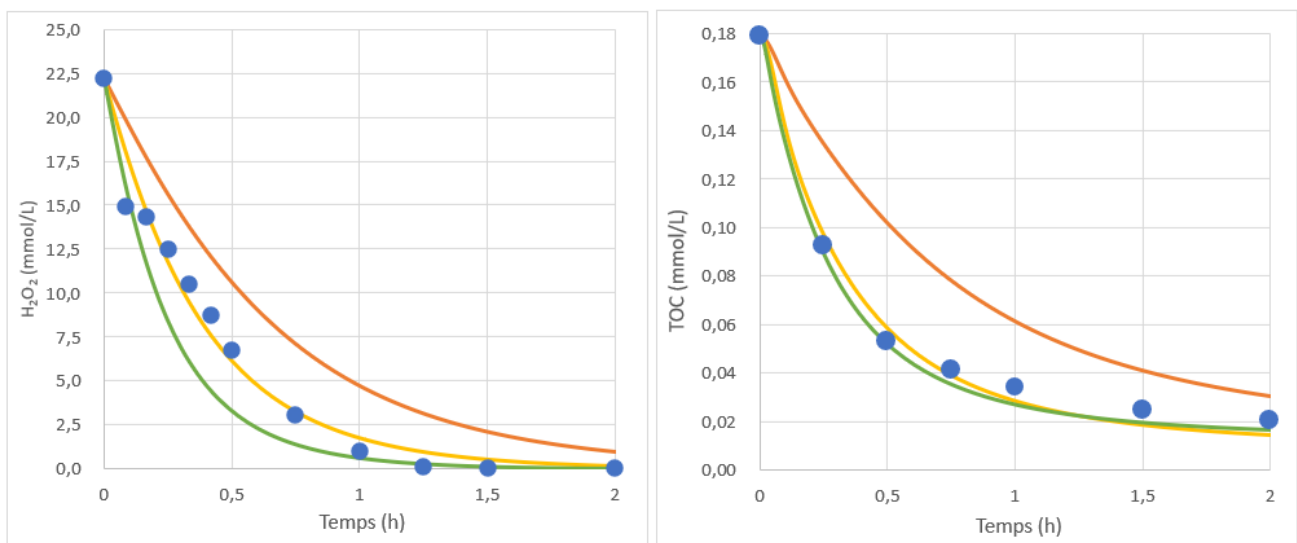


Figura 39. Dades experimentals i simulades de H_2O_2 i TOC vs. temps per l'experiment 756_ON14

Taula 44. Dades simulades de l'experiment 756_ON5 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 756_ON5								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	22,2353	0,1772	0	22,2353	0,1772	0	22,2353	0,1772
4,902E-06	22,2352	0,1772	5,331E-06	22,2352	0,1772	3,517E-06	22,2351	0,1772
9,803E-06	22,2350	0,1772	1,066E-05	22,2350	0,1772	7,033E-06	22,2349	0,1772
1,470E-05	22,2349	0,1772	1,599E-05	22,2349	0,1772	1,055E-05	22,2347	0,1772
3,601E-05	22,2343	0,1772	3,896E-05	22,2344	0,1772	2,433E-05	22,2339	0,1772
5,731E-05	22,2337	0,1772	6,192E-05	22,2338	0,1772	3,811E-05	22,2331	0,1772
7,862E-05	22,2331	0,1772	8,489E-05	22,2332	0,1772	5,190E-05	22,2323	0,1772
9,992E-05	22,2325	0,1772	1,079E-04	22,2326	0,1772	6,568E-05	22,2315	0,1772
1,602E-04	22,2306	0,1772	1,715E-04	22,2308	0,1772	1,073E-04	22,2288	0,1772
2,205E-04	22,2287	0,1772	2,351E-04	22,2290	0,1772	1,489E-04	22,2261	0,1772
2,808E-04	22,2267	0,1772	2,988E-04	22,2271	0,1772	1,906E-04	22,2232	0,1772
3,411E-04	22,2246	0,1772	3,624E-04	22,2251	0,1772	2,322E-04	22,2202	0,1772
4,430E-04	22,2210	0,1772	4,684E-04	22,2218	0,1772	2,969E-04	22,2154	0,1772
5,449E-04	22,2173	0,1772	5,745E-04	22,2183	0,1772	3,617E-04	22,2105	0,1772
6,468E-04	22,2135	0,1772	6,805E-04	22,2148	0,1772	4,264E-04	22,2054	0,1772
7,487E-04	22,2097	0,1772	7,865E-04	22,2113	0,1772	4,911E-04	22,2002	0,1772
8,506E-04	22,2059	0,1772	8,925E-04	22,2077	0,1772	5,559E-04	22,1950	0,1772
9,885E-04	22,2008	0,1772	0,001037	22,2029	0,1772	6,618E-04	22,1863	0,1772
0,00113	22,1956	0,1772	0,001181	22,1982	0,1772	7,677E-04	22,1775	0,1772
0,00126	22,1906	0,1772	0,001325	22,1934	0,1772	8,736E-04	22,1687	0,1772
0,00140	22,1855	0,1772	0,001470	22,1887	0,1772	9,795E-04	22,1599	0,1772
0,00154	22,1806	0,1772	0,001614	22,1840	0,1772	0,001085	22,1511	0,1772
0,00168	22,1756	0,1772	0,001758	22,1794	0,1772	0,001242	22,1380	0,1772
0,00202	22,1637	0,1772	0,002113	22,1682	0,1772	0,001399	22,1249	0,1772
0,00229	22,1543	0,1772	0,002401	22,1593	0,1772	0,001556	22,1118	0,1772
0,00257	22,1449	0,1772	0,002688	22,1506	0,1772	0,001713	22,0987	0,1772
0,00284	22,1357	0,1772	0,002976	22,1419	0,1772	0,001870	22,0857	0,1772
0,00312	22,1267	0,1772	0,003264	22,1334	0,1772	0,002179	22,0600	0,1771
0,00339	22,1177	0,1772	0,003552	22,1250	0,1772	0,002488	22,0345	0,1771
0,00367	22,1089	0,1772	0,003839	22,1167	0,1772	0,002797	22,0089	0,1771
0,00417	22,0929	0,1771	0,004351	22,1021	0,1771	0,003105	21,9834	0,1771
0,00468	22,0771	0,1771	0,004862	22,0878	0,1771	0,003414	21,9580	0,1770
0,00519	22,0616	0,1771	0,005373	22,0736	0,1771	0,003911	21,9172	0,1770
0,00569	22,0462	0,1771	0,005885	22,0596	0,1771	0,004408	21,8764	0,1769
0,00620	22,0310	0,1771	0,006396	22,0458	0,1771	0,004905	21,8358	0,1768
0,00727	21,9991	0,1770	0,007540	22,0151	0,1770	0,005402	21,7953	0,1767
0,00835	21,9675	0,1770	0,008685	21,9849	0,1770	0,005899	21,7548	0,1766
0,00943	21,9362	0,1769	0,009829	21,9550	0,1769	0,007018	21,6642	0,1764
0,01051	21,9051	0,1768	0,01097	21,9252	0,1768	0,008136	21,5740	0,1761
0,01158	21,8741	0,1767	0,01212	21,8956	0,1767	0,009255	21,4843	0,1758
0,01325	21,8262	0,1766	0,01387	21,8506	0,1766	0,01037	21,3949	0,1755
0,01493	21,7785	0,1764	0,01561	21,8058	0,1765	0,01149	21,3059	0,1751
0,01660	21,7310	0,1763	0,01736	21,7612	0,1763	0,01440	21,0760	0,1741
0,01827	21,6836	0,1761	0,01911	21,7166	0,1761	0,01731	20,8482	0,1728
0,01994	21,6363	0,1759	0,02086	21,6722	0,1759	0,02023	20,6223	0,1714
0,02327	21,5425	0,1754	0,02362	21,6021	0,1756	0,02314	20,3981	0,1700
0,02660	21,4489	0,1749	0,02638	21,5322	0,1752	0,02605	20,1756	0,1684
0,02992	21,3557	0,1744	0,02914	21,4625	0,1748	0,03059	19,8319	0,1659
0,03325	21,2626	0,1738	0,03191	21,3929	0,1744	0,03512	19,4920	0,1634
0,03658	21,1698	0,1732	0,03795	21,2412	0,1734	0,03966	19,1558	0,1609
0,04456	20,9479	0,1717	0,04399	21,0899	0,1723	0,04420	18,8236	0,1584
0,05254	20,7267	0,1700	0,05003	20,9391	0,1712	0,04874	18,4957	0,1560

0,06052	20,5061	0,1682	0,05607	20,7885	0,1700	0,05430	18,0995	0,1531
0,06850	20,2859	0,1664	0,06212	20,6382	0,1688	0,05987	17,7104	0,1503
0,07648	20,0663	0,1646	0,07392	20,3451	0,1663	0,06544	17,3286	0,1477
0,08917	19,7183	0,1617	0,08573	20,0529	0,1637	0,07101	16,9543	0,1452
0,1018	19,3721	0,1589	0,09753	19,7616	0,1612	0,07657	16,5876	0,1427
0,1145	19,0283	0,1563	0,1093	19,4717	0,1588	0,08214	16,2284	0,1403
0,1272	18,6874	0,1537	0,1211	19,1834	0,1565	0,09145	15,6443	0,1364
0,1399	18,3500	0,1513	0,1329	18,8971	0,1542	0,1008	15,0808	0,1327
0,1526	18,0165	0,1490	0,1487	18,5177	0,1514	0,1101	14,5374	0,1292
0,1671	17,6406	0,1464	0,1645	18,1431	0,1486	0,1194	14,0135	0,1257
0,1816	17,2704	0,1440	0,1803	17,7738	0,1460	0,1287	13,5086	0,1224
0,1960	16,9060	0,1416	0,1961	17,4099	0,1435	0,1380	13,0220	0,1192
0,2105	16,5476	0,1393	0,2119	17,0518	0,1410	0,1542	12,2185	0,1139
0,2250	16,1952	0,1370	0,2277	16,6994	0,1386	0,1704	11,4656	0,1089
0,2395	15,8489	0,1348	0,2499	16,2153	0,1354	0,1866	10,7605	0,1042
0,2540	15,5086	0,1326	0,2720	15,7427	0,1322	0,2027	10,1003	0,09982
0,2771	14,9780	0,1292	0,2941	15,2814	0,1291	0,2189	9,4823	0,09565
0,3002	14,4625	0,1259	0,3163	14,8314	0,1261	0,2454	8,5539	0,08935
0,3234	13,9619	0,1226	0,3384	14,3927	0,1232	0,2720	7,7212	0,08363
0,3465	13,4761	0,1195	0,3605	13,9650	0,1203	0,2985	6,9745	0,07844
0,3696	13,0047	0,1165	0,4005	13,2197	0,1153	0,3250	6,3048	0,07372
0,3927	12,5477	0,1135	0,4405	12,5092	0,1106	0,3515	5,7039	0,06943
0,4327	11,7899	0,1086	0,4805	11,8324	0,1060	0,3915	4,9123	0,06368
0,4727	11,0727	0,1039	0,5205	11,1883	0,1017	0,4315	4,2390	0,05867
0,5127	10,3949	0,09947	0,5605	10,5761	0,09758	0,4715	3,6654	0,05428
0,5527	9,7549	0,09526	0,6005	9,9944	0,09366	0,5115	3,1758	0,05044
0,5927	9,1513	0,09126	0,6405	9,4424	0,08993	0,5515	2,7571	0,04706
0,6327	8,5826	0,08747	0,6805	8,9188	0,08639	0,5915	2,3983	0,04408
0,6727	8,0472	0,08388	0,7205	8,4226	0,08302	0,6315	2,0902	0,04143
0,7127	7,5437	0,08048	0,7605	7,9527	0,07982	0,6715	1,8253	0,03908
0,7527	7,0705	0,07726	0,8005	7,5080	0,07678	0,7115	1,5970	0,03699
0,7927	6,6262	0,07421	0,8405	7,0872	0,07389	0,7515	1,3991	0,03511
0,8327	6,2091	0,07133	0,8805	6,6895	0,07115	0,7915	1,2275	0,03342
0,8727	5,8180	0,06861	0,9205	6,3137	0,06854	0,8315	1,0786	0,03190
0,9127	5,4514	0,06603	0,9605	5,9588	0,06607	0,8715	0,9492	0,03053
0,9527	5,1079	0,06359	1,0005	5,6237	0,06372	0,9115	0,8366	0,02930
0,9927	4,7862	0,06129	1,0405	5,3074	0,06150	0,9515	0,7383	0,02817
1,0327	4,4850	0,05911	1,0805	5,0091	0,05938	0,9915	0,6526	0,02715
1,0727	4,2031	0,05705	1,1205	4,7277	0,05737	1,0315	0,5776	0,02622
1,1127	3,9393	0,05510	1,1605	4,4624	0,05547	1,0715	0,5119	0,02537
1,1527	3,6926	0,05326	1,2005	4,2122	0,05366	1,1115	0,4542	0,02459
1,1927	3,4618	0,05151	1,2405	3,9765	0,05193	1,1515	0,4034	0,02388
1,2327	3,2460	0,04986	1,2805	3,7543	0,05030	1,1915	0,3586	0,02322
1,2727	3,0442	0,04829	1,3205	3,5448	0,04875	1,2315	0,3191	0,02262
1,3127	2,8554	0,04681	1,3605	3,3475	0,04727	1,2715	0,2842	0,02206
1,3527	2,6788	0,04540	1,4005	3,1615	0,04586	1,3115	0,2533	0,02155
1,3927	2,5137	0,04407	1,4405	2,9864	0,04453	1,3515	0,2260	0,02107
1,4327	2,3593	0,04281	1,4805	2,8214	0,04326	1,3915	0,2017	0,02063
1,4727	2,2148	0,04161	1,5205	2,6659	0,04205	1,4315	0,1802	0,02022
1,5127	2,0798	0,04047	1,5605	2,5195	0,04090	1,4715	0,1610	0,01984
1,5527	1,9534	0,03940	1,6005	2,3815	0,03980	1,5115	0,1440	0,01949
1,5927	1,8352	0,03837	1,6405	2,2515	0,03876	1,5515	0,1288	0,01916
1,6327	1,7246	0,03740	1,6805	2,1291	0,03776	1,5915	0,1154	0,01885
1,6727	1,6210	0,03647	1,7205	2,0137	0,03681	1,6315	0,1034	0,01857
1,7127	1,5241	0,03559	1,7605	1,9050	0,03591	1,6715	0,09268	0,01830
1,7527	1,4334	0,03475	1,8005	1,8024	0,03504	1,7115	0,08313	0,01805
1,7927	1,3484	0,03395	1,8405	1,7057	0,03422	1,7515	0,07459	0,01781

1,8327	1,2688	0,03319	1,8805	1,6145	0,03343	1,7915	0,06697	0,01760
1,8727	1,1942	0,03246	1,9205	1,5285	0,03268	1,8315	0,06014	0,01739
1,9127	1,1242	0,03177	1,9605	1,4474	0,03196	1,8715	0,05403	0,01720
1,9527	1,0587	0,03111	2,0000	1,3718	0,03128	1,9115	0,04855	0,01702
1,9927	0,9972	0,03048				1,9515	0,04365	0,01685
2,0000	0,9865	0,03037				1,9915	0,03925	0,01669
						2,0000	0,03838	0,01666

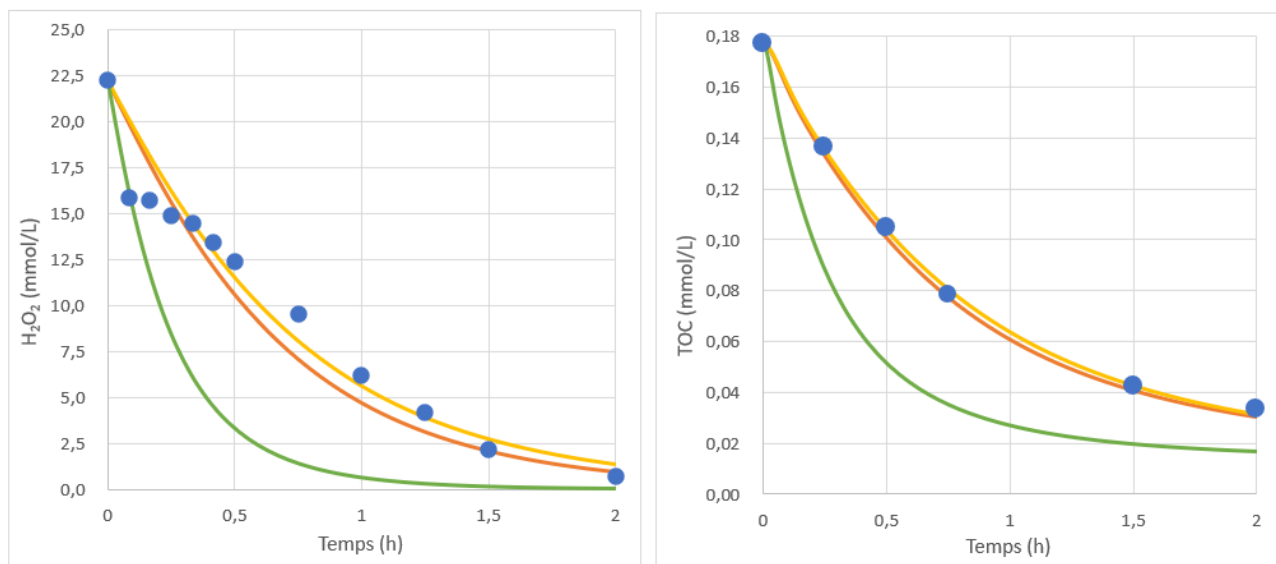


Figura 40. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per l'experiment 756_ON5

Taula 45. Dades simulades de l'experiment 472,5_ON9 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 472,5_ON9								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	13,8971	0,1712	0	13,8971	0,1712	0	13,8971	0,1712
7,714E-06	13,8970	0,1712	6,153E-06	13,8969	0,1712	5,236E-06	13,8969	0,1712
1,543E-05	13,8968	0,1712	1,231E-05	13,8968	0,1712	1,047E-05	13,8967	0,1712
2,314E-05	13,8967	0,1712	1,846E-05	13,8966	0,1712	1,571E-05	13,8966	0,1712
5,454E-05	13,8962	0,1712	4,188E-05	13,8959	0,1712	3,563E-05	13,8958	0,1712
8,594E-05	13,8956	0,1712	6,530E-05	13,8953	0,1712	5,556E-05	13,8951	0,1712
1,173E-04	13,8951	0,1712	8,872E-05	13,8946	0,1712	7,549E-05	13,8944	0,1712
1,487E-04	13,8945	0,1712	1,121E-04	13,8939	0,1712	9,541E-05	13,8936	0,1712
2,301E-04	13,8930	0,1712	1,761E-04	13,8920	0,1712	1,441E-04	13,8917	0,1712
3,114E-04	13,8914	0,1712	2,402E-04	13,8900	0,1712	1,927E-04	13,8898	0,1712
3,928E-04	13,8897	0,1712	3,042E-04	13,8880	0,1712	2,414E-04	13,8877	0,1712
4,741E-04	13,8880	0,1712	3,682E-04	13,8859	0,1712	2,900E-04	13,8856	0,1712
6,031E-04	13,8852	0,1712	4,652E-04	13,8827	0,1712	3,387E-04	13,8834	0,1712
7,321E-04	13,8824	0,1712	5,623E-04	13,8794	0,1712	4,343E-04	13,8791	0,1712
8,610E-04	13,8795	0,1712	6,593E-04	13,8760	0,1712	5,299E-04	13,8745	0,1712
9,900E-04	13,8765	0,1712	7,563E-04	13,8726	0,1712	6,255E-04	13,8699	0,1712
0,001119	13,8736	0,1712	8,534E-04	13,8692	0,1712	7,211E-04	13,8651	0,1712
0,001307	13,8693	0,1712	0,001011	13,8637	0,1712	8,167E-04	13,8603	0,1712
0,001495	13,8651	0,1712	0,001169	13,8582	0,1712	9,702E-04	13,8525	0,1712
0,001684	13,8608	0,1712	0,001327	13,8527	0,1712	0,001124	13,8446	0,1712
0,001872	13,8566	0,1712	0,001484	13,8472	0,1712	0,001277	13,8366	0,1712

0,002060	13,8524	0,1712	0,001642	13,8418	0,1712	0,001431	13,8286	0,1712
0,002248	13,8482	0,1712	0,001873	13,8339	0,1712	0,001584	13,8206	0,1712
0,002606	13,8403	0,1712	0,002104	13,8260	0,1712	0,001811	13,8088	0,1712
0,002963	13,8325	0,1712	0,002336	13,8183	0,1712	0,002038	13,7969	0,1712
0,003321	13,8248	0,1712	0,002567	13,8106	0,1712	0,002265	13,7851	0,1712
0,003678	13,8171	0,1712	0,002798	13,8029	0,1712	0,002492	13,7732	0,1711
0,004036	13,8095	0,1712	0,003327	13,7856	0,1711	0,002720	13,7613	0,1711
0,004394	13,8020	0,1711	0,003857	13,7685	0,1711	0,003135	13,7397	0,1711
0,005102	13,7872	0,1711	0,004386	13,7516	0,1711	0,003550	13,7181	0,1711
0,005810	13,7726	0,1711	0,004915	13,7347	0,1710	0,003964	13,6966	0,1710
0,006518	13,7581	0,1711	0,005445	13,7180	0,1710	0,004379	13,6751	0,1710
0,007227	13,7437	0,1710	0,006296	13,6912	0,1709	0,004794	13,6536	0,1709
0,007935	13,7294	0,1710	0,007148	13,6646	0,1708	0,005536	13,6154	0,1708
0,008643	13,7152	0,1710	0,008000	13,6381	0,1707	0,006277	13,5773	0,1707
0,009735	13,6934	0,1709	0,008852	13,6117	0,1706	0,007019	13,5394	0,1706
0,01083	13,6717	0,1708	0,009704	13,5854	0,1705	0,007761	13,5015	0,1705
0,01192	13,6502	0,1708	0,01114	13,5413	0,1703	0,008502	13,4638	0,1703
0,01301	13,6287	0,1707	0,01257	13,4973	0,1700	0,01092	13,3415	0,1698
0,01410	13,6073	0,1706	0,01400	13,4535	0,1698	0,01335	13,2205	0,1691
0,01519	13,5859	0,1705	0,01544	13,4098	0,1695	0,01577	13,1005	0,1683
0,01729	13,5449	0,1703	0,01687	13,3663	0,1691	0,01819	12,9816	0,1675
0,01939	13,5041	0,1701	0,02032	13,2620	0,1683	0,02062	12,8636	0,1666
0,02149	13,4634	0,1698	0,02376	13,1583	0,1673	0,02477	12,6633	0,1649
0,02359	13,4228	0,1696	0,02721	13,0551	0,1663	0,02893	12,4656	0,1631
0,02569	13,3824	0,1693	0,03066	12,9523	0,1652	0,03309	12,2703	0,1613
0,03043	13,2913	0,1686	0,03410	12,8500	0,1640	0,03725	12,0774	0,1593
0,03518	13,2007	0,1679	0,04044	12,6628	0,1617	0,04140	11,8868	0,1574
0,03992	13,1105	0,1671	0,04677	12,4769	0,1594	0,04765	11,6051	0,1545
0,04466	13,0207	0,1662	0,05311	12,2923	0,1570	0,05389	11,3290	0,1516
0,04940	12,9312	0,1654	0,05944	12,1090	0,1546	0,06013	11,0585	0,1488
0,05879	12,7549	0,1635	0,06578	11,9272	0,1522	0,06637	10,7938	0,1462
0,06818	12,5796	0,1616	0,07433	11,6844	0,1490	0,07261	10,5350	0,1436
0,07756	12,4054	0,1597	0,08289	11,4450	0,1460	0,07885	10,2821	0,1411
0,08695	12,2323	0,1577	0,09144	11,2092	0,1430	0,08627	9,9892	0,1382
0,09633	12,0603	0,1558	0,1000	10,9773	0,1402	0,09369	9,7047	0,1355
0,1095	11,8211	0,1532	0,1086	10,7494	0,1375	0,1011	9,4285	0,1329
0,1227	11,5847	0,1506	0,1171	10,5255	0,1348	0,1085	9,1604	0,1303
0,1358	11,3513	0,1482	0,1299	10,1985	0,1310	0,1160	8,9002	0,1278
0,1490	11,1213	0,1458	0,1427	9,8806	0,1273	0,1234	8,6478	0,1254
0,1621	10,8948	0,1436	0,1555	9,5718	0,1238	0,1308	8,4029	0,1231
0,1753	10,6720	0,1414	0,1683	9,2719	0,1204	0,1430	8,0161	0,1194
0,1941	10,3599	0,1384	0,1811	8,9808	0,1171	0,1552	7,6481	0,1158
0,2130	10,0557	0,1356	0,1978	8,6129	0,1130	0,1674	7,2981	0,1124
0,2318	9,7595	0,1328	0,2145	8,2592	0,1090	0,1796	6,9651	0,1092
0,2506	9,4712	0,1301	0,2313	7,9193	0,1053	0,1918	6,6484	0,1061
0,2694	9,1907	0,1275	0,2480	7,5928	0,1016	0,2040	6,3472	0,1032
0,2937	8,8403	0,1243	0,2648	7,2793	0,09820	0,2336	5,6771	0,09650
0,3180	8,5024	0,1211	0,3048	6,5791	0,09056	0,2631	5,0831	0,09050
0,3423	8,1767	0,1181	0,3448	5,9448	0,08369	0,2720	4,9183	0,08882
0,3666	7,8629	0,1151	0,3848	5,3710	0,07752	0,2809	4,7593	0,08719
0,3909	7,5605	0,1123	0,4248	4,8525	0,07197	0,2897	4,6059	0,08560
0,4309	7,0866	0,1078	0,4648	4,3848	0,06699	0,2986	4,4579	0,08407
0,4709	6,6415	0,1036	0,5048	3,9631	0,06250	0,3075	4,3151	0,08258
0,5109	6,2238	0,09954	0,5448	3,5830	0,05845	0,3322	3,9414	0,07863
0,5509	5,8320	0,09574	0,5848	3,2403	0,05480	0,3570	3,6028	0,07500
0,5909	5,4647	0,09215	0,6248	2,9313	0,05149	0,3818	3,2959	0,07166
0,6309	5,1206	0,08875	0,6648	2,6529	0,04849	0,4066	3,0175	0,06857

0,6709	4,7982	0,08554	0,7048	2,4020	0,04578	0,4466	2,6214	0,06407
0,7109	4,4964	0,08250	0,7448	2,1758	0,04330	0,4866	2,2821	0,06009
0,7509	4,2139	0,07962	0,7848	1,9719	0,04106	0,5266	1,9906	0,05656
0,7909	3,9496	0,07690	0,8248	1,7881	0,03901	0,5666	1,7394	0,05342
0,8309	3,7024	0,07433	0,8648	1,6222	0,03713	0,6066	1,5226	0,05062
0,8709	3,4711	0,07189	0,9048	1,4724	0,03542	0,6466	1,3351	0,04810
0,9109	3,2548	0,06959	0,9448	1,3372	0,03385	0,6866	1,1726	0,04585
0,9509	3,0525	0,06741	0,9848	1,2152	0,03241	0,7266	1,0315	0,04381
0,9909	2,8633	0,06534	1,0248	1,1049	0,03108	0,7666	0,9087	0,04197
1,0309	2,6864	0,06338	1,0648	1,0049	0,02986	0,8066	0,8016	0,04031
1,0709	2,5210	0,06152	1,1048	0,9144	0,02874	0,8466	0,7079	0,03880
1,1109	2,3663	0,05976	1,1448	0,8326	0,02770	0,8866	0,6259	0,03742
1,1509	2,2216	0,05809	1,1848	0,7585	0,02673	0,9266	0,5541	0,03616
1,1909	2,0862	0,05650	1,2248	0,6914	0,02585	0,9666	0,4910	0,03501
1,2309	1,9596	0,05500	1,2648	0,6306	0,02502	1,0066	0,4357	0,03396
1,2709	1,8411	0,05357	1,3048	0,5754	0,02425	1,0466	0,3869	0,03299
1,3109	1,7302	0,05221	1,3448	0,5254	0,02354	1,0866	0,3440	0,03210
1,3509	1,6264	0,05091	1,3848	0,4799	0,02288	1,1266	0,3061	0,03129
1,3909	1,5291	0,04968	1,4248	0,4385	0,02226	1,1666	0,2727	0,03053
1,4309	1,4381	0,04851	1,4648	0,4008	0,02168	1,2066	0,2431	0,02983
1,4709	1,3529	0,04740	1,5048	0,3665	0,02114	1,2466	0,2169	0,02919
1,5109	1,2730	0,04633	1,5448	0,3353	0,02064	1,2866	0,1937	0,02859
1,5509	1,1982	0,04532	1,5848	0,3069	0,02017	1,3266	0,1731	0,02804
1,5909	1,1280	0,04436	1,6248	0,2810	0,01972	1,3666	0,1548	0,02752
1,6309	1,0623	0,04344	1,6648	0,2573	0,01931	1,4066	0,1385	0,02704
1,6709	1,0006	0,04256	1,7048	0,2358	0,01892	1,4466	0,1240	0,02659
1,7109	0,9428	0,04172	1,7448	0,2161	0,01855	1,4866	0,1110	0,02618
1,7509	0,8885	0,04092	1,7848	0,1982	0,01820	1,5266	0,09949	0,02579
1,7909	0,8376	0,04015	1,8248	0,1818	0,01788	1,5666	0,08920	0,02542
1,8309	0,7899	0,03942	1,8648	0,1668	0,01757	1,6066	0,08001	0,02508
1,8709	0,7450	0,03872	1,9048	0,1531	0,01728	1,6466	0,07180	0,02476
1,9109	0,7028	0,03805	1,9448	0,1405	0,01701	1,6866	0,06445	0,02447
1,9509	0,6632	0,03740	1,9848	0,1291	0,01675	1,7266	0,05789	0,02419
1,9909	0,6259	0,03679	2,0000	0,1250	0,01666	1,7666	0,05201	0,02392
2,0000	0,6177	0,03665				1,8066	0,04675	0,02368
						1,8466	0,04204	0,02345
						1,8866	0,03782	0,02323
						1,9266	0,03403	0,02303
						1,9666	0,03063	0,02284
						2,0000	0,02806	0,02268

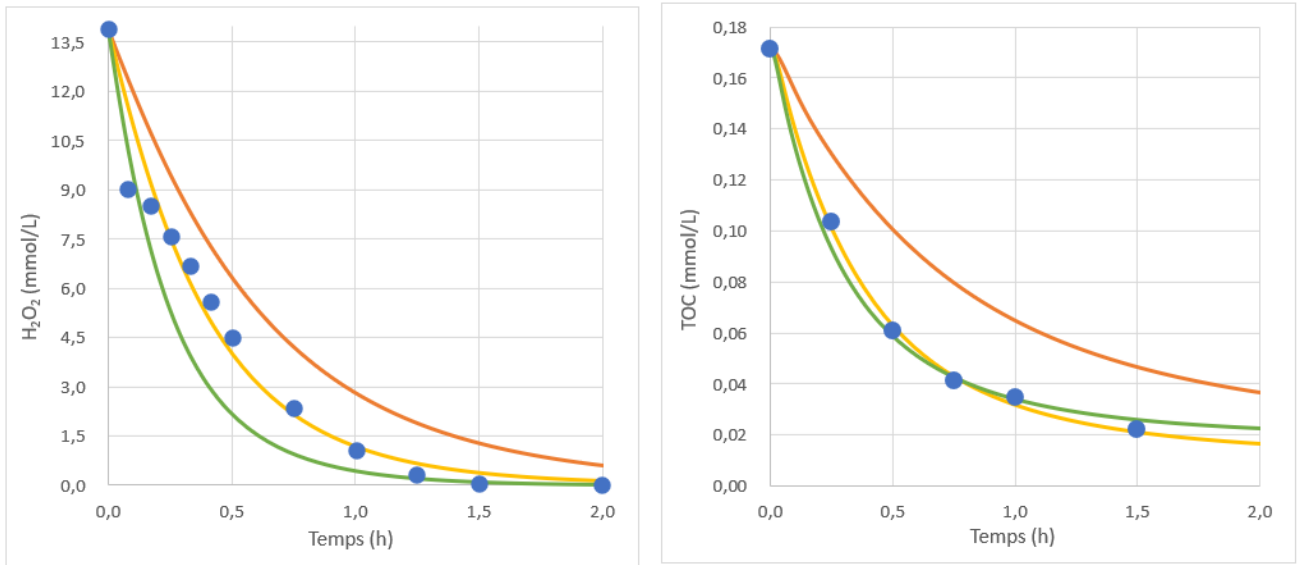


Figura 41. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per l'experiment 472,5_ON9

Taula 46. Dades simulades de l'experiment 873,4_ON9 pels 3 valors de paràmetres.

DADES SIMULADES EXPERIMENT 873,4_ON9								
Model sense ajustar			Model ajustat			Model ajustat global		
Temps	H2O2	TOC	Temps (h)	H2O2	TOC	Temps	H2O2	TOC
0	25,6882	0,1639	0	25,6882	0,1639	0	25,6882	0,1639
4,287E-06	25,6881	0,1639	4,591E-05	25,6880	0,1639	2,983E-06	25,6880	0,1639
8,574E-06	25,6879	0,1639	9,182E-05	25,6879	0,1639	5,966E-06	25,6878	0,1639
1,286E-05	25,6878	0,1639	1,377E-04	25,6877	0,1639	8,948E-06	25,6876	0,1639
3,175E-05	25,6872	0,1639	2,997E-04	25,6871	0,1639	2,107E-05	25,6868	0,1639
5,064E-05	25,6866	0,1639	4,617E-04	25,6865	0,1639	3,319E-05	25,6860	0,1639
6,953E-05	25,6860	0,1639	6,236E-04	25,6859	0,1639	4,531E-05	25,6852	0,1639
8,842E-05	25,6853	0,1639	7,856E-04	25,6852	0,1639	5,743E-05	25,6843	0,1639
1,452E-04	25,6833	0,1639	1,179E-03	25,6837	0,1639	9,956E-05	25,6812	0,1639
2,020E-04	25,6812	0,1639	1,572E-03	25,6821	0,1639	1,417E-04	25,6780	0,1639
2,588E-04	25,6790	0,1639	1,965E-03	25,6804	0,1639	1,838E-04	25,6746	0,1639
3,156E-04	25,6767	0,1639	2,358E-03	25,6788	0,1639	2,259E-04	25,6710	0,1639
4,124E-04	25,6726	0,1639	2,752E-03	25,6770	0,1639	2,885E-04	25,6656	0,1639
5,092E-04	25,6685	0,1639	3,429E-03	25,6740	0,1639	3,510E-04	25,6600	0,1639
6,060E-04	25,6643	0,1639	4,106E-03	25,6709	0,1639	4,135E-04	25,6542	0,1639
7,028E-04	25,6601	0,1639	4,783E-03	25,6678	0,1639	4,760E-04	25,6484	0,1639
7,997E-04	25,6559	0,1639	5,461E-03	25,6646	0,1639	5,385E-04	25,6425	0,1639
9,264E-04	25,6504	0,1639	6,138E-03	25,6614	0,1639	6,403E-04	25,6328	0,1639
0,001053	25,6449	0,1639	7,278E-03	25,6560	0,1639	7,421E-04	25,6230	0,1639
0,001180	25,6395	0,1639	8,418E-03	25,6505	0,1639	8,439E-04	25,6132	0,1639
0,001307	25,6342	0,1639	9,558E-03	25,6451	0,1639	9,457E-04	25,6034	0,1639
0,001433	25,6289	0,1639	0,001070	25,6396	0,1639	0,001047	25,5936	0,1639
0,001560	25,6236	0,1639	0,001184	25,6341	0,1639	0,001149	25,5838	0,1639
0,001877	25,6108	0,1639	0,001352	25,6259	0,1639	0,001333	25,5662	0,1639
0,002136	25,6005	0,1639	0,001521	25,6178	0,1639	0,001517	25,5486	0,1639
0,002395	25,5905	0,1639	0,001689	25,6097	0,1639	0,001700	25,5311	0,1639
0,002654	25,5806	0,1639	0,001858	25,6015	0,1639	0,001884	25,5135	0,1639

0,002913	25,5709	0,1639	0,002026	25,5934	0,1639	0,002068	25,4961	0,1638
0,003172	25,5613	0,1639	0,002342	25,5782	0,1639	0,002251	25,4786	0,1638
0,003431	25,5519	0,1639	0,002658	25,5630	0,1639	0,002614	25,4442	0,1638
0,003941	25,5336	0,1638	0,002973	25,5478	0,1639	0,002977	25,4098	0,1638
0,004452	25,5157	0,1638	0,003289	25,5326	0,1638	0,003340	25,3756	0,1637
0,004962	25,4981	0,1638	0,003605	25,5174	0,1638	0,003703	25,3414	0,1637
0,005473	25,4808	0,1638	0,004092	25,4940	0,1638	0,004066	25,3073	0,1636
0,005983	25,4636	0,1638	0,004580	25,4706	0,1638	0,004428	25,2732	0,1636
0,007001	25,4299	0,1637	0,005067	25,4472	0,1638	0,004948	25,2246	0,1635
0,008019	25,3966	0,1637	0,005555	25,4238	0,1637	0,005468	25,1760	0,1634
0,009036	25,3635	0,1636	0,006466	25,3802	0,1637	0,005987	25,1276	0,1633
0,01005	25,3307	0,1636	0,007377	25,3367	0,1636	0,006507	25,0793	0,1632
0,01107	25,2981	0,1635	0,008289	25,2933	0,1635	0,007027	25,0311	0,1631
0,01267	25,2469	0,1634	0,009200	25,2499	0,1634	0,007546	24,9830	0,1630
0,01428	25,1958	0,1632	0,01167	25,1325	0,1631	0,008283	24,9150	0,1628
0,01588	25,1450	0,1631	0,01415	25,0156	0,1627	0,009020	24,8472	0,1626
0,01749	25,0942	0,1629	0,01662	24,8991	0,1623	0,009757	24,7796	0,1624
0,01909	25,0436	0,1627	0,01909	24,7831	0,1619	0,01049	24,7122	0,1622
0,02250	24,9362	0,1623	0,02157	24,6675	0,1614	0,01123	24,6449	0,1620
0,02591	24,8291	0,1619	0,02686	24,4214	0,1602	0,01259	24,5209	0,1615
0,02932	24,7224	0,1614	0,03215	24,1771	0,1588	0,01396	24,3975	0,1610
0,03273	24,6159	0,1608	0,03744	23,9347	0,1574	0,01532	24,2746	0,1604
0,03614	24,5096	0,1602	0,04274	23,6941	0,1559	0,01669	24,1521	0,1598
0,04442	24,2526	0,1587	0,04803	23,4554	0,1544	0,02011	23,8465	0,1583
0,05269	23,9963	0,1571	0,05332	23,2188	0,1528	0,02354	23,5435	0,1566
0,06097	23,7405	0,1553	0,06151	22,8569	0,1503	0,02696	23,2428	0,1548
0,06924	23,4851	0,1536	0,06969	22,5002	0,1479	0,03039	22,9445	0,1530
0,07752	23,2302	0,1518	0,07788	22,1487	0,1455	0,03382	22,6485	0,1511
0,08894	22,8792	0,1494	0,08606	21,8026	0,1431	0,03853	22,2454	0,1486
0,1004	22,5296	0,1471	0,09424	21,4618	0,1408	0,04324	21,8472	0,1461
0,1118	22,1820	0,1449	0,1024	21,1263	0,1385	0,04795	21,4542	0,1438
0,1232	21,8367	0,1427	0,1152	20,6139	0,1350	0,05266	21,0667	0,1415
0,1346	21,4943	0,1407	0,1279	20,1143	0,1317	0,05737	20,6849	0,1393
0,1465	21,1430	0,1387	0,1407	19,6270	0,1284	0,06232	20,2904	0,1370
0,1583	20,7953	0,1368	0,1534	19,1520	0,1252	0,06727	19,9025	0,1349
0,1701	20,4515	0,1349	0,1662	18,6889	0,1222	0,07222	19,5213	0,1328
0,1820	20,1117	0,1330	0,1820	18,1307	0,1185	0,07717	19,1469	0,1307
0,1938	19,7760	0,1312	0,1978	17,5898	0,1150	0,08212	18,7792	0,1287
0,2139	19,2167	0,1283	0,2137	17,0658	0,1117	0,09053	18,1693	0,1255
0,2339	18,6694	0,1254	0,2295	16,5581	0,1084	0,09894	17,5784	0,1223
0,2539	18,1342	0,1226	0,2453	16,0662	0,1053	0,1074	17,0061	0,1192
0,2740	17,6110	0,1199	0,2755	15,1674	0,09971	0,1158	16,4519	0,1163
0,2940	17,0998	0,1172	0,3058	14,3214	0,09451	0,1242	15,9154	0,1134
0,3263	16,3016	0,1130	0,3360	13,5250	0,08968	0,1374	15,1088	0,1091
0,3586	15,5338	0,1090	0,3663	12,7753	0,08519	0,1506	14,3428	0,1050
0,3908	14,7959	0,1051	0,4063	11,8512	0,07974	0,1637	13,6157	0,1011
0,4231	14,0874	0,1014	0,4463	10,9980	0,07478	0,1769	12,9258	0,09736
0,4631	13,2490	0,09693	0,4863	10,2099	0,07026	0,2039	11,6223	0,09028
0,5031	12,4538	0,09271	0,5263	9,4817	0,06614	0,2309	10,4533	0,08389
0,5431	11,7005	0,08869	0,5663	8,8086	0,06237	0,2578	9,4062	0,07810
0,5831	10,9877	0,08487	0,6063	8,1864	0,05891	0,2848	8,4688	0,07287
0,6231	10,3142	0,08124	0,6463	7,6109	0,05574	0,3248	7,2579	0,06601
0,6631	9,6786	0,07780	0,6863	7,0785	0,05284	0,3648	6,2317	0,06009
0,7031	9,0792	0,07453	0,7263	6,5858	0,05016	0,4048	5,3608	0,05496
0,7431	8,5145	0,07144	0,7663	6,1296	0,04769	0,4448	4,6205	0,05050
0,7831	7,9830	0,06851	0,8063	5,7072	0,04542	0,4848	3,9904	0,04660
0,8231	7,4832	0,06573	0,8463	5,3157	0,04332	0,5248	3,4532	0,04320
0,8631	7,0135	0,06311	0,8863	4,9529	0,04137	0,5648	2,9942	0,04021

0,9031	6,5725	0,06062	0,9263	4,6165	0,03957	0,6048	2,6014	0,03757
0,9431	6,1587	0,05827	0,9663	4,3045	0,03790	0,6448	2,2649	0,03524
0,9831	5,7706	0,05605	1,0063	4,0149	0,03635	0,6848	1,9760	0,03318
1,0231	5,4068	0,05395	1,0463	3,7459	0,03490	0,7248	1,7271	0,03134
1,0631	5,0661	0,05196	1,0863	3,4960	0,03356	0,7648	1,5116	0,02969
1,1031	4,7469	0,05008	1,1263	3,2638	0,03230	0,8048	1,3250	0,02822
1,1431	4,4482	0,04830	1,1663	3,0481	0,03113	0,8448	1,1632	0,02689
1,1831	4,1686	0,04662	1,2063	2,8474	0,03003	0,8848	1,0227	0,02570
1,2231	3,9070	0,04503	1,2463	2,6608	0,02901	0,9248	0,9006	0,02462
1,2631	3,6622	0,04353	1,2863	2,4872	0,02805	0,9648	0,7941	0,02364
1,3031	3,4332	0,04210	1,3263	2,3256	0,02715	1,0048	0,7013	0,02276
1,3431	3,2191	0,04075	1,3663	2,1752	0,02630	1,0448	0,6200	0,02195
1,3831	3,0188	0,03948	1,4063	2,0350	0,02551	1,0848	0,5489	0,02121
1,4231	2,8315	0,03827	1,4463	1,9043	0,02476	1,1248	0,4865	0,02054
1,4631	2,6564	0,03712	1,4863	1,7826	0,02406	1,1648	0,4317	0,01992
1,5031	2,4927	0,03604	1,5263	1,6690	0,02340	1,2048	0,3836	0,01936
1,5431	2,3396	0,03501	1,5663	1,5631	0,02277	1,2448	0,3411	0,01884
1,5831	2,1964	0,03403	1,6063	1,4643	0,02218	1,2848	0,3037	0,01836
1,6231	2,0625	0,03310	1,6463	1,3721	0,02162	1,3248	0,2705	0,01792
1,6631	1,9372	0,03222	1,6863	1,2860	0,02110	1,3648	0,2412	0,01751
1,7031	1,8200	0,03138	1,7263	1,2056	0,02060	1,4048	0,2153	0,01713
1,7431	1,7103	0,03059	1,7663	1,1305	0,02013	1,4448	0,1922	0,01678
1,7831	1,6077	0,02983	1,8063	1,0603	0,01968	1,4848	0,1718	0,01646
1,8231	1,5116	0,02911	1,8463	0,9946	0,01925	1,5248	0,1536	0,01615
1,8631	1,4216	0,02843	1,8863	0,9332	0,01885	1,5648	0,1374	0,01587
1,9031	1,3373	0,02778	1,9263	0,8757	0,01847	1,6048	0,1230	0,01561
1,9431	1,2584	0,02716	1,9663	0,8219	0,01810	1,6448	0,1102	0,01536
1,9831	1,1844	0,02657	2,0000	0,7793	0,01781	1,6848	0,09872	0,01513
2,0000	1,1546	0,02632				1,7248	0,08852	0,01492
						1,7648	0,07941	0,01472
						1,8048	0,07127	0,01454
						1,8448	0,06400	0,01436
						1,8848	0,05749	0,01420
						1,9248	0,05166	0,01404
						1,9648	0,04643	0,01390
						2,0000	0,04228	0,01378

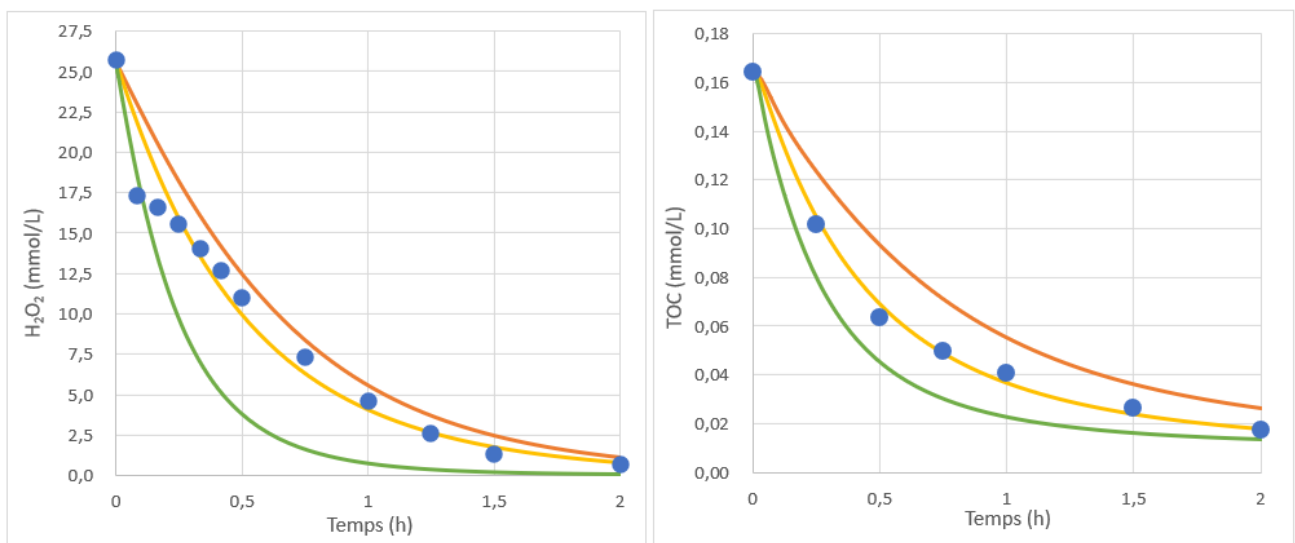


Figura 42. Dades experimentals i simulades de H₂O₂ i TOC vs. temps per l'experiment 873,4_ON9

Taula 47. Dades simulades de l'experiment utilitzat per la validació 1.

Validació 1		
Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	6,9500	0,1702
7,7850E-06	6,9499	0,1702
1,5570E-05	6,9497	0,1702
2,3355E-05	6,9496	0,1702
5,5681E-05	6,9490	0,1702
8,8007E-05	6,9484	0,1702
0,0001203	6,9478	0,1702
0,0001527	6,9472	0,1702
0,0002260	6,9458	0,1702
0,0002993	6,9444	0,1702
0,0003727	6,9429	0,1702
0,0004460	6,9414	0,1702
0,0005193	6,9398	0,1702
0,0006478	6,9369	0,1702
0,0007763	6,9340	0,1702
0,0009048	6,9310	0,1702
0,001033	6,9279	0,1702
0,001162	6,9249	0,1702
0,001381	6,9195	0,1702
0,001600	6,9141	0,1702
0,001820	6,9086	0,1702
0,002039	6,9031	0,1702
0,002258	6,8977	0,1702
0,002567	6,8899	0,1702
0,002877	6,8822	0,1702
0,003186	6,8744	0,1701
0,003495	6,8667	0,1701
0,003804	6,8589	0,1701
0,004370	6,8447	0,1701
0,004937	6,8306	0,1700
0,005504	6,8165	0,1700
0,006070	6,8025	0,1699
0,006637	6,7884	0,1699
0,007808	6,7596	0,1697
0,008979	6,7308	0,1696
0,01015	6,7023	0,1694
0,01132	6,6738	0,1692
0,01249	6,6456	0,1690
0,01552	6,5731	0,1685
0,01854	6,5015	0,1678
0,02157	6,4307	0,1671
0,02459	6,3607	0,1663
0,02762	6,2914	0,1654
0,03282	6,1741	0,1638
0,03801	6,0587	0,1622
0,04321	5,9453	0,1605
0,04841	5,8339	0,1587
0,05360	5,7242	0,1569
0,06058	5,5800	0,1545
0,06756	5,4391	0,1521
0,07454	5,3015	0,1497
0,08151	5,1672	0,1474
0,08849	5,0363	0,1451

0,09774	4,8679	0,1422
0,10698	4,7053	0,1395
0,11622	4,5483	0,1368
0,12547	4,3968	0,1342
0,13471	4,2507	0,1317
0,15059	4,0118	0,1276
0,16647	3,7873	0,1237
0,18235	3,5765	0,1201
0,19823	3,3785	0,1166
0,21411	3,1925	0,1133
0,23530	2,9616	0,1092
0,25648	2,7489	0,1053
0,27767	2,5529	0,1017
0,29886	2,3721	0,09828
0,32004	2,2054	0,09510
0,36004	1,9247	0,08961
0,40004	1,6828	0,08472
0,44004	1,4739	0,08034
0,48004	1,2930	0,07642
0,52004	1,1362	0,07289
0,56004	0,9999	0,06971
0,60004	0,8813	0,06684
0,64004	0,7778	0,06423
0,68004	0,6873	0,06186
0,72004	0,6082	0,05971
0,76004	0,5388	0,05774
0,80004	0,4778	0,05593
0,84004	0,4242	0,05428
0,88004	0,3770	0,05276
0,92004	0,3353	0,05137
0,96004	0,2985	0,05008
1,00004	0,2659	0,04889
1,04004	0,2371	0,04779
1,08004	0,2116	0,04677
1,12004	0,1890	0,04583
1,16004	0,1689	0,04496
1,20004	0,1511	0,04414
1,24004	0,1352	0,04338
1,28004	0,1211	0,04268
1,32004	0,1085	0,04202
1,36004	0,09720	0,04141
1,40004	0,08716	0,04083
1,44004	0,07819	0,04030
1,48004	0,07017	0,03979
1,52004	0,06301	0,03932
1,56004	0,05660	0,03888
1,60004	0,05086	0,03847
1,64004	0,04572	0,03808
1,68004	0,04112	0,03772
1,72004	0,03700	0,03737
1,76004	0,03330	0,03705
1,80004	0,02998	0,03675
1,84004	0,02699	0,03646
1,88004	0,02431	0,03620
1,92004	0,02190	0,03594
1,96004	0,01973	0,03570
2	0,01778	0,03548

Taula 48. Dades simulades de l'experiment utilitzat per la validació 2.

Validació 2		
Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	11,1176	0,1656
5,969E-06	11,1174	0,1656
1,194E-05	11,1173	0,1656
1,791E-05	11,1171	0,1656
4,128E-05	11,1164	0,1656
6,466E-05	11,1158	0,1656
8,804E-05	11,1151	0,1656
0,0001114	11,1144	0,1656
0,0001675	11,1126	0,1656
0,0002237	11,1108	0,1656
0,0002798	11,1089	0,1656
0,0003359	11,1070	0,1656
0,0003921	11,1050	0,1656
0,0004972	11,1012	0,1656
0,0006024	11,0973	0,1656
0,0007076	11,0932	0,1656
0,0008128	11,0891	0,1656
0,0009180	11,0849	0,1656
0,001091	11,0779	0,1656
0,001264	11,0708	0,1656
0,001438	11,0637	0,1656
0,001611	11,0565	0,1656
0,001784	11,0494	0,1656
0,002036	11,0389	0,1656
0,002288	11,0285	0,1656
0,002541	11,0180	0,1655
0,002793	11,0076	0,1655
0,003045	10,9971	0,1655
0,003504	10,9781	0,1655
0,003962	10,9592	0,1655
0,004421	10,9402	0,1654
0,004880	10,9214	0,1654
0,005339	10,9025	0,1653
0,006191	10,8677	0,1652
0,007042	10,8330	0,1651
0,007894	10,7984	0,1650
0,008746	10,7640	0,1648
0,009598	10,7297	0,1647
0,0118	10,6424	0,1642
0,0140	10,5559	0,1637
0,0161	10,4701	0,1631
0,0183	10,3850	0,1624
0,0205	10,3006	0,1617
0,0247	10,1408	0,1603
0,0289	9,9831	0,1587
0,0330	9,8275	0,1571
0,0372	9,6740	0,1554
0,0414	9,5224	0,1537
0,0476	9,3004	0,1511
0,0538	9,0829	0,1485
0,0600	8,8698	0,1460
0,0662	8,6612	0,1435
0,0725	8,4573	0,1412
0,0787	8,2579	0,1389

0,0871	7,9939	0,1358
0,0956	7,7384	0,1329
0,1041	7,4914	0,1302
0,1125	7,2526	0,1275
0,1210	7,0218	0,1249
0,1294	6,7988	0,1224
0,1379	6,5833	0,1200
0,1514	6,2537	0,1163
0,1650	5,9417	0,1128
0,1785	5,6465	0,1094
0,1921	5,3671	0,1062
0,2056	5,1027	0,1032
0,2191	4,8524	0,1003
0,2482	4,3596	0,09447
0,2772	3,9210	0,08921
0,3063	3,5303	0,08444
0,3353	3,1819	0,08009
0,3644	2,8709	0,07613
0,4044	2,4962	0,07123
0,4444	2,1747	0,06690
0,4844	1,8981	0,06305
0,5244	1,6597	0,05962
0,5644	1,4537	0,05655
0,6044	1,2754	0,05380
0,6444	1,1208	0,05133
0,6844	0,9865	0,04910
0,7244	0,8695	0,04708
0,7644	0,7675	0,04525
0,8044	0,6781	0,04358
0,8444	0,5998	0,04207
0,8844	0,5312	0,04068
0,9244	0,4709	0,03941
0,9644	0,4180	0,03825
1,0044	0,3714	0,03719
1,0444	0,3303	0,03620
1,0844	0,2940	0,03530
1,1244	0,2619	0,03447
1,1644	0,2336	0,03369
1,2044	0,2085	0,03298
1,2444	0,1862	0,03232
1,2844	0,1665	0,03170
1,3244	0,1489	0,03113
1,3644	0,1332	0,03060
1,4044	0,1193	0,03010
1,4444	0,1069	0,02964
1,4844	0,09584	0,02921
1,5244	0,08596	0,02880
1,5644	0,07712	0,02843
1,6044	0,06922	0,02807
1,6444	0,06215	0,02774
1,6844	0,05583	0,02743
1,7244	0,05017	0,02714
1,7644	0,04509	0,02687
1,8044	0,04055	0,02661
1,8444	0,03647	0,02637
1,8844	0,03282	0,02614
1,9244	0,02954	0,02593
2	0,02423	0,02556

8.1.4 Funció interpolació i dades interpolades

```

' Definició de la funció i les seves entrades
Function INTERPOLAR(valor As Double, vec_ref As Range, vec_resultat As Range) As Double '
' Definició de variables
Dim y0, x0, y1, x1, m, x As Double
Dim i, nElements As Long
nElements = vec_ref.Count ' Especifica el número d'elementos del rango seleccionado
x = valor ' Dada d'entrada
' Interpolació linial
If vec_ref(vec_ref.Count) > vec_ref(1) Then
  For i = 1 To nElements - 1
' Condicional per trobar l'interval en el que es troba el valor a evaluar (Rang amb dades ascendents)
  If valor >= vec_ref(i) And valor < vec_ref(i + 1) Then
    y1 = vec_resultat(i + 1)
    y0 = vec_resultat(i)
    x1 = vec_ref(i + 1)
    x0 = vec_ref(i)
    m = (y1 - y0) / (x1 - x0) ' Càlcul de pendente de l'equació linial
    INTERPOLAR = y0 + m * (x - x0) 'Càlculo del valor interpolat
  End If
  Next i
Else
  For i = 1 To nElements - 1
' Condicional per trobar l'interval en el que es troba el valor a evaluar (Rang amb dades descendents)
  If valor >= vec_ref(i + 1) And valor < vec_ref(i) Then
    y1 = vec_resultat(i)
    y0 = vec_resultat(i + 1)
    x1 = vec_ref(i)
    x0 = vec_ref(i + 1)
    m = (y1 - y0) / (x1 - x0) ' Càlcul de pendiente de l'equació linial
    INTERPOLAR = y0 + m * (x - x0) 'Càlculo del valor interpolat
  End If
  Next i
End If
End Function

```

Figura 43. Funció interpolació definida en el Visual Basic de l'Excel.

Taula 49. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 189_ON5

	Experiment 189_ON5			
	Model ajustat		Model ajustat global	
Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	5,5588	0,1707	5,5588	0,1707
0,0833	4,4541	-	4,1334	-
0,1667	3,5595	-	3,0693	-
0,2500	2,8550	0,1103	2,2965	0,1116
0,3333	2,3042	-	1,7304	-
0,4167	1,8682	-	1,3166	-
0,5000	1,5230	0,0744	1,0072	0,0806
0,7500	0,8474	0,0551	0,4668	0,0641
1,0000	0,4864	0,0437	0,2254	0,0546
1,2500	0,2860	-	0,1122	-
1,5000	0,0000	0,0000	0,0570	0,0449
2,0000	0,0640	0,0260	0,0153	0,0406

Taula 50. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 189_ON14

Experiment 189_ON14				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	5,5588	0,1721	5,5588	0,1721
0,0833	3,6276	-	4,1338	-
0,1667	2,3587	-	3,0697	-
0,2500	1,5571	0,0738	2,2968	0,1126
0,3333	1,0450	-	1,7307	-
0,4167	0,7089	-	1,3167	-
0,5000	0,4868	0,0424	1,0073	0,0813
0,7500	0,1683	0,0304	0,4669	0,0647
1,0000	0,0616	0,0248	0,2254	0,0551
1,2500	0,0234	-	0,1122	-
1,5000	0,0091	0,0202	0,0570	0,0453
2,0000	0,0015	0,0187	0,0153	0,0410

Taula 51. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 71,6_ON9

Experiment 71,6_ON9				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	2,1059	0,1717	2,1059	0,1717
0,0833	0,8623	-	1,6135	-
0,1667	0,3611	-	1,2361	-
0,2500	0,1679	0,0924	0,9500	0,1338
0,3333	0,0846	-	0,7324	-
0,4167	0,0448	-	0,5689	-
0,5000	0,0247	0,0681	0,4433	0,1074
0,7500	0,0047	0,0598	0,2149	0,0919
1,0000	0,0010	0,0566	0,1069	0,0823
1,2500	0,0002	-	0,0545	-
1,5000	0,0001	0,0000	0,0282	0,0719
2,0000	0,0000	0,0547	0,0077	0,0672

Taula 52. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 756_ON14

Experiment 756_ON14				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	22,2353	0,1787	22,2353	0,1787
0,0833	18,0703	-	16,1545	-
0,1667	14,6013	-	11,6392	-
0,2500	11,7670	0,0968	8,4088	0,0891
0,3333	9,4748	-	6,1154	-
0,4167	7,6355	-	4,4828	-
0,5000	6,1563	0,0584	3,3148	0,0520
0,7500	3,2740	0,0390	1,4089	0,0355
1,0000	1,7812	0,0286	0,6367	0,0272
1,2500	0,9908	-	0,3024	-
1,5000	0,5622	0,0187	0,1488	0,0198
2,0000	0,1899	0,0145	0,0384	0,0168

Taula 53. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 756_ON5

Experiment 756_ON5				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	22,2353	0,1772	22,2353	0,1772
0,0833	20,1121	-	16,1535	-
0,1667	18,0933	-	11,6381	-
0,2500	16,2122	0,1353	8,4106	0,0884
0,3333	14,4932	-	6,1158	-
0,4167	12,9333	-	4,4889	-
0,5000	11,5192	0,1039	3,3167	0,0515
0,7500	8,0766	0,0807	1,4066	0,0352
1,0000	5,6282	-	0,6367	-
1,2500	3,9240	-	0,3029	-
1,5000	2,7458	0,0427	0,1489	0,0196
2,0000	1,3718	0,0313	0,0384	0,0167

Taula 54. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 472,5_ON9

Experiment 472,5_ON9				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	13,8971	0,1712	13,8971	0,1712
0,0833	11,4327	-	10,1052	-
0,1667	9,3097	-	7,3197	-
0,2500	7,5556	0,1012	5,3473	0,0932
0,3333	6,1259	-	3,9266	-
0,4167	4,9573	-	2,9174	-
0,5000	4,0132	0,0630	2,1841	0,0589
0,7500	2,1490	0,0430	0,9595	0,0427
1,0000	1,1731	0,0319	0,4447	0,0341
1,2500	0,6530	-	0,2149	-
1,5000	0,3706	0,0212	0,1072	0,0260
2,0000	-	-	-	-

Taula 55. Dades interpolades dels models ajustat i ajustat global de l'experiment 873,4_ON9

Experiment 873,4_ON9				
Temps (h)	Model ajustat		Model ajustat global	
	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	25,6882	0,1639	25,6882	0,1639
0,0833	21,9179	-	18,6909	-
0,1667	18,6726	-	13,4630	-
0,2500	15,9265	0,1045	9,7104	0,0798
0,3333	13,5962	-	7,0390	-
0,4167	11,6297	-	5,1411	-
0,5000	9,9602	0,0688	3,7863	0,0453
0,7500	6,3153	0,0487	1,5913	0,0303
1,0000	4,0604	0,0366	0,7124	0,0229
1,2500	2,6447	-	0,3363	-
1,5000	1,7436	0,0000	0,1649	0,0163
2,0000	0,7793	0,0178	0,0423	0,0138

Taula 56. Dades interpolades del model ajustat global de l'experiment utilitzat per la validació 1.

Validació 1		
Model ajustat global		
Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	6,9500	0,1702
0,0833	5,1331	-
0,1667	3,7848	-
0,2500	2,8140	0,1065
0,3333	2,1121	-
0,4167	1,5960	-
0,5000	1,2148	0,0747
0,7500	0,5562	0,0582
1,0000	0,2659	0,0489
1,2500	0,1317	-
1,5000	0,0666	0,0396
2,0000	0,0178	0,0355

Taula 57. Dades interpolades del model ajustat global de l'experiment utilitzat per la validació 2.

Validació 2		
Model ajustat global		
Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0000	11,1176	0,1656
0,0833	8,1123	-
0,1667	5,9049	-
0,2500	4,3323	0,0941
0,3333	3,2060	-
0,4167	2,3975	-
0,5000	1,8050	0,0617
0,7500	0,8042	0,0459
1,0000	0,3765	0,0373
1,2500	0,1835	-
1,5000	0,0920	0,0291
2,0000	0,0242	0,0256

8.2 Annex apartat 4

8.2.1 Taula resum

Taula 58. Càlculs realitzats per l'estudi de la molalitat i la força iònica respecte els paràmetres k i ξ^{\max}

	Codi			Matèria (mg)			mi (mol/kg)				Força iònica (mol/kg)	Paràmetres model			
	Cl-	SO42-	SO42-	KCl	MgSO ₄	CaSO ₄	KCl	MgSO ₄	CaSO ₄	SO ₄ ²⁻ total	$I=(1/2)\sum i \cdot Z^2$	ξ^{\max}	k (min ⁻¹)	R ²	
PARACETAMOL	0_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,8956	0,0449	0,9928	
	100_100	100	50	50	98	49	49	0,0013	0,00041	0,00028	0,0013	0,0041	0,7634	0,0428	0,9973
	100_600	100	300	300	98	294	294	0,0013	0,0024	0,00171	0,0013	0,018	0,7760	0,0425	0,9987
	600_100	600	50	50	588	49	49	0,0079	0,00041	0,00028	0,0079	0,011	0,6315	0,0370	0,9946
	600_600	600	300	300	588	294	294	0,0079	0,0024	0,00171	0,0079	0,025	0,5980	0,0289	0,9943
	350_350	350	175	175	343	171,5	171,5	0,0046	0,0014	0,0010	0,0046	0,014	0,6603	0,0354	0,9963
	350_0	350	0	0	343	0	0	0,0046	0	0	0,0046	0,0046	0,6859	0,0461	0,9968
	350_700	350	350	350	343	343	343	0,0046	0,0028	0,0020	0,0046	0,0240	0,6789	0,0411	0,9985
	0_350	0	175	175	0	171,5	171,5	0	0,0014	0,0010	0	0,0097	0,9008	0,0381	0,9989
	700_350	700	175	175	686	171,5	171,5	0,0092	0,0014	0,0010	0,0092	0,019	0,6117	0,0387	0,9962
	600_300	600	150	150	588	147	147	0,0079	0,0012	0,00085	0,0079	0,016	0,6032	0,0401	0,9983
	0_600	0	300	300	0	294	294	0	0,0024	0,0017	0	0,017	0,8814	0,0383	0,9997
600_0	600	0	0	588	0	0	0,0079	0	0	0,0079	0,0079	0,6365	0,0453	0,9986	
CARBAMAZEPINA	0_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,8342	0,0782	0,9989	
	100_100	100	50	50	98	49	49	0,0013	0,00041	0,00028	0,0013	0,0041	0,7507	0,0471	0,9984
	100_600	100	300	300	98	294	294	0,0013	0,0024	0,0017	0,0013	0,018	0,7662	0,0432	0,9974
	600_100	600	50	50	588	49	49	0,0079	0	0,00028	0,0079	0,011	0,5972	0,0380	0,9915
	600_600	600	300	300	588	294	294	0,0079	0,0024	0,0017	0,0079	0,025	0,5917	0,0387	0,9871
	350_350	350	175	175	343	172	172	0,0046	0,0014	0,0010	0,0046	0,014	0,6783	0,0402	0,9933
	350_0	350	0	0	343	0	0	0,0046	0	0	0,0046	0,0046	0,7187	0,0382	0,9953
	350_700	350	350	350	343	343	343	0,0046	0,0028	0,0020	0,0046	0,024	0,6918	0,0294	0,9887
	0_300	0	175	175	0	171,5	171,5	0	0,0014	0,0010	0	0,0097	0,8338	0,0418	0,9923
	700_350	700	175	175	686	171,5	171,5	0,0092	0,0014	0,0010	0,0092	0,019	0,5209	0,0423	0,9898
	0_500	0	250	250	0	245	245	0	0,0020	0,0014	0	0,014	0,6270	0,0218	0,9855
	CAFEÏNA	0_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,7524	0,0344	0,9976
100_100		100	50	50	98	49	49	0,0013	0,00041	0,00028	0,0013	0,0041	0,6551	0,0265	0,9976
100_600		100	300	300	98	294	294	0,0013	0,0024	0,0017	0,0013	0,018	0,6807	0,0217	0,9979
600_100		600	50	50	588	49	49	0,0079	0,00041	0,00028	0,0079	0,011	0,4331	0,0274	0,9943
600_600		600	300	300	588	294	294	0,0079	0,0024	0,0017	0,0079	0,025	0,4562	0,0267	0,9933
350_350		350	175	175	343	171,5	171,5	0,0046	0,0014	0,0010	0,0046	0,014	0,5071	0,0258	0,9922
350_0		350	0	0	343	0	0	0,0046	0	0	0,0046	0,0046	0,5157	0,0322	0,9915
350_700		350	350	350	343	343	343	0,0046	0,0028	0,0020	0,0046	0,024	0,5182	0,0265	0,9969
0_350		0	175	175	0	172	172	0	0,0014	0,0010	0	0,0097	0,7762	0,0216	0,9984
700_350		700	175	175	686	172	172	0,0092	0,0014	0,0010	0,0092	0,019	0,3764	0,0156	0,9803
0_500		0	250	250	0	245	245	0	0,0020	0,0014	0	0,014	0,4681	0,0238	0,9974
600_1200		600	600	600	588	588	588	0,0079	0,0049	0,0034	0,0079	0,041	0,4592	0,0243	0,9946
MESCLA	0_0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,8403	0,0447	0,9987	
	100_100	100	50	50	98	49	49	0,0013	0,00041	0,00028	0,0013	0,0041	0,7562	0,0451	0,9983
	100_600	100	300	300	98	294	294	0,0013	0,0024	0,0017	0,0013	0,018	0,7605	0,0490	0,9975
	600_100	600	50	50	588	49	49	0,0079	0,0004	0,00028	0,0079	0,011	0,6005	0,0288	0,9925
	600_600	600	300	300	588	294	294	0,0079	0,0024	0,0017	0,0079	0,025	0,5979	0,0180	0,9913
	350_350	350	175	175	343	171,5	171,5	0,0046	0,0014	0,0010	0,0046	0,014	0,6278	0,0247	0,9783
	350_0	350	0	0	343	0	0	0,0046	0	0	0,0046	0,0046	0,6478	0,0369	0,9982
	350_700	350	350	350	343	343	343	0,0046	0,0028	0,0020	0,0046	0,024	0,6386	0,0243	0,9906
	0_350	0	175	175	0	171,5	171,5	0	0,0014	0,0010	0	0,0097	0,8221	0,0403	0,9982
	700_350	700	175	175	686	171,5	171,5	0,0092	0,0014	0,0010	0,0092	0,019	0,5962	0,0191	0,9905

8.2.2 Dades i simulacions dels experiments amb presència de sals en el model de principis bàsics

Taula 59. Dades de l'experiment 600_0

600_0					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	189	24,5160	0	5,5588	0,1622
5	103,76	21,6460	0,0833	3,0518	0,1432
10	72,16	-	0,1667	2,1224	-
15	48,02	17,0670	0,25	1,4124	0,1129
20	30,2	-	0,3333	0,8882	-
30	8,07	12,5900	0,5	0,2374	0,0833
45	0,3	10,7010	0,75	0,0088	0,0708
60	0	10,1650	1	0,0000	0,0672
90	0	9,2880	0,3850	0,0000	0,0614
120	0	8,9500	0,2999	0,0000	0,0592

Taula 60. Dades de l'experiment 0_600

0_600					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	189	25,5250	0	5,5588	0,1688
5	96,29	21,5320	0,0833	2,8321	0,1424
10	75,6	-	0,1667	2,2235	-
15	54,91	15,8120	0,25	1,6150	0,1046
20	41,98	-	0,3333	1,2347	-
30	18,71	10,0490	0,5	0,5503	0,0665
45	5,91	6,8840	0,75	0,1738	0,0455
60	1,16	5,2110	1	0,0341	0,0345
90	0	3,9300	0,3850	0,0000	0,0260
120	0	3,0300	0,2999	0,0000	0,0200

Taula 61. Dades de l'experiment 100_100

100_100					
Temps (min)	H ₂ O ₂ (mg/L)	TOC (mg/L)	Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	189	25,1170	0	5,5588	0,1662
5	102,33	22,2110	0,0833	3,0097	0,1469
10	77,61	-	0,1667	2,2826	-
15	57,79	16,4620	0,25	1,6997	0,1089
20	37,96	-	0,3333	1,1165	-
30	13,53	10,7660	0,5	0,3979	0,0712
45	1,88	8,3570	0,75	0,0553	0,0553
60	0	7,3060	1	0,0000	0,0483
90	0	6,4820	0,3850	0,0000	0,0429
120	0	6,3480	0,2999	0,0000	0,0420

Taula 62. Simulació de l'experiment 600_0

Temps (h)	H ₂ O ₂ (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0,0	5,5588	0,1622
8,798E-06	5,5587	0,1622
1,760E-05	5,5586	0,1622
2,639E-05	5,5584	0,1622
6,396E-05	5,5579	0,1622
1,015E-04	5,5574	0,1622
0,0001391	5,5568	0,1622
0,0001767	5,5563	0,1622
0,0002596	5,5550	0,1622
0,0003426	5,5537	0,1622
0,0004256	5,5524	0,1622
0,0005085	5,5510	0,1622
0,0005915	5,5496	0,1622
0,0007325	5,5471	0,1622
0,0008736	5,5446	0,1622
0,001015	5,5420	0,1622
0,001156	5,5393	0,1622
0,001297	5,5366	0,1622
0,001541	5,5320	0,1622
0,001785	5,5272	0,1622
0,002029	5,5224	0,1622
0,002272	5,5177	0,1622
0,002516	5,5129	0,1622
0,002855	5,5062	0,1622
0,003193	5,4995	0,1622
0,003532	5,4928	0,1621
0,003871	5,4862	0,1621
0,004209	5,4795	0,1621
0,004838	5,4672	0,1621
0,005467	5,4549	0,1620
0,006097	5,4426	0,1620
0,006726	5,4303	0,1619
0,007355	5,4181	0,1619

0,008751	5,3912	0,1617
0,01015	5,3644	0,1616
0,01154	5,3377	0,1614
0,01294	5,3112	0,1612
0,01433	5,2849	0,1610
0,01763	5,2233	0,1604
0,02092	5,1626	0,1598
0,02421	5,1025	0,1591
0,02750	5,0432	0,1583
0,03079	4,9845	0,1575
0,03648	4,8847	0,1560
0,04216	4,7869	0,1545
0,04785	4,6908	0,1528
0,05353	4,5966	0,1512
0,05922	4,5040	0,1495
0,06680	4,3834	0,1472
0,07438	4,2658	0,1450
0,08196	4,1512	0,1428
0,08955	4,0397	0,1406
0,09713	3,9311	0,1385
0,1076	3,7861	0,1357
0,1181	3,6466	0,1330
0,1285	3,5125	0,1304
0,1390	3,3836	0,1278
0,1495	3,2597	0,1254
0,1675	3,0575	0,1214
0,1856	2,8689	0,1177
0,2036	2,6929	0,1141
0,2217	2,5287	0,1108
0,2397	2,3755	0,1076
0,2639	2,1861	0,1037
0,2881	2,0131	0,10000
0,3122	1,8551	0,09656
0,3364	1,7106	0,09336
0,3606	1,5784	0,09036
0,4006	1,3836	0,08582
0,4406	1,2148	0,08175
0,4806	1,0683	0,07808
0,5206	0,9409	0,07477
0,5606	0,8298	0,07177
0,6006	0,7329	0,06905
0,6406	0,6480	0,06657
0,6806	0,5738	0,06431
0,7206	0,5086	0,06224
0,7606	0,4513	0,06035
0,8006	0,4009	0,05862
0,8406	0,3564	0,05702
0,8806	0,3172	0,05556
0,9206	0,2826	0,05420
0,9606	0,2519	0,05295
1,0006	0,2247	0,05179
1,0406	0,2007	0,05072
1,0806	0,1793	0,04972
1,1206	0,1603	0,04880
1,1606	0,1434	0,04794

1,2006	0,1284	0,04714
1,2406	0,1150	0,04639
1,2806	0,1030	0,04570
1,3206	0,09235	0,04505
1,3606	0,08283	0,04444
1,4006	0,07433	0,04387
1,4406	0,06672	0,04334
1,4806	0,05991	0,04284
1,5206	0,05383	0,04237
1,5606	0,04839	0,04193
1,6006	0,04352	0,04152
1,6406	0,03916	0,04113
1,6806	0,03523	0,04077
1,7206	0,03171	0,04043
1,7606	0,02855	0,04011
1,8006	0,02571	0,03980
1,8406	0,02315	0,03952
1,8806	0,02086	0,03925
1,9206	0,01880	0,03899
1,9606	0,01694	0,03876
2,0000	0,01529	0,03853

Taula 63. Simulació de l'experiment O_600

Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	5,5588	0,1688
8,798E-06	5,5587	0,1688
1,760E-05	5,5586	0,1688
2,639E-05	5,5584	0,1688
6,388E-05	5,5579	0,1688
0,0001014	5,5574	0,1688
0,0001389	5,5568	0,1688
0,0001763	5,5563	0,1688
0,0002592	5,5550	0,1688
0,0003420	5,5537	0,1688
0,0004248	5,5524	0,1688
0,0005076	5,5510	0,1688
0,0005904	5,5496	0,1688
0,0007314	5,5471	0,1688
0,0008725	5,5446	0,1688
0,001014	5,5420	0,1688
0,001155	5,5394	0,1688
0,001296	5,5367	0,1688
0,001539	5,5320	0,1688
0,001783	5,5273	0,1688
0,002027	5,5225	0,1688
0,002271	5,5177	0,1688
0,002514	5,5130	0,1688
0,002853	5,5063	0,1688
0,003192	5,4996	0,1688
0,003530	5,4930	0,1687
0,003869	5,4863	0,1687
0,004208	5,4797	0,1687

0,004836	5,4673	0,1687
0,005465	5,4551	0,1686
0,006094	5,4428	0,1686
0,006723	5,4306	0,1685
0,007352	5,4184	0,1685
0,008747	5,3915	0,1683
0,01014	5,3648	0,1682
0,01154	5,3382	0,1680
0,01293	5,3118	0,1678
0,01433	5,2855	0,1676
0,01763	5,2239	0,1670
0,02093	5,1631	0,1663
0,02423	5,1030	0,1656
0,02752	5,0436	0,1648
0,03082	4,9849	0,1640
0,03653	4,8850	0,1624
0,04223	4,7870	0,1608
0,04794	4,6907	0,1591
0,05364	4,5963	0,1574
0,05934	4,5036	0,1556
0,06696	4,3825	0,1533
0,07458	4,2645	0,1510
0,08220	4,1496	0,1487
0,08982	4,0376	0,1464
0,09743	3,9287	0,1442
0,1079	3,7835	0,1413
0,1184	3,6439	0,1384
0,1289	3,5096	0,1357
0,1394	3,3806	0,1331
0,1499	3,2567	0,1305
0,1680	3,0540	0,1264
0,1861	2,8650	0,1225
0,2042	2,6888	0,1188
0,2223	2,5243	0,1153
0,2405	2,3708	0,1120
0,2646	2,1817	0,1079
0,2888	2,0090	0,1040
0,3130	1,8512	0,1005
0,3372	1,7069	0,09713
0,3614	1,5749	0,09402
0,4014	1,3805	0,08930
0,4414	1,2122	0,08507
0,4814	1,0661	0,08126
0,5214	0,9389	0,07781
0,5614	0,8281	0,07469
0,6014	0,7314	0,07186
0,6414	0,6468	0,06929
0,6814	0,5726	0,06694
0,7214	0,5076	0,06480
0,7614	0,4504	0,06283
0,8014	0,4001	0,06103
0,8414	0,3558	0,05937
0,8814	0,3166	0,05784
0,9214	0,2820	0,05643
0,9614	0,2514	0,05513

1,0014	0,2243	0,05393
1,0414	0,2003	0,05281
1,0814	0,1790	0,05178
1,1214	0,1600	0,05082
1,1614	0,1432	0,04992
1,2014	0,1282	0,04909
1,2414	0,1148	0,04831
1,2814	0,1028	0,04759
1,3214	0,09218	0,04691
1,3614	0,08268	0,04628
1,4014	0,07419	0,04569
1,4414	0,06660	0,04513
1,4814	0,05981	0,04462
1,5214	0,05374	0,04413
1,5614	0,04831	0,04367
1,6014	0,04345	0,04324
1,6414	0,03909	0,04284
1,6814	0,03518	0,04246
1,7214	0,03166	0,04211
1,7614	0,02851	0,04177
1,8014	0,02567	0,04146
1,8414	0,02312	0,04116
1,8814	0,02083	0,04088
1,9214	0,01877	0,04062
1,9614	0,01692	0,04037
2,0000	0,01531	0,04014

Taula 64. Simulació de l'experiment 100_100

Temps (h)	H2O2 (mmol/L)	TOC (mmol/L)
0	5,5588	0,1662
8,798E-06	5,5587	0,1662
1,760E-05	5,5586	0,1662
2,639E-05	5,5584	0,1662
6,391E-05	5,5579	0,1662
0,0001014	5,5574	0,1662
0,0001389	5,5568	0,1662
0,0001765	5,5563	0,1662
0,0002593	5,5550	0,1662
0,0003422	5,5537	0,1662
0,0004251	5,5524	0,1662
0,0005080	5,5510	0,1662
0,0005908	5,5496	0,1662
0,0007319	5,5471	0,1662
0,0008729	5,5446	0,1662
0,001014	5,5420	0,1662
0,001155	5,5393	0,1662
0,001296	5,5367	0,1662
0,001540	5,5320	0,1662
0,001784	5,5273	0,1662
0,002027	5,5225	0,1662
0,002271	5,5177	0,1662
0,002515	5,5129	0,1662

0,002854	5,5063	0,1662
0,003192	5,4996	0,1662
0,003531	5,4929	0,1661
0,003870	5,4863	0,1661
0,004208	5,4796	0,1661
0,004837	5,4673	0,1661
0,005466	5,4550	0,1660
0,006095	5,4427	0,1660
0,006724	5,4305	0,1659
0,007353	5,4183	0,1659
0,008748	5,3914	0,1657
0,01014	5,3646	0,1656
0,01154	5,3380	0,1654
0,01293	5,3116	0,1652
0,01433	5,2853	0,1650
0,01763	5,2237	0,1644
0,02092	5,1629	0,1637
0,02422	5,1028	0,1630
0,02752	5,0435	0,1622
0,03081	4,9848	0,1614
0,03651	4,8849	0,1599
0,04221	4,7869	0,1583
0,04790	4,6908	0,1566
0,05360	4,5964	0,1549
0,05929	4,5038	0,1532
0,06690	4,3829	0,1509
0,07450	4,2650	0,1486
0,08210	4,1502	0,1464
0,08971	4,0384	0,1441
0,09731	3,9296	0,1420
0,1078	3,7845	0,1391
0,1183	3,6450	0,1363
0,1287	3,5108	0,1336
0,1392	3,3818	0,1310
0,1497	3,2579	0,1285
0,1678	3,0554	0,1244
0,1859	2,8666	0,1206
0,2040	2,6904	0,1169
0,2221	2,5261	0,1135
0,2402	2,3727	0,1103
0,2643	2,1834	0,1062
0,2885	2,0106	0,1024
0,3127	1,8527	0,09893
0,3369	1,7084	0,09564
0,3611	1,5763	0,09258
0,4011	1,3818	0,08793
0,4411	1,2133	0,08376
0,4811	1,0670	0,08000
0,5211	0,9397	0,07661
0,5611	0,8288	0,07354
0,6011	0,7320	0,07075
0,6411	0,6473	0,06822
0,6811	0,5731	0,06590
0,7211	0,5080	0,06379
0,7611	0,4508	0,06185

0,8011	0,4004	0,06008
0,8411	0,3560	0,05845
0,8811	0,3169	0,05694
0,9211	0,2822	0,05555
0,9611	0,2516	0,05427
1,0011	0,2245	0,05309
1,0411	0,2005	0,05199
1,0811	0,1791	0,05097
1,1211	0,1601	0,05002
1,1611	0,1433	0,04914
1,2011	0,1283	0,04832
1,2411	0,1149	0,04756
1,2811	0,1029	0,04684
1,3211	0,09226	0,04618
1,3611	0,08275	0,04555
1,4011	0,07426	0,04497
1,4411	0,06668	0,04443
1,4811	0,05990	0,04392
1,5211	0,05382	0,04344
1,5611	0,04839	0,04299
1,6011	0,04351	0,04257
1,6411	0,03913	0,04217
1,6811	0,03520	0,04180
1,7211	0,03168	0,04145
1,7611	0,02852	0,04112
1,8011	0,02568	0,04081
1,8411	0,02314	0,04052
1,8811	0,02085	0,04024
1,9211	0,01879	0,03998
1,9611	0,01694	0,03974
2,0000	0,01531	0,03951

