

Treball de Fi de Grau

Grau en Tecnologies Industrials

Simulació Fluidodinàmica (CFD) de Formació de Nanoparticules a Escala Industrial.

MEMÒRIA

Autor:	Albert Parra Mondéjar
Director:	Alfredo Guardo Zabaleta
Convocatòria:	Juny 2016



Escola Tècnica Superior
d'Enginyeria Industrial de Barcelona



Resum

Cada vegada més empreses treballen amb eines de Fluidodinàmica Computacional. Per què? Per una senzilla raó. Economia. Gràcies a aquestes eines es pot estalviar una gran quantitat de diners, sovint malgastats en prototips defectuosos.

Aquest treball és una bona mostra d'això. Es vol aconseguir un prototip industrial d'un sistema experimental de formació de nanopartícules. Però, abans d'intentar construir el prototip a través d'una inversió grandiosa, s'ha preferit estudiar el sistema a través d'eines de Fluidodinàmica Computacional. D'aquesta manera, s'intentarà comprendre el funcionament de totes les variables que hi intervenen, es farà un model per a ésser simulat mitjançant aquestes eines recent descrites, i es valorarà si la construcció d'aquest prototip és viable o no.

D'aquesta manera, aquest projecte ha servit a l'autor per poder aprendre a fer servir aquestes eines de Fluidodinàmica Computacional i per aplicar-les a un problema real.

Sumari

RESUM	1
SUMARI	2
1. GLOSSARI DE FIGURES I TAULES.	6
1.1. Glossari de figures.....	6
1.2. Glossari de taules.....	7
2. PREFACI	8
2.1. Origen del projecte	8
2.2. Motivació.....	8
2.3. Requeriments previs	8
3. INTRODUCCIÓ	9
3.1. Objectius del projecte	9
3.2. Abast del projecte.....	9
4. MODEL EXPERIMENTAL.	10
4.1. Introducció.	10
4.2. <i>Microencapsulation by solvent evaporation.</i>	10
4.2.1. Paràmetres experimentals vs. propietats de les microesferes.....	11
4.3. Experiment.....	12
4.3.1. Material.	12
4.3.2. Dissolucions.....	13
4.3.3. Procediment.....	13
4.4. Agitador Turrax T18.....	14
5. DINÀMICA DE FLUIDS.	16
5.1. Introducció.	16
5.2. Propietats dels fluids.	16
5.2.1. Tensió superficial.	17
5.2.2. Viscositat.....	18
5.3. Equacions fonamentals de la dinàmica de fluids.....	19
5.3.1. Equació de la continuïtat.	19
5.3.2. Equació de conservació de la quantitat de moviment.	20
5.3.3. Equacions de Navier-Stokes.	20
6. MODELS MATEMÀTICS PER A LA RESOLUCIÓ DEL MODEL.	21
6.1. Introducció.	21
6.2. Model de viscositat.....	21
6.2.1. El fenomen de la turbulència.....	21

6.2.2.	Model $k-\varepsilon$.	22
6.2.3.	Model $k-\omega$.	23
6.2.4.	Model SST $k-\omega$.	24
6.3.	Model multifàsic.	24
6.3.1.	Model <i>Mixture</i> .	24
6.3.2.	Model <i>Eulerian</i> .	25
6.3.2.1.	Formulació implícita.	25
6.3.2.2.	Formulació explícita.	25
7.	SIMULACIÓ DEL MODEL EXPERIMENTAL.	27
7.1.	Modelització 3D.	27
7.2.	Discretització i mallat.	28
7.2.1.	Mallat del rotor.	28
7.2.2.	Mallat del estator.	32
7.3.	<i>Preprocessor</i> .	35
7.3.1.	Materials.	35
7.3.2.	Condicions de contorn i paràmetres de malla.	36
7.3.3.	Models matemàtics.	37
7.3.3.1.	Model multifàsic.	38
7.3.3.2.	Model de turbulència.	38
7.3.4.	Estat estacionari / estat transitori.	39
7.4.	Simulació.	40
7.4.1.	Simulació-Test del model.	40
7.4.2.	Simulació a l'equip del Departament de Mecànica de Fluids.	41
8.	POSTPROCESSOR.	45
9.	ANÀLISI DELS RESULTATS.	46
10.	ESTUDI ECONÒMIC.	48
10.1.	Càlcul de la inversió.	48
10.1.1.	Despesa administrativa.	48
10.1.2.	Despesa en material informàtic.	49
10.1.3.	Despesa en material de laboratori.	50
10.1.4.	Despesa d'oficina.	51
10.1.5.	Càlcul de la inversió necessària.	52
10.2.	Càlcul d'ingressos generats per la realització del projecte.	52
10.3.	Cost del projecte per a l'empresa.	53
10.4.	Balanç econòmic final per a l'enginyer.	53
CONCLUSIONS		55

Validació del model.....	55
Assoliment d'objectius.....	56
AGRAÏMENTS _____	57
BIBLIOGRAFIA _____	58
Referències bibliogràfiques.....	58

1. Glossari de figures i taules.

1.1. Glossari de figures.

FIG 4.1. ESQUEMA DEL MÈTODE <i>OIL-IN-WATER</i> . [8]	10
FIG 4.2. MODEL EXPERIMENTAL.	12
FIG 4.3. VISTA MICROSCÒPICA DE LES MICROESFERES. [8]	13
FIG 4.4. AGITADOR TURRAX T18. [9]	14
FIG 4.5. EFECTE DE CISALLA PRODUÏT PER L'AGITADOR. [9]	14
FIG 4.6. BRAÇ S18N-19G. [9]	15
FIG 5.1.ESQUEMA D'UNA GOTA QUASI ESFÈRICA.	17
FIG 5.2.ESFORÇ TALLANT APLICAT A UN ELEMENT DIFERENCIAL FLUID.	18
FIG 5.3. DIFERÈNCIA DE VELOCITATS ENTRE PART SUPERIOR I INFERIOR D'UN ELEMENT DIFERENCIAL FLUID.	18
FIG 6.1. DIFERÈNCIA ENTRE UN FLUX TURBULENT I UN FLUX LAMINAR. [5]	22
FIG 7.1. MODEL 3D DE L'AGITADOR TURRAX.	27
FIG 7.2. EXEMPLE DE MALLA TETRAÈDRICA. [10]	28
FIG 7.3. GEOMETRIA DEL ROTOR ABANS DE MALLAR.	29
FIG 7.4.GEOMETRIA INTERIOR DEL ROTOR, VISTA EN DETALL DE LES CISALLES.	29
FIG 7.5. VISTA TRIDIMENSIONAL DEL MALLAT.	30
FIG 7.6. VISTA EN DETALL DEL <i>EDGE SIZING</i> .	31
FIG 7.7. VISTA EN DETALL DE L'INTERIOR DE LA MALLA DEL ROTOR.	31
FIG 7.8. MESH METRICS DE LA MALLA DEL ROTOR.	32
FIG 7.9. GEOMETRIA INICIAL DE L'ESTATOR.	32
FIG 7.10. VISTA INTERIOR DEL MALLAT DE L'ESTATOR.	33
FIG 7.11. VISTA EN DETALL DE LA SUPERFÍCIE DE CONTACTE ENTRE CISALLES DEL ROTOR I ESTATOR.	34
FIG 7.12. VISTA EN DETALL DE LA ZONA DE CONTACTE SUPERIOR.	34
FIG 7.13. MESH METRICS DEL MALLAT DE L'ESTATOR.	35
FIG 7.14. A L'ESQUERRA, PICNÒMETRE. A LA DRETA, REÒMETRE.	36
FIG 7.15. VISTA DEL SLIDING MESH DEL MODEL.	37
FIG 7.16. VISTA EN DETALL DEL PANELL DE TRIA DEL MODEL MULTIFÀSIC A FLUENT 16.2.	38
FIG 7.17. VISTA EN DETALL DEL PANELL DE TRIA DEL MODEL DE TURBULÈNCIA A FLUENT 16.2.	39
FIG 7.18. DETALL DE LA VISTA TRANSVERSAL.	42
FIG 7.19. VISTA TALL EN DIRECCIÓ RADIAL.	42
FIG 7.20. VISTA EN 3D DE LES CISALLES DEL ROTOR.	43
FIG 7.21. PANELL DE SELECCIÓ I EDICIÓ D'ANIMACIONS A FLUENT 16.2.	43
FIG 8.1. VISTA DEL PROGRAMA MOVIE MAKER.	45
FIG 9.1. COMPARACIÓ MODEL SIMULAT VS MODEL EXPERIMENTAL.	47

1.2. Glossari de taules.

TAULA 4.1. ESPECIFICACIONS TÈCNIQUES DE L'AGITADOR.	15
TAULA 7.1. PROPIETATS FÍSiques DE LES FASES.	36
TAULA 7.2. RESUM DE LES FASES DEL TEST.	41
TAULA 7.3. MODELS USATS PER A LA SIMULACIÓ FINAL.	44
TAULA 10.1. DESPESA ADMINISTRATIVA.	48
TAULA 10.2. DESPESA EN HARDWARE.	49
TAULA 10.3. DESPESA EN SOFTWARE.	49
TAULA 10.4. DESPESA TOTAL EN MATERIAL INFORMÀTIC.	49
TAULA 10.5. DESPESA TOTAL EN APARELLS DE LABORATORI.	50
TAULA 10.6. DESPESA TOTAL EN SUBSTÀNCIES QUÍMIQUES.	50
TAULA 10.7. DESPESA TOTAL EN MATERIAL DE LABORATORI.	50
TAULA 10.8. DESPESA TOTAL EN SERVEIS D'OFICINA.	51
TAULA 10.9. DESPESA TOTAL EN MATERIALS D'OFICINA.	51
TAULA 10.10. DESPESA TOTAL DERIVADA DE L'ÚS D'UNA OFICINA.	51
TAULA 10.11. INVERSIÓ NECESSÀRIA PER REALITZAR EL PROJECTE.	52
TAULA 10.12. CÀLCUL DE LA RETRIBUCIÓ ECONÒMICA DE L'ENGINYER.	52
TAULA 10.13. COSTOS ASSUMITS PER L'EMPRESA.	53
TAULA 10.14. CÀLCUL IRPF TOTAL.	53
TAULA 10.15. BALANÇ ECONÒMIC FINAL PER A L'ENGINYER.	54

2. Prefaci

2.1. Origen del projecte

Aquest projecte s'ha portat a terme per la necessitat que hi havia dins del Departament d'Enginyeria Química d'implementar un sistema de formació de nanopartícules a escala industrial. Per a fer-ho, el departament va pensar que l'eina adequada seria utilitzar software de simulació CFD per a verificar el sistema d'escala experimental i extrapolar els resultats per a comprovar si és possible realitzar el pas a escala industrial.

2.2. Motivació

Actualment hi ha molts articles relacionats amb la simulació de sistemes mitjançant eines CFD. Però no n'hi ha cap que provi de simular la formació de nanopartícules i la seva posterior comprovació experimental a través de valors directament mesurats a les partícules (distribucions de tamany, viscositats, densitats, etc). La importància d'aquest projecte és notable, ja que a més de donar resposta a una necessitat pròpia del departament, també és un projecte pioner.

2.3. Requeriments previs

Si bé és cert que la majoria de coneixements s'han adquirit durant la realització del projecte, per afrontar-lo correctament era necessari un cert nivell de mecànica de fluids, aconseguit durant l'assignatura impartida al Grau.

3. Introducció

3.1. Objectius del projecte

Aquest Treball de Fi de Grau té com a objectiu principal simular un sistema de fabricació de nanopartícules mitjançant eines de CFD. Es vol aconseguir una comparació a nivell qualitatiu del funcionament del model creat durant aquest treball amb el model experimental.

Com a objectius post-treball, l'equip s'ha marcat arribar a poder comparar valors aconseguits a partir de la simulació amb les variables que s'obtenen del model experimental.

A nivell personal, el projecte ha de servir per assolir un nivell alt de coneixements de totes les disciplines que l'emmarquen: química experimental, mecànica de fluids, gestió de projectes o fluidodinàmica computacional.

3.2. Abast del projecte

Tot i que l'objectiu final que s'ha marcat l'equip d'investigació és arribar a aconseguir un model capaç de mesurar tamanys de partícula i potències d'agitació per tal de poder extrapolar els resultats experimentals per a aconseguir realitzar les nanopartícules a escala industrial, cal emfatitzar que aquest treball només es centra en la primera part: la realització d'un model mitjançant eines CFD i la posterior comparació envers el sistema experimental a través de mètodes qualitius.

Per tant, l'abast d'aquest projecte és el següent:

- Modelitzar l'entorn experimental utilitzant software de disseny 3D.
- Realitzar un mallat del disseny 3D suficientment precís per captar els fenòmens que s'observen al model experimental.
- Preparar la simulació d'aquest disseny, definint correctament tots els paràmetres i les condicions de contorn que hi intervenen.
- Trobar els models matemàtics que siguin capaços de calcular els valors de les variables que es volen estudiar de manera estable i precisa.
- Analitzar mitjançant les eines CFD el funcionament del model.
- Comparar els resultats obtinguts amb el model de simulació amb el funcionament del model experimental a través de mètodes qualitius.
- Dissenyar els experiments pertinents per tal de poder aconseguir les variables experimentals que determinen el comportament dels fluids.
- Dissenyar els experiments pertinents per aconseguir visualitzar el funcionament del model experimental per a poder comparar-lo amb el model de la simulació.

4. Model experimental.

4.1. Introducció.

Aquest apartat tractarà d'explicar el funcionament i la finalitat del model experimental usat pel Departament d'Enginyeria Química de l'ETSEIB, el qual es pretén simular en el transcurs d'aquest projecte.

4.2. *Microencapsulation by solvent evaporation.*

El títol d'aquest apartat fa referència al procés químic que fa servir l'experiment realitzat pel Departament.

Aquesta tècnica és àmpliament usada per la indústria farmacèutica. Facilita l'alliberament de la droga de forma controlada, la qual cosa aporta molts beneficis clínics. Per a fer-ho, es parteix de polímers insolubles en aigua, que són usats com a matriu per encapsular la droga.

Diferents tipus de drogues hidrofòbiques han sigut encapsulades utilitzant aquesta tècnica amb èxit. Com a exemples, nombrar la lidocaïna, el cisplatí o la progesterona. Com a exemples de drogues hidrofíliques, també s'han aconseguit encapsular drogues com la insulina, proteïnes o pèptids.

Actualment existeixen diferents mètodes per aplicar aquesta tècnica. Tot i això, en aquest projecte només es mencionarà el mètode que s'utilitza per a la realització del model experimental. Aquest mètode s'anomena *oil-in-water*. És el mètode més senzill, i rep aquest nom per la seva similitud a l'hora de mesclar oli dins d'aigua. S'utilitza en drogues insolubles o molt poc solubles en aigua.

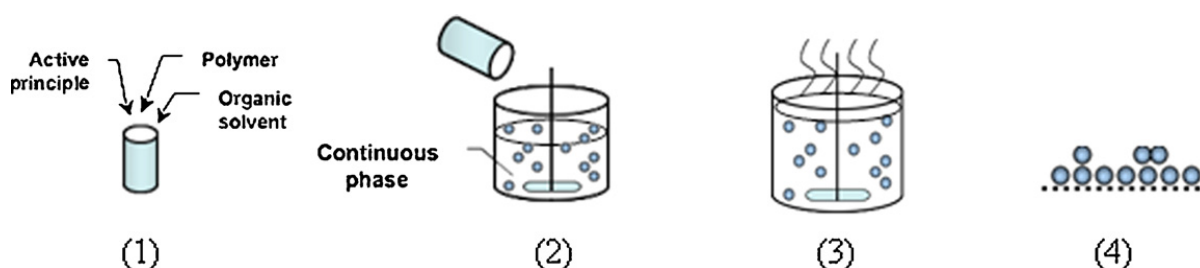


Fig 4.1. Esquema del mètode *oil-in-water*. [8]

Com es pot observar a la figura 4.1, el procés consta de quatre passos:

1. Es dissol la droga hidrofòbica en un solvent orgànic que contingui també el polímer.
2. S'emulsiona la fase orgànica, també anomenada fase dispersa, dins d'una fase aquosa o fase contínua.

3. S'extrau el solvent de la fase dispersa a través de l'evaporació d'aquest solvent. D'aquesta manera, es transformen les gotes de fase dispersa en partícules sòlides.
4. Es recuperen i s'assequen les microesferes per eliminar el solvent residual.

D'aquesta manera s'obtenen les microesferes de nanopartícules. És important comentar els diversos paràmetres que afectaran directament a les propietats d'aquestes microesferes. Hi ha tres tipus de paràmetres:

- Propietats dels materials: tipus de polímer usat en la fase dispersa, tipus de droga usada, surfactant usat a la fase contínua.
- Paràmetres físics de la dissolució: viscositats de les fases, fracció en volum de la fase dispersa dins de la fase contínua, quantitat de droga a la fase dispersa.
- Condicions operatives: geometria del reactor i de l'agitador, temperatura i pressió, velocitat d'agitació.

A partir d'aquests paràmetres, les propietats de les microesferes variaran. Les més importants a tenir en compte són: la mida mitjana de les microesferes, la distribució de tamanys, la morfologia de la superfície i l'eficiència de la droga.

Existeixen diferents expressions experimentals per a quantificar la relació que hi ha entre els paràmetres de l'experiment i les propietats de les microesferes, que seran explicades al següent apartat.

4.2.1. Paràmetres experimentals vs. propietats de les microesferes.

Relació entre les viscositats i el diàmetre mitjà de les microesferes:

$$d_{32} = \left(\frac{\mu_d}{\mu_c} \right)^{0,25} \cdot A \quad (4-1)$$

Aquesta expressió relaciona el diàmetre mitjà (o diàmetre de Sauter) amb les viscositats d'ambdues fases i una constant A, que depèn d'altres paràmetres experimentals. D'aquesta manera, veiem que si s'augmenta la viscositat de la fase dispersa (la viscositat de la fase aquosa sempre serà propera a la viscositat de l'aigua i, per tant, difícil de variar), augmenta el tamany mitjà esperat de les partícules. Una tècnica fàcil per fer augmentar la viscositat de la fase dispersa pot ésser augmentar la concentració de polímer.

Relació entre l'agitador i el diàmetre de gota esperat:

$$\frac{d_{max}}{D} = c_1 \cdot \left(\frac{\rho_c N^2 D^3}{\sigma} \right)^{-\frac{3}{5}} \quad (4-2)$$

L'agitació és un dels paràmetres més importants a l'hora de controlar el tamany de les microesferes, just pel darrera de les propietats físic-químiques dels materials usats a la mescla. Depenen del tipus d'agitador usat, del nombre de cisalles que tingui, de la geometria del reactor,

etc, d'obtenen propietats de microesferes molt diferents. Per tal d'explicar la relació entre aquests factors i les propietats finals, existeix l'equació **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**4-2. Està basada en la Teoria de Kolmogoroff (Hinze, 1955).

D'aquesta manera es relaciona el diàmetre màxim de gota sota condicions de turbulència (d_{max}) amb el diàmetre de l'agitador (D), la densitat de la fase contínua (ρ_c), el ràtio d'agitació (N), la tensió interfacial entre ambdues fases (σ) i la constant experimental c_1 .

Com a conclusió, es pot extreure que si s'augmenta el ràtio d'agitació (a partir de l'augment de la velocitat de l'agitador), el tamany esperat de microesfera disminuirà.

4.3. Experiment.

Un cop explicat el fenomen en el que es basa el model experimental, es procedirà a explicar el funcionament d'aquest.

4.3.1. Material.

- Vas de precipitats de 500 mL.
- Agitador tipus Turrax T18.
- 438 mL de fase contínua.
- 62 mL de fase dispersa.

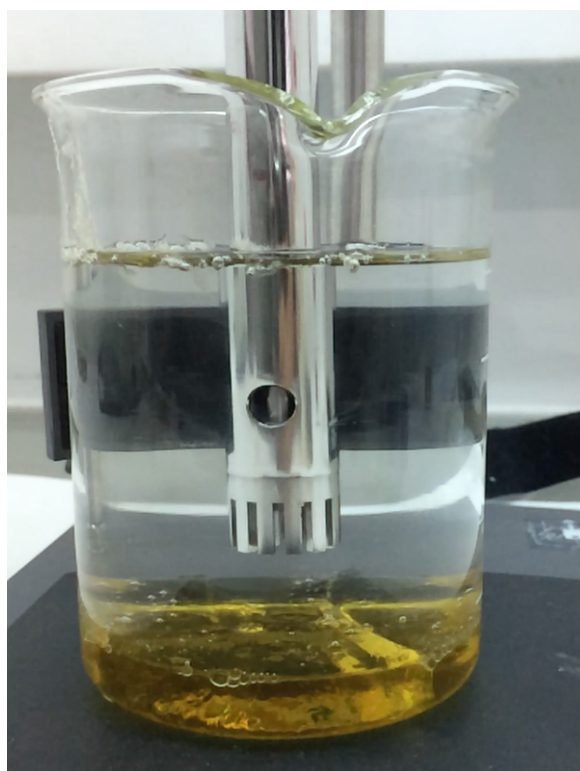


Fig 4.2. Model Experimental.

4.3.2. Dissolucions.

Com hem mencionat anteriorment, per tal d'aconseguir el fenomen explicat a l'apartat 4.2, és necessari aconseguir emulsificar una fase dispersa dins d'una fase aquosa o contínua.

La fase contínua, en aquest cas, serà una dissolució del polímer alcohol de polivinil (PVA) al 1% en aigua. Aquest polímer és soluble en aigua, i actua com a surfactant, és a dir, s'introdueix per tal d'augmentar la tensió interfacial entre ambdues fases.

Per tal d'extreure conclusions i relacions entre les propietats de les fases i de les microesferes finals, l'experiment s'ha realitzat amb diversos tipus de fases disperses. S'ha efectuat amb diferents polímers i amb diferents concentracions. En aquest projecte, però, només s'estudiarà una fase dispersa en particular: una dissolució del polímer polietilenimina (PEI) al 33% en diclorurmetà. Dins d'aquesta dissolució és on anirà la droga a encapsular.

4.3.3. Procediment.

Per a realitzar l'experiment, es segueix una pauta per tal que totes les proves segueixin el mateix procediment. Aquest comença introduint la fase contínua dins d'un vas de precipitats. A aquesta dissolució, se li introdueix l'agitador fins a 2/3 parts del recipient. Un cop està muntat, s'introdueix la fase dispersa. Aquesta fase es diposita al principi a la part superior del vas, i és quan s'ha d'encendre l'agitador.

Aquest treballarà a 10.000 rpm al començament, durant uns 30 segons per evitar que es formi espuma a la fase dispersa. Un cop passat aquest temps, s'augmenta la velocitat de l'agitador fins a 20.000 rpm. En aquestes condicions, es deixa treballar durant 30 min. Un cop finalitzat aquest temps, es procedeix a efectuar la fase d'assecamment del solvent i recollida de microesferes.

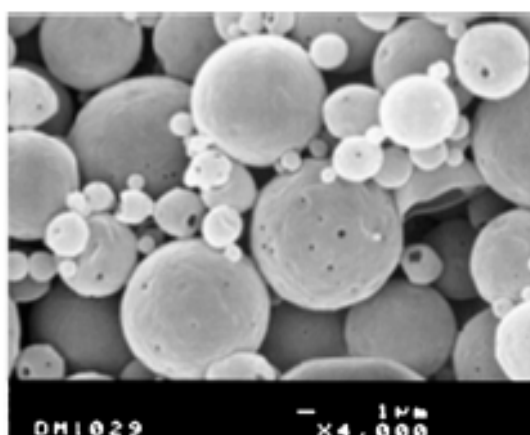


Fig 4.3. Vista microscòpica de les microesferes. [8]

4.4. Agitador Turrax T18.

Després d'explicar a l'apartat 4.2.1 la dependència tan forta que existeix entre les propietats finals de les microesferes i el tipus d'agitador, s'ha cregut molt important fer un capítol dedicat a l'agitador usat durant aquest projecte. L'agitador en qüestió és un Turrax T18, fabricat per l'empresa IKA. Es tracta d'un agitador anomenat de cisalla.



Fig 4.4. Agitador Turrax T18. [11]

S'anomena així degut a l'efecte que li produeix al fluid: no només li aplica un flux, sinó que també força un esforç de cisallament al mateix. És un agitador perfecte per produir el fenomen que es vol estudiar: a partir d'aquest cisallament és com es pot aconseguir l'emulsió en forma de microgotetes de la fase dispersa en la fase contínua.

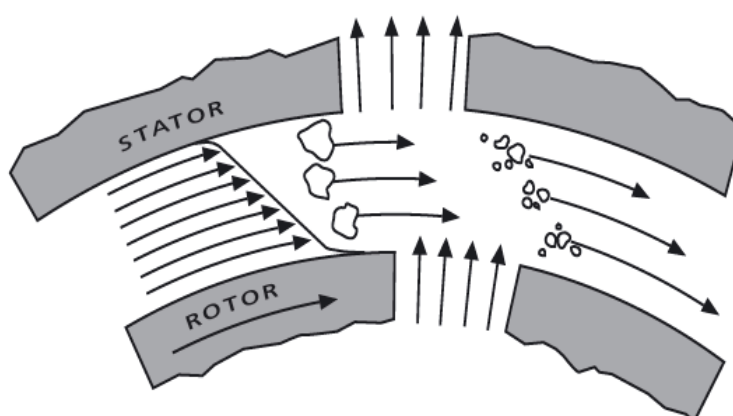


Fig 4.5. Efecte de cisalla produït per l'agitador. [11]

A continuació, es mostraran les especificacions tècniques de l'agitador:

<i>Tensió</i>	V_{ac}	200-240 \pm 10%
<i>Tensió nominal</i>	V_{ac}	230
<i>Freqüència</i>	Hz	50/60
<i>Potència consumida</i>	W	500
<i>Potència subministrada</i>	W	300
<i>Rang de velocitats</i>	rpm	3.000-25.000
<i>Temperatura ambient permissible</i>	°C	+5...+40
<i>Dimensions</i>	mm	65x106x271

Taula 4.1. Especificacions tècniques de l'agitador.

És necessari també analitzar amb deteniment el braç de l'agitador, ja que la disposició de cisalles és clau per tal d'arribar a l'èxit durant l'experiment. En aquest cas, es fa servir el model S18N-19G, fabricat també per l'empresa IKA.



Fig 4.6. Braç S18N-19G. [11]

Com s'aprecia a la figura anterior, el braç disposa d'una corona exterior de cisalles estàtiques, que conformen l'estator, i una cisalla mòbil a l'interior que gira solidària a l'eix del motor del Turrax, que forma el rotor.

És gràcies a aquesta geometria que les cisalles del rotor, a més de crear un flux de fluid cap a l'exterior, fan un primer efecte de cisalla del fluid. Un cop ha sigut cisallat, per efecte del flux sortint, el fluid passa per les cisalles del estator, on torna a patir un esforç de cisalla.

D'aquesta manera s'aconsegueix un doble cisallat del fluid, a més d'un efecte d'agitació igual de potent que qualsevol agitador de pales.

5. Dinàmica de fluids.

5.1. Introducció.

Definim fluid com a qualsevol substància que, al contrari d'un sòlid, es deforma sota l'acció d'un esforç tallant, independentment del valor d'aquest.

Un sòlid, per contra, pot resistir l'esforç tallant sempre i quan no es superi el límit elàstic del material.

Un cop presentat el concepte de fluid, cal diferenciar-los en dos tipus: líquids i gasos. La diferència entre les dues substàncies la trobem a la força de cohesió entre les partícules que la formen.

Un líquid, tot i no tenir una estructura molecular ordenada com la d'un sòlid, es compon de moltes partícules molt properes entre elles. Per aquesta raó, entre elles hi trobem una gran força de cohesió, que tendirà a conservar el seu volum.

En contraposició, les partícules que formen els gasos estan molt separades entre sí. Per tant, no hi actuen tantes forces de cohesió, fent que la substància tingui la tendència d'ocupar sempre tot l'espai on està confinat.

La ciència que estudia l'efecte de les forces aplicades als fluids s'anomena **mecànica de fluids**. Dins d'aquesta ciència, hi trobem dues branques: l'estàtica i la dinàmica dels fluids:

- L'**estàtica de fluids** es l'estudi d'aquest tipus de substància en repòs i en situació d'equilibri.
- La **dinàmica de fluids** es l'estudi dels fluids en moviment.

Com l'objectiu del projecte es trobar resultats d'un model dinàmic (és a dir, en moviment), s'hauran d'aplicar les equacions que governen la **dinàmica dels fluids**.

5.2. Propietats dels fluids.

Les propietats característiques dels fluids es poden diferenciar entre **mecàniques i tèrmiques**.

Les propietats tèrmiques més importants són: la temperatura, l'energia interna, l'entalpia, l'entropia, el coeficient de dilatació tèrmica i els calors específics a volum i pressió constant.

Com a propietats mecàniques, s'acostumen a prendre com a més importants la densitat, la pressió, el mòdul d'elasticitat volumètrica, la tensió superficial i la viscositat del fluid.

Com s'explicarà més endavant, les propietats tèrmiques en aquest projecte no tenen un efecte massa rellevant sobre el model, per tant no s'estudiaran a fons. En canvi, les propietats mecàniques dels fluids centraran la majoria dels càlculs. Per tant, seguidament es detallaran les propietats mecàniques més rellevants.

5.2.1. Tensió superficial.

La tensió superficial σ [N/m], descriu les forces sobre la superfície de contacte entre un gas i un líquid, dos líquids o un gas i un sòlid.

Aquesta propietat pren una gran importància en models que, com en aquest projecte, estudien la formació de gotes dins d'un líquid.

Per tal de trobar les expressions que determinen el comportament d'aquesta propietat, utilitzarem una gota infinitesimal de forma gairebé esfèrica situada sobre d'un altre fluid, al punt 0 de la superfície tangent al pla XY.

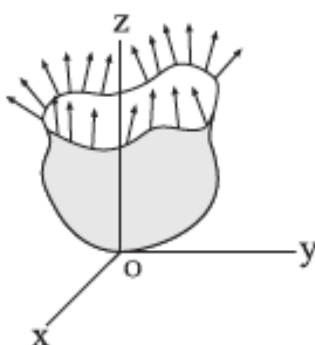


Fig 5.1. Esquema d'una gota quasi esfèrica.

Per aquesta superfície, es pot demostrar que la força vertical dF_z sobre la cantonada de la superfície ve donada per:

$$dF_z = \sigma \left[\left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} \right)_0 + \left(\frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right)_0 \right] dA \quad (5-1)$$

Si es fa la suposició de que la gota sigui perfectament esfèrica, dividint l'expressió per dA , es troba la diferència de pressió entre la part interior i l'exterior de la gota:

$$\Delta P = \frac{2\sigma}{R} \quad (5-2)$$

5.2.2. Viscositat.

Segurament és la propietat més coneguda i important quan s'estudien sistemes amb fluids. Aquesta propietat va ser descrita en primer lloc per Isaac Newton al relacionar els esforços tallants aplicats a una capa de fluid amb la velocitat de deformació del mateix.

Suposant un element diferencial de fluid, si se li aplica un esforç tallant τ , es pot apreciar que l'angle de deformació $\delta\theta$ depèn del temps d'actuació d'aquest. És a dir, mentre se li aplica el tallant, el fluid es seguirà deformant.

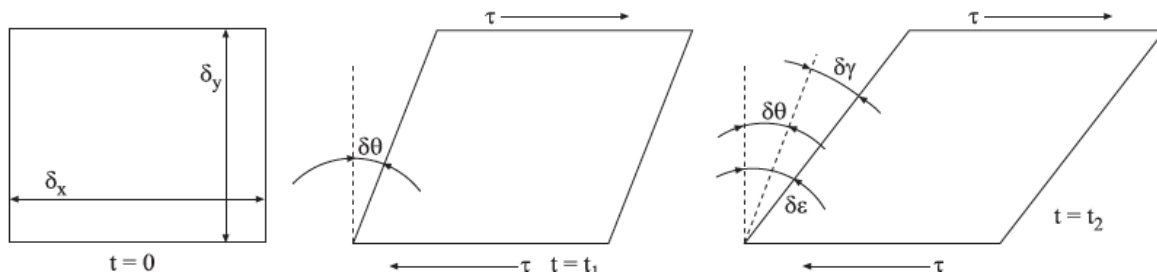


Fig 5.2.Esforç tallant aplicat a un element diferencial fluid.

Suposem ara que es té una mostra d'aquest element diferencial, on s'aprecien diferents velocitats entre la part superior i l'inferior (Fig. 5.3). La diferència entre ambdues velocitats es pot veure que és $\frac{du}{dy} \delta y$:

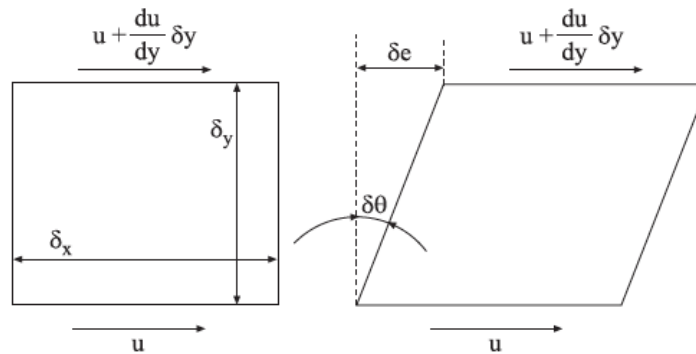


Fig 5.3. Diferència de velocitats entre part superior i inferior d'un element diferencial fluid.

Aplicant una sèrie d'aproximacions geomètriques a aquesta expressió, s'arriba a la conclusió de que l'esforç aplicat és una funció proporcional del quocient entre el desplaçament du i la posició dy :

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \tag{5-3}$$

Aquesta constant de proporcionalitat τ és l'anomenada viscositat dinàmica del fluid. L'equació 5.3 s'anomena Llei de Newton de la Viscositat o Equació Reològica d'un fluid Newtonià.

S'anomena fluid Newtonià aquell que manté una relació lineal entre l'esforç tallant i la deformació. En aquest treball de Fi de Grau només tractarem amb fluids Newtonians, així que no s'explicaran els casos en que els fluids no segueixen aquesta linealitat.

5.3. Equacions fonamentals de la dinàmica de fluids.

5.3.1. Equació de la continuïtat.

L'estat i el moviment d'un fluid es poden determinar a partir dels següents supòsits:

- Principi de conservació de la massa.
- La variació de la quantitat de moviment d'un volum finit és igual a la resultant de les forces de superfície, volumètriques i màssiques.
- Principi de conservació de l'energia.
- Hipòtesis d'equilibri termodinàmic local.

Per estudiar qualsevol sistema fluid, és necessari definir el concepte de volum de control: regió finita de fronteres obertes per les quals es poden definir fluxos de massa, quantitat de moviment i energia. Entre aquestes fronteres es realitza un balanç de magnituds entrants, sortints i romanents.

Per calcular la velocitat de canvi d'una propietat genèrica associada al fluid, es defineix un sistema de control que es desplaça amb el fluid. Inicialment, el sistema de control ocupa el mateix volum que el volum de control.

Si estudiem una propietat qualsevol del fluid, B, realitzant un balanç dins del volum de control trobem la següent expressió:

$$\frac{dB_{sist}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{VC} \rho b dV + \dot{B}_{sor} - \dot{B}_{ent} \quad (5-4)$$

L'equació 5-4 ens mostra la variació de la propietat B dins del volum V . Com a aclariment, el signe (-) indica que el flux va cap a dins del sistema.

Treballant aquesta expressió i definint la propietat B com a flux entrant, arribem a l'equació del Transport de Reynolds:

$$\frac{dB_{sist}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{VC} \rho b dV + \oint_{SC} \rho b \vec{v} d\vec{s} \quad (5-5)$$

L'últim terme de l'equació 5-5 representa el flux net de la propietat B a través de les fronteres del volum de control.

Substituint a l'equació de Transport de Reynolds el terme B per la massa del sistema, trobem l'equació de la continuïtat de la massa en forma integral:

$$0 = \frac{d}{dt} \int_{VC} \rho dV + \oint_{SC} \rho \vec{v} d\vec{s} \quad (5-6)$$

Aplicant el teorema de la divergència, trobem l'equació de la continuïtat en forma diferencial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) = 0 \quad (5-7)$$

5.3.2. Equació de conservació de la quantitat de moviment.

Agafant com a punt de partida un altre cop l'equació de transport de Reynolds, substituint la propietat B per la quantitat de moviment ($\vec{M} = m\vec{v}$) i tenint en compte el caràcter vectorial d'aquesta s'obté l'equació en forma integral de la conservació de la quantitat de moviment (Eq. 5-8):

$$\int_{VC} \rho \vec{g} dV - \oint_{SC} P d\vec{s} + \oint_{SC} \overline{\tau_{ij}} d\vec{s} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho \vec{V}_i dV + \oint_{SC} \rho \vec{V}_i \vec{V} d\vec{s} \quad (5-8)$$

Si es transformen totes les integrals de superfície en integrals de volum aplicant el teorema de la divergència, s'arriba a l'EDO de la conservació de la quantitat de moviment (Eq. 5-9):

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla P + \rho \vec{g} + \nabla \bar{\tau} \quad (5-9)$$

5.3.3. Equacions de Navier-Stokes.

Partint de l'equació 5.9, si es relacionen els termes de velocitat de deformació amb els esforços (tallants i normals), es pot arribar a un conjunt d'equacions anomenat Equacions de Navier-Stokes (a partir d'ara, abreujat com NS). En forma vectorial es poden escriure de la següent forma (Eq. 5.10 flux compressible, Eq. 5.11 flux incompressible):

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} + \frac{1}{3} \mu \nabla(\nabla \cdot \vec{V}) \quad (5-10)$$

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\nabla P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (5-11)$$

Aquestes equacions són les més importants per aquest projecte, ja que la seva finalitat és descriure el moviment i els esforços d'un fluid en qualsevol moment. La peculiaritat d'aquestes equacions és que, llevat de fluxos i condicions molt senzilles i concretes, és impossible trobar una solució analítica. Per a poder resoldre-les, és necessari fer servir les eines que s'aplicaran durant aquest projecte: mètodes de CFD.

6. Models matemàtics per a la resolució del model.

6.1. Introducció.

El model que es vol estudiar té una gran complexitat. És per això, que ha comportat molts problemes la selecció dels models matemàtics per arribar a una solució. Dins de tots els models matemàtics disponibles al paquet de software Ansys Fluent, en distingirem els dos tipus que hem hagut de triar per tal que el model CFD arribi a calcular valors que es puguin comparar amb el model experimental:

- **Model de viscositat.** Com es treballa a molt alta velocitat i dins d'un dipòsit molt petit, és d'esperar que el fluid pateixi el fenomen de la turbulència. És per això que la selecció del model de viscositat turbulent adequat a les condicions del model és de gran importància.
- **Model multifàsic.** Al treballar amb dues dissolucions amb propietats físiques molt diferents, és necessari definir un model multifàsic. En funció de la complexitat de cada model, s'obtenen uns resultats més o menys aproximats. Per tant, el triatge d'un model multifàsic adequat és tant o més important que el model de turbulència.

6.2. Model de viscositat.

6.2.1. El fenomen de la turbulència.

Es defineix un **flux turbulent** com aquell flux inestable, on es desenvolupen fluctuacions irregulars del fluid. Per aquesta raó existeix una enorme quantitat de moviment entre les partícules de fluid. Les propietats del fluid han de ser definides per un valor mig acompanyat d'una fluctuació respecte aquest valor. Es diu que un flux és turbulent quan el seu número de Reynolds és superior a 10.000 (per tubs circulars).

Per comprovar si el flux en aquest cas és turbulent, s'utilitzarà l'aproximació d'un tub circular. D'aquesta manera, calculem el número de Reynolds suposant que la velocitat del fluid és de 20.000 rpm i que el dipòsit (tub, en aquest cas) té un diàmetre de 87 mm. Per calcular la velocitat del fluid, es troba la velocitat tangencial del fluid al sortir del rotor en funció de la velocitat angular del mateix rotor. Agafant com a fluid la fase aquosa (ja que té una concentració molt més elevada), es troba que:

$$Re = \frac{\rho v_f D}{\mu} = \frac{r_{rotor} n \frac{2\pi}{60} D}{\nu} = \frac{6,25 \cdot 10^{-3} \cdot 20000 \cdot \frac{2\pi}{60} \cdot 87,5 \cdot 10^{-3}}{1,003 \cdot 10^{-6}} = 1,141 \cdot 10^6 \quad (6-1)$$

El valor del número adimensional de Reynolds és de $1,141 \cdot 10^6$, és a dir, molt més gran que 10000. Per tant, es pot afirmar que el problema tindrà flux turbulent.

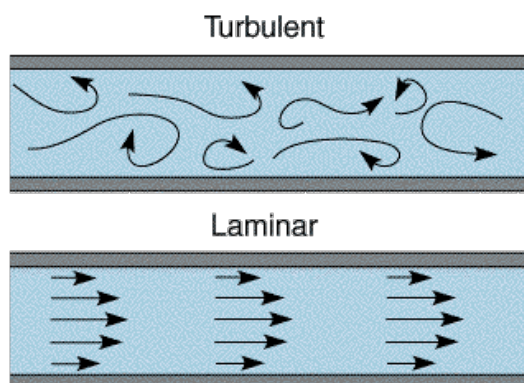


Fig 6.1. Diferència entre un flux turbulent i un flux laminar. [5]

Com es pot apreciar a la figura 6.1, al contrari que el flux laminar el qual és un flux previsible i ordenat, el flux turbulent és molt difícil de modelar pel seu desordre intern. Per a trobar expressions que descriguin la dinàmica de fluids dins d'un flux turbulent, és necessari usar la conjunció d'un valor mig de la propietat a estudiar i un factor de fluctuació. Aquest tipus de tècnica s'anomena *Equacions de Navier-Stokes a un Reynolds determinat*, en anglès *RANS (Reynolds Average Navier-Stokes)*.

Dins del software Ansys Fluent trobem diversos models que utilitzen aquesta idea, però amb diferents matisos. Dins d'aquest treball només s'estudiaran els dos models usats per la simulació: el model $k-\epsilon$ i el model $k-\omega$.

6.2.2. Model $k-\epsilon$.

És el model més utilitzat pel càlcul de turbulències. Aquest model funciona molt bé en fluxos on el Reynolds és molt superior a 10.000, és a dir, per fluxos completament turbulents.

El model es compon per dues equacions:

- Equació de l'energia cinètica turbulenta, k . Es defineix com la variació de la fluctuació de la velocitat:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + P_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (6-2)$$

- Equació de la dissipació de remolí turbulenta. Es defineix com la proporció a la qual les fluctuacions de la velocitat es dissipen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (P_k + C_{3\epsilon} P_b) - \frac{C_{2\epsilon} \rho \epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (6-3)$$

Com s'ha comentat amb anterioritat, aquest model funciona molt bé per fluxos completament turbulents. Per aquesta raó, dóna molt bons resultats en els punts interiors d'un fluid turbulent, però té problemes quan els punts són propers a les zones de contorn del domini. Per aquesta raó, pel model a estudiar en aquest projecte, s'ha necessitat la introducció d'un altre model per estudiar les zones properes a les parets del fluid.

6.2.3. Model k- ω .

Degut a les dificultats trobades utilitzant el model k- ϵ , s'ha necessitat combinar-lo amb l'altre model més famós dins dels programaris CFD: el model k- ω . És molt semblant al citat a l'apartat anterior, ja que està dins del grup dels models amb dues equacions:

- Equació de l'energia cinètica, k . La definició és idèntica a l'apartat anterior. Tot i això, l'equació que la determina difereix una mica per la introducció de la variable ω :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_k \frac{\rho k}{\omega} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P - \beta^* \rho \omega k \quad (6-4)$$

- Equació de la dissipació específica, ω . Aquesta variable defineix l'escala de la turbulència:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \omega u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_\omega \frac{\rho k}{\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \frac{\gamma \omega}{k} P - \beta \rho \omega^2 \quad (6-5)$$

On ρ, μ, γ, β i β^* són constants.

Aquest model funciona molt bé quan el flux està començant a desenvolupar turbulència, és a dir, per zones turbulentes però a prop del contorn del fluid. Tot i això, presenta problemes per turbulències grans.

Per conseqüent, el que el model d'aquest projecte necessita és una combinació d'ambdós

models: ha de captar bé el fenomen de la gran turbulència que pateix el fluid a les zones interiors del fluid degudes a l'alta velocitat de gir de l'agitador, però també ha de captar les petites turbulències generades a les zones exteriors del dipòsit i les parets del estator.

És per aquesta raó que és necessària la introducció d'un nou model que aporti els punts forts dels dos models anteriors i no afegeixi un cost computacional massa alt.

6.2.4. Model SST k- ω .

Aquest model, anomenat *shear stress transport* (SST), és una reformulació del model k- ω . La particularitat d'aquesta reformulació ve donada en que el model aplica les equacions vistes a l'apartat 6.2.3 quan els punts a calcular són propers al contorn o els Reynolds d'aquests són baixos, però quan els punts són interiors i el seu Reynolds augmenta considerablement, utilitza el model k- ϵ per a poder captar amb major precisió el fenomen de la turbulència.

Aquest model està actualment en auge. S'ha demostrat que per casos com el d'aquest projecte funciona amb molta precisió i no afegeix un cost computacional gaire alt.

6.3. Model multifàsic.

Com s'ha comentat a la introducció, aquest projecte tracta la interacció entre dues dissolucions o fases amb diferents propietats. Per captar aquesta interacció, és necessari definir un model multifàsic dins del software. En funció del model triat, s'obtenen un nivell de resultats i precisions diferents, per la qual cosa és important definir un model que sigui capaç d'aportar les propietats que podem mesurar experimentalment per fer després la comparació adient.

És important recordar que, dins del procés de simulació de models tan complexos, és impossible treballar amb un únic model matemàtic. Com s'explicarà a la part de les simulacions, per arribar a convergir a una solució s'han necessitat tres models multifàsics diferents. Són aquests els que s'explicaran en aquest apartat, tot i que el software en disposi de més.

6.3.1. Model *Mixture*.

És el model computacionalment parlant més senzill dels que veurem. És un model que treballa amb menys equacions que els altres models i que, per consegüent, acostuma a aportar uns resultats menys precisos que la resta.

En aquest projecte s'usarà per estabilitzar el model, ja que al ser més lleuger és el que dona menys problemes de convergència.

Aquest model s'usa quan la interacció entre els dos fluids és del tipus mescla o separació de fluids. Com a equacions principals, resol l'equació de la continuïtat per a la mescla, l'equació del moment per la mescla, l'equació de l'energia per la mescla i l'equació de la fracció de volum per

la fase secundària. A més a més, calcula equacions algebraiques per determinar velocitats relatives entre ambdós fluids. Les equacions en qüestió, estan descrites al capítol 5.3 d'aquest projecte. L'únic que s'ha de variar d'aquestes formulacions és que es treballa amb masses i volums calculats per la mescla, no per cada una de les fases.

Per la condició de les equacions de treballar amb les propietats de la mescla i no amb les de les fases rau la conseqüència d'ésser més simple de calcular en comparació als models que trobem a continuació.

6.3.2. Model Eulerian.

El model Eulerian és el més complex per aquest tipus de simulacions. També és el que aporta una major quantitat d'informació a l'hora de fer el *postprocess* i el que dona resultats més precisos. Per contra, té un cost computacional molt més alt que el model mixture.

La particularitat d'aquest model, i la raó principal per l'augment del cost computacional, és que resol totes les equacions característiques del fluid (vistes a l'apartat 5.3 d'aquest projecte) per cada fase i per la mescla. D'aquesta manera s'augmenta molt la càrrega matemàtica del model i, per conseqüent, el temps de càlcul.

D'altra banda, aconseguim resultats tant de la mescla en el seu conjunt com per ambdues fases per separat. Aquesta característica fa que aquest model sigui molt més interessant des del punt de vista de l'anàlisi de resultats.

Dins del model Eulerian, hem de distingir dos tipus en funció de l'aproximació que es segueix per arribar a resultats: formulació **implícita** o **explícita**.

6.3.2.1. Formulació implícita.

Per arribar als resultats, aquesta formulació fa servir les equacions que s'han explicat a l'apartat 5 a través d'un esquema d'aproximació implícita. La idea principal és que arriba al resultat a través de fer mitjanes estadístiques de les variables del fluid. D'aquesta manera, es pot agilitzar el càlcul, però es perd precisió als càlculs.

Tot i això, la característica més important pel que fa a la relació d'aquest model amb el projecte, és que per la natura intrínseca del càlcul implícit només permet simulacions en estat estacionari. Com veurem en capítols posteriors, això fa que només es pugui utilitzar aquest model en fases d'estabilització de la simulació i no en l'estudi dels fenòmens que pateix el fluid al model experimental.

6.3.2.2. Formulació explícita.

De manera anàloga a l'apartat anterior, aquest mètode resol les equacions utilitzant l'esquema d'aproximació explícita. D'aquesta manera, té una forta dependència amb el *time step* utilitzat,

però calcula els resultats de forma directa a partir dels resultats del *time step* anterior. Al no calcular els resultats a través de mitjanes, els resultats tenen una precisió major que amb la formulació implícita. Per contra, s'augmenta el cost computacional al requerir més memòria al sistema.

En relació a això, la formulació explícita només es pot utilitzar en simulacions en estat transitori. Per aquestes dues raons, s'usarà aquesta formulació del model multifàsic Eulerian per a la simulació final de l'experiment.

7. Simulació del model experimental.

7.1. Modelització 3D.

Per a simular correctament el model, el primer pas és dibuixar la geometria del model mitjançant eines de dibuix 3D. En aquest projecte s'ha utilitzat el software SolidWorks, de l'empresa Dassault Systemes, per poder dissenyar la geometria amb la precisió necessària.

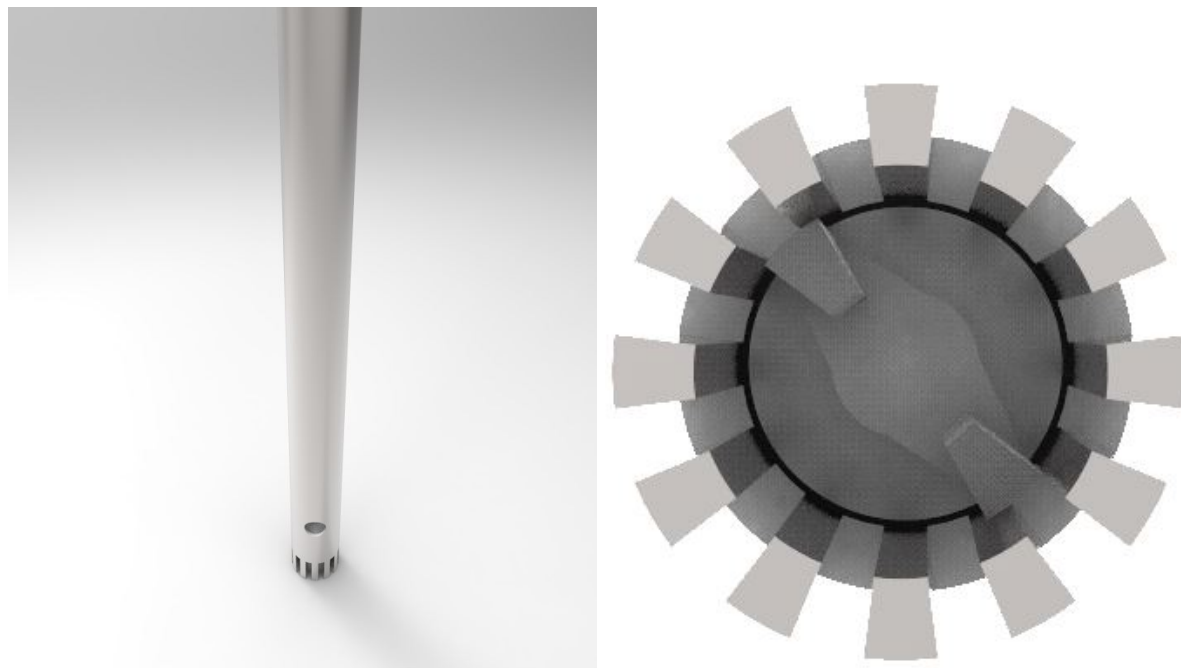


Fig 7.1. Model 3D de l'agitador Turrax.

El disseny ha d'incloure totes les cisalles que conté el sistema (Turrax), tant a l'estator com al rotor. Per a fer-ho, es van prendre mesures directes del braç de l'agitador a través d'un peu de rei i es van comprovar amb les dades geomètriques que aporta el fabricant a la fitxa tècnica.

Un cop preses totes les mesures, es va procedir a dibuixar només el braç, sense les cisalles. Seguidament, gràcies a l'eina de tall del software, es van dibuixar totes les cisalles del estator. Per acabar, es va dibuixar el rotor a l'interior de l'estator.

Com es pot apreciar a les fotografies del model, el resultat final ha sigut del tot satisfactori. La geometria del model real i del model 3D són gairebé idèntiques, condició absolutament necessària per tal de que els resultats de la simulació siguin òptims.

7.2. Discretització i mallat.

El següent pas per a poder simular un sistema, és la discretització i el mallat de la geometria. Per a fer-ho, es va utilitzar el programa *Meshing*, inclòs dins del paquet Ansys 16.2. Per començar, es va importar la geometria creada a l'apartat anterior, i es va procedir a realitzar el que s'anomena "el negatiu" de la geometria. Com el que s'ha de discretitzar és el fluid i no la geometria, s'ha canviat el que la geometria CAD estableix com a "buit" en superfície mallable, i viceversa amb la superfície establerta com a "cos" o "superfície" del material. D'aquesta manera s'aconsegueix que el programa reconegui qualsevol punt del sistema on pugui haver fluid per tal de establir una malla.

Un cop tenim la superfície del fluid en condicions òptimes, es procedeix a discretitzar el model a través d'una malla tridimensional. Per la natura del problema a analitzar, aquest ha sigut un pas crucial per arribar a un model estable i poder captar tots els fenòmens que hi tenen lloc. Com el resultat de l'experiment són esferes de tamany micromètric, s'ha d'assegurar que la malla pugui calcular les propietats del fluid en aquestes condicions de tamany. Per a fer-ho, ha sigut necessari realitzar un mallat molt fi, és a dir, amb elements de tamany molt petit.

A més del tamany, s'havia de triar correctament el tipus d'element. Pel cas tridimensional, existeixen diversos tipus de malla en funció de la geometria de les cel·les. Per a la realització d'aquest projecte, s'ha triat com a solució òptima la malla tetraèdrica.

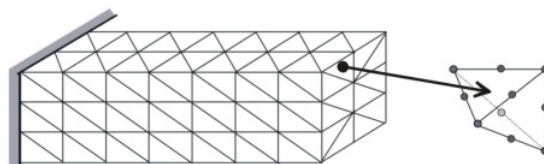


Fig 7.2. Exemple de malla tetraèdrica. [15]

Tot i ser el tipus d'element que atorga una pitjor qualitat geomètrica a la discretització, era l'única capaç de suportar correctament les exigències del model. És el tipus de malla més versàtil i, per tant, l'única que servia per tal d'aconseguir un mallat tan fi i amb tanta precisió.

7.2.1. Mallat del rotor.

Per realitzar una malla prou fina, com els recursos del nostre equip informàtics no eren prou potents, es va haver de recórrer a la solució de mallar per separat el rotor i l'estator.

Es va començar realitzant el mallat del rotor. De partida teníem la geometria aconseguida mitjançant la modelització en SolidWorks del model, i la posterior actuació de buidatge.

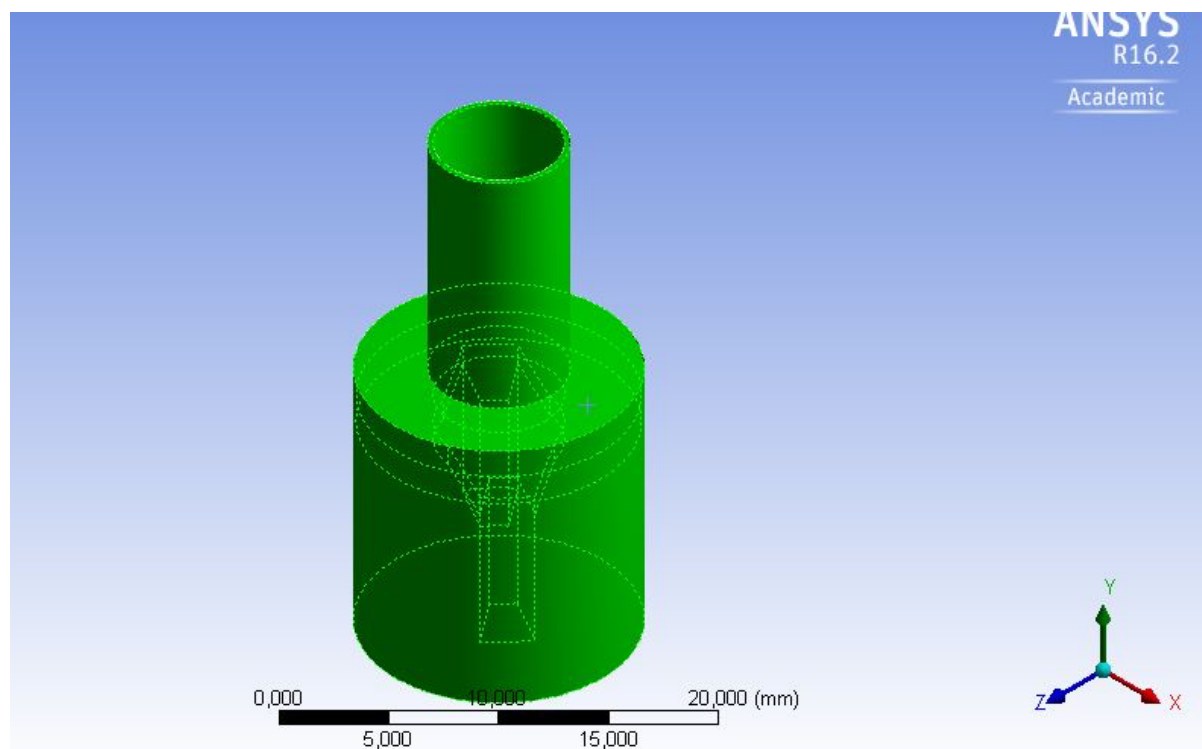


Fig 7.3. Geometria del rotor abans de mallar.

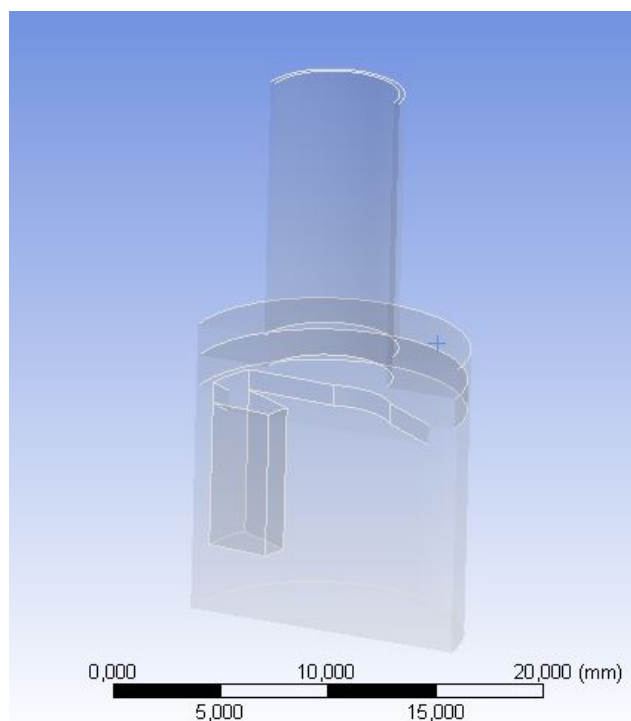


Fig 7.4. Geometria interior del rotor, vista en detall de les cissalles.

A partir d'aquesta geometria, es va començar el mallat definint el tipus de malla tetraèdrica a través de l'anomenat *Patch Conforming Method*. Aquest mètode va mallar tota la geometria de forma automàtica utilitzant malla tridimensional tetraèdrica. Com el nostre objectiu era tenir una malla molt fina als punts de màxim interès, i no tant fina als punts on no hi havia contacte amb el fluid, vam haver de recórrer als mètodes d'ajust de tamany manuals.

El primer a ser usat va ésser el *Body Sizing*. Com el mètode anterior tenia un tamany de malla massa gran, es va definir aquest tipus d'ajust per tota la geometria. D'aquesta manera, es va rebaixar el tamany d'element fins als 0,4 mm.

Es va utilitzar un segon mètode, anomenat *Face Sizing*. Com el seu nom indica, aquest mètode serveix per controlar el tamany dels elements a una o més superfícies de la geometria en concret. Es va aplicar aquest mètode tant a les zones interiors (cisalles) com al petit conducte que uneix la zona superior del rotor amb la zona de les cisalles. Es va definir un tamany d'element de 0,1 mm.

Per acabar, es va definir un *Edge Sizing*. Aquest mètode es fa servir per definir el tamany d'element a través dels límits d'una geometria. En aquest cas, es va utilitzar la circumferència de la zona superior del rotor per definir un tamany d'element de 0,1 mm. Amb aquesta eina s'ha volgut garantir que hi hagi prou elements dins d'aquesta zona tant petita, però on hi ha contacte amb el fluid.

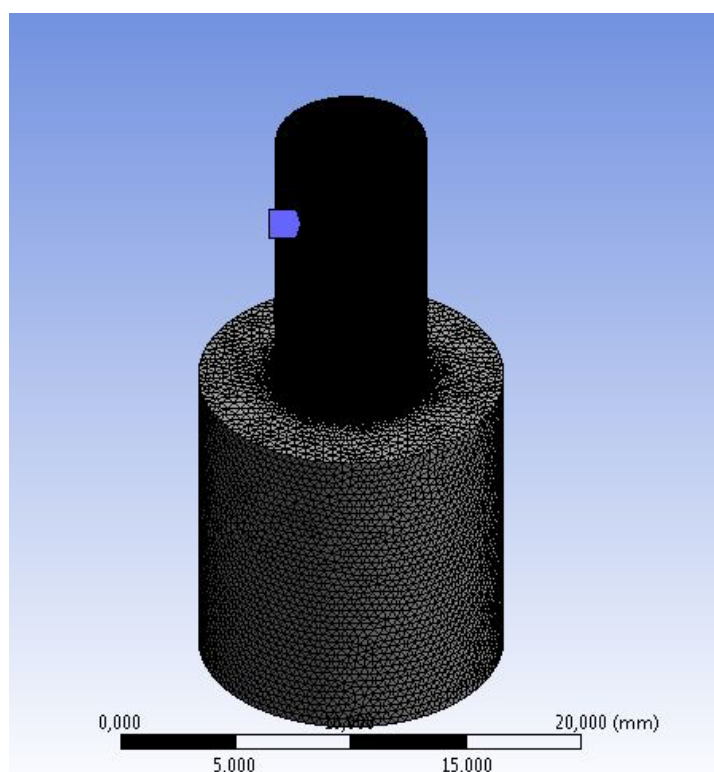


Fig 7.5. Vista tridimensional del mallat.

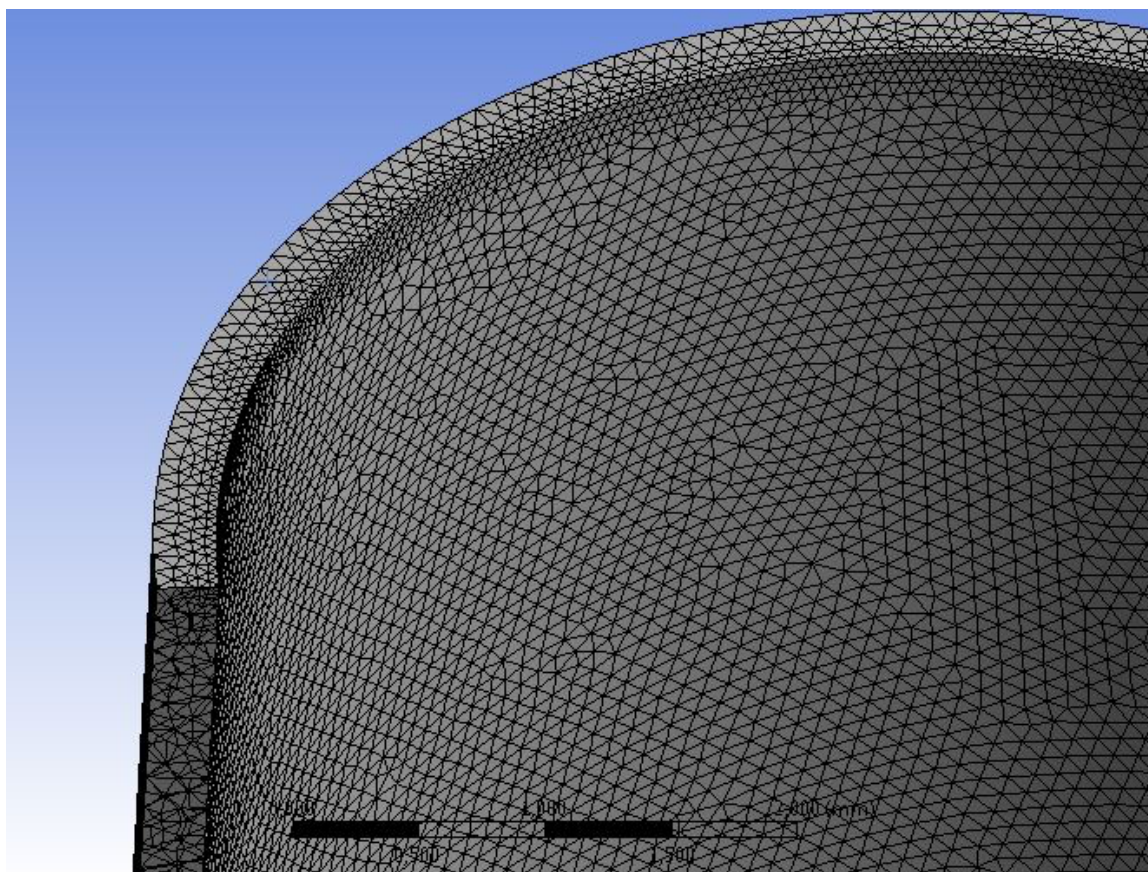


Fig 7.6. Vista en detall del *Edge Sizing*.

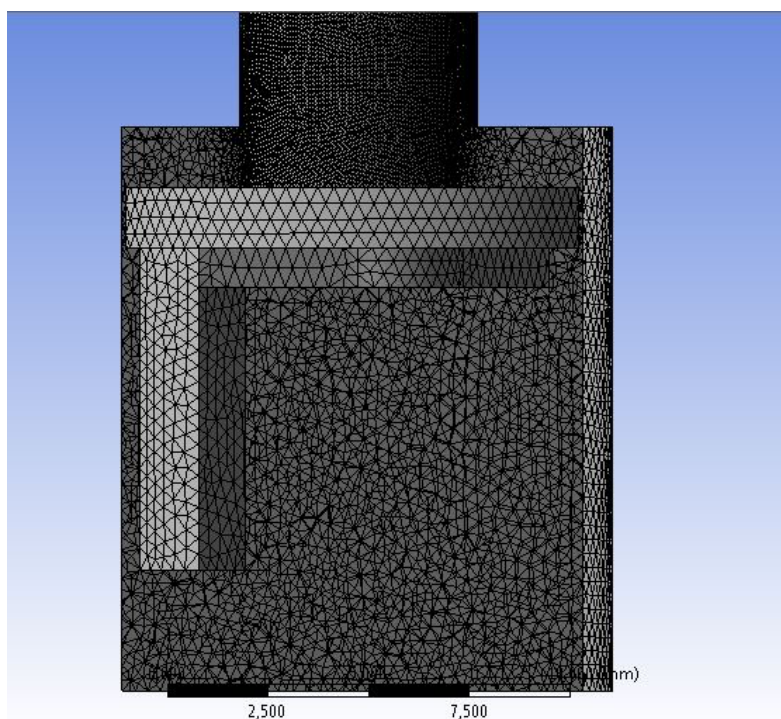


Fig 7.7. Vista en detall de l'interior de la malla del Rotor.

Al final d'aquesta metodologia, queda un mallat amb 824.669 elements, amb una mitjana de Qualitat Ortogonal de 0,85714 (com més proper a 1 millor).

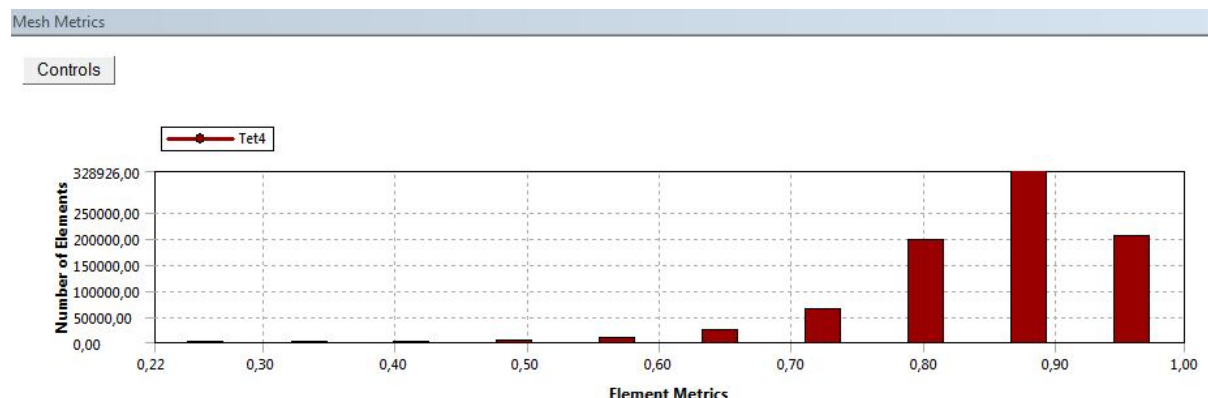


Fig 7.8. Mesh Metrics de la malla del Rotor.

7.2.2. Mallat del estator.

De la mateixa manera que per mallar el rotor es va combinar una metodologia automàtica amb un refinament manual, es va procedir d'igual manera per a mallar l'estator. Partint de la següent geometria:

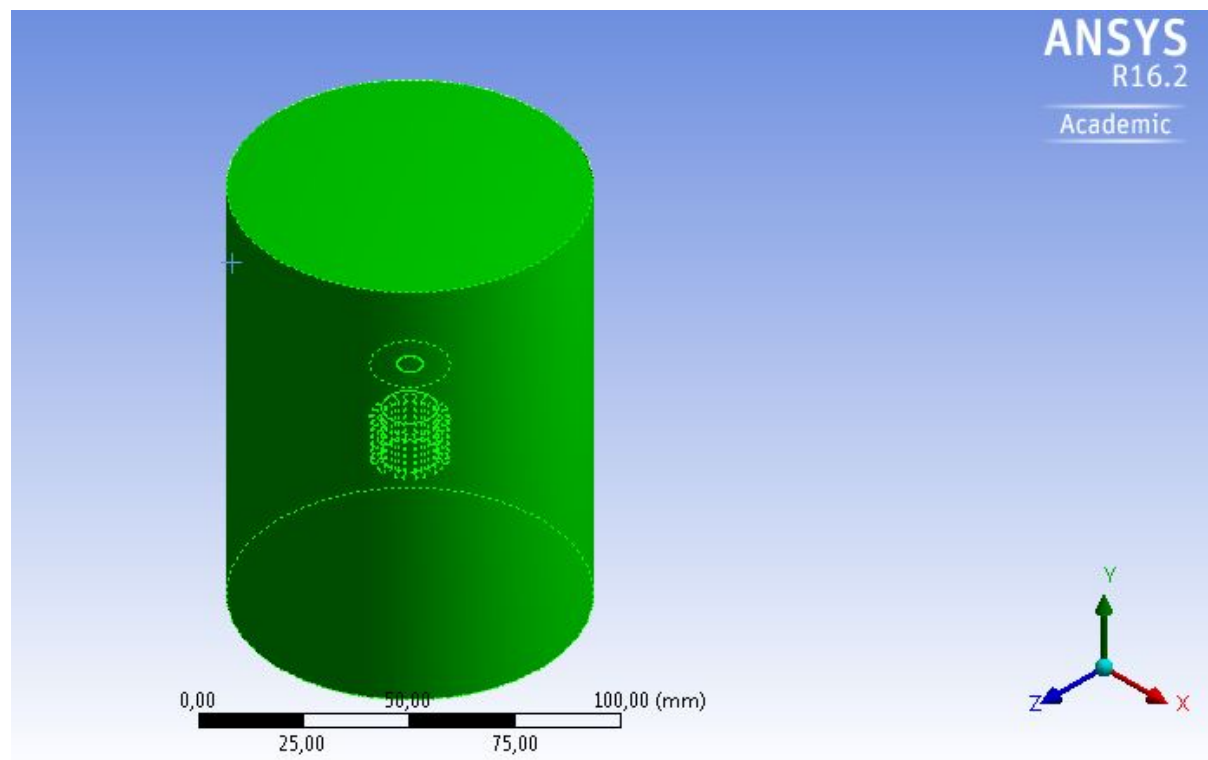


Fig 7.9. Geometria inicial de l'estator.

Es va partir d'un *Patch Conforming Method* per fer un mallat general de la peça. Un cop realitzat, es va procedir a ajustar el tamany de les diferents zones. Es va aplicar un *Body Sizing* per tota la peça, definint un tamany d'element de 1 mm. Posteriorment, es va aplicar un *Face Sizing* a la zona de contacte superior del rotor, amb un tamany d'element de 0,2 mm.

El següent pas va ser definir un tamany d'element per a la zona de contacte entre el rotor i l'estator d'entre cisalles. Aquest era un pas clau per al bon funcionament del model, ja que un error en aquesta zona i l'error en els càlculs hauria sigut catastròfic. Per facilitar aquesta operació, es va definir una cara al punt mig de l'espai que queda entre les cisalles del rotor i les cisalles de l'estator. En aquesta superfície, es va aplicar un *Face Sizing* per aconseguir un tamany d'element de 0,2 mm. D'aquesta manera, la diferència entre els tamanyes del rotor i de l'estator és assumible pel programa i no generarà problemes a l'hora d'interpretar la zona interfacial.

Per últim, es va definir un altre *Face Sizing* a la zona de contacte superior, és a dir, al petit interstici que queda entre el braç del rotor i la paret de l'estator. Per aquesta zona interfacial es va definir un tamany de malla de 0,2 mm, per la mateixa raó que a l'operació anterior.

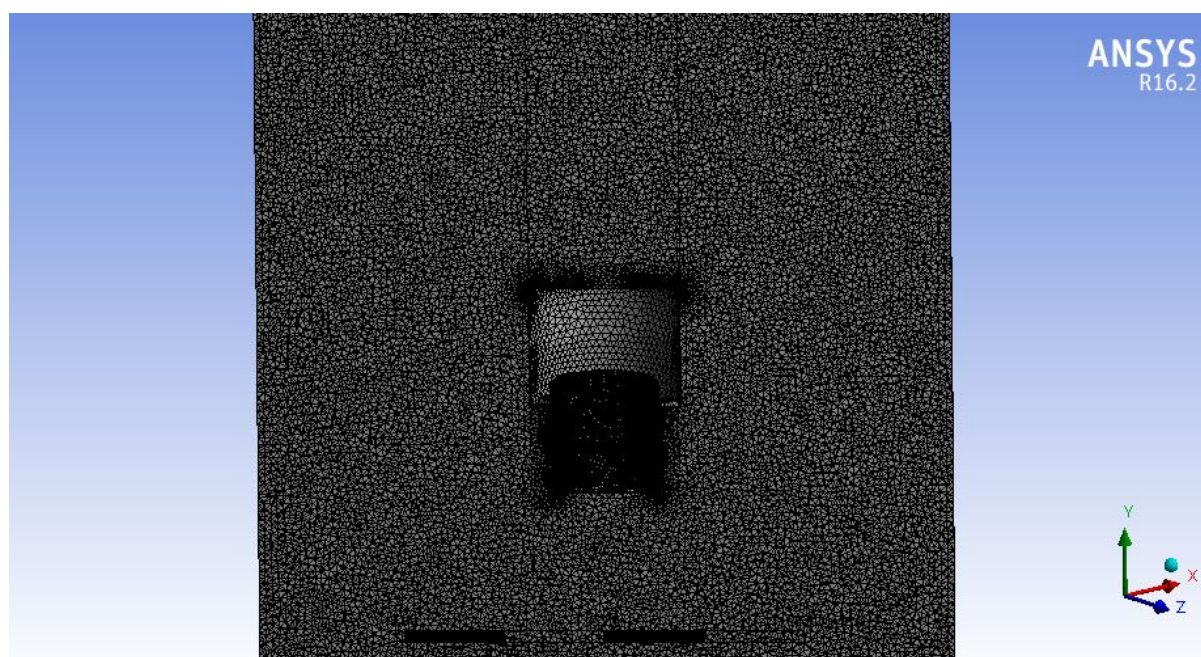


Fig 7.10. Vista interior del mallat de l'estator.

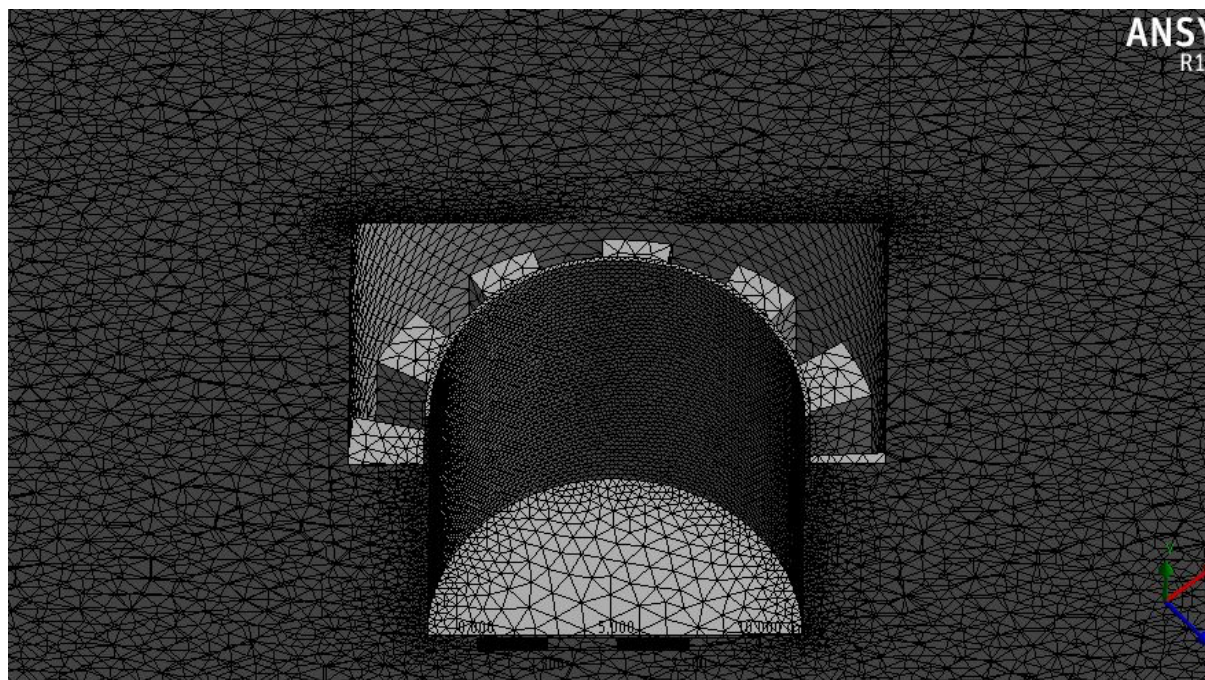


Fig 7.11. Vista en detall de la superfície de contacte entre cisalles del rotor i estator.

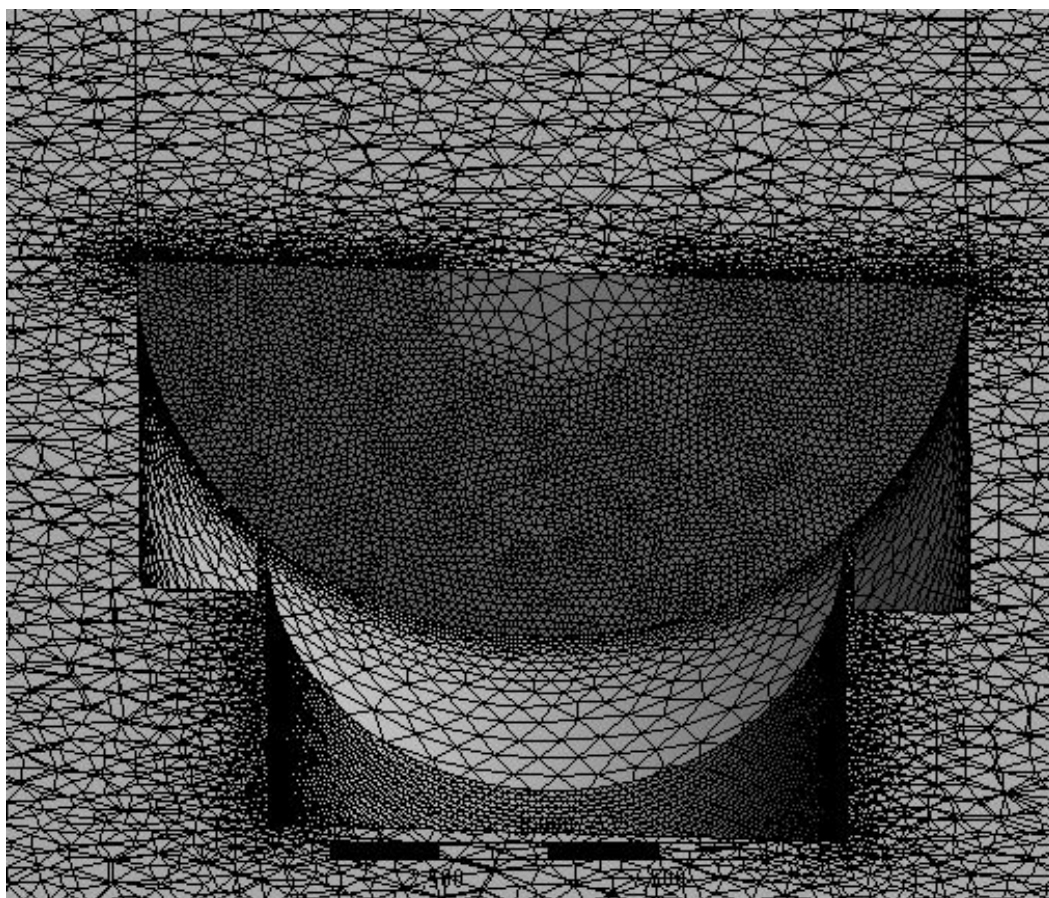


Fig 7.12. Vista en detall de la zona de contacte superior.

A l'acabar aquesta metodologia, ens trobem amb mallat de 6.335.687 elements, amb una Qualitat Ortogonal mitjana del 0,86979 (com més proper a 1 millor).

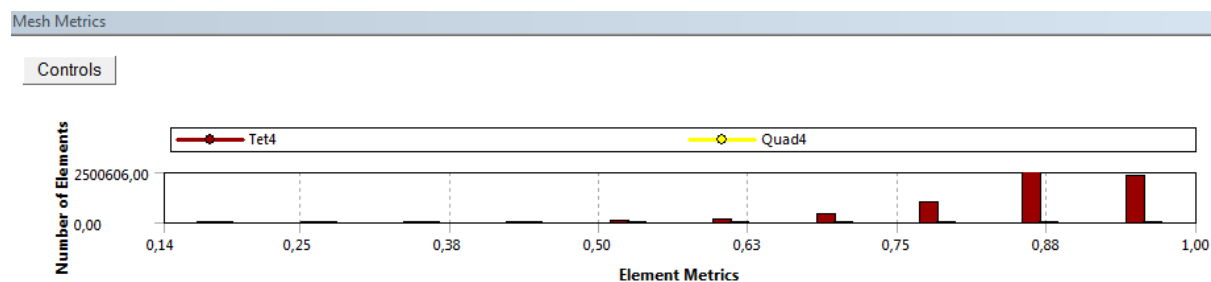


Fig 7.13. Mesh Metrics del mallat de l'estator.

7.3. Preprocessor.

S'anomena *preprocessor* a l'acció de definir tots els paràmetres necessaris al software per tal de que realitzi la simulació amb les condicions adients. Durant aquest treball, el *preprocessor* ha tingut les següents fases:

7.3.1. Materials.

Abans de començar la simulació, s'han de definir els diferents paràmetres que hi intervenen. Els primers a ser definits han sigut els materials que seran simulats. Com s'ha explicat en apartats anteriors, l'experiment consta de dues fases: una fase dispersa i una fase contínua. És imprescindible definir les constants físiques d'ambdues fases amb correcció, sinó els resultats no seran satisfactoris.

Com les dissolucions usades en els experiments no tenen valors de propietats físiques tabulats, es van haver de determinar de forma experimental. Com el software necessita els valors de densitats i viscositats de totes les fases, es van realitzar dos experiments per cada dissolució per tal de determinar aquests valors.



Fig 7.14. A l'esquerra, picnòmetre. A la dreta, reòmetre.

Utilitzant el picnòmetre (fig.7.14) es va determinar la densitat d'ambdues fases. Aquesta tècnica utilitza la comparació del fluid a analitzar amb la d'un fluid amb propietats conegudes, com per exemple l'aigua. Sabent la densitat de l'aigua i comparant el pes del recipient amb aigua només i amb aigua i el fluid de densitat desconeguda, s'aconsegueix determinar la densitat.

Per trobar les viscositats, s'ha usat un aparell anomenat reòmetre (fig.7.14). Aquest aparell calcula l'esforç tallant que cal fer per tal de fer girar el fluid. A través de la Llei de Newton de la viscositat, explicada a l'apartat 5, s'aconsegueix determinar la viscositat del fluid.

Així doncs, es van establir els següents valors per les fases:

<i>Fase</i>	<i>Densitat(g/mL)</i>	<i>Viscositat(mPa·s)</i>
<i>Contínua</i>	0,998465	1,002
<i>Dispersa</i>	1,337965	312

Taula 7.1. Propietats físiques de les fases.

7.3.2. Condicions de contorn i paràmetres de malla.

Per a obtenir l'èxit a l'hora de realitzar una simulació fluidodinàmica, és primordial establir correctament les condicions de contorn i els paràmetres del mallat.

Primerament s'ha d'establir correctament les interfícies que existeixen entre ambdues malles (rotor i estator). En el nostre cas, s'han de definir dos interfícies: la que existeix entre la malla exterior del rotor i la malla interior del estator, i la malla de l'interstici que existeix entre la part superior del rotor i el fluid que correspon al estator.

Per realitzar aquesta operació, s'utilitza l'eina *mesh interfaces* integrada al programa Fluent. D'aquesta manera es pot definir si el contacte entre malles és entre dos fluids, entre paret i fluid i entre dues parets.

Si aquest pas no es realitza correctament, el programa no serà capaç d'interpretar dos resultats diferents pel mateix punt del fluid, i la solució divergirà.

Aquest anterior pas és imprescindible per fer servir el següent mètode per definir els paràmetres de malla: el mètode del **sliding mesh** o malles lliscants.

Gràcies a aquest mètode, es pot definir dins del mateix model una malla en moviment en contacte amb una malla estàtica. En el nostre cas, tenim el mallat del rotor que es troba girant a una certa velocitat angular, i la malla del estator que està en contacte amb la malla del rotor però es troba estàtica en qualsevol instant de temps.

Per aconseguir que aquesta tècnica funcioni amb correcció, és del tot imprescindible que la interfície entre els mallats estigui definida com a tal i que la diferència entre tamany de malles sigui, com s'ha explicat abans, menor a un factor de 10.

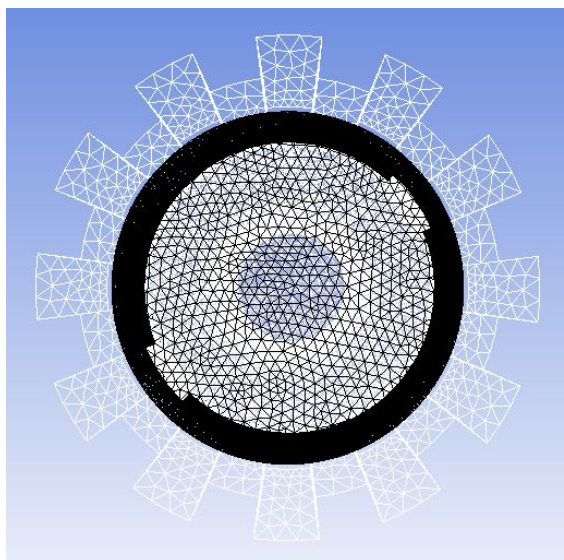


Fig 7.15. Vista del Sliding Mesh del model.

Per activar aquesta opció, ha sigut necessari definir una velocitat de rotació a la malla pertanyent al rotor, i definir que la malla del estator quedi amb velocitat 0.

Un cop finalitzar aquest pas, s'ha procedit a especificar-li al software totes les condicions de contorn. S'ha definit com a *wall* totes les zones pertanyents als límits de la geometria, *interior* tots els punts interiors del fluid i com a *moving mesh* les zones del rotor en moviment.

Així doncs, després de realitzar tots aquests passos, el model està preparat per a la simulació.

7.3.3. Models matemàtics.

Per aconseguir els resultats esperats, és de vital importància triar els models matemàtics que millor s'adeqüen al tipus d'experiment que es vol simular. Aquest apartat ha sigut el punt més

crític de tot el projecte, ja que és on s'han centrat més esforços pel que fa a la comprensió dels models a utilitzar.

Com s'explica a l'apartat teòric 6, s'han de triar diferents models en funció del fenomen que es vulgui estudiar.

7.3.3.1. Model multifàsic.

Pel que fa al model multifàsic, s'ha triat com a millor el model *Eulerian* en formulació explícita. És el que donarà més informació sobre les microgotetes que es formen dins de la fase contínua. És l'únic model que pot donar com a informació de sortida una distribució de tamanys de gota, que són els paràmetres que s'utilitzaran per verificar la simulació enfront el model experimental.

Tot i això, aquest model al ser tant complex, portava a divergència si s'aplicava directament. Per poder-lo aplicar, s'ha hagut de passar per fases d'estabilització del model a través d'utilitzar els altres dos models que s'expliquen a l'apartat teòric mencionat anteriorment.

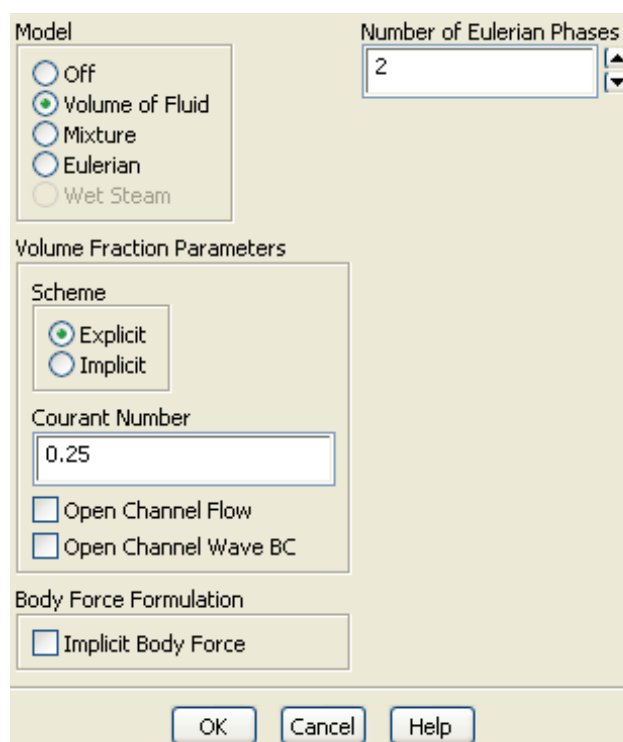


Fig 7.16. Vista en detall del panell de tria del model multifàsic a Fluent 16.2.

7.3.3.2. Model de turbulència.

Trobar un model de turbulència estable i que aportés bons resultats ha sigut, sens dubte, el punt més crític del projecte juntament amb trobar l'estabilització del sistema multifàsic. A més d'intentar comprendre de forma analítica quin era el model que s'adeqüés millor al tipus d'experiment, ha sigut necessari fer moltes proves per estudiar la validesa dels resultats de la simulació.

Amb un model una mica més senzill, per fer més lleuger el càlcul, es van fer proves amb tots els tipus de models de turbulència $k-\varepsilon$ i $k-\omega$.

Els models $k-\varepsilon$ donaven molts problemes de divergència. Una raó per aquest problema és que, com s'explica a l'apartat teòric, aquests models funcionen molt bé per fluxos molt turbulents, però no donen bons resultats per fluxos poc turbulents. En el cas simulat es troben els dos tipus de fluxos: un flux molt turbulent quan pateix l'efecte del rotor (velocitats molt altes i Re alts) però també un flux poc turbulent quan el fluid s'allunya del rotor (velocitats més petites i Re baixos). Com a conseqüència d'això, el model matemàtic no trobava l'estabilitat i acabava divergint amb facilitat.

Per contra, els models $k-\omega$ eren una mica més estables, però acabaven sense trobar la convergència. Les raons d'aquesta problemàtica rauen en les mateixes causes que s'acaben de citar pels models $k-\varepsilon$.

Per aquesta raó, es va decidir provar el model SST $k-\omega$. Com s'explica a l'apartat teòric, és un model que aprofita el bo i millor tant del $k-\omega$ com del $k-\varepsilon$. Un cop provat, es va veure que el model trobava l'estabilitat amb certa facilitat, i acabava trobant la convergència de la solució. Per tant, es va decidir utilitzar aquest model de turbulència per la simulació.

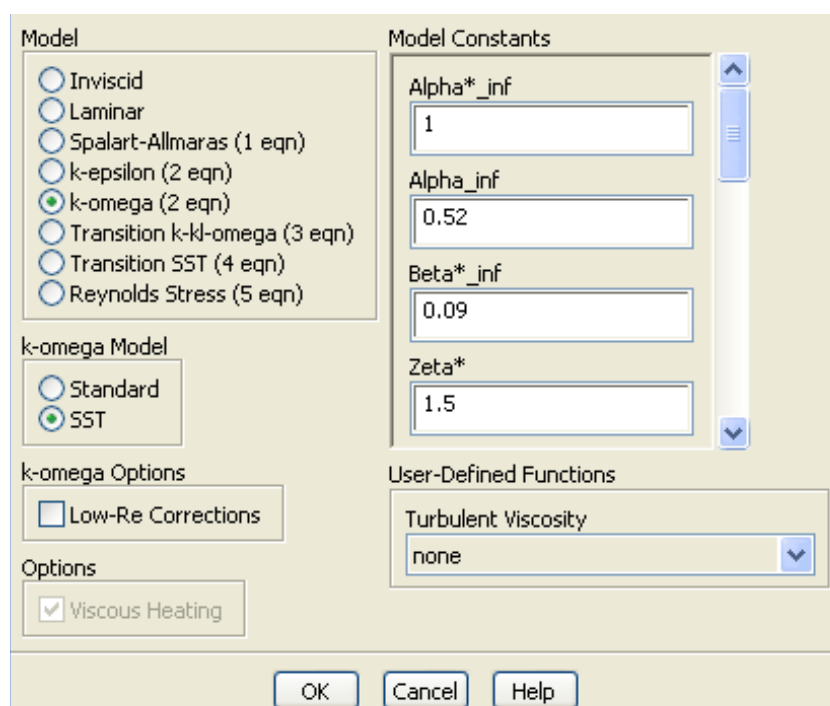


Fig 7.17. Vista en detall del panell de tria del model de turbulència a Fluent 16.2.

7.3.4. Estat estacionari / estat transitori.

L'últim paràmetre a triar abans de començar la simulació ha sigut l'elecció de l'estat de la simulació, entre estat estacionari o estat transitori.

Tot i que la natura de l'experiment és clarament transitòria, la tria no ha sigut tan fàcil com sembla. Pel que fa al software, sempre és molt més complex simular en estat transitori, ja que per definició tendeix molt més a la inestabilitat que una simulació estacionària.

Per poder realitzar les simulacions de forma estable, es va haver de començar a simular en estat estacionari. Un cop es va aconseguir una base de resultats sòlida i estable, es va poder canviar a l'estat transitori, estat que clarament s'adequa molt més a les condicions de l'experiment.

7.4. Simulació.

Aquest capítol es dividirà en dos apartats: la simulació per provar el model, realitzada a l'equip del Departament d'Enginyeria Química, i la simulació final, portada a terme a un equip del Departament de Mecànica de Fluids.

7.4.1. Simulació-Test del model.

Abans d'enviar el model a l'equip de Mecànica de Fluids, era del tot recomanable testear-lo. Aquest equip només es disposava per a un temps limitat i només per simular el procés en condicions estables. Per tant, es va haver de realitzar una simulació a mode de test a l'equip del Departament d'Enginyeria Química de l'escola.

La primera simulació es va realitzar utilitzant el model multifàsic *Mixture* amb el model de turbulència *SST k- ω* i en estat estacionari. Es van realitzar 1000 iteracions, i el model es va estabilitzar. Un cop arribat a aquesta fase estable, es va provar el mateix model però en estat transitori. Es van realitzar 400 iteracions, on el model es va estabilitzar ràpidament i va convergir.

Un cop testejada l'estabilitat del sistema, es va procedir a provar el model multifàsic *Eulerian*. Primer es va provar en formulació implícita i en estat transitori. Es van realitzar 100 iteracions, i el sistema va arribar a una certa estabilitat. Com el temps de iteració es va disparar, no es van poder realitzar més iteracions i, tot i que el sistema no estava estable del tot, analitzant la tendència es va creure que el test havia sigut satisfactori.

Seguidament es va provar el model més complex de tots: el model *Eulerian* en formulació explícita i estat transitori. Es van fer 70 iteracions més, ja que usant aquest model el temps d'iteració era encara més alt. Analitzant un altre cop la tendència dels residuals, es va establir que el sistema arribaria a convergir si es disposés de més potència de càlcul.

A continuació es mostra una taula-resum del test de la simulació del model CFD:

<i>Model Multifàsic</i>	<i>Model turbulència</i>	<i>Estat de la simulació</i>	<i>Número d'iteracions</i>
<i>Mixture</i>	<i>SST $k-\omega$</i>	Estacionari	1000
<i>Mixture</i>	<i>SST $k-\omega$</i>	Transitori	400
<i>Eulerian (Implícit)</i>	<i>SST $k-\omega$</i>	Transitori	100
<i>Eulerian (Explícit)</i>	<i>SST $k-\omega$</i>	Transitori	70

Taula 7.2. Resum de les fases del test.

7.4.2. Simulació a l'equip del Departament de Mecànica de Fluids.

Un cop trobats els paràmetres necessaris per garantir l'estabilitat i convergència de la simulació, es va enviar a l'equip del Departament de Mecànica de Fluids per realitzar les simulacions finals.

Abans de començar les simulacions, es van haver de definir diferents indicadors per poder facilitar la lectura de dades durant la simulació i després al *postprocessor*. Es van definir 12 punts a la geometria per poder analitzar la variació de concentració de la fase dispersa durant la simulació. Els punts es van distribuir de manera uniforme, a diferents alçades i distàncies respecte el centre per a poder ser analitzades.

D'altra banda, també es van definir tres animacions per analitzar el comportament del model durant la simulació i poder així comparar amb els vídeos que es van realitzar del model experimental.

Per a fer-ho, s'usà l'eina de *Animations* de Fluent. Es van definir tres seqüències:

- Tall transversal de la secció. A través de la creació d'un pla situat al punt mig de la peça i paral·lel al pla XY, es va aconseguir una vista transversal de la peça. D'aquesta manera es va poder analitzar el comportament del flux en qualsevol zona del dipòsit. Com a variable mostrada, es va triar la concentració de la fase dispersa.

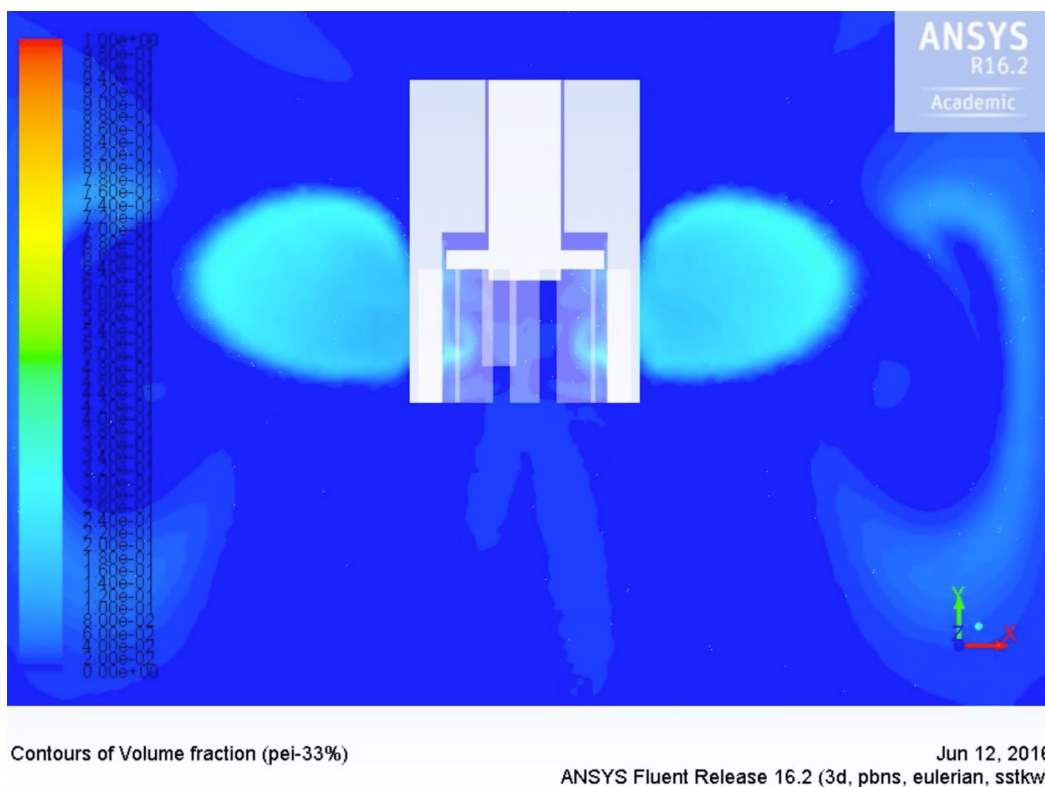


Fig 7.18. Detall de la vista transversal.

- Tall en direcció radial. En aquesta animació es va usar un pla paral·lel al pla ZX i situat a l'altura del rotor. D'aquesta forma, s'aconsegueix una vista desde la part superior de la peça del moviment del fluid dins i fora del rotor. La variable, com a la seqüència anterior, va ser la concentració de la fase dispersa.

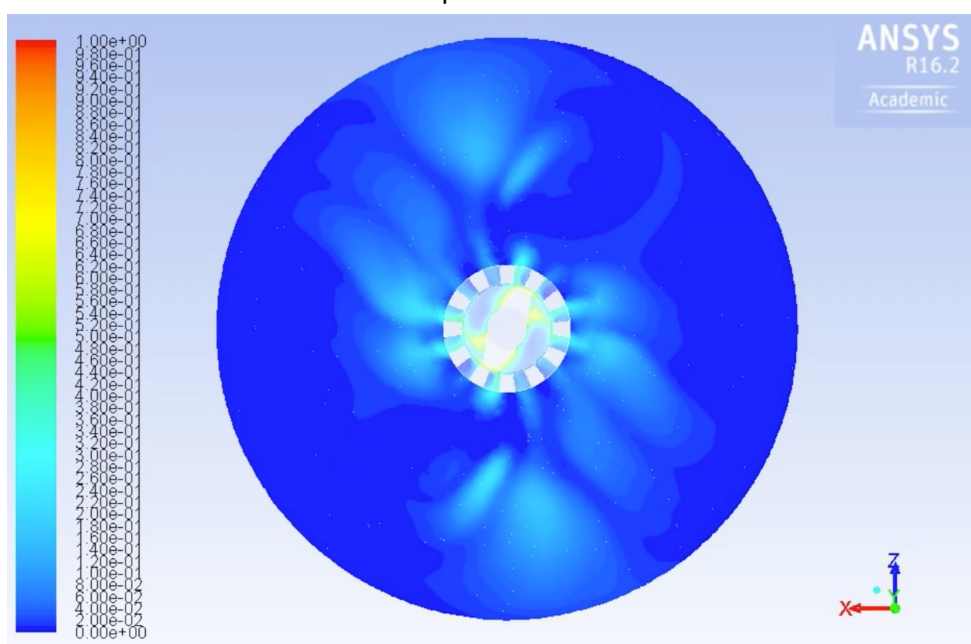


Fig 7.19. Vista tall en direcció radial.

- Vista en 3D de les cisalles del rotor. Aquesta seqüència es va crear amb l'objectiu d'aconseguir una representació tridimensional del moviment del rotor. Com a variable del fluid, en aquesta seqüència es va triar la velocitat del fluid.

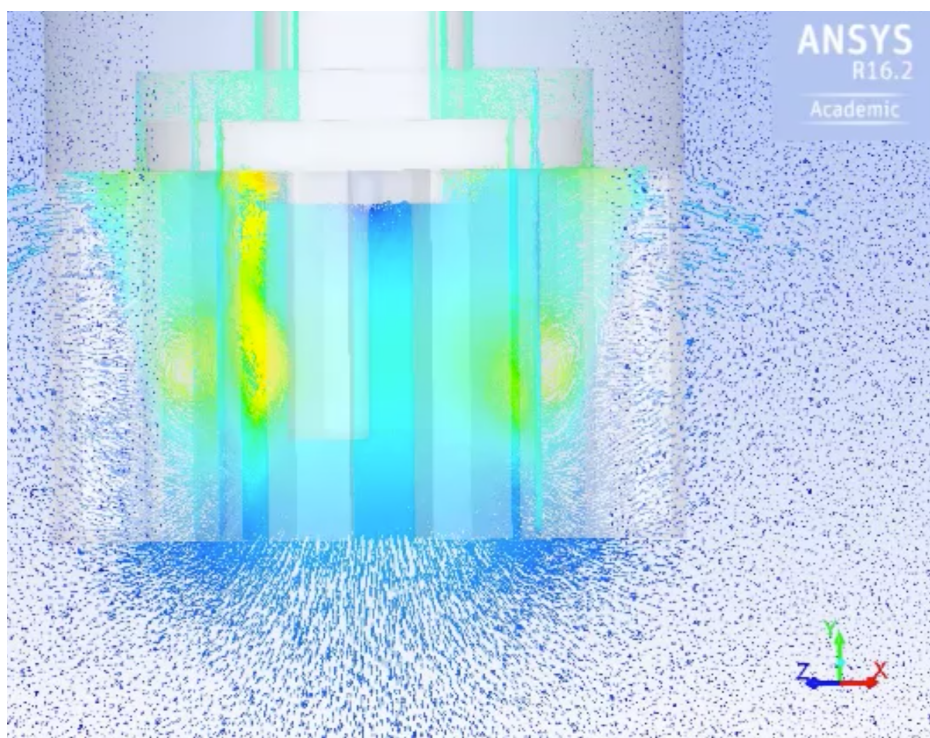


Fig 7.20. Vista en 3D de les cisalles del rotor.

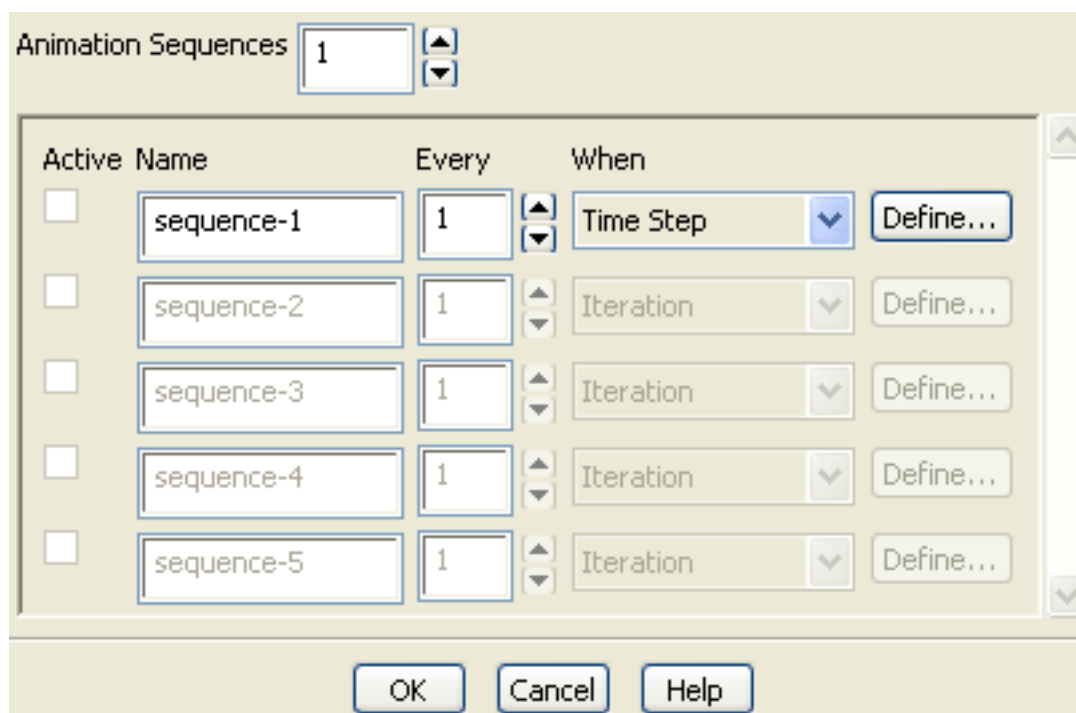


Fig 7.21. Panell de selecció i edició d'animacions a Fluent 16.2.

Un cop es van haver definit tant els monitors de concentració com les animacions, es va procedir a la simulació. Es va establir usant directament les últimes condicions del test, és a dir, les següents:

<i>Model Multifàsic</i>	<i>Model turbulència</i>	<i>Estat de la simulació</i>	<i>Número d'iteracions</i>
<i>Eulerian (Explícit)</i>	<i>SST $k-\omega$</i>	<i>Transitori</i>	<i>4000</i>

Taula 7.3. Models usats per a la simulació final.

Aprofitant la major potència de l'equip, es van poder realitzar suficients iteracions per a obtenir suficients dades per tal de poder comparar-les després i validar el model.

8. *Postprocessor.*

En aquest capítol es parlarà sobre com s'ha treballat l'anomenat *Postprocessor*. Com el seu propi nom indica, aquesta part de la simulació tracta sobre la forma de poder visualitzar i analitzar els resultats obtinguts per la pròpia simulació.

A priori, aquest apartat pot semblar menys important que els altres. Però en una simulació CFD, és del tot bàsic treballar de forma idònia el Postprocessor. De no ésser així, es pot arribar a analitzar malament els milions de dades de sortida que guarda el software en una simulació d'aquest tipus.

En el nostre cas, el postprocessor s'ha centrat en la creació de les animacions per poder comparar-les després amb els vídeos del model experimental.

Les animacions, com s'ha vist al capítol anterior, han sigut definides abans de començar la simulació. S'han definit de manera que Fluent 16.2 guarda una imatge del respectiu pla definit per cada iteració. D'aquesta manera, a l'acabar la simulació, el que es troba l'usuari és amb un seguit de fotogrames, un per cada iteració.

Un cop es tenen tots aquests fotogrames, la intenció de l'equip de treball ha sigut la de muntar vídeos. Per a fer-ho, s'ha utilitzat el software de Windows anomenat MovieMaker. En aquest programa es poden adjuntar les imatges, i ajustant el temps entre canvi d'imatges al temps d'iteració, s'aconsegueix la creació d'un vídeo que correspon perfectament a un vídeo de la simulació.

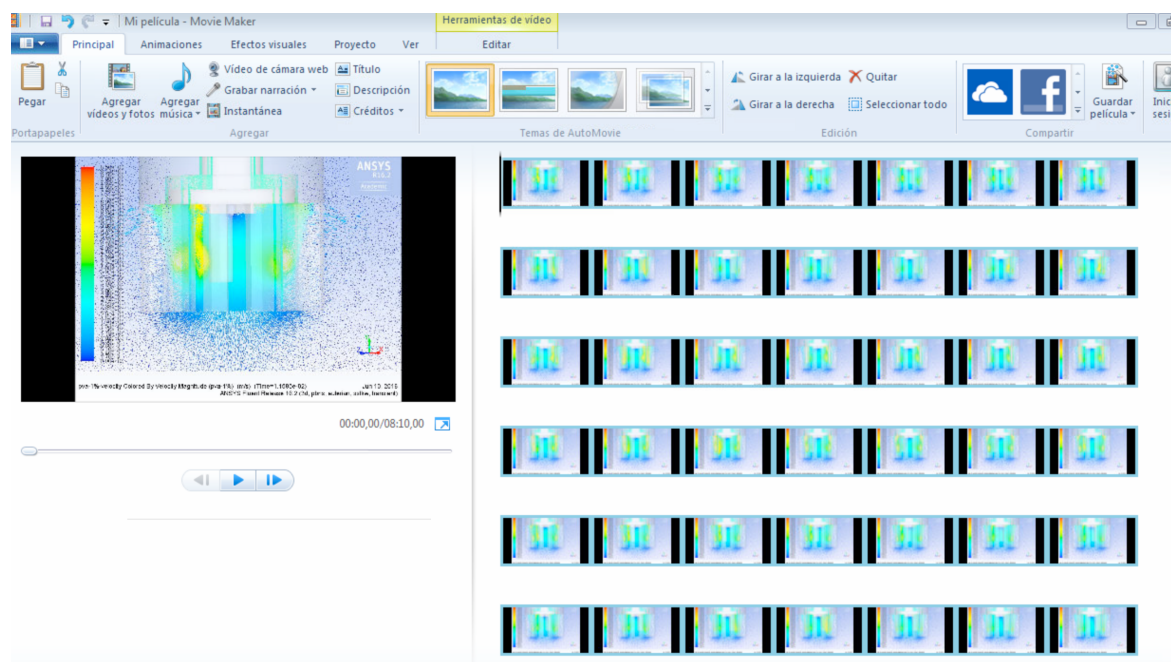
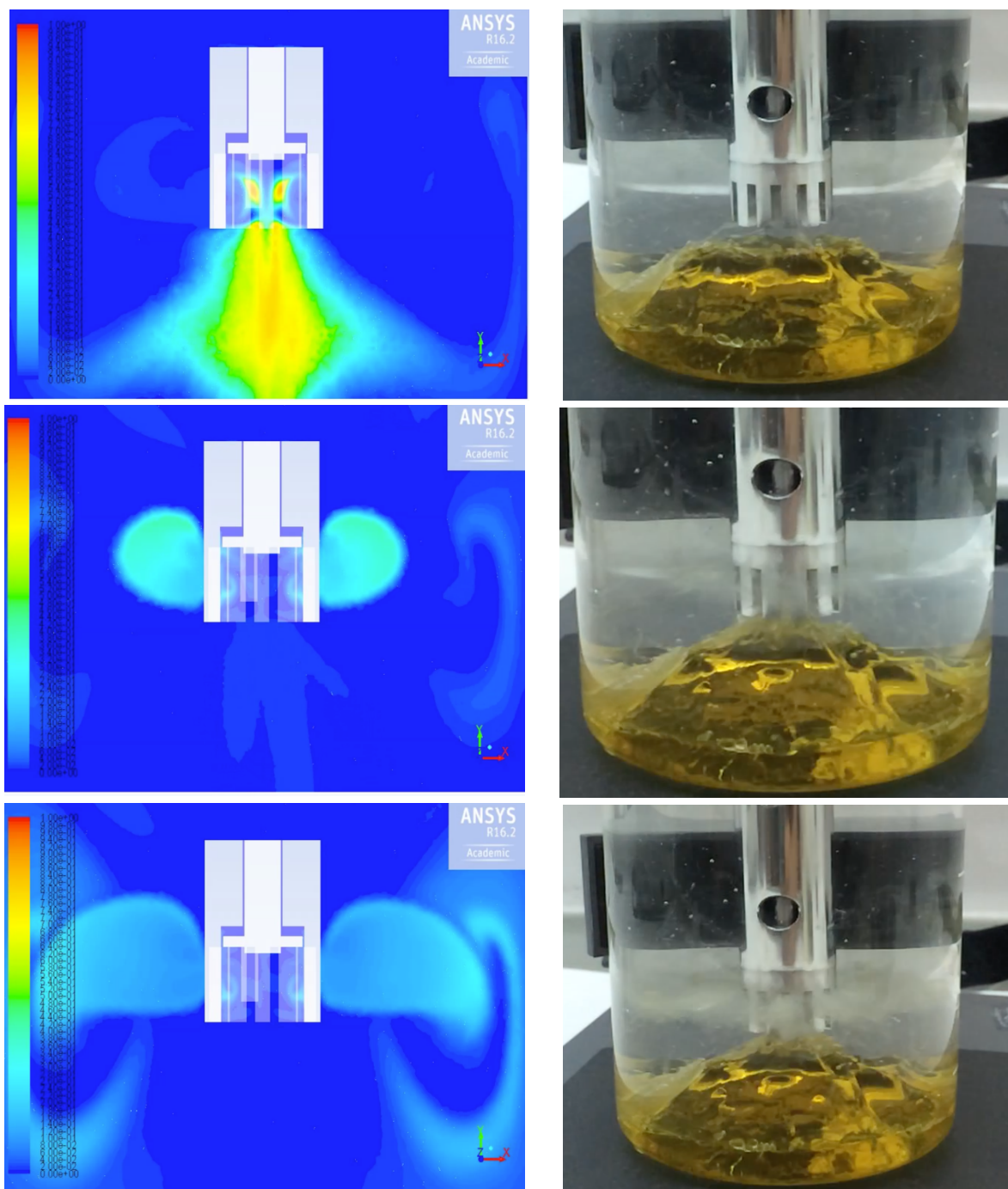


Fig 8.1. Vista del programa MovieMaker.

9. Anàlisi dels resultats.

En aquest capítol es procedirà a analitzar de forma qualitativa els resultats obtinguts mitjançant la simulació. Cal recordar que la comparació del model a través de dades experimentals s'ha definit com a treballs futurs i no entra dins l'abast d'aquest treball.

A continuació, es mostraran una sèrie de fotogrames comparant el model simulat amb el model experimental:



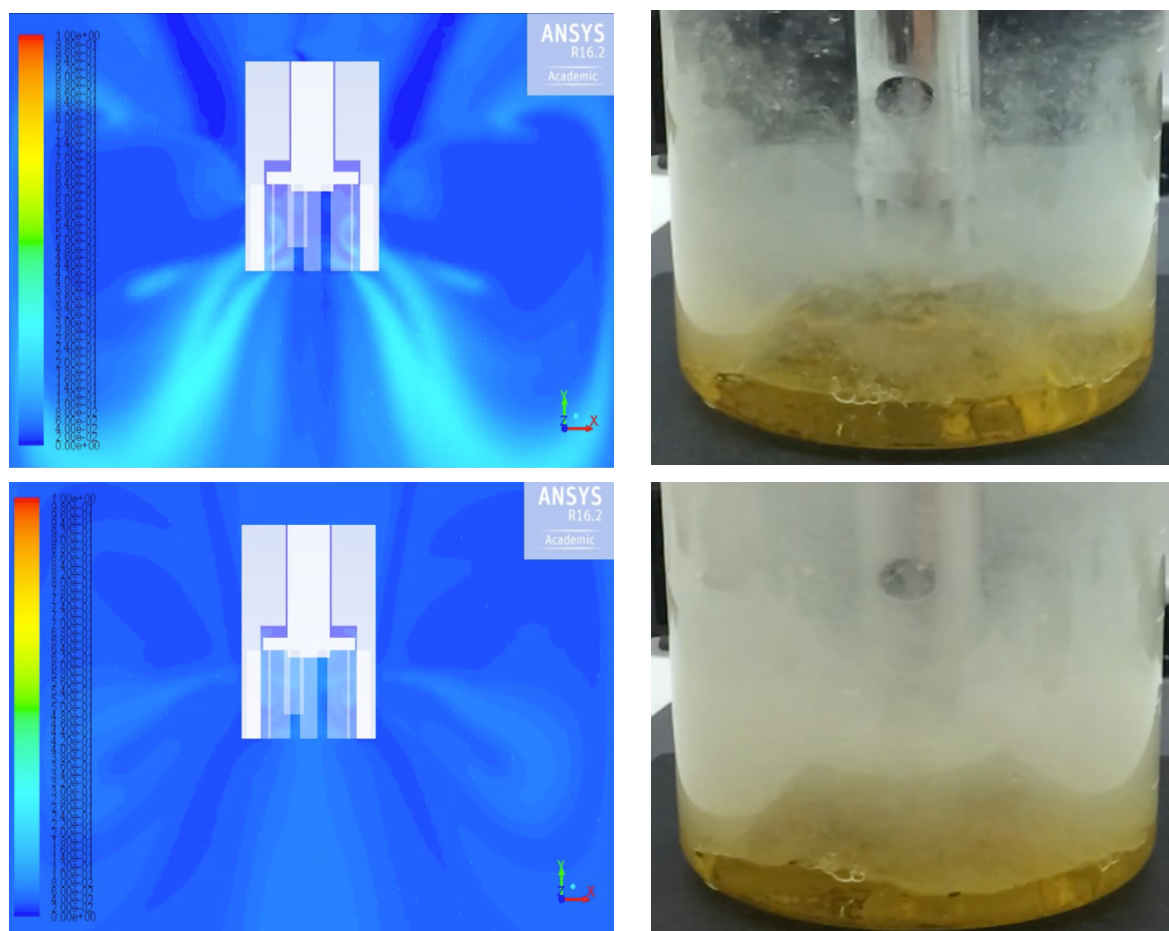


Fig 9.1. Comparació Model Simulat vs Model Experimental.

Es comença per analitzar les primeres imatges del fotograma. Com es pot apreciar, en ambdós models, les cisalles creen una succió suficient per fer pujar la fase dispersa cap a la zona interior de l'agitador.

En el segon nivell del fotograma, s'analitza com el sistema expulsa la fase dispersa a través de les seves cisalles, tant les del rotor com les del estator.

Al tercer nivell, es pot apreciar com en ambdós models el fluid sortint de l'agitador pateix un xoc contra les parets de l'agitador. Aquest xoc produeix un fenomen d'agitació anomenat *baffle*. Aquest fenomen força al fluid a ser agitat pel propi fluid a més de l'efecte de l'agitador.

Al quart nivell, el sistema comença a establir-se. Els *baffles* estan creats, i la concentració de la fase contínua comença a baixar, forçada per la dissolució de la fase dispersa en ella.

A l'últim nivell es veu com el sistema ja treballa quasi en estat estacionari. La concentració de fase dispersa segueix augmentant, de forma progressiva, en la fase contínua. D'aquesta manera, la fase dispersa cisallada s'està emulsionant en la fase contínua.

10. Estudi econòmic.

En aquest capítol s'analitzaran de forma estimada tant els costos de fer un projecte d'aquesta mena (simulació fluidodinàmica per a un client) com els seus beneficis a nivell econòmic.

Per tal de realitzar aquest estudi, s'ha triat la idea de que el client contracta a l'enginyer encarregat del projecte per a realitzar-lo. S'ha utilitzat aquest tipus de contractació perquè és una de les més usades avui en dia: no contractar un enginyer de forma indefinida sinó només per a la realització de projectes puntuals. D'aquesta forma, l'enginyer pot actuar com a *Freelance* i no li cal fundar una empresa.

10.1. Càlcul de la inversió.

Per a calcular la despesa total de forma més ordenada, es dividirà en aquests grups:

- Despesa administrativa.
- Despesa en material informàtic.
- Despesa en materials de laboratori.
- Despesa d'oficina.

10.1.1. Despesa administrativa.

Per a poder treballar com a autònom o *freelance*, l'Agència Tributària Espanyola obliga a registrar-se com a tal, a més a més de donar-se d'alta a la Seguretat Social. Els costos derivats d'aquest registre es descriuen a la següent taula:

<i>Tipus</i>	<i>Cost Mensual(€)</i>	<i>Cost anual(€)</i>
<i>Cotització Seguretat Social</i>	266,14	3.193,93
Total		3.193,93 €

Taula 10.1. Despesa administrativa.

10.1.2. Despesa en material informàtic.

En aquest capítol s'analitzarà la despesa en els dos tipus de material informàtic: els costos dels equips (Hardware) i els costos de les llicències (Software).

<i>Tipus</i>	<i>Unitats</i>	<i>Preu/unitat(€)</i>	<i>Preu(€)</i>	<i>PVP(€)</i>
<i>Sobretaula</i>	1	1.000	1.000	1.210
<i>Workstation</i>	1	4.000	4.000	4.840
Total				6.050 €

Taula 10.2. Despesa en Hardware.

<i>Tipus</i>	<i>Unitats</i>	<i>Preu/unitat anual(€)</i>	<i>Cost anual(€)</i>
<i>Llicència Ansys Fluent 16.2</i>	2	30.000	60.000
<i>Llicència Ansys WorkBench</i>	2	30.000	60.000
<i>Llicència SolidWorks 2016</i>	1	12.000	12.000
<i>Llicència Microsoft Office 365 Empresa Premium</i>	1	126	126
<i>Llicència Windows 10 Pro 64 bits</i>	2	279	558
Total			120.684 €

Taula 10.3. Despesa en Software.

<i>Tipus</i>	<i>Cost anual(€)</i>
<i>Hardware</i>	6.050
<i>Software</i>	120.684
Total	126.734 €

Taula 10.4. Despesa total en material informàtic.

10.1.3. Despesa en material de laboratori.

Per analitzar la despesa en material de laboratori, la dividirem en dos apartats: aparells de laboratori i substàncies químiques:

<i>Tipus</i>	<i>Unitats</i>	<i>Preu/unitat(€)</i>	<i>Preu(€)</i>	<i>PVP(€)</i>
<i>Turrax T18</i>	1	1.078	1.078	1.304,38
<i>Accessori S18N-19G</i>	1	652	652	789
<i>Microscopi Binocular 1000x</i>	1	281	281	339,85
<i>Reòmetre Digital</i>	1	1.227	1.227	1.485
<i>Pignòmetre</i>	1	117	117	141,57
<i>Materials Laboratori</i>	-	-	1653	2.000
Total				6.059,80 €

Taula 10.5. Despesa total en aparells de laboratori.

<i>Tipus</i>	<i>Unitats</i>	<i>Preu/unitat(€)</i>	<i>Preu(€)</i>	<i>PVP(€)</i>
<i>Diclorurmetà</i>	1 (2,5 L)	66,45	66,45	80,41
<i>PVA</i>	1 (1L)	265,3	263,3	321
<i>PEI</i>	1 (500 g)	283,47	283,47	343
Total				744,41 €

Taula 10.6. Despesa total en substàncies químiques.

<i>Tipus</i>	<i>Cost total(€)</i>
<i>Aparells de laboratori</i>	6.059,80
<i>Substàncies químiques</i>	744,41
Total	6.804,21€

Taula 10.7. Despesa total en Material de Laboratori.

10.1.4. Despesa d'oficina.

En aquest apartat s'analitzaran els costos derivats de l'ús d'una oficina: electricitat, connexió a internet o compra de mobiliari.

<i>Tipus</i>	<i>Cost Mensual(€)</i>	<i>Cost Anual(€)</i>
<i>Electricitat</i>	50	600
<i>Internet + Telèfon</i>	25	300
<i>Neteja i Manteniment</i>	200	2.400
<i>Aigua</i>	30	360
Total		3.660€

Taula 10.8. Despesa total en serveis d'oficina.

<i>Tipus</i>	<i>Unitats</i>	<i>Preu/unitat (€)</i>	<i>Preu(€)</i>	<i>PVP(€)</i>
<i>Mobiliari</i>	-	-	-	2.000
<i>Material d'oficina</i>	-	-	-	1.000
<i>Aire Acondicionat/Calefacció</i>	1	579	579	700
Total				3.700€

Taula 10.9. Despesa total en materials d'oficina.

<i>Tipus</i>	<i>Cost total(€)</i>
<i>Serveis d'Oficina</i>	3.660
<i>Materials d'Oficina</i>	3.700
Total	7.360€

Taula 10.10. Despesa total derivada de l'ús d'una oficina.

10.1.5. Càlcul de la inversió necessària.

En aquest apartat ens disposem a calcular la inversió que seria necessària per a poder dur a terme aquest projecte.

<i>Tipus</i>	<i>Cost total(€)</i>
<i>Despesa administrativa</i>	3.193,93
<i>Despesa en material de laboratori</i>	6.804
<i>Despesa d'oficina</i>	7.360
<i>Despesa en material informàtic</i>	126.734
Total	144.091,93 €

Taula 10.11. Inversió necessària per realitzar el projecte.

10.2. Càlcul d'ingressos generats per la realització del projecte.

Aquest capítol intentarà calcular els ingressos generats durant la realització d'aquest projecte. Aquest càlcul es basarà en la idea de que l'enginyer rep una quantitat econòmica pel fet de realitzar un projecte per a una empresa. D'aquesta manera, el càlcul es farà en funció de les hores dedicades a aquest projecte.

<i>Tipus</i>	<i>Hores</i>	<i>Preu/hora (€)</i>	<i>Preu total (€)</i>
<i>Hores totals treballades</i>	960	-	-
<i>Retribució econòmica per hora</i>	-	20	-
<i>Retribució econòmica total</i>	960	20	19.200
Total			19.200€

Taula 10.12. Càlcul de la retribució econòmica de l'enginyer.

El càlcul d'hores totals treballades s'ha realitzat a través de la hipòtesis que el projecte s'ha fet en sis mesos, treballant una mitjana de 40 hores a la setmana.

D'altra banda, el càlcul de la retribució econòmica per hora s'ha realitzat mitjançant la dada de que, de mitjana, un enginyer industrial té un salari de 44.800€ bruts anuals.

10.3. Cost del projecte per a l'empresa.

Com s'ha dit al començament de l'estudi econòmic, la hipòtesis de partida d'aquest estudi està basat en la idea de que l'enginyer treballi com a *freelance* i l'empresa es faci càrrec dels costos i de les inversions del projecte.

Per tant, en aquest apartat es presentaran els costos que haurà d'assumir l'empresa encarregada del projecte per poder portar-lo a terme:

<i>Tipus</i>	<i>Cost total(€)</i>
<i>Despesa en l'enginyer</i>	19.200
<i>Despesa en material de laboratori</i>	6.804
<i>Despesa d'oficina</i>	7.360
<i>Despesa en material informàtic</i>	126.734
Total	160.098 €

Taula 10.13. Costos assumits per l'empresa.

Com es pot apreciar en aquesta taula, l'empresa assumirà tots els costos excepte els costos administratius, que van a càrrec de l'enginyer. Per tant, l'empresa hauria de realitzar una inversió de 160.098 € per a poder realitzar aquest projecte.

10.4. Balanç econòmic final per a l'enginyer.

Per acabar l'estudi econòmic, es farà un balanç dels ingressos respecte els costos que ha de fer l'enginyer per a la realització d'aquest projecte.

Per al càlcul del IRPF, es treballarà amb la idea que l'enginyer realitza dos projectes idèntics a aquest a l'any.

<i>Tipus</i>	<i>Tipus aplicable(%)</i>	<i>Cost Anual (€)</i>
<i>Càlcul IRPF per factura</i>	15 %	5280,91
<i>Càlcul IRPF per tram salarial</i>	30 %	10.561,82
<i>Càlcul IRPF total</i>		5280,91€

Taula 10.14. Càlcul IRPF total.

<i>Tipus</i>	<i>Cost Anual (€)</i>	<i>Ingrés Anual (€)</i>
<i>Costos administratius</i>	-3.193,93	-
<i>Costos IRPF</i>	-5280,91	-
<i>Retribució econòmica</i>	-	+19.200
<i>Balanç Total</i>	-8.474,84	+19.200
Total		+ 10.725,16 €

Taula 10.15. Balanç econòmic final per a l'enginyer.

Com es pot apreciar a la taula precedent, l'enginyer guanyaria un total de 10.725,16 € per a la realització d'aquest projecte.

Conclusions

Un cop arribats a aquest capítol i haver acabat la realització del projecte, ja s'està en condicions de poder extreure conclusions.

Per a fer-ho, primer es detallaran una sèrie de conclusions respecte als resultats obtinguts i després es farà un recompte d'objectius assolits.

Validació del model.

Com a objectiu principal d'aquest projecte s'havia marcat arribar a dissenyar un model CFD capaç de simular de forma correcta el funcionament del model experimental explicat al capítol 4.

Per a poder validar el model, es va decidir per l'equip de projecte comparar les animacions extretes mitjançant Fluent 16.2 amb vídeos gravats a càmera lenta del model. Aquesta comparació es mostra al capítol 9, de forma explicativa i sense extreure cap conclusió.

Aquest capítol es centrarà en extreure la conclusió de si el model és vàlid, i es podrà seguir amb el projecte final de poder comparar dades experimentals amb les simulades, o per contra el model no és vàlid, i s'haurà de reconstruir o canviar per un de correcte.

Si s'analitza el fotograma mostrat al capítol 9, es pot apreciar que hi ha força similituds pel que fa als dos models. L'escala de temps entre fotogrames d'ambdós models és el mateix, per tant, s'està comparant amb igualtat de condicions.

Analitzant bé els fotogrames, com a paràmetre visual fàcil d'identificar es pot usar la creació de *baffles*. Com es pot veure, en ambdós models apareixen a partir del fotograma 3.

Un altre paràmetre visual que pot ajudar a la validació o no del model és el temps que triga l'agitador en fer arribar la fase dispersa a tot el tanc. De fet, és una variable a tenir molt en compte, ja que anirà relacionada directament amb la potència de l'agitador. Analitzant ambdós sistemes, es pot arribar a concloure que a partir del fotograma cinquè ja no es pot visualitzar cap zona de fase contínua sense concentració de fase dispersa en ella.

A partir d'aquestes dues variables, podem arribar a la conclusió que el sistema dissenyat mitjançant eines de CFD funciona de forma gairebé idèntica al sistema experimental. Per tant, com a conclusió final del projecte, es pot afirmar que el sistema CFD dissenyat amb l'objectiu d'analitzar el comportament d'un sistema experimental format per un agitador Turrax, funciona de forma correcta i està preparat per a poder comparar dades entre ambdós sistemes.

Assoliment d'objectius.

Modelitzar l'entorn experimental utilitzant software de disseny 3D. Assolit. Com s'explica a l'apartat 7.1, el sistema s'ha pogut modelar de forma correcta.

Realitzar un mallat del disseny 3D suficientment precís per captar els fenòmens que s'observen al model experimental. Assolit. Com s'explica a l'apartat 7.2, s'ha aconseguit una malla prou precisa per captar els fenòmens experimentals.

Preparar la simulació d'aquest disseny, definint correctament tots els paràmetres i les condicions de contorn que hi intervenen. Assolit. Com s'explica a l'apartat 7.3, s'ha aconseguit analitzar les condicions de contorn que intervenen a l'entorn experimental i s'han definit correctament al software CFD.

Trobar els models matemàtics que siguin capaços de calcular els valors de les variables que es volen estudiar de manera estable i precisa. Assolit. Com s'explica a l'apartat 7.3.3, s'ha pogut analitzar tots els models matemàtics possibles i s'han triat els més adients pel sistema.

Analitzar mitjançant les eines CFD el funcionament del model. Assolit. Com s'explica a l'apartat 8, s'ha pogut simular i analitzar el funcionament del model.

Comparar els resultats obtinguts amb el model de simulació amb el funcionament del model experimental a través de mètodes qualitius. Assolit. Com s'explica a l'apartat 9, s'ha pogut comparar els resultats del model dissenyat de forma qualitativa.

Dissenyar els experiments pertinents per tal de poder aconseguir les variables experimentals que determinen el comportament dels fluids. Assolit. Com s'explica a l'apartat 7.3.1, s'han pogut dissenyar i realitzar els experiments necessaris per aconseguir les variables experimentals.

Dissenyar els experiments pertinents per aconseguir visualitzar el funcionament del model experimental per a poder comparar-lo amb el model de la simulació. Assolit. Com es pot comprovar a l'apartat 9, s'han pogut realitzar els experiments adients per poder recollir dades experimentals per poder comparar-les amb les dades que donava el model CFD.

D'aquesta manera, s'han assolit tots els objectius que s'havien plantejat a l'inici del projecte. Es pot donar com a finalitzat, doncs, la realització del mateix.

Agraïments

M'agradaria començar aquest capítol del projecte donant les gràcies a la meva "Tata". Gràcies per tot el que m'has donat, per creure sempre en mi i per donar-nos a tots infinites raons per estimar la vida. Allà on estiguis, sé que sempre estaràs amb mi.

M'agradaria també agrair l'ajut de la Gemma i dels meus amics. Sense el vostre suport això no hauria sigut possible.

Gràcies també a la meva família per l'ajuda i el suport rebut.

No m'agradaria acabar aquest capítol sense agrair al grup de projectes tot el que ha fet per mi. Moltes gràcies Jordi, Lucho, Francesc i Alfredo. Gràcies per donar-me l'oportunitat d'aprendre de grandíssims professionals com sou.

I, en especial, m'agradaria agrair l'ajuda que m'ha donat el meu tutor Alfredo. Gracias por resolver todas mis dudas, que no han sido pocas, siempre con una sonrisa y palabras de ánimo.

Per acabar, gràcies a tots els companys del Departament d'Enginyeria Química, en especial al meu company de batalles Marc.

Bibliografia

Referències bibliogràfiques

- [1] BERGADÀ GRANYÓ, JOSEP MARIA. *Mecánica de Fluidos: breve introducción teórica con problemas resueltos*. Editorial Universitat Politècnica de Catalunya Iniciativa Digital Politècnica. 2015. 27.
- [2] AMES, W.F.: *Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering*. Academic, New York, 1965.
- [3] BOSSER, J. *Vademécum de mecánica de fluidos y maquinas hidráulicas*, Barcelona: ETSEIB - CPDA . 1985.
- [4] JOHN D. ANDERSON, JR. *Computational Fluid Dynamics. The basics with Applications*. McGraw-Hill, Inc. New York, 1995.
- [5] Department of Chemical Engineering and Biotechnology. <http://www.ceb.cam.ac.uk/>.
- [6] ALI SANATI. *Numerical simulation of air–water two–phase flow in vertical pipe using k-ε model*. International Journal of Engineering & Technology.
- [7] WILCOX, D. C. *Turbulence Modeling for CFD*. 2nd edition, DCW Industries, Inc., La Canada CA. 1998
- [8] MING LI, OLIVIER ROUAUD, DENIS PONCELET. *Microencapsulation by solvent evaporation: State of art for process engineering approaches*. International Journal of Pharmaceutincs. 2008.
- [9] Ansys Fluent 12.0. User's Guide. ANSYS INC, 2009.
- [10] Bases y tipos de cotizaciones 2016. Ministerio de Empleo y Seguridad Social. http://www.seg-social.es/Internet_1/Trabajadores/CotizacionRecaudaci10777/Basesytiposdecotiza36537/index.htm
- [11] Pàgina web oficial de IKA-Werke GmbH & Co.KG. www.ika.com.
- [12] SÁNCHEZ VAZQUEZ, JESÚS. *Simulación numérica directa en paralelo de las ecuaciones de navier-stokes en flujos con capa límite desprendida. Aplicaciones en instalaciones deportivas con gradas cubiertas*. Universidad de Sevilla.
- [13] Resum del capítol 20 del Fluent User's Guide. Sistemes Multifàsics. <http://www.afs.enea.it/fluent/Public/Fluent-Doc/PDF/chp20.pdf>

- [14] Universitat de Southampton. Apunts sobre models de turbulència a Fluent.
http://www.southampton.ac.uk/~nwb/lectures/GoodPracticeCFD/Articles/Turbulence_Notes_Fluent-v6.3.06.pdf
- [15] Pàgina web oficial de FEM EXPERT. www.femexpert.com

