



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

TRABAJO DE FINAL DE GRADO

Grado en Ingeniería mecánica

CARACTERIZACIÓN COMPUTACIONAL DE FENÓMENOS DE TRANSPORTE A TRAVÉS DE MEMBRANAS



Memoria y Anexos

Autor/a: Ramón Boneu Sola
Director/a: Ricardo Torres Camara
Co-Director/a: Julio López Rodríguez
Convocatoria: Junio 2022

Resumen

La electrodiálisis (ED) es un proceso electroquímico con membranas que permite la separación de iones disueltos de una disolución acuosa gracias a la acción de un campo eléctrico generado al aplicar una diferencia de potencial. Para poder separar correctamente estos iones presentes en la disolución se usan membranas de intercambio iónico, que presentan una carga positiva o negativa y solo permiten el paso de iones de carga opuesta a la de la membrana. El campo eléctrico generado permite a los cationes desplazarse hasta el cátodo y a los aniones desplazarse hasta el ánodo. A medida que los iones se desplazan se encuentran con las membranas selectivas de intercambio iónico. Gracias a este proceso es posible desionizar disoluciones, siendo la desalinización el caso que ocupa este trabajo.

En este contexto, este proyecto tiene como objetivo analizar el efecto y ver en qué grado se incrementa la eficiencia del proceso de ED cuando se introducen unos elementos encargados de mejorar el transporte convectivo en el eje transversal al flujo, los *spacers*, o en castellano espaciadores. Para realizar este trabajo se ha empleado el software de elementos finitos COMSOL Multiphysics, mediante el cual se comparó una configuración en ED con *spacers* con una sin para ver como afectaban.

Los resultados han mostrado que la influencia de los *spacers* es significativa. Concretamente, se ha podido demostrar como los *spacers* intensifican en gran medida el proceso de ED al añadir una convección forzada transversal al flujo que favorece mucho el mezclado de la disolución, aun estando en un flujo laminar.

Resum

L'electrodiàlisi (ED) és un procés electroquímic amb membranes que permet la separació d'ions dissolts d'una dissolució aquosa gràcies a l'acció d'un camp elèctric generat en aplicar una diferència de potencial. Per a poder separar correctament aquests ions presents en la dissolució s'utilitzen membranes d'intercanvi iònic, que presenten una càrrega positiva o negativa i només permeten el pas d'ions de càrrega oposada a la de la membrana. El camp elèctric generat permet als cations desplaçar-se fins al càtode i als anions desplaçar-se fins a l'ànode. A mesura que els ions es desplacen es troben amb les membranes selectives d'intercanvi iònic. Gràcies a aquest procés és possible desionitzar dissolucions, sent la dessalinització el cas que ocupa aquest treball.

En aquest context, aquest projecte té com a objectiu analitzar l'efecte i veure en quin grau s'incrementa l'eficiència del procés d'ED quan s'introdueixen uns elements encarregats de millorar el transport convectiu en l'eix transversal al flux, els *spacers*, o en català espaiadors. Per fer aquest treball s'ha emprat el programari d'elements finits COMSOL Multiphysics, mitjançant el qual es va comparar una configuració en ED amb *spacers* amb una sense per a veure com afectaven.

Els resultats han mostrat que la influència dels *spacers* és significativa. Concretament, s'ha pogut demostrar com els *spacers* intensifiquen en gran manera el procés d'ED en afegir una convecció forçada transversal al flux que afavoreix molt el barrejat de la dissolució, fins i tot estant en un flux laminar.

Abstract

Electrodialysis (ED) is an electrochemical process with membranes that allows the separation of dissolved ions from an aqueous solution thanks to the action of an electric field generated by applying a potential difference. In order to correctly separate these ions present in the solution, ion exchange membranes are used, which have a positive or negative charge and only allow the passage of ions of opposite charge to that of the membrane. The electric field generated allows the cations to move to the cathode and the anions to move to the anode. As the ions move, they encounter the selective ion exchange membranes. Thanks to this process it is possible to deionize solutions, desalination being the case of this work.

In this context, this project aims to analyse the effect and to see to what extent the efficiency of the ED process is increased when elements are introduced to improve the convective transport in the transverse axis of the flow, the spacers. The finite element software COMSOL Multiphysics has been used to perform this work, by means of which an ED configuration with spacers was compared with one without spacers to see how they affected the ED process.

The results have shown that the influence of spacers is significant. Specifically, it has been shown that spacers greatly intensify the ED process by adding forced transverse convection to the flow greatly enhancing the mixing of the solution, even in a laminar flow.



Agradecimientos

Me gustaría empezar este trabajo de final de grado dando las gracias a mi director, Ricardo Torres Camara, por la ayuda, la orientación y la atención prestada en el transcurso del trabajo, y por permitirme aprender más sobre un área que no conocía apenas. También me gustaría dar las gracias a mi co-director, Julio López Rodríguez, por los consejos y recomendaciones que me ha ido proporcionando al realizar la memoria y que han sido de gran ayuda. Me gustaría, además, hacer una mención a Joan Grau Barceló que también me ayudó en repetidas ocasiones, y a Tamara Elizabeth León Oviedo por dedicar parte de su tiempo en ayudarnos con ciertas dudas que nos surgieron.

Por último, quiero agradecer a mi familia, a mis amigos y a mi pareja todo el apoyo que me han proporcionado, no solo durante este trabajo, sino durante toda la carrera. Sin ellos, nada de esto habría sido posible. Gracias.



Glosario

Palabras y abreviaciones anglosajonas

<i>Anion Exchange membrane (AEM)</i>	Membrana de intercambio aniónico
<i>Cation Exchange membrane (CEM)</i>	Membrana de intercambio catiónico
<i>Electrodialysis (ED)</i>	Electrodiálisis
<i>Evaluation Group</i>	Grupo de evaluación
<i>Inflow</i>	Entrada de flujo
<i>Inlet</i>	Entrada
<i>Mapped</i>	Mapeado
<i>Mixing</i>	Mezclado
<i>Outflow</i>	Salida de flujo
<i>Outlet</i>	Salida
<i>Periodic Flow condition</i>	Condición de flujo periódico
<i>Spacer</i>	Espaciador
<i>Stack</i>	Pila
<i>Step</i>	Paso
<i>Surface average</i>	Media de la superficie
<i>Velocity field</i>	Campo de velocidades
<i>Water splitting</i>	Descomposición del agua



Índice

RESUMEN	I
RESUM	II
ABSTRACT	III
AGRADECIMIENTOS	V
GLOSARIO	VII
Palabras y abreviaciones anglosajonas	vii
1. INTRODUCCIÓN	15
1.1 Objetivos del trabajo	16
1.2 Alcance del trabajo	16
2. MARCO TEÓRICO	19
2.1. Electrodiálisis.....	19
2.1.1. Membranas de intercambio iónico	20
2.1.2. Canales y disoluciones	21
2.1.3. Ánodo y Cátodo	22
2.1.4. Spacers	22
2.2. Electrodiálisis con membranas bipolares	23
2.3. Fenómenos de transporte	25
2.3.1. Ecuación de la convección-difusión.....	25
2.3.2. Ecuaciones de Navier-Stokes.....	26
2.3.3. Ecuación de Nernst-Planck	28
2.3.4. Conservación de la carga: electroneutralidad y Poisson.....	29
3. METODOLOGÍA	33
3.1. Modelización computacional.....	33
3.1.1. Procedimiento seguido.....	33
3.1.2. Consideraciones realizadas.....	34
3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con <i>spacers</i> en 3D	35
3.2. Validación experimental	66
4. CONTINUACIÓN DEL PROYECTO	71
5. ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	72

CONCLUSIONES	73
PRESUPUESTO	75
BIBLIOGRAFÍA	79
ANEXOS	83
A1. Modelización de una celda de ED en 2D sin <i>spacers</i>	83
Introducción	83
Objetivo	83
Parámetros de entrada	83
Geometría del objeto de estudio	84
Condiciones de contorno	85
Mallado	95
Resolución en COMSOL	99
Resultados	101
A2. Modelización de los <i>spacers</i> con forma cilíndrica	105
Introducción	105
Objetivo	105
Parámetros de entrada	106
Geometría del objeto de estudio	106
Condiciones de contorno	107
Mallado	113
Resolución en COMSOL	118
Resultados	119
A3. Modelización de los <i>spacers</i> con formas cónicas y cilíndricas	126
Introducción	126
Objetivo	126
Parámetros de entrada	126
Geometría del objeto de estudio	127
Condiciones de contorno	129
Mallado	134
Resolución en COMSOL	137
Resultados	138
A4. Simulación del mezclado en un canal sin <i>spacers</i>	145
Introducción	145
Objetivo	145
Parámetros de entrada	145

Geometría del objeto de estudio.....	146
Condiciones de contorno.....	146
Mallado	152
Resolución en COMSOL	154
Resultados.....	155

Índice de figuras

Figura 1. Esquema del funcionamiento de una célula de electrodiálisis (Fuente: [3]).	20
Figura 2. Membrana de intercambio catiónico basada en el poliestireno y divinilbenceno con grupos sulfónicos (Fuente: [3]).	21
Figura 3. Membrana de intercambio aniónica basada en el poliestireno y divinilbenceno con grupos amino cuaternarios (Fuente: [3]).	21
Figura 4. Spacers que se encuentran en el equipo de electrodiálisis de la universidad (Fuente: elaboración propia).	23
Figura 5 Esquema del proceso de water splitting en una membrana bipolar (Fuente: [4]).	24
Figura 6. Esquema del funcionamiento de una célula de electrodiálisis con membranas bipolares (Fuente:[5]).	24
Figura 7. Representación acotada de un filamento de los spacers (Fuente: [16]).	37
Figura 8. Distribución de los spacers en una unidad repetitiva (Fuente: elaboración propia).	37
Figura 9. Modelización del canal central (Fuente: elaboración propia).	38
Figura 10. Geometría del caso 3D con spacers (Fuente: elaboración propia).	38
Figura 11. Vista frontal de la geometría 3D (Fuente: elaboración propia).	39
Figura 12. Cálculo de A_{ch} (Fuente: elaboración propia).	39
Figura 13. Cálculo de L (Fuente: elaboración propia).	40
Figura 14. Distribución exacta de los canales y membranas (Fuente: elaboración propia).	41
Figura 15. Visualización de los semicanales (Fuente: elaboración propia).	42

Figura 16. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).	43
Figura 17. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).	43
Figura 18 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).	43
Figura 19. Selección del dominio del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).	43
Figura 20. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	44
Figura 21. Entradas del flujo (Fuente: elaboración propia).	44
Figura 22. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).	45
Figura 23. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).	45
Figura 24. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	46
Figura 25. Aplicación de la primera condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	46
Figura 26. Aplicación de la segunda condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	47
Figura 27. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).	47
Figura 28. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).	48
Figura 29. Definición de la movilidad (Fuente: elaboración propia).	48
Figura 30. Propiedades de la CEM (Fuente: elaboración propia).	49
Figura 31. Propiedades restantes de la CEM (Fuente: elaboración propia).	50
Figura 32. Aplicación de la CEM (Fuente: elaboración propia).	50
Figura 33. Propiedades de la AEM (Fuente: elaboración propia).	51
Figura 34. Aplicación de la AEM (Fuente: elaboración propia).	51

Figura 35. Condiciones de entrada del flujo de disolución (Fuente: elaboración propia).	51
Figura 36. Potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).	52
Figura 37. Borde de aplicación del potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).	52
Figura 38. Condición periódica en el módulo de electroquímica (Fuente: elaboración propia).	53
Figura 39. Aplicación de la condición periódica (Fuente: elaboración propia).	53
Figura 40. Malla usada (Fuente: elaboración propia).	54
Figura 41. Calibración y dimensionado de la malla (Fuente: elaboración propia).	54
Figura 42. Malla generada (Fuente: elaboración propia).	55
Figura 43. Study 1 para la resolución del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia).	56
Figura 44. Study 2 (Fuente: elaboración propia).	56
Figura 45. Campo de velocidades del flujo en el canal central (Fuente: elaboración propia).	57
Figura 46. Campo de velocidades en los semicanales (Fuente: elaboración propia).	57
Figura 47. Campo de velocidades del canal central visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).	58
Figura 48. Campo de velocidades de los semicanales visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).	58
Figura 49. Distribución del potencial eléctrico a lo largo del sistema de estudio (Fuente: elaboración propia).	59
Figura 50. Concentración de Na^+ en el canal central (Fuente: elaboración propia).	60
Figura 51. Detalle del gradiente de concentración de Na^+ en el canal central (Fuente: elaboración propia).	60

Figura 52. Concentración de Na^+ en los semicanales (Fuente: elaboración propia).	_____	61
Figura 53. Detalle del gradiente de concentración de Na^+ en los semicanales (Fuente: elaboración propia).	_____	61
Figura 54. Concentración de Cl^- en el canal central (Fuente: elaboración propia).	_____	62
Figura 55. Gradiente de concentración de Cl^- en el canal central (Fuente: elaboración propia).	_	62
Figura 56. Flujo debido a la migración eléctrica de Na^+ (Fuente: elaboración propia).	_____	63
Figura 57. Flujo debido a la migración eléctrica de Cl^- (Fuente: elaboración propia).	_____	64
Figura 58. Diferencias entre las tecnologías SLA, DLP y LFS (Fuente: [21]).	_____	67
Figura 59. Impresora Form 3+ que hay en el taller mecánico común de la UPC.	_____	67
Figura 60. Módulo de curado (izquierda) y lavado (derecha) de la impresora 3D.	_____	68
Figura 61. BX53M de Olympus (Fuente: [23])	_____	69
Figura 62. Geometría del caso 2D con ED (Fuente: elaboración propia).	_____	84
Figura 63. Distribución exacta de los canales y membranas (Fuente: elaboración propia).	_____	85
Figura 64. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).	_____	85
Figura 65. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).	_____	86
Figura 67. Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).	_____	86
Figura 66. Selección del dominio del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).	_____	86
Figura 68. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	_____	87
Figura 69. Entradas del flujo (Fuente: elaboración propia).	_____	87

Figura 70. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).	88
Figura 71. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).	88
Figura 72. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	89
Figura 73. Contorno de aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	89
Figura 74. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).	89
Figura 75. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).	90
Figura 76. Definición de la movilidad (Fuente: elaboración propia).	91
Figura 77. Propiedades de la CEM (Fuente: elaboración propia).	91
Figura 78. Propiedades restantes de la CEM (Fuente: elaboración propia).	92
Figura 79. Aplicación de la CEM (Fuente: elaboración propia).	92
Figura 80. Propiedades de la AEM (Fuente: elaboración propia).	93
Figura 81. Aplicación de la AEM (Fuente: elaboración propia).	93
Figura 82. Condiciones de entrada del flujo de disolución (Fuente: elaboración propia).	93
Figura 83. Potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).	94
Figura 84. Punto de aplicación del potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).	94
Figura 85. Condición periódica en el módulo de electroquímica (Fuente: elaboración propia).	95
Figura 86. Aplicación de la condición periódica (Fuente: elaboración propia).	95
Figura 87. Características de la distribución 1 (Fuente: elaboración propia).	96
Figura 88. Contorno de aplicación de la distribución 1 (Fuente: elaboración propia).	96

Figura 89. Contornos de aplicación de la distribución 2 (Fuente: elaboración propia).	96
Figura 90. Características de la distribución 2 (Fuente: elaboración propia).	96
Figura 91. Contornos de aplicación de la distribución 3 (Fuente: elaboración propia).	97
Figura 92. Características de la distribución 3 (Fuente: elaboración propia).	97
Figura 93. Contornos de aplicación de la distribución 4 (Fuente: elaboración propia).	97
Figura 94. Características de la distribución 4 (Fuente: elaboración propia).	97
Figura 95. Características de la distribución 5 (Fuente: elaboración propia).	98
Figura 96. Contornos de aplicación de la distribución 5 (Fuente: elaboración propia).	98
Figura 97. Malla generada (Fuente: elaboración propia).	98
Figura 98. Detalle de la malla (Fuente: elaboración propia).	99
Figura 99. Study 1 (Fuente: elaboración propia).	100
Figura 100. Study 2 (Fuente: elaboración propia).	100
Figura 101. Campo de velocidades del flujo en los canales (Fuente: elaboración propia).	101
Figura 102. Gradiente de velocidades (Fuente: elaboración propia).	101
Figura 103. Potencial eléctrico (Fuente: elaboración propia).	102
Figura 104. Concentración de Na ⁺ (Fuente: elaboración propia).	103
Figura 105. Gradiente de concentración de Na ⁺ (Fuente: elaboración propia).	103
Figura 106. Geometría del canal con spacers cilíndricos (Fuente: elaboración propia).	107
Figura 107. Vista más detallada de los spacers (Fuente: elaboración propia).	107

Figura 108. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).	108
Figura 109. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).	108
Figura 110. Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).	108
Figura 111. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	109
Figura 112. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	109
Figura 113. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).	110
Figura 114. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).	110
Figura 115. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	111
Figura 116. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	111
Figura 117. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).	111
Figura 118. Propiedades del transporte (Fuente: elaboración propia).	112
Figura 119. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	113
Figura 120. Opción de Multiphysics (Fuente: elaboración propia).	113
Figura 121. Módulos acoplados (Fuente: elaboración propia).	113
Figura 122. Diagrama de convergencia de S_outlet en función del número de nodos (Fuente: elaboración propia).	114
Figura 123. Diagrama de convergencia de S_outlet en función del tiempo de cálculo (Fuente: elaboración propia).	114
Figura 124. Physics controlled mesh (Fuente: elaboración propia).	115
Figura 125. Características del desplegable Size 1 (Fuente: elaboración propia).	116

Figura 126. Malla generada (Fuente: elaboración propia) _____	117
Figura 127. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia). _____	117
Figura 128. Mallado sin refinamiento (Fuente: elaboración propia). _____	118
Figura 129. Step 1 (Fuente: elaboración propia). _____	119
Figura 130. Step 2 (Fuente: elaboración propia). _____	119
Figura 131. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia). _____	120
Figura 132. Campo de velocidades visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia). _____	120
Figura 133. Líneas de corriente del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia) _____	121
Figura 134. Presiones originadas en el canal (Fuente: elaboración propia). _____	122
Figura 135. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia). _____	123
Figura 136. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia). _____	123
Figura 137. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia). _____	124
Figura 138. Líneas de corriente representando el flujo total (Fuente: elaboración propia). _____	124
Figura 139. Geometría del canal con spacers con forma cónica y cilíndrica (Fuente: elaboración propia). _____	128
Figura 140. Vista más detallada de los spacers (Fuente: elaboración propia). _____	128
Figura 141. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia). _____	129
Figura 142. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia). _____	129
Figura 143 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	130

Figura 144. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	130
Figura 145. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	130
Figura 146. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).	131
Figura 147. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).	131
Figura 148. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	132
Figura 149. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).	132
Figura 150. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).	132
Figura 151. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).	133
Figura 152. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).	134
Figura 153. Opción de Multiphysics (Fuente: elaboración propia).	134
Figura 154. Módulos acoplados (Fuente: elaboración propia).	134
Figura 155. Características del desplegable Size 1 (Fuente: elaboración propia).	135
Figura 156. Malla generada (Fuente: elaboración propia)	136
Figura 157. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia).	136
Figura 158. Mallado sin refinamiento (Fuente: elaboración propia).	137
Figura 159. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).	138
Figura 160. Campo de velocidades visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).	139
Figura 161. Líneas de corriente del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia)	139
Figura 162. Presiones originadas en el canal (Fuente: elaboración propia).	140

Figura 163. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia). _____	141
Figura 164. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia). _____	141
Figura 165. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia). _____	142
Figura 166. Gradiente de concentraciones visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia). _____	142
Figura 167. Líneas de corriente representando el flujo total (Fuente: elaboración propia). _____	143
Figura 168. Geometría del canal sin spacers (Fuente: elaboración propia). _____	146
Figura 169. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia). _____	147
Figura 170. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia). _____	147
Figura 171 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	147
Figura 172. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	148
Figura 173. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	148
Figura 174. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	149
Figura 175. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	149
Figura 176. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia). _____	149
Figura 177. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia). _____	150
Figura 178. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia). _____	150
Figura 179. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia). _____	151
Figura 180. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia). _____	152

Figura 181. Calibración y dimensionado de la malla (Fuente: elaboración propia). _____ 153

Figura 182. Malla generada (Fuente: elaboración propia) _____ 153

Figura 183. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia). _____ 154

Figura 184. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia). 155

Figura 185. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia). _____ 156

Figura 186. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia). _____ 156

Figura 187. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).
_____ 157

Figura 188. Gradiente de concentraciones visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).
_____ 157

Índice de tablas

Tabla 1. Emisiones de CO ₂ producidas en kg. _____	72
Tabla 2. Presupuesto de los recursos humanos. _____	75
Tabla 3. Presupuesto del software. _____	76
Tabla 4. Presupuesto del uso del superordenador. _____	76
Tabla 5. Presupuesto total de este trabajo. _____	77

1. Introducción

El estudio de equipos y máquinas que trabajan con fluidos mediante técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD, del inglés *Computational Fluid Dynamics*) ha aumentado de manera exponencial en los últimos 20 años, hecho ligado al aumento en la capacidad de cálculo que han tenido los procesadores de los ordenadores. Gracias a estos adelantos en la tecnología del *hardware* se puede modelizar casi cualquier dispositivo que requiera un análisis de CFD con el objetivo de conocer mejor su funcionamiento o de introducir mejoras o cambios sin tener que destinar recursos económicos a prototipos. En este contexto, este trabajo se centra en realizar análisis fluidodinámicos de los canales en un equipo de electrodiálisis, para ver y entender el comportamiento del fluido que por ahí circula, y como se podría mejorar la eficiencia de este equipo mediante CFD.

La electrodiálisis es un proceso electroquímico con membranas que permite la separación iones disueltos de una solución acuosa gracias a la acción de un campo eléctrico. Este campo se genera al conectar ambos extremos del *stack* de electrodiálisis a una diferencia de potencial. Para poder separar correctamente estos iones presentes en la solución se usan membranas de intercambio iónico, presentan una carga positiva o negativa y solo permiten el paso de cationes o aniones de acuerdo a la carga de la membrana, aunque en la práctica se ha comprobado que no son del todo perfectas. Este proceso se realiza en una región llamada celda, la cual está formada por canales, por donde circula el electrolito, y membranas de intercambio iónico, catiónicas y aniónicas alternadas. Los extremos de la celda están conectados a un ánodo y un cátodo que generan el campo eléctrico que permite a los cationes desplazarse hasta el cátodo y a los aniones desplazarse hasta el ánodo. A medida que estas partículas se desplazan se encuentran con las membranas selectivas de intercambio iónico, las cuales según su carga dejan o no pasar a dichos iones. Las membranas de intercambio catiónico, al estar cargadas negativamente, únicamente permiten el paso de cationes, mientras que las membranas de intercambio aniónico, al estar cargadas positivamente, solo permiten el paso de aniones. Debido a esto, en algunos canales se diluye la disolución y en los adyacentes a este aumenta la concentración de los iones.

Una de las aplicaciones más comunes de la electrodiálisis (y en la que se centra este trabajo) es la de desalinizar el agua. Como es evidente, esta aplicación es una de las más importantes, puesto que, aproximadamente, solo el 2,5 % del agua del planeta es dulce [1]. Por lo tanto, encontrar métodos que puedan desalinizar el agua y maximizar su eficiencia es una prioridad real en el contexto climático en el que nos encontramos, en el cual, el riesgo de sequía ha aumentado considerablemente en los últimos años [2].

Antes de proseguir con la explicación de los objetivos y el alcance del trabajo, hay que remarcar la relación de este trabajo de final de grado hacia otros de la misma área de estudio. Esta memoria tiene como uno de los propósitos de ser continuar el trabajo de investigación y modelización que el autor Pol Lezcano Romero llevó a cabo en el cuatrimestre de otoño del año 2022 con el título de *Modelización matemática y simulación computacional de equipos de electrodiálisis con membranas bipolares*.

1.1 Objetivos del trabajo

Cómo se ha mencionado anteriormente, este trabajo tiene como objetivo realizar análisis fluidodinámicos de los canales de un equipo de electrodiálisis mediante CFD, y más concretamente, mediante el programa COMSOL Multiphysics. Cómo se puede apreciar el área de estudio es muy parecida a la del trabajo de final de grado del autor Pol Lezcano, pero se diferencia en que este trabajo se centra, mayormente, en la parte referente a la mecánica de fluidos en vez de la electroquímica que existe en el proceso de electrodiálisis. Centrándose en la mecánica de fluidos, este trabajo analizará la función y comportamiento de unos elementos que se hallan en los canales por donde circula el fluido: los *spacers*, o en castellano separadores. La función de este elemento es mejorar el transporte convectivo en el eje transversal al flujo, mejorando la eficiencia del proceso de electrodiálisis, y, además, aportar solidez estructural.

El objetivo, por lo tanto, es la modelización y el estudio computacional de estos separadores en un equipo de electrodiálisis con dimensiones parecidas del que se dispone en la universidad para observar cómo influyen en el proceso de electrodiálisis y comprobar en qué grado se incrementa la eficiencia de dicho proceso.

1.2 Alcance del trabajo

El área de aplicación de este proyecto, como ya se ha explicado, es el campo de la electrodiálisis, es decir, este trabajo está pensado para que sus resultados sean comprobados y aplicados en los equipos de electrodiálisis. Aunque como hay una parte considerable de fluidodinámica, también podría adaptarse a otros procesos que, por características similares, encajen con los modelos estudiados en esta memoria.

Este trabajo se centrará en estudiar computacionalmente el comportamiento del fluido, en este caso agua, que circula por la célula de electrodiálisis a través de los separadores y cómo estos afectan al proceso de electrodiálisis. Por lo tanto, el estudio del proceso de electrodiálisis o su modelización no

entran dentro del alcance de este trabajo final de grado, puesto que ya ha sido realizado anteriormente por otros autores.

Finalmente, se hará un análisis del impacto ambiental que pueda tener este trabajo con el objetivo de concienciar sobre el efecto de este proyecto en el ámbito del consumo energético y sobre sus emisiones equivalentes de CO₂(g). Además, se extraerán conclusiones sobre los resultados obtenidos para valorar en que grado y cómo se han cumplido los objetivos de este trabajo y se efectuará un presupuesto sobre los costes que este trabajo conlleva, teniendo en cuenta el precio por hora del ingeniero, los costes de computación y el *software* usado.

2. Marco teórico

A continuación, se realizará una explicación de los conceptos teóricos que se hallan presentes en el área de estudio de este trabajo. Estos conceptos, como se ha mencionado brevemente antes, son los fenómenos de transporte y los procesos electroquímicos, en este caso la electrodiálisis.

2.1. Electrodiálisis

La electrodiálisis (ED) es un proceso electroquímico que consiste en la separación de iones de una disolución acuosa, gracias a un campo eléctrico y a membranas selectivas de iones. El campo eléctrico es generado al conectar los extremos de la célula de ED a un ánodo y un cátodo, creando una diferencia de potencial. Dicho campo genera una fuerza eléctrica que atrae los cationes al cátodo y los aniones al ánodo. Para poder desionizar la disolución correctamente se colocan las membranas de intercambio iónico de manera alternada, que presentan una carga positiva o negativa, de manera que solo permiten el paso de cationes (si están cargadas negativamente) o aniones (si están cargadas positivamente). Aunque teóricamente debería ser así, en la realidad las membranas no son completamente selectivas y pueden permitir cierto paso de cargas del mismo signo. La disolución acuosa circula por los canales, los cuales se encuentran entre las membranas, mientras que el transporte de iones tiene lugar tanto en los canales como en las membranas.

El equipo de ED que se dispone en la universidad, y que es el que se analizará, trabaja con una disolución de NaCl, por lo tanto, con iones Na^+ y Cl^- . Para poder entender mejor este proceso, en la Figura 1 se muestra un esquema de un equipo de ED.

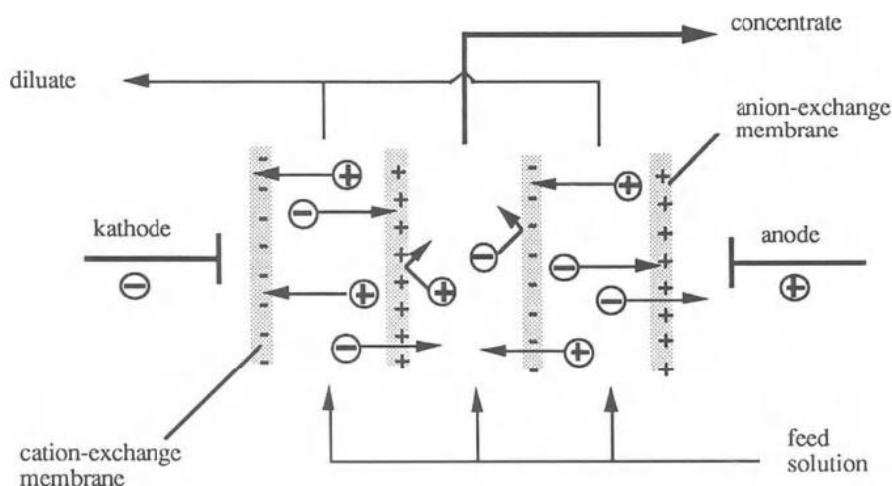


Figura 1. Esquema del funcionamiento de una célula de electrodiálisis (Fuente: [3]).

Si se observa la Figura 1, se pueden apreciar las diferentes partes que conforman la célula de electrodiálisis, estas son: el cátodo y el ánodo, las membranas de intercambio iónico y los canales (en donde se encuentran los *spacers*, que no aparecen en la ilustración). A continuación, se explicarán con más detalle cada una de estas partes. La alimentación entraría en todos los canales del *stack* y, en función de la disposición de las membranas de intercambio iónico, se distingue entre canales de diluido y concentrado. Debido al efecto del campo eléctrico, los cationes tienden a transportarse hacia el cátodo y los aniones hacia el ánodo. De esta forma, en el canal de diluido, los iones se transportan preferencialmente hacia el compartimento del concentrado, mientras que en este los iones no se transportan debido a las cargas de las membranas.

2.1.1. Membranas de intercambio iónico

Una membrana se puede definir como una barrera selectiva entre dos fases, la cual deja pasar ciertos elementos, pero bloquea el paso a otros. Una manera de clasificar las membranas, y quizás la más importante, es su origen. De esta forma, las membranas pueden ser biológicas, como las membranas plasmáticas de las células, o sintéticas (principalmente poliméricas), creadas para separar compuestos en la industria o en laboratorios.

Las membranas de intercambio iónico son un tipo de membranas sintéticas que se encuentran cargadas eléctricamente debido a la presencia de grupos funcionales ionizados y, en consecuencia, permiten solo el paso de cationes o aniones, dependiendo de la carga de la membrana. Los dos tipos de membranas de intercambio iónico son:

- Membranas de intercambio catiónico (en inglés, cation exchange membrane, CEM): son aquellas que se encuentran cargadas negativamente y, por lo tanto, permiten el paso de cationes y bloquean el paso a los aniones. La carga negativa de la membrana se consigue, por ejemplo, mediante

grupos de ácidos sulfónicos ($R-SO_3^-$) o carboxílicos ($R-COO^-$) unidos a un polímero [3]. En la Figura 2 se puede ver un ejemplo de la composición de una membrana selectiva de cationes, formada por grupos sulfónicos:

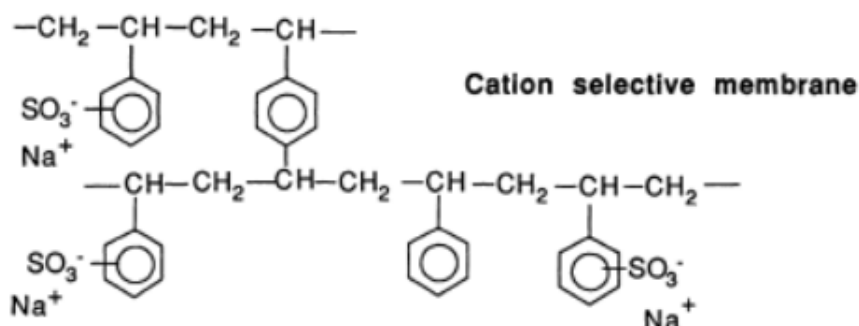


Figura 2. Membrana de intercambio catiónico basada en el poliestireno y divinilbenceno con grupos sulfónicos (Fuente: [3]).

- Membranas de intercambio aniónico (en inglés, anion exchange membrane, AEM): son aquellas que se encuentran cargadas positivamente y, por lo tanto, permiten el paso de aniones y bloquean el paso a los cationes. La carga positiva de las membranas se consigue, por ejemplo, mediante grupos amino cuaternarios unidos a un polímero (R_4-N^+) [3]. En la Figura 3 se puede ver un ejemplo de la composición de una membrana selectiva de aniones con grupos amino cuaternarios:

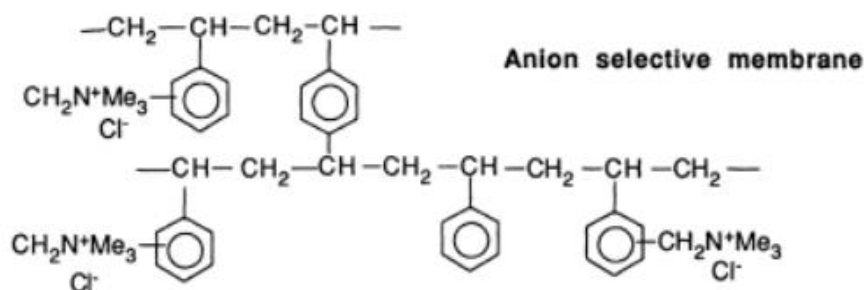


Figura 3. Membrana de intercambio aniónica basada en el poliestireno y divinilbenceno con grupos amino cuaternarios (Fuente: [3]).

2.1.2. Canales y disoluciones

Como se ha mencionado anteriormente, la disolución acuosa entra por los canales, donde a cada lado hay una membrana de intercambio iónico distinta. Dependiendo de que membrana tiene en cada lado, el canal albergará la solución concentrada o diluida, tal como se puede apreciar en la Figura 1.

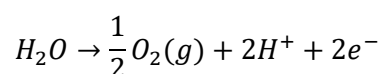
La disolución que circula por los canales es acuosa, formada generalmente por una salmuera (NaCl).

Debido a la presencia de iones disueltos, la disolución es capaz de conducir la corriente eléctrica. La conductividad de ésta, es decir, la capacidad que tiene para dejar pasar el corriente a través de ella, depende sobre todo de la temperatura y la salinidad (a mayor salinidad, mayor conductividad eléctrica).

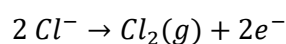
2.1.3. Ánodo y Cátodo

Estos dos elementos son los encargados de crear la diferencia de potencial que permite generar el campo eléctrico que transporta los iones disueltos hacia el ánodo o cátodo dependiendo de su carga. Como se mencionaba anteriormente, los cationes, bajo la acción del campo eléctrico, se desplazan hacia el cátodo y los aniones hacia el ánodo. Con el fin de transportar la carga eléctrica a la propia celda, se hace circular una disolución con cierta conductividad por los compartimentos adyacentes al ánodo y al cátodo (generalmente sulfato de sodio, Na_2SO_4). Es en el ánodo y en el cátodo, en los electrodos, donde se produce la electrolisis del agua, en donde se descompone en oxígeno e hidrógeno. Cuando se realiza el proceso de electrolisis en el agua salada, las reacciones que ocurren en el ánodo y cátodo son las siguientes [3]:

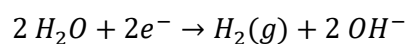
-En el ánodo, tiene lugar la oxidación del agua, en dónde se produce oxígeno ($\text{O}_2(g)$) y protones (H^+), mientras que se liberan electrones:



Uno de los problemas principales cuando se trabajan con salmueras en base NaCl , es un posible transporte de cloruros hacia el compartimento del electrodo, ya que se podría generar cloro gas ($\text{Cl}_2(g)$).



-En el cátodo, se produce la reducción del agua, en dónde se libera hidrógeno (H_2) y iones hidroxilos (OH^-) en una reacción donde se ganan electrones:



2.1.4. Spacers

Los *spacers*, o espaciadores en castellano, son unos elementos con forma de malla entrecruzada que se encuentran en los canales cuya función es favorecer el transporte convectivo en la dirección transversal al flujo, con el objetivo de favorecer el mezclado en un flujo laminar (*mixing*). Además de favorecer el mezclado, los *spacers* aportan solidez estructural a la célula, pues la membrana está en

contacto con los *spacers* y se apoya en ellos. A continuación, en la Figura 4 se muestran los *spacers* que se disponen en el equipo experimental de la universidad:



Figura 4. *Spacers* que se encuentran en el equipo de electrodiálisis de la universidad (Fuente: elaboración propia).

2.2. Electrodiálisis con membranas bipolares

Aunque el proceso de la electrodiálisis con membranas bipolares no es el objeto de estudio de este trabajo, puesto que el objetivo es analizar la función de los *spacers* en la electrodiálisis simple, se realizará una breve introducción a esta con el propósito de poder observar las diferencias que existen entre los dos procesos.

La diferencia principal entre los dos tipos de electrodiálisis es la implementación de las membranas bipolares. Dichas membranas están formadas por la unión de una membrana de intercambio aniónico y una de intercambio catiónico (Figura 5). Esta unión de dos membranas de intercambio iónico es la responsable de que se produzca el *water splitting*, proceso que consiste en la descomposición del agua (H_2O) en protones (H^+) e hidroxilos (OH^-) bajo la acción de un potencial eléctrico [3].

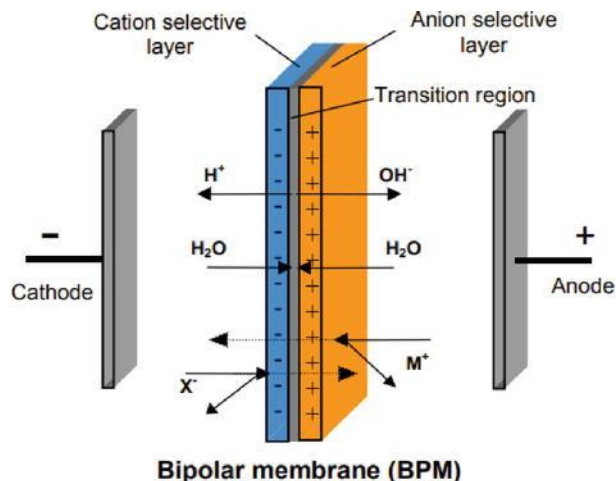


Figura 5 Esquema del proceso de water splitting en una membrana bipolar (Fuente: [4]).

En la Figura 6 se puede apreciar como la incorporación de las membranas bipolares crea dos tipos de canales nuevos al lado de las membranas bipolares: los canales ácidos y los básicos. La generación de estos ácidos y estas bases es el efecto principal que resulta del *water splitting* y la característica principal de la electrodiálisis con membranas bipolares. De esta manera, la electrodiálisis con membranas bipolares no sólo desala la salmuera inicial, sino que también permite producir ácidos y bases.

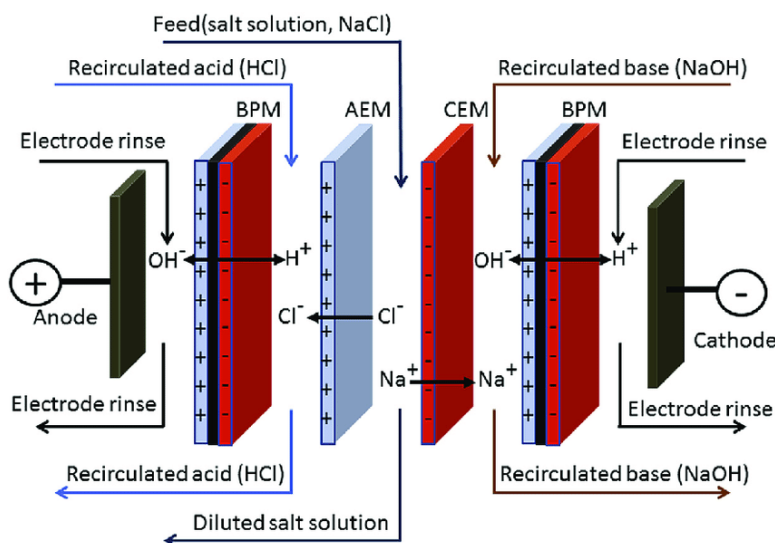


Figura 6. Esquema del funcionamiento de una célula de electrodiálisis con membranas bipolares (Fuente:[5]).

2.3. Fenómenos de transporte

El concepto de fenómenos de transporte hace referencia al estudio de la variación de una cierta magnitud, como puede ser la masa, la energía o la cantidad de movimiento, entre otras, en un dominio determinado. Este estudio se realiza mediante las denominadas leyes de conservación, las cuales se pueden aplicar a diferentes magnitudes y postulan que en un sistema concreto la variación de dicha magnitud es igual a la diferencia de la cantidad entrante menos la cantidad saliente de esa magnitud, más la cantidad generada por una posible fuente aportadora de esa magnitud. Estas leyes de conservación se aplican sobre todo en la masa, la energía, la cantidad de movimiento y la carga eléctrica [6].

2.3.1. Ecuación de la convección-difusión

La ecuación que permite expresar el transporte, es decir, la difusión y convección, de una propiedad es la ecuación de convección-difusión. La convección se puede definir como el transporte de una magnitud en un flujo, y la difusión como el flujo de una magnitud de una zona con una alta concentración a otra zona con una concentración más baja de esa magnitud. La ecuación de convección-difusión permite establecer un balance de la transferencia de una propiedad, tal como la masa o la energía. Si realizamos el balance de transferencia sobre la propiedad que nos interesa para este caso, es decir, la masa, la variable de interés pasa a ser la concentración y la ecuación que refleja dicho proceso es la Ec. (1) [7], [8]:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (c_i \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D_i \nabla c_i) + R_i \quad (1)$$

Donde c_i es la concentración de la especie i , D_i es la difusividad de la especie i , \mathbf{u} es el campo de velocidades y R_i son las posibles fuentes o sumideros de la especie i . Empezando por la izquierda, el primer término indica la variación de la concentración a lo largo del tiempo, el segundo término indica la variación de la concentración debido a la convección, el tercer término indica la variación de la concentración debido a la difusión, y el último término indica la creación o eliminación de la concentración [7].

De esta ecuación se derivan muchas otras que involucran procesos difusivos o convectivos, como la ley de Fick o la ecuación de Nernst-Planck. Por lo tanto, esta ecuación resulta necesaria si se quiere modelizar el transporte en los canales de una célula de electrodiálisis, puesto que en estos canales ocurren procesos de difusión, ya que se producen gradientes de concentración de las sustancias diluidas, y convección, puesto que se produce un transporte del fluido en el flujo [9].

2.3.2. Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes (Ec. (2) y Ec. (3)) son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales en función del tiempo que describen el movimiento de un fluido viscoso. Dichas ecuaciones establecen la ley de conservación para la masa y la cantidad de movimiento y permiten obtener el campo de velocidades del flujo estudiado cuando se resuelven bajo unas ciertas condiciones [6], [10].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right] + \mathbf{F} \quad (3)$$

Donde, ρ es la densidad, t es el tiempo, \mathbf{u} es el campo de velocidades, el término $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ es la aceleración local, $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ es la aceleración convectiva, ∇p es el gradiente de presiones, $\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T$ es la velocidad de deformación, $\frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}$ es la compresibilidad del flujo y \mathbf{F} son las posibles fuerzas de volumen que pueda haber.

Sobre estas ecuaciones es necesario realizar varias consideraciones para poder llegar a la ecuación que describe correctamente el flujo en los canales del equipo. En primer lugar, el análisis que se efectúa es estacionario, es decir, que no depende del tiempo, por lo tanto, las derivadas parciales respecto del tiempo, así como la aceleración local, son igual a cero. En segundo lugar, como el fluido que circula por los canales es un líquido (disolución acuosa) el flujo es incompresible, es decir, la densidad se mantiene constante en todo el flujo. En último lugar, si el flujo está desarrollado al entrar, y no hay variaciones en la geometría, la aceleración convectiva también es cero, pues no hay variaciones de la aceleración respecto el espacio. Estas tres condiciones matemáticamente se expresan de la siguiente manera [6], [10]:

Empezando por la Ec. (2) llamada ecuación de conservación de la masa, si se aplican las dos primeras condiciones mencionadas anteriormente, se obtiene lo siguiente:

- En primer lugar, si el proceso es estacionario, este no depende del tiempo, es decir, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ y, por lo tanto:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

- Si el flujo es incompresible, $\rho = cte$ y en consiguiente la ecuación resultante es la siguiente [10]:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (5)$$

La tercera condición mencionada es la siguiente:

- Si el flujo está desarrollado y no hay variaciones en la geometría, el término convectivo de la aceleración se anula, es decir $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = 0$. Cabe destacar que el único caso en el que no hay variaciones en la geometría es cuando se analizan los canales sin *spacers*.

Si estas condiciones se aplican ahora en la Ec. (3), llamada ecuación de conservación de la cantidad de movimiento, se obtiene lo siguiente:

- En primer lugar, si el proceso es estacionario, este no depende del tiempo, es decir, $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = 0$. Y, si el flujo es incompresible, como se ha visto en la Ec. (5), $\nabla \cdot \vec{u} = 0$. Por lo tanto, bajo estas consideraciones, la ecuación que describe el flujo estacionario e incompresible en los canales con *spacers* del equipo de ED es la siguiente:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \mathbf{F} \quad (6)$$

- Cuando se analizan los canales sin *spacers*, hay que añadir la tercera condición, y la ecuación que describe el flujo pasa a ser la siguiente:

$$0 = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] + \mathbf{F} \quad (7)$$

Para poder simular correctamente el flujo en COMSOL, hay que determinar si este se encuentra en estado laminar o turbulento. Para ello hay que calcular el número de Reynolds y, dependiendo del valor obtenido, se sabrá en qué estado se encuentra. Por lo tanto, el tipo de flujo viene dado por las condiciones en las que trabaja el equipo de ED. Para calcular el número de Reynolds, aplicado a una tubería de sección rectangular, hay que usar la Ec. (8) [10]:

$$Re = \frac{\rho c D_h}{\mu} \quad (8)$$

$$D_h = \frac{4LW}{2(L + W)} \quad (9)$$

Donde, ρ es la densidad en kg/m^3 , c es la velocidad en m/s , D_h es el diámetro hidráulico en m , que se calcula mediante la Ec. (9), donde L y W son los lados de la sección rectangular, y μ es la viscosidad dinámica en $\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$.

Sustituyendo por los valores que se usaran en las simulaciones, se obtiene lo siguiente:

$$Re = \frac{1000 \cdot 0,07 \cdot \left(\frac{4 \cdot 9,5 \cdot 10^{-4} \cdot 0,0039}{2(9,5 \cdot 10^{-4} + 0,0039)} \right)}{0,001} = 106,95$$

Por lo tanto, como el número de Reynolds se encuentra muy por debajo de 2300, se puede asumir que el flujo es laminar. Un valor superior a 2300 indicaría que el flujo está en transición a un estado turbulento. Por encima de 4000 el flujo es turbulento [10].

2.3.3. Ecuación de Nernst-Planck

Las ecuaciones presentadas anteriormente, como se ha mencionado, son totalmente necesarias cuando se quiere estudiar un proceso en el cual ocurren fenómenos de difusión y/o convección, pero si además se desea incluir el efecto de iones disueltos en un fluido y movidos por una fuerza eléctrica, hay que usar la ecuación de Nernst-Planck ((10)). Esta ecuación es una de las de continuidad existentes y establece una conservación de la masa, en la cual, el flujo molar total de una especie diluida tiene que ser igual a la contribución de las componentes difusivas, convectivas y migrativas (referentes a la electromigración) en dicho flujo [11].

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{v}c_i - D_i \nabla c_i - z_i u_i F c_i \nabla \phi \quad (10)$$

Donde el término \mathbf{J}_i representa el flujo total molar para una componente i . El primer término después del igual representa la componente de convección del flujo \mathbf{J}_i ($\mathbf{v}c_i$), el segundo término la componente de difusión ($D_i \nabla c_i$) y el último término la migración ($z_i u_i F c_i \nabla \phi$); siendo \mathbf{v} el campo de velocidades, c_i la concentración molar de la componente i , D_i el coeficiente de difusión de la componente i , ∇c_i el gradiente de concentración de la componente i , z_i el número de carga de la componente i , u_i es la movilidad de la componente i , F la constante de Faraday (96485,3 C/mol) y ϕ el potencial eléctrico.

Además, se asume que, durante el proceso de ED, la sal está totalmente diluida en la disolución. Gracias a esta asunción es posible relacionar el coeficiente de difusión, la constante de los gases i la temperatura con la movilidad de la especie mediante la relación de Einstein (Ec.(11)) [9]:

$$u_i = \frac{D_i}{R_g T} \quad (11)$$

Donde R_g es la constante de los gases (8,314 J/mol·K) y T es la temperatura absoluta.

La ecuación de Nernst-Planck aplica tanto a los canales como a las membranas.

2.3.4. Conservación de la carga: electroneutralidad y Poisson

El principio de electroneutralidad establece que en una solución acuosa la suma de la concentración de aniones será igual a la suma de la concentración de cationes [12]. De manera que, un aumento en la concentración de una de las especies iónicas, se asociará con un aumento de la especie iónica opuesta, ya que están interrelacionadas [13].

En el caso de la ED, para poder relacionar la distribución de la carga eléctrica con el campo eléctrico que se produce es necesario usar la Ley de Gauss, una de las cuatro leyes de Maxwell del electromagnetismo. La ley de Gauss postula que el flujo del campo eléctrico que atraviesa una superficie cerrada es proporcional a la carga eléctrica que hay contenida por esa superficie (Ec. (12)) [14]:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (12)$$

Donde ϕ es potencial eléctrico, ρ es la densidad de carga, ϵ_0 es la permisividad del vacío y ϵ_r es la permisividad relativa del medio. La densidad de carga eléctrica, a su vez, se puede expresar de acuerdo a la (Ec. (13)):

$$\rho = F \sum_{i=1}^{N_c} z_i c_i \quad (13)$$

Sustituyendo la anterior expresión en la Ec. (12), se obtiene la ecuación de Poisson (Ec. (14)) [11]:

$$\nabla^2 \phi + \frac{F}{\epsilon_0 \epsilon_r} \sum_{i=1}^{N_c} z_i c_i = 0 \quad (14)$$

Una vez obtenida la ecuación de Poisson, es necesario encontrar además la ecuación que permite establecer la condición de electroneutralidad. Para ello, primeramente, hay que buscar la ecuación que representa el balance de las cargas en una solución y añadir el término correspondiente a la ecuación de Poisson [11]:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = -\nabla \cdot \mathbf{j} = -\nabla \cdot \mathbf{j}^{\text{conv}} - \nabla \cdot \mathbf{j}^{\text{dif}} + \nabla k \cdot \nabla \phi + k \nabla^2 \phi \quad (15)$$

$$k = \frac{F^2}{R_g T} \sum_{i=1}^{N_c} D_i c_i z_i^2 \quad (16)$$

Donde \mathbf{j} es la densidad de corriente.

Si se considera que se está analizando una zona en equilibrio, se pueden despreciar los tres primeros términos. Sustituyendo además la ecuación de Poisson en la Ec. (15) se obtiene lo siguiente [11]:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = k \nabla^2 \phi = -k \frac{\rho}{\epsilon} \quad (17)$$

Donde k se puede calcular mediante la Ec. (16) y, además, se puede relacionar con ϵ mediante la Ec. (18):

$$\tau_D = \frac{\epsilon}{k} = \frac{\epsilon R_g T}{2cF^2 D} = \frac{l_D^2}{D} \quad (18)$$

Ahora sustituyendo la Ec. (18) en la Ec. (17) se consigue la Ec. (19):

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = -\frac{\rho}{\tau_D} \quad (19)$$

Si de la Ec. (18) se aísla l_D se obtiene que:

$$l_D = \sqrt{\frac{\epsilon R_g T}{2cF^2}} \quad (20)$$

Donde D es el coeficiente de difusión y l_D es la longitud de Debye, la cual es una medida que indica la longitud en la cual las cargas generan un apantallamiento del campo eléctrico. Si dicha longitud es muy pequeña, se puede aproximar a 0, y en consiguiente, se deduce la condición de electroneutralidad [11]:

$$\rho = \tau_D (-\nabla \cdot \mathbf{j}^{\text{conv}} - \nabla \cdot \mathbf{j}^{\text{dif}} + \nabla k \cdot \nabla \phi) = 0 \quad (21)$$

Sustituyendo ρ en la ecuación anterior:

$$\sum_{i=1}^{N_c} z_i c_i = 0 \quad (22)$$

Siendo la Ec. (22) la condición de electroneutralidad [9], [11].

La densidad de corriente del electrolito se calcula usando la ley de Faraday, sumando las contribuciones de los flujos molares y multiplicado por la carga de las especies, pero sin tener en cuenta el término convectivo, ya que desaparece gracias a la condición de electroneutralidad [9]:

$$i = F \sum_{i=1}^n z_i (-D_i \nabla c_i - z_i u_i F c_i \nabla \phi) \quad (\text{Ec. } 23)$$

Donde i es la densidad de corriente (A/m^2).

Para calcular la movilidad y la distribución del potencial del electrolito es necesario usar la Ec. (11) y la ecuación de conservación de corriente [9]:

$$\nabla \cdot i = 0 \quad (24)$$

Como se mencionaba anteriormente en el apartado de Nernst-Planck, se considera que las membranas son perfectamente selectivas, es decir, las membranas catiónicas solo permiten el paso de cationes y las aniónicas solo permiten el paso de aniones y todas ellas son ideales. Como resultado de esta consideración, los coeficientes de difusión de los co-iones (misma carga que la membrana) no se tienen en cuenta. Además, se considera que las membranas tienen una conductividad eléctrica constante y que son impermeables al agua [9]. En estas condiciones, para definir la densidad de corriente en las membranas es necesario usar la teoría secundaria de la distribución [9]:

$$i = -\sigma \nabla \phi \quad (25)$$

Donde σ es la conductividad eléctrica de la membrana permeable con los iones (S/m).

La consideración que las membranas son ideales significa que la concentración de los iones en las membranas es uniforme y mucho más grande que la concentración en el fluido. Por lo tanto, para calcular la caída de potencial a través de las membranas basta con aplicar la Ley de Ohm (Ec. (25)). Aunque esta consideración permite simplificar notablemente la modelización, cabe destacar que el proceso real no siempre ocurre así, ya que las membranas pueden perder su capacidad de selectividad con concentraciones muy elevadas [9].

Por último, es necesario, además, añadir la caída de potencial de Donnan, la cual se origina a raíz de las discontinuidades de carga en el límite entre la membrana y el fluido. La ecuación de la caída de potencial de Donnan se muestra a continuación [9]:

$$\phi_s = \phi_m + \frac{RT}{F} \ln \left(\frac{a_{i,m}}{a_{i,s}} \right) \quad (26)$$

Donde los subíndices m y s hacen referencia a membrana y solución, respectivamente. Los términos $a_{i,m}$ y $a_{i,s}$ son la actividad permeable iónica de la membrana y el electrolito, respectivamente. Además, se considera que, en la solución diluida, la solución es ideal y la actividad iónica es igual a la concentración correspondiente [9].

Como últimas consideraciones, hace falta añadir que este modelo está diseñado para un caso con temperatura constante. Esta condición solo se puede mantener si el voltaje aplicado no es excesivamente grande. También se ha asumido que todos los canales tienen las mismas condiciones

hidrodinámicas, aunque la realidad no sea así, ya que la viscosidad aumenta en aquellos canales donde hay más concentración, y eso provoca distintas condiciones hidrodinámicas (aunque dicho aumento no sea significativo). Por último, los fenómenos de ensuciamiento e incrustación no se han tenido en cuenta [9].

3. Metodología

3.1. Modelización computacional

Se puede entender por modelización computacional el proceso que consiste en adaptar un problema físico real en uno más simple que pueda ser resuelto, mediante programas especializados para la simulación, por un ordenador. En este trabajo, para la modelización computacional se ha usado COMSOL Multiphysics 6.0, que permite, mediante la utilización de elementos finitos, aplicar diversas ramas de la física a un mismo problema y ver la interacción que tienen entre ellas. Por este motivo es el simulador idóneo para modelizar un equipo de ED, ya que incorpora fenómenos relacionados con la mecánica de fluidos y con la electroquímica.

Para poder modelizar correctamente una situación real, hay que ser conscientes de las limitaciones que existen en cuanto a la computación. No se puede modelizar cualquier problema y esperar que funcione, puesto que los ordenadores tienen una capacidad de procesamiento y una memoria limitada. Es por estos motivos que es muy importante simplificar, en la medida de lo posible, los problemas que se están estudiando. Cuando se simplifica un problema real para modelizarlo computacionalmente, hay que seguir ciertos pasos:

- Hay que indicar todos los parámetros de entrada necesarios y descartar aquellos que no lo son.
- Es necesario, generalmente, simplificar la geometría del objeto que se está estudiando.
- Hay que escoger detenidamente qué condiciones de contorno establecer, pues de ello, principalmente, depende que se consigan los resultados deseados o no.
- Hay que realizar una malla acorde con el problema, es decir, si se necesitan resultados precisos hay que usar una malla fina.
- Se tiene que escoger de qué manera resolver la simulación, esto es, el orden en el que hay que resolver las físicas existentes, decidir si se quieren hacer barridos paramétricos o refinamientos de malla, entre otros.

3.1.1. Procedimiento seguido

Como el objetivo de este trabajo es estudiar la influencia de los *spacers* en un equipo de electrodiálisis, primero se tuvieron que modelizar estos elementos. Se crearon unos *spacers* con forma cilíndrica y se analizó el campo de velocidades que ahí se generaba. Posteriormente, se encontró un ejemplo, proporcionado por COMSOL, en el que se usaba el coeficiente de varianza para medir la eficacia en el mezclado en un dispositivo de mezclado para flujos laminares. Como había muchas similitudes entre

nuestro caso y el propuesto por el ejemplo, se decidió emplear la varianza como medidor del mezclado en los *spacers* que se había generado. Concretamente, se calculaba la varianza de la concentración a la salida y se dividía entre la varianza de la concentración a la entrada. El coeficiente obtenido de esta operación (S_{outlet}) indica en que grado se han mezclado estas dos zonas y aporta información sobre qué tipo de *spacers* mezcla mejor [15].

La fórmula de la varianza aplicada a la concentración se muestra en la Ec. (27) [15].

$$s_x = \frac{\int_{K_x} (c - \bar{c})^2 dA}{\int_{K_x} dA} \quad (27)$$

Donde c es la concentración, \bar{c} es la concentración media de la sustancia y K_x es el plano perpendicular al flujo en el punto x . Una vez calculada la varianza a la entrada y a la salida, el coeficiente que informa de la calidad del *mixing* a la salida se puede calcular mediante la Ec. (28) [15].

$$S_{outlet} = \frac{S_{outlet}}{S_{inlet}} \quad (28)$$

El coeficiente S_{outlet} para un proceso con un mezclado perfecto sería de cero, y un valor de 1 indicaría que no se ha mezclado en absoluto. En los Anexos se muestra todo el procedimiento relacionado con la eficiencia de mezclado de los *spacers*.

Poco después, se encontró un artículo que realizaba análisis fluidodinámicos sobre distintos *spacers* comerciales con una geometría basada en conos y cilindros, así que se decidió evaluar su capacidad de mezclado. De los posibles tamaños que tenían estos *spacers* se escogió el que más se aproximaba a las medidas de la geometría del trabajo del autor Pol Lezcano. Se efectuaron análisis de convergencia sobre la malla, para saber cuál era la más adecuada en función de las necesidades y de los tiempos de cálculo que estas originaban. Finalmente, después de un proceso de comparación y selección, se incorporaron estos últimos *spacers* a un caso con ED en 3D y los resultados se compararon con el mismo caso, pero sin *spacers*. Esta última simulación es la que se presenta a continuación, mientras que las demás se encuentran, también explicadas, en los anexos.

3.1.2. Consideraciones realizadas

Para la simulación que se presenta a continuación, se realizaron una serie de consideraciones, algunas referentes a las ecuaciones que gobiernan estos sucesos y que ya han sido mencionadas en el marco teórico, y otras relacionadas con la simplificación del problema. Estas consideraciones son:

- El flujo es laminar, tal como se mostró anteriormente, el número de Reynolds es suficientemente pequeño y, por lo tanto, se puede asumir esta consideración.

- La disolución acuosa de NaCl es incompresible.
- Las membranas de intercambio iónico son perfectamente selectivas, es decir, las membranas de intercambio catiónico solo permiten el paso a los cationes y bloquean el paso a los aniones, y viceversa.
- El agua no puede circular por las membranas, estas son impermeables.
- Las membranas no llegan a tocar los *spacers*, aunque en la realidad sea así. En su lugar, se deja un espacio muy pequeño. Esto es debido a las irregularidades y zonas conflictivas que se forman si entran en contacto.

3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D

3.1.1.1. Introducción

En este apartado se mostrará la modelización de una celda con *spacers* en 3D. La geometría y dimensiones de los *spacers* están basadas en las proporcionadas por un artículo que realizaba análisis fluidodinámicos en *spacers* comerciales [16]. La modelización de la celda está basada en un ejemplo proporcionado por COMSOL Multyphysics sobre la desalinización en el proceso de ED [17]. Se han modificado algunos parámetros para adaptarlos al caso que se quiere estudiar. Las características principales del objeto de estudio son:

- La geometría del modelo es en 3D.
- Se trabaja con una disolución de NaCl.
- No se analiza un *stack* entero, tan solo una unidad repetitiva, es decir, una unidad que se puede ir repitiendo tantas veces como se quiera para formar un *stack*.
- Para resolver el ejemplo se efectúan dos estudios: uno que resuelve el flujo laminar y el otro que resuelve la distribución de las concentraciones de Na⁺ y Cl⁻.
- Los *spacers* tienen una mezcla de sección cilíndrica y cónica.

3.1.1.2. Objetivo

El objetivo de esta simulación es modelizar un caso de ED con *spacers* en los canales y comparar los resultados con un caso sin *spacers*, mostrado en el Anexo. Aunque el caso sin *spacers* es en 2D, se puede comparar perfectamente con el 3D, ya que no hay elementos que perturben el flujo y, en consiguiente, no depende de la profundidad que añadiría una tercera dimensión. Una vez comparados los resultados, se podrán extraer las conclusiones sobre la influencia de los *spacers*.

3.1.1.3. Parámetros de entrada

Los parámetros usados para realizar la simulación han estado los siguientes:

Geometría:

En la Figura 7 se puede apreciar a que corresponde cada parámetro en un filamento de los *spacers*.

- Grosor del canal (D_{tot}) = 0.95 mm
- Grosor de la membrana (L_{mem}) = 0.62 mm
- Longitud de la celda (L) = 19.66 mm
- Profundidad de la celda (A_{ch}) = 3.93 mm
- Longitud del cilindro grande ($L1$) = 0.983 mm
- Longitud del cono grande ($L2$) = 0.557 mm
- Longitud del cilindro pequeño ($L3$) = 0.358 mm
- Longitud del cono pequeño ($L4$) = 0.34 mm
- Longitud del cilindro medio ($L5$) = 0.542 mm
- Diámetro mayor ($D1$) = 0.447 mm
- Diámetro menor ($D2$) = 0.263 mm
- Longitud total de una unidad de *spacer* (L_{tot}) = 2.78 mm

Flujo:

- Velocidad media ($U0$) = 7 cm/s

Especies:

- Difusividad del Na^+ (D_{Na}) = $2.5 \cdot 10^{-9}$ m²/s
- Difusividad del Cl^- (D_{Cl}) = $2 \cdot 10^{-9}$ m²/s
- Concentración de carga en la membrana (c_{Mem}) = 1000 mol/m³
- Concentración a la entrada de Na^+ y Cl^- (c_{Cl_0}) = 500 mol/m³
- Diferencia de potencial (V_{tot}) = 1,5 V

3.1.1.4. Geometría del objeto de estudio

Como se ha mencionado en la Introducción, la geometría y medidas de los *spacers* están basadas en un artículo que realizó análisis fluidodinámicos en *spacers* comerciales [16]. En los Anexos se detalla el proceso por el cual se escogió la geometría del artículo en vez de una geometría basada en cilindros. En la Figura 7 se muestra una representación acotada de un filamento de los *spacers* [16].

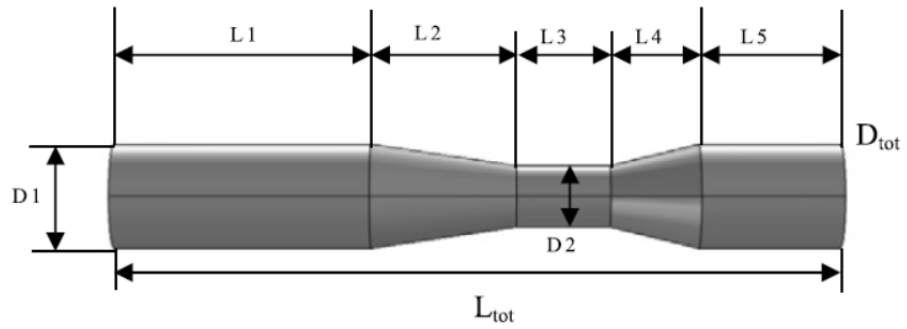


Figura 7. Representación acotada de un filamento de los spacers (Fuente: [16]).

Los *spacers* se colocan formando 90° entre ellos. En la Figura 8 se puede apreciar cómo están distribuidos los *spacers* mediante la representación de una unidad repetitiva de estos.

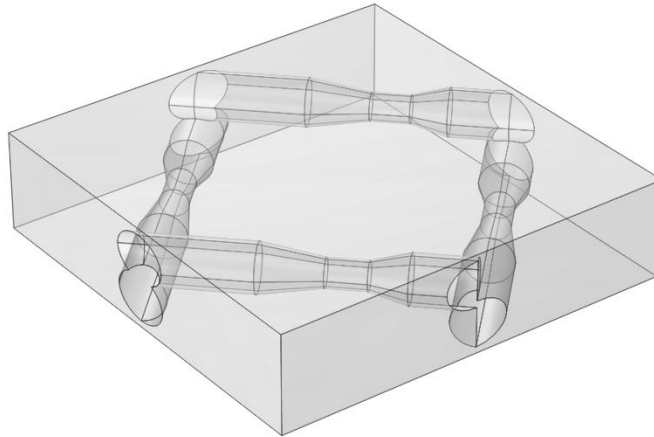


Figura 8. Distribución de los spacers en una unidad repetitiva (Fuente: elaboración propia).

Encadenando cinco unidades como las de la Figura 8 se consigue el canal central que se quiere modelizar, tal como se puede ver en la Figura 9.

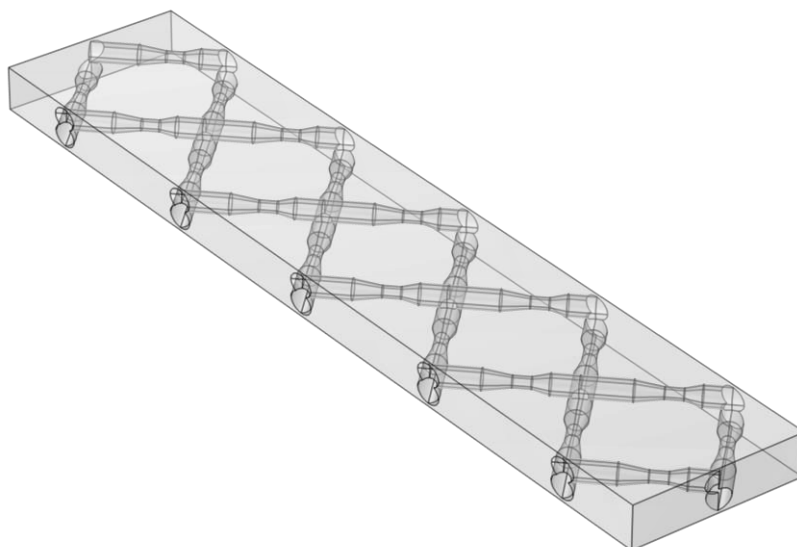


Figura 9. Modelización del canal central (Fuente: elaboración propia).

La geometría, como ya se ha comentado, es en 3D y está conformada por un canal central, dos semicanales y dos membranas de intercambio iónico. En la Figura 10 se muestra la geometría que se analizará con las dimensiones principales.

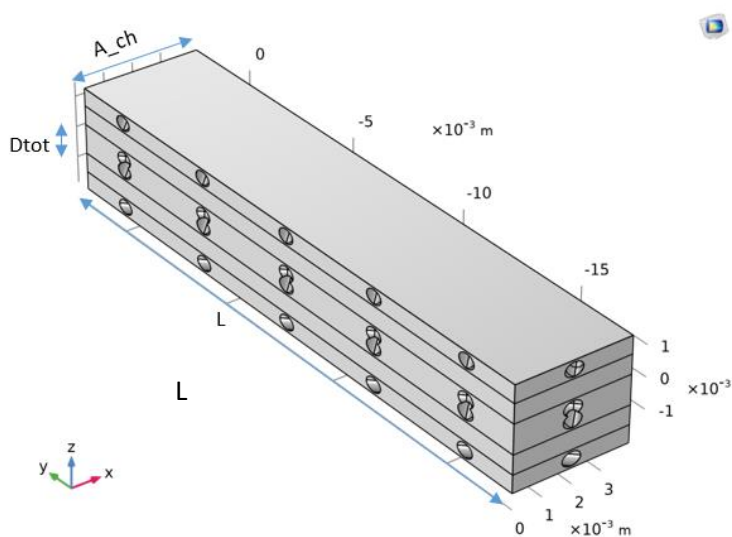


Figura 10. Geometría del caso 3D con spacers (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 11 se muestra una vista más detallada de la parte frontal de la geometría con las dimensiones correspondientes.

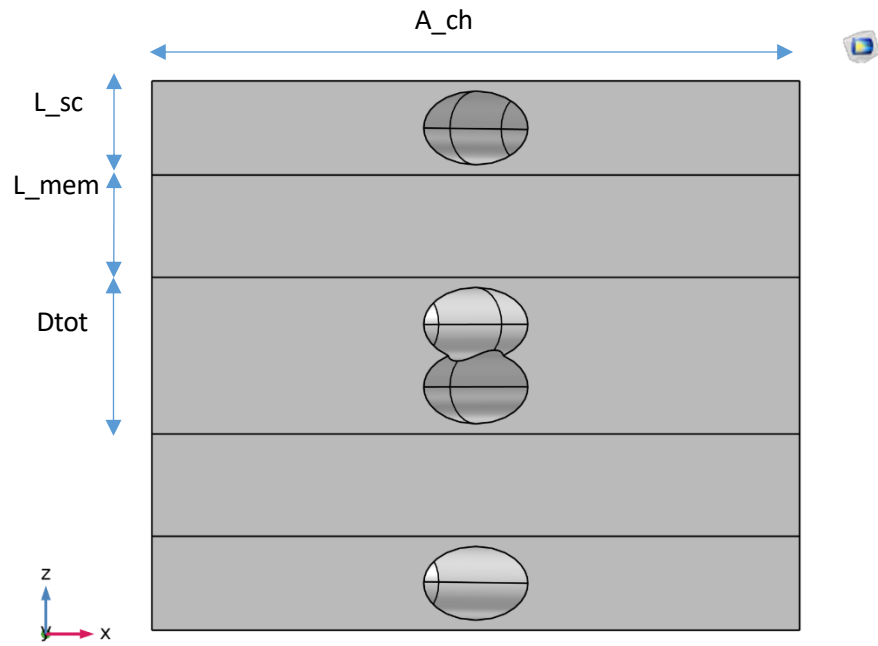


Figura 11. Vista frontal de la geometría 3D (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 11, L_{sc} es el grosor del semicanal, que se calcula sumando el diámetro mayor (D_1) más dos veces el hueco que hay entre *spacer* y membrana ($61,525 \mu\text{m}$). El parámetro A_{ch} se puede considerar como la base de un triángulo cuyos lados son dos *spacers* que forman un ángulo de 90° entre ellos, en la Figura 12 se puede visualizar dicha explicación.

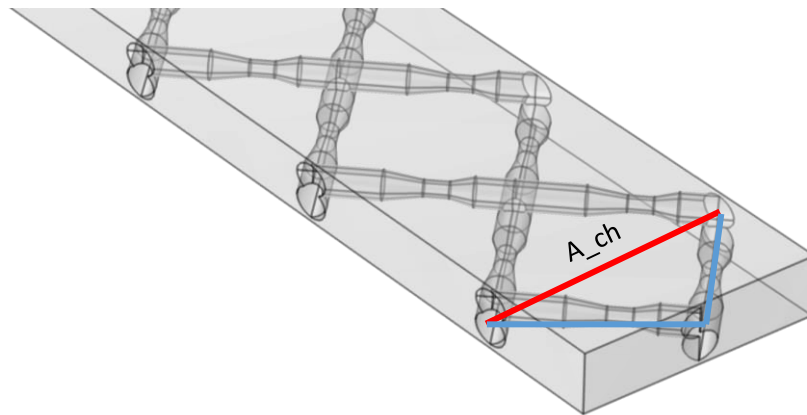


Figura 12. Cálculo de A_{ch} (Fuente: elaboración propia).

De manera que, para calcular el ancho del canal hay que usar la siguiente expresión:

$$A_{ch} = 2L_{tot} \cdot \cos(45^\circ) = 2 \cdot 2,78 \cdot \cos(45) = 3,93 \text{ mm}$$

Para calcular el valor del parámetro L hay que seguir un procedimiento parecido al usado con el parámetro A_ch, pero aplicado al eje Y. Más concretamente, como hay cinco unidades repetitivas, se calcularán las diagonales de cada unidad repetitiva y dicho valor se multiplicará por cinco. En la Figura 13 se puede visualizar la explicación.

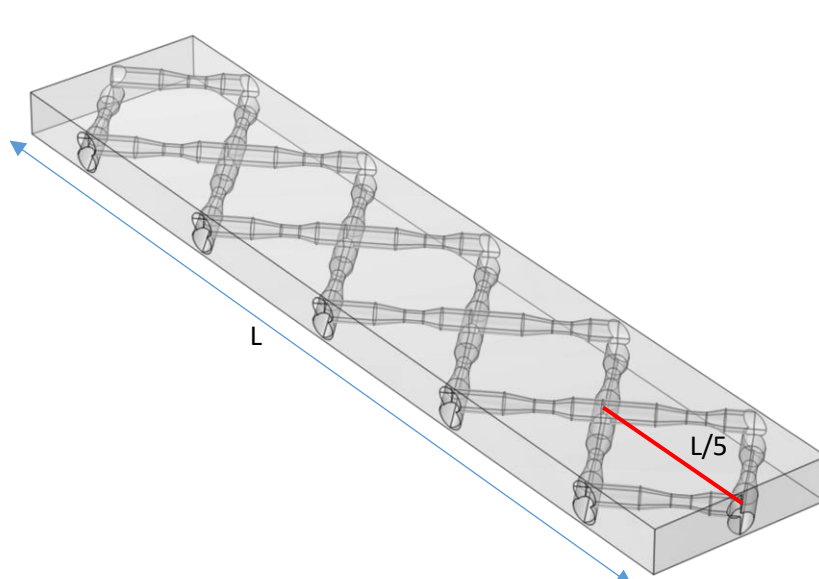


Figura 13. Cálculo de L (Fuente: elaboración propia).

De manera que, para calcular el largo del canal hay que usar la siguiente expresión:

$$L = 5(2 L_{tot} \cdot \sin(45^\circ)) = 5(2 \cdot 2,78 \cdot \sin(45)) = 19,66 \text{ mm}$$

Para calcular el valor del parámetro L_mem se aplica una relación que tiene como objetivo mantener una proporción entre el tamaño del canal y el de la membrana. Se quería mantener la proporción del tamaño entre canal y membrana que había en el trabajo realizado por el autor Pol Lezcano, por lo que sabiendo que el tamaño de la membrana y del canal era de 0,6 y 0,762 mm, respectivamente, se aplicó la siguiente expresión [18]:

$$\frac{L_{mem}}{D_{tot}} = \frac{0,6}{0,762} \quad (29)$$

El valor usado para Dtot ha sido el valor que se proponía inicialmente en el artículo (0,787 mm), es decir, no se han tenido en cuenta los huecos creados a posteriori. Aislado L_mem en la Ec. (29) y sustituyendo se obtiene la Ec. (30):

$$L_{mem} = 0,787 \cdot \frac{0,6}{0,762} = 0,62 \text{ mm} \quad (30)$$

Además, para facilitar el mallado de los *spacers* que se encuentran unos encima de otros se ha decidido que se superpongan un 15 %. Esta medida se ha tomado porque hacer que la zona de contacto entre dos cilindros sea muy pequeña crea irregularidades en la malla que pueden llevar a errores en la computación. Esta superposición se puede apreciar en la Figura 11.

La distribución exacta de los canales y membranas se muestra en la Figura 14.

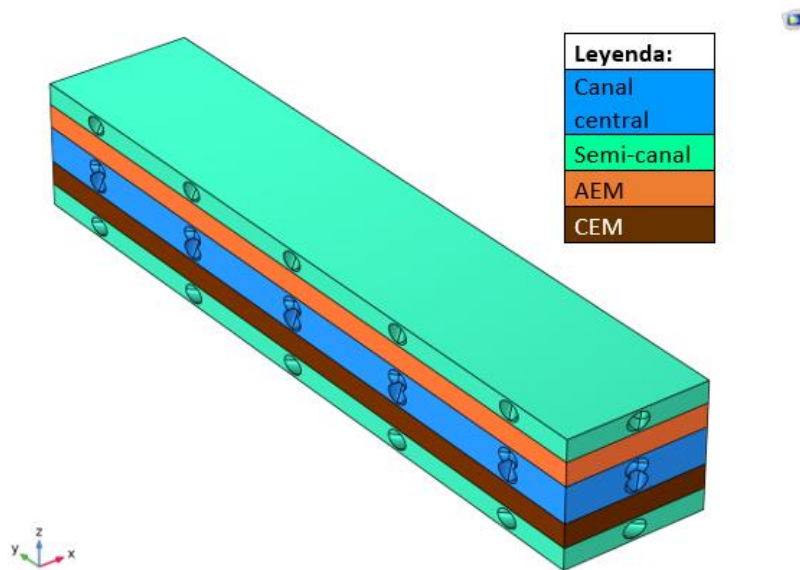


Figura 14. Distribución exacta de los canales y membranas (Fuente: elaboración propia). En los semicanales, como se analiza la mitad de un canal, no hay dos filas de *spacers* (una encima de la otra como en el canal central) sino una sola, tal como se puede comprobar en la Figura 15.

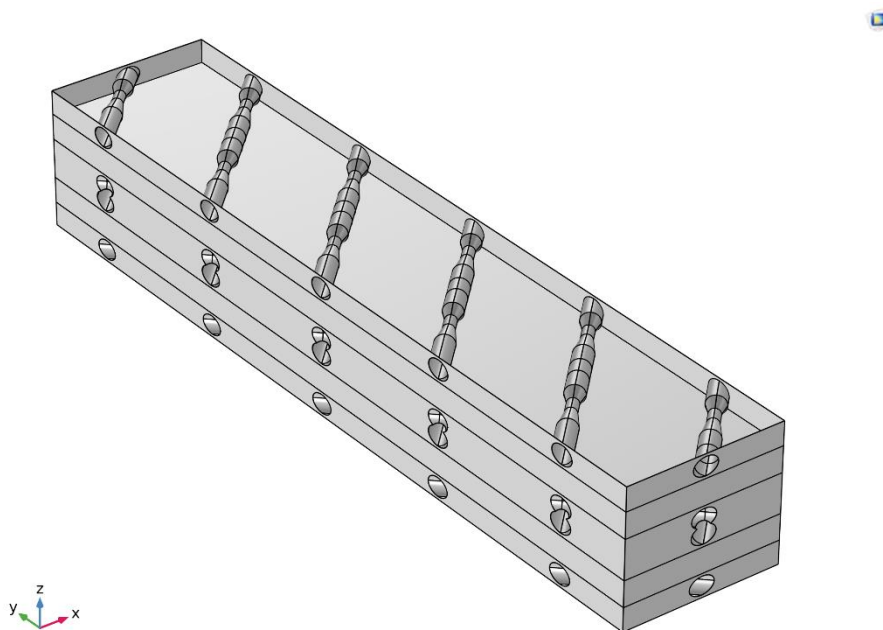


Figura 15. Visualización de los semicanales (Fuente: elaboración propia).

Se comprobó mediante diversas simulaciones que el contacto entre membranas y *spacers* era el responsable de que las simulaciones no convergieran, de manera que, se tuvo que encontrar una solución a ese problema. Esa solución fue dejar un pequeño espacio entre *spacer* y membrana para que no estuvieran en contacto, pero implementar esa solución hizo variar la geometría de los semicanales. Debido a esto, los semicanales no son la mitad del canal central exactamente, aunque se comporten como tal. El hecho de que haya que dejar un pequeño hueco entre *spacer* y membrana, o entre *spacer* y la pared superior, hace que el grosor de los semicanales no sea la mitad exacta del grosor del canal central, sino un poco más, concretamente:

- Grosor del semicanal (L_{sc}) = 0,57 mm
- Mitad del grosor del canal central ($D_{tot}/2$) = 0,475 mm

Los posibles efectos que esto pueda tener se discutirán en las conclusiones.

3.1.1.5. Condiciones de contorno

En primer lugar, hay que indicar que el material que se analiza es agua, mediante la opción *add material from library*, tal como se muestra en la Figura 16.

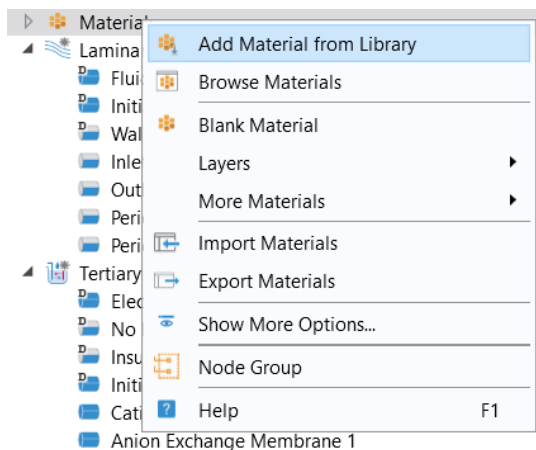


Figura 16. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).

Para poder resolver esta simulación se usarán dos módulos: el de *laminar flow* y el de *tertiary current distribution, Nernst-Planck*. Las ecuaciones que actúan en el módulo de *laminar Flow* son las de Navier-Stokes (Ec. (4) y Ec. (6)), y las que actúan en el módulo de electroquímica son las principales mostradas en el apartado 2.3.3. Ecuación de Nernst-Planck y 2.3.4. Conservación de la carga: electroneutralidad y Poisson. En la Figura 17 se muestran las condiciones de contorno del módulo de *laminar flow*.

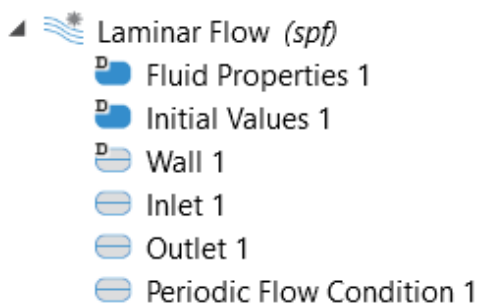


Figura 17. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

Primeramente, en la condición de *laminar flow* se debe especificar que el flujo laminar ocurre solo en el canal central y en los semicanales, y que las propiedades del fluido son las del material escogido (agua, en este caso). Además, hay que establecer que el flujo es incompresible, tal como se muestra en la Figura 18 y Figura 19, respectivamente.

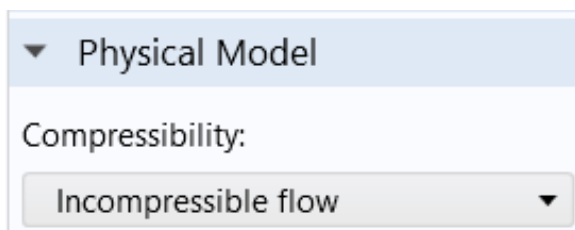


Figura 18 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).

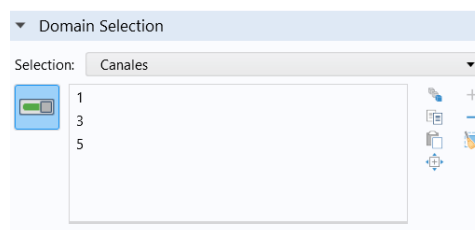


Figura 19. Selección del dominio del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inlet*) y salida (*outlet*) del flujo. Esto se hace mediante las condiciones *inlet* y *outlet*.

- *Inlet*: se define que el flujo que entra está totalmente desarrollado y que la velocidad media de ese flujo es U_0 (7 cm/s), tal como se puede apreciar en la Figura 20.

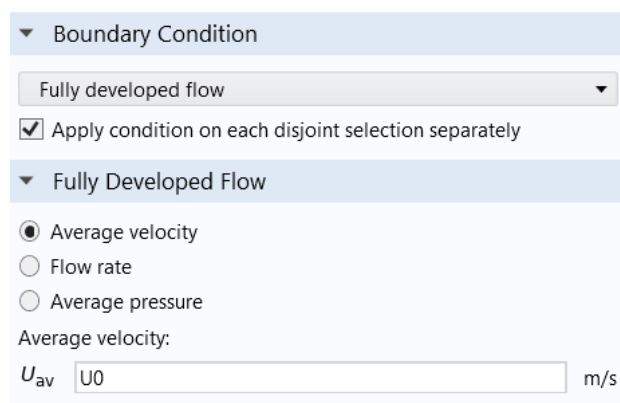


Figura 20. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

En Figura 21, se pueden observar las superficies en las que se aplica la condición de *inlet*.

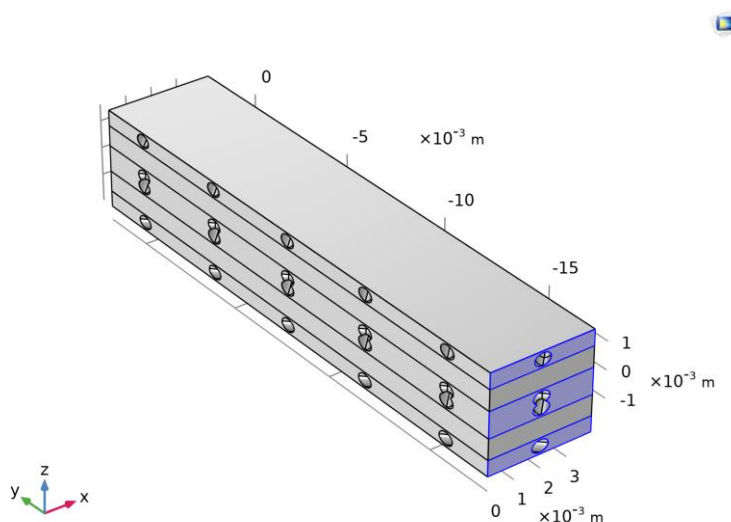


Figura 21. Entradas del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outlet*: se define que la presión a la salida es cero Pa y que no hay flujo de retorno, tal como se puede apreciar en la Figura 22.

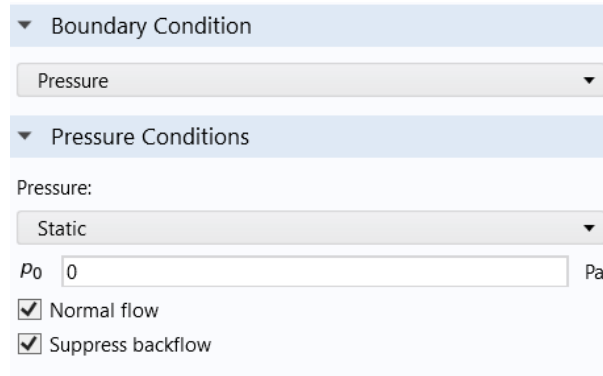


Figura 22. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 23 se pueden observar los contornos en los que se aplica la condición *outlet*:

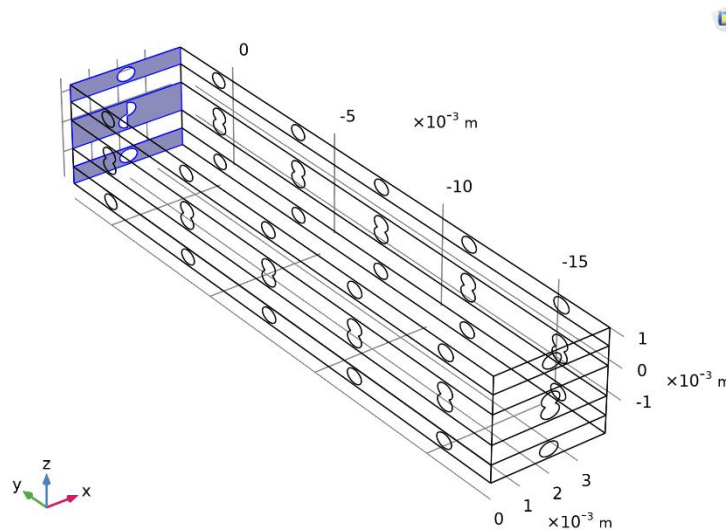


Figura 23. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).

Por último, hay que establecer dos condiciones periódicas. La primera es para señalar que se está trabajando con una unidad repetitiva y, por lo tanto, lo que ocurre en las superficies superior e inferior de los semicanales debe ser lo mismo. Sin esta condición periódica, el programa interpretaría que los semicanales son como el canal central, solo que más estrechos, y este no es el caso, pues los semicanales solo representan la mitad del canal central con el objetivo de crear una unidad repetitiva exacta. La segunda es para indicar que las paredes laterales, paralelas al flujo, también forman parte de una unidad repetitiva, ya que la hilera de *spacers* que se ha modelizado podría tener otras hileras adyacentes en cada lado, como se ha mostrado con los *spacers* reales en la Figura 4. Para definir estas condiciones periódicas hay que usar la condición llamada *periodic flow condition*, e indicar que la diferencia de presión entre las superficies contrarias es igual a 0, tal como se puede ver en la Figura 72:

▼ Flow Condition

Flow condition:
Pressure difference ▼

Pressure difference:
 Δp Pa

Figura 24. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 25 se pueden observar los contornos en los que se aplica la primera *periodic flow condition*:

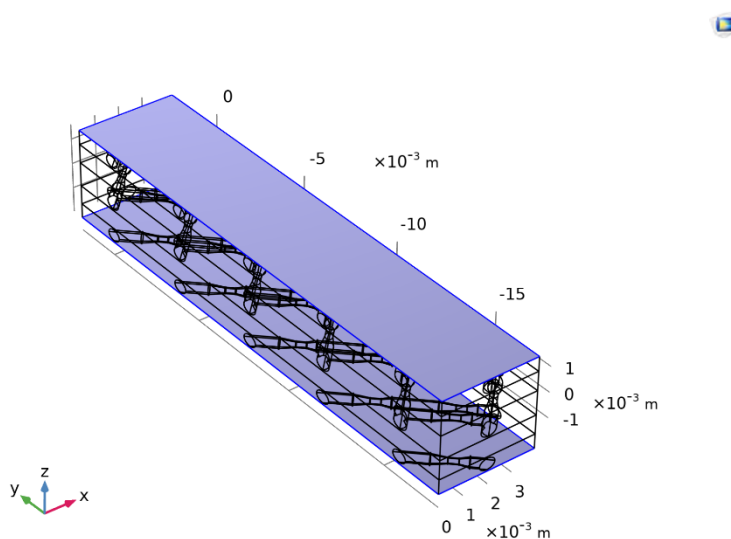


Figura 25. Aplicación de la primera condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 26 se pueden observar los contornos en los que se aplica la segunda *periodic flow condition*:

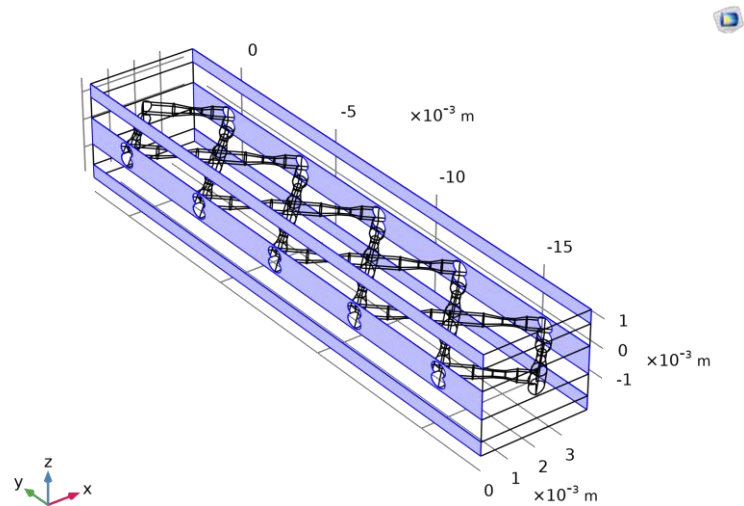


Figura 26. Aplicación de la segunda condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

Ahora se introducirán las condiciones de contorno del módulo de electroquímica. En la Figura 27 se pueden ver dichas condiciones de contorno:

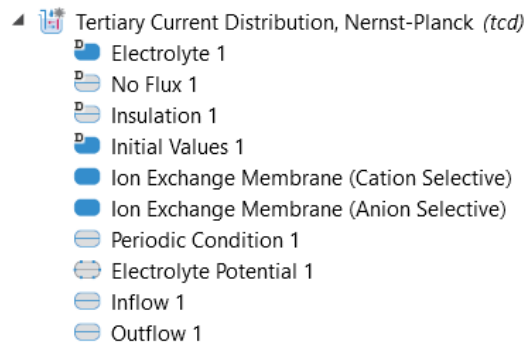


Figura 27. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).

El primer paso es indicar que el modelo de conservación de la carga es el de electroneutralidad, esto se consigue mediante la opción *electroneutrality*, que se encuentra dentro del módulo de *tertiary current distribution*. Se ha escogido la condición de electroneutralidad en vez de la de Poisson, porque esta última es mucho más difícil de hacer converger [18]. El segundo paso es definir las propiedades del electrolito que circula por los canales. Es necesario establecer a que temperatura se encuentra, que

campo de velocidades actúa, las propiedades difusivas de las especies diluidas y las propiedades de las especies en la migración debida al campo eléctrico. En la Figura 28 se muestran estas condiciones:

The screenshot shows a software interface with the following sections:

- Model Input**: Temperature: T, set to 'Common model input'.
- Coordinate System Selection**: Coordinate system: 'Global coordinate system'.
- Convection**: Velocity field: 'Velocity field (spf)'.
- Diffusion**: Material: 'None'. Diffusion coefficient for D_{cNa} : 'User defined', with a text input 'DNa' and units 'm²/s'. Diffusion coefficient for D_{cCl} : 'User defined', with a text input 'DCl' and units 'm²/s'.

Figura 28. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).

Donde el *common model input* tiene un valor igual a T (298,15 K), el campo de velocidades (*velocity field*) hay que indicar que lo obtiene de resolver el flujo laminar seleccionando la opción *Velocity field (spf)* y en difusión hay que indicar los coeficientes de difusión del Na⁺ y el Cl⁻. Además, hay que indicar que la movilidad está gobernada por la relación Nernst-Einstein e indicar la carga de las especies, tal como se muestra en la Figura 29:

The screenshot shows the 'Migration in Electric Field' panel with the following settings:

- Mobility**: 'Nernst-Einstein relation'.
- Equation: $u_{m,j} = \frac{D_j}{RT}$
- Charge number**: z_{cNa} is set to 1, and z_{cCl} is set to -1.

Figura 29. Definición de la movilidad (Fuente: elaboración propia).

Una vez definidas las propiedades del electrolito, se pueden definir las propiedades de las membranas de intercambio iónico. Las propiedades a definir son las mismas que en el electrolito, pero hay que añadir la carga fija y la porosidad de la membrana.

- CEM: En la Figura 30 y Figura 31 se muestran las propiedades de dicha membrana.

Figura 30. Propiedades de la CEM (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 30 y Figura 77, F_{const} es la constante de Faraday (96485,3 C/mol) y, como la membrana solo deja pasar cationes, está cargada negativamente. El campo de velocidades se establece como cero, ya que el flujo no circula por las membranas (se consideran impermeables) y los coeficientes de difusión son los mismos que se han definido antes.

En la Figura 31 se muestran las propiedades restantes por definir:

▼ Migration in Electric Field

Mobility:

Nernst-Einstein relation

$$u_{m,j} = \frac{D_j}{RT}$$

Charge number:

z_{cNa} 1

z_{cCl} 1

▼ Porous Matrix Properties

Electrolyte volume fraction:

ϵ_l 1

▼ Effective Transport Parameter Correction

Diffusion:

Bruggeman

Figura 31. Propiedades restantes de la CEM (Fuente: elaboración propia).

La migración en el campo eléctrico se define igual que en el electrolito. El valor de la porosidad de la membrana es el que se definió en el ejemplo, 0,15 [17]. La aplicación de la CEM se puede apreciar en la Figura 32.

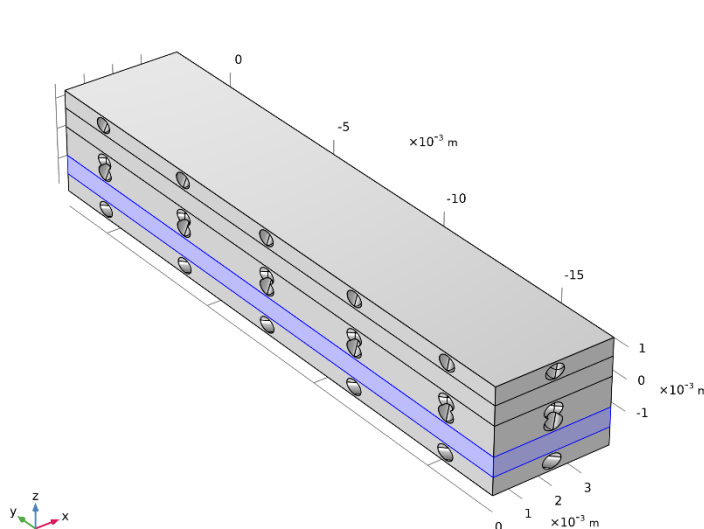


Figura 32. Aplicación de la CEM (Fuente: elaboración propia).

- AEM: En la Figura 33 se muestran las propiedades de dicha membrana. El campo de velocidades, los coeficientes de difusión, la migración y la porosidad son iguales que en la CEM y, por lo tanto, no se volverán a mostrar.

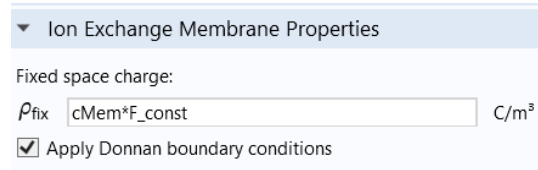


Figura 33. Propiedades de la AEM (Fuente: elaboración propia).

La aplicación de la CEM se puede apreciar en la Figura 34.

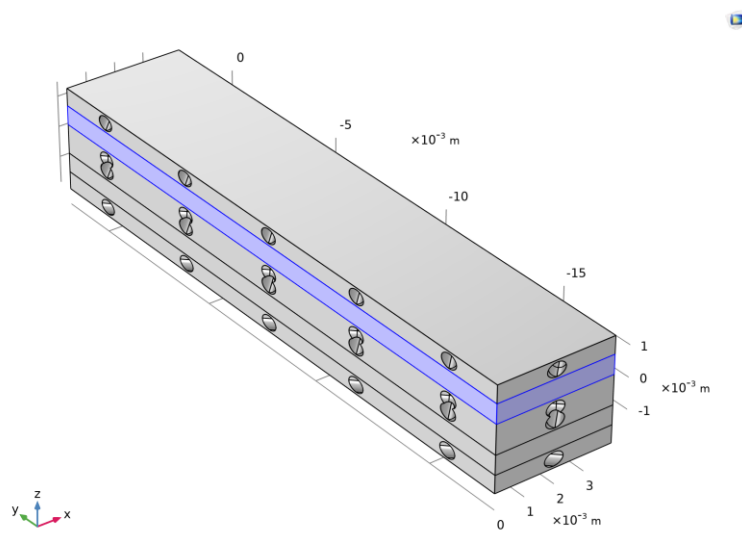


Figura 34. Aplicación de la AEM (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inflow*) y salida (*outflow*) del flujo de disolución. Para ello se usan las condiciones *inflow* y *outflow*.

- *Inflow*: se establece que el flujo entra como en la Figura 21 y con una concentración de valor c_{Cl_0} (500 mol/m^3). En la Figura 35 se muestran las condiciones de entrada del flujo.

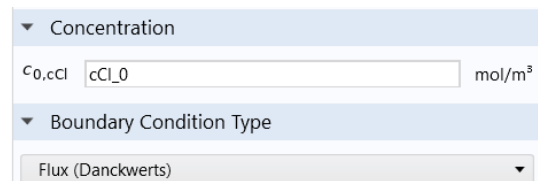


Figura 35. Condiciones de entrada del flujo de disolución (Fuente: elaboración propia).

- *Outflow*: se establece que el flujo sale como en la Figura 23.

Una vez definidas las condiciones de *inflow* y *outflow*, hay que definir las condiciones referentes a la diferencia de potencial aplicada. Más concretamente se usarán dos condiciones: *periodic condition* y *electrolyte potential*.

- *Electrolyte potential*: se establece que el potencial en uno de los bordes inferiores es de 0 V.

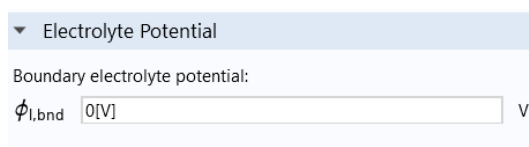


Figura 36. Potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).

La condición mostrada en la Figura 36 se aplica en un borde, tal como se muestra en la Figura 37.

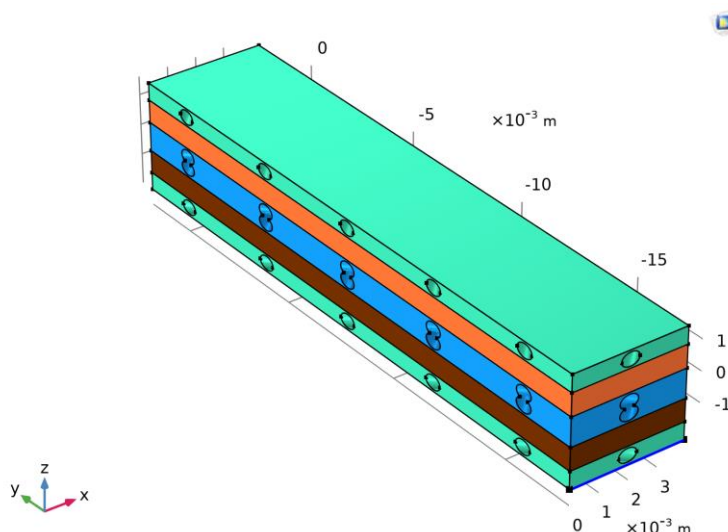


Figura 37. Borde de aplicación del potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).

- *Periodic condition*: se establece una condición periódica, al igual que en el flujo laminar, para indicar que lo que ocurre en las superficies superior e inferior de los semicanales es lo mismo. En dicha condición se especifica que la superficie inferior del semicanal inferior menos la superficie superior del semicanal superior provoca una diferencia de potencial de valor $-V_{tot}$ (-1,5 V), en otras palabras, el extremo derecho se encuentra a un potencial V_{tot} . En Figura 38, se puede apreciar dicha condición.

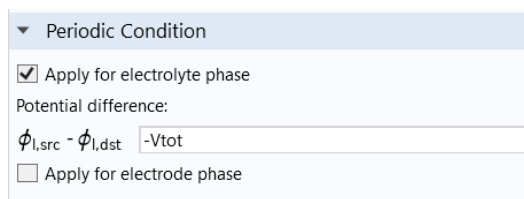


Figura 38. Condición periódica en el módulo de electroquímica (Fuente: elaboración propia).

Como se ha mencionado previamente, la condición periódica se aplica en las superficies de los semicanales, tal como se muestra en la Figura 39. Se puede observar que los lados de aplicación son los mismos mostrados en la Figura 25.

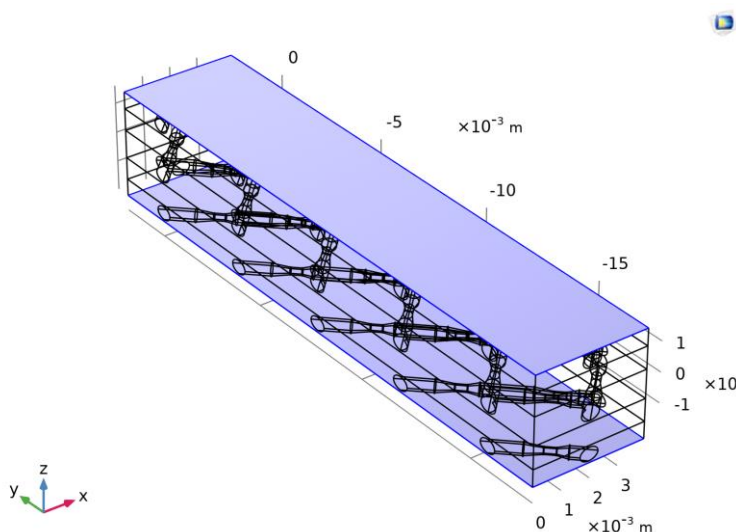


Figura 39. Aplicación de la condición periódica (Fuente: elaboración propia).

3.1.1.6. Mallado

Se ha decidido usar tetraedros, pues es el elemento que, en general, se usa por defecto, ya que se adapta mejor a geometrías irregulares. Los otros tipos de elementos como prismas triangulares o hexaedros son preferibles en otras circunstancias [19].

Para crear la malla de tetraedros hay que utilizar la opción *free tetrahedral*, y a continuación, indicar el tamaño de elemento que se quiere usar. Se empezó aplicando el tamaño normal, pero la malla generada tenía un número de elementos bastante elevado (1060930 elementos), debido principalmente a la geometría irregular de los *spacers*. Para intentar solventar esto, se introdujo un tamaño de elemento un poco más grande, con el objetivo de reducir el número de elementos. Esto se hizo porque cuanto más fina es la malla, más elementos se generan, y, en consecuencia, se eleva más el tiempo de computación. A veces, incluso no se puede resolver mediante el clúster por limitaciones en la memoria de este. En la Figura 40 se pueden observar las opciones de malla escogidas.



Figura 40. Malla usada (Fuente: elaboración propia).

Además, COMSOL permite calibrar la malla según la física que se esté estudiando, adaptándose a problemas relacionados con el plasma, con los semiconductores, con la dinámica de fluidos o sin ninguna física en concreto. En este caso, se ha calibrado para la dinámica de fluidos. En la Figura 41 se puede observar la calibración mencionada y la elección del tamaño de malla.

 A screenshot of the 'Element Size' calibration dialog box. The 'Calibrate for:' dropdown is set to 'Fluid dynamics'. The 'Predefined' radio button is selected, and the 'Normal' preset is chosen. The 'Element Size Parameters' section is expanded, showing several checked options: 'Maximum element size' (0.0003 m), 'Minimum element size' (0.00009 m), 'Maximum element growth rate' (1.175), 'Curvature factor' (0.65), and 'Resolution of narrow regions' (0.65).

Figura 41. Calibración y dimensionado de la malla (Fuente: elaboración propia).

La malla generada se muestra en la Figura 42.

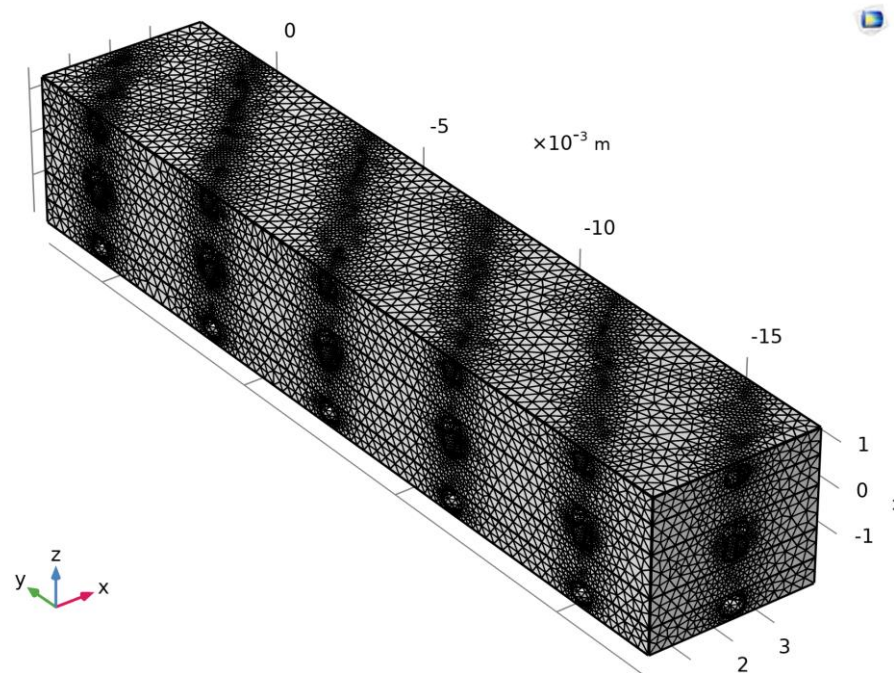


Figura 42. Malla generada (Fuente: elaboración propia).

La malla mostrada en la Figura 42 tiene 711606 elementos. Como se puede apreciar, en los *spacers* se genera un mallado excesivo con elementos muy pequeños debido a la geometría irregular de estos.

3.1.1.7. Resolución en COMSOL

Como hay dos módulos que resolver, es necesario emplear dos estudios y que cada uno resuelva un módulo, o bien usar un estudio, pero que resuelva el problema en dos pasos (uno para cada módulo). Se ha optado por la primera opción, ya que con la segunda hay que esperar a que hayan finalizado los dos pasos para ver los resultados de ambos estudios.

Se ha empleado un estudio para resolver el módulo de *laminar flow* (*Study 1*) y otro para resolver el de *tertiary current distribution, Nernst-Planck* (*Study 2*).

- *Study 1*: se ha indicado que solo debe resolver el módulo de flujo laminar y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los de las no resueltas se deben solventar, tal como se muestra en la Figura 43.

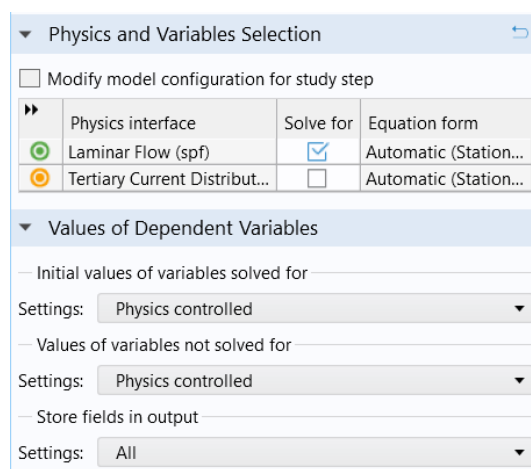


Figura 43. *Study 1* para la resolución del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia).

- *Study 2*: se ha indicado que sólo debe resolver el módulo de electroquímica y que los valores de las variables no resueltas se tienen que extraer del *Study 1*, es decir, el campo de velocidades. Además, se ha realizado un estudio paramétrico con la concentración de la membrana con el objetivo de facilitar la convergencia, dicho valor se ha variado en 0, 500 y 1000 mol/m³. En la Figura 44 se pueden observar las condiciones del estudio.

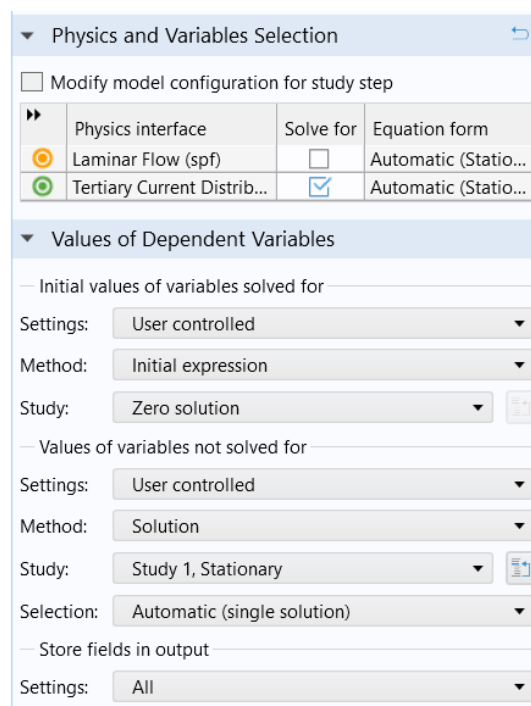


Figura 44. *Study 2* (Fuente: elaboración propia).

3.1.1.8. Resultados

Primeramente, se presentarán los resultados obtenidos al resolver el flujo laminar y, a continuación, se mostrarán los resultados referentes a la ED.

- *Laminar flow:*

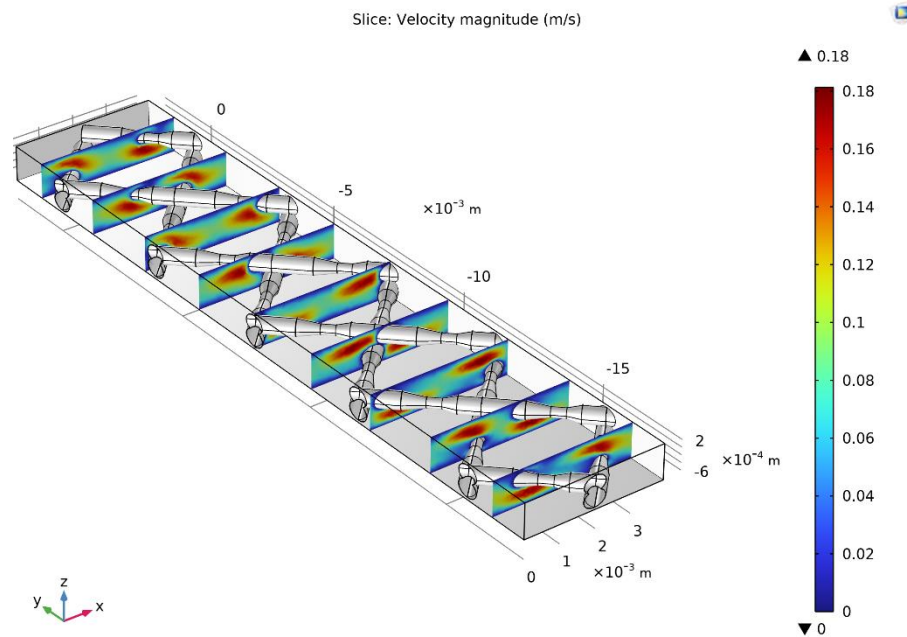


Figura 45. Campo de velocidades del flujo en el canal central (Fuente: elaboración propia).

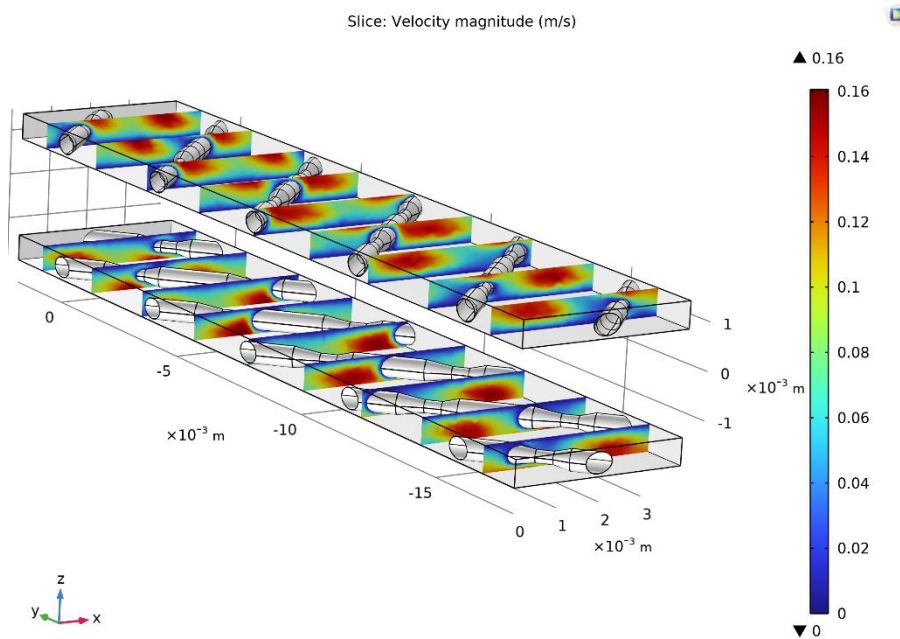


Figura 46. Campo de velocidades en los semicanales (Fuente: elaboración propia).

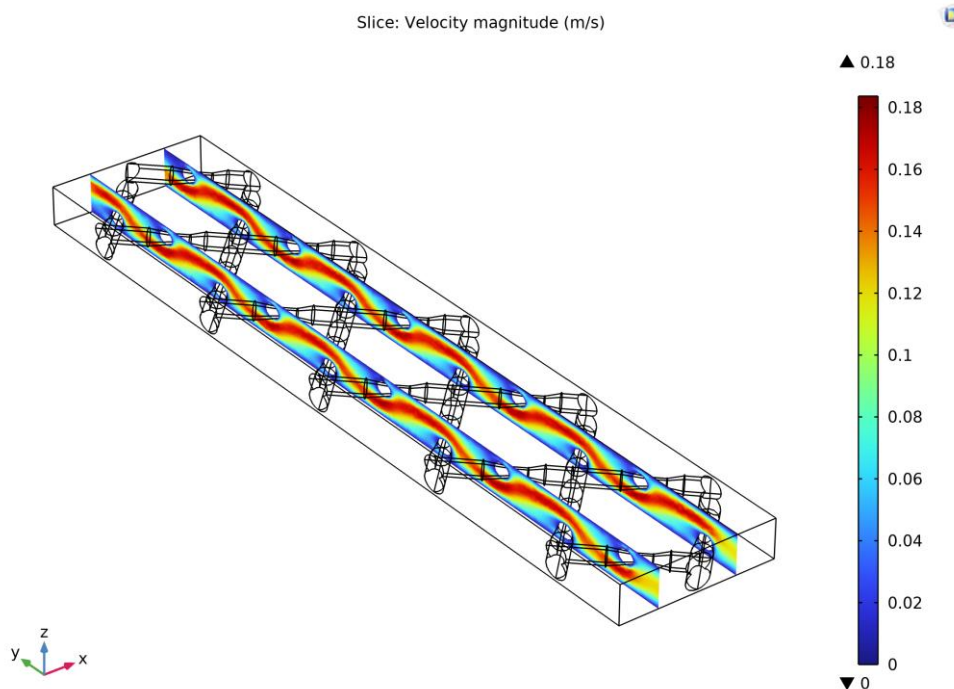


Figura 47. Campo de velocidades del canal central visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

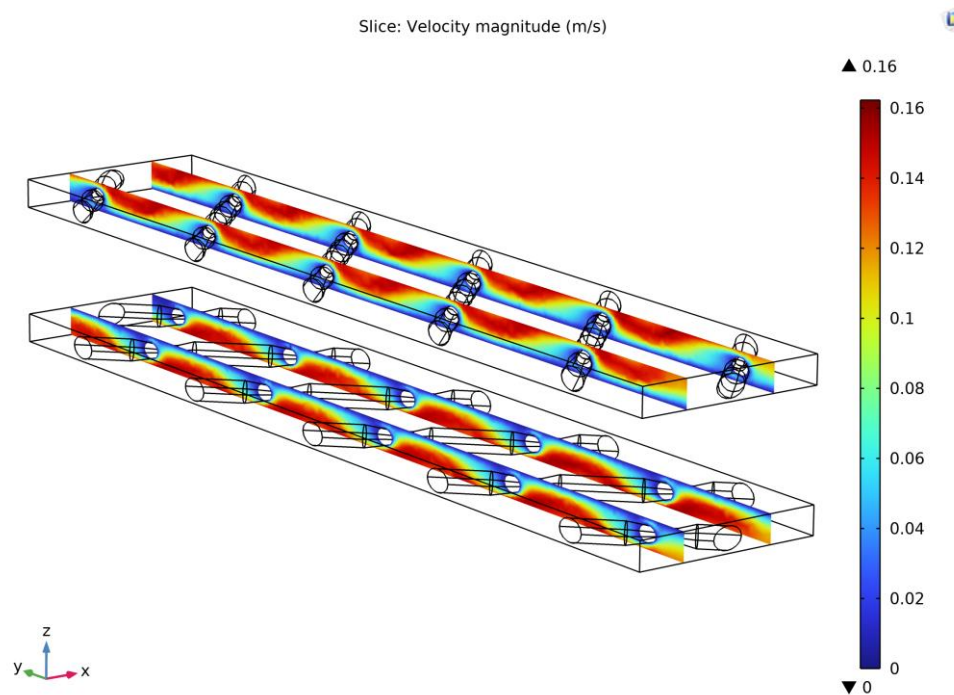


Figura 48. Campo de velocidades de los semicanales visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 45 y Figura 47 se puede apreciar como el flujo rodea los *spacers*, y a medida que el área de paso se estrecha este se acelera, y viceversa. Además, se puede ver la condición de

no deslizamiento en las paredes y en las caras de los *spacers*, donde la velocidad es nula. Se observa cómo el flujo entra de manera totalmente desarrollada en los canales, tal como se había especificado previamente. Por último, en la Figura 46 y Figura 48 se puede ver el resultado de la condición periódica mencionada antes, y como a pesar de haber solo una hilera de *spacers*, el campo de velocidades está descrito como si hubiera dos, debido a que la cara superior y la inferior se complementan.

- *Tertiary current distribution, Nernst-Planck:*
 - Potencial eléctrico:

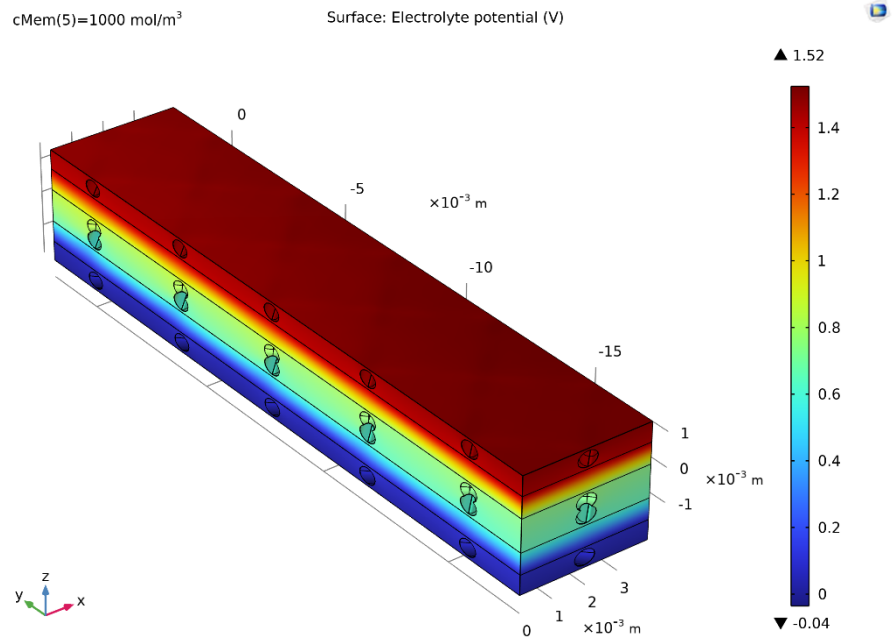


Figura 49. Distribución del potencial eléctrico a lo largo del sistema de estudio (Fuente: elaboración propia).

Tal como se había establecido en las condiciones de contorno, el lado superior se encuentra a V_{tot} (1,5 V) y el lado inferior a 0 V. A medida que va travesando la célula de ED se van produciendo las caídas de potencial, sobre todo en las membranas, tal como se puede ver en la Figura 49.

- Concentración de Na^+ :

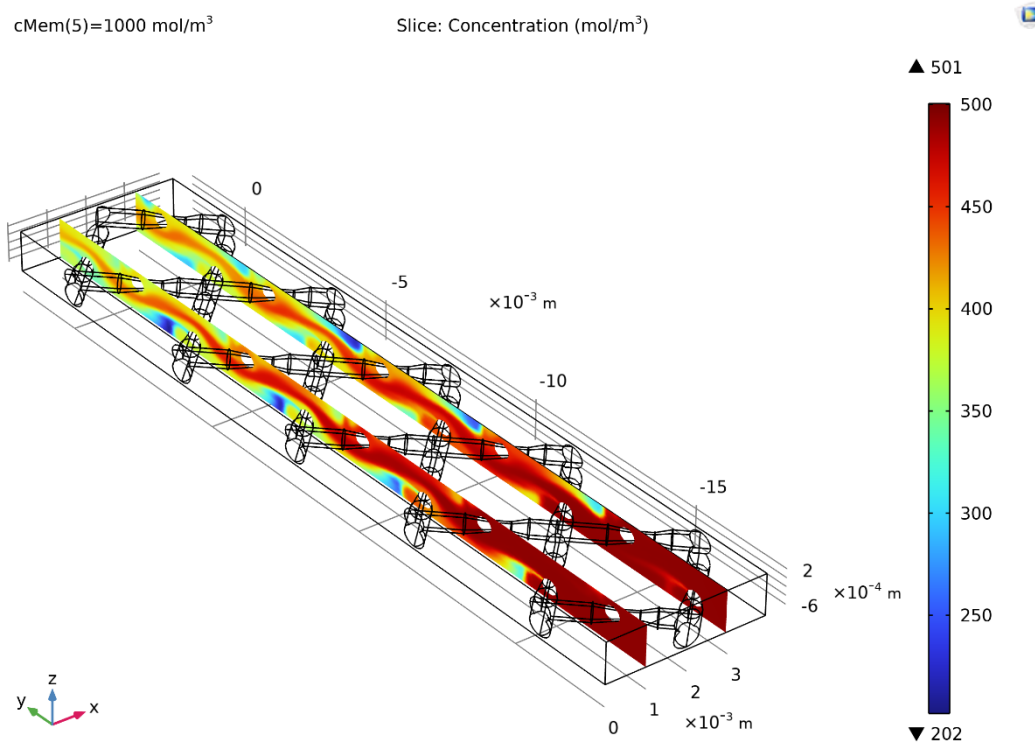


Figura 50. Concentración de Na⁺ en el canal central (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 51, se puede apreciar con más detalle el gradiente de concentración de Na⁺.

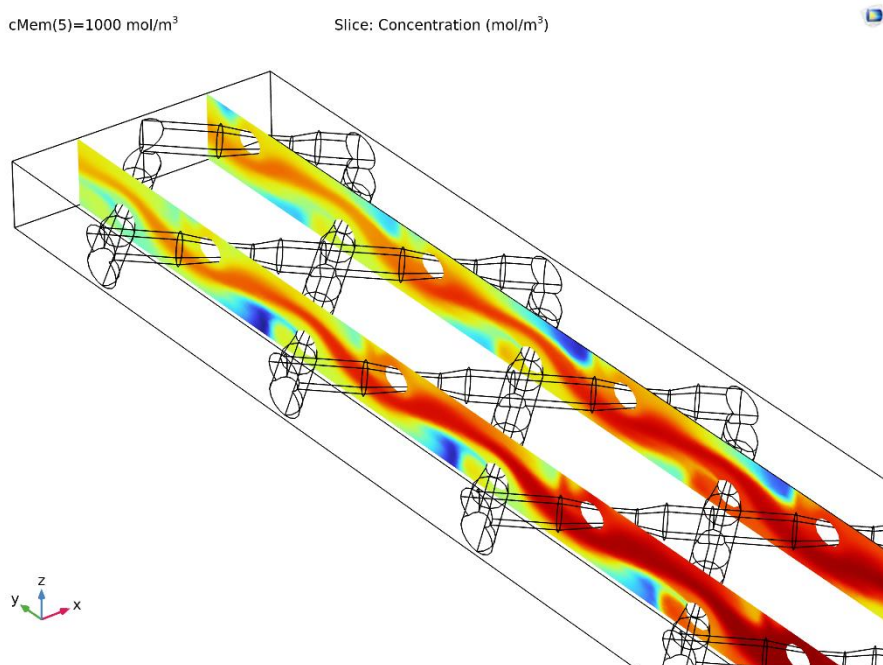


Figura 51. Detalle del gradiente de concentración de Na⁺ en el canal central (Fuente: elaboración propia).

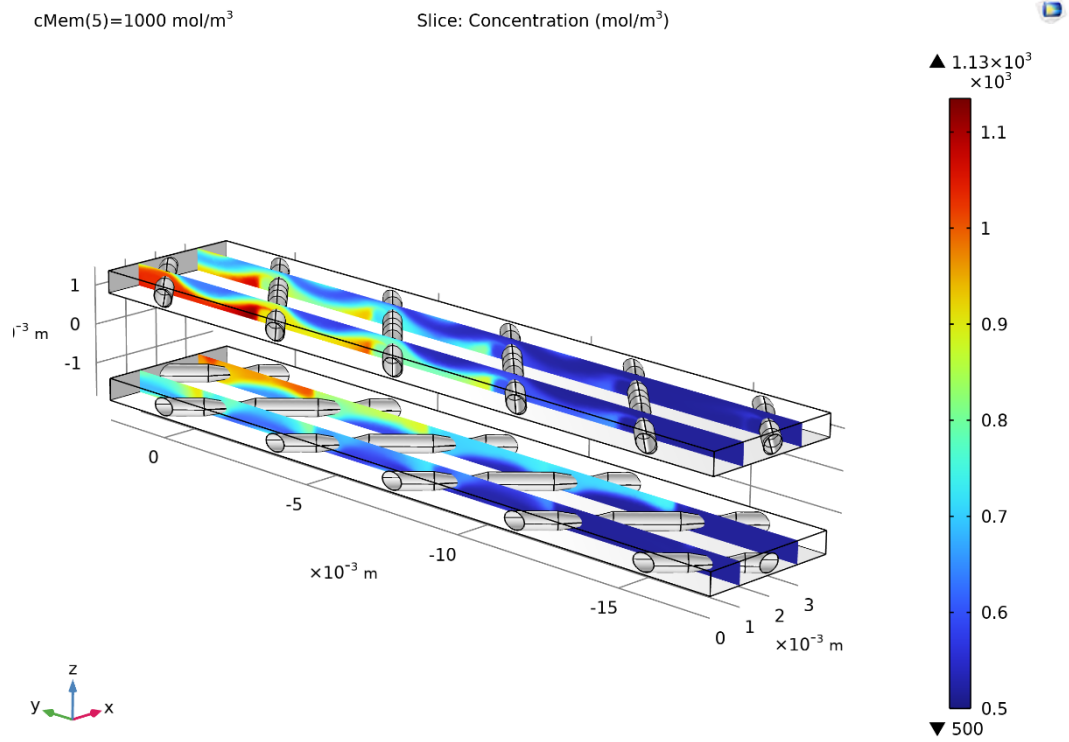


Figura 52. Concentración de Na⁺ en los semicanales (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 53 se puede apreciar una vista más detallada.

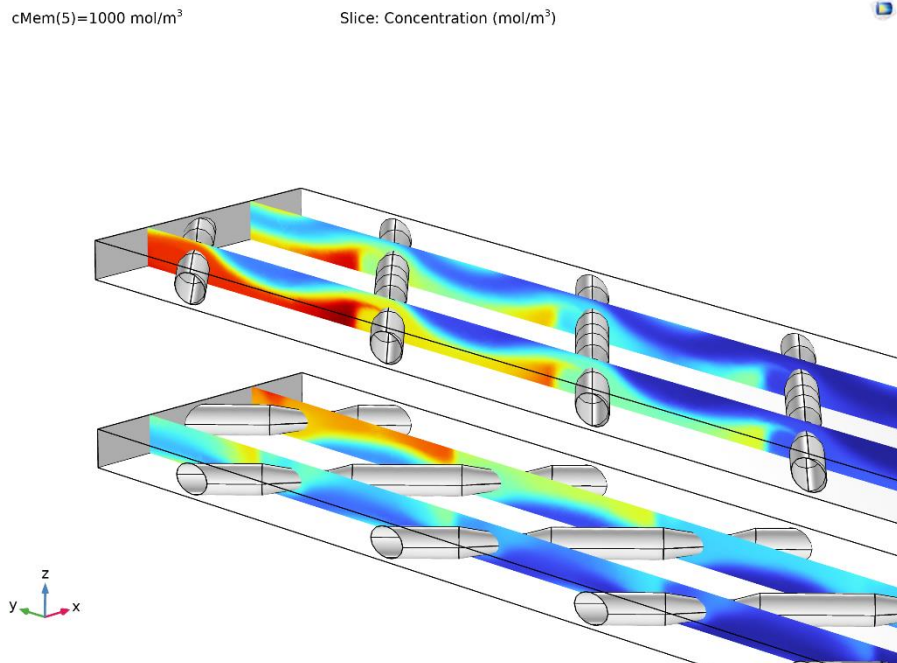


Figura 53. Detalle del gradiente de concentración de Na⁺ en los semicanales (Fuente: elaboración propia).

- Concentración de Cl⁻:

Al igual que en el caso anterior, la Figura 54 y Figura 55 muestran las concentraciones en el canal central, en este caso de Cl⁻.

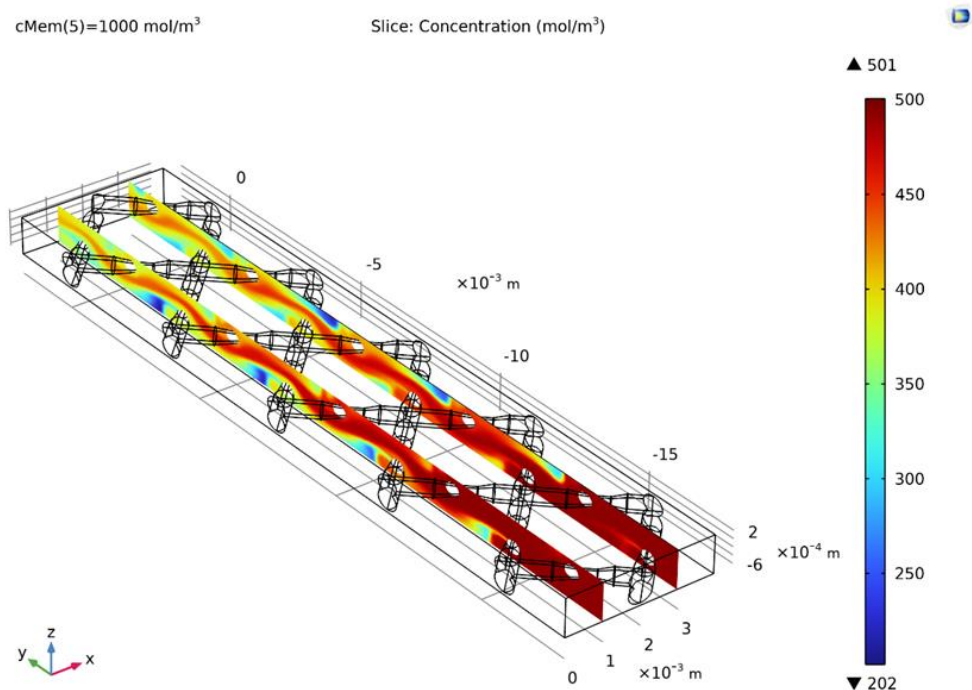


Figura 54. Concentración de Cl⁻ en el canal central (Fuente: elaboración propia).

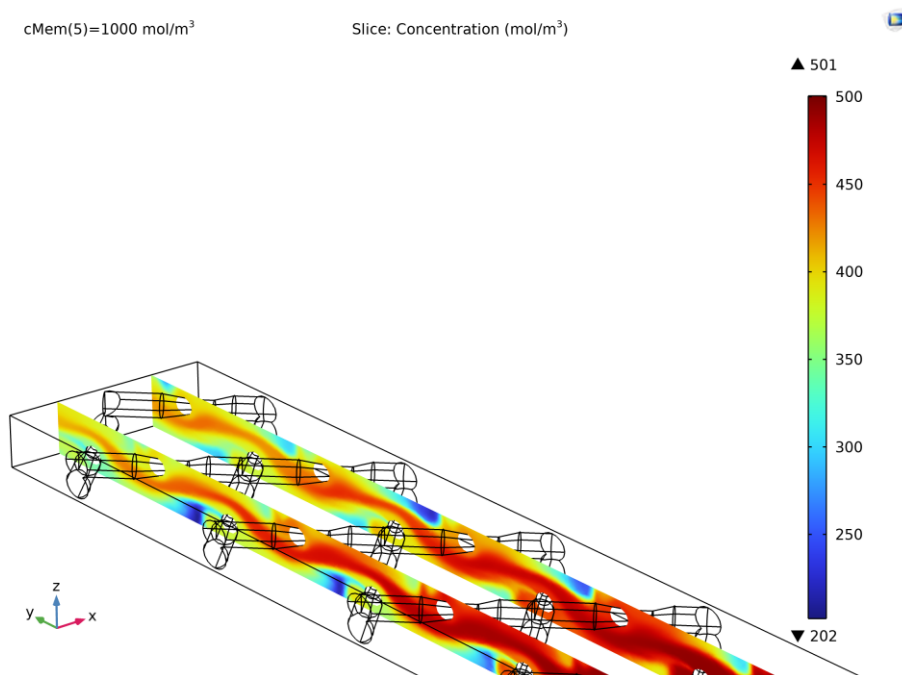


Figura 55. Gradiente de concentración de Cl⁻ en el canal central (Fuente: elaboración propia).

Como se puede ver, las concentraciones de Cl^- en los canales son idénticas a las de Na^+ , esto es debido a la condición de electroneutralidad mencionada previamente y que establece que un aumento en la concentración de cationes supone un aumento de la concentración de aniones, y viceversa. Además, otro factor por el cual las concentraciones son idénticas es que las membranas tienen las mismas propiedades en cuanto a carga y porosidad. Las gráficas restantes no se mostrarán, ya que también son idénticas.

En la Figura 51 y Figura 53 se pueden apreciar como los gradientes de concentración se intensifican al acercarse a la membrana. Además, el centro del canal y de los semicanales si se ve afectado por el gradiente de concentración, aunque en menor medida obviamente.

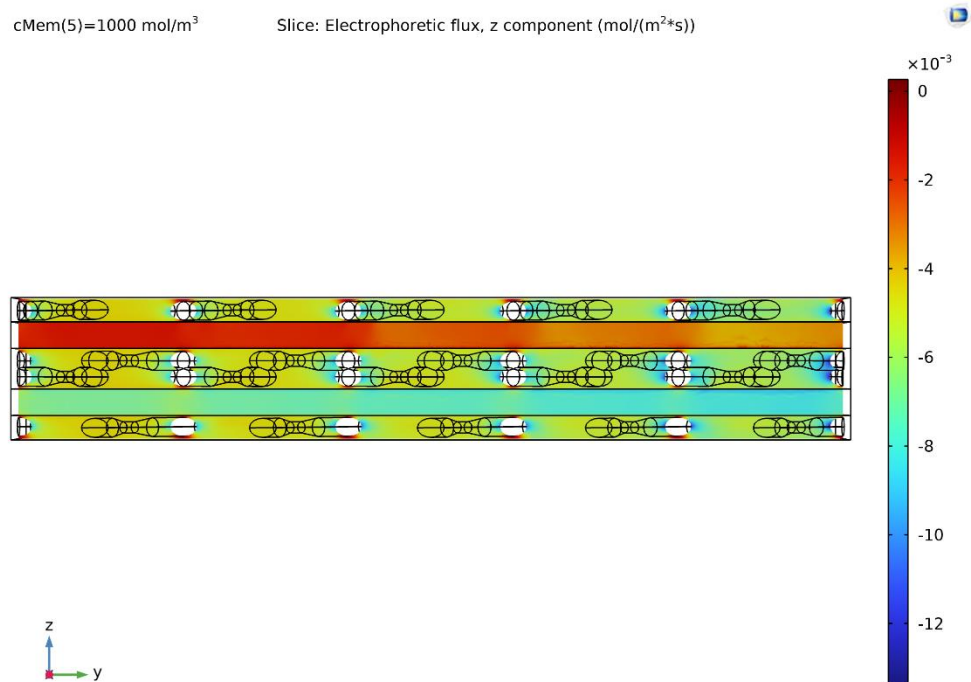


Figura 56. Flujo debido a la migración eléctrica de Na^+ (Fuente: elaboración propia).

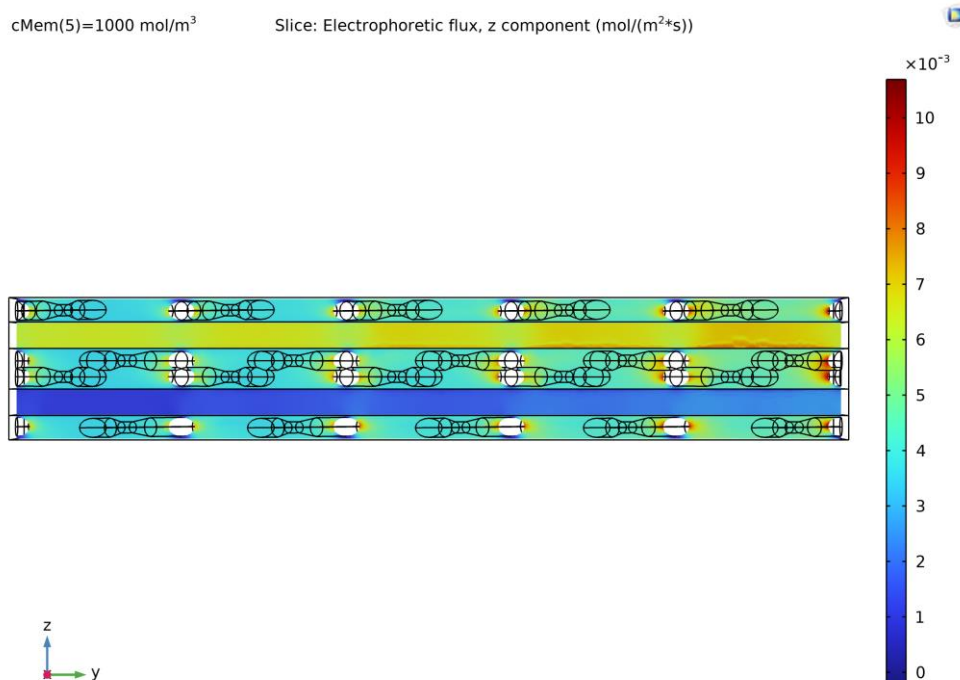


Figura 57. Flujo debido a la migración eléctrica de Cl⁻ (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 56 y Figura 57 se puede ver el flujo debido a la migración eléctrica del Na⁺ y del Cl⁻. Nótese como para el caso del Na⁺ el flujo es negativo, ya que el lado negativo es el inferior y, además, en la membrana superior no hay flujo, ya que es la membrana de intercambio aniónico y no deja pasar cationes. Para el caso del Cl⁻ es justo lo opuesto, el flujo es positivo porque el lado positivo es el superior y, además, en la membrana inferior no hay flujo, puesto que es la membrana de intercambio catiónico y no deja pasar aniones. Por último, cabe destacar que el flujo electromigrativo se intensifica cerca de los *spacers* en ambos casos, mostrando la importancia de estos elementos.

Como se ha podido comprobar, el canal central es el que transporta la disolución diluida y los semicanales transportan la disolución concentrada. En los semicanales, usando la opción *Volume maximum*, se puede ver que la concentración llega hasta 1288 mol/m³, mientras que, en el canal central, usando la opción *Volume minimum*, se ve que la disolución llega a diluirse hasta los 48 mol/m³ muy puntualmente. A la salida del canal central, la concentración media de NaCl es de 343,82 mol/m³, y en los semicanales superior e inferior es de 914,67 y 911,55 mol/m³, respectivamente. Estas medidas han sido obtenidas con la opción *Evaluation Group*, mediante la selección *Surface average*, seleccionando las áreas de salida y especificando que la variable a calcular tiene que ser cNa.

Si estos resultados se comparan con el caso en 2D sin *spacers* mostrado en los Anexos, se podrá comprobar que, para dos casos con las mismas condiciones de contorno y dimensiones geométricas, el efecto de los *spacers* es más que evidente, y consigue intensificar de manera muy notoria el proceso de ED. Concretamente, en el caso sin *spacers* (tomando los valores medios) la concentración en el canal diluido se reduce, un 1,6 %, y en el canal concentrado aumenta un 1,7 %, aproximadamente, con respecto a la de la entrada. En el caso con *spacers* la concentración en el canal diluido se reduce un 31,2 %, y en el canal de concentrado aumenta hasta un 83 %, aproximadamente, con respecto a la de la entrada.

A continuación, se hará un análisis de las consideraciones usadas y los posibles efectos que han tenido. Como se ha comentado previamente, se tuvo que dejar un espacio entre *spacer* y membrana o *spacer* y superficie porque si no las simulaciones no convergían. La otra consideración realizada fue la de hacer más grandes los semicanales, por lo que se realizaron simulaciones con un tamaño de semicanal equivalente a la mitad del canal central y dejando el espacio para evitar el contacto, pero no convergió ninguna. El hecho que la concentración en los semicanales sea tan elevada puede estar relacionado con el que haya una superficie de mezclado mayor. De todos modos, cabe recordar que la diferencia entre el tamaño del semicanal y el tamaño teórico que debería tener es de 0,095 mm, por lo tanto, tampoco se puede esperar una gran diferencia si finalmente se consigue reproducir exactamente el semicanal.

3.2. Validación experimental

Aunque por el tiempo disponible no se pudo realizar, se propuso una validación experimental sobre el mezclado en flujos laminares. El objetivo era comprobar la premisa de que, si se introducen dos sustancias en un flujo laminar en una escala cuasi microscópica y sin *spacers*, estas no se mezclarán. Para verificar esta premisa, se iba a efectuar, mediante impresión 3D, una recreación de uno de los canales analizados mediante COMSOL, pero sin *spacers*. Una vez hecha la geometría en 3D se iban a crear dos entradas, y por cada una entraría un fluido con un colorante diferenciado del otro. Para poder observar todo lo que ocurre, una de las caras del canal se iba a sustituir por una placa de metacrilato, que es transparente, y mediante un equipo de microscopia se iba a analizar cómo y en qué grado se realizaba el posible mezclado. La modelización computacional sobre esta validación se muestra los Anexos.

El equipo usado para realizar esta validación experimental iba a ser:

- Impresora 3D modelo Form 3+ de FormLabs. Se trata de una impresora 3D ideada para crear prototipos y piezas finales con una calidad fiable y rápidamente con un coste de 3499,00 €. La impresora cuenta con la tecnología *Low Force Stereolithography (LFS)* con las siguientes características básicas [20]:
 - Resolución en el plano XY (horizontal) de 25 μm .
 - Resolución en el eje Z, también conocido como grosor de capa, de 25-300 μm .
 - Láser con una potencia de 250 mW.
 - Punto focal del láser 85 μm .

La resolución en el plano XY es un indicador directo de la calidad de la impresión, siendo la combinación del tamaño del punto focal del láser y de los incrementos con los que se puede usar el láser en impresoras LFS. En el caso de la resolución en el eje Z, este valor indica la resolución que tiene la impresora en el eje vertical. La tecnología LFS utiliza, a diferencia de otras tecnologías, un láser y un barrido de líneas constante que se aplica en pequeños incrementos. Las impresoras LFS pueden concentrar el láser en cualquier coordenada del plano XY, a diferencia de otras tecnologías que se basan en una matriz fija de píxeles [21]. En la Figura 58 se muestran las diferencias entre tres tipos de tecnologías de impresión 3D.

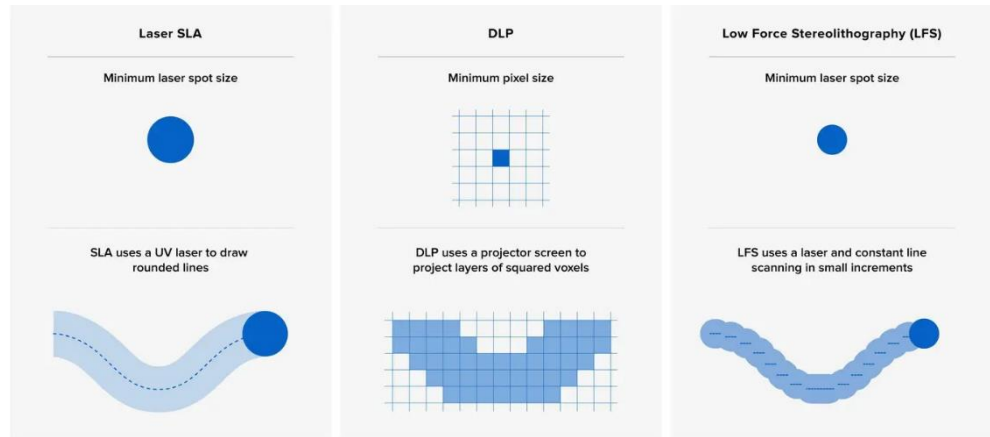


Figura 58. Diferencias entre las tecnologías SLA, DLP y LFS (Fuente: [21]).

La parte de impresión 3D iba a estar a cargo de Rafael Bermúdez Jiménez en el taller mecánico común de la UPC, situado en la ETSEIB. Las imágenes de la impresora fueron proporcionadas por el director de este trabajo, Ricardo Torres.



Figura 59. Impresora Form 3+ que hay en el taller mecánico común de la UPC.

Además de la impresora 3D, en la ETSEIB se dispone de un módulo de lavado y curado de las piezas creadas. El módulo de lavado consiste en sumergir las piezas generadas en alcohol isopropílico limpio para limpiarlas. La máquina agita las piezas sumergidas durante

15 minutos y esto permite que se limpien a detalle. El módulo de curado sirve para mejorar las propiedades mecánicas de las piezas mediante la exposición uniforme a temperaturas de hasta 80 °C y 13 LEDS multidireccionales. Los módulos de lavado y curado tienen un precio de 549,00 € y 699,00 €, respectivamente [22]. Las imágenes de los módulos también fueron proporcionadas por Ricardo Torres.



Figura 60. Módulo de curado (izquierda) y lavado (derecha) de la impresora 3D.

- Equipo de microscopia BX53M de Olympus: Se trata de un equipo que permite visualizar escalas muy pequeñas, en este caso, del orden de milímetros con bastante detalle. Por esta razón, es el equipo idóneo para la observación en tiempo real del flujo en el canal. Además, este dispositivo está pensado para ser intuitivo y fácil de usar. El coste de la versión básica del modelo BX53M asciende a 8179,00€, y se encuentra disponible en la facultad de la EEBE. Las características básicas son las siguientes [23], [24]:
 - Enfoque: tiene un recorrido de 25 milímetros, un recorrido fino por rotación de 100 micras y una graduación mínima de una micra.
 - Altura máxima de la muestra: la reflejada es de 65 milímetros con separador y la reflejada/transmitida es de 35 milímetros con separador.
 - Los objetivos disponibles son MPLFLN5X, 10X, 20X, 50X y 100X.



Figura 61. BX53M de Olympus (Fuente: [23])

4. Continuación del proyecto

La continuación de este proyecto puede dividirse en varias líneas de enfoque. Por un lado, se podría optar por modelizar el equipo de ED presente en la facultad, incluyendo los *spacers* con o sin las membranas bipolares. Puesto que las membranas bipolares ya proporcionan dificultades en la computación, si además se añadieran los *spacers* podría ser una tarea bastante difícil. El objetivo sería adaptar los parámetros y la geometría a los del equipo real, e intentar realizar validaciones experimentales con el fin de comprobar si los resultados son acertados.

Por otro lado, la propuesta de validación experimental que se planteó en el punto 0 podría resultar bastante interesante, dado que involucraría conocimientos de la conformación en impresión 3D, pero también en la mecánica de fluidos.

Por último, se podría expandir la idea de medir la eficacia del mezclado de diferentes *spacers* comerciales, buscar cuál es la mejor geometría de las disponibles en el mercado para ser aplicada en la electrodiálisis, y que resultados ofrecería. Además, se podría adquirir algún modelo de *spacer* comercial y verificar experimentalmente si los resultados obtenidos coinciden con las simulaciones computacionales.

5. Análisis del impacto ambiental

A continuación, se realizará el impacto ambiental que se ha generado a lo largo de este trabajo. Para ello, se determinarán las emisiones de CO₂(g) que se han producido producto del consumo eléctrico efectuado. Para determinar dichas emisiones, se ha utilizado el mix eléctrico, que considera aquellas asociadas a la generación de electricidad que se consume, y en consiguiente, indica como de renovables son las fuentes usadas para producir esa electricidad, un valor bajo de mix eléctrico significa que la contribución de las renovables o fuentes bajas en carbono es mayor, y viceversa [25]. El valor del mix eléctrico para España en el año 2022 es de 259 g CO_{2eq}/kWh, es decir, 0,259 kg CO_{2eq}/kWh [26].

Con el valor del mix eléctrico obtenido, el siguiente paso es calcular la energía eléctrica gastada a lo largo de este proyecto, y para ello, se tendrá en cuenta la energía gastada por el ordenador personal y por el superordenador empleado para las simulaciones más complejas. El ordenador portátil personal tiene un consumo máximo de 200 watts y el superordenador de 10 watts/core, teniendo en cuenta que en la mayoría de simulaciones se han utilizado 16 cores, el consumo sería de 160 watts.

Tabla 1. Emisiones de CO₂ producidas en kg.

	Potencia (W)	Horas de uso (h)	Consumo total (kWh)	Mix eléctrico (kg CO _{2eq} /kWh)	Emisiones totales (kg CO _{2eq})
Ordenador personal	200	500	100	0,259	25,9
Superordenador	160	180	28,8	0,259	7,46
Total					33,36

Para poder comprender la magnitud de las emisiones generadas, se calculará la superficie de bosque que sería necesaria para absorber la cantidad de CO_{2eq} producida. Una hectárea de bosque a lo largo de 40 años puede absorber unas 200 toneladas de CO₂, por lo tanto, la cantidad que puede absorber en un año es de 5 toneladas de CO₂ [27]. Como este trabajo se ha realizado en cuatro meses, aproximadamente, la cantidad que puede absorber una hectárea de bosque en cuatro meses es de 1666,67 kg. Sabiendo esta relación, la superficie necesaria de bosque para absorber 33,36 kg de CO₂ es de 0,02 ha, es decir, 200 m², aproximadamente. Por lo tanto, se puede comprobar que este trabajo no ha tenido un impacto ambiental significativo.

Conclusiones

Como se ha podido comprobar en los resultados, el objetivo de este trabajo, que consistía en analizar la función de los *spacers* en una celda de electrodiálisis y ver cómo afectan a dicho proceso, ha sido cumplido.

Inicialmente, se empezó a modelar un caso de ED sin *spacers*, y se observó que, sin la incorporación de estos elementos, no tiene lugar un mezclado del fluido dentro del canal y, por lo tanto, los gradientes de concentración de los iones solo se producen en las zonas más adyacentes a la membrana. Posteriormente, para la modelización de los *spacers* se incorporó el coeficiente de calidad del mezclado para poder obtener un valor que sirviera para poder comparar la eficiencia de cualquier tipo de *spacer*. Concretamente, se obtuvo un valor de 0,075787 para los *spacers* cilíndricos y de 0,074636 para los de forma cónica y cilíndrica, siendo mejores estos últimos. Aunque las diferencias no eran significativas, hubo otros dos factores a tener en cuenta: en primer lugar, los *spacers* cilíndricos generaban discontinuidades muy grandes en las caras superiores que podían dificultar la convergencia y, en segundo lugar, era preferible escoger el segundo tipo de espaciadores porque son *spacers* comerciales y su eficacia podría ser comprobada mediante una validación experimental. Basándose en estos factores, se escogió el *spacer* más adecuado, incorporando las membranas adyacentes al canal y los semicanales adyacentes a las membranas. Se tuvieron que solventar diversos problemas relacionados con la convergencia de las soluciones, para ello se tomaron las siguientes decisiones: se dejó un hueco entre los *spacers* y las membranas, y entre los *spacers* y las paredes para evitar que se generaran irregularidades y zonas conflictivas en esas superficies; y los semicanales se hicieron un poco más grandes de lo que correspondía porque si no se generaban geometrías demasiado complejas.

Una vez realizadas las simulaciones, se ha podido observar que gracias a los *spacers* las concentraciones de los semicanales pueden aumentar hasta un 83 %, y en el canal central pueden disminuir hasta un 31 %, respecto las de la entrada. Aparte, se han podido extraer los valores máximos y mínimos que se pueden llegar a obtener durante el proceso: en los semicanales la concentración puede llegar hasta los 1288 mol/m³, mientras que en el canal central puede llegar a disminuir hasta los 48 mol/m³, aunque muy puntualmente. Todos estos datos permiten obtener una idea general de la influencia de los *spacers*, y de la eficiencia añadida que pueden aportar en comparación con un caso sin ningún elemento que induzca una convección forzada.

Presupuesto

En este apartado se presentará el presupuesto para este trabajo, se dividirá en los costes de recursos humanos, los costes de software y costes de computación.

1. Coste de los recursos humanos

Tabla 2. Presupuesto de los recursos humanos.

	Horas (h)	Coste unitario (€/h)	Coste total (€)
Elaboración de la memoria	150	14,08	2112,00
Búsqueda y lectura de información	50	14,08	704,00
Modelización computacional	150	14,08	2112,00
Análisis de los resultados	100	14,08	1408,00
Total	450		6336,00

Para calcular el coste unitario de los recursos humanos se ha buscado el salario medio de un ingeniero mecánico junior en España, 25000 €/año, y se ha dividido entre el número de horas laborables que hay en 2022 en España, 1776 horas, aproximadamente [28], [29].

2. Coste del software

El *software* usado para realizar este trabajo ha sido COMSOL Multiphysics con los siguientes módulos: *CFD*, *chemical reaction engineering* y *electrochemistry module*. Se ha consultado los precios de la licencia de COMSOL y los módulos usados [30]. Nótese que el precio está en dólares estadounidenses, por lo tanto, es necesario hacer la conversión a euros ($1\text{€} = 0,9507\text{ \$}$).

Tabla 3. Presupuesto del software.

	Unidad	Coste unitario (€/unidad)	Coste total (€)
Licencia de COMSOL Multiphysics	1	1611,55	1611,55
Módulo de CFD	1	1611,55	1611,55
Módulo de ingeniería de reacciones químicas	1	755,86	755,86
Módulo de electroquímica	1	850,93	850,93
Total			4829,89

3. Coste del uso del ordenador personal y del superordenador

Para calcular el coste de uso del ordenador personal, se ha calculado el coste de la electricidad que este ha gastado. El coste medio del kWh desde febrero hasta junio se ha tomado como 0,23 €/kWh, y fue proporcionado por el profesor Joan Grau Barceló. Como se ha empleado durante 500 horas y tiene un consumo de 0,2 kW, el coste de empleo del ordenador personal asciende a 23 €.

Para el coste de las simulaciones con el superordenador se usó la información proporcionada por el profesor Joan Grau Barceló sobre las tarifas de uso. La tarificación, hecha por el CSUC y que incluye todo (uso del equipo, energía...), es de 0,05 €/(core·hora). Como se han utilizado 16 cores y el tiempo de empleo del superordenador ha sido de 180 horas, aproximadamente, el coste de las simulaciones asciende a 144 €.

Tabla 4. Presupuesto del uso del superordenador.

	Unidad	Coste unitario (€/unidad)	Coste total (€)
Uso del ordenador personal	1	23,00	23,00
Uso del superordenador	1	144,00	144,00
Total			167,00

Coste total

El coste total de realización de este trabajo se obtiene de sumar los capítulos mostrados anteriormente.

Tabla 5. Presupuesto total de este trabajo.

	Coste (€)
Recursos humanos	6336,00
<i>Software</i>	4829,89
Uso del ordenador personal y del superordenador	167,00
Total	11332.89
Total con IVA (21 %)	13712,80

Bibliografía

- [1] “Where is Earth’s water? USGS Water-Science School.” <https://web.archive.org/web/20131214091601/http://ga.water.usgs.gov/edu/earthwherewater.html> (accessed Jun. 03, 2022).
- [2] “6. El riesgo de sequía en el hemisferio norte aumenta con el incremento del calentamiento - Mundoclasico.com.” <https://www.mundoclasico.com/articulo/36134/6-El-riesgo-de-sequia-en-el-hemisferio-norte-aumenta-con-el-incremento-del-calentamiento> (accessed Jun. 03, 2022).
- [3] M. Mulder, “Basic principles of membrane technology.” 1991. doi: 10.1524/zpch.1998.203.part_1_2.263.
- [4] T. Yonar, “A New Approach for Membrane Process Concentrate Management: Electrodialysis Bipolar Membrane Systems-A Short Communication,” *Electrodialysis*, Oct. 2020, doi: 10.5772/INTECHOPEN.93985.
- [5] P. Arribas, M. Khayet, M. C. García-Payo, and L. Gil, *Novel and emerging membranes for water treatment by electric potential and concentration gradient membrane processes*, no. December. Elsevier Ltd, 2015. doi: 10.1016/B978-1-78242-121-4.00009-5.
- [6] G. K. Batchelor, “Introduction to fluid mechanics,” *Model. Simul. Sci. Eng. Technol.*, vol. 56, pp. 427–457, 2012, doi: 10.1007/978-0-8176-8352-8_23.
- [7] S. a. Socolofsky and G. H. Jirka, “Environmental Fluid Mechanics Part I : Mass Transfer and Diffusion,” *Inst. fur Hydromechanik*, p. 171, 2002.
- [8] “Convection-Diffusion Equation.” <https://www.comsol.com/multiphysics/convection-diffusion-equation> (accessed Jun. 12, 2022).
- [9] “2015 Mass transfer modeling of desalination through an electrodialysis cell”.
- [10] F. White, *Mecanica de fluidos 5ta E.* 2006. [Online]. Available: https://www.academia.edu/35477659/Mecanica_de_los_Fluidos_White_5ta_Edición
- [11] R. Kodým, D. Šnita, and K. Bouzek, “Mathematical modeling of electromembrane processes,” in *Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes: Membrane Desalination Systems: The Next Generation*, Elsevier, 2018, pp. 285–326. doi: 10.1016/B978-0-12-813551-8.00012-7.
- [12] M. Meza García, “Acid-base disturbances in critically ill patients,” *Acta Med Per*, vol. 28, no. 1, p. 46, 2011.
- [13] “Principio de electroneutralidad - Electroneutralidad de un átomo, Electroneutralidad de un material | KripKit.” <https://kripkit.com/principio-de-electroneutralidad/> (accessed Jun. 03, 2022).

- [14] “Teorema de Gauss y Flujo Eléctrico.” <https://web.archive.org/web/20080129044505/http://cabierta.uchile.cl/libros/c-utreras/node16.html> (accessed Jun. 03, 2022).
- [15] C. Multiphysics, C. Software, and L. Agreement, “Micromixer”.
- [16] S. S. Bucs, A. I. Radu, V. Lavric, J. S. Vrouwenvelder, and C. Picioreanu, “Effect of different commercial feed spacers on biofouling of reverse osmosis membrane systems: A numerical study,” *Desalination*, vol. 343, pp. 26–37, 2014, doi: 10.1016/j.desal.2013.11.007.
- [17] D. In and a N. Electrodialysis, “Desalination in an Electrodialysis,” pp. 1–26, 2013.
- [18] P. Lezcano Romero, “Grau en Enginyeria Mecànica MODELITZACIÓ MATEMÀTICA I SIMULACIÓ COMPUTACIONAL D’EQUIPS D’ELECTRODIÀLISI AMB MEMBRANES BIPOLARS Memòria i Annexos,” 2022.
- [19] W. Frei, “Meshing Your Geometry: When to Use the Various Element Types | COMSOL Blog,” Nov. 04, 2013. <https://www.comsol.com/blogs/meshing-your-geometry-various-element-types/> (accessed Jun. 09, 2022).
- [20] “Form 3+: Una impresora 3D SLA de sobremesa de calidad industrial.” https://formlabs.com/es/3d-printers/form-3/?&utm_source=google&utm_medium=cpc&utm_campaign=ES-EMEA-Prospecting-Search_Brand-Form_3-Brand-ES-Exact-Paid-Adwords&utm_term=formlabs3&utm_content=Form_3&utm_device=c&_bt=586887591082&_bk=formlabs3&_bm=e&_bn=g&_bg=141095335384&gclid=CjwKCAjw7cGUBhA9EiwArBAvot-CA7iYhvr2zAkRoupRUaSO5aboqYQ0-G7e4Al7yfeczEx4bBQYoRoCh9YQAvD_BwE (accessed Jun. 12, 2022).
- [21] “¿Qué significa la resolución en la impresión 3D?” <https://formlabs.com/es/blog/significado-resolucion-impresora-3d/> (accessed Jun. 12, 2022).
- [22] “Form Wash y Form Cure: Posacabado automatizado.” <https://formlabs.com/es/post-processing/wash-cure/> (accessed Jun. 12, 2022).
- [23] “Microscopio para la ciencia de materiales BX53M | Microscopios ligeros | Olympus.” <https://www.olympus-ims.com/es/microscope/bx53m/> (accessed Jun. 12, 2022).
- [24] “Olympus Microscopios Serie BX53M | ASTROSHOP.” <https://www.astroshop.es/microscopios/23/m,Olympus/a,Mikroskope.Allgemein.Serie=BX53M> (accessed Jun. 12, 2022).
- [25] “FACTORES DE EMISIÓN REGISTRO DE HUELLA DE CARBONO, COMPENSACIÓN Y PROYECTOS DE ABSORCIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO”.
- [26] “Factor de emisión de la energía eléctrica: el mix eléctrico. Cambio climático.” https://canviclimatic.gencat.cat/es/actua/factors_demissio_associats_a_lenergia/ (accessed Jun. 11, 2022).
- [27] “Bosques y tecnología para la captura de CO₂ | El futuro no se detiene | EL PAÍS.”

<https://elpais.com/economia/el-futuro-no-se-detiene/2020-12-04/bosques-y-tecnologia-para-la-captura-de-co.html> (accessed Jun. 11, 2022).

- [28] “Salario para Ingeniero Mecánico en España - Salario Medio.” <https://es.talent.com/salary?job=ingeniero+mecánico> (accessed Jun. 11, 2022).
- [29] “Distribución de la jornada laboral para 2022,” 2022.
- [30] Comsol Multiphysics, “COMSOL Multiphysics® Software Price List,” 2015, [Online]. Available: <http://collaborate.bu.edu/engit/Comsol?action=AttachFile&do=get&target=comsol-pricelist.pdf>
- [31] “Función escalón de Heaviside.” <https://es.alegsonline.com/art/43136> (accessed Jun. 15, 2022).

Anexos

A1. Modelización de una celda de ED en 2D sin *spacers*

Introducción

Esta modelización está basada en un ejemplo proporcionado por COMSOL Multiphysics sobre la desalinización en la ED [17]. A partir de dicho ejemplo, se han modificado los parámetros y la geometría para adaptarlos al caso que se quiere estudiar. Las características principales son:

- La geometría es en 2D.
- Se trabaja con una disolución de NaCl.
- No se analiza un *stack* entero, tan solo una unidad repetitiva, es decir, una unidad que se puede ir repitiendo tantas veces como se quiera para formar un *stack*.
- Para resolver el ejemplo se realizan dos estudios: uno que resuelve el flujo laminar y el otro que resuelve la distribución de las concentraciones de Na⁺ y Cl⁻.

Objetivo

El objetivo de esta simulación es poder comparar los resultados obtenidos en un caso sin *spacers* con el caso con *spacers* mostrado en 3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D. Para poder compararlos correctamente deben tener las mismas dimensiones y condiciones de contorno, siendo la única diferencia entre ambos casos la presencia de *spacers*. El hecho que el caso sin *spacers* sea en 2D no afecta a los resultados, ya que como no hay nada que altere el flujo, este caso no depende de la profundidad de la célula, y en consiguiente, un análisis en 2D es suficiente para ver el comportamiento de esta.

Parámetros de entrada

Los parámetros usados para realizar la simulación han estado los siguientes:

Geometría:

- Ancho del canal (W_{ch}) = 0.95 mm
- Ancho de la membrana (W_m) = 0.62 mm
- Longitud de la celda (L) = 19.66 mm

Flujo:

- Velocidad media (U_0) = 7 cm/s

Especies:

- Difusividad del Na^+ (D_{Na}) = $2.5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
- Difusividad del Cl^- (D_{Cl}) = $2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
- Concentración de carga en la membrana (c_{Mem}) = $1000 \text{ mol}/\text{m}^3$
- Concentración a la entrada de Na^+ y Cl^- (c_{Cl_0}) = $500 \text{ mol}/\text{m}^3$
- Diferencia de potencial (V_{tot}) = 1,5 V

Geometría del objeto de estudio

Como se comentaba en la introducción, la geometría que se analiza es en 2D. Está conformada por dos membranas de intercambio iónico, un canal central y dos semicanales en los laterales.

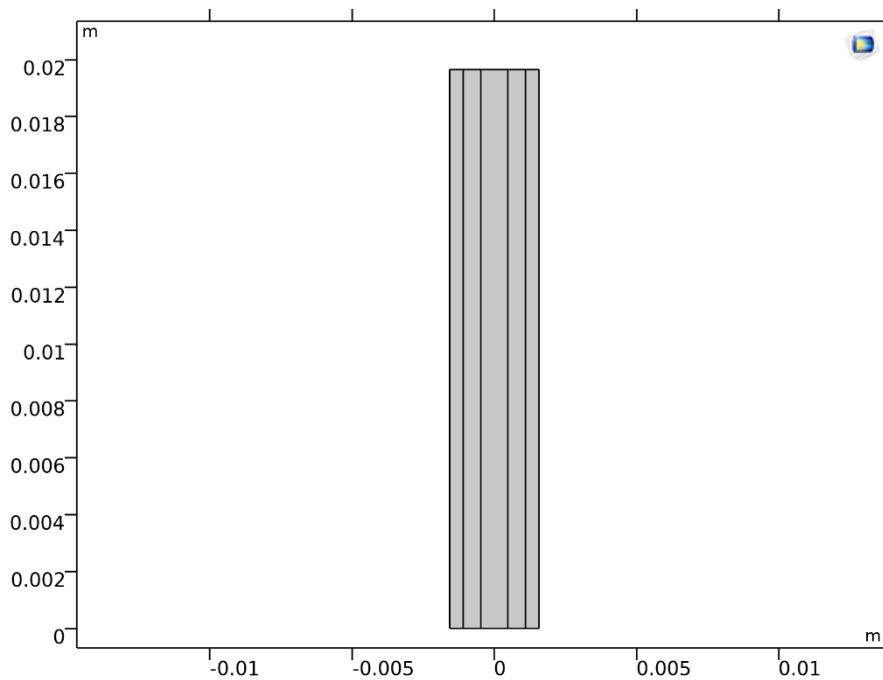


Figura 62. Geometría del caso 2D con ED (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 63 se muestra la distribución exacta de los canales y membranas.

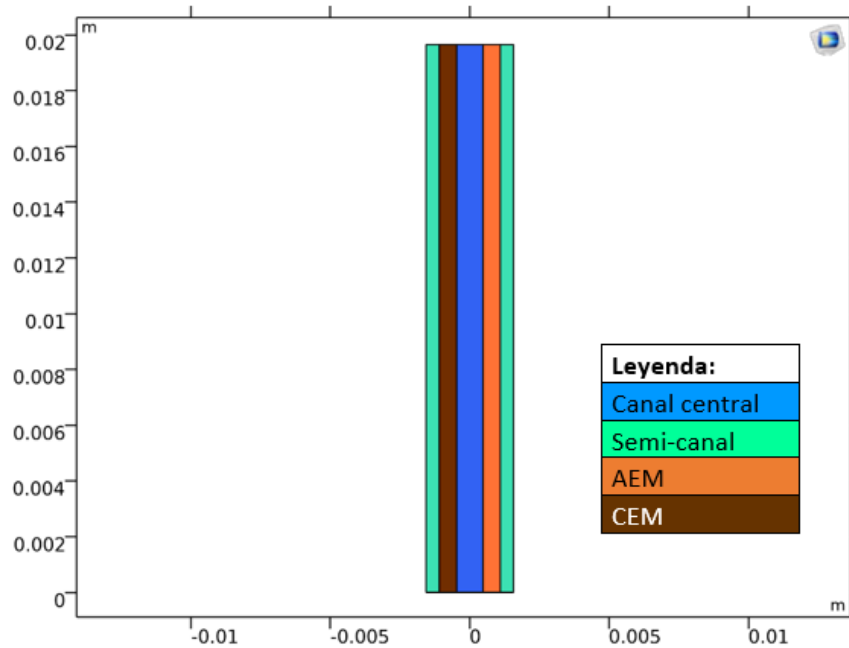


Figura 63. Distribución exacta de los canales y membranas (Fuente: elaboración propia).

Condiciones de contorno

En primer lugar, hay que indicar que el material que se analiza es agua, mediante la opción *add material from library*:

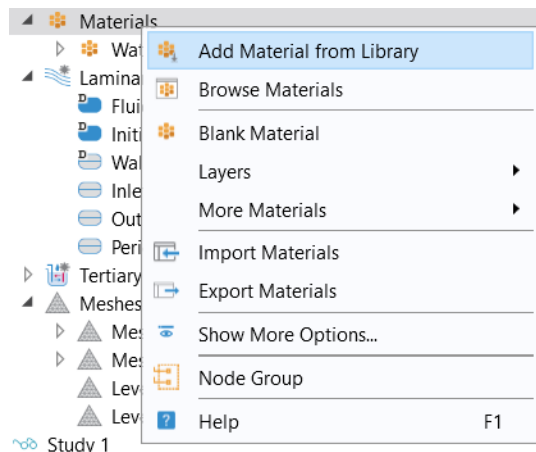


Figura 64. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).

Para poder resolver esta simulación se usarán dos módulos: el de *laminar flow* y el de *tertiary current distribution, Nernst-Planck*. Las ecuaciones que actúan en el módulo de *laminar Flow* son las de Navier-Stokes (Ec. (4) y Ec. (6)), y las que actúan en el módulo de electroquímica son las principales mostradas

en el apartado 2.3.3. Ecuación de Nernst-Planck y 2.3.4. Conservación de la carga: electroneutralidad y Poisson. En la Figura 65 se muestran las condiciones de contorno del módulo de *laminar flow*.

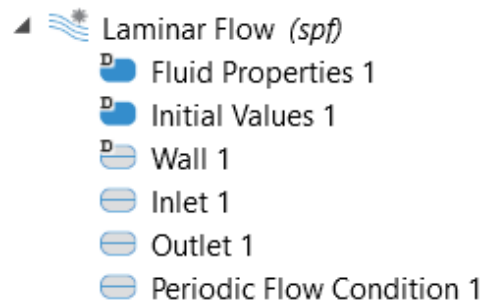


Figura 65. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente:elaboración propia).

Primeramente, en la condición de *laminar flow* se debe especificar que el flujo laminar ocurre solo en el canal central y en los semicanales, y que las propiedades del fluido son las del material escogido (agua, en este caso). Además, hay que establecer que el flujo es incompresible, tal como se muestra en la Figura 66 y Figura 67, respectivamente.

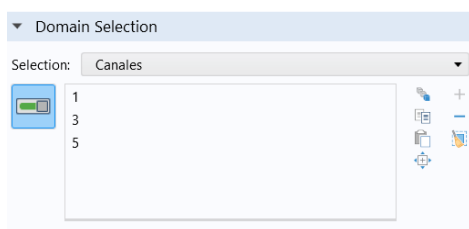


Figura 66. Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).

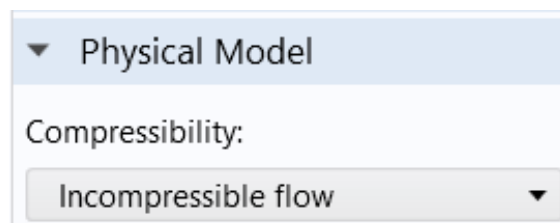


Figura 67. Selección del dominio del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inlet*) y salida (*outlet*) del flujo. Esto se hace mediante las condiciones *inlet* y *outlet*.

- *Inlet*: se define que el flujo que entra está totalmente desarrollado y que la velocidad media de ese flujo es U_0 (7 cm/s), tal como se puede apreciar en la Figura 68.

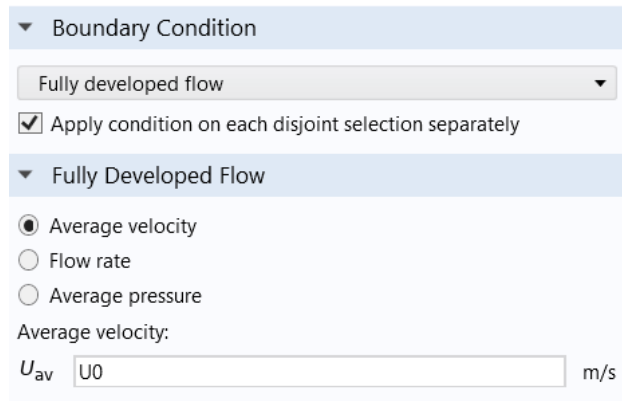


Figura 68. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 69 se pueden observar los lados en los que se aplica la condición de *inlet*.

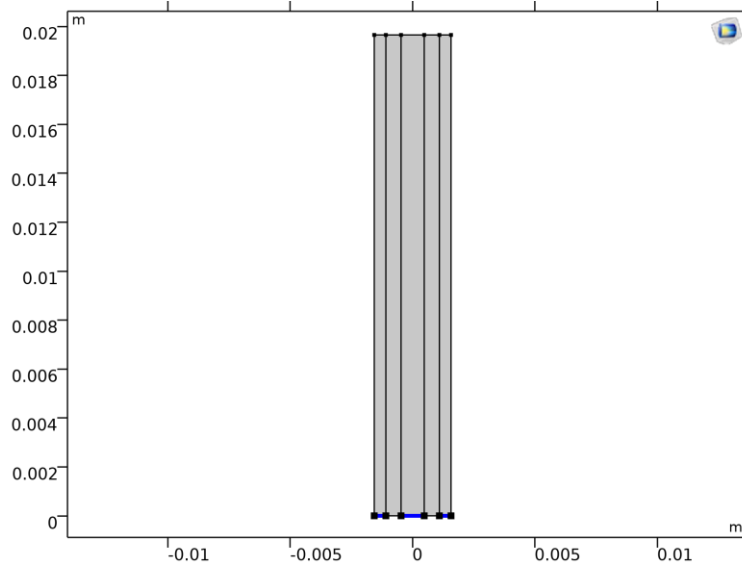


Figura 69. Entradas del flujo (Fuente: elaboración propia).

- **Outlet:** se define que la presión a la salida es cero Pa y que no hay flujo de retorno, tal como se puede apreciar en la Figura 70.

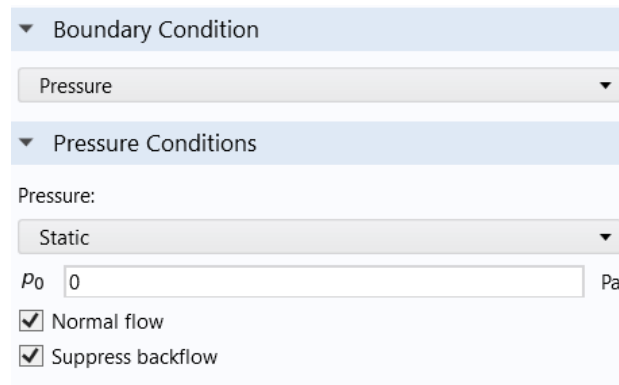


Figura 70. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 71 se pueden observar los contornos en los que se aplica la condición *outlet*:

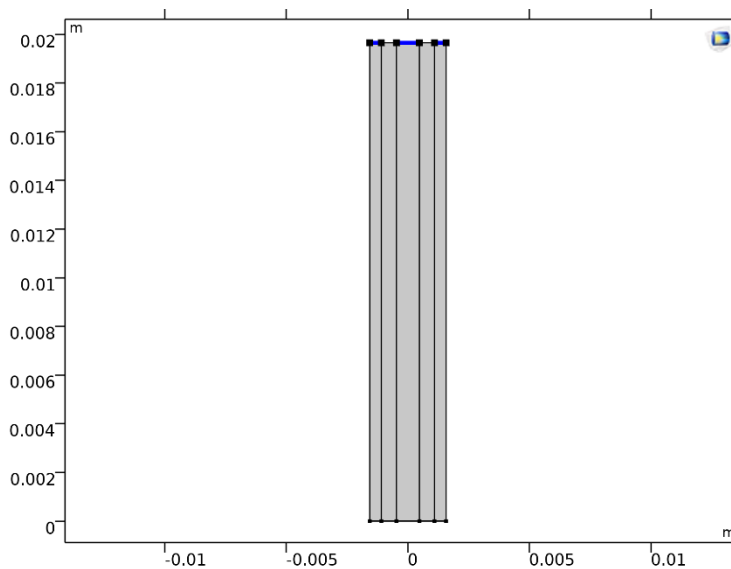


Figura 71. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).

Por último, hay que establecer una condición periódica para señalar que se está trabajando con una unidad repetitiva y, por lo tanto, lo que ocurre en los extremos de los semicanales debe ser lo mismo. Sin esta condición periódica, el programa interpretaría que los semicanales son como el canal central, solo que más estrechos, y este no es el caso, pues los semicanales solo representan la mitad del canal central con el objetivo de crear una unidad repetitiva exacta. Para definir esta condición periódica hay que usar la condición llamada *periodic flow condition*, e indicar que la diferencia de presión entre ambos extremos es de cero Pa:

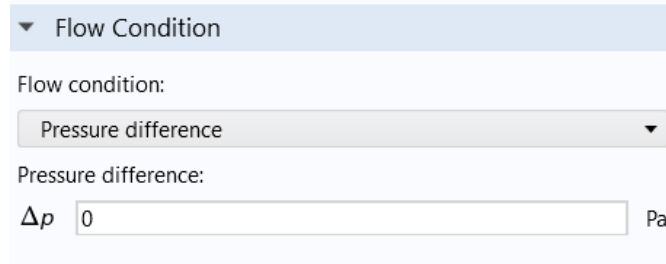


Figura 72. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 73 se pueden observar los contornos en los que se aplica la *periodic flow condition*:

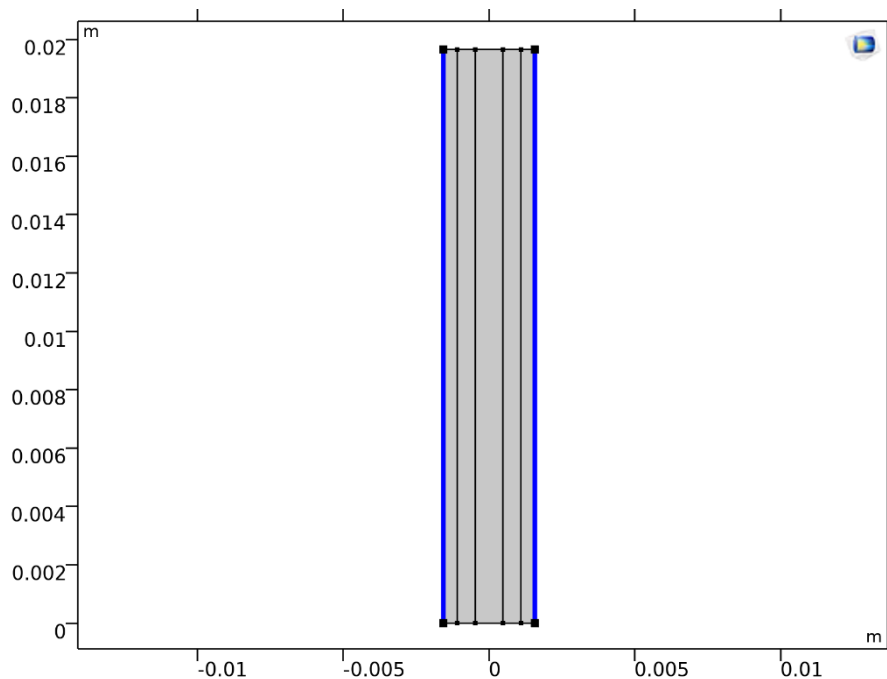


Figura 73. Contorno de aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

Ahora se introducirán las condiciones de contorno del módulo de electroquímica. En la Figura 74 se pueden ver dichas condiciones de contorno:

- ▾
📄 Tertiary Current Distribution, Nernst-Planck (*tcd*)
 - 📄 Electrolyte 1
 - 📄 No Flux 1
 - 📄 Insulation 1
 - 📄 Initial Values 1
 - 📄 Ion Exchange Membrane (Cation Selective)
 - 📄 Ion Exchange Membrane (Anion Selective)
 - 📄 Periodic Condition 1
 - 📄 Electrolyte Potential 1
 - 📄 Inflow 1
 - 📄 Outflow 1

Figura 74. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).

El primer paso es indicar que el modelo de conservación de la carga es el de electroneutralidad, esto se consigue mediante la opción *electroneutrality*, que se encuentra dentro del módulo de *tertiary current distribution*. Se ha escogido la condición de electroneutralidad en vez de la de Poisson, porque esta última es mucho más difícil de hacer converger [18]. El segundo paso es definir las propiedades del electrolito que circula por los canales. Es necesario establecer a que temperatura se encuentra, que campo de velocidades actúa, las propiedades difusivas de las especies diluidas y las propiedades de las especies en la migración debida al campo eléctrico. En la Figura 75 se muestran estas condiciones:

Figura 75. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).

Donde el *common model input* tiene un valor igual a T (298,15 K), el campo de velocidades (*velocity field*) se obtiene de resolver el flujo laminar seleccionando la opción *Velocity field (spf)* y en difusión se indican los coeficientes de difusión del Na⁺ y el Cl⁻. Además, hay que indicar que la movilidad está gobernada por la relación Nernst-Einstein e indicar la carga de las especies, tal como se muestra en la Figura 76:

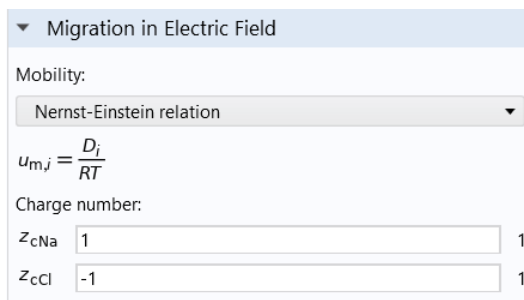


Figura 76. Definición de la movilidad (Fuente: elaboración propia).

Una vez definidas las propiedades del electrolito, se pueden definir las propiedades de las membranas de intercambio iónico. Las propiedades a definir son las mismas que en el electrolito, pero hay que añadir la carga fija y la porosidad de la membrana.

- CEM: En la Figura 77 y en la Figura 78 se muestran las propiedades de dicha membrana.

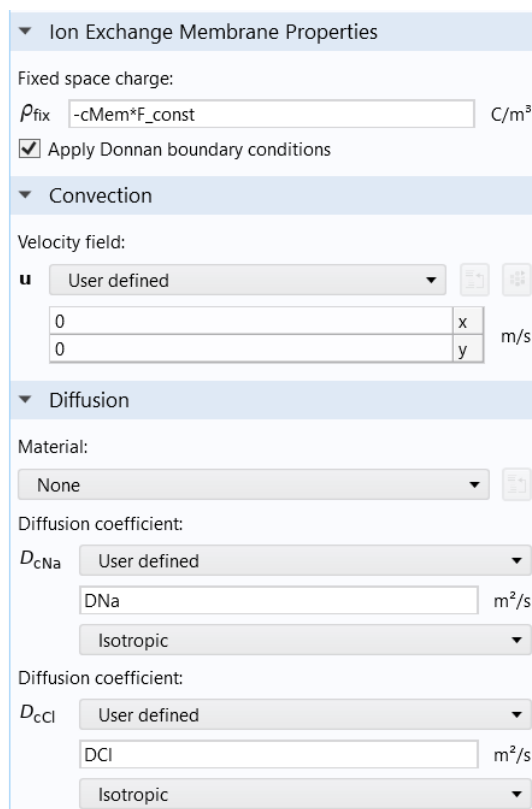


Figura 77. Propiedades de la CEM (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 77, F_{const} es la constante de Faraday (96485,3 C/mol), como la membrana solo deja pasar cationes, está cargada negativamente. El campo de velocidades se establece como cero, ya que el flujo no circula por las membranas y los coeficientes de difusión son los mismos que se han definido antes.

En la Figura 78 se muestran las propiedades restantes por definir:

▼ Migration in Electric Field

Mobility:

Nernst-Einstein relation ▼

$$u_{m,j} = \frac{D_j}{RT}$$

Charge number:

z_{cNa} 1

z_{cCl} 1

▼ Porous Matrix Properties

Electrolyte volume fraction:

ϵ_l 1

▼ Effective Transport Parameter Correction

Diffusion:

Bruggeman ▼

Figura 78. Propiedades restantes de la CEM (Fuente: elaboración propia).

La migración en el campo eléctrico se define igual que en el electrolito. El valor de la porosidad de la membrana es el que se definió en el ejemplo, 0,15 [17]. La aplicación de la CEM se puede apreciar en la Figura 79.

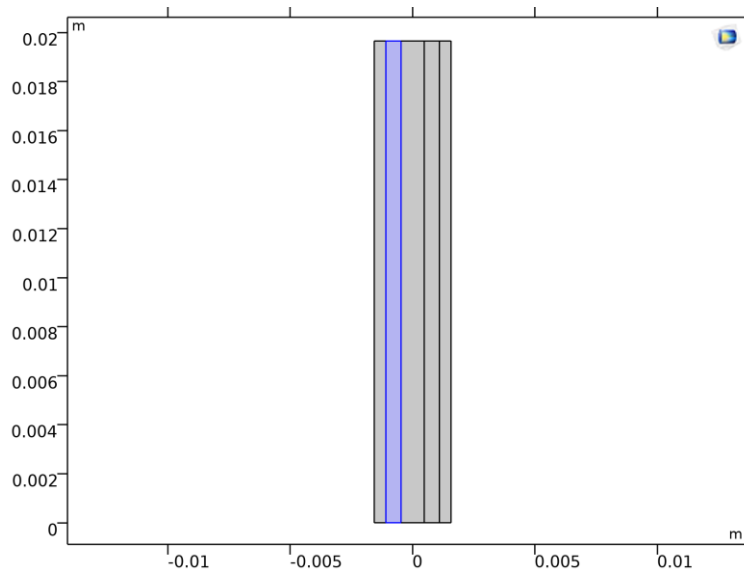


Figura 79. Aplicación de la CEM (Fuente: elaboración propia).

- AEM: En la Figura 80 se muestran las propiedades de dicha membrana. El campo de velocidades, los coeficientes de difusión, la migración y la porosidad son iguales que en la CEM y, por lo tanto, no se volverán a mostrar.

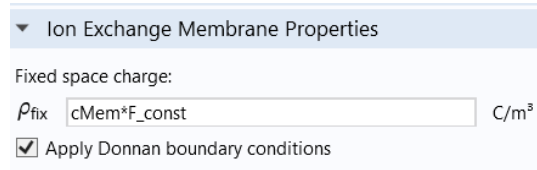


Figura 80. Propiedades de la AEM (Fuente: elaboración propia).

La aplicación de la AEM se puede apreciar en la Figura 81.

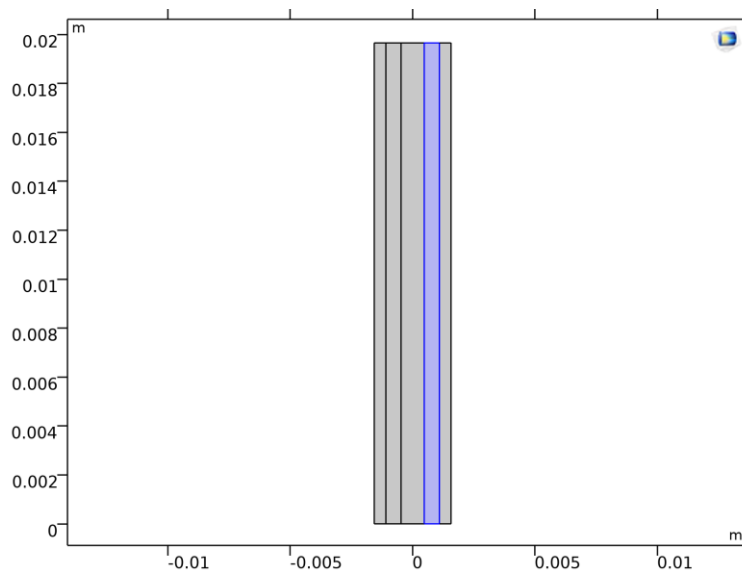


Figura 81. Aplicación de la AEM (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inflow*) y salida (*outflow*) del flujo de disolución. Para ello se usan las condiciones *inflow* y *outflow*.

- *Inflow*: se establece que el flujo entra como en la Figura 69 y con una concentración de valor c_{Cl_0} (500 mol/m^3). En la Figura 82 se muestran las condiciones de entrada del flujo.

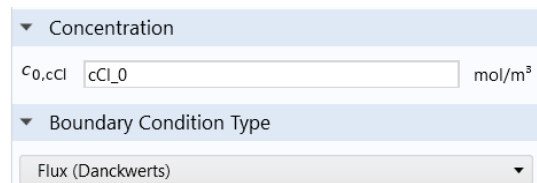


Figura 82. Condiciones de entrada del flujo de disolución (Fuente: elaboración propia).

- *Outflow*: se establece que el flujo sale como en la Figura 71.

Una vez definidas las condiciones de *inflow* y *outflow*, hay que definir las condiciones referentes a la diferencia de potencial aplicada. Más concretamente se usarán dos condiciones: *periodic condition* y *electrolyte potential*.

- *Electrolyte potential*: se establece que el potencial en el lado izquierdo es de 0 V.

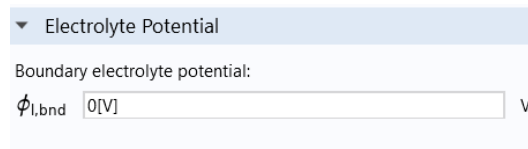


Figura 83. Potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).

La condición mostrada en la Figura 83 se aplica en un punto, tal como se muestra en la Figura 84.

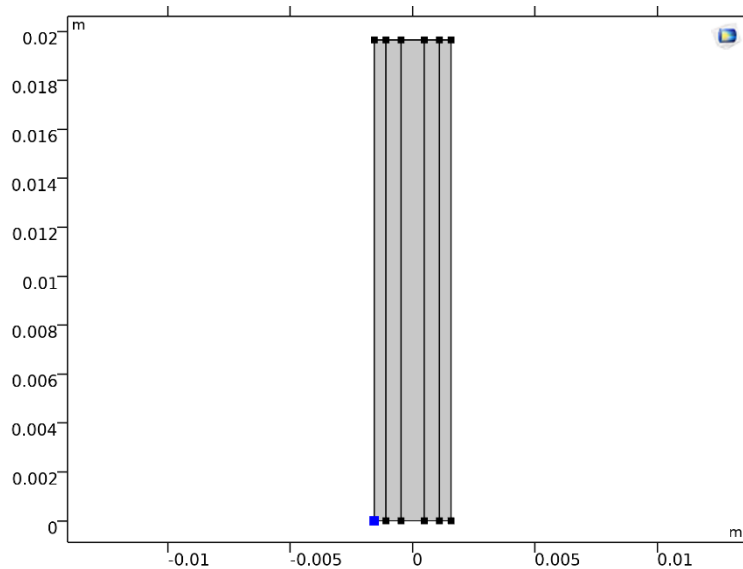


Figura 84. Punto de aplicación del potencial del electrolito (Fuente: elaboración propia).

- *Periodic condition*: se establece una condición periódica, al igual que en el flujo laminar, para indicar que lo que pasa en los extremos de los semicanales es lo mismo. En dicha condición se especifica que el extremo izquierdo del semicanal izquierdo menos el extremo derecho del semicanal derecho provoca una diferencia de potencial de valor $-V_{tot}$ (-1,5 V), en otras palabras, el extremo derecho se encuentra a un potencial V_{tot} . En la Figura 85, se puede apreciar dicha condición.

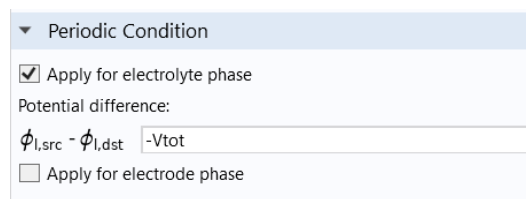


Figura 85. Condición periódica en el módulo de electroquímica (Fuente: elaboración propia).

Como se ha mencionado previamente, la condición periódica se aplica en los extremos de los semicanales, tal como se muestra en la Figura 86.

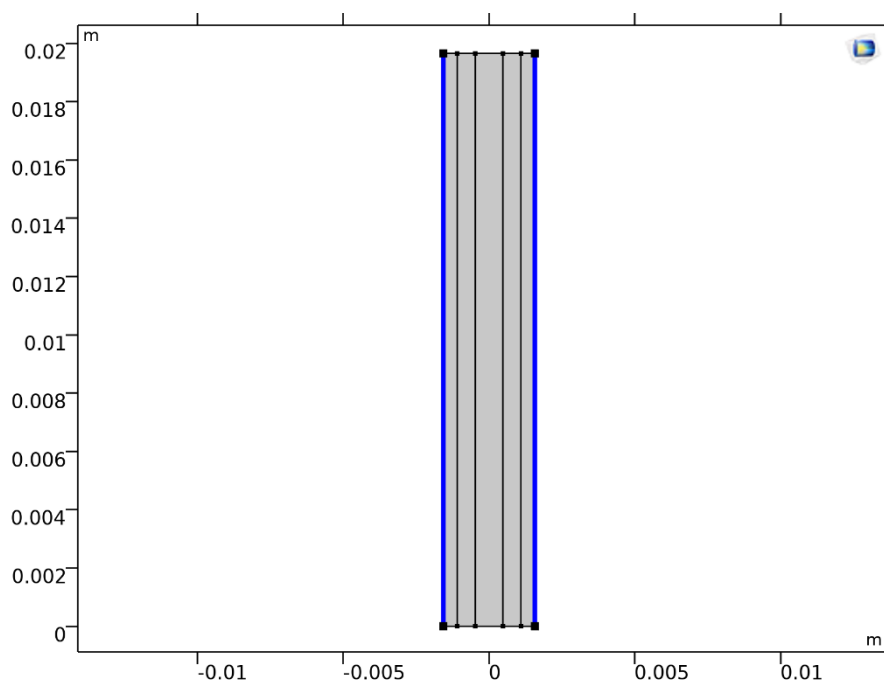


Figura 86. Aplicación de la condición periódica (Fuente: elaboración propia).

Mallado

La malla que se ha realizado es la que proponía el ejemplo en el que se basa esta modelización. Se ha efectuado con la opción *mapped*, la cual permite hacer mallas estructuradas con cuadriláteros. En esta opción se han añadido cinco distribuciones, mediante la opción *distribution*, que tienen como objetivo definir cómo está estructurada dicha malla [17].

- *Distribution 1*: el objetivo de esta primera distribución es hacer un mallado general de toda la geometría, sin hacer un especial énfasis. En la Figura 87 se muestran las especificaciones de la primera distribución.

▼ Distribution

Distribution type:
Fixed number of elements ▼

Number of elements:
100

Figura 87. Características de la distribución 1 (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 88 se muestra el contorno donde se aplica la distribución 1.

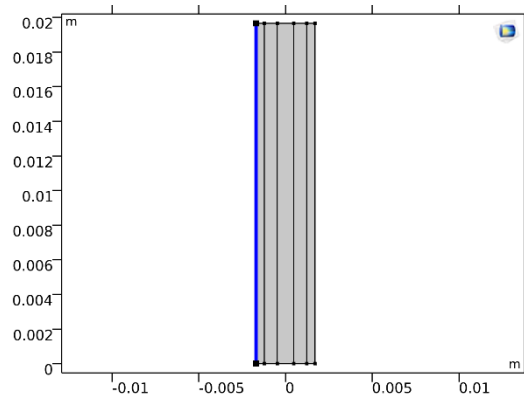


Figura 88. Contorno de aplicación de la distribución 1 (Fuente: elaboración propia).

- **Distribution 2:** el objetivo de la distribución 2 es mallar con detalle el canal central. La malla se hace más fina cerca de los bordes y se ha marcado la opción para que se realice de manera simétrica. En la Figura 90 y Figura 89 se muestran las especificaciones de la segunda distribución y los contornos de aplicación, respectivamente.

▼ Distribution

Distribution type:
Predefined ▼

Number of elements:
100

Element ratio:
10

Growth rate:
Linear ▼

Symmetric distribution

Reverse direction

Figura 90. Características de la distribución 2 (Fuente: elaboración propia).

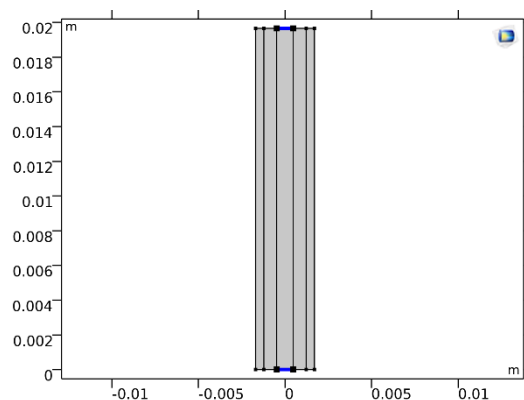


Figura 89. Contornos de aplicación de la distribución 2 (Fuente: elaboración propia).

- **Distribution 3:** el objetivo de la distribución 3 es mallar con detalle los semicanales. La malla se hace más fina cerca de los contornos derechos de los elementos que malla, esto se consigue

mediante la opción *reverse direction*. En la Figura 92 y Figura 91 se muestran las especificaciones de la tercera distribución y los contornos de aplicación, respectivamente.

▼ Distribution

Distribution type:
 Predefined ▼

Number of elements:
 20

Element ratio:
 10

Growth rate:
 Linear ▼

Symmetric distribution

Reverse direction

Figura 92. Características de la distribución 3 (Fuente: elaboración propia).

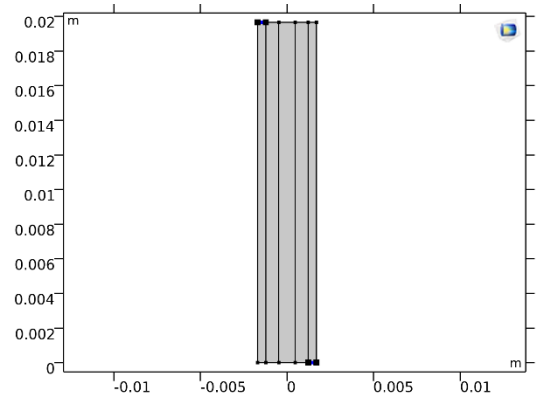


Figura 91. Contornos de aplicación de la distribución 3 (Fuente: elaboración propia).

- **Distribution 4:** el objetivo de la distribución 4 es mallar con detalle los semicanales. Esta malla se complementa con la creada en la distribución 3, ya que ahora la malla se hace más fina cerca de los contornos izquierdos de los elementos que malla, esto se consigue desmarcando la opción *reverse direction*. En la Figura 94 y Figura 93 se muestran las especificaciones de la cuarta distribución y los contornos de aplicación, respectivamente.

▼ Distribution

Distribution type:
 Predefined ▼

Number of elements:
 20

Element ratio:
 10

Growth rate:
 Linear ▼

Symmetric distribution

Reverse direction

Figura 94. Características de la distribución 4 (Fuente: elaboración propia).

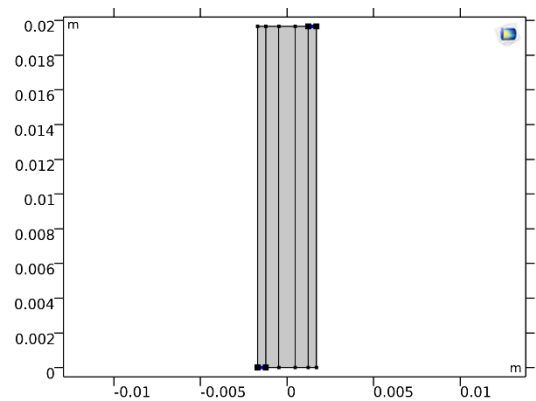


Figura 93. Contornos de aplicación de la distribución 4 (Fuente: elaboración propia).

- **Distribución 5:** el objetivo de la distribución 5 es mallar con detalle las membranas. La malla se hace más fina cerca de los bordes y se ha marcado la opción para que se realice de manera simétrica. En la Figura 95 y Figura 96 se muestran las especificaciones de la quinta distribución y los contornos de aplicación, respectivamente.

▼ Distribution

Distribution type:
Predefined

Number of elements:
20

Element ratio:
2

Growth rate:
Linear

Symmetric distribution
 Reverse direction

Figura 95. Características de la distribución 5 (Fuente: elaboración propia).

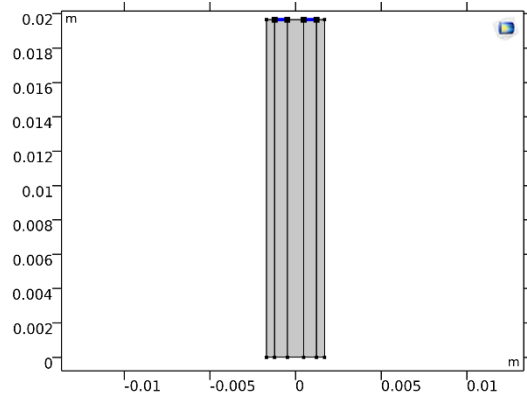


Figura 96. Contornos de aplicación de la distribución 5 (Fuente: elaboración propia).

Con estas condiciones, la malla que se forma está compuesta por 18.000 elementos cuadrados y tiene el detalle suficiente para proporcionar un resultado fiable sin suponer un tiempo de cálculo muy elevado. En la Figura 97 y Figura 98 se puede ver la malla resultante y una vista más detallada de esta, respectivamente.

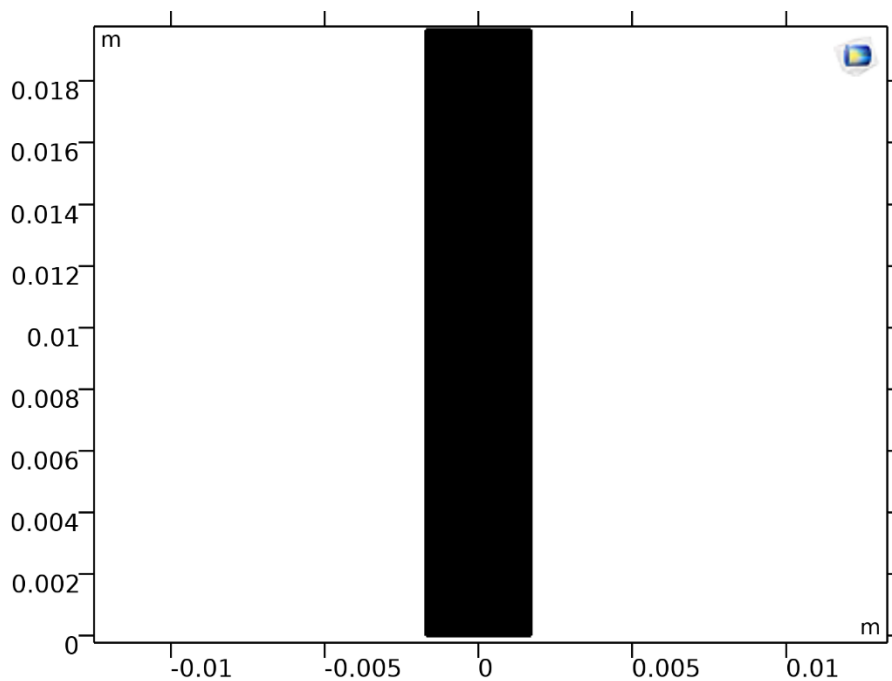


Figura 97. Malla generada (Fuente: elaboración propia).

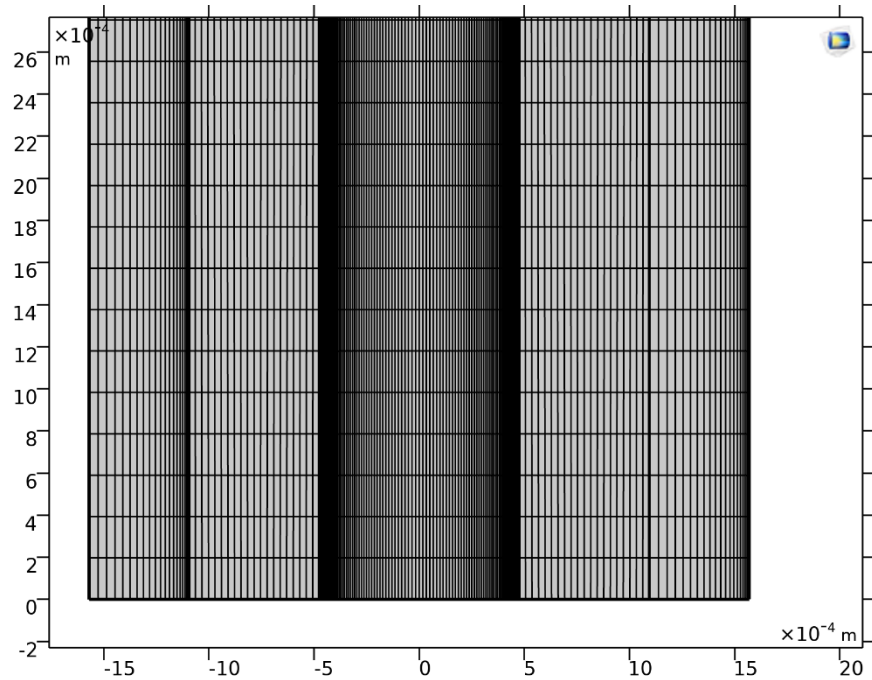


Figura 98. Detalle de la malla (Fuente: elaboración propia).

Resolución en COMSOL

Como hay dos módulos que resolver es necesario emplear dos estudios y que cada uno resuelva un módulo o bien, usar un estudio, pero que resuelva el problema en dos pasos (uno para cada módulo). Se ha optado por la primera opción, ya que con la segunda hay que esperar a que hayan finalizado los dos pasos para ver los resultados.

Se ha empleado un estudio para resolver el módulo de *laminar flow (Study 1)* y otro para resolver el de *tertiary current distribution, Nernst-Planck (Study 2)*.

- *Study 1*: se ha indicado que solo debe resolver el módulo de flujo laminar y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los de las no resueltas se deben resolver, tal como se muestra en la Figura 99.

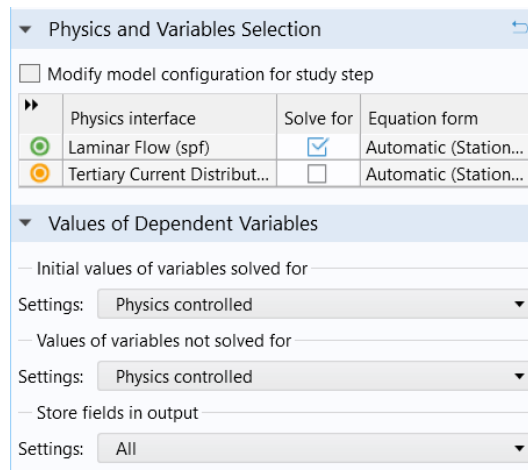


Figura 99. Study 1 (Fuente: elaboración propia).

- *Study 2*: se ha indicado que sólo debe resolver el módulo de electroquímica y que los valores de las variables no resueltas se tienen que extraer del *Study 1*, es decir, el campo de velocidades. Además, se ha realizado un estudio paramétrico con la concentración de la membrana con el objetivo de facilitar la convergencia, variándolo en 0, 500 y 1000 mol/m³. En la Figura 100 se pueden observar las condiciones del estudio.

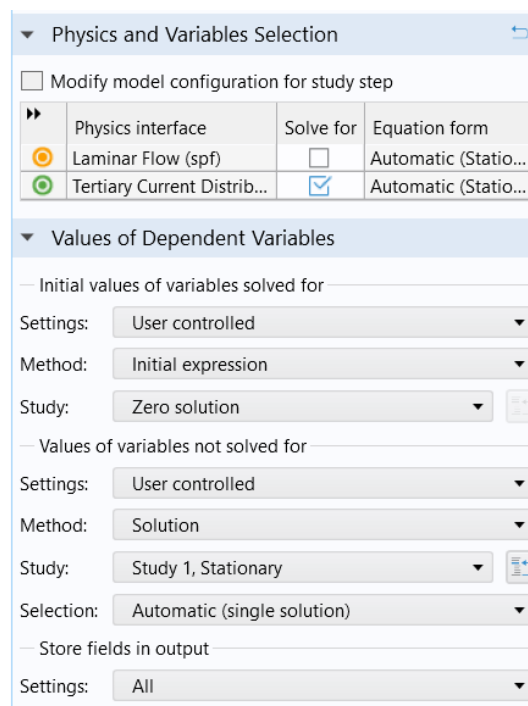


Figura 100. Study 2 (Fuente: elaboración propia).

Resultados

Primeramente, se presentarán los resultados obtenidos al resolver el flujo laminar y, a continuación, se mostrarán los resultados referentes a la electrodiálisis.

- *Laminar flow:*

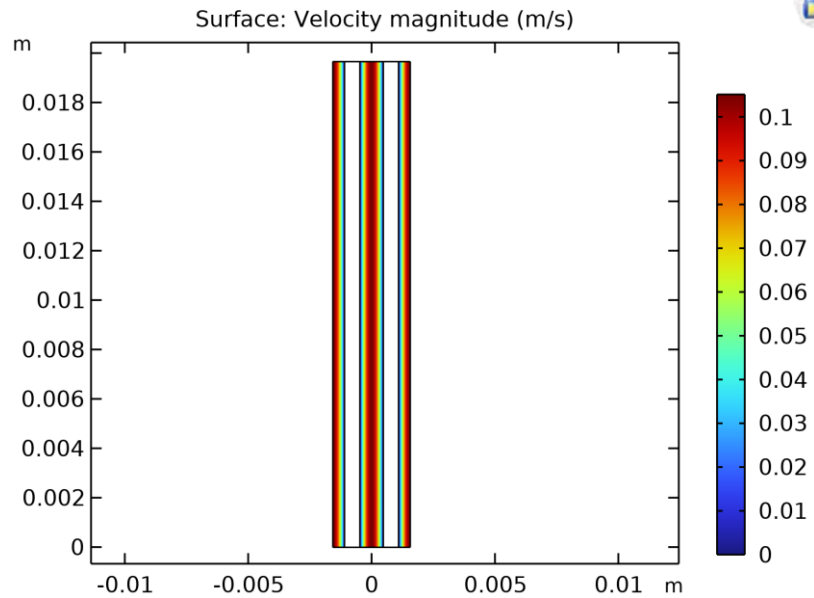


Figura 101. Campo de velocidades del flujo en los canales (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 102 se mostrará con más detalle el gradiente de velocidades que ocurre en el canal y los semicanales.

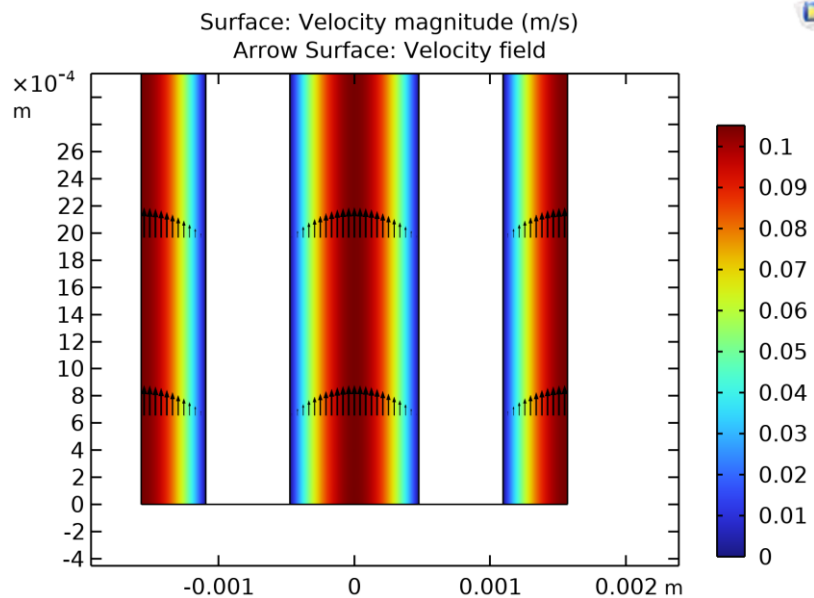


Figura 102. Gradiente de velocidades (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 102 se puede apreciar el perfil parabólico característico de los flujos laminares y la condición de no deslizamiento en las paredes, donde la velocidad es nula. Además, se puede ver cómo el flujo entra de manera totalmente desarrollada en los canales, tal como se había especificado previamente.

- *Tertiary current distribution, Nernst-Planck:*

- Potencial eléctrico:

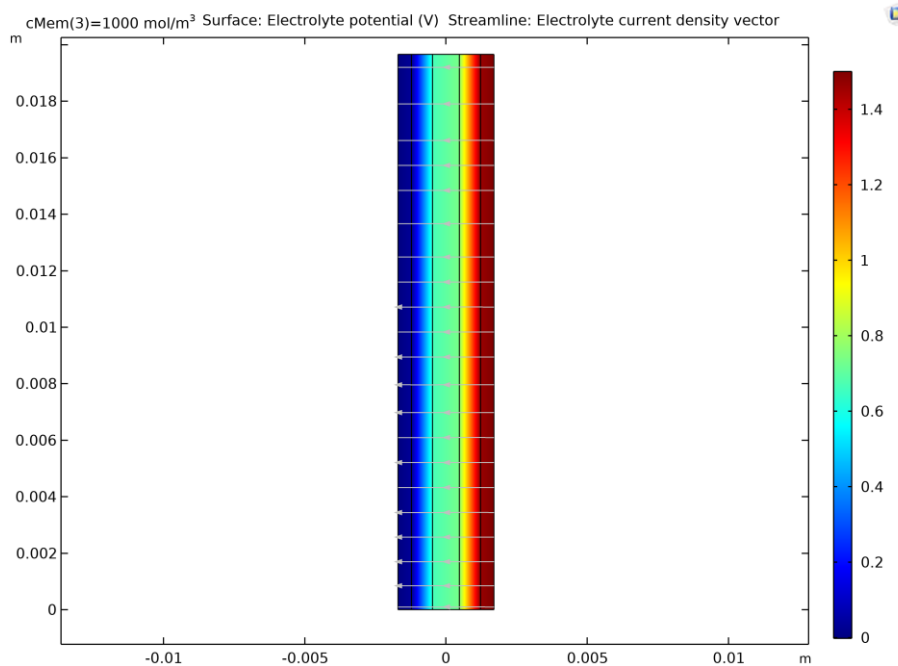


Figura 103. Potencial eléctrico (Fuente: elaboración propia).

Se puede apreciar en la Figura 103 como el lado derecho se encuentra a un potencial V_{tot} y el izquierdo a un potencial de 0 V, tal como se había definido. Además, se puede ver como las caídas de potencial se producen principalmente en las membranas.

- Concentración de Na^+ :

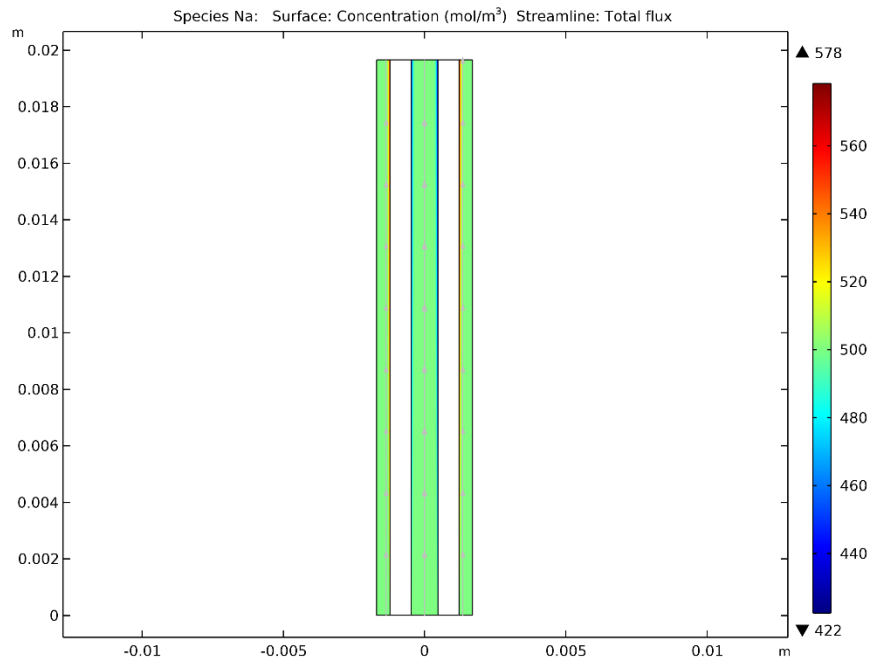


Figura 104. Concentración de Na⁺ (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 105 se puede apreciar con más detalle el gradiente de concentración del Na⁺.

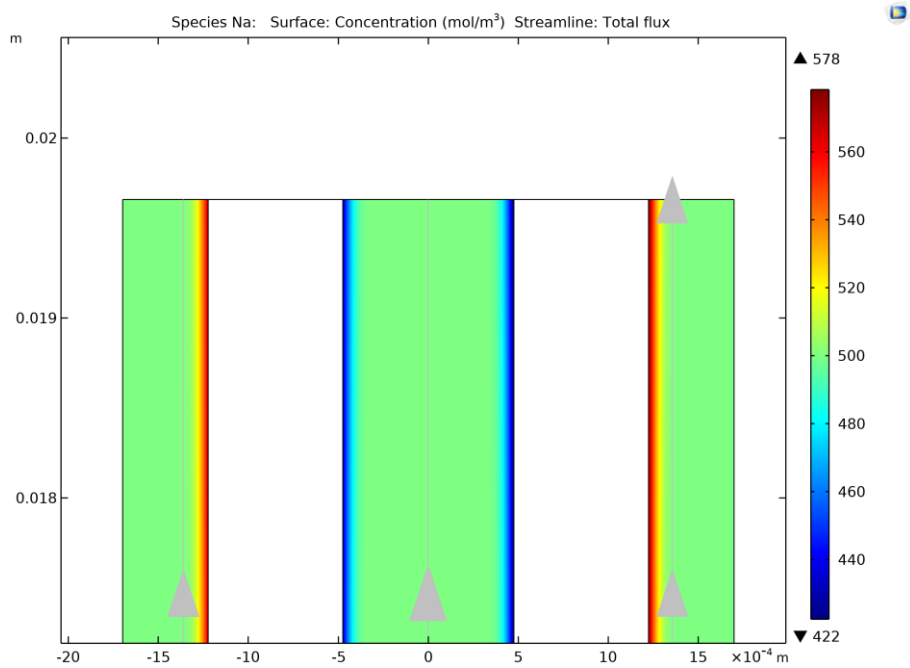


Figura 105. Gradiente de concentración de Na⁺ (Fuente: elaboración propia).

Las concentraciones de Cl⁻ en los canales son idénticas a las de Na⁺, de manera que no se mostrarán.

Observando la Figura 105, se puede apreciar como el canal central es el que transporta la disolución diluida y los semicanales transportan la concentrada. Además, se puede ver como los gradientes de concentración solo ocurren en las zonas más próximas a la membrana, y el resto del canal o semicanal no se ve afectado prácticamente.

En los semicanales la concentración llega hasta 578 mol/m^3 , mientras que en el canal central la disolución llega a diluirse hasta los 422 mol/m^3 . A la salida del canal central, la concentración media es de 491.83 mol/m^3 , mientras que en los semicanales izquierdo y derecho la concentración media es de 507.5 y 508.66 mol/m^3 , respectivamente. Estas medidas han sido obtenidas con la opción *Evaluation Group*, mediante la selección *Line average*, seleccionando las líneas de salida y especificando que la variable a calcular tiene que ser cNa.

A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica

Introducción

La primera modelización que se realizó fueron los *spacers* con forma cilíndrica. Las dimensiones estaban basadas en las del artículo que proponía unos *spacers* con secciones cónicas y cilíndricas, pero sin usar esa geometría [16]. La modelización está basada en un ejemplo proporcionado por COMSOL Multiphysics sobre el mezclado en flujos laminares y como obtener un medidor de la calidad del mezclado a partir de la varianza [15]. A partir de dicho ejemplo, se han modificado los parámetros y la geometría para adaptarlos al caso que se quiere estudiar. Las características principales son:

- La geometría es en 3D.
- Se trabaja con agua.
- Se analiza el canal central solamente.
- Para resolver el ejemplo se ejecuta un estudio con dos *steps*: uno que resuelve el flujo laminar y el otro que resuelve el transporte de especies diluidas.
- Los *spacers* tienen forma cilíndrica.
- Se emplea la varianza para calcular la calidad del *mixing*.

Objetivo

El objetivo de esta simulación es poder cuantificar la calidad del mezclado en un flujo laminar con los *spacers* cilíndricos. La simulación consiste en hacer entrar un flujo, en el cual, una mitad tiene una concentración determinada de una sustancia diluida ficticia, y la otra mitad no tiene ninguna sustancia diluida. Gracias a los *spacers* las dos zonas con concentraciones distintas se mezclan aun estando en un flujo laminar en una escala muy pequeña. Para comprobar la calidad del *mixing* se utiliza la varianza, concretamente, se calcula la varianza de la concentración a la salida y se divide entre la varianza de la concentración a la entrada. El coeficiente obtenido de esta operación (S_{outlet}) indica en que grado se han mezclado estas dos zonas y aporta información sobre qué tipo de *spacers* mezcla mejor [15]. La fórmula de la varianza aplicada a la concentración y del coeficiente S_{outlet} se ha mostrado previamente en la Ec. (27) y (28).

El coeficiente S_{outlet} para un proceso con un mezclado perfecto sería de cero, y un valor de 1 indicaría que no se ha mezclado en absoluto.

Para poder definir que una mitad de la entrada entre con una concentración y la otra mitad entre sin ninguna sustancia diluida, es necesario implementar una función escalón de Heaviside mediante la opción de función *Step* [15]. La función escalón de Heaviside es una función discontinua cuyo valor es

cero para cualquier entrada negativa, y 1 para cualquier entrada positiva. En las condiciones de contorno se mostrará como se implementa [31].

Parámetros de entrada

Como se puede comprobar, los parámetros de la geometría son muy parecidos a los usados en el apartado 3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D.

Geometría:

- Grosor del canal (D_{tot}) = 0.787 mm
- Longitud del canal (L) = 19.66 mm
- Profundidad del canal (A_{ch}) = 3.93 mm
- Diámetro de los *spacers* ($D1$) = 0.447 mm
- Longitud total de una unidad de *spacer* (L_{tot}) = 2.78 mm

Flujo:

- Velocidad media ($U0$) = 7 cm/s

Especies:

- Difusividad de la sustancia (D) = $4.5 \cdot 10^{-9}$ m²/s
- Concentración a la entrada de la sustancia ($c0$) = 27 mol/m³

Geometría del objeto de estudio

La geometría que se analizará es un canal central formado por cinco unidades repetitivas de *spacers*, tal como se había mostrado en el apartado 3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D. La diferencia principal es que en este caso los *spacers* son completamente cilíndricos. En la Figura 106 se muestra la geometría que se analizará.

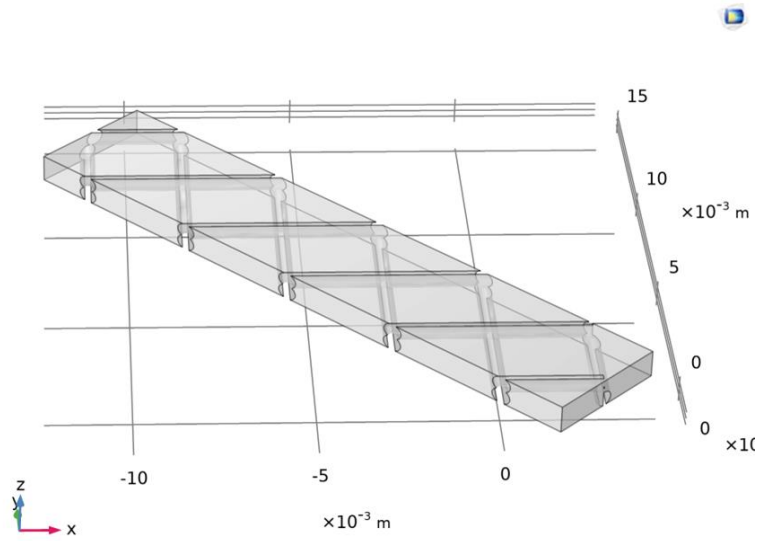


Figura 106. Geometría del canal con spacers cilíndricos (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 107 se muestra la geometría ocultando la cara superior para poder apreciar con más detalle los spacers.

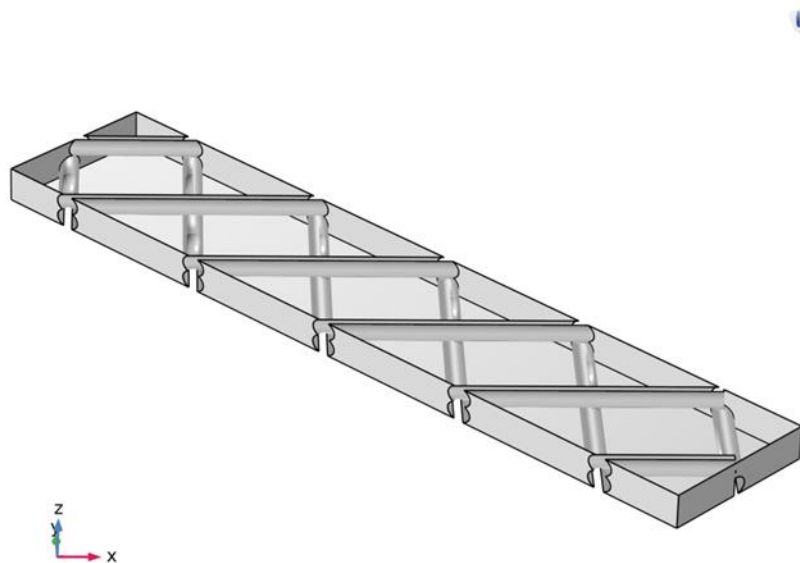


Figura 107. Vista más detallada de los spacers (Fuente: elaboración propia).

Condiciones de contorno

En primer lugar, hay que indicar que el material que se analiza es agua, mediante la opción *add material from library*:

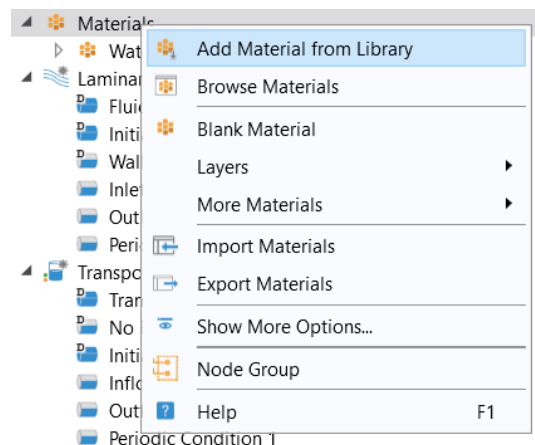


Figura 108. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).

Para poder resolver esta simulación se usarán dos módulos: el de *laminar flow* i el de *transport of diluted species*. Las ecuaciones que actúan en el módulo de *laminar Flow* son las de Navier-Stokes (Ec. (4) y Ec. (6)), y las que actúan en el módulo de transporte de especies diluidas es la Ec. (1). En la Figura 109 se muestran las condiciones de contorno del módulo de *laminar flow*.

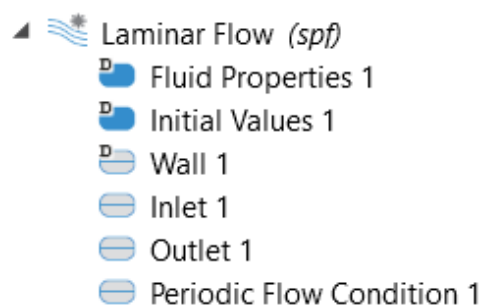


Figura 109. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

Primeramente, en la condición de *laminar flow* se debe especificar que el flujo laminar ocurre en toda la geometría, y que las propiedades del fluido son las del material escogido (agua, en este caso). Además, hay que establecer que el flujo es incompresible, tal como se muestra en la Figura 110.

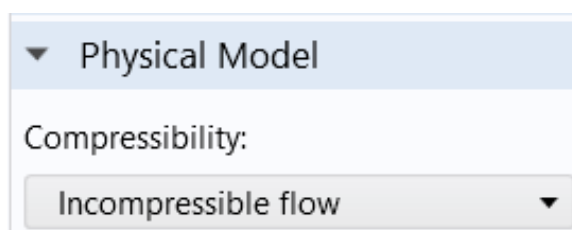


Figura 110. Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inlet*) y salida (*outlet*) del flujo. Esto se hace mediante las condiciones *inlet* y *outlet*.

- **Inlet:** se define que el flujo que entra está totalmente desarrollado y que la velocidad media de ese flujo es U_0 (7 cm/s), tal como se puede apreciar en la Figura 111.

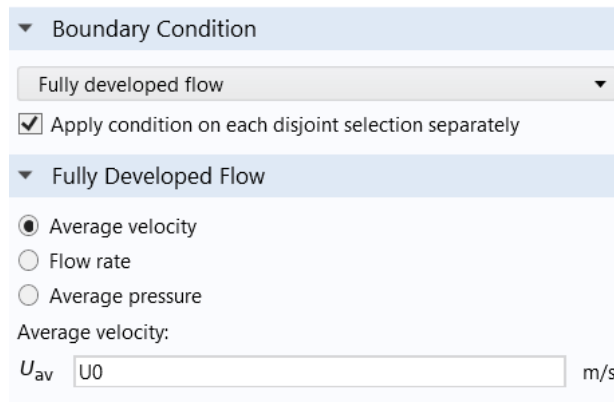


Figura 111. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 112 se pueden observar las superficies en las que se aplica la condición de *inlet*.

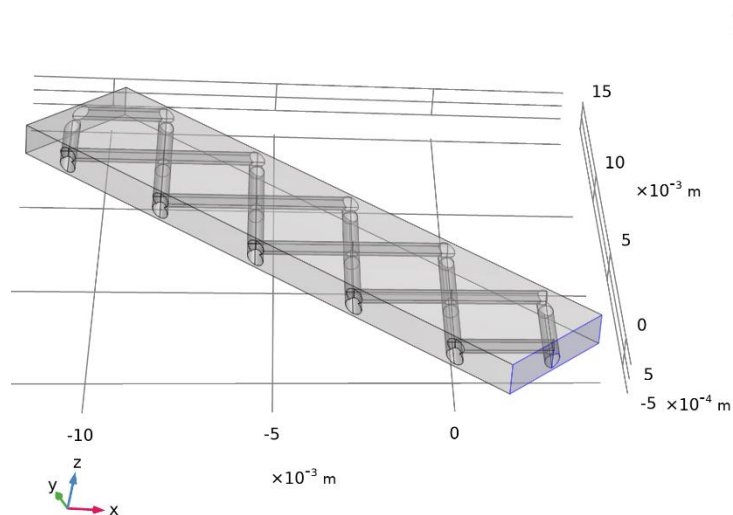


Figura 112. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- **Outlet:** se define que la presión a la salida es cero Pa y que no hay flujo de retorno, tal como se puede apreciar en la Figura 113.

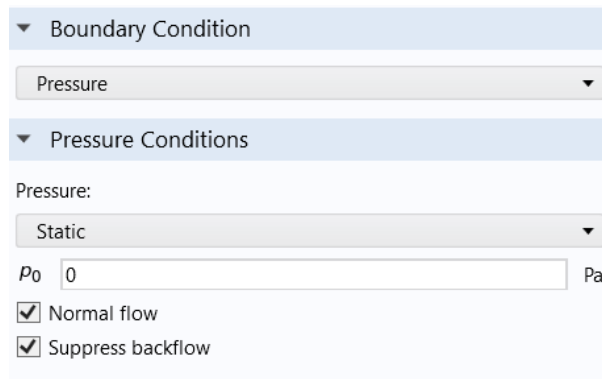


Figura 113. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 114 se pueden observar los contornos en los que se aplica la condición *outlet*:

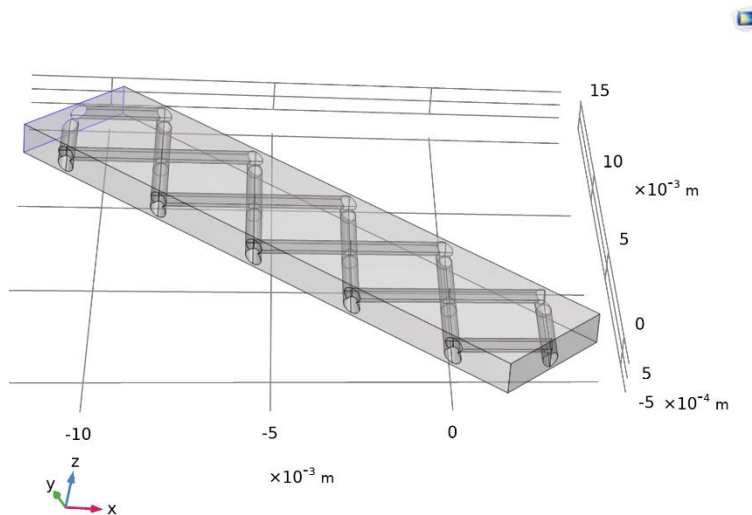


Figura 114. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).

Por último, hay que establecer una condición periódica para indicar que las paredes laterales, paralelas al flujo, también forman parte de una unidad repetitiva, ya que la hilera de *spacers* que se ha modelizado podría tener otras hileras adyacentes en cada lado, como se ha mostrado con los *spacers* reales en la Figura 4. Para definir estas condiciones periódicas hay que usar la condición llamada *periodic flow condition*, e indicar que la diferencia de presión entre las superficies contrarias es igual a cero:

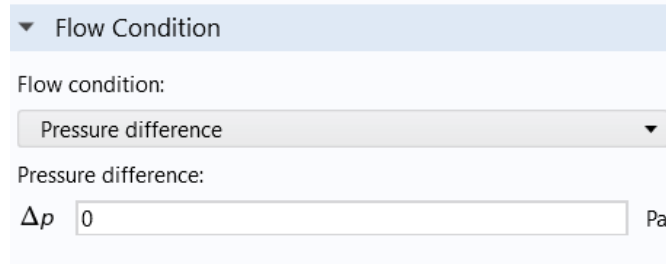


Figura 115. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 116 se pueden observar los contornos en los que se aplica la *periodic flow condition*:

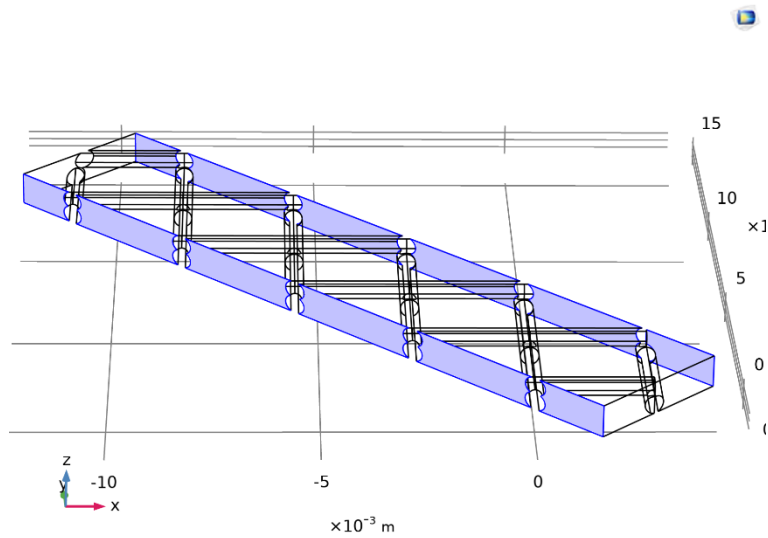


Figura 116. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

Ahora se introducirán las condiciones de contorno del módulo de transporte de especies diluidas:

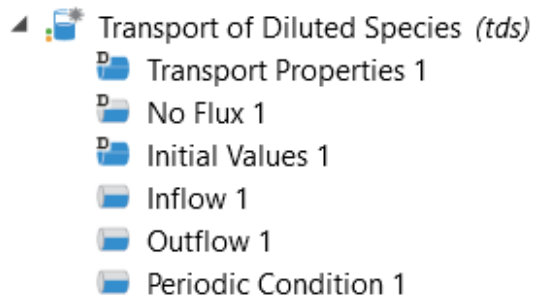


Figura 117. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).

El primer paso es definir las propiedades del transporte que se está efectuando. Es necesario establecer a que temperatura se encuentra, que campo de velocidades actúa y las propiedades difusivas de la sustancia. En la Figura 118 se muestran estas condiciones:

Figura 118. Propiedades del transporte (Fuente: elaboración propia).

Donde el *common model input* tiene un valor igual a T (298,15 K), el campo de velocidades (*velocity field*) se obtiene de resolver el flujo laminar seleccionando la opción *Velocity field (rfd 1)* y en difusión hay que indicar el coeficiente de difusión de la sustancia.

El siguiente paso es definir la entrada (*inflow*) y salida (*outflow*) del flujo. Para ello se usan las condiciones *inflow* y *outflow*.

- *Inflow*: se establece que el flujo entra como en la Figura 112. Como se ha indicado previamente, el flujo entra con un perfil discontinuo de concentración, una mitad entra con una concentración de 27 mol/m³ y la otra mitad con una concentración de 0 mol/m³. La condición matemática que expresa este perfil discontinuo de concentración se muestra en la Ec. (31) [15].

$$c|_{inlet} = \begin{cases} c0, & z > 0 \\ 0, & z \leq 0 \end{cases} \quad (31)$$

Para poder implementar esta función discontinua en COMSOL es necesario usar la función *step* que se había mencionado previamente en el apartado de Objetivo. Gracias a esta función

de Heaviside es posible implementar la Ec. (31) en la condición de *inflow*, tal como se muestra en la Figura 119.

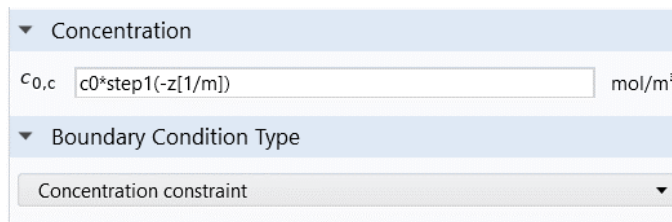


Figura 119. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outflow*: se establece que el flujo sale como en la Figura 114.

Una vez definidas las condiciones de *inflow* y *outflow*, hay que definir una condición periódica, al igual que en el flujo laminar, para indicar que las paredes laterales forman parte de la unidad repetitiva. Las superficies de aplicación son las mismas que las mostradas en la Figura 115.

Por último, para realizar el acoplamiento de los dos módulos físicos, se usará la opción *Multiphysics*. Esta opción permite unir los dos módulos de manera rápida y automática para que el usuario no tenga que hacerlo, pero no se encuentra disponible para todas las combinaciones de módulos físicos. En la Figura 120 se muestra la opción de *Multiphysics* y en la Figura 121 se muestran los módulos acoplados.



Figura 120. Opción de Multiphysics (Fuente: elaboración propia).

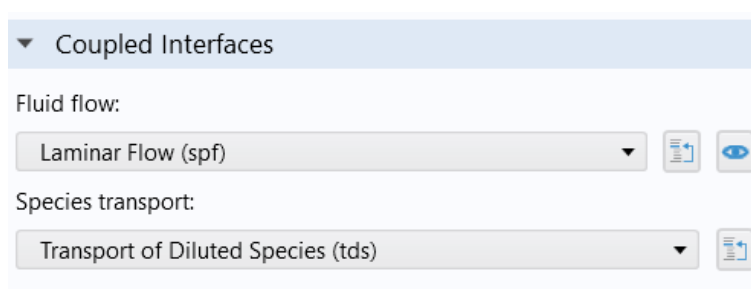


Figura 121. Módulos acoplados (Fuente: elaboración propia).

Mallado

En esta simulación también se ha decidido usar los tetraedros como elementos, por los mismos motivos mencionados en el apartado 3.1.1.6. Como se ha indicado en dicho apartado, para crear la malla de tetraedros hay que utilizar la opción *free tetrahedral*, y a continuación, indicar el tamaño de malla que se quiere usar. Además, fue en este punto donde se decidió emplear elementos lineales en

vez de cuadráticos para todas las simulaciones, ya que se comprobó, después de un análisis de convergencia, que las diferencias no eran significativas, pero la diferencia en los tiempos de cálculo sí que lo era.

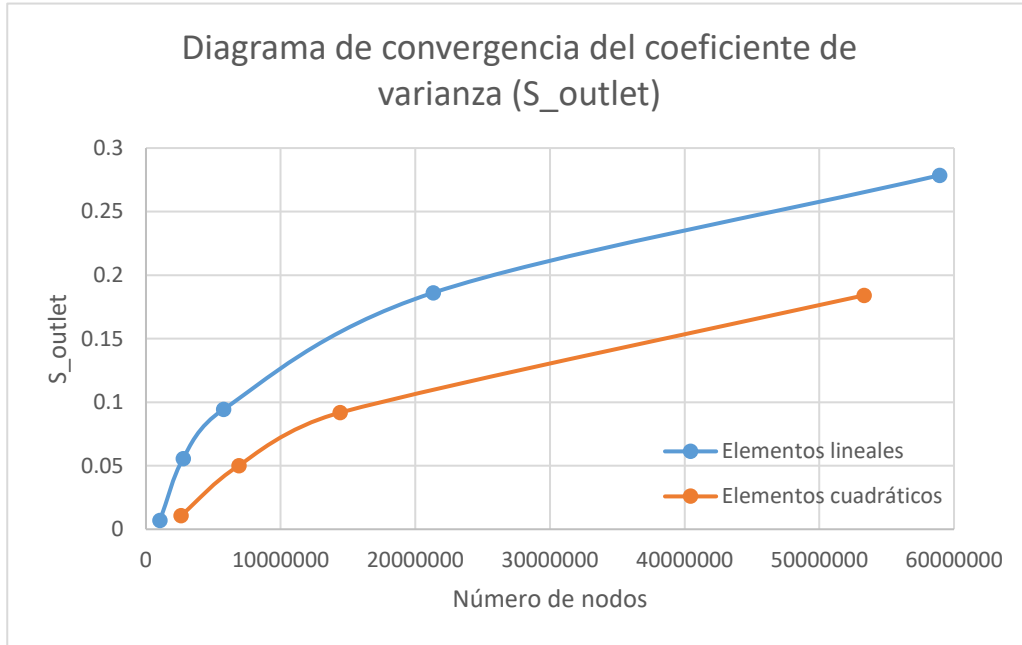


Figura 122. Diagrama de convergencia de S_{outlet} en función del número de nodos (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 123 se muestra una comparativa de los tiempos de cálculo.

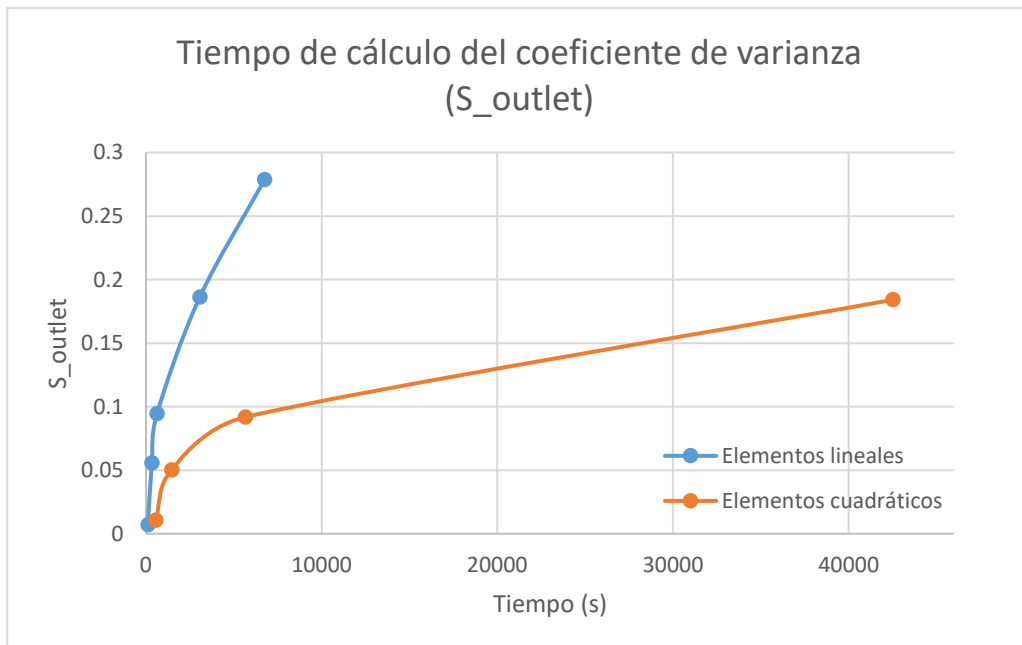


Figura 123. Diagrama de convergencia de S_{outlet} en función del tiempo de cálculo (Fuente: elaboración propia).

Nótese que hay cinco puntos en el caso de los elementos lineales, pero cuatro en el de cuadráticos. Esto es debido a que el último punto de los elementos cuadráticos no se pudo calcular por el grado de refinamiento de la malla. Además, si se observa la Figura 123 se puede comprobar como el tiempo de cálculo se dispara a partir de un cierto número de nodos, hecho que hace imposible que se use ese tipo de elemento.

Como se quiere comparar dos geometrías bastante similares, el tamaño de los elementos debe ser lo más parecido posible, de lo contrario los resultados obtenidos podrían variar por el tamaño de los elementos, y no por la variación de la geometría.

Se empezó mallando con un tamaño de elemento *normal*, pero la malla resultante tenía muy pocos elementos en comparación con la normal de los *spacers* con forma cónica y cilíndrica. De manera que, se realizó un mallado con un tamaño de elemento *fine*, que es el superior al normal, y dicho tamaño se aplicó en la malla del otro caso. Aunque siguiendo este procedimiento el cálculo efectuado era más exacto, se observó que los *spacers* creaban irregularidades en la malla que podían estar afectando a los resultados. De manera que, se empleó la opción de mallado *Physics controlled mesh*, la cual introduce una malla adaptada a las físicas aplicadas, y que incorpora un refinado para las zonas más conflictivas detectadas por el programa. Los elementos que conforman dicha opción se muestran en la Figura 124.

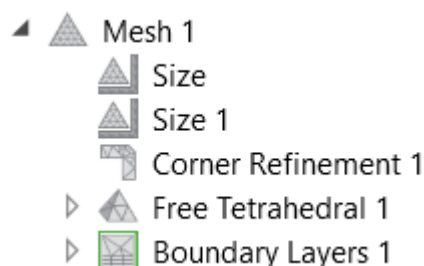


Figura 124. *Physics controlled mesh* (Fuente: elaboración propia).

Dentro de la opción *Size 1* se estableció que el tamaño de elemento debía ser *fine*, este tamaño tiene las siguientes características:

Element Size

Calibrate for:
Fluid dynamics

Predefined Custom
Fine

Element Size Parameters

Maximum element size:
1.92E-4 m

Minimum element size:
3.62E-5 m

Maximum element growth rate:
1.13

Curvature factor:
0.5

Resolution of narrow regions:
0.8

Figura 125. Características del desplegable Size 1 (Fuente: elaboración propia).

La malla generada se muestra en la Figura 126.

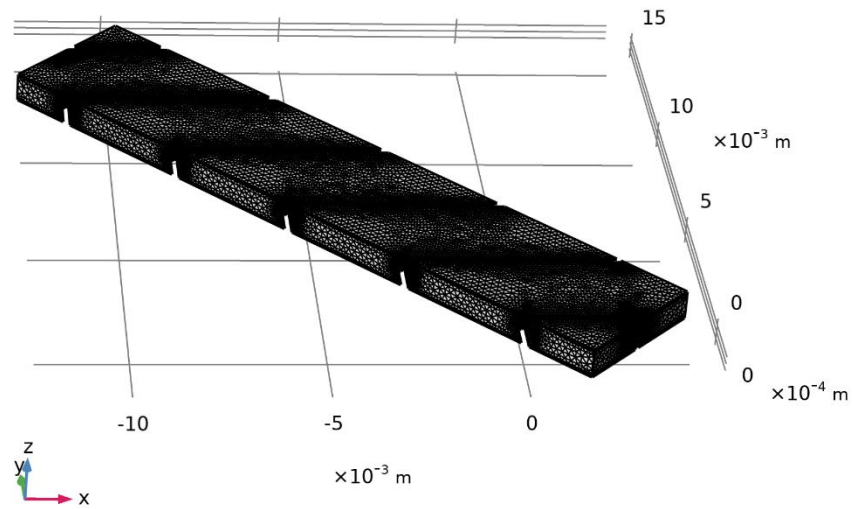


Figura 126. Malla generada (Fuente: elaboración propia)

Una vista más detallada de la malla se muestra en la Figura 127.

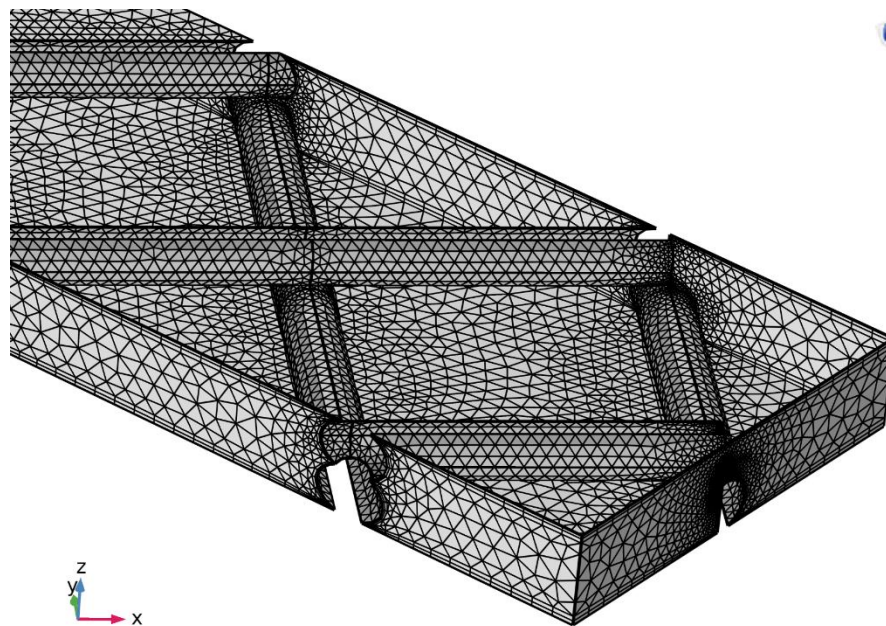


Figura 127. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia).

La malla mostrada en la Figura 127 tiene 274903 elementos. En la Figura 128 se muestra la malla que se generaba sin la opción de *physics controlled mesh*.

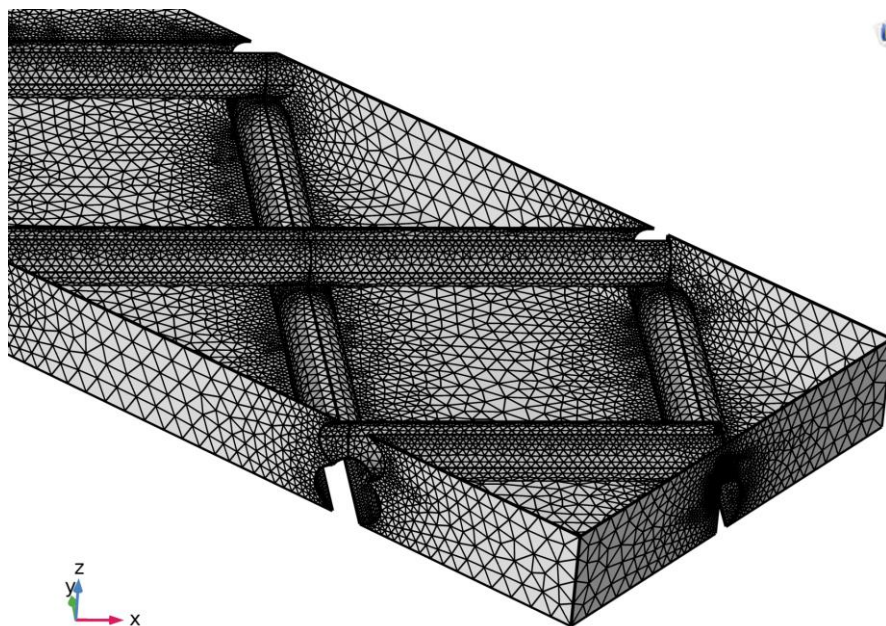


Figura 128. Mallado sin refinamiento (Fuente: elaboración propia).

La malla de la Figura 128 tenía 760238 elementos. Como se puede apreciar, en los *spacers* se generaba un mallado excesivo con elementos muy pequeños debido a su geometría irregular. Aplicando la *physics controlled mesh* se consigue bajar el número de elementos y una malla más regular.

Aunque esta opción ha resultado muy útil para la modelización de los *spacers*, aumenta el tiempo de cálculo considerablemente. Por este motivo no se ha usado en el caso de ED con *spacers*.

Resolución en COMSOL

Como hay dos módulos que resolver es necesario emplear dos estudios, cada uno con un *step*, o un estudio con dos *steps*. Se ha optado por la segunda opción, aunque esta decisión no afecta a los resultados.

Se ha usado un *step* para resolver el módulo de *laminar flow* (*Step 1*) y otro para resolver el de *transport of diluted species* (*Step 2*).

- *Step 1*: se ha indicado que solo debe resolver el módulo de flujo laminar y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los de las variables no resueltas se deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento de las dos físicas existentes se realiza mediante la opción de *Multiphysics couplings*. Las propiedades del *step 1* se pueden ver en la Figura 129.

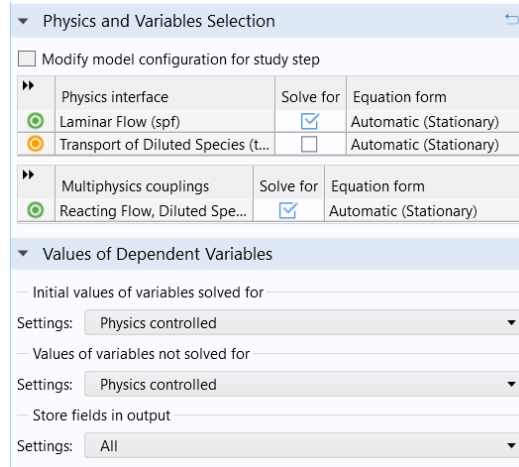


Figura 129. Step 1 (Fuente: elaboración propia).

- **Step 2:** se ha indicado que sólo debe resolver el módulo de transporte de especies diluidas y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los de las no resueltas se deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento multifísico se realiza como en el **step 1**. En la Figura 130 se pueden observar las condiciones del estudio.

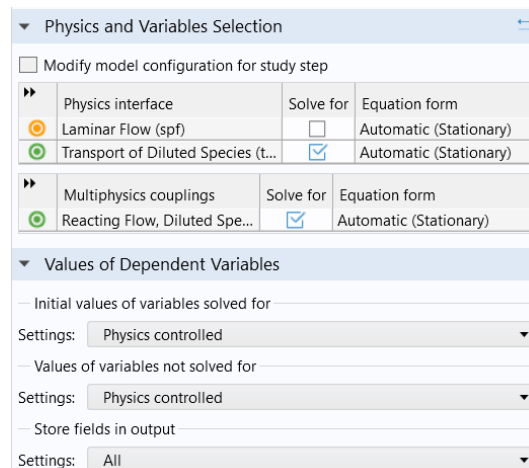


Figura 130. Step 2 (Fuente: elaboración propia).

Resultados

Primeramente, se presentarán los resultados obtenidos al resolver el flujo laminar y, a continuación, se mostrarán los resultados referentes al transporte de especies diluidas.

- **Laminar flow:**
 - Campo de velocidades:

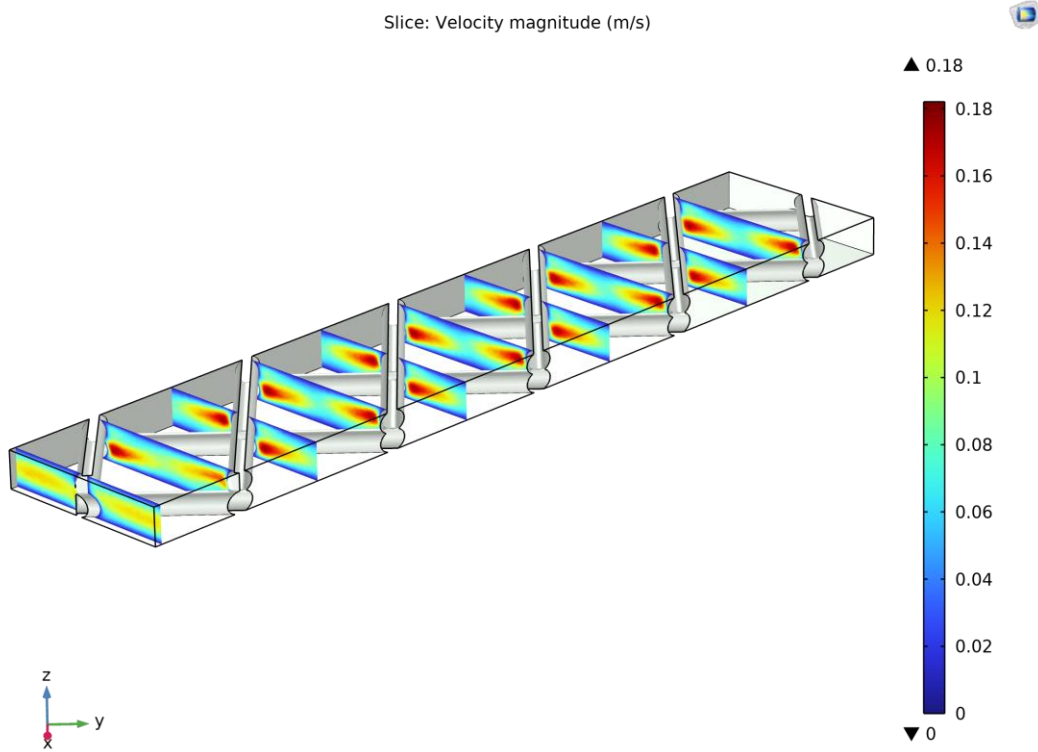


Figura 131. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

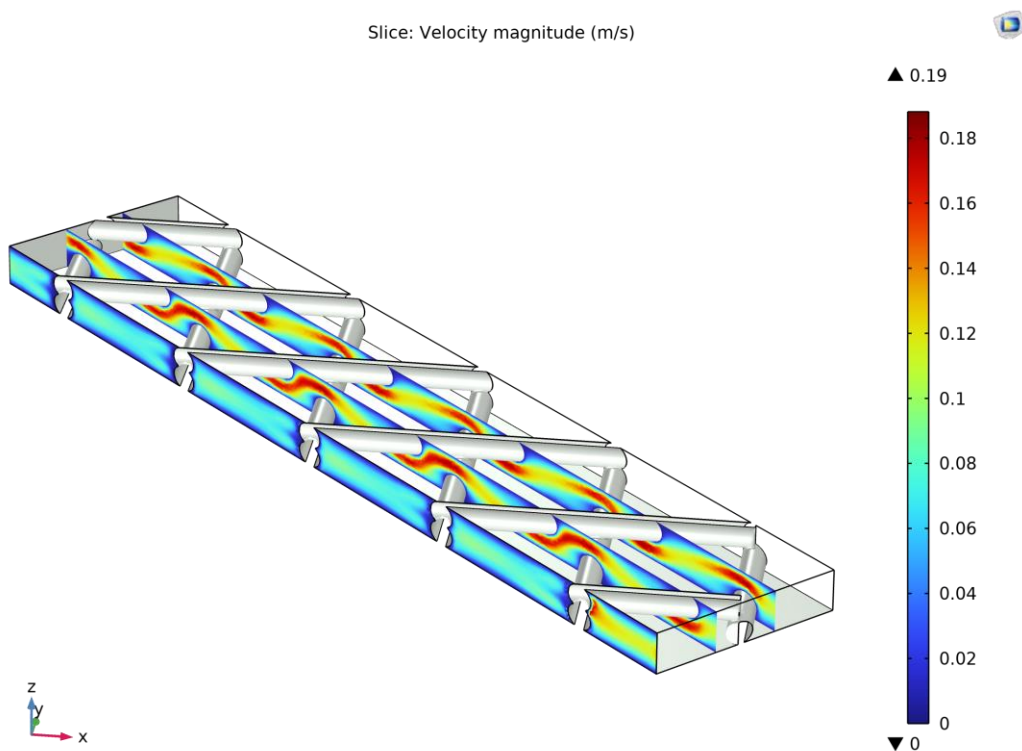


Figura 132. Campo de velocidades visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

Streamline: Velocity field

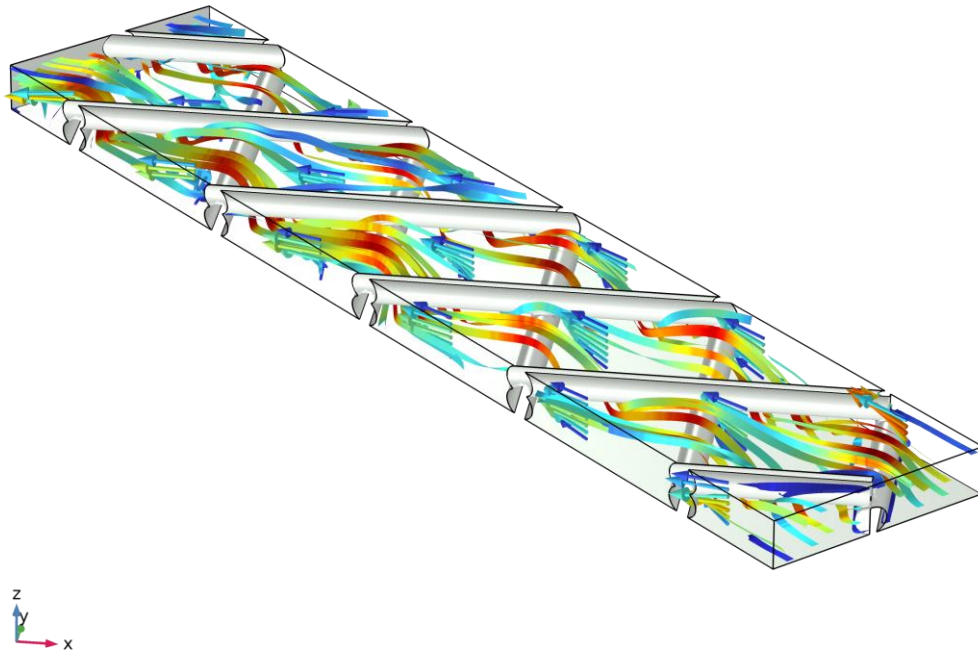


Figura 133. Líneas de corriente del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia)

Se puede apreciar como el flujo va rodeando los obstáculos que se encuentra a su paso, y a medida que el área de paso se estrecha el flujo se acelera, y viceversa. Además, se puede ver la condición de no deslizamiento en las paredes y en los *spacers*, donde la velocidad es nula. En la Figura 131 se puede apreciar como el flujo entra totalmente desarrollado, tal como se había especificado previamente.

○ Presiones:

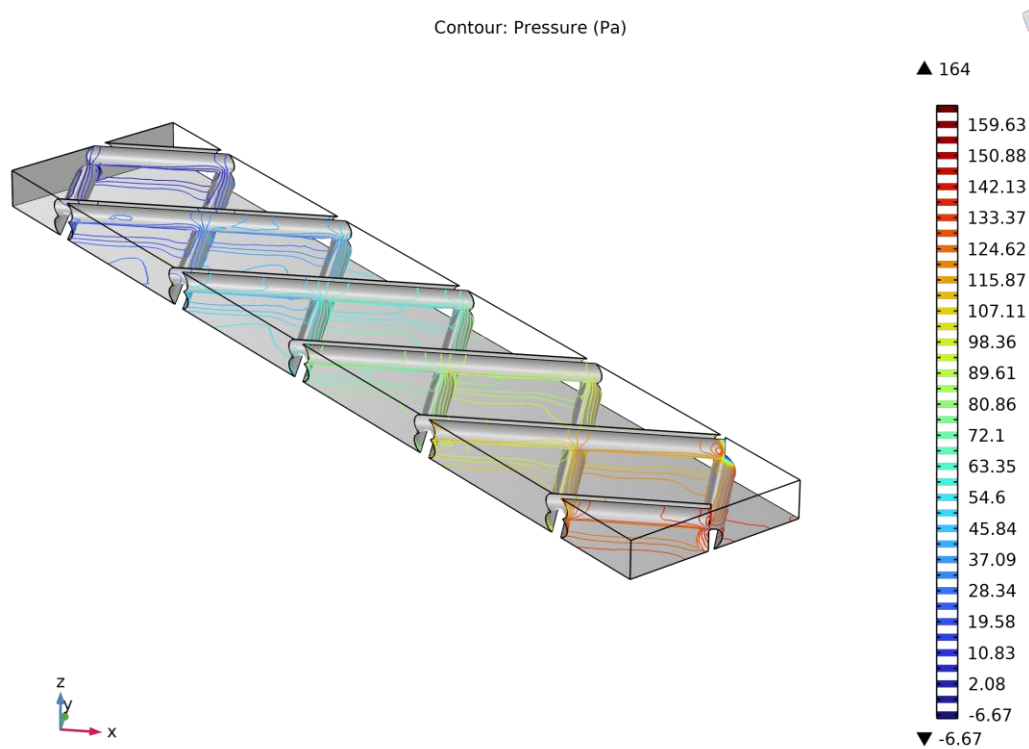


Figura 134. Presiones originadas en el canal (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 134 se pueden ver las presiones generadas por el flujo en el canal. Nótese como en la salida son prácticamente cero, debido a la condición aplicada previamente en *outlet*.

- *Transport of diluted species:*
 - Concentración:

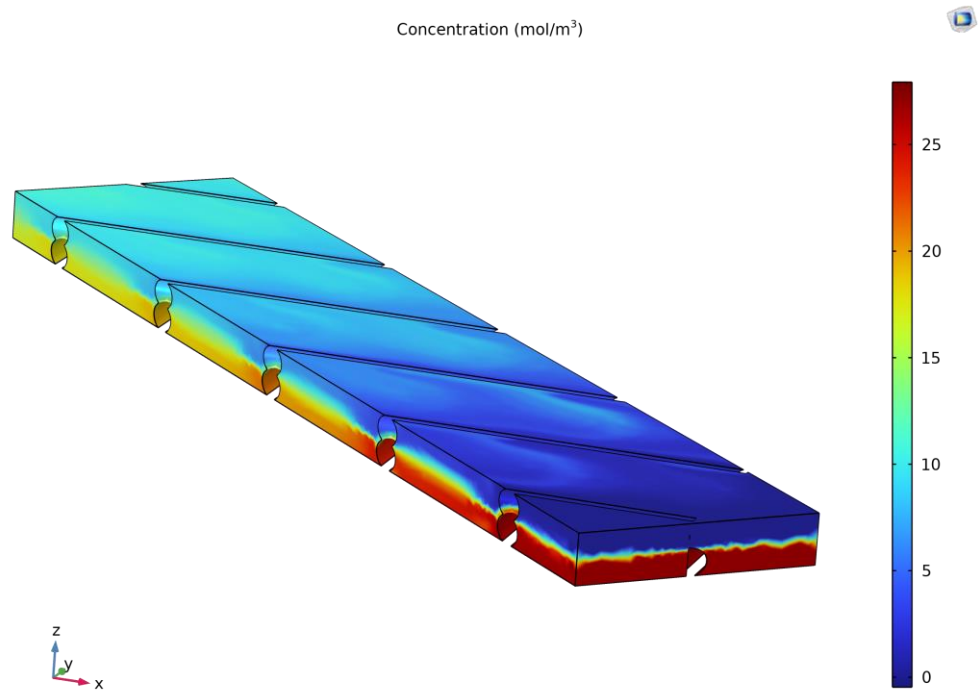


Figura 135. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia).

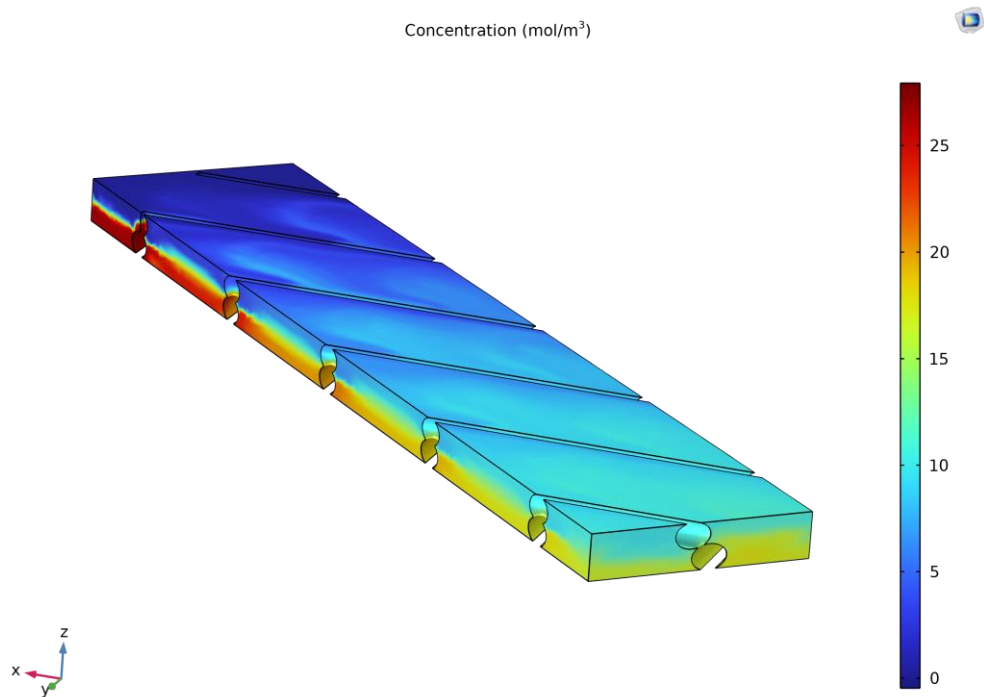


Figura 136. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia).

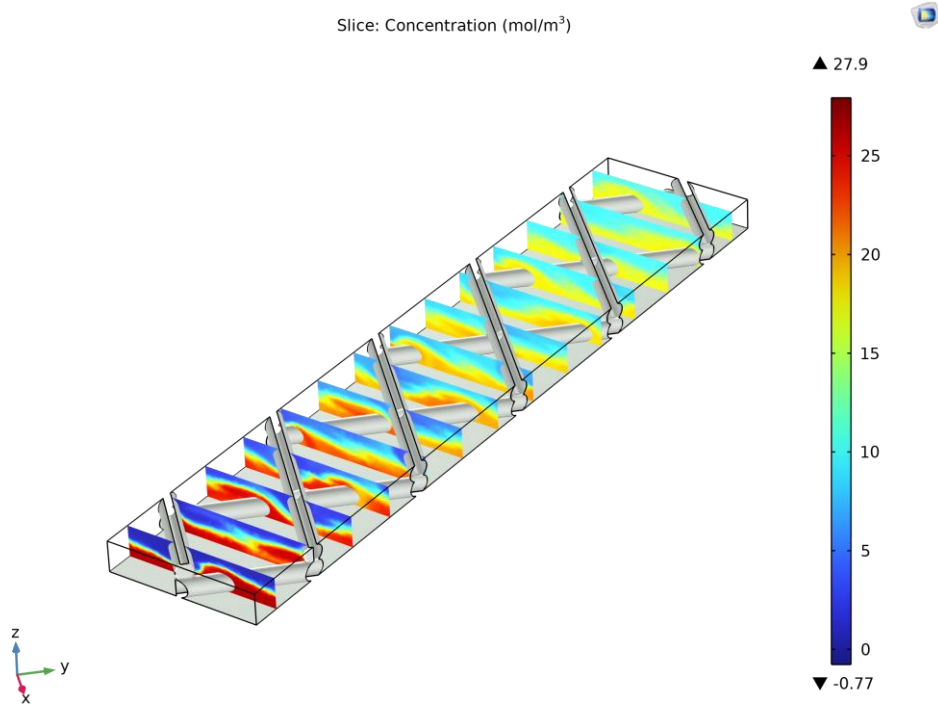


Figura 137. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

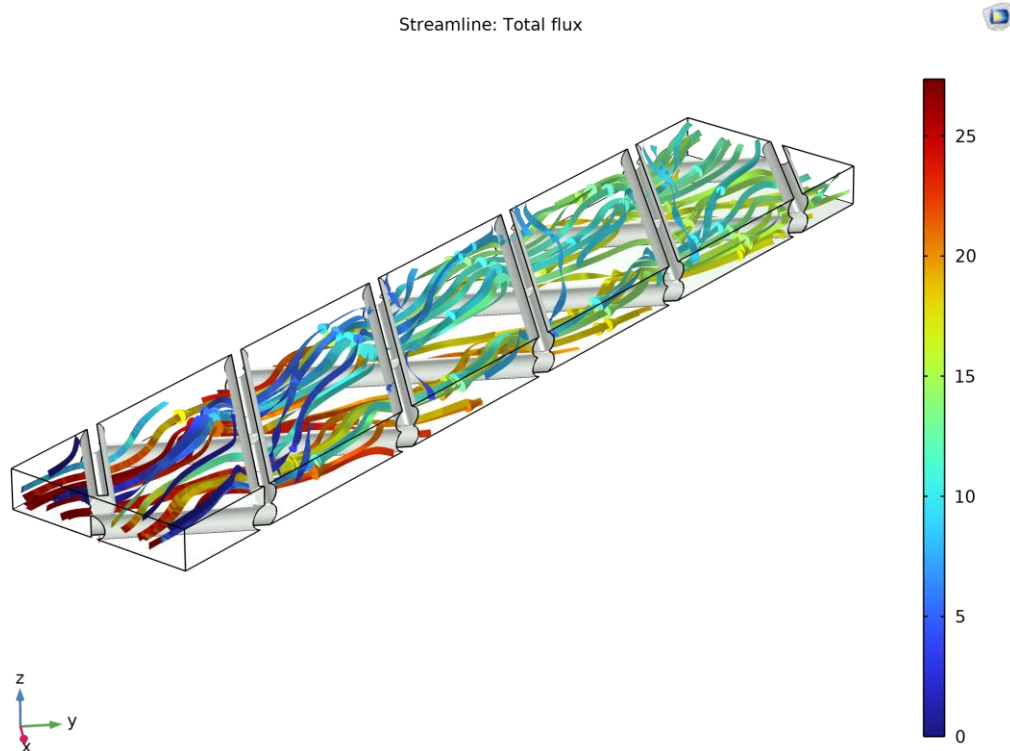


Figura 138. Líneas de corriente representando el flujo total (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 135 se puede apreciar la discontinuidad de la concentración a la entrada. Además, en la Figura 137 se puede ver como el flujo, a medida que va rodeando los *spacers*, se va mezclando.

Una vez vistos los resultados, se procederá a calcular el coeficiente de calidad del mezclado. Para ello, es necesario ir a la opción *Global Evaluation* dentro de *Derived Values*, buscar la variable *S_outlet* y seleccionar *Evaluate*. Realizando este proceso se obtiene que el coeficiente de calidad del mezclado para esta geometría es de 0.075787, por lo tanto, esta geometría favorece mucho el mezclado.

A3. Modelización de los *spacers* con formas cónicas y cilíndricas

Introducción

La segunda modelización que se realizó fueron los *spacers* con forma cónica y cilíndrica. La geometría y dimensiones estaban basadas en las de un artículo que efectuaba análisis fluidodinámicos en varios tipos de *spacers* [16]. La modelización, como el caso anterior, está basada en un ejemplo proporcionado por COMSOL Multiphysics sobre el mezclado en flujos laminares y como obtener un indicador de la calidad del mezclado a partir de la varianza [15]. A partir de dicho ejemplo, se han modificado los parámetros y la geometría para adaptarlos al caso que se quiere estudiar. Las características principales son:

- La geometría es en 3D.
- Se trabaja con agua.
- Se analiza el canal central solamente.
- Para resolver el ejemplo se emplea un estudio con dos *steps*: uno que resuelve el flujo laminar y el otro que resuelve el transporte de especies diluidas.
- Los *spacers* tienen forma cónica y cilíndrica.
- Se usa la varianza para calcular la calidad del *mixing*.

Objetivo

El objetivo de esta simulación es poder cuantificar la calidad del mezclado en un flujo laminar con los *spacers* con forma cónica y cilíndrica. La simulación, como la anterior, consiste en hacer entrar un flujo, en el cual, una mitad tiene una concentración determinada de una sustancia diluida ficticia, y la otra mitad no tiene ninguna sustancia diluida. Gracias a los *spacers* las dos zonas con concentraciones distintas se mezclan aun estando en un flujo laminar en una escala muy pequeña. De manera similar al caso anterior, el grado de mezclado se determina mediante el coeficiente S_{outlet} . La fórmula de la varianza aplicada a la concentración y del coeficiente S_{outlet} se ha mostrado previamente en la Ec. (27) y (28).

Parámetros de entrada

Como se puede comprobar, los parámetros de la geometría son idénticos a los usados en el apartado 3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D

Geometría:

- Grosor del canal (D_{tot}) = 0.787 mm

- Longitud del canal (L) = 19.66 mm
- Profundidad del canal (A_{ch}) = 3.93 mm
- Longitud del cilindro grande ($L1$) = 0.983 mm
- Longitud del cono grande ($L2$) = 0.557 mm
- Longitud del cilindro pequeño ($L3$) = 0.358 mm
- Longitud del cono pequeño ($L4$) = 0.34 mm
- Longitud del cilindro medio ($L5$) = 0.542 mm
- Diámetro mayor ($D1$) = 0.447 mm
- Diámetro menor ($D2$) = 0.263 mm
- Longitud total de una unidad de *spacer* (L_{tot}) = 2.78 mm

Flujo:

- Velocidad media ($U0$) = 7 cm/s

Especies:

- Difusividad de la sustancia (D) = $4.5 \cdot 10^{-9}$ m²/s
- Concentración a la entrada de la sustancia ($c0$) = 27 mol/m³

Geometría del objeto de estudio

La geometría que se analizará es un canal formado por cinco unidades repetitivas de *spacers* con forma cónica y cilíndrica. La geometría y dimensiones han sido obtenidas de un artículo que realizaba análisis fluidodinámicos en *spacers* [16]. Como se puede comprobar, la geometría es idéntica al canal central mostrado en el apartado 3.1.3. Modelización de una celda de electrodiálisis con *spacers* en 3D.

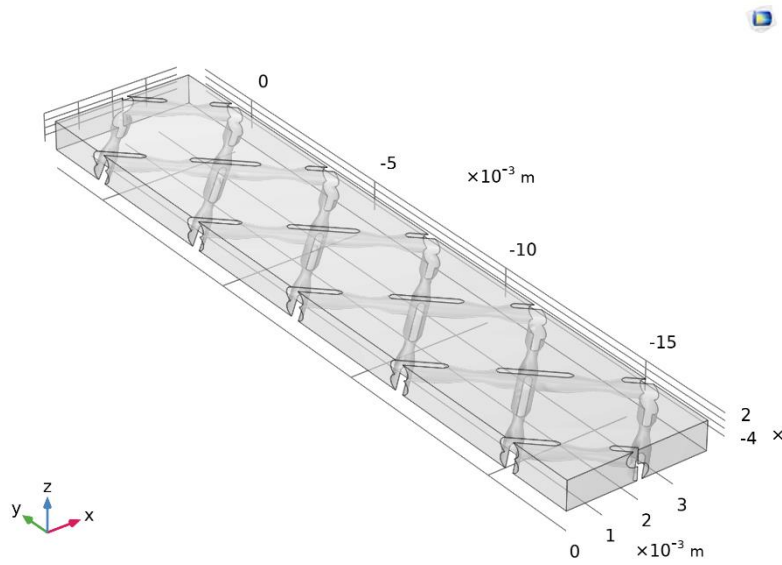


Figura 139. Geometría del canal con spacers con forma cónica y cilíndrica (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 140 se muestra la geometría ocultando la cara superior para poder apreciar con más detalle los spacers.

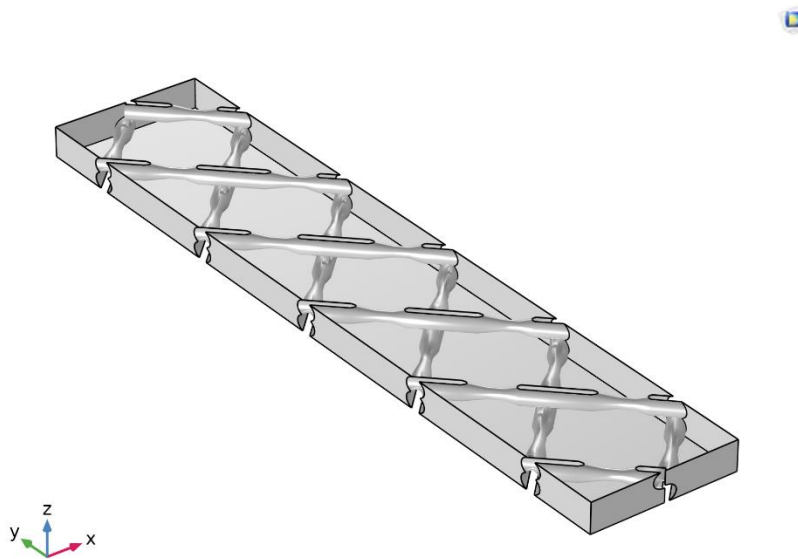


Figura 140. Vista más detallada de los spacers (Fuente: elaboración propia).

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno de esta simulación son idénticas a las de la simulación presentada en A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica.

En primer lugar, hay que indicar que el material que se analiza es agua, mediante la opción *add material from library*:

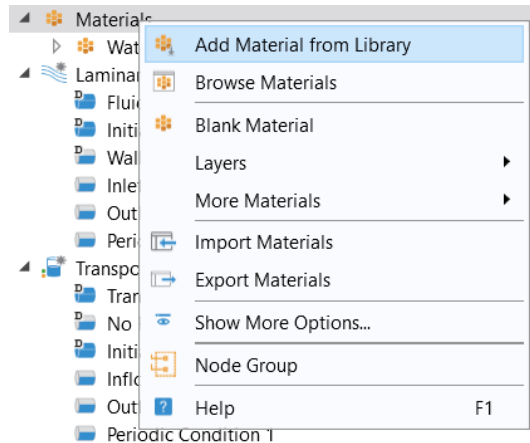


Figura 141. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).

Para poder resolver esta simulación se usarán dos módulos: el de *laminar flow* y el de *transport of diluted species*. Las ecuaciones que actúan en el módulo de *laminar Flow* son las de Navier-Stokes (Ec. (4) y Ec. (6)), y la que actúa en el módulo de transporte de especies diluidas es la Ec. (1). En la Figura 142 se muestran las condiciones de contorno del módulo de *laminar flow*.

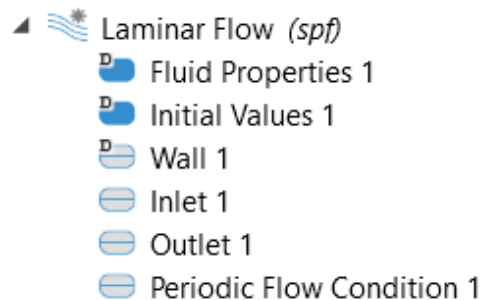


Figura 142. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

Primeramente, en la condición de *laminar flow* se debe especificar que el flujo laminar en toda la geometría, y que las propiedades del fluido son las del material escogido (agua, en este caso). Además, hay que establecer que el flujo es incompresible:

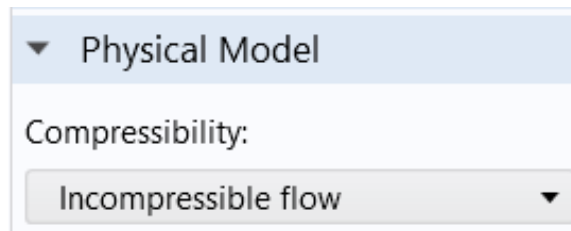


Figura 143 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inlet*) y salida (*outlet*) del flujo. Esto se hace mediante las condiciones *inlet* y *outlet*.

- *Inlet*: se define que el flujo que entra está totalmente desarrollado y que la velocidad media de ese flujo es U_0 (7 cm/s), tal como se puede apreciar en la Figura 144.

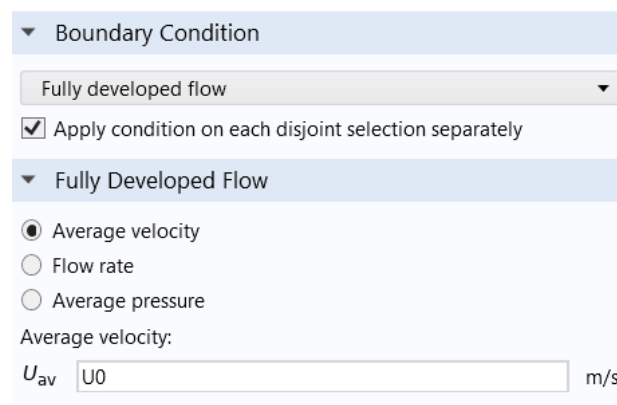


Figura 144. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 145 se pueden observar las superficies en las que se aplica la condición de *inlet*.

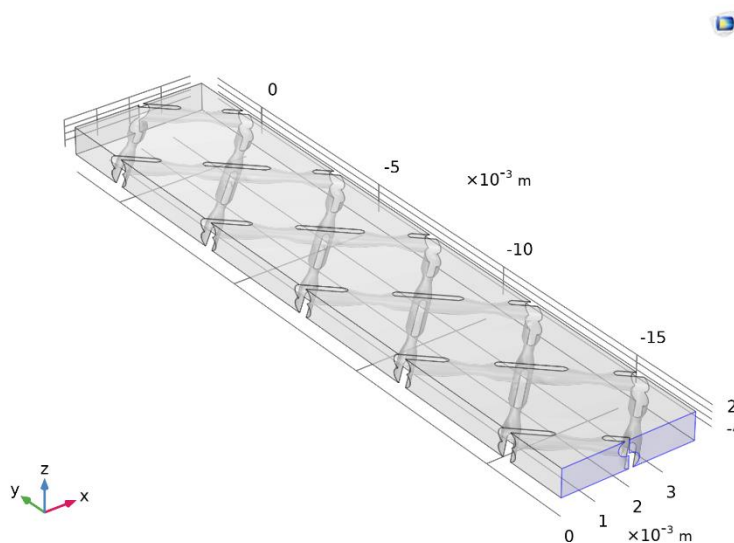


Figura 145. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outlet*: se define que la presión a la salida es cero Pa y que no hay flujo de retorno:

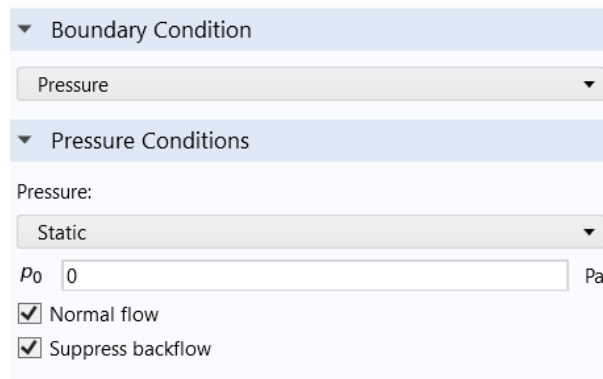


Figura 146. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 114 se pueden observar los contornos en los que se aplica la condición *outlet*:

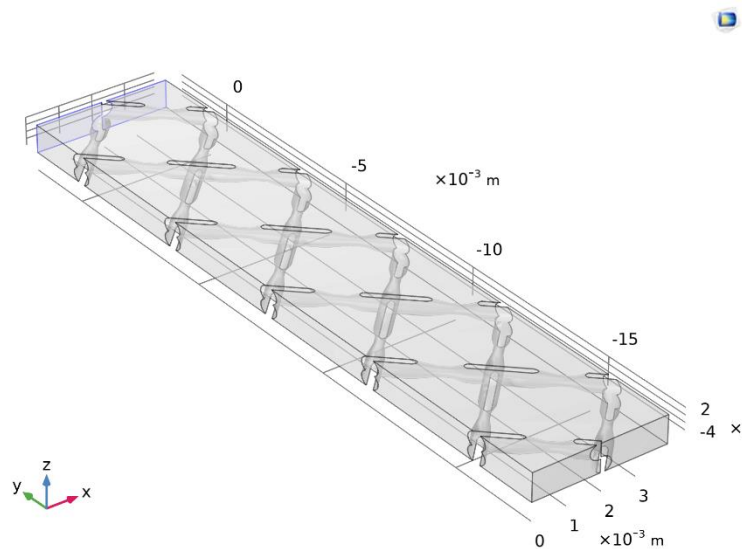


Figura 147. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).

Por último, hay que establecer una condición periódica para indicar que las paredes laterales, paralelas al flujo, también forman parte de una unidad repetitiva, ya que la hilera de *spacers* que se ha modelizado podría tener otras hileras adyacentes en cada lado, como se ha mostrado con los *spacers* reales en la Figura 4. Para definir estas condiciones periódicas hay que usar la condición llamada *periodic flow condition*, e indicar que la diferencia de presión entre las superficies contrarias es igual a cero:

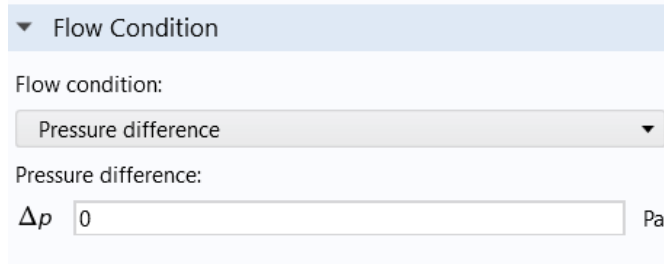


Figura 148. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 149 se pueden observar los contornos en los que se aplica la *periodic flow condition*:

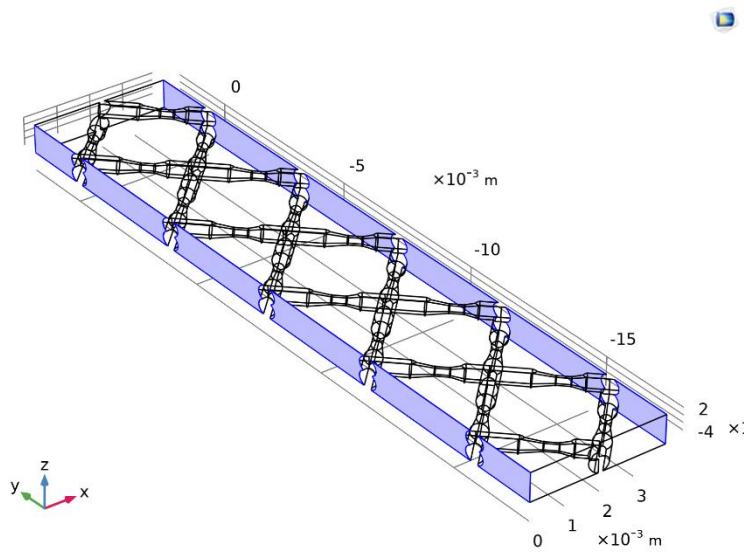


Figura 149. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

Ahora se introducirán las condiciones de contorno del módulo de transporte de especies diluidas:

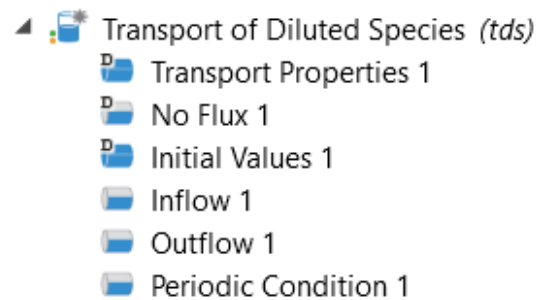


Figura 150. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).

El primer paso es definir las propiedades del transporte que se está efectuando. Es necesario establecer a que temperatura se encuentra, que campo de velocidades actúa y las propiedades difusivas de la sustancia:

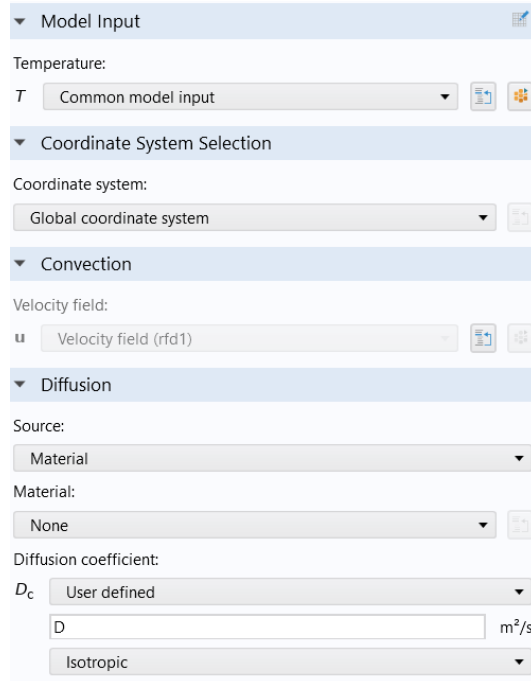


Figura 151. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).

Donde el *common model input* tiene un valor igual a T (298,15 K), el campo de velocidades (*velocity field*) se resuelve del flujo laminar seleccionando la opción *Velocity field (rfd 1)* y en difusión se indica el coeficiente de difusión de la sustancia.

El siguiente paso es definir la entrada (*inflow*) y salida (*outflow*) del flujo. Para ello se usan las condiciones *inflow* y *outflow*.

- *Inflow*: se establece que el flujo entra como en la Figura 112. Como se ha indicado previamente, el flujo entra con un perfil discontinuo de concentración, una mitad entra con una concentración de 27 mol/m^3 y la otra mitad con una concentración de 0 mol/m^3 . La condición matemática que expresa este perfil ha sido mostrada en la (31)[15].

La implementación de la condición matemática se realiza de la misma manera que en el apartado A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica. Gracias a esta función de Heaviside es posible implementar la (31) en la condición de *inflow*:

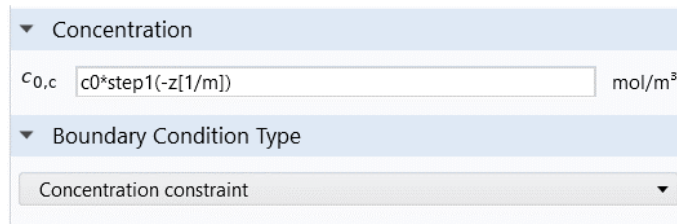


Figura 152. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outflow*: se establece que el flujo sale como en la Figura 147.

Una vez definidas las condiciones de *inflow* y *outflow*, hay que definir una condición periódica, al igual que en el flujo laminar, para indicar que las paredes laterales forman parte de la unidad repetitiva. Las superficies de aplicación son las mismas que las mostradas en la Figura 149.

Por último, para realizar el acoplamiento de los dos módulos físicos, se usará la opción *Multiphysics*. Esta opción permite unir los dos módulos de manera rápida y automática para que el usuario no tenga que hacerlo. En la Figura 153 se muestra la opción de *Multiphysics* y en la Figura 154 se muestran los módulos acoplados.



Figura 153. Opción de Multiphysics (Fuente: elaboración propia).

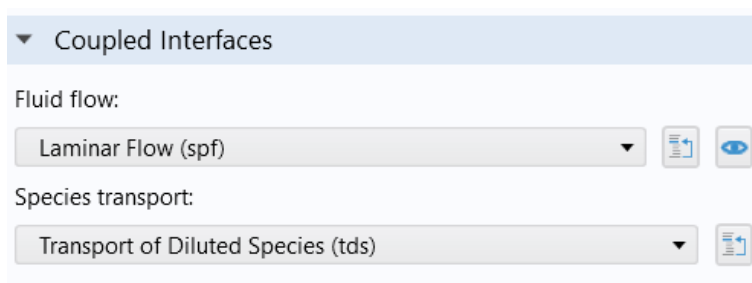


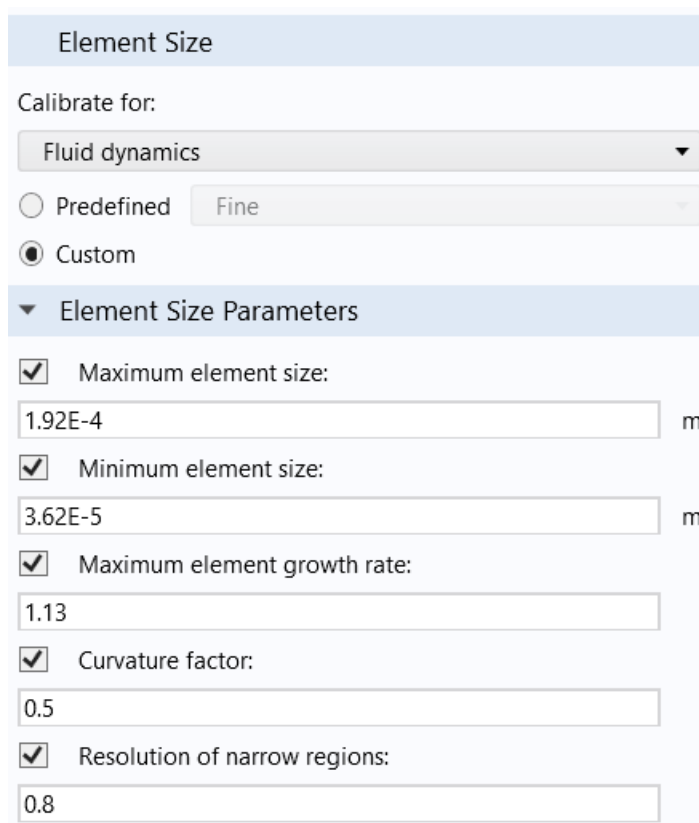
Figura 154. Módulos acoplados (Fuente: elaboración propia).

Mallado

En esta simulación también se ha decidido usar los tetraedros como elementos, por los mismos motivos mencionados en el apartado 3.1.1.6. Como se ha indicado en dicho apartado, para crear la malla de tetraedros hay que emplear la opción *free tetrahedral*, y a continuación, indicar el tamaño de malla que se quiere usar.

Como se ha mencionado en el apartado de Malla de A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica, se quiere mallar las geometrías con un tamaño de elemento muy parecido, para obtener resultados que puedan ser comparables. Por este motivo, el tamaño de elemento usado en esta simulación es el mismo utilizado en la simulación anterior, el cual corresponde al tamaño de elemento *fine* de esa geometría.

De manera similar al caso anterior, se usó la opción de mallado *Physics controlled mesh*, la cual introduce una malla adaptada a las físicas aplicadas, e incorpora un refinado para las zonas más conflictivas detectadas por el programa. En este caso, dentro de la opción *Size 1*, se estableció que el tamaño de elemento debía ser el tamaño *fine* de la malla anterior:



Element Size

Calibrate for:

Fluid dynamics

Predefined Fine

Custom

Element Size Parameters

Maximum element size: 1.92E-4 m

Minimum element size: 3.62E-5 m

Maximum element growth rate: 1.13

Curvature factor: 0.5

Resolution of narrow regions: 0.8

Figura 155. Características del desplegable *Size 1* (Fuente: elaboración propia).

La malla generada se muestra en la Figura 156.

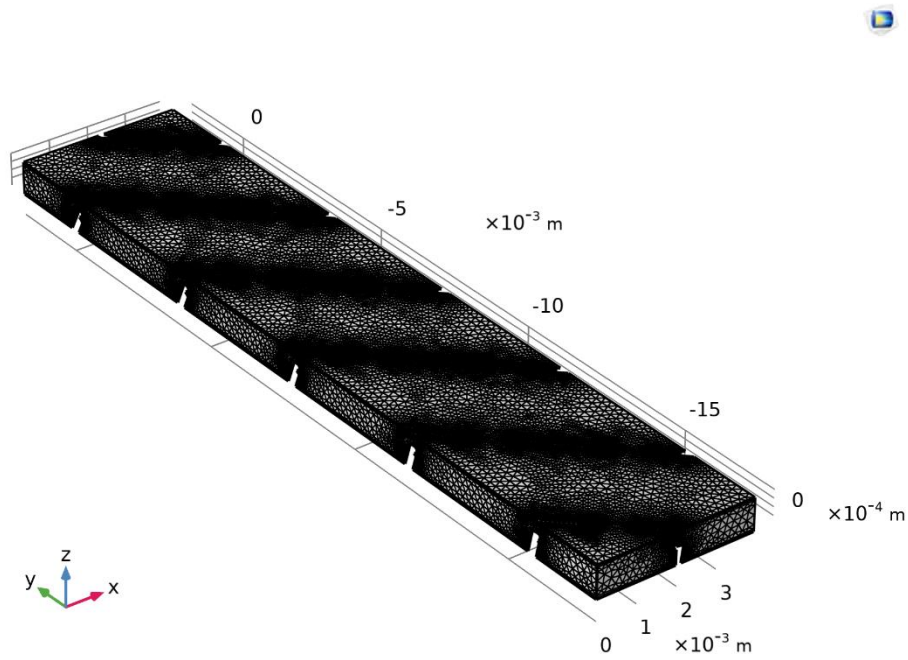


Figura 156. Malla generada (Fuente: elaboración propia)

Una vista más detallada de la malla se muestra en la Figura 127.

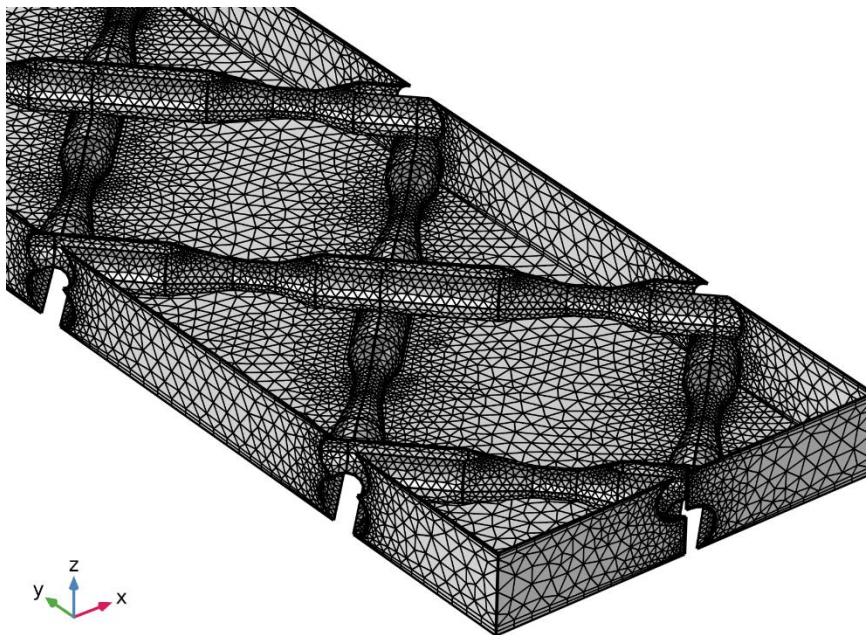


Figura 157. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia).

La malla mostrada en la Figura 127 tiene 504315 elementos. En la Figura 158 se muestra la malla que se generaba sin la opción de *physics controlled mesh*.

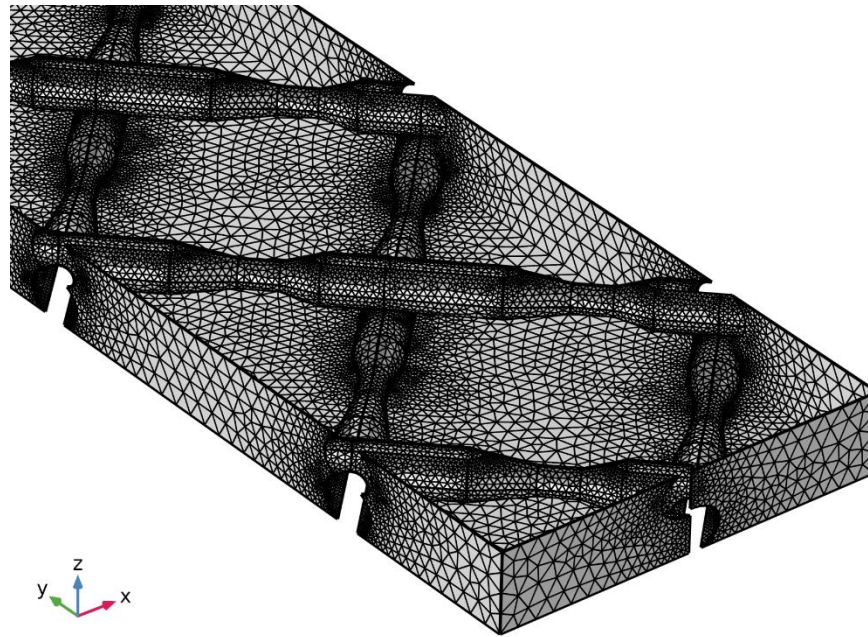


Figura 158. Mallado sin refinamiento (Fuente: elaboración propia).

La malla de la Figura 158 tenía 854710 elementos. Como se puede apreciar, en los *spacers* se generaba un mallado excesivo con elementos muy pequeños debido a su geometría irregular. Aplicando la *physics controlled mesh* se consigue bajar el número de elementos y una malla más regular, aunque sigue habiendo un mallado excesivo. La diferencia en el número de elementos entre los *spacers* cilíndricos y los cónicos es debida a la mayor irregularidad de los *spacers* cónicos.

Resolución en COMSOL

Los estudios a realizar son los mismos que en el caso anterior, se ha realizado un solo estudio con dos *steps*.

Se ha usado un *step* para resolver el módulo de *laminar flow* (*Step 1*) y otro para resolver el de *transport of diluted species* (*Step 2*).

- *Step 1*: se ha indicado que únicamente debe resolver el módulo de flujo laminar y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los valores de las no resueltas se deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento de las dos físicas existentes se efectúa mediante la opción de *Multiphysics couplings*.
- *Step 2*: se ha indicado que sólo debe resolver el módulo de transporte de especies diluidas y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los valores de las no resueltas se

deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento multifísico se realiza como en el *step 1*.

Resultados

Primeramente, se presentarán los resultados obtenidos al resolver el flujo laminar y, a continuación, se mostrarán los resultados referentes al transporte de especies diluidas.

- *Laminar flow*:
 - Campo de velocidades:

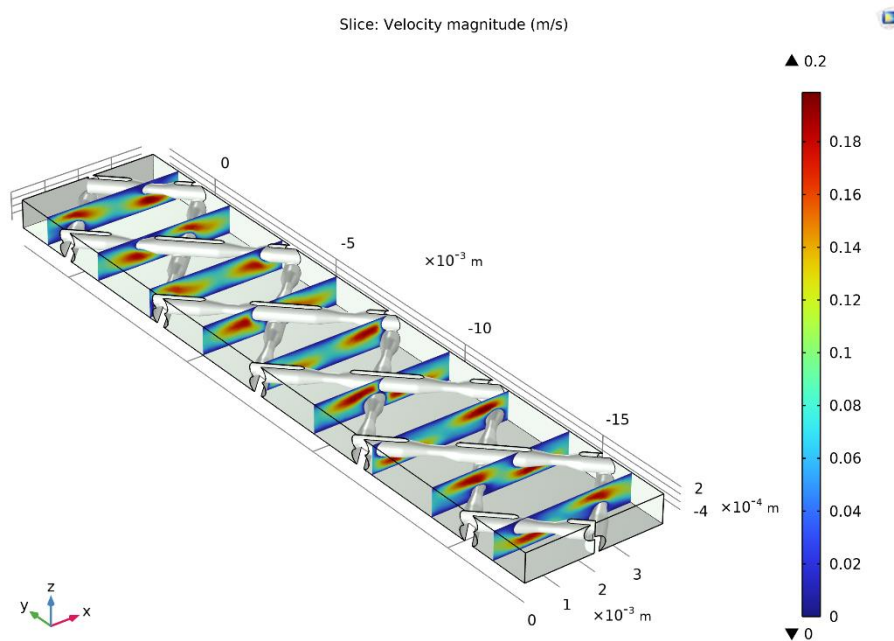


Figura 159. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

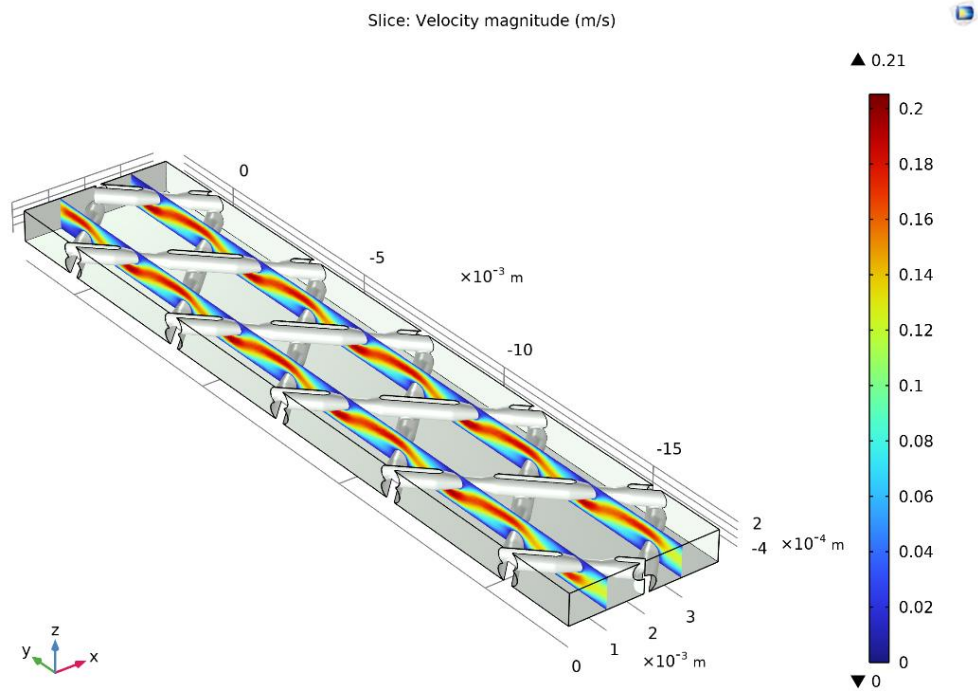


Figura 160. Campo de velocidades visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

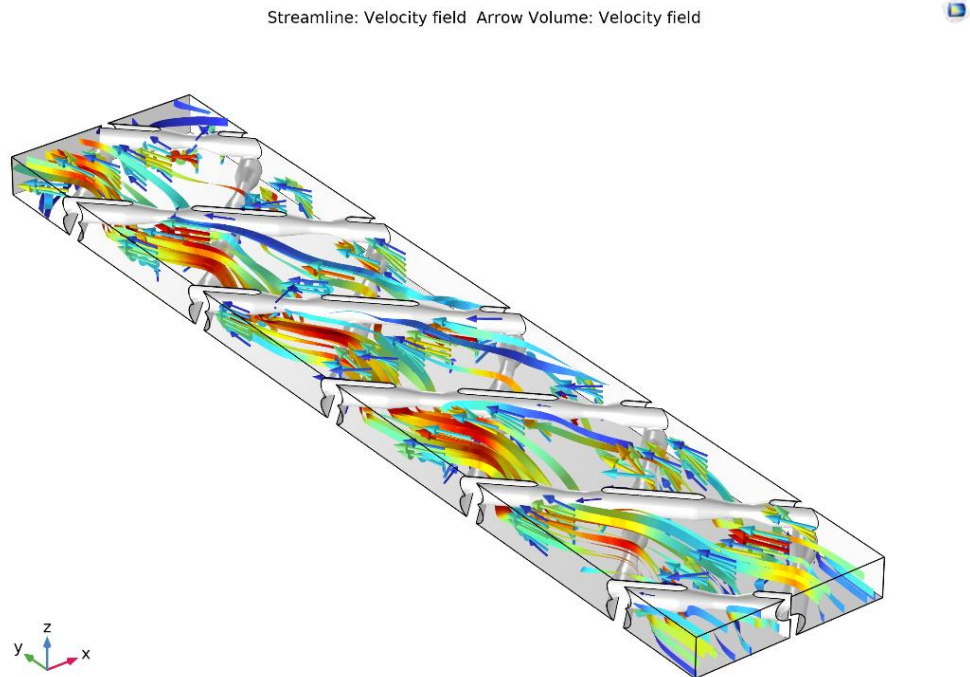


Figura 161. Líneas de corriente del campo de velocidades (Fuente: elaboración propia)

Se puede apreciar como el flujo va rodeando los obstáculos que se encuentra a su paso, y a medida que el área de paso se estrecha el flujo se acelera, y viceversa. Además, se puede ver

la condición de no deslizamiento en las paredes y en los *spacers*, donde la velocidad es nula. En la Figura 159 se puede apreciar como el flujo entra totalmente desarrollado, tal como se había especificado previamente.

- Presiones:

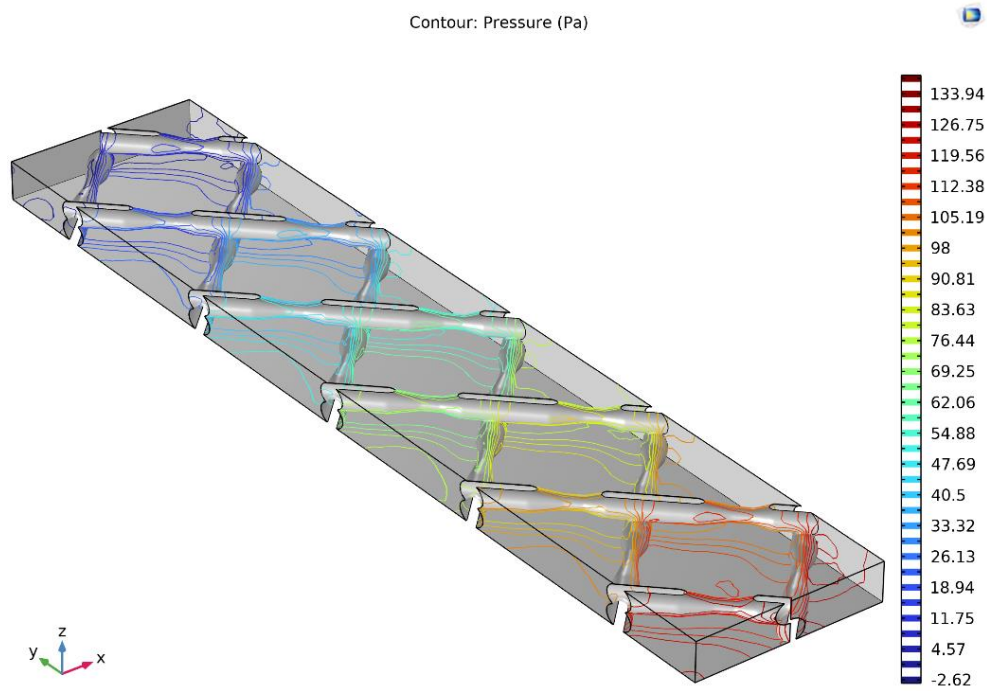


Figura 162. Presiones originadas en el canal (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 162 se pueden ver las presiones generadas por el flujo en el canal. Nótese como en la salida son prácticamente cero, debido a la condición aplicada previamente en *outlet*.

- *Transport of diluted species:*
 - Concentración:

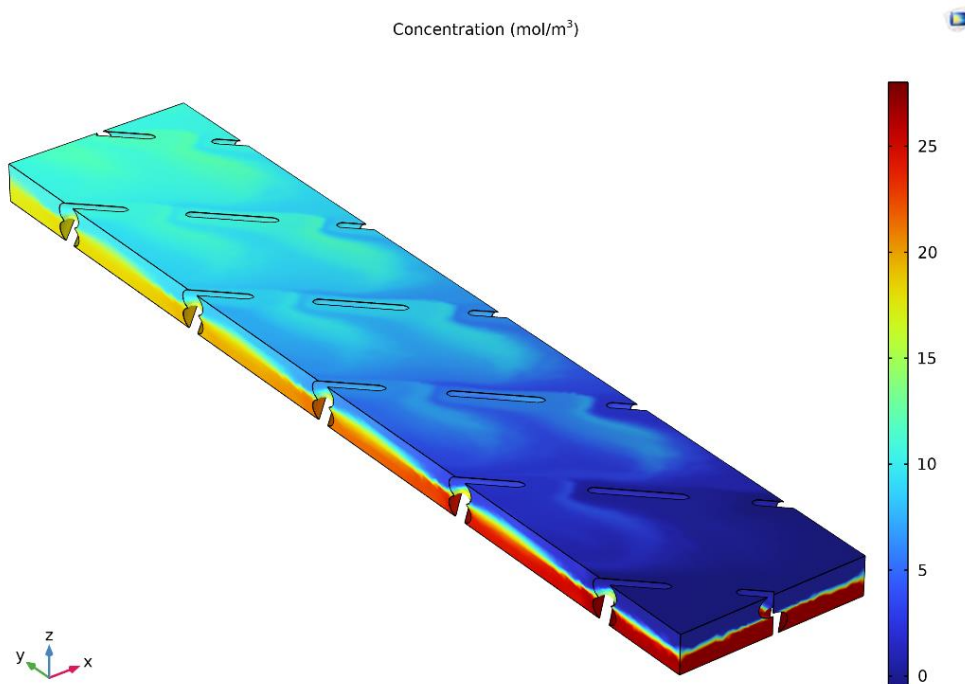


Figura 163. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia).

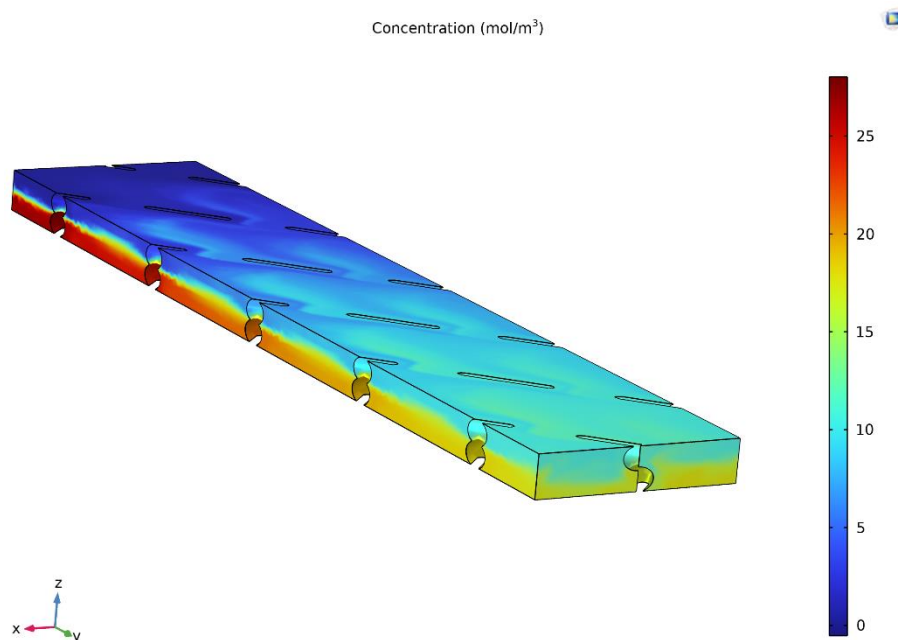


Figura 164. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia).

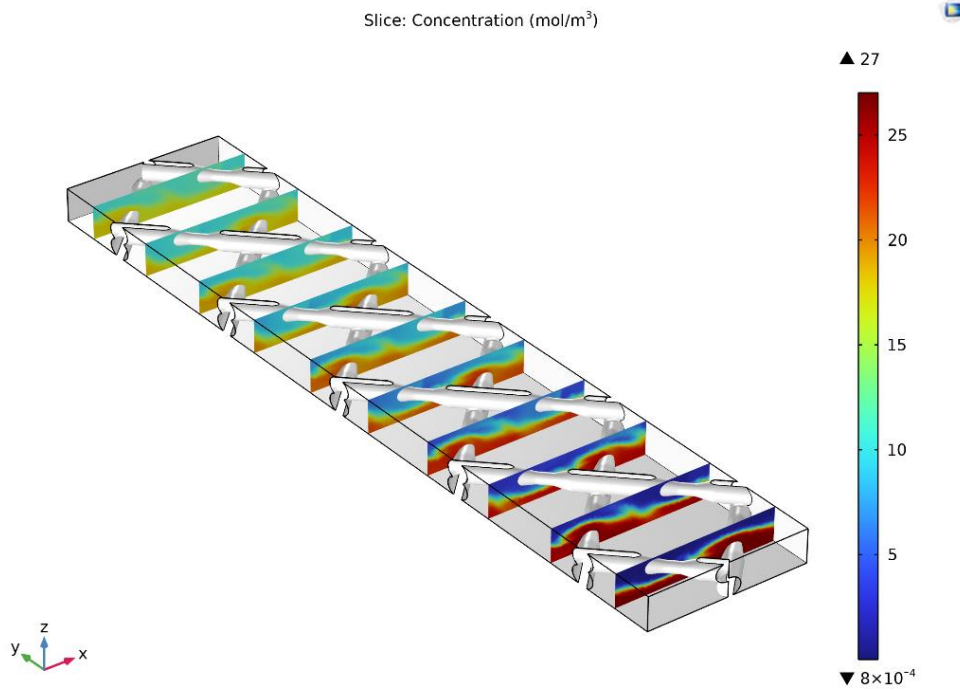


Figura 165. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

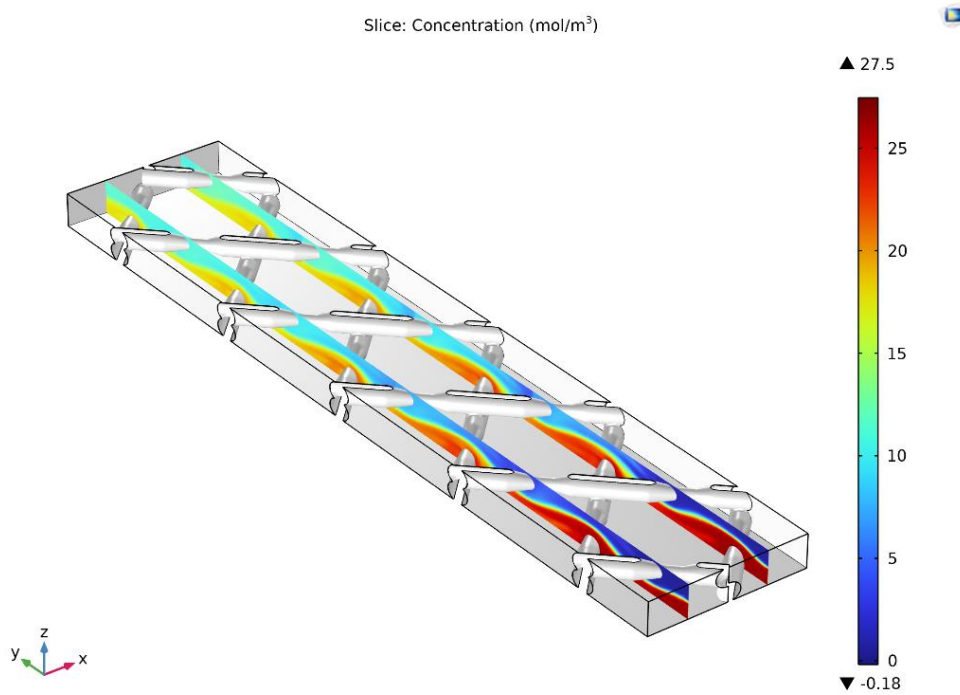


Figura 166. Gradiente de concentraciones visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

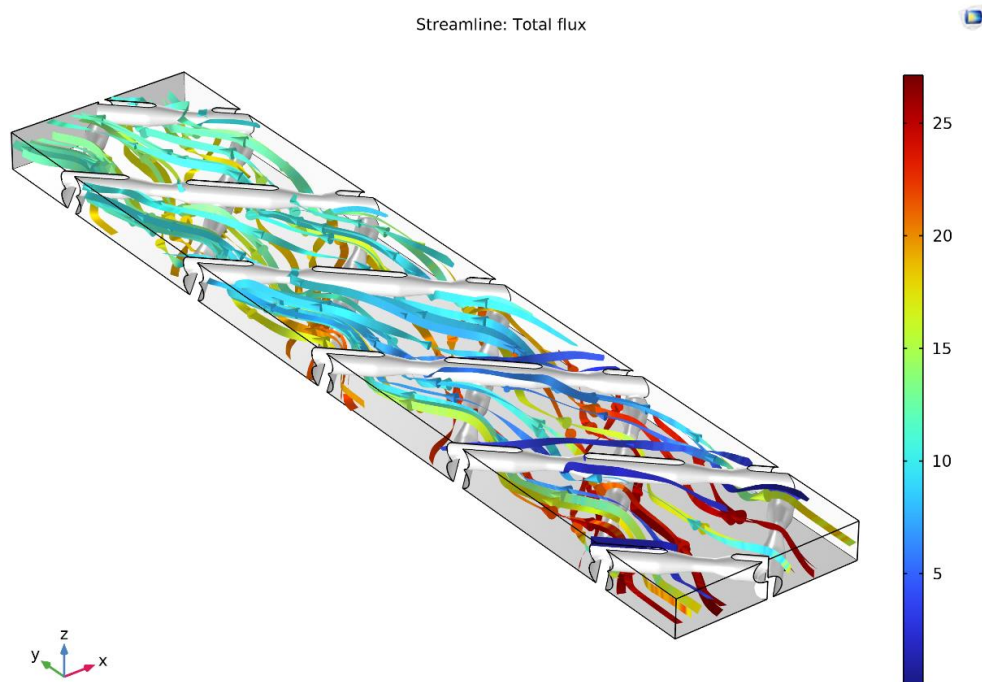


Figura 167. Líneas de corriente representando el flujo total (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 163 se puede apreciar la discontinuidad de la concentración a la entrada. Además, en la Figura 165 y Figura 166 se puede ver como el flujo, a medida que va rodeando los *spacers*, se va mezclando.

Una vez vistos los resultados, se procederá a calcular el coeficiente de calidad del mezclado. Para ello, como en el caso anterior, es necesario ir a la opción *Global Evaluation* dentro de *Derived Values*, buscar la variable *S_outlet* y seleccionar *Evaluate*. Realizando este proceso se obtiene que el coeficiente de calidad del mezclado para esta geometría es de 0.074636, es decir, esta geometría también favorece mucho el mezclado.

Realizando una comparación entre ambas geometrías, se puede ver que los valores obtenidos de *S_outlet* son muy parecidos, y la diferencia no es significativa. Aun y así, los *spacers* con forma cónica y cilíndrica ofrecen un coeficiente de mezclado un poco menor, y en consiguiente, mezclan mejor, por lo que es preferible escogerlos.

Además, hay dos otras razones para decantarse por estos últimos *spacers*. En primer lugar, la geometría generada con los *spacers* con forma cilíndrica genera discontinuidades en los laterales y en las caras superior e inferior, mientras que la geometría mostrada en este caso solo las genera en los laterales. Las discontinuidades pueden dificultar, o incluso imposibilitar, la convergencia de los resultados cuando se ejecutan cálculos mucho más sofisticados, como los relacionados con la

electrodiálisis. En segundo lugar, la geometría de los *spacers* cónicos proviene de un artículo que analizaba diferentes *spacers* comerciales, por lo tanto, es preferible modelizar estos *spacers*, ya que existen y se podría efectuar una validación experimental sobre ellos en un otro trabajo. Por estos tres motivos es preferible usar la geometría formada por conos y cilindros.

A4. Simulación del mezclado en un canal sin *spacers*

Introducción

Además de las dos modelizaciones sobre *spacers* ya presentadas, se realizó una sin *spacers*, pero manteniendo la parte referente al mezclado mostrada en el ejemplo de COMSOL [15]. Las características principales son:

- La geometría es en 3D.
- Se trabaja con agua.
- Se analiza el canal central solamente.
- Para resolver el ejemplo se emplea un estudio con dos *steps*: uno que resuelve el flujo laminar y el otro que resuelve el transporte de especies diluidas.
- No hay *spacers*.
- Se usa la varianza para calcular la calidad del *mixing*.

Objetivo

El objetivo de esta simulación es poder observar cómo se mezcla un flujo laminar en una escala muy pequeña cuando no hay ningún elemento que introduzca una convección forzada. La simulación, como la anterior, consiste en hacer entrar un flujo, en el cual, una mitad tiene una concentración determinada de una sustancia diluida ficticia, y la otra mitad no tiene ninguna sustancia diluida. De manera similar a los dos casos anteriores, el grado de mezclado se determina mediante el coeficiente S_{outlet} . La fórmula de la varianza aplicada a la concentración y del coeficiente S_{outlet} se ha mostrado previamente en la Ec. (27) y (28).

Parámetros de entrada

Los parámetros usados para realizar la simulación han estado los siguientes:

Geometría:

- Grosor del canal (D_{tot}) = 0.787 mm
- Longitud del canal (L) = 19.66 mm
- Profundidad del canal (A_{ch}) = 3.93 mm

Flujo:

- Velocidad media (U_0) = 7 cm/s

Especies:

- Difusividad de la sustancia (D) = $4.5 \cdot 10^{-9}$ m²/s
- Concentración a la entrada de la sustancia (c_0) = 27 mol/m³

Geometría del objeto de estudio

La geometría que se analizará es un canal sin *spacers*. Las medidas de este son las mismas que las de los casos previos, tal como se puede comprobar en los parámetros de entrada.

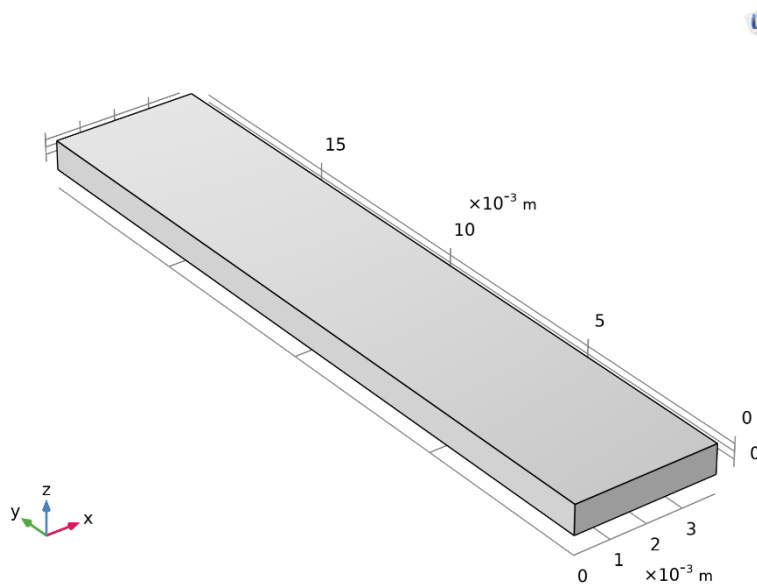


Figura 168. Geometría del canal sin *spacers* (Fuente: elaboración propia).

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno de esta simulación son idénticas a las de la simulación presentada en A2.

Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica.

En primer lugar, hay que indicar que el material que se analiza es agua, mediante la opción *add material from library*:

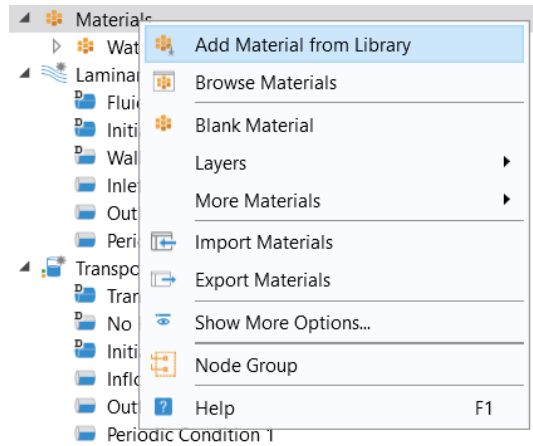


Figura 169. Método para seleccionar el material (Fuente: elaboración propia).

Para poder resolver esta simulación se usarán dos módulos: el de *laminar flow* y el de *transport of diluted species*. Las ecuaciones que actúan en el módulo de *laminar Flow* son las de Navier-Stokes (Ec. (4) y Ec. (6)), y la que actúa en el módulo de transporte de especies diluidas es la Ec. (1). En la Figura 170 se muestran las condiciones de contorno del módulo de *laminar flow*.

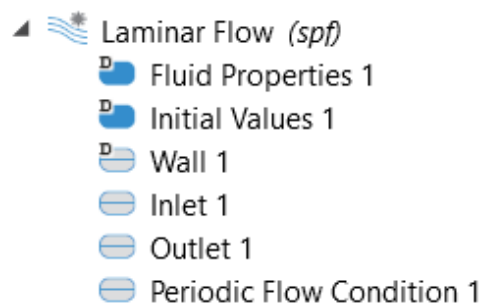


Figura 170. Condiciones de contorno del flujo laminar (Fuente: elaboración propia).

Primeramente, en la condición de *laminar flow* se debe especificar que el flujo laminar en toda la geometría, y que las propiedades del fluido son las del material escogido (agua, en este caso). Además, hay que establecer que el flujo es incompresible:

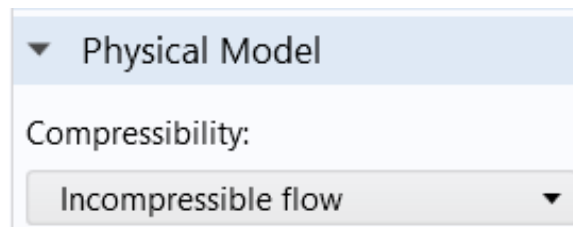


Figura 171 Selección de la incompresibilidad del flujo (Fuente: elaboración propia).

El siguiente paso es definir la entrada (*inlet*) y salida (*outlet*) del flujo. Esto se hace mediante las condiciones *inlet* y *outlet*.

- *Inlet*: se define que el flujo que entra está totalmente desarrollado y que la velocidad media de ese flujo es U_0 (7 cm/s), tal como se puede apreciar en la Figura 172.

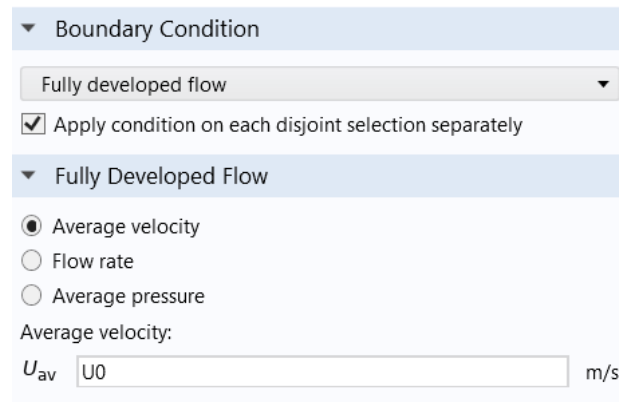


Figura 172. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 173 se pueden observar las superficies en las que se aplica la condición de *inlet*.

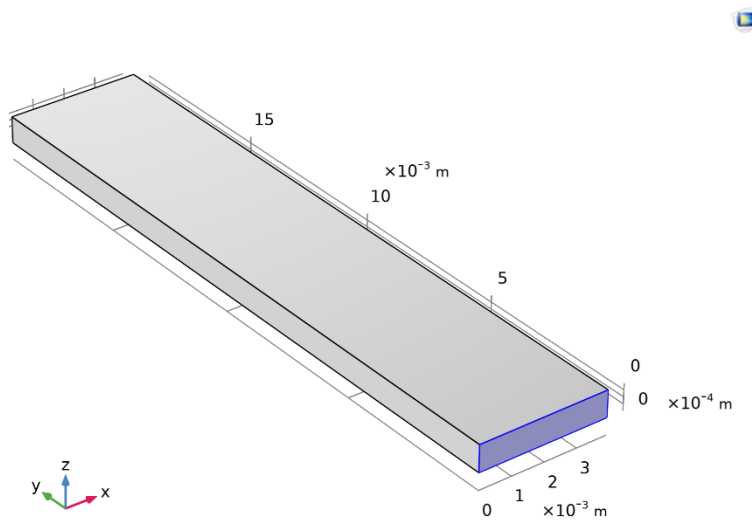


Figura 173. Entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outlet*: se define que la presión a la salida es cero Pa y que no hay flujo de retorno:

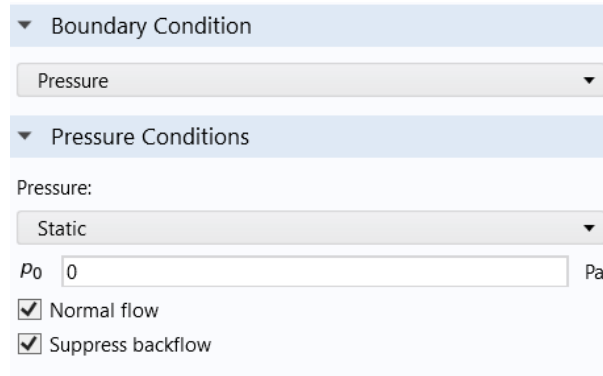


Figura 174. Condiciones de salida del flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 175 se pueden observar los contornos en los que se aplica la condición *outlet*:

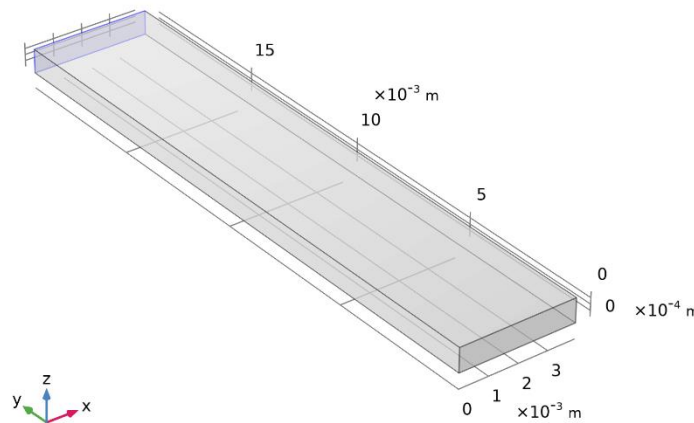


Figura 175. Salidas del flujo (Fuente: elaboración propia).

Por último, hay que establecer una condición periódica para indicar que las paredes laterales, paralelas al flujo, también forman parte de una unidad repetitiva, ya que el ancho del canal podría ser más grande. Para definir estas condiciones periódicas hay que usar la condición llamada *periodic flow condition*, e indicar que la diferencia de presión entre las superficies contrarias es igual a cero:

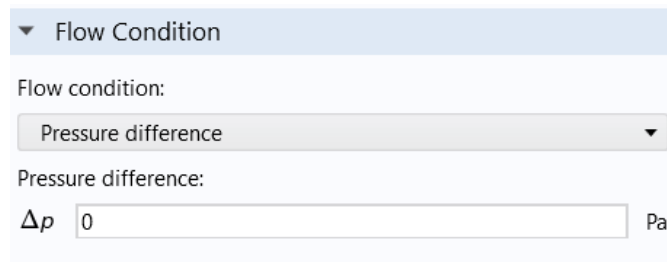


Figura 176. Condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 177 se pueden observar los contornos en los que se aplica la *periodic flow condition*:

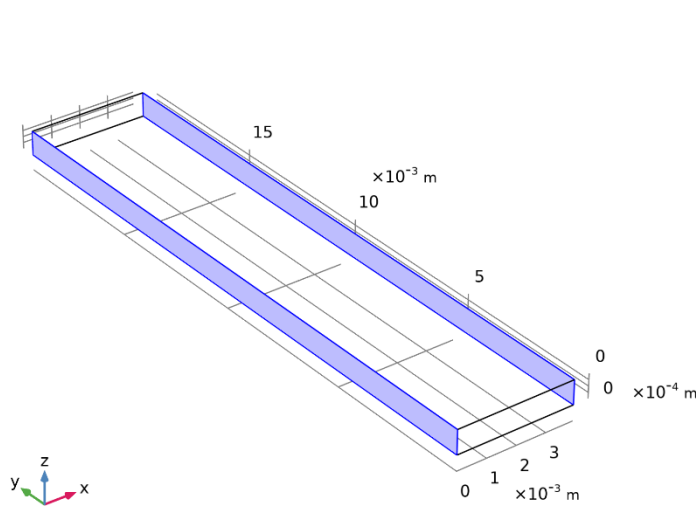


Figura 177. Aplicación de la condición de flujo periódico (Fuente: elaboración propia).

Ahora se introducirán las condiciones de contorno del módulo de transporte de especies diluidas:

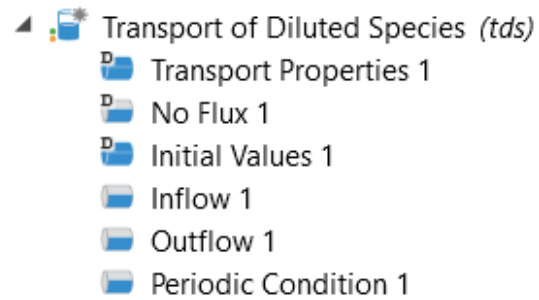


Figura 178. Condiciones de contorno del proceso electroquímico (Fuente: elaboración propia).

El primer paso es definir las propiedades del transporte que se está efectuando. Es necesario establecer a que temperatura se encuentra, que campo de velocidades actúa y las propiedades difusivas de la sustancia:

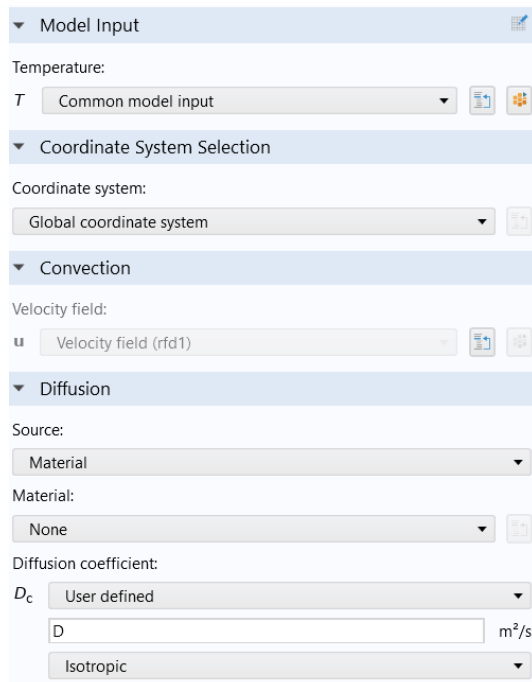


Figura 179. Propiedades del electrolito (Fuente: elaboración propia).

Donde el *common model input* tiene un valor igual a T (298,15 K), el campo de velocidades (*velocity field*) se resuelve del flujo laminar seleccionando la opción *Velocity field (rfd 1)* y en difusión se indica el coeficiente de difusión de la sustancia.

El siguiente paso es definir la entrada (*inflow*) y salida (*outflow*) del flujo. Para ello se usan las condiciones *inflow* y *outflow*.

- *Inflow*: se establece que el flujo entra como en la Figura 112. Como se ha indicado previamente, el flujo entra con un perfil discontinuo de concentración, una mitad entra con una concentración de 27 mol/m^3 y la otra mitad con una concentración de 0 mol/m^3 . La condición matemática que expresa este perfil ha sido mostrada en la (31)[15]. La implementación de la condición matemática se realiza de la misma manera que en el apartado A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica. Gracias a esta función de Heaviside es posible implementar la (31) en la condición de *inflow*:

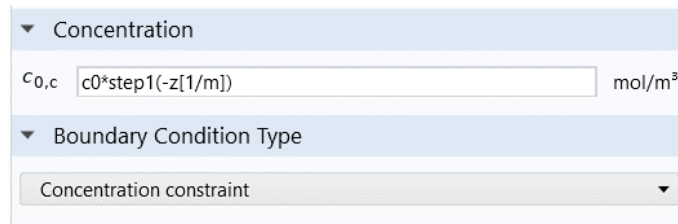


Figura 180. Condiciones de entrada del flujo (Fuente: elaboración propia).

- *Outflow*: se establece que el flujo sale como en la Figura 147.

Una vez definidas las condiciones de *inflow* y *outflow*, hay que definir una condición periódica, al igual que en el flujo laminar, para indicar que las paredes laterales forman parte de la unidad repetitiva. Las superficies de aplicación son las mismas que las mostradas en la Figura 177.

Por último, para realizar el acoplamiento de los dos módulos físicos, se usará la opción *Multiphysics*. Esta opción permite unir los dos módulos de manera rápida y automática para que el usuario no tenga que hacerlo. Los módulos se acoplan igual que en el caso anterior.

Mallado

En esta simulación también se ha decidido usar los tetraedros como elementos, por los mismos motivos mencionados en el apartado 3.1.1.6. Como se ha indicado en dicho apartado, para crear la malla de tetraedros hay que emplear la opción *free tetrahedral*, y a continuación, indicar el tamaño de malla que se quiere usar.

Como se ha mencionado en el apartado de Malla de A2. Modelización de los *spacers* con forma cilíndrica, se quiere mallar las geometrías con un tamaño de elemento muy parecido, para obtener resultados que puedan ser comparables. Por este motivo, se ha utilizado el mismo tamaño de elemento que en los dos casos anteriores.

De nuevo, se ha usado la calibración que ofrece COMSOL para la dinámica de fluidos. En la Figura 124 se puede observar la calibración mencionada y la elección del tamaño de malla.

Element Size

Calibrate for:
Fluid dynamics

Predefined Normal
 Custom

Element Size Parameters

Maximum element size:
1.92E-4 m

Minimum element size:
3.62E-5 m

Maximum element growth rate:
1.13

Curvature factor:
0.5

Resolution of narrow regions:
0.8

Figura 181. Calibración y dimensionado de la malla (Fuente: elaboración propia).

La malla generada se muestra en la Figura 182.

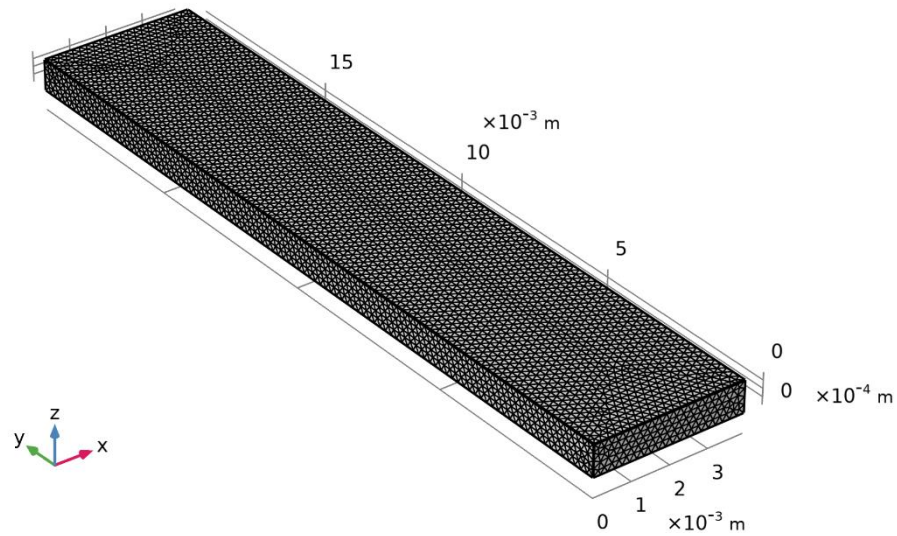


Figura 182. Malla generada (Fuente: elaboración propia)

Una vista más detallada de la malla se muestra en la Figura 183.

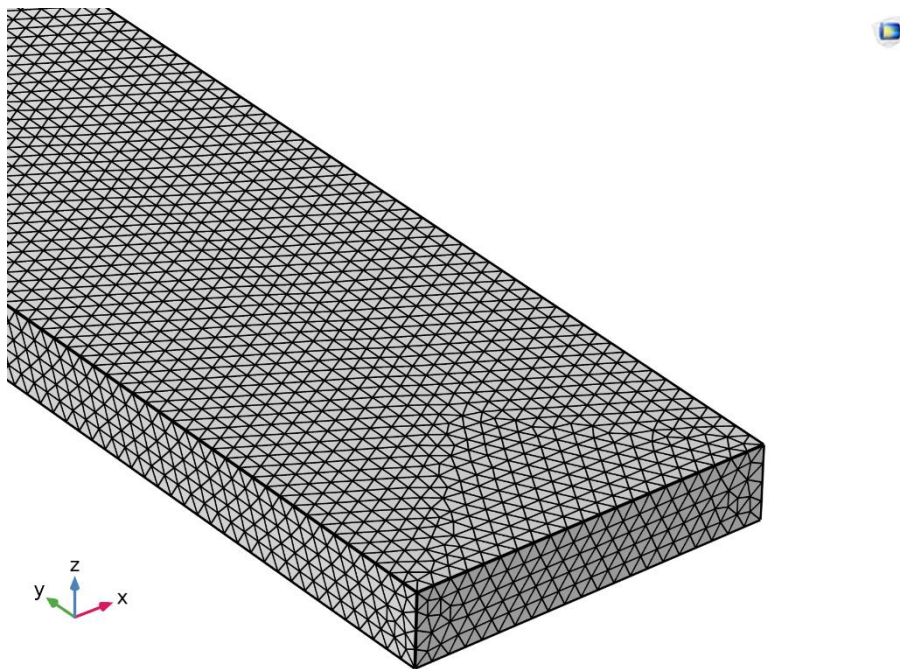


Figura 183. Vista detallada de la malla (Fuente: elaboración propia).

La malla mostrada en la Figura 182 tiene 143088 elementos. Como se puede apreciar, se ha creado una malla con menos elementos y muy regular debido a que ahora no hay *spacers*.

Resolución en COMSOL

Los estudios a realizar son los mismos que en el caso anterior, se ha realizado un solo estudio con dos *steps*.

Se ha usado un *step* para resolver el módulo de *laminar flow* (*Step 1*) y otro para resolver el de *transport of diluted species* (*Step 2*).

- *Step 1*: se ha indicado que únicamente se debe resolver el módulo de flujo laminar y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los valores de las no resueltas se deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento de las dos físicas existentes se efectúa mediante la opción de *Multiphysics couplings*.
- *Step 2*: se ha indicado que sólo debe resolver el módulo de transporte de especies diluidas y que tanto los valores iniciales de las variables resueltas como los valores de las no resueltas se

deben resolver de acuerdo con las físicas empleadas. El acoplamiento multifísico se efectúa como en el *step 1*.

Resultados

Primeramente, se presentarán los resultados obtenidos al resolver el flujo laminar y, a continuación, se mostrarán los resultados referentes al transporte de especies diluidas.

- *Laminar flow*:
 - Campo de velocidades:

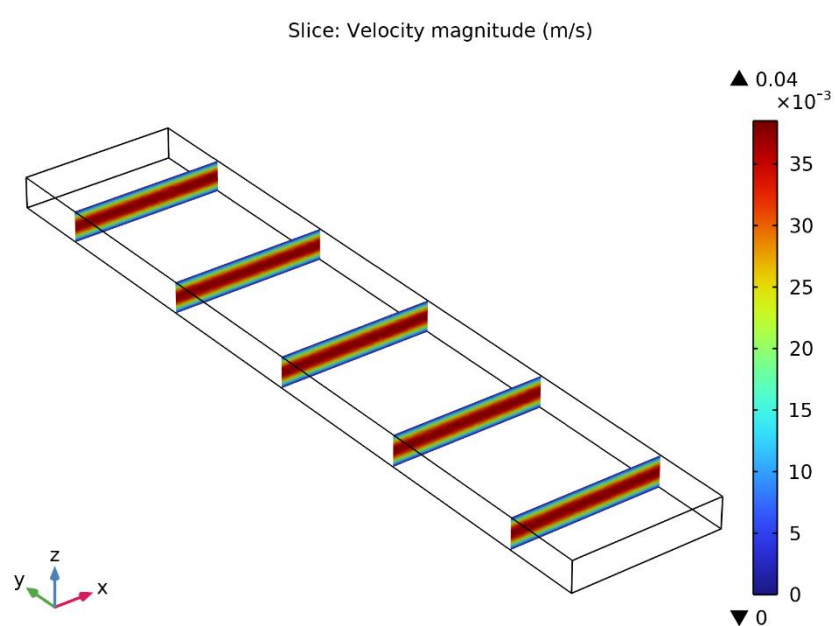


Figura 184. Campo de velocidades visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 184 se puede apreciar el perfil parabólico característico de los flujos laminares y la condición de no deslizamiento en las paredes, donde la velocidad es nula. Además, se puede ver cómo el flujo entra de manera totalmente desarrollada en el canal, tal como se había especificado previamente.

- *Transport of diluted species*:
 - Concentración:

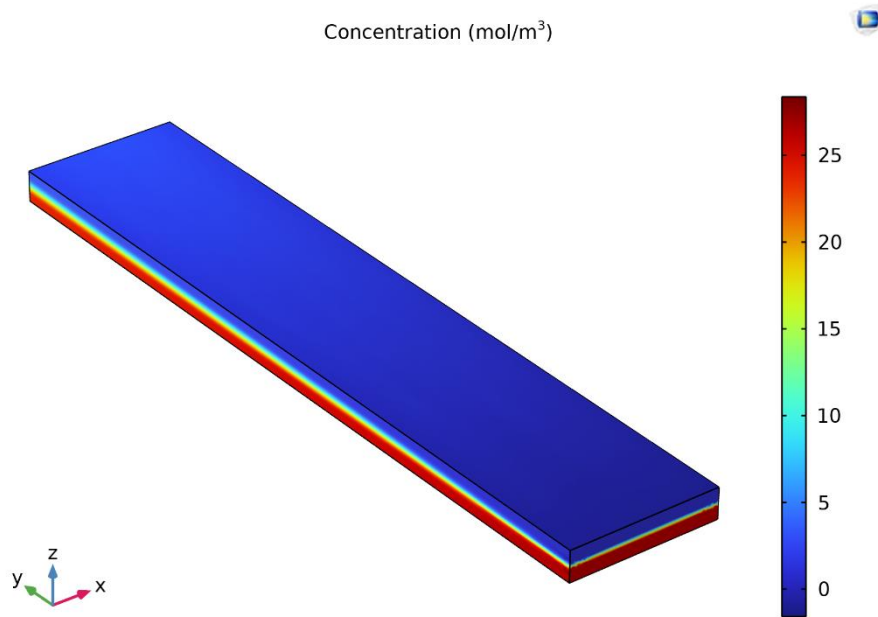


Figura 185. Concentración en las superficies exteriores (Fuente: elaboración propia).

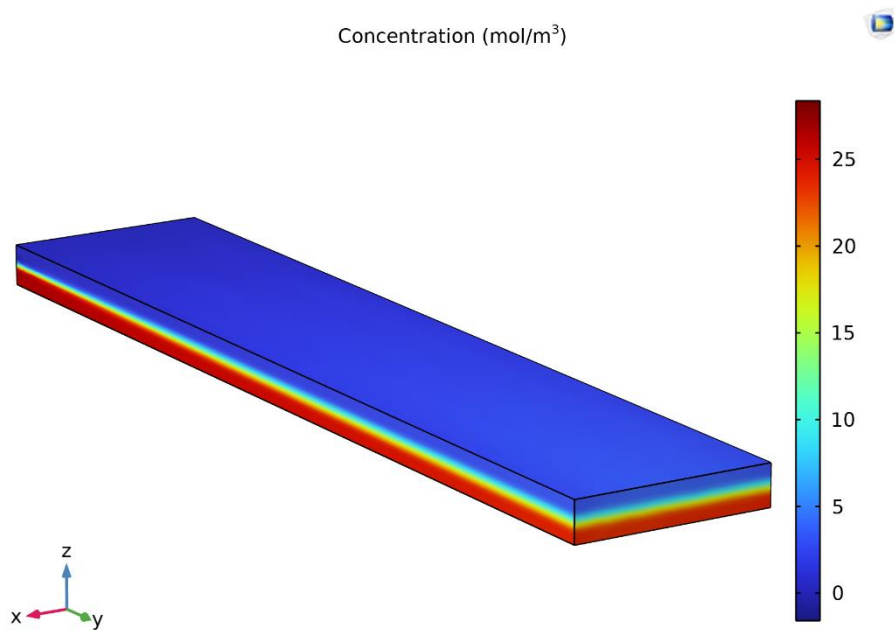


Figura 186. Vista posterior de la geometría (Fuente: elaboración propia).

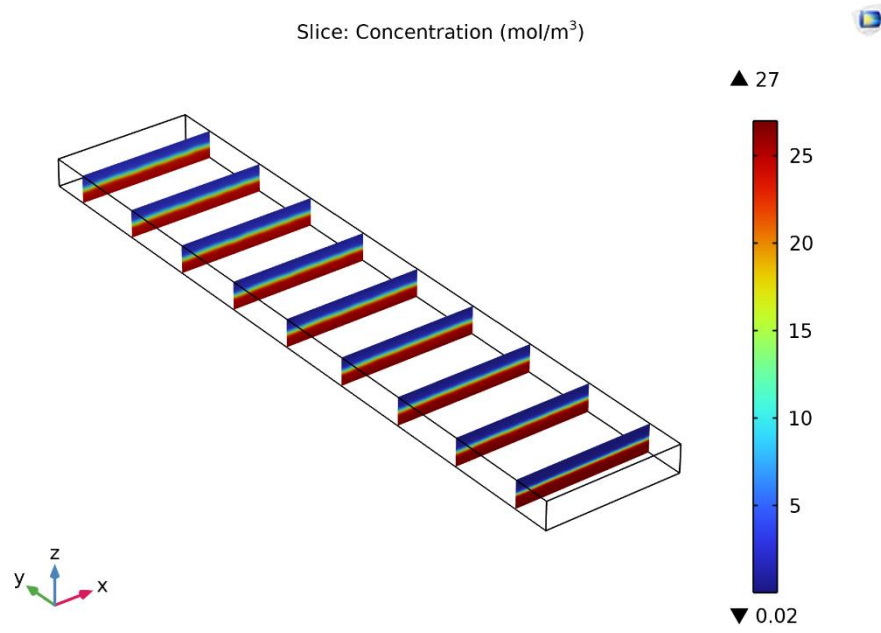


Figura 187. Gradiente de concentraciones visto transversalmente al flujo (Fuente: elaboración propia).

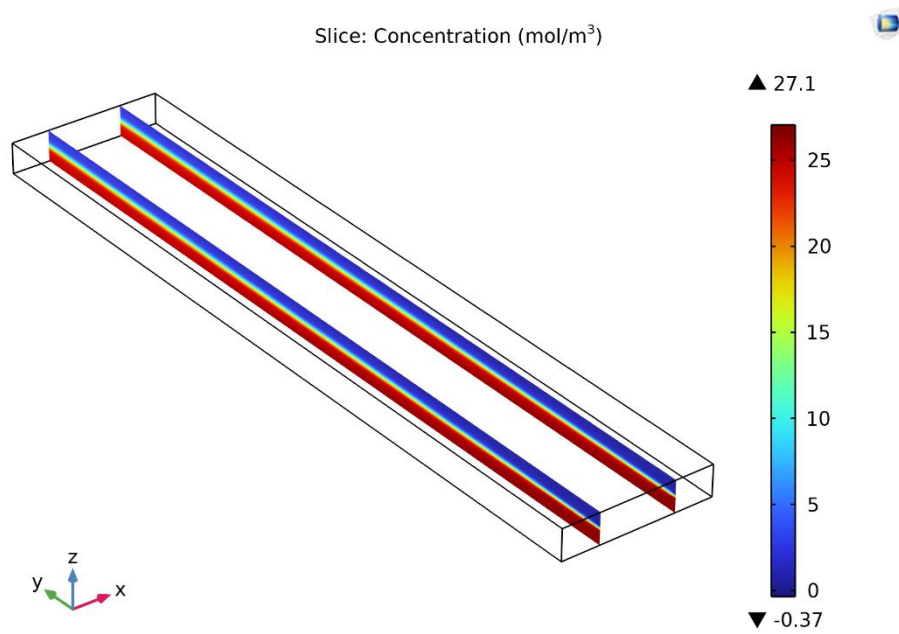


Figura 188. Gradiente de concentraciones visto paralelamente al flujo (Fuente: elaboración propia).

En la Figura 185 se puede apreciar la discontinuidad de la concentración a la entrada. Se puede observar cómo, a primera vista, el flujo no parece mezclarse.

Una vez vistos los resultados, se procederá a calcular el coeficiente de calidad del mezclado. Para ello, como en el caso anterior, es necesario ir a la opción *Global Evaluation* dentro de *Derived Values*, buscar la variable *S_outlet* y seleccionar *Evaluate*. Realizando este proceso se obtiene que el coeficiente de calidad del mezclado para esta geometría es de 0.47736, es decir, esta geometría no favorece el mezclado. El coeficiente de mezclado es mucho más elevado que en los casos mostrados anteriormente, hecho que constata que, en un flujo laminar, si no se induce una convección, es muy difícil hacer que las sustancias se mezclen bien. El poco mezclado que hay ocurre en la mitad exacta y en las zonas más adyacentes por difusión, ya que la convección prácticamente no tiene efecto.

Esta simulación fue la que nos dio la idea de efectuar una validación experimental al respecto, y las dimensiones que se pensaron para el canal impreso en 3D eran las presentadas en el apartado de Parámetros de entrada.

