



POLITÉCNICA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid
Tel.: 91 336 3060
info.industriales@upm.es

www.industriales.upm.es



SOFÍA HABER LEÓN

05 TRABAJO FIN DE GRADO

INDUSTRIALES

TRABAJO FIN DE GRADO

MODELO Y SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN CRISTALIZADOR CONTINUO DE MEZCLA PERFECTA UTILIZANDO EL MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS PARA LA RESOLUCIÓN DE LOS BALANCES DE POBLACIÓN

TRABAJO FIN DE GRADO
PARA LA OBTENCIÓN DEL
TÍTULO DE GRADUADO EN
INGENIERÍA QUÍMICA

Sofía Haber León

TUTOR DEL TRABAJO FIN DE GRADO:

Santos Galán Casado



POLITÉCNICA

“La ciencia y la ingeniería son el camino hacia el futuro. La innovación es nuestro motor para el progreso”

- May-Britt Moser

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que han sido parte esencial en el desarrollo y culminación de este trabajo de fin de grado. Vuestro apoyo incondicional y confianza en mí han sido fundamentales para alcanzar este logro.

A mi padre, Rodolfo, y mi madre, Adria, quienes han sido mis pilares inquebrantables, y especialmente a mi hermano Dani, quien ha sabido hacerme sonreír todos los días. Su amor, dedicación y sacrificio han sido una inspiración constante en mi vida y en mi carrera académica. Gracias por vuestro apoyo, palabras de aliento y por creer en mí incluso cuando yo dejaba de hacerlo.

A mis queridos familiares, que, aunque la distancia física nos separe y algunos ya no estéis presentes, quiero expresar mi profundo agradecimiento por el amor, el apoyo y los valores que habéis dejado como legado en mi vida. A pesar de la lejanía, siento vuestra presencia en cada paso que doy y en cada logro que alcanzo.

No puedo olvidar a esa familia que no es de sangre, Andrea, Vidal y Eva, que han sido testigos de mi crecimiento y desarrollo desde pequeña, y a Marlín y Virginia, quienes me han visto crecer y han sido una guía en mi camino. Vuestro apoyo y afecto han sido fundamentales en mi vida.

A los amigos que me ha dado la universidad las Sofías, las Carmenes, las Lucias, Borja, Celia, Andie y Espeso, y a todos esos amigos que han seguido este camino conmigo desde fuera de la universidad. Gracias por haber sido mi fuente de alegría, motivación y compañía en este proceso, por aguantar llantos y risas a mi lado. Agradezco todos los días vuestra amistad inquebrantable, apoyo constante y su presencia en cada momento. Tampoco podría olvidarme de Nacho, gracias por ser un soporte invaluable en mi vida y caerte y levantarte conmigo todos los días.

Finalmente, agradecer a mi tutor, Santos Galán, quien ha sido un guía excepcional en este proceso. Gracias por la dedicación, orientación y conocimientos compartidos. Tú apoyo y asesoramiento han sido fundamentales para llevar a cabo este trabajo y para mi crecimiento académico.

Sin vuestro amor, apoyo, confianza y mucha paciencia este logro no habría sido posible.

Gracias.

Resumen

En la industria química, la cristalización es un proceso comúnmente empleado para la producción de sólidos a partir de soluciones líquidas. Esta operación se basa en la nucleación y el crecimiento de partículas sólidas, dando como resultado la formación de cristales. La industria farmacéutica, alimenticia o química son solo algunas dentro de la gran variedad que existe que emplean la cristalización en alguno de sus procesos.

A lo largo del presente estudio se realiza el modelo y simulación de un cristalizador de sulfato de potasio continuo de mezcla perfecta, sobre el que se han llevado a cabo una serie de actividades con el fin de validar y estudiar el modelo propuesto, así como analizar su comportamiento frente a la variación de distintos parámetros y explorar posibles líneas de futuro.

El Sulfato de Potasio es un compuesto químico ampliamente utilizado en la industria agrícola y en la producción de fertilizantes, y es en el caso de estudio, el compuesto elegido para cristalizar.

El modelo propuesto se examinará frente modelos bibliográficos ya publicados previamente. Para garantizar la precisión y fiabilidad del modelo desarrollado, realizar la validación es fundamental. Esta se lleva a cabo empleando el software Aspen Custom Modeler, que ofrece herramientas avanzadas para la simulación y optimización de procesos químicos, lo cual ha permitido plantear modelo realizado, y obtener unos resultados rigurosos.

Para llevar a cabo la resolución de los balances de población, se emplea el método de volúmenes finitos. Este método discretiza el dominio del problema en celdas o volúmenes finitos, y resuelve los distintos balances de masa o energía en cada una de estas celdas. En relación a esto y en búsqueda de la mayor proximidad posible entre el modelo realizado y el original se probaron varios esquemas de discretización como el método de diferencias regresivas aguas arriba (upwind), el de diferencias centradas, esquemas combinados o incluso esquemas de alta resolución como el de Sweby.

Durante la simulación y análisis, se detectó un error en el modelo bibliográfico proporcionado por Aspen Custom Modeler, el cual fue empleado como base para todos los análisis. Dicho error fue solventado, permitiendo que se compare de manera más efectiva con los casos elaborados, obteniendo de este modo unos resultados prácticamente equivalentes a los del modelo corregido.

Además, para llevar a cabo una evaluación equilibrada entre los resultados obtenidos y el coste computacional empleado para ello, se han medido los tiempos de ejecución de cada caso, así como estudiado la resolución del mallado, es decir la cantidad óptima de nodos y celdas necesarios, todo ello con el objetivo de evaluar estos parámetros junto con la calidad de los resultados obtenidos.

Así mismo se ha realizado un exhaustivo análisis de los resultados tras la validación del modelo. Esto se ha llevado a cabo empleando diferentes gráficas y representaciones. Se han evaluado variables como la concentración y la densidad del magma en el tiempo, así como

analizado gráficas tridimensionales que representan la densidad poblacional, el tiempo y el tamaño del cristal. Todo ello además de estudiar la distribución de tamaños de partículas generadas durante el proceso de cristalización, y el número de cristales obtenidos para cada tamaño.

En relación a esta última línea de estudio, proyectando la simulación a un caso real, se busca un mayor número de cristales de tamaño superior para facilitar la distribución de este fertilizante en el terreno agrícola. Esto se lleva a cabo por medio de la modificación de parámetros como el caudal de entrada o la temperatura.

Para comprender el comportamiento de las variables representadas en los gráficos, se han realizado modificaciones en algunos parámetros clave, como por ejemplo la temperatura o la concentración de entrada. El análisis de estos casos presenta un gran interés para el estudio ya que al aumentar la temperatura la velocidad de formación de cristales y la calidad de los mismos puede verse afectada. Del mismo modo, incrementar la concentración de entrada puede afectar la cinética de crecimiento de los cristales y saturación del sistema.

Los hallazgos y recomendaciones de este estudio contribuirán a una comprensión más profunda de la cristalización del sulfato de potasio, así como de una herramienta de modelado sólida que se puede aplicar en la industria química para mejorar la eficiencia de la producción y la calidad del producto.

PALABRAS CLAVE

Cristalización, Sulfato de Potasio, Balance de población, Aspen Custom Modeler.

CÓDIGOS UNESCO

1203 Ciencia de Los Ordenadores

1203.26 Simulación

2211 Física del Estado Sólido

2211.03 Crecimiento de Cristales

2211.04 Cristalografía

2211.05 Estructura Cristalina

3303 Ingeniería y Tecnologías Químicas

3303.03 Procesos Químicos

3303.11 Química Industrial

3310 Tecnología Industrial

3310.01 Equipo Industrial

3310.03 Procesos Industriales

3310.05 Ingeniería de los Procesos

3328 Procesos Tecnológicos

3328.05 Cristalización

ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN	7
1.1	Aspen Custom Modeler	7
2.	OBJETIVOS	9
3.	FUNDAMENTO TEÓRICO	10
3.1	Nucleación	10
3.1.1	Nucleación primaria.....	11
3.1.2	Nucleación secundaria	12
3.2	Crecimiento	13
3.3	Solubilidad, metaestabilidad y sobresaturación.....	14
3.4	Métodos de discretización	15
3.4.1	Método de las líneas.....	16
3.4.2	Discretización por volúmenes finitos	17
3.4.1	Método diferencias regresivas aguas arriba o <i>upwind</i>	18
3.4.2	Método diferencias centradas	19
3.4.3	Esquema combinado de κ	21
3.4.2	Métodos de alta resolución	21
3.5	Caso de estudio.....	23
4.	MODELO	24
4.1	Balance de población.....	24
4.2	Balance de masa	26
4.3	Distribución del tamaño de las partículas.....	27
4.4	Aplicación de la discretización por volúmenes finitos.....	28
4.4.1	Caso I: Aplicación del método de diferencias centradas y <i>upwind</i>	28
4.4.2	Caso II: Aplicación de métodos de alta resolución.....	30
5.	VALIDACIÓN DEL MODELO.....	31
5.1	Validación del modelo mediante la discretización por el método de diferencias centradas y <i>upwind</i>	31
5.2	Validación del modelo mediante la discretización por el esquema combinado de κ	34
5.3	Validación del modelo mediante la discretización por métodos de alta resolución.....	35
5.4	Errores Aspen Custom Modeler	37
5.5	Resolución del mallado	43

6.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	48
6.1	Duración de las simulaciones	57
7.	CONCLUSIONES	58
8.	POSIBLES LÍNEAS FUTURAS DE ESTUDIO	60
9.	EVALUACIÓN DE IMPACTO SOCIAL, AMBIENTAL, LEGAL Y ÉTICO ...	61
10.	PLANIFICACIÓN TEMPORAL Y PRESUPUESTO	63
10.1	Estructura de descomposición del proyecto (EDP)	63
10.2	Diagrama de Gantt.....	64
10.3	Presupuesto	65
10.3.1	Personal	65
10.3.2	Otros	66
	BIBLIOGRAFÍA	67
	ÍNDICE DE GRÁFICAS	69
	ÍNDICE DE FIGURAS	70
	ÍNDICE DE TABLAS	71
	ANEXO A: Casos de Simulación en Aspen Custom Modeler	72
	CASO 1: Cálculo de la tasa de crecimiento por diferencias centradas.....	73
	CASO 2: Cálculo de la tasa de crecimiento en las caras	76
	CASO 3: Modelos combinados	78
	CASO 4: Modelos de alta resolución (Sweby).....	80
	ANEXO B: Abreviaturas, unidades y acrónimos	82
	ANEXO C: Evaluación de impactos de los Objetivos de Desarrollo Sostenible	84

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los fenómenos más presentes en la naturaleza es la cristalización. Esta operación unitaria es una de las más antiguas, y ha ido adquiriendo cada vez un papel más importante en la industria desde el surgimiento de la química y la física moderna [1].

Hoy en día, la cristalización sigue siendo motivo de estudio y, debido al incesante descubrimiento de nuevas técnicas, es además un campo en constante evolución y desarrollo, permitiendo mejorar la aplicación de este proceso en sectores como el farmacéutico, químico o alimentario.

Esta operación basa en la formación de cristales en el seno de una disolución por medio de un proceso que comienza con la sobresaturación de esta, seguido de la formación de cristales o nucleación, y que finaliza con el crecimiento de dichos cristales [2].

En este estudio se tratará la cristalización en continuo del sulfato de potasio en un cristalizador de suspensión mixta y eliminación de producto mixto, también conocido como tanque agitado ideal o MSMPR por sus siglas en inglés *mixed suspension, mixed product removal* [3]. Este modelo de cristalizador presenta la base de la cual surgen otros como el discontinuo. En este caso, la operación consiste en la introducción de una disolución acuosa del sulfato de potasio en el tanque de cristalización junto a un flujo continuo de agua que permite mantener una concentración adecuada y una temperatura controlada. Además, tal y como indica su nombre, habrá una eliminación de los cristales formados de sulfato de potasio a medida que los cristales crecen. Este producto cristalizado es empleado como fertilizante en terrenos agrícolas.

Este es uno de los muchos tipos de cristalizadores presentes en la industria, caracterizado por una mayor flexibilidad de operación y menor coste de equipo en comparación con cristalizadores que operan en discontinuo[4].

Con el fin de comprender, analizar y modelar el proceso de cristalización continua, se empleará el software Aspen Custom Modeler para el modelado y la simulación del cristalizador mencionado.

Aspen Plus es una herramienta reconocida por su capacidad para simular procesos químicos complejos, lo que lo convierte en una elección ideal para el estudio que se plantea. A través de la implementación de ecuaciones de balance de masa y población, así como la correcta discretización del modelo, se buscará obtener una representación lo más cercana a la realidad del proceso de cristalización de sulfato de potasio.

1.1 Aspen Custom Modeler

Aspen Custom Modeler (ACM) es un software computacional de simulación y modelado de procesos industriales que permite a los usuarios crear modelos personalizados para analizar y optimizar el desempeño de procesos químicos, petroquímicos, farmacéuticos y otros procesos relacionados.

Este software, más conocido con su abreviatura ACM, es una de las múltiples herramientas que ofrece la empresa Aspen Technology. Este software será de gran utilidad para el modelado y simulación, permitiendo a los usuarios crear modelos personalizados contando con una de las mayores bases de datos del mercado.

ACM es utilizado por ingenieros y científicos de la industria para realizar el diseño y optimización de procesos, la identificación y resolución de problemas, y la validación de nuevos modelos o tecnologías.

En el caso se que plantea, se emplea este software para realizar una validación del modelo de un cristalizador de sulfato de potasio que se desarrollará más adelante en el documento.

2. OBJETIVOS

El principal objetivo de este Trabajo de Fin de Grado será desarrollar el modelado de un cristizador de Sulfato de Potasio que se ajuste adecuadamente a las características de estos. Además, para llevar esto a cabo se empleará el software Aspen Custom Modeler, donde se podrá definir como objetivo la conveniente formación en el programa.

Para llevar a cabo lo mencionado anteriormente, se emplea la discretización por volúmenes finitos, un método de resolución de ecuaciones diferenciales cuyo aprendizaje se podrá sumar a los objetivos anteriores.

Validar el modelo de cristizador mediante la comparación con modelos bibliográficos y datos experimentales será otra de las metas de este trabajo que tendrá gran relevancia dado que asegurará la confiabilidad y utilidad del modelo.

Finalmente, analizar los resultados del modelo de cristizador y realizar comparaciones con los modelos bibliográficos utilizados en la validación será crucial ya que proporcionará una comprensión más profunda del proceso de cristalización y la calidad del producto final.

Todo ello se deberá llevar a cabo sin dejar de lado un enfoque de responsabilidad social, legal, ética y sostenible.

Por último, cabe hacer una breve mención al método SMART (*Specific, Mesurable, Attainable, Relevant y Timely*), una herramienta que se emplea en la formulación de objetivos para asegurar que estos son específicos, medibles, alcanzables y relevantes además de que sean claros y realistas. Es por ello que, analizando los objetivos descritos anteriormente, todos cumplen con los criterios del método SMART, ya que son específicos en cuanto a los conocimientos a adquirir, medibles en términos de resultados tangibles, alcanzables con los recursos disponibles, relevantes para el proyecto y con un marco temporal correctamente definido.

3. FUNDAMENTO TEÓRICO

La cristalización es un fenómeno por el cual se produce la formación de cristales a partir de una solución sobresaturada debido a la organización de iones que se enlazan para crear una red. Esta operación presenta una gran aplicabilidad en procesos de la industria química para obtener productos de alta pureza y calidad, requiriendo en algunos casos de etapas adicionales de filtración, secado y tamizado para obtener un producto final con la calidad y cualidades deseadas.

Esta operación se puede clasificar según su modo de operación en cristalización por lotes y en cristalización continua. En la primera de las mencionadas, la solución se carga en un recipiente y se lleva a cabo la formación de los cristales en una única carga. Sin embargo, en la cristalización continua, se alimenta la solución y se extraen los cristales de forma constante en el tiempo.

Otra forma de clasificación, esta vez más enfocada los cristalizadores, es por medio de la recirculación. Esta se utiliza en ciertas operaciones para elevar la sobresaturación de la solución y de este modo, favorecer la formación de cristales, es decir, impulsar la nucleación. El fluido recirculado podrá ser la propia disolución o el magma, donde este último término hace referencia a la solución residual que queda tras la formación y separación de cristales de la disolución de cristalización. Dichas soluciones contienen el soluto en una concentración más baja que la solución original, además de impurezas y componentes no deseados que pueden acumularse y afectar a la calidad y la eficiencia del proceso de cristalización. En la mayoría de los procesos de cristalización industrial, estas aguas se recirculan no solo para impulsar la cristalización, sino que, además, de ese modo los residuos generados se ven disminuidos.

Cabe añadir a esta clasificación, la existencia de diferentes modos para conseguir la sobresaturación necesaria de la solución para la correcta obtención de cristales. Uno de los métodos más comunes es la evaporación, por medio de la cual se aumenta la concentración del soluto debido a la eliminación de disolvente. El enfriamiento será otra de las opciones posibles para llevar esto a cabo, en este caso se reduce la temperatura de la solución para disminuir la solubilidad del soluto. Al igual que estos, existen muchos otros como la cristalización por reacción química o por adición de sales.

En el momento que comienza a darse la cristalización, se empiezan a formar los núcleos, creciendo y desarrollándose en las etapas de nucleación y crecimiento explicadas en puntos posteriores. Sin embargo, estos procesos no se llevan a cabo de una manera uniforme, dando lugar al concepto de distribución de tamaños de cristales, un concepto de gran relevancia en esta operación ya que será un factor que dependa de la naturaleza del soluto y disolvente, temperatura, velocidad de enfriamiento, agitación, entre otros, y que afecte a la pureza, rendimiento y calidad de los cristales finales.

3.1 Nucleación

La nucleación y el crecimiento son las dos etapas cinéticas clave en la operación de cristalización para dar lugar a los distintos cristales.

La etapa de nucleación de cristales es el primero de los pasos en la formación de un cristal y será esencial para dar lugar a un cristal estable. Durante esta fase, es necesario superar una barrera conocida como barrera de nucleación. Esto puede ocurrir de manera espontánea o por medio de la adición de un agente nucleador. Este primer paso en el proceso de cristalización se puede clasificar en dos tipos, la nucleación primaria, que a su vez se puede clasificar en homogénea y heterogénea, y nucleación secundaria [5][6].

3.1.1 Nucleación primaria

La nucleación primaria es la que se da en aquellas disoluciones donde hay ausencia de cristales. Dentro de ella, se encuentran la nucleación homogénea y heterogénea:

- **Nucleación homogénea**: este tipo de nucleación se le puede definir como un proceso termodinámicamente desfavorable debido a que para la correcta formación del núcleo es necesario vencer una barrera energética, o lo que sería equivalente, alcanzar un tamaño crítico que haga estables a los núcleos en condiciones de sobresaturación. Alcanzando este tamaño crítico, se evita que estos precrisales o gérmenes se disuelvan nuevamente, permitiendo así que prosigan su crecimiento.

Esta barrera energética surge a causa de la creación de una interfaz entre la fase original y la nueva que lleva implícita la formación de un núcleo. Todo ello a su vez deriva en un aumento de la energía libre del sistema.

Siguiendo la Teoría de Gibbs acerca de este tipo de nucleación, la energía libre requerida se define según la expresión (1):

$$\Delta G = \Delta G_s + \Delta G_v = \beta \cdot L^2 \cdot \delta + \alpha \cdot L^3 \cdot \Delta G_v \quad (1)$$

Donde el primer sumando va referido a la energía necesaria para la formación de una superficie, ya que habrá que vencer la tendrían entre las fases (cristal/disolución). Este término será positivo tal y como se puede observar en la **Figura 1**, donde además se aprecia la tendencia negativa del segundo sumando. Este último hace referencia a la energía libre necesaria para la transformación de una fase, es decir, la energía necesaria para que las moléculas pasen a estar inmóviles en un sólido partiendo de la movilidad que permite la disolución.

En la expresión más desarrollada, δ hace referencia a la tensión superficial mientras que β será un factor de área equivalente a π en caso de núcleos completamente esféricos, y α un factor de volumen, que nuevamente para el caso de núcleos esféricos será $\frac{\pi}{6}$ [7].

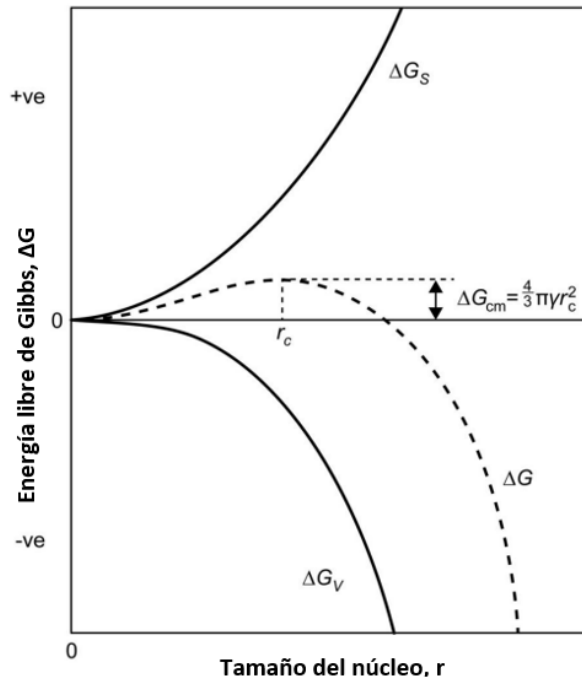


Figura 1: Variación de la energía libre con el tamaño del germen. (Fuente: [7])

- **Nucleación heterogénea:** este tipo de nucleación será mucho más probable que la anteriormente descrita. Esto se debe a que se ve favorecida por la presencia de cualquier tipo de partícula extraña, como por ejemplo polvo, o incluso por las irregularidades que pueda presentar la superficie de los tanques o agitadores. A su vez, esto provoca la disminución de la barrera energética, la cual también se verá influida por el ángulo de contacto entre la superficie extraña y el germen, siendo necesario en este tipo de nucleación un menor tamaño crítico de los cristales [7].

3.1.2 Nucleación secundaria

La nucleación secundaria es el fenómeno por el cual se forman cristales nuevos a partir de semillas de cristales presentes después de que haya ocurrido la primera nucleación. Estos pequeños cristales actuarán de catalizadores sobre la nucleación, que, en este caso, se producirá a una sobresaturación inferior a la nucleación espontánea.

Este tipo de nucleación puede verse originada de distintas formas. En la primera posible, se produce un sembrado o agregado de cristales a la disolución después de haberse producido la nucleación primaria. Estas semillas pueden ser añadidas de manera intencional para acelerar la cristalización, o pueden formarse debido a la presencia de impurezas.

La segunda situación descrita ocurre cuando la solución se ve sometida a perturbaciones físicas, como la agitación, o químicas como cambios en la concentración. Dichas alteraciones favorecen la formación de núcleos cristalinos adicionales, y por ende a la propia nucleación secundaria [8] [7].

3.2 Crecimiento

El crecimiento de los cristales ocurre en dos etapas principales: nucleación y crecimiento propiamente dicho. Este fenómeno va referido al aumento de tamaño de los cristales a medida que otros se forman.

Esta etapa ocurre en diferentes direcciones y velocidades una vez concluida la formación de los núcleos (nucleación), lo cual dará lugar a la estructura y forma del cristal final. Además, este crecimiento se verá influido por factores como la concentración de la solución o la temperatura, que podrán modificarse para que los cristales crezcan de manera controlada con las propiedades y formas deseadas [3].

Cabe mencionar que, durante esta etapa, pueden ocurrir defectos e impurezas en la cristalización que afecten la calidad del cristal y su estructura. Para reducir estos efectos negativos, se utilizan técnicas de control de calidad, como el control de la concentración de solutos, la temperatura y la presión durante el crecimiento.

Existen numerosos modelos capaces de explicar este fenómeno de crecimiento, entre ellos se encuentra la Teoría del Modelo BCF o la Teoría de Nucleación Bidimensional, que presentan una matemática bastante compleja, o la Teoría de Difusión-Reacción, que posee una mayor simpleza y es comúnmente empleado en la explicación del crecimiento en el proceso de cristalización. La base de la Teoría de Difusión-Reacción es previo a la incorporación del soluto al cristal, que indica la necesidad de una difusión del fluido hacia el mismo atravesando una capa límite [7].

En el caso unidimensional que se trata en este estudio, las primeras expresiones a plantear son, aquella que represente la relación entre la tasa de crecimiento con la tasa de difusión (expresión (2)), y la que manifieste el comportamiento de la concentración atravesando la capa límite mencionada previamente (expresión (3)).

$$\frac{dm_c}{dt} = D \cdot A \cdot \left(\frac{dC}{dx}\right) \quad (2)$$

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C - C_i}{\delta} \quad (3)$$

Donde A hace referencia al área del cristal, D es el coeficiente de difusión, δ es el grosor de la capa límite y C y C_i hacen referencia a la concentración del soluto en la disolución y en la interfase respectivamente.

En la expresión inferior se observa la combinación de las dos anteriores, dando lugar a la ecuación (4) que representa la difusión del seno del fluido al cristal. En ella aparecen nuevamente los términos de concentraciones y la superficie del cristal, además del coeficiente de transferencia k_d que se representa según la expresión (5).

$$\frac{dm_c}{dt} = k_d \cdot A \cdot (C - C_i) \quad (4)$$

$$k_d = \frac{D}{\delta} \quad (5)$$

En caso de tratar una reacción de primer orden, la ecuación se podrá ver simplificada, eliminando el término de la concentración en la capa límite que resulta complejo de obtener. Además, se considerará un coeficiente de transferencia global en el que se incluyen el coeficiente de transferencia (k_d) y la constante cinética (k_r).

$$\frac{dm_c}{dt} = K_c \cdot A \cdot (C - C^*) \quad (6)$$

$$\frac{1}{K_c} = \frac{1}{k_d} + \frac{1}{k_r} \quad (7)$$

3.3 Solubilidad, metaestabilidad y sobresaturación

En 1927, Miers postuló la Teoría de Supersaturación, la cual se puede explicar apoyándose en la **Figura 2** inferior [5].

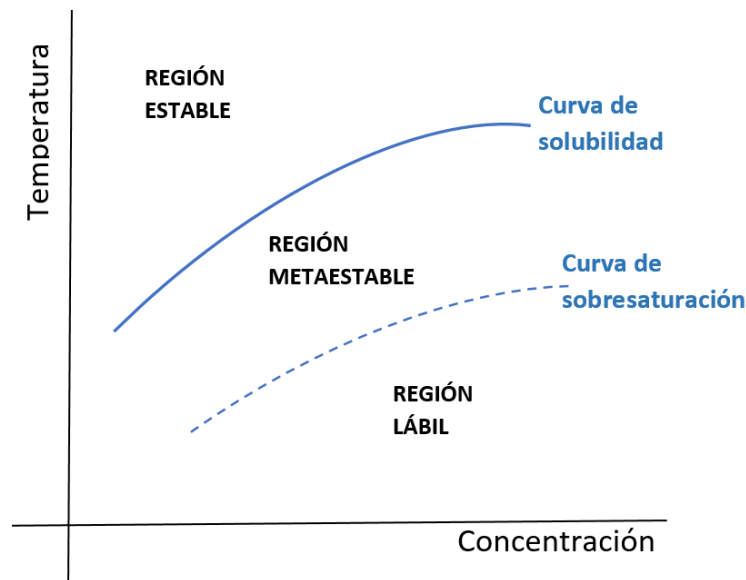


Figura 2; Diagrama solubilidad y sobresaturación

Siguiendo esta teoría, las zonas estables, metaestable y lábil, son las tres regiones que describen la evolución de los cristales desde la nucleación hasta la finalización de su crecimiento [5]. Entre estas zonas se encuentran las curvas de solubilidad y sobresaturación, dos conceptos clave para la correcta comprensión de la cristalización:

- La curva de solubilidad representa el estado de equilibrio que se alcanza cuando la tasa de nucleación es equivalente a la velocidad de disolución de los núcleos, es decir, el equilibrio entre soluto y solvente [6].
- La curva de sobresaturación es aquella en la que la concentración de soluto es mayor que la que se define en el equilibrio del sistema. Esta curva, además, podrá adoptar distintas posiciones, pues a diferencia de la curva de solubilidad, no es una propiedad del sistema, sino que depende de factores externos y condiciones de operación como la velocidad de agitación, impurezas, o incluso el equipo en el que se lleve a cabo la

cristalización, lo cual modificará a su vez la amplitud de la zona metaestable. La sobresaturación será uno de los parámetros principales que determinen tanto la nucleación y crecimiento de cristales como la aglomeración, tamaño y pureza de los mismos [6]. Esta se puede expresar según las expresiones (8), (9) y (10) en las que C representa la concentración de la disolución y C^* es la concentración de saturación:

$$\text{Gradiente de concentración:} \quad \Delta C = C - C^* \quad (8)$$

$$\text{Ratio de sobresaturación:} \quad S = \frac{C}{C^*} \quad (9)$$

$$\text{Supersaturación relativa:} \quad \sigma = \frac{C - C^*}{C^*} \quad (10)$$

Si se realiza un estudio avanzando por las distintas regiones de la ilustración superior, se pueden analizar tres zonas:

- Región estable, una región insaturada donde la formación y crecimiento de cristales resulta imposible.
- Región metaestable, localizada entre las curvas de solubilidad y sobresaturación, posee un ancho dependiente de las condiciones de operación como la presencia de impurezas o tasa de agitación y enfriamiento que afectan a la curva de sobresaturación. En esta zona existe una elevada improbabilidad de que ocurra una cristalización espontánea, sin embargo, si se produce el crecimiento de cristales.
- Región lábil o inestable, donde se produce la formación de núcleos de manera espontánea, de forma que se podría definir el recorrido de un cristal desde su nucleación y crecimiento en las regiones lábil y metaestable respectivamente, hasta su dilución en la región estable [6].

3.4 Métodos de discretización

Los métodos de discretización toman su origen en el campo de la modelización y simulación de procesos donde juegan un papel muy importante ya que son los encargados de transformar ecuaciones diferenciales parciales continuas en sistemas de ecuaciones algebraicas discretas. De este modo, estos métodos permiten aproximar numéricamente las soluciones de problemas complejos, facilitando el análisis y comprensión de gran variedad de procesos industriales como el de cristalización.

El nacimiento de los métodos de discretización surge de la necesidad de representar sistemas de manera discreta. Existen gran cantidad de métodos de discretización, sin embargo, para el caso de estudio, se desarrolla únicamente el método de líneas y de volúmenes finitos, ambos esquemas que se emplean en la simulación de manera directa o indirecta [9].

Previo al análisis de cada uno de los esquemas mencionados cabe hacer una breve descripción del papel fundamental que toma el número de Péclet en ellos como forma de medida de la difusión [10][11].

Este número adimensional representa la relación entre la advección y la difusión, o lo que es lo mismo, el transporte convectivo y molecular, y se define según la expresión inferior.

$$Pe = \frac{\text{Velocidad de advección}}{\text{Coeficiente de difusión}} = \frac{v_a}{D} \quad (11)$$

En función del valor que tome este número se podrá determinar si lo que predomina es la advección o la difusión, siendo en cada uno de estos casos, el transporte convectivo y el transporte molecular el predominante respectivamente. Es decir, si el número de Péclet es mayor que 1 predominará la convección en el sistema, mientras que si esta toma un valor menor que 1 la difusión será más influyente.

Estos fenómenos estarán presentes en el caso de estudio, concretamente en cada uno de los puntos discretos en los que se divide al sistema, por lo que su relación con los métodos de discretización será importante para hacer una correcta elección de estos.

3.4.1 Método de las líneas

Una de las opciones dentro de los métodos de discretización para resolver ecuaciones en derivadas parciales (EDP) es el denominado método de las líneas. Este procedimiento descompone estas EDP en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO).

Mediante este método se discretizan todas las dimensiones a excepción de una, el tiempo. Al conseguir que la EDP quede referida únicamente a una dimensión, por medio de este método se podrán calcular las soluciones aplicando métodos de integración.

Todo ello se puede observar con más claridad con un ejemplo como el que se muestra a continuación.

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (12)$$

La expresión (12) posee dos derivadas, una referida al tiempo (t) y otra referida al espacio (x). En este punto habrá dos caminos que se puedan seguir. Con el primero de ellos, tal y como se ha mencionado anteriormente, se puede discretizar la derivada respecto al espacio y dejar a la derivada respecto al tiempo para la aplicación de este método. De este modo, se reduce el esfuerzo, que se empleará en aplicar integradores a esta última derivada. Estos integradores son algoritmos numéricos que se emplean para calcular soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales, de entre los más conocidos están el método de Euler o el de Runge-Kutta.

Este último paso, es decir, el cálculo de la derivada respecto al tiempo se le puede dejar a softwares. Esto será lo que ocurra en el modelo que se planteará más adelante, en el que se discretizará una derivada respecto al espacio, dejando que el software Aspen Custom Modeler se encargue de la derivada restante a través de este método.

Tal y como se ha mencionado, había dos caminos posibles, ya habiendo tratado el primero, cabe mencionar la otra opción viable para la aplicación de este método. En lugar de aplicar una discretización únicamente a una parte de la EDP, se podrá discretizar toda ella, de este

modo se obtienen ecuaciones algebraicas cuya resolución se podrá realizar en ausencia de integradores.

La elección de un camino u otro podrá variar en función del caso. Si se desea tratar una expresión en régimen permanente se podrá aplicar únicamente una discretización del término referido al espacio. Sin embargo, en régimen transitorio se podrá aplicar cualquiera de las opciones brevemente descritas anteriormente.

Para el caso de estudio, al emplearse un software computacional que puede resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, para que este requiera del menor esfuerzo computacional, la EDP inicial se transforma discretizando lo mínimo necesario, es decir, la derivada en el espacio [12][13].

3.4.2 Discretización por volúmenes finitos

En el punto anterior se desarrolla el método de líneas donde se menciona la discretización de la derivada respecto al espacio, en relación a esto, en este punto se describe una de las técnicas más usadas para llevar esto a cabo, la discretización por volúmenes finitos.

El origen de este método comienza originalmente en el campo de dinámica de fluidos, siendo actualmente uno de los pilares para la simulación de problemas físicos en ingeniería [7].

El método de discretización de volúmenes finitos, también conocido como FVM por sus siglas en inglés *Finite Volume Discretization*, es una técnica numérica robusta y versátil que se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales parciales (EDP).

Este método divide el dominio del problema en una malla o red de volúmenes finitos, también conocidos como elementos de control. Cada celda es un pequeño volumen del dominio que contiene un nodo, un punto discreto en el que se evalúan las variables del sistema y se resuelven las ecuaciones diferenciales mediante integración numérica. Además, dichas ecuaciones se expresan en términos de cantidades conservativas, es decir, como una representación de la cantidad total de una propiedad física, como la densidad o la energía entre otros. Estas cantidades se conservan en cada celda y se transfieren a través de las fronteras de las celdas a medida que avanza el tiempo [14].

En la **Figura 3** inferior se ilustra lo mencionado anteriormente. Se observan 3 celdas con sus 3 respectivos nodos separados unos de otros una distancia δL . El flujo de salida de W a través de la cara w será el flujo que entra a la celda P , comprobando así de manera ilustrativa la conservación que presenta este método

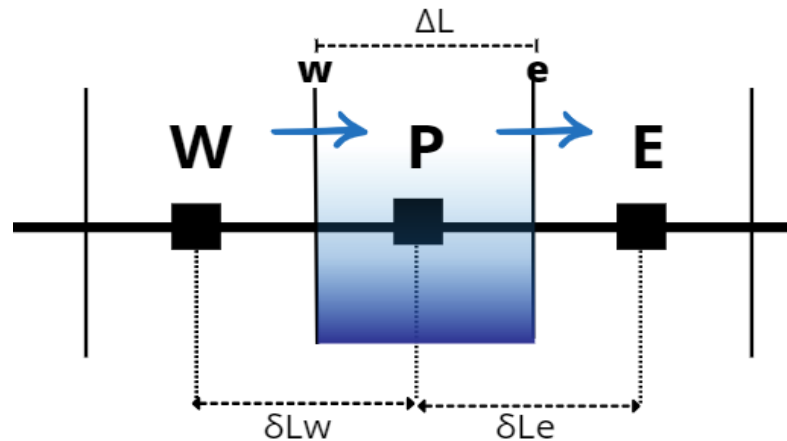


Figura 3: Representación volúmenes finitos

Existen numerosas ventajas que ofrece este método además de su simpleza en comparación a otros, como por ejemplo que garantiza el principio de conservación en cada volumen de control, es decir, el flujo saliente de un volumen, será equivalente al entrante en otro.

Otro aspecto positivo de emplear este método es la flexibilidad que presenta para tratar complejas geometrías, la precisión en la solución de problemas mediante la utilización de un mallado fino y la estabilidad que proporciona, dando lugar a unas soluciones numéricas no divergentes [15].

A continuación, se describen una serie de alternativas dentro de este método de discretización que serán de gran relevancia a la hora de llevar a cabo el modelado.

3.4.1 Método diferencias regresivas aguas arriba o *upwind*

El método de diferencias regresivas aguas arriba, también conocido como *upwind*, es un método de primer orden. Este es un esquema de discretización, se utiliza comúnmente en la discretización por volúmenes finitos para resolver problemas que involucran fenómenos de advección o transporte.

En este método, la dirección del flujo o del transporte se tiene en cuenta a la hora de llevar a cabo la discretización, y los valores en los límites de las celdas se extrapolan de las celdas vecinas en la dirección del flujo. Esto garantiza que la solución numérica no propague información en dirección contraria a la del flujo, lo que podría provocar inestabilidad numérica y difusión [16][17].

En relación a esto último y haciendo referencia a lo mencionado al comienzo del punto acerca del número de Péclet, dado que la convección es un proceso vectorial direccional, y que por medio de este esquema de discretización se puede determinar la dirección del flujo, se puede concluir que este método de discretización por diferencias regresivas aguas arriba será el más apropiado para números de Péclet altos, es decir, en aquellos casos donde la advección sea el fenómeno predominante [10].

Se trata de un esquema coherente, consistente y acotado, tres características fundamentales cuando se habla de métodos de discretización. Sin embargo, pese a la multitud de ventajas que presenta, su aplicación solo dará resultados lógicos en aquellos casos en los que la velocidad del flujo este alineada con el mallado, dado que, en caso contrario se producirán errores por difusión.

En la **Figura 4** se observa todo lo mencionado de manera gráfica, donde u representa la velocidad del flujo.

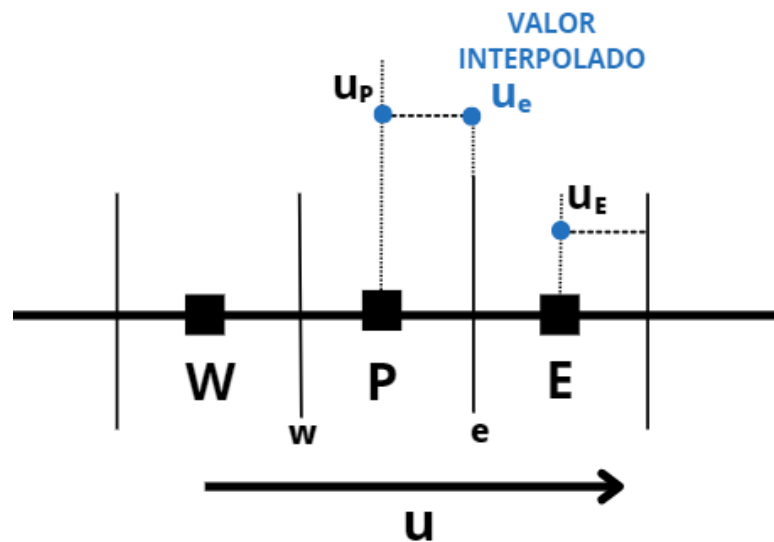


Figura 4: Representación del método de diferencias regresivas aguas arriba

3.4.2 Método diferencias centradas

La posible difusión mencionada en el punto anterior será de gran importancia para analizar este método. De manera simplificada se puede decir que este fenómeno ocurre al aplicar métodos numéricos, y va referido a los errores de redondeo que se producen durante los cálculos. Además, la difusión puede acumularse y propagarse a través de las iteraciones afectando la precisión de los resultados [18].

La difusión afecta a la distribución de una cantidad transportada a lo largo de todos sus gradientes en todas las direcciones, mientras que los efectos por convección solo afectan a la dirección del flujo tal y como se muestra en la ilustración inferior (**Figura 5**).

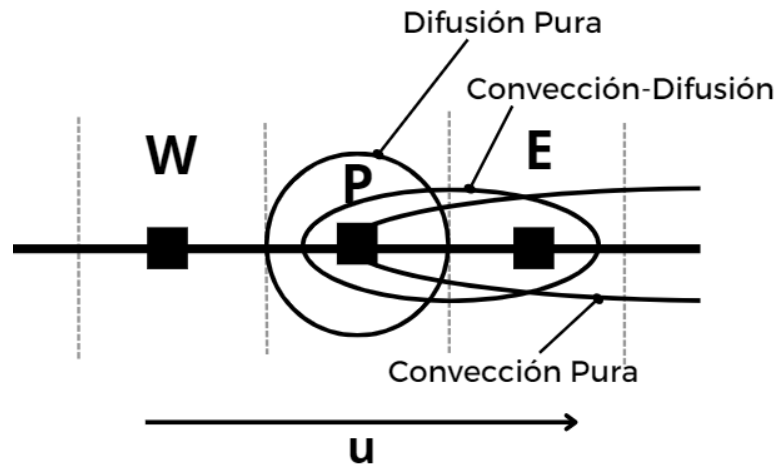


Figura 5: Representación de la difusión y convección en nodos

Todo esto deriva en que el esquema de diferencias centradas presentará una gran exactitud para aquellos casos que presenten una difusión pura, mientras que en presencia de convección no presentará tal precisión. Es decir, este esquema no tendrá en cuenta la dirección del flujo, por lo que considera el mismo efecto en dirección aguas abajo y aguas arriba.

Este esquema de segundo orden presenta coherencia a la hora de calcular los flujos en los volúmenes de control, por lo que se trata de un método consistente. Sin embargo, la incapacidad para trabajar en el sentido del flujo hace que se puedan producir oscilaciones en las soluciones.

Nuevamente en la **Figura 6** inferior, se observa este esquema de discretización aplicado a los mismos 3 nodos anteriores.

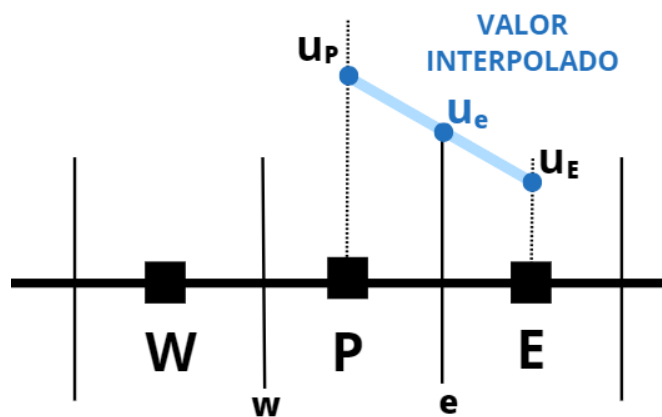


Figura 6: Representación del método de diferencias centradas

3.4.3 Esquema combinado de κ

En relación al método de diferencias centradas y el método de diferencias regresivas expuestos anteriormente cabe mencionar que existe la posibilidad de combinarlos por medio de la interpolación polinómica que se muestra en la expresión ... [15]. En ella se hace referencia a un hipotético mallado en el que se encuentran definidos i nodos y L_i caras ambos de 0 hasta un total de N_x .

$$(Gn)_{L_i} = G_{L_i} \cdot \left(n_i + \frac{1 + \kappa}{4} \cdot (n_{i+1} - n_i) + \frac{1 - \kappa}{4} \cdot (n_i - n_{i-1}) \right) \quad (13)$$

En ella el parámetro κ podrá tomar valores entre -1 y 1. Siendo $\kappa=-1$ en el caso que se aplique el esquema de primer orden de diferencias regresivas aguas arriba, y $\kappa=1$ en el caso que se emplee el sistema de primer orden de diferencias centradas.

Además, si se observa con detenimiento la expresión anterior, esta no será aplicable para las caras exteriores del mallado realizado ya que no existe L_{-1} . Es por ello que, en el caso de la cara más interna se deberán aplicar las condiciones de contorno que se describirán más adelante, $n(0)$ y G_0 , mientras que para la siguiente cara del mallado solo se podrá aplicar el método de diferencias centradas, es decir $\kappa=1$, resultando en la ecuación (14):

$$(Gn)_{L=1} = G_{L=1} \cdot \left(\frac{n_2 + n_1}{2} \right) \quad (14)$$

Ocurre lo mismo para la cara más exterior (L_N), no se podrá aplicar la expresión 37 dado que no existe la cara L_{N+1} . Además, tampoco se puede aplicar el esquema de diferencias centradas dado que nuevamente se saldría del dominio definido, es decir, en este caso se emplea el método *upwind*, $\kappa=-1$, según la expresión (15) inferior [16]:

$$(Gn)_{L_N} = G_{L_N} \cdot \left(n_N + \frac{1}{2} \cdot (n_N - n_{N-1}) \right) \quad (15)$$

Únicamente faltarían por definir el resto de caras internas del mallado realizado, para lo cual se empleará una $\kappa=1/3$, que será equivalente a un esquema de diferencias regresivas aguas arriba de tercer orden, resultando finalmente en la expresión (16) inferior en la que r hace referencia a la ratio de gradientes sucesivos y el parámetro ε se emplea para evitar dividir entre cero:

$$(Gn)_{L_i} = G_{L_i} \cdot \left(n_i + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot r_i \right) \cdot (n_i - n_{i-1}) \right) \quad (16)$$

$$r_i = \frac{n_{i+1} - n_i + \varepsilon}{n_i - n_{i-1} + \varepsilon} \quad (17)$$

3.4.2 Métodos de alta resolución

Previamente se han mencionado métodos de discretización de primer y segundo orden, sin embargo, existen otros esquemas de orden superior como, por ejemplo, el método de diferencias aguas arriba de orden dos o el método QUICK de tercer orden.

Las combinaciones de estos esquemas de orden elevado junto a unos criterios de acotación dan lugar a los esquemas de alta resolución, también conocidos como métodos avanzados.

Estos métodos permiten obtener una solución numérica más precisa de las ecuaciones de balances de población que describen los procesos de cristalización. Esta representación más exacta, permitirá realizar mejores predicciones del proceso de cristalización [10].

Los esquemas de alta resolución suelen incorporar propiedades TVD (*Total Variation Diminishing*) como componente imprescindible para garantizar que la variación de la solución no aumente con el tiempo, manteniendo la estabilidad y precisión de la simulación.

Estos esquemas TVD o esquemas de variación total decreciente, emplean lo que se conoce como limitadores de flujo (ψ) y limitadores de pendiente. El primero de ellos, como su propio nombre indica, se encarga de limitar el flujo a través de caras del mallado y de este modo evitar una difusión excesiva. En cuanto a los limitadores de pendiente se encargarán de controlar la velocidad a la que la solución en cada celda del mallado cambia. El uso de estos dos limitadores garantiza el equilibrio que asegura la estabilidad de la solución.

Para el caso que se estudia se plantea la expresión general (18) en la que ψ hace referencia a la función de limitación de flujo mencionada anteriormente [15].

$$(Gn)_{Li} = G_{Li} \cdot \left(n_i + \frac{1}{2} \cdot \psi(r_i) \cdot (n_i - n_{i-1}) \right) \quad (18)$$

En el año 1984, Sweby consolida las condiciones necesarias y suficientes para que un esquema sea TVD por medio de la relación entre la función limitadora de flujo (ψ) y la ratio r que aparece en la expresión (17). Para observar esto con mayor claridad cabe analizar la **Figura 7** donde aparece sombreada la zona en la cual los esquemas son TVD, es decir, todos aquellos esquemas que queden fuera de este recinto requerirán de una modificación en la relación r - ψ [18].

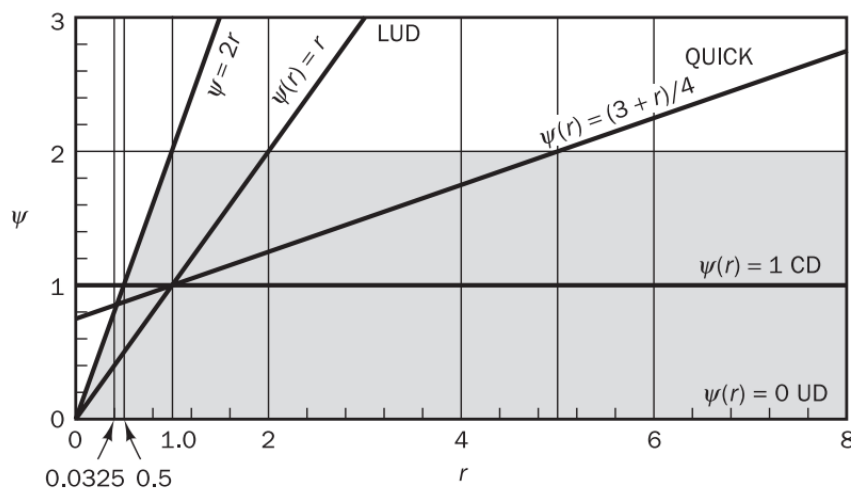


Figura 7: Representación de la relación de la ratio r y el limitador de flujo. (Fuente: [18])

Tal y como se observa si la función limitadora de flujo toma los valores de 0 o 1, el esquema pasa a ser el upwind y el de diferencias centradas respectivamente. Esto además, se

puede comprobar comparando dicha sustitución en la expresión (18) con las expresiones que se definen más adelante.

Este limitador de flujo podrá tomar distintos valores ya empleados a lo largo de la historia con éxito como el limitador de Van Leer, MinMod o Sweby [10].

3.5 Caso de estudio

A lo largo de este Trabajo de Fin de Grado se tratará un cristalizador de suspensión mixta y eliminación de producto (MSMPR), un tipo de reactor de cristalización utilizado para producir cristales de alta calidad con una distribución de tamaños equilibrada. Concretamente, se estudiará una de las numerosas aplicaciones de esta tecnología, la producción de cristales de sulfato de potasio, empleados en diversos procesos industriales, como fertilizantes, productos farmacéuticos y tintes.

El cristalizador MSMPR funciona en condiciones estacionarias, lo que implica que la velocidad de crecimiento de los cristales se equilibra con la velocidad de eliminación de los mismos. Esta condición de estado estacionario garantiza que la distribución del tamaño de los cristales siga siendo balanceada, lo que es importante para muchas aplicaciones industriales.

La solución saturada de sulfato potásico se produce normalmente disolviendo la sal en agua a temperaturas elevadas y enfriando después la solución a la temperatura de funcionamiento deseada en el cristalizador. El proceso de enfriamiento se controla cuidadosamente para evitar la formación de cristales grandes no deseados que puedan obstruir el reactor y reducir la calidad del producto final [8] [19].

A continuación, se expone el modelado realizado para dicho cristalizador, donde además se llevará a cabo la discretización de los distintos tamaños de cristales que se localizan en el mismo.

4. MODELO

Tal y como se ha mencionado, a continuación, se plantea un modelo de un cristalizador MSMPR en el software Aspen Custom Modeler basado en la tesis de Min Oh [20].

Dicho cristalizador tiene una capacidad de 50 litros y se considera inicialmente que opera a temperatura ambiente de 25°C empleando agua como disolvente ($\rho_{\text{agua}}= 1000 \text{ kg/m}^3$) para cristalizar sulfato de potasio ($\rho_{\text{sulfato}}=2660 \text{ kg/m}^3$).

Además, el flujo másico entrante al cristalizador (W) se considerará fijo con un valor de 100 kg/h.

4.1 Balance de población

Un balance de población realiza un seguimiento de los cambios que se producen en la distribución del tamaño de los cristales contenidos en un cristalizador a medida que estos nacen, crecen, mueren o salen del volumen de control [8].

La evolución de los cristales considerada en estos balances, se tomará en función de una variable independiente que será el tiempo (t), así como en función de lo que se conoce como coordenada de propiedad o propiedad interna, que, en el caso de estudio, será el tamaño de la partícula (L).

La expresión general de un balance de población se presenta según la expresión (19):

$$\text{Acumulación} = \text{Entran} - \text{Salen} + \text{Generación neta} \quad (19)$$

Siguiendo la expresión 11 en orden, se define el término de acumulación. Este término hace referencia al número de cristales de un mismo tamaño, es decir, estará formado por la densidad numérica en el tiempo t. Quedando finalmente la acumulación representada por la variación de cristales de un rango de tamaños en el cristalizador en un intervalo de tiempo (expresión (20)).

$$\frac{\partial(n \cdot V)}{\partial t} \cdot \Delta L \quad (20)$$

Continuando con el desgranado de la expresión (12) se debe analizar la entrada y salida de cristales dentro de un tamaño, o lo que es lo mismo, el flujo de población a través de la coordenada interna definida previamente.

El flujo mencionado puede tener varios orígenes que van desde el crecimiento y decrecimiento de cristales dentro del cristalizador hasta la entrada y salida de corrientes con cristales del cristalizador.

Para representar el crecimiento y decrecimiento de cristales en el cristalizador se deberán tener en cuenta el número de cristales que crecen por unidad de tiempo, es decir, el producto de la velocidad de crecimiento lineal G [mm/h] con la densidad poblacional n [$\text{n}^{\circ}/\text{m}^4$]. De este modo, aplicando lo anterior al cristalizador de volumen V conocido, se obtiene la expresión (21):

$$(G_e \cdot n_e - G_s \cdot n_s) \cdot V \quad (21)$$

Por otro lado, como se ha mencionado, se tienen en cuenta las corrientes de disoluciones con cristales que entran y salen del cristalizador. Para ello en primer lugar se deben plantear los caudales volumétricos que entran y salen del cristalizador de la forma que se representa en la expresión (22), donde Q_i hace referencia a un caudal volumétrico de disolvente genérico, siendo W el caudal másico conocido y ρ la densidad.

$$Q_i = \frac{W_i}{\rho_i} \quad i = \text{entrada, salida} \quad (22)$$

Resultando finalmente la expresión referida a los caudales con cristales de entrada y salida queda de la forma que se muestra en la expresión (23):

$$\left(\frac{W_e}{\rho_e} \cdot n_e - \frac{W_s}{\rho_s} \cdot n_s \right) \cdot \Delta L \quad (23)$$

Unificando bajo una misma expresión las ecuaciones (19), (20) y (22), se obtiene la primera aproximación al balance de población que se muestra en la expresión (24):

$$\frac{\partial n}{\partial t} \cdot V \cdot \Delta L = (G_e \cdot n_e - G_s \cdot n_s) \cdot V + \left(\frac{W_e}{\rho_e} \cdot n_e - \frac{W_s}{\rho_s} \cdot n_s \right) \cdot \Delta L \quad (24)$$

Tomando el caso de un cristalizador de suspensión mixta y eliminación de producto (MSMPR), dividiendo entre el producto del volumen por el intervalo de tamaño, y realizando las siguientes hipótesis:

- Una mezcla homogénea en el cristalizador
- No entran cristales
- Una sobresaturación constante
- Un tamaño de cristales suficiente para evitar la aglomeración
- No se produce rotura de cristales

Se puede determinar finalmente la expresión (25) del balance de población:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{(G_e \cdot n_e - G_s \cdot n_s)}{\Delta L} + \frac{\left(\frac{W_e}{\rho_e} \cdot n_e - \frac{W_s}{\rho_s} \cdot n_s \right)}{V} \quad (25)$$

Donde, si además de tiene presente la definición de tiempo de residencia (τ) que se muestra en la expresión (26), y se considera que este va a ser equivalente para todos los cristales:

$$\tau = \frac{V \cdot \rho}{W} \quad (26)$$

Finalmente, se obtiene la expresión (27) del balance de población:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(G \cdot n)}{\partial L} + \frac{n}{\tau} = 0 \quad (27)$$

Además, será necesario definir la tasa de crecimiento de los cristales que se emplea en las expresiones superiores. Para ello se emplean los datos experimentales obtenidos por Chianese et al. para la cristalización de sulfato de potasio [21].

$$G(L) = 892 \cdot \sigma^2 \cdot (1 + 5,87 \cdot L) \quad (28)$$

$$B_o = 4,12 \cdot 10^{14} \cdot M_t \cdot \sigma^{3,4} \quad (29)$$

$$G_o = 847 \cdot \sigma^2 \quad (30)$$

Donde G es la tasa de crecimiento para cada tamaño L , G_o es la tasa de crecimiento de los núcleos y B_o es la tasa de nucleación.

Dentro de estas últimas expresiones, ecuación (29) y (30), aparecen los términos de sobresaturación (σ) y densidad del magma (M_t), donde este último se desarrolla más adelante.

Además, cabe realizar una anotación que será de utilidad en análisis posteriores, si el balance de población que se representa en la expresión (25) se reescribe tomando como hipótesis que el crecimiento es independiente del tamaño, se obtiene la siguiente expresión exponencial [22]:

$$n = n_o \cdot \exp\left(\frac{-L}{G \cdot \tau}\right) \quad (31)$$

La sobresaturación tal y como se ha descrito previamente, se puede definir como la diferencia entre la concentración y la concentración en el equilibrio (expresión (32)), por lo que, para el modelo que se plantea será necesario la definición de esta última referida al sulfato de potasio en agua [23].

$$C_{eq} = 0,0735 + 1,675 \cdot 10^{-3} \cdot T \quad (32)$$

4.2 Balance de masa

Además del flujo de cristales que se produce en cada uno de los espacios discretizados, también cabe dar relevancia al balance de masa global del cristalizador, el cual, tal y como se ha mencionado, se trata de un cristalizador continuo. La entrada de la disolución de sulfato de potasio y la salida de cristales se observa de manera gráfica en la figura inferior.

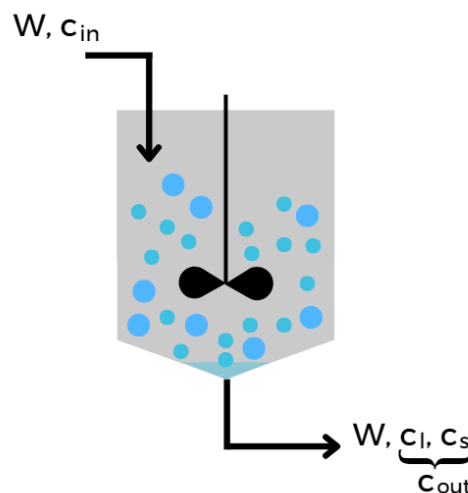


Figura 8: Representación de las entradas y salidas del cristalizador

La cantidad de disolución no se verá modificada (W), sin embargo, si lo hará la concentración de sulfato de potasio en la misma (c_l). Esto se debe a que el sulfato de potasio también saldrá cristalizado, cuya concentración se representa con el término c_s .

Dada la forma general del balance de masa:

$$\text{Acumulación} = \text{Entran} - \text{Salen} + \text{Generación neta} \quad (33)$$

El balance de masas del soluto en las fases líquida y sólida arroja la ecuación (33) [20]:

$$V \cdot \rho \cdot \frac{\partial c_{out}}{\partial t} = W \cdot (c_{in} - c_{out}) \quad (34)$$

Donde V es el volumen del cristalizador estudiado, ρ es la densidad del solvente y W es el flujo de masa que atraviesa el cristalizador. Además, el término c_{out} hace referencia a las concentraciones del soluto tanto en fase sólida como líquida.

La concentración del soluto en fase sólida (cristales), se calcula a través de la densidad del magma (M_t). Quedando finalmente la expresión (34), donde la concentración de sulfato de potasio a la salida del cristalizador es la suma de la concentración en estado sólido y líquido.

$$c_{out} = c_l + c_s = c_l + \frac{M_t}{\rho} \quad (35)$$

Donde a su vez, el término M_t se calcula tomando todos los tamaños de cristales (L) y teniendo en cuenta la densidad poblacional (n) tal y como se muestra en la expresión (36). Además, se realizará un ajuste al volumen de un cubo aplicando el factor de forma Φ_v :

$$M_t = \rho_s \cdot \int_0^{\infty} \Phi_v(L) \cdot L^3 \cdot n(L, t) \cdot dL \quad (36)$$

El factor de forma Φ_v partícipe en la expresión superior será variable en función del tamaño de los cristales, definiéndose para el caso de estudio las correlaciones obtenidas por Budz et al. y que se muestran a continuación en las expresiones (37) y (38) [24].

$$\Phi_v(L) = 0,898 \cdot e^{0,168 \cdot \sqrt{1000 \cdot L} - 8,235 \cdot L} \quad \text{si } L \leq 0,1 \text{ mm} \quad (37)$$

$$\Phi_v(L) = 4,460 \cdot e^{-0,0797 \cdot \sqrt{1000 \cdot L} - 0,676} \quad \text{si } L > 0,1 \text{ mm} \quad (38)$$

4.3 Distribución del tamaño de las partículas

La distribución de tamaño de partículas hace referencia a la distribución de cristales en un sistema cristalino, es decir, el cristalizador tomado para el caso de estudio.

A este concepto también se le conoce como distribución de densidad o acumulativa pese a que puede definirse de distintas formas, desde el número de cristales, volumen o masa de los mismos.

Esta distribución es una de las principales características de la población cristalina saliente del sistema ya que puede afectar entre otros a la velocidad de crecimiento, solubilidad o incluso estabilidad del producto final.

Para el modelo planteado, se estudiará este concepto, que se plantea como un porcentaje de la densidad poblacional en los nodos interiores según la expresión (39).

$$DTP = \frac{n(L_i)}{\sum_1^{N_x} n(L_i)} \cdot 100 \quad (39)$$

4.4 Aplicación de la discretización por volúmenes finitos

La ausencia de soluciones analíticas para la expresión (27) ha resultado en la creación de métodos numéricos para resolverla. Estas soluciones numéricas son altamente complicadas debido a la falta de compatibilidad entre las condiciones internas y de contorno. Por esta razón, se han mejorado continuamente los algoritmos matemáticos especializados en la resolución de estos problemas [16].

Otra de las posibles alternativas para la resolución de ecuaciones diferenciales son las técnicas de discretización, donde se encuentra el esquema de volúmenes finitos ya descrito. Este método presenta entre sus ventajas hacer frente a la naturaleza conectiva causada por las ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas, y disminuir la inestabilidad.

Además, las discontinuidades del sistema se pueden ver reducidas empleando un mallado más fino, es decir, realizando una mayor división del dominio espacial [16][15] [6]. De este modo, se transforma la ecuación diferencial del espacio continuo en una serie de ecuaciones discretas para cada una de las divisiones del espacio realizadas.

Para el caso de estudio, como se ha mencionado, la discretización realizada no está referida al cristalizador sino a los tamaños de cristales que se encuentran en él, partiendo de lo que se consideraría tamaño cero hasta el máximo tamaño (descrito como L_N en la **Figura 9**) considerado tal y como se muestra en la ilustración inferior.

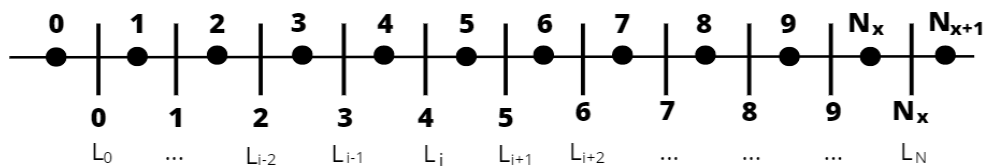


Figura 9: Representación de la discretización por tamaño de cristales

Para tratar de manera genérica dicha división, dado que, tal y como se ha mencionado, el mallado podrá aumentar o disminuir, se consideran N_x celdas y N_x+1 nodos totales.

Mediante la aplicación de este método a las expresiones descritas anteriormente, especialmente al balance de población, se busca poder solucionar el modelo de manera adecuada. Además, para buscar la mejor solución y la mayor aproximación al modelo de referencia sobre el que se va a validar, se plantean distintos casos de discretización.

4.4.1 Caso I: Aplicación del método de diferencias centradas y *upwind*

El método de diferencias regresivas aguas arriba (*upwind*) ya descrito, será empleado para en una única dimensión del espacio. Con este fin, se deberá tener constancia del sentido de la velocidad del flujo u tal y como se muestra en la **Figura 10**.

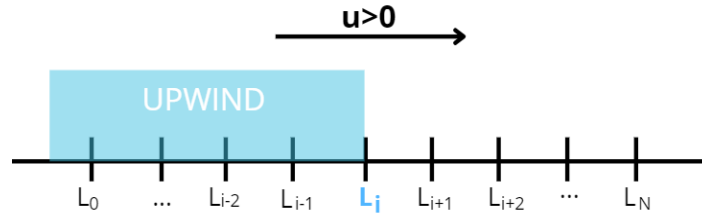


Figura 10: Representación del método de diferencias regresivas aguas arriba (upwind)

Para el caso de estudio se considera únicamente el crecimiento de los cristales, es decir $G > 0$, tomándose el sentido del flujo hacia la derecha tal y como se muestra en la expresión (40) inferior. Definiéndose análogamente en la expresión (41) el caso en que los cristales decrecieran.

Por tanto, aplicando el razonamiento anterior a la expresión 19, concretamente al término $\frac{\partial(G \cdot n)}{\partial L}$ que hace referencia al balance de cristales que llegan a un determinado tamaño y evacúan el cristizador, se obtiene:

$$\frac{\partial(G \cdot n)}{\partial L} = \frac{(G \cdot n)_{L_i} - (G \cdot n)_{L_{i-1}}}{L_i - L_{i-1}} \text{ si } G(L, t) > 0 \quad (40)$$

$$\frac{\partial(G \cdot n)}{\partial L} = \frac{(G \cdot n)_{L_{i+1}} - (G \cdot n)_{L_i}}{L_{i+1} - L_i} \text{ si } G(L, t) < 0 \quad (41)$$

La propiedad transportada en el caso de estudio es la tasa de crecimiento (G) que se rige por la expresión (28). Esta deberá ubicarse en las caras de las celdas que conforman el mallado.

Para el cálculo de dicha tasa de crecimiento (G) y saliendo del método upwind, en primera instancia, se calcula dicha tasa según el método de diferencias centradas aplicado a los nodos internos del mallado. Es decir, la tasa de crecimiento de la cara L_i será la media de la tasa de crecimiento en el nodo N_i y el nodo N_{i+1} tal y como se muestra en la ecuación (42):

$$G_{caras, L_i} = \frac{G_{N_i} + G_{N_{i+1}}}{2} \quad (42)$$

Además, tal y como cabe pensar, la primera cara del mallado se plantea como un caso excepcional. Dado que dicha cara hace referencia a los núcleos se plantea como tal, siendo esta la tasa de crecimiento de los núcleos G_0 descrita según la expresión (30).

Del mismo modo, se podría definir la densidad poblacional por el método de diferencias centradas, no obstante, dado que la variación del nodo a la cara va a ser muy sutil, si se emplea el método upwind considerando que para la cara L_i la densidad va a ser la misma que en el nodo N_i .

Es por ello que, según los razonamientos anteriores, la expresión del balance de población finalmente aplicada a las caras del mallado será de la forma que se representa en la fórmula (43):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{(G_{cara} \cdot n)_{L_i} - (G_{cara} \cdot n)_{L_{i-1}}}{L_i - L_{i-1}} + \frac{n}{\tau} = 0 \quad (43)$$

Además, continuando con la expresión del balance de población y recuperando lo mencionado anteriormente y que aparece representado en la **Figura 9**, la discretización comienza con los núcleos, requiriendo de aplicar para la primera cara del mallado la condición de contorno que se expone a continuación en la expresión (44), y cuyos parámetros ya se han descrito previamente:

$$n(L_0) = \frac{B_o}{G_o} = \frac{4,12 \cdot 10^{14} \cdot Mt \cdot \sigma^{3,4}}{847 \cdot \sigma^2 \cdot 10^{-3}} \quad (44)$$

Tratado este caso en el que la tasa de crecimiento se plantea por el método de diferencias centradas y la densidad poblacional por el método upwind, cabe mencionar que se pueden plantear variaciones de esta.

En relación a esto y como segundo intento de aproximar el modelo con la mayor exactitud al modelo de referencia se calcula la tasa de crecimiento directamente en las caras aplicando la expresión (28) de la forma que se muestra a continuación en la expresión (45):

$$G_{caras}(L_x) = 892 \cdot \sigma^2 \cdot (1 + 5,87 \cdot L_x) \quad (45)$$

Es decir, en este caso la tasa de crecimiento en lugar de calcularse en los nodos e interpolar para obtener dicho valor en las caras, se evalúa directamente para cada tamaño de las caras (L_x). Consiguiendo de este modo reducir los errores por aproximación que se podían dar en el primer caso, y manteniendo la forma de trabajar con la densidad poblacional.

4.4.2 Caso II: Aplicación de métodos de alta resolución

Los métodos de alta resolución, tal y como se ha mencionado, se aplican con el fin de obtener unos resultados más precisos. Además, se nombraron una serie de posibles funciones de limitación de flujo aplicables a la expresión (18).

En el caso de estudio se aplica la función limitadora de flujo de Sweby que se presenta en la expresión (46):

$$Z(r_i) = \max\left(0, \min\left(\frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot r_i, 2\right)\right) \quad (46)$$

5. VALIDACIÓN DEL MODELO

El punto de validación del modelo es una etapa crucial en la evaluación de cualquier modelo matemático o numérico. En esta etapa, se comparará el modelo realizado mediante una discretización a partir de volúmenes finitos con uno realizado en la tesis de Min Oh de 1995 [20] y transcrito a Aspen Custom Modeler con una discretización realizada con el método de diferencias finitas. El objetivo de esta comparación es verificar la precisión y la capacidad de predicción del modelo y determinar si es adecuado para su uso en aplicaciones prácticas.

5.1 Validación del modelo mediante la discretización por el método de diferencias centradas y upwind

Tal y como se ha explicado, para la elaboración del modelo, en primera instancia se planteó la tasa de crecimiento según el método de diferencias centradas, mientras que la densidad poblacional se obtenía por el método de diferencias regresivas aguas arriba o upwind.

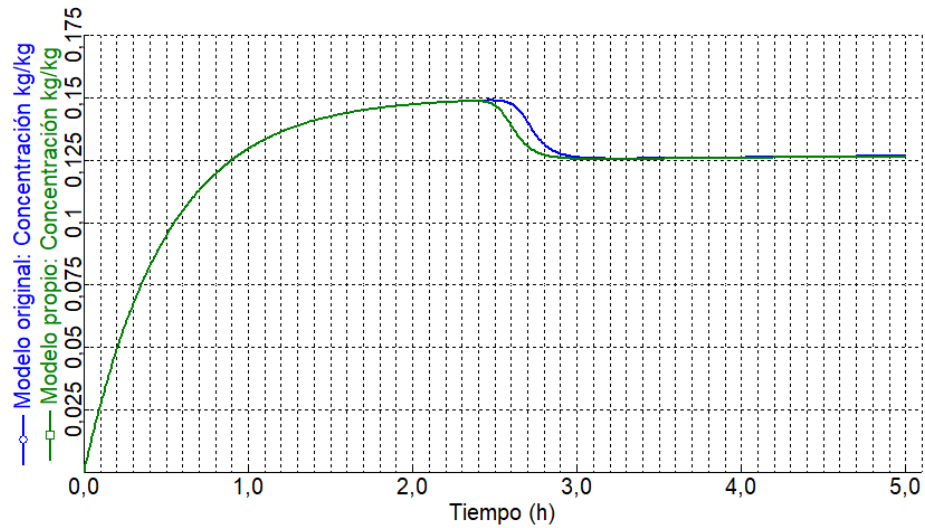
Para asegurar la validez del modelo se establecieron las mismas condiciones de operación que en la tesis a comparar. Dichos datos aparecen en la **Tabla 1**: Datos de las condiciones de operación del modelo.

Tabla 1: Datos de las condiciones de operación del modelo

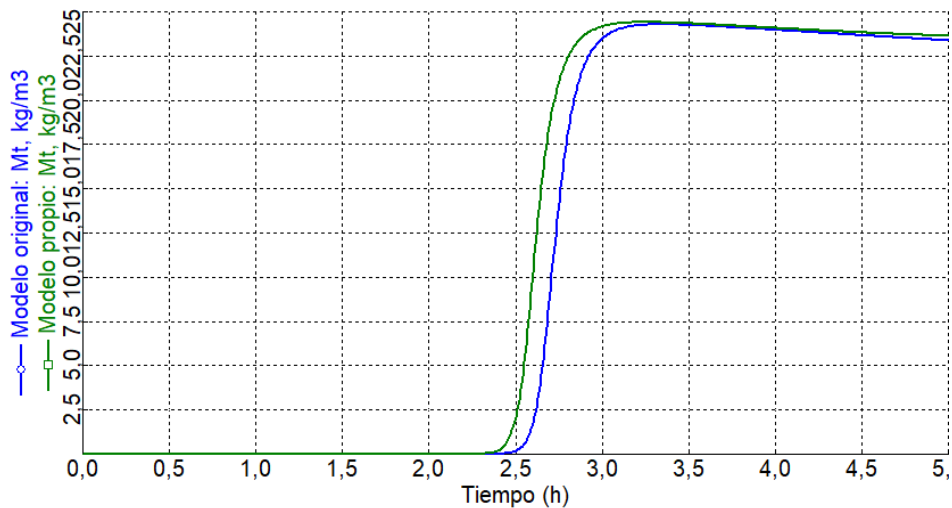
Descripción	Nombre en el modelo	Valor y unidades
Tamaño máximo de cristales	Max_Size	1,5 mm
Concentración de entrada	C_{in}	0,15 kg/kg
Temperatura	Temp	25°C
Flujo másico	W	100 kg/h
Densidad del disolvente	ρ	1000 kg/m ³
Densidad de los cristales	ρ_s	2660 kg/m ³
Volumen del cristalizador	V	0,05 m ³

Planteando las condiciones superiores y aplicando en Aspen Custom Modeler las expresiones señaladas en el punto 4 donde se describe el modelo, se realiza una primera validación de lo que anteriormente se ha denominado como “Caso I”.

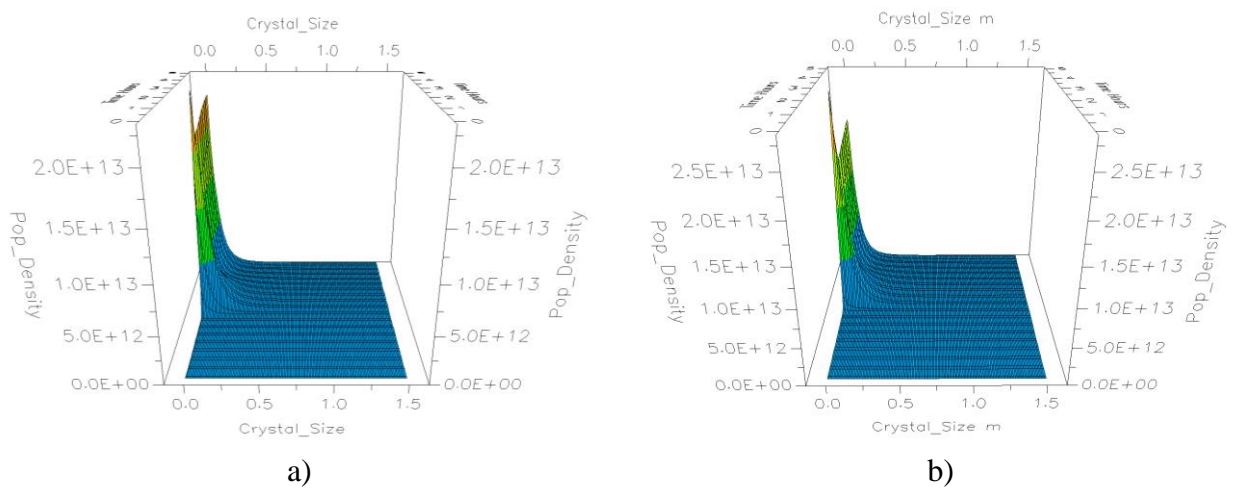
La **Gráfica 1**, **Gráfica 2** y **Gráfica 3** muestran la comparación de distintas propiedades entre modelos, como la concentración, densidad del magma o densidad poblacional respectivamente. De este modo se busca que el modelo propio se ajuste de la manera más precisa posible al modelo original.



Gráfica 1: Representación 1 comparativa de las concentraciones de los modelos frente al tiempo



Gráfica 2: Representación 1 comparativa de las densidades de magma de los modelos frente al tiempo

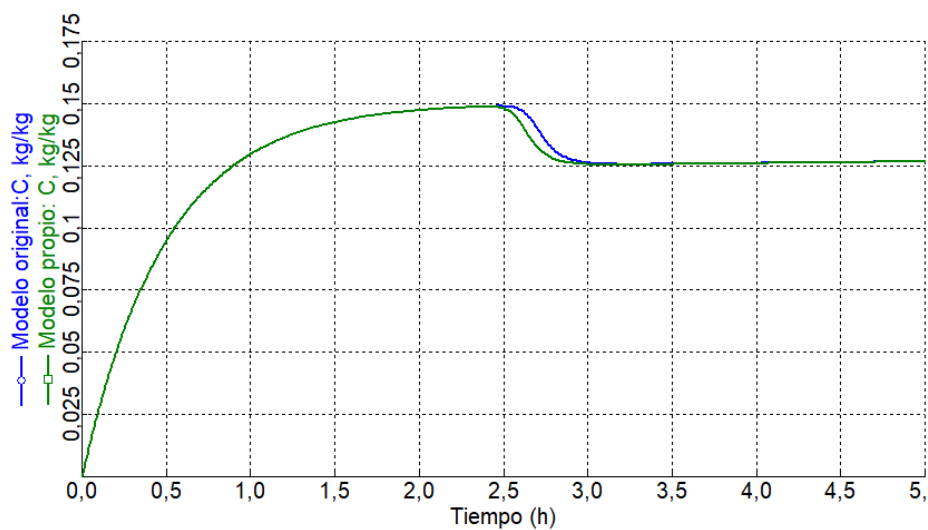


Gráfica 3: Representación de las densidades poblacionales de los modelos: (a) Modelo propio; (b) Modelo original

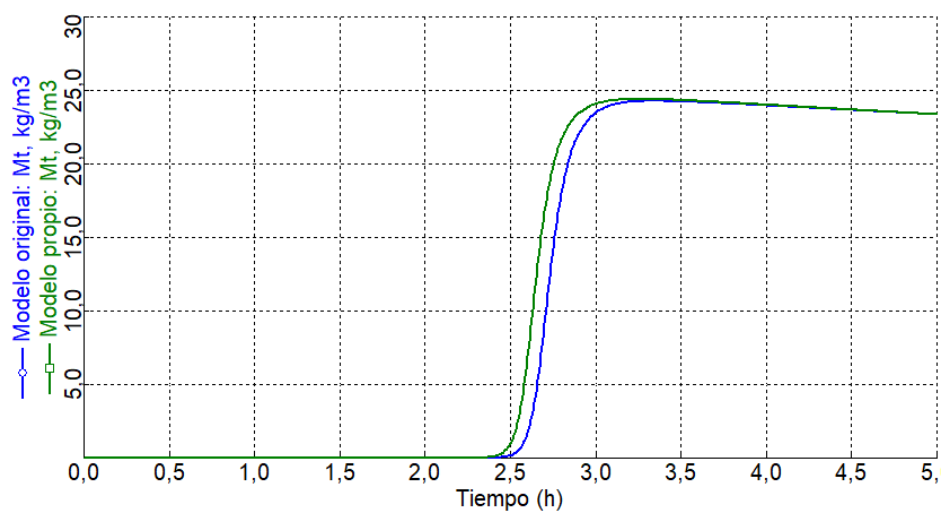
Si se observan todas ellas se aprecia claramente una desviación en todas. Para descartar un error en el modelo planteado se recurre a ejecutar la segunda parte del denominador como “Caso 1”.

En esta segunda iteración se busca un mayor acercamiento al modelo, planteando en este caso cálculo de la tasa de crecimiento directamente sobre las caras de las celdas que componen el mallado. De este modo, se consigue descartar que las pequeñas desviaciones producidas entre gráficas se deban a errores de aproximación debido al uso de diferencias centradas en el cálculo de la tasa de crecimiento (G).

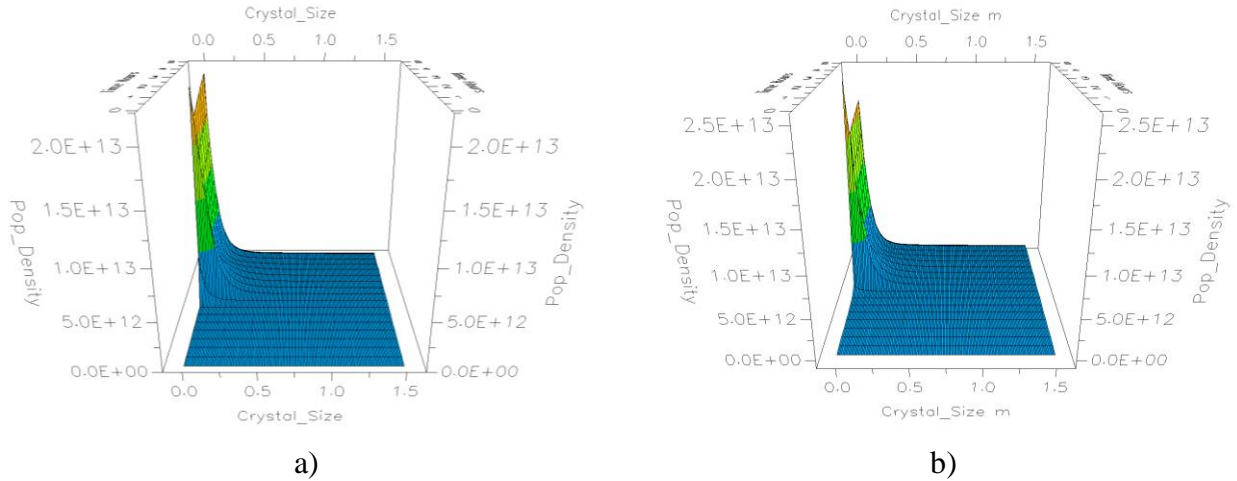
De manera análoga al caso anterior se exponen a continuación la misma comparación de gráficas entre modelos.



Gráfica 4: Representación 2 comparativa de las concentraciones de los modelos frente al tiempo



Gráfica 5: Representación 2 comparativa de las densidades de magma de los modelos frente al tiempo



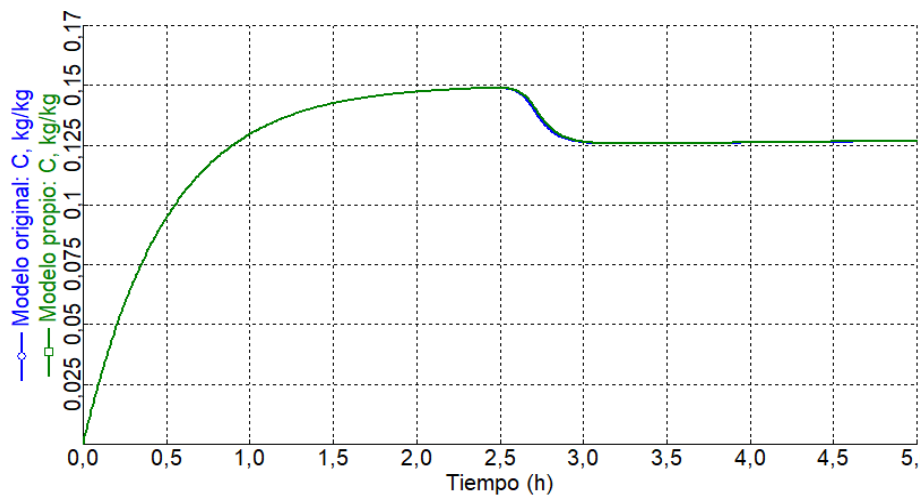
Gráfica 6: Representación 2 de las densidades poblacionales de los modelos: (a) Modelo propio; (b) Modelo original

En este caso al observar las denominadas **Gráfica 4**, **Gráfica 5** y **Gráfica 6** se aprecia un ligero cambio entre gráficas hacia una mayor similitud entre modelos. Esto lleva a pensar en errores de redondeo y aproximación por parte de los métodos empleados en lugar de que se trate de un modelo fallido.

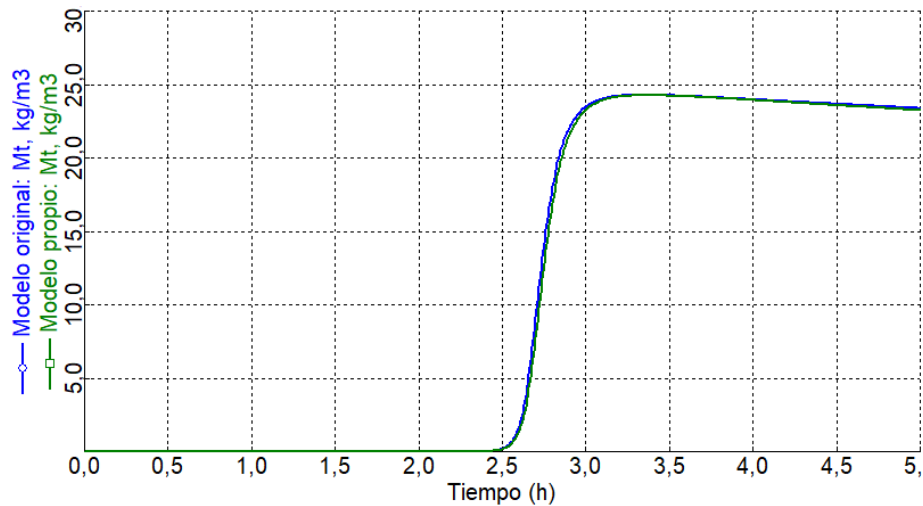
5.2 Validación del modelo mediante la discretización por el esquema combinado de κ

Para continuar con la validación del método se ha aplicado el esquema combinado κ que se representa en las expresiones (14), (15), (16) y (17).

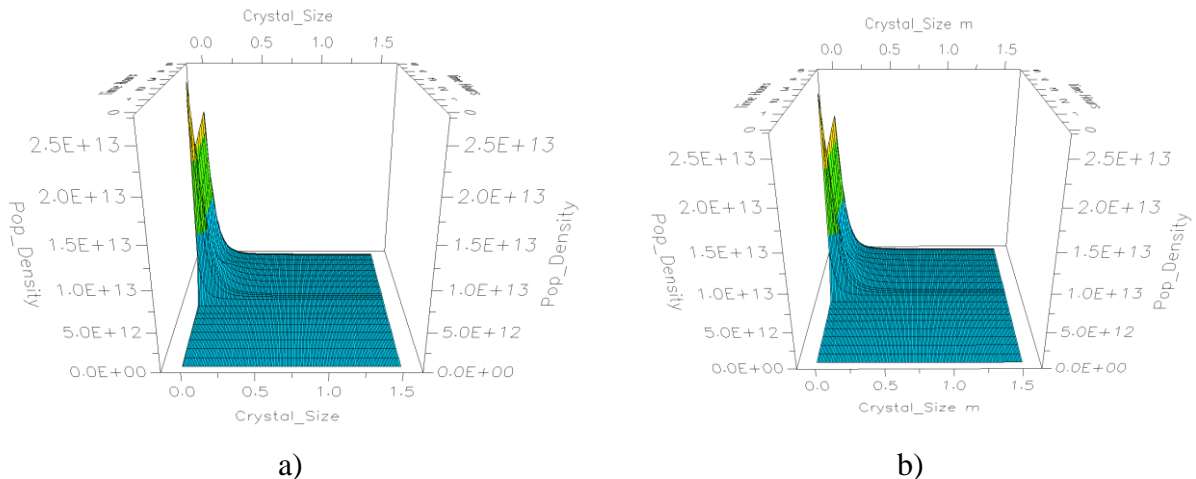
Los resultados se observan en la **Gráfica 7**, **Gráfica 8** y **Gráfica 9** donde se aprecia que el modelo queda mucho más próximo al original tal y como cabía esperar.



Gráfica 7: Representación de la comparativa de concentraciones aplicando métodos de alta resolución



Gráfica 8: Representación de la comparativa de densidades del magma aplicando métodos combinado

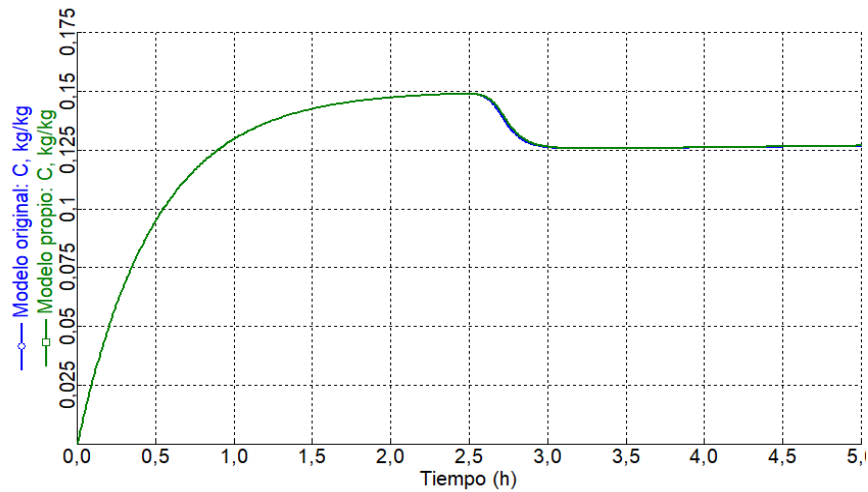


Gráfica 9: Representación de las densidades poblacionales de los modelos aplicando métodos de alta resolución: (a) Modelo propio; (b) Modelo original

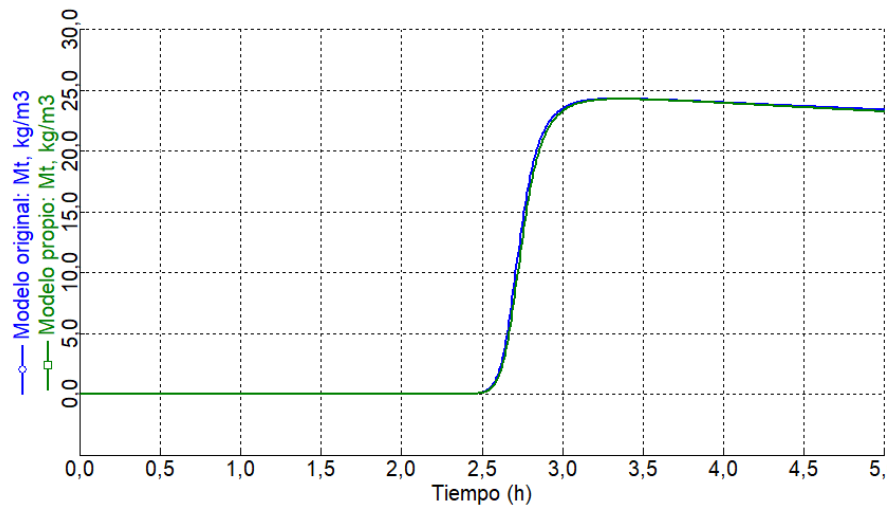
5.3 Validación del modelo mediante la discretización por métodos de alta resolución

Para terminar de comprobar la validez del modelo se recurre a lo que se ha denominado como “Caso II”, es decir, se probarán el esquema de Sweby de alta resolución.

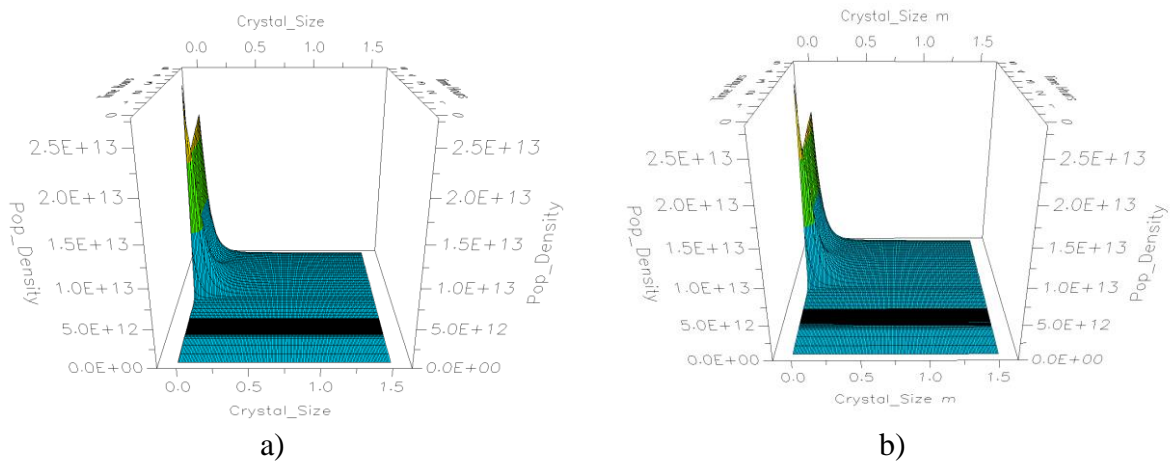
Previo a su ejecución y habiendo observado los resultados anteriores, cabe esperar unas gráficas donde ambos modelos se solapen dado que estos modelos deberían atenuar cualquier tipo de oscilación que pudiera ocurrir. El resultado se observa en la **Gráfica 10**, **Gráfica 11** y **Gráfica 12**.



Gráfica 10: Representación de la comparativa de concentraciones aplicando métodos de alta resolución (Sweby)



Gráfica 11: Representación de la comparativa de densidades del magma aplicando métodos de alta resolución (Sweby)



Gráfica 12: Representación de las densidades poblacionales de los modelos aplicando métodos de alta resolución (Sweby): (a) Modelo propio; (b) Modelo original

Como se ha podido observar ocurre lo que ya se había predicho, un mejor ajuste del modelo en comparación con las pruebas anteriores.

No obstante, si se presta gran atención a las **Gráfica 10** y **Gráfica 11** obtenidas, pese a ser las más cercanas al modelo original, presentan una diferencia con este de en torno a $4 \cdot 10^{-5}$. Esta cantidad pudiera considerarse insignificante, sin embargo, cabe buscar posibles hipótesis a las que se debe.

La razón de mayor peso para que se produzca esta pequeña diferencia entre modelos se puede deber principalmente a la diferencia en el escalado de los modelos, es decir, mientras que el modelo original se realiza en base logarítmica para evitar posibles errores por las magnitudes tan grandes que se tratan, el modelo que se ha desarrollado para este trabajo de fin de grado no.

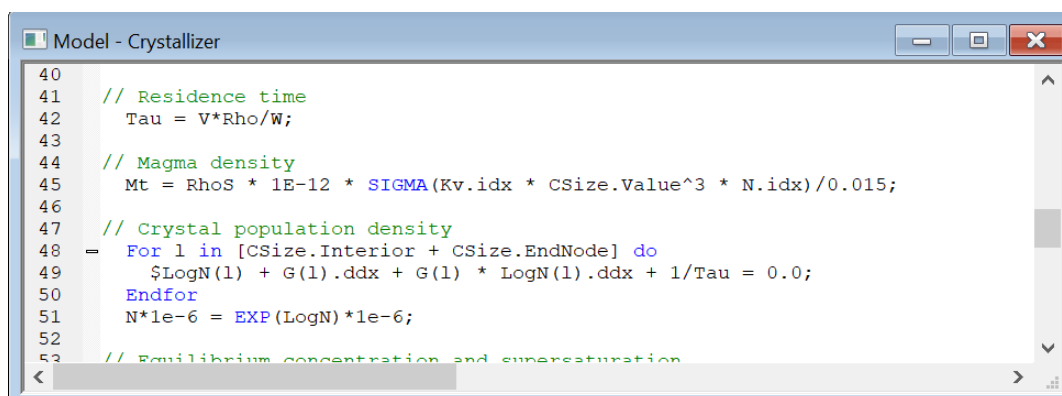
Además, otra posible fuente de ese pequeño fallo puede deberse nuevamente a diferencias entre modelos ya que, mientras el modelo que se desarrolla en este estudio se apoya de la discretización por volúmenes finitos, el modelo original con el que se contrasta se realiza con el método de diferencias finitas, dos métodos igual de válidos pero que pueden presentar variaciones uno respecto al otro.

Pese a esto se puede concluir que el modelo desarrollado es válido.

5.4 Errores Aspen Custom Modeler

Tras realizar la validación del modelo por medio la iteración con diversos esquemas en busca de la mayor aproximación posible al modelo original que toma base en la tesis de Min Oh, se detectó un error en la simulación del modelo de referencia, concretamente en el cálculo de la densidad del magma (M_t).

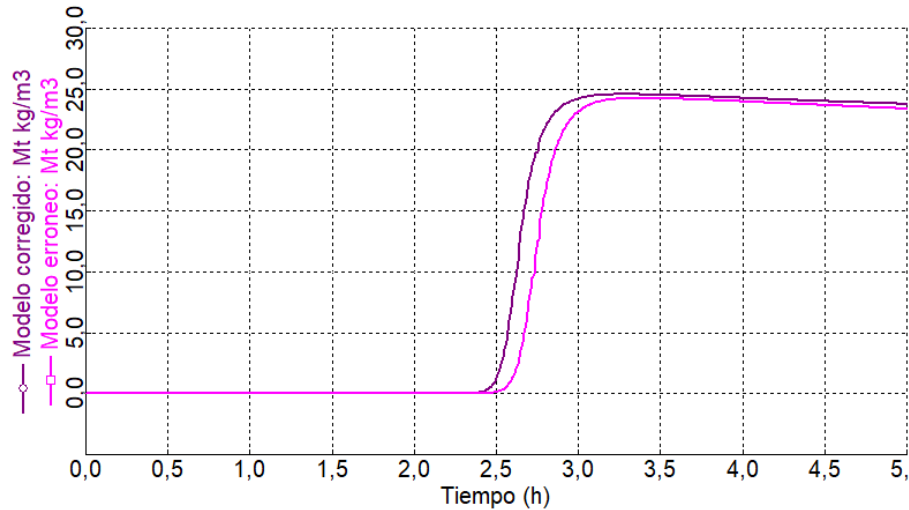
El código del modelo original se muestra en la **Figura 11**, donde la integral queda dividida por el factor 0.015, que no tiene cabida en ella. La búsqueda de la mayor similitud entre el modelo realizado en el software con la tesis mencionada anteriormente posiblemente fuera la causante de esta equivocación.



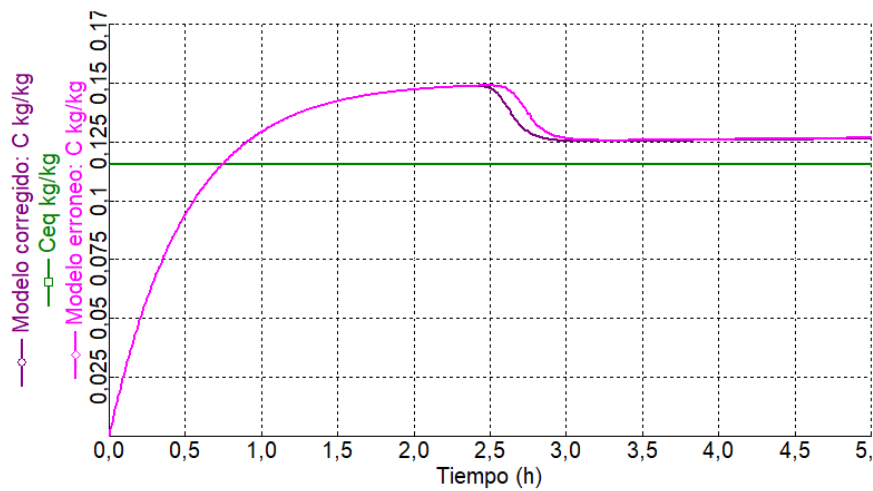
```
40
41 // Residence time
42 Tau = V*Rho/W;
43
44 // Magma density
45 Mt = RhoS * 1E-12 * SIGMA(Kv.idx * CSize.Value^3 * N.idx)/0.015;
46
47 // Crystal population density
48 = For l in [CSize.Interior + CSize.EndNode] do
49   $LogN(l) + G(l).ddx + G(l) * LogN(l).ddx + 1/Tau = 0.0;
50 Endfor
51 N*1e-6 = EXP(LogN)*1e-6;
52
53 // Equilibrium concentration and supersaturation
```

Figura 11: Captura del código erróneo del modelo de Aspen Custom Modeler

Corrigiendo dicho fallo, la diferencia entre el modelo erróneo y el modelo corregido se muestra a continuación en **Gráfica 13** y la **Gráfica 14** referidas a la densidad del magma y la concentración respectivamente.



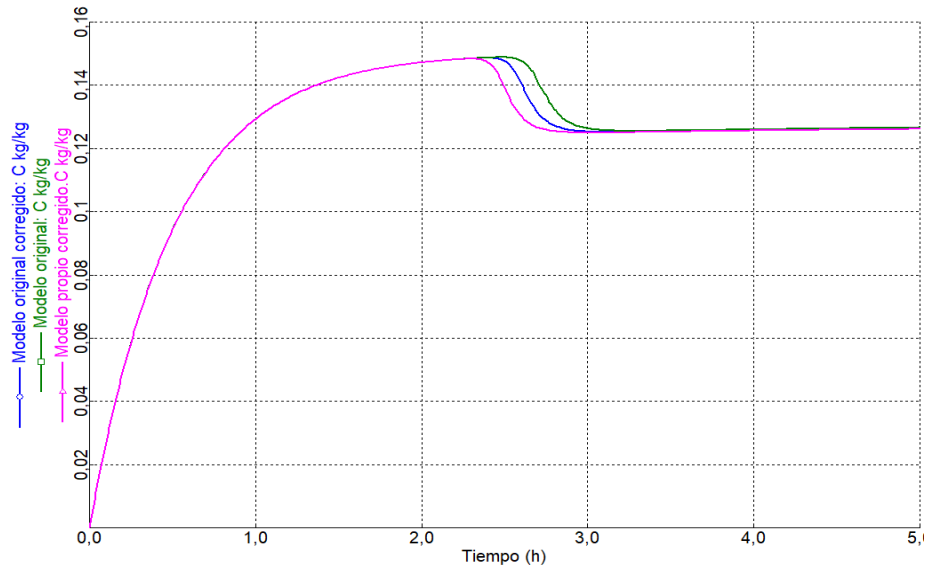
Gráfica 13: Comparación de la densidad del magma obtenida con el modelo original erróneo y el corregido



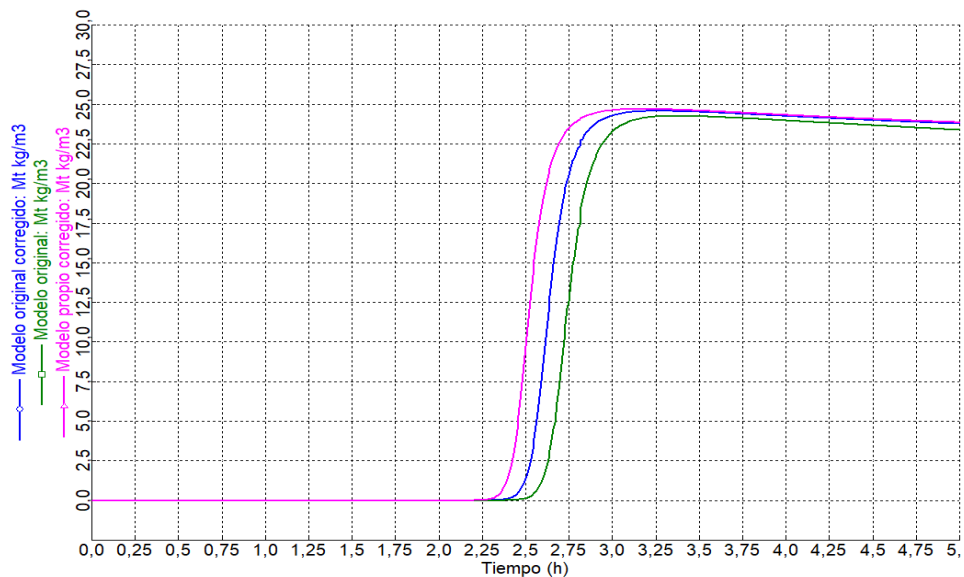
Gráfica 14: Comparación de la concentración obtenida con el modelo original erróneo y el corregido

Entre ambas curvas se observa una desviación.

Si esta comparación se lleva a cabo junto al modelo realizado sobre el que se han ido aplicando métodos de resolución más aproximados en búsqueda de un mayor acercamiento al modelo original, se observa lo que aparece en la **Gráfica 15** y **Gráfica 16**, es decir, un alejamiento entre los 3 modelos.



Gráfica 15: Comparación de la concentración entre el modelo original, el corregido y el modelo propio



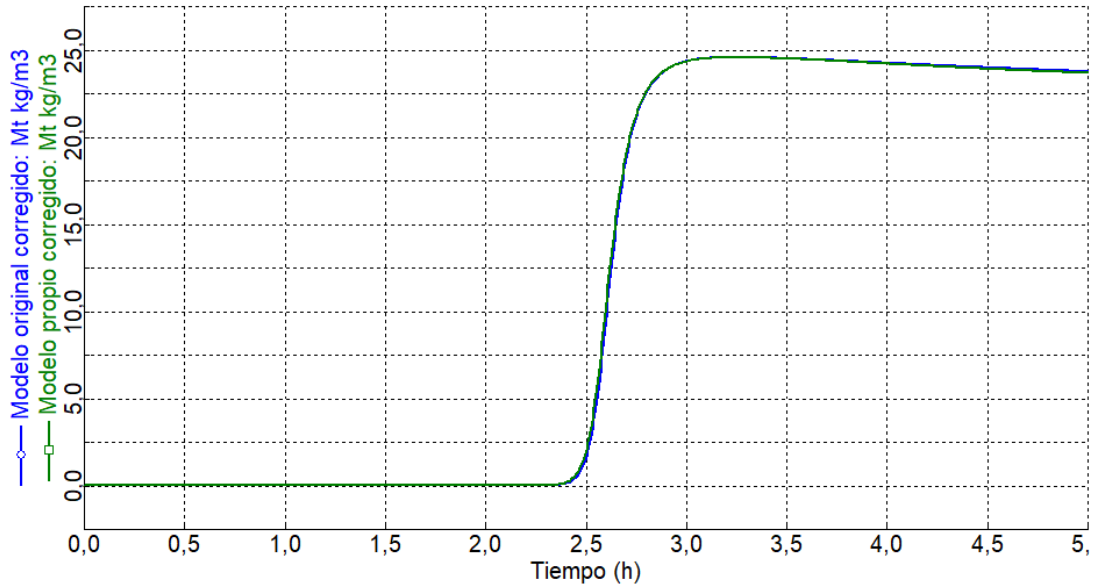
Gráfica 16: Comparación de la densidad del magma entre el modelo original, el corregido y el modelo propio

Llegados a este punto cabe anotar nuevamente que el modelo se realizó desde un inicio con el propósito de acercarse al modelo original. No obstante, siendo conocedores de este error, ahora se podrán llevar a cabo las modificaciones pertinentes que se habían realizado en un inicio para acercar ambos modelos.

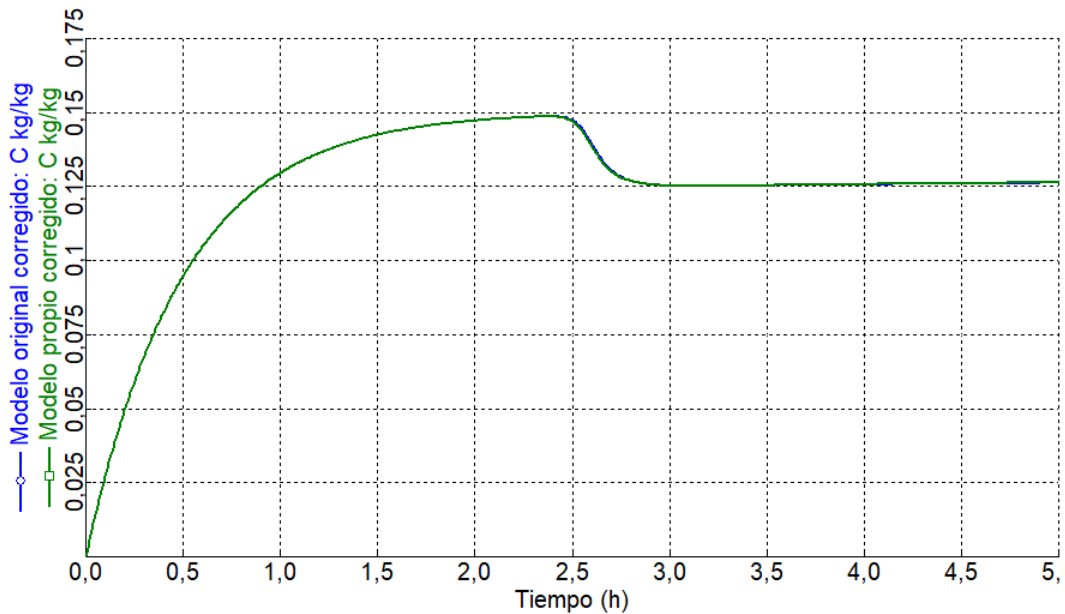
La principal modificación es la división entre el factor 1.5, añadido al comienzo y que, una vez comprobado que se debía a un error del modelo original se puede eliminar.

Ahora es necesario buscar las causas que producen el alejamiento entre el modelo correcto y el realizado. Para ello como primera iteración cabe comprobar que ocurre si el modelo con el

que se compara es el realizado por medio de los métodos de alta resolución que ya en un comienzo mostraba un mayor acercamiento. Si se corrigen ambos modelos, el original y el modelo propio se obtienen la **Gráfica 17** y la **Gráfica 18** donde se observa una ligera diferencia en la tendencia en comparación a las curvas de la **Gráfica 10** y la **Gráfica 11** debida a las modificaciones realizadas.



Gráfica 17: Comparación de la densidad del magma para ambos modelos corregidos

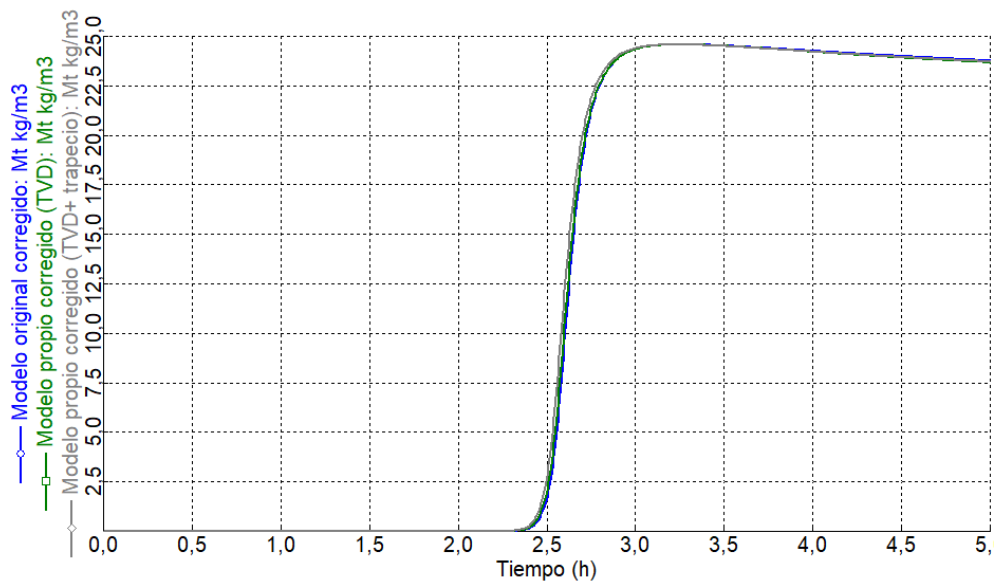


Gráfica 18: Comparación de la concentración para ambos modelos corregidos

Para continuar con este análisis se ha decidido comprobar que sucede si se realiza la integral de la expresión (36) empleando en este caso el método del trapecio según la expresión (47).

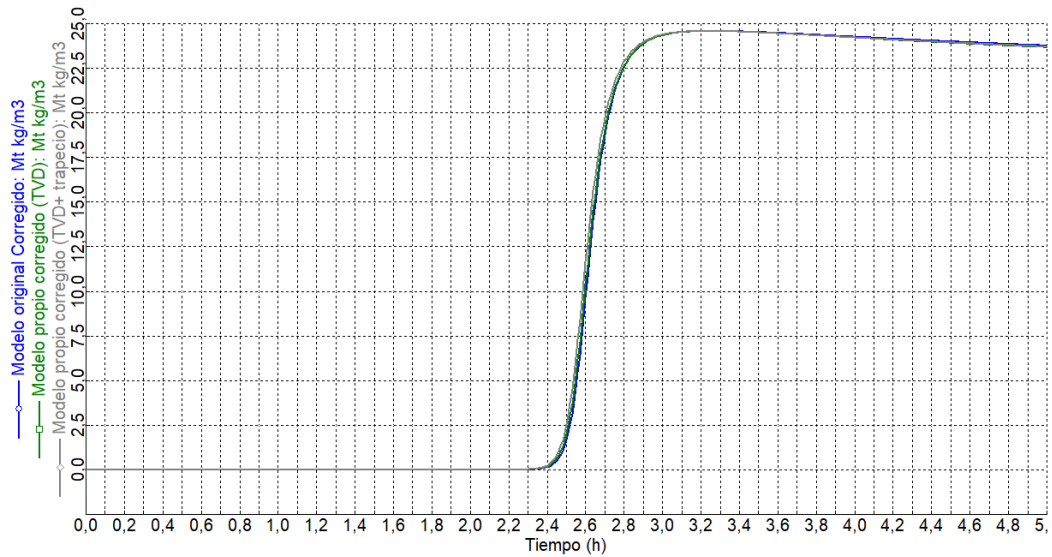
$$M_t = \rho_s \cdot \left[\frac{\Phi_v(L_i) \cdot L_i^3 \cdot n(L_i) + \Phi_v(L_{i-1}) \cdot L_{i-1}^3 \cdot n(L_{i-1})}{2} \cdot dx \right] \quad (47)$$

De este modo si se compara el modelo original corregido calculando la densidad del magma del modelo realizado con el esquema de Sweby por medio de una aproximación por rectángulos y dicha densidad calculada por el método del trapecio, se observa en la **Gráfica 19** que no existe una gran desviación entre ambos casos.



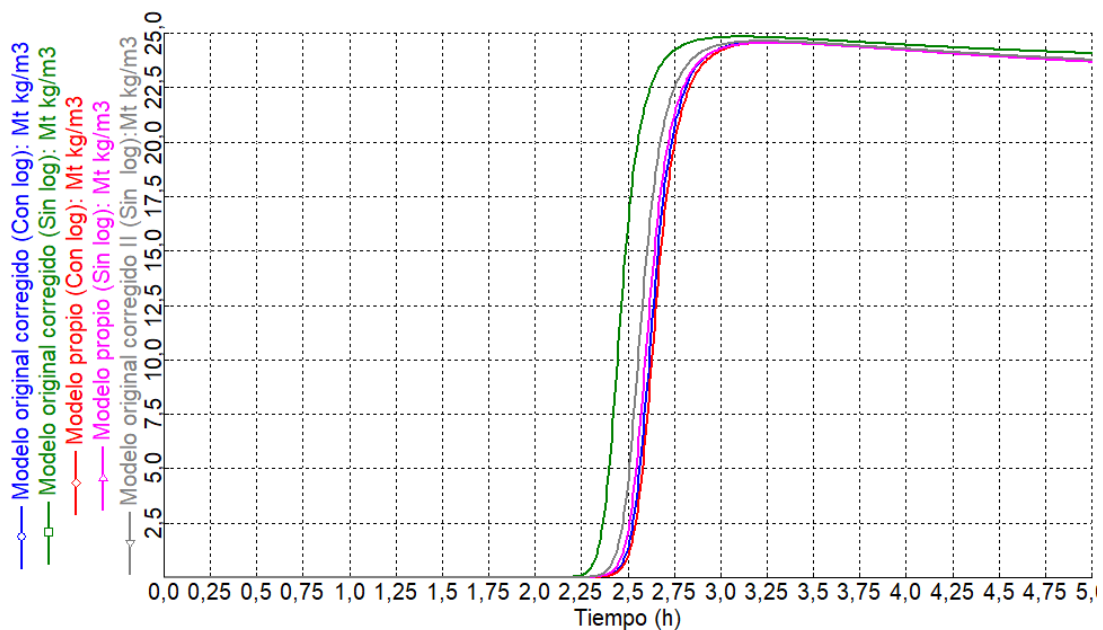
Gráfica 19: Comparación de los modelos realizando la integral de la densidad el magma por dos métodos

Del mismo modo se realizó nuevamente el análisis anterior, pero en este caso ampliando la cantidad de nodos del mallado pasando de una cantidad de 150 a 250 celdas. Tal y como muestra la **Gráfica 20** y como cabía esperar se produce una mayor proximidad entre modelos que podría seguir aumentando con el mallado. No obstante, también se deberá tener en cuenta que a medida que se aumenta el mallado el tiempo de ejecución real del programa aumenta de manera considerable.

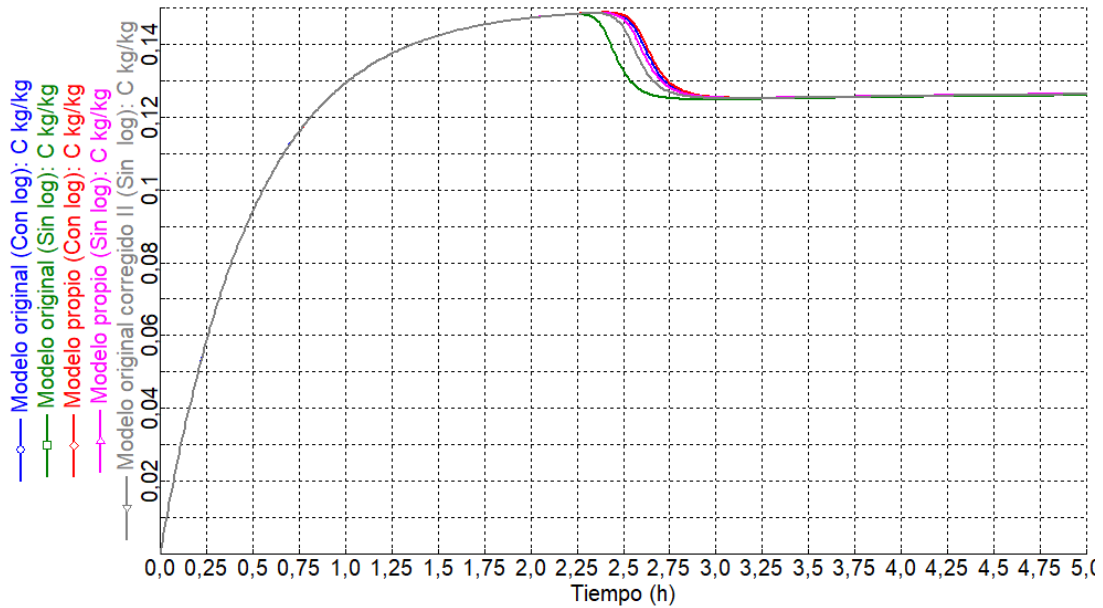


Gráfica 20: Comparación de los modelos realizando la integral de la densidad el magma por dos métodos aumentando el mallasado

Por último, se comprobó la influencia que tienen los logaritmos en los modelos realizados. El modelo de origen sobre el que se basa este estudio plantea la densidad poblacional (n) como un logaritmo debido a la magnitud de los valores que se obtienen, es por ello que se plantea la **Gráfica 21** y la **Gráfica 22** donde se observa el modelo original con y sin presencia de logaritmos, y el modelo realizado, que en un principio no tiene logaritmos, con ellos.



Gráfica 21: Influencia logarítmica en el cálculo de la densidad del magma



Gráfica 22: Influencia logarítmica en el cálculo de la concentración

No obstante, tal y como se observa, en las gráficas superiores se presenta el modelo original con dos mallados. El modelo con la tendencia más alejada es aquel con un mallado de menor tamaño, mientras que el modelo al cual se le ha aumentado el número de divisiones realizadas del mallado se encuentra mucho más cerca del resto de curvas.

Es por ello que se puede concluir que la presencia de logaritmos si tiene un efecto en los resultados, especialmente en modelos realizados con mallados pequeños.

5.5 Resolución del mallado

La resolución del mallado consiste dar con la cantidad adecuada de nodos en los que se debe dividir el dominio. Este paso será el último de los necesarios para poder validar el modelo ya que podrá conseguir una mayor aproximación al modelo original.

Se busca aquella malla que permita obtener adecuadamente el resultado, así como sus detalles y variaciones, y que, además, presente un equilibrio entre la precisión y el coste computacional que supone. Es decir, la adecuada definición del mallado jugará un papel de gran importancia en la precisión, estabilidad y eficiencia de las soluciones que se obtengan.

Para llevar a cabo esto, se itera variando la cantidad de nodos N_x que definen el mallado, de forma que se observa cómo afectan a la propiedad más relevante que se evalúa en este estudio, la distribución de tamaños de partícula que se representa según la expresión (39).

Se toma como solución final aquel mallado más pequeño a partir del cual no se produzcan cambios relevantes en la propiedad evaluada. De este modo, se garantiza en gran medida la precisión, y, además, al tomar el mallado más pequeño, se disminuye el coste computacional.

Todo este proceso de iteración se aplica al modelo que se apoya en los métodos de alta resolución para resolverlo, concretamente en el que se aplica el esquema de Sweby, y del cual se ha obtenido la solución más óptima.

En primer lugar, se estudiaron los casos a), b), c) y d) de la **Figura 12** y **Figura 13**, donde los mallados eran de 150, 250, 300 y 350 celdas. Tal y como se puede observar en las dos figuras inferiores realizadas al comienzo y al final de la simulación existen diferencias notables entre ellas, teniendo así, que recurrir a una nueva iteración del mallado.

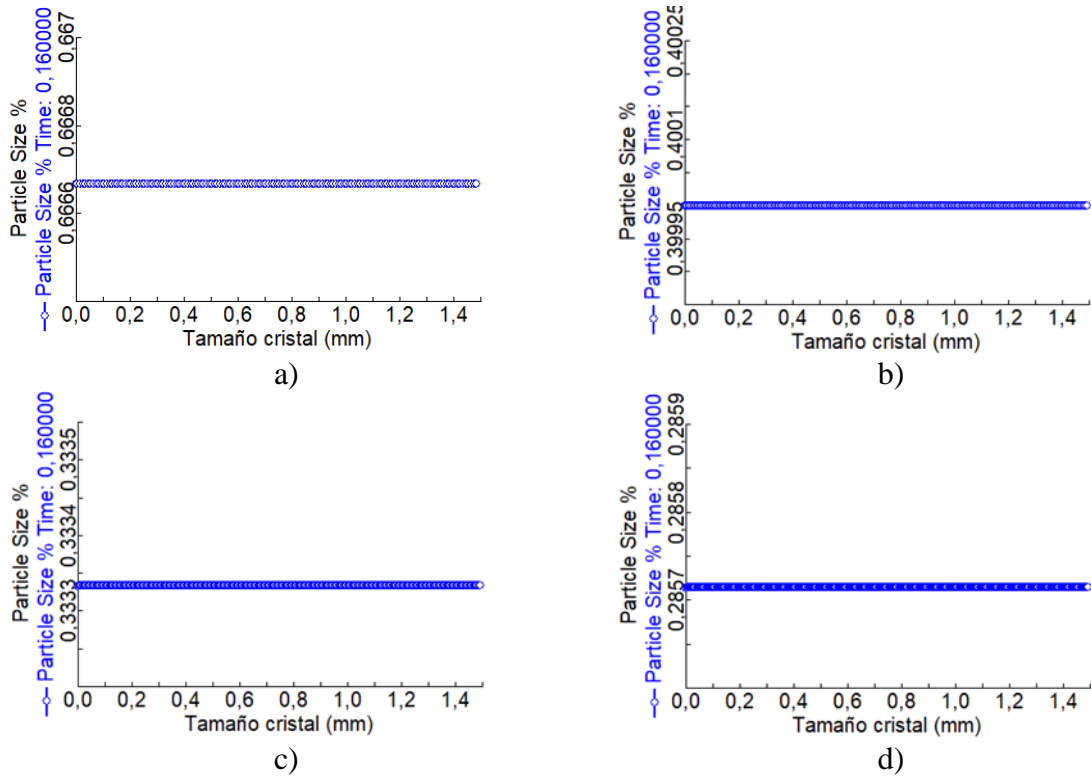
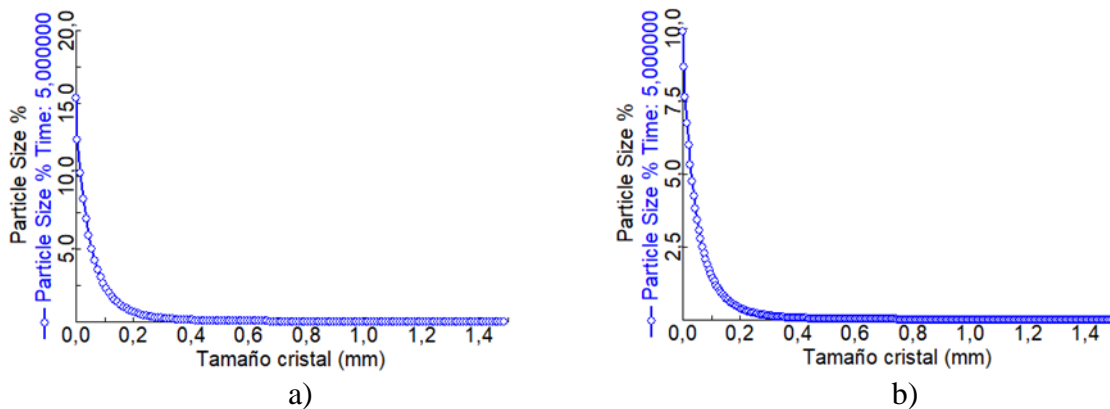


Figura 12: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al comienzo de la simulación para distintos tamaños de mallado. (a)150 celdas (b)250 celdas (c) 300 celdas (d) 350 celdas



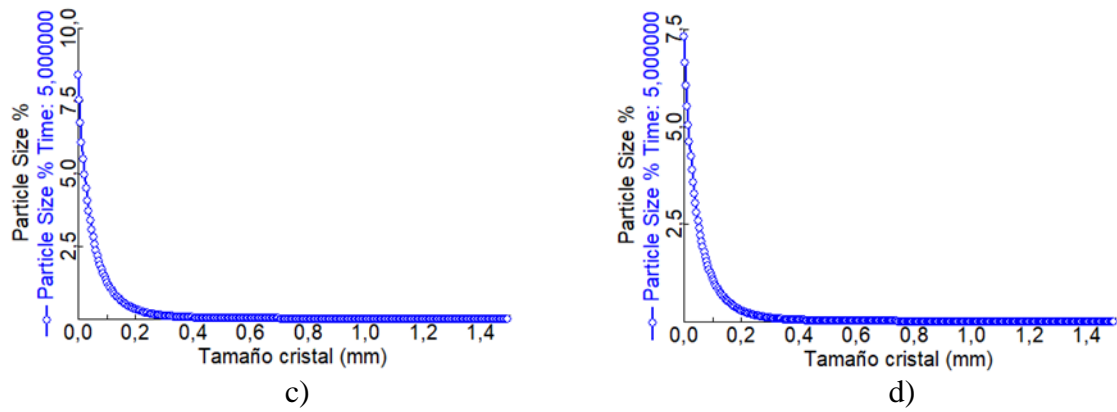


Figura 13: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al final de la simulación para distintos tamaños de mallado. (a)150 celdas (b)250 celdas (c) 300 celdas (d) 350 celdas

La siguiente iteración se realiza de manera análoga analizando mallados cada vez mayores. Se estudiaron mallados con 400, 500, 600, 700 celdas, donde si se analizan gráficamente estos dos últimos como se muestra en la **Figura 14** no se puede apreciar a priori ninguna diferencia.

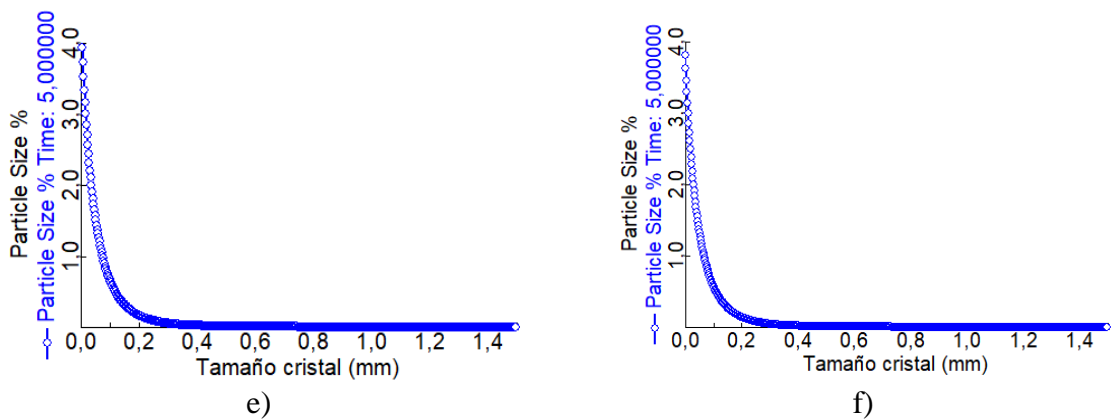


Figura 14: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al final de la simulación para distintos tamaños de mallado. (e)600 celdas (f)700 celdas

Es por ello que se representa en la **Tabla 2** los distintos valores en porcentaje de las distribuciones por tamaño de partícula para unos intervalos de tamaños concretos seleccionados aleatoriamente.

Tabla 2: Distribución de tamaños de partícula para unos tamaños concretos en distintos mallados

LC (mm)	PSD (%)			
	400 nodos	500 nodos	600 nodos	700 nodos
0-0,1	75,6670	74,6160	74,7928	75,0792
0,1-0,2	14,9100	15,7786	15,3808	15,0299
0,2-0,3	4,9913	4,9765	5,0866	5,0973

LC (mm)	400 nodos	500 nodos	600 nodos	700 nodos
0,3-0,5	2,9565	3,1138	3,1777	3,1928
0,5-0,8	1,0426	1,0816	1,1214	1,1515
0,8-1	0,2393	0,2380	0,2444	0,2504
1-1,5	0,2219	0,2192	0,2168	0,2169

De este modo, tal y como se puede apreciar entre los dos últimos mallados las diferencias no son lo suficientemente elevadas como para afectar de manera relevante a la solución, y es por ello que se puede concluir con que el mallado adecuado es aquel con 600 nodos.

Además, tal y como se mencionó, no solo es relevante obtener unos resultados lógicos, precisos y que no cambien en exceso, sino que el tiempo de ejecución también será un parámetro a tener en cuenta. Para poder analizar esto también se ha realizado la con los tiempos de ejecución de la iteración con los últimos 4 mallados (**Tabla 3**).

Tabla 3: Tiempos de ejecución de distintos mallados

MALLADO	TIEMPO
400 NODOS	1 min 26 segundos
500 NODOS	1 min 35 segundos
600 NODOS	1 min 46 segundos
700 NODOS	2 min

Los tiempos que aparecen en la tabla superior no son exactos ni precisos dado que son los que proporciona el programa, notándose una gran diferencia si se cronometra la ejecución de manera externa al programa. Además, cabe anotar que las simulaciones se ejecutan por medio de un servidor externo, produciendo una mayor lentitud en la resolución el problema.

Es por todo lo anterior que cabe pensar que no sea práctico llevar a cabo todo el análisis de resultados que se muestra a continuación con 600 nodos.

Si en la tabla inferior (**Tabla 4**) se muestra el mismo análisis de porcentajes de distribución de partículas por intervalos de tamaños, pero en este caso comparando la simulación realizada con 600 y 150 nodos, se pueden apreciar unas diferencias mayores que para los casos analizados anteriormente.

Tabla 4: Distribución de tamaños de partícula para unos tamaños concretos en distintos mallados

LC(mm)	PSD (%)	
	150 nodos	600 nodos
0-0,1	78,0014	74,7928
0,1-0,2	13,5148	15,3808
0,2-0,3	4,1615	5,0866
0,3-0,5	2,5030	3,1777

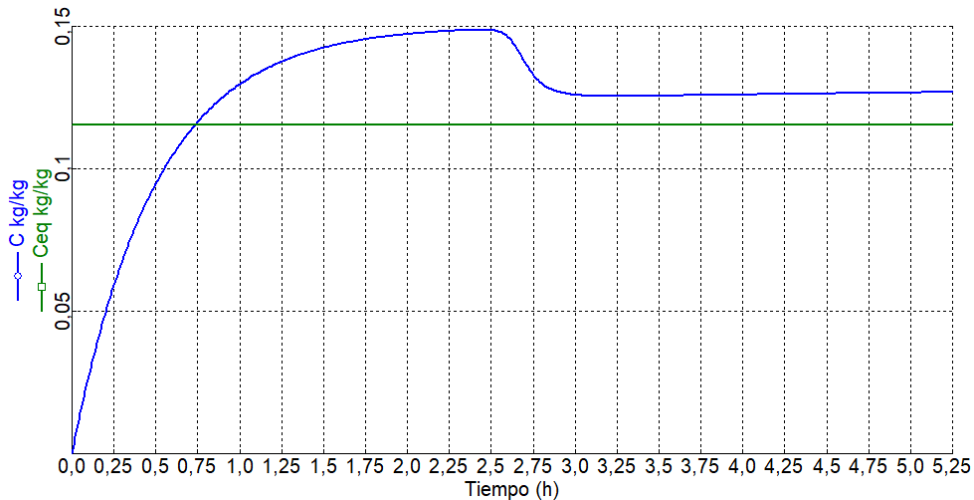
LC(mm)	150 nodos	600 nodos
0,5-0,8	1,2124	1,1214
0,8-1	0,3343	0,2444
1-1,5	0,2728	0,2168

No obstante, dada la baja variabilidad de tendencias entre los resultados gráficos obtenidos con dichos nodos y una diferencia de tiempo de ejecución entre ambos casos de más de un minuto, hace que se puedan considerar razonables las diferencias entre resultados y se procederá a hacer el análisis de resultados para la cantidad de 150 nodos.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Tras la validación del modelo cabe analizar los resultados obtenidos y su variabilidad modificando parámetros.

Tal y como se muestra en la **Gráfica 23** inferior la concentración crecerá pasando la concentración en el equilibrio además de la concentración de la disolución de entrada.



Gráfica 23: Representación de la concentración frente al tiempo para el modelo validado

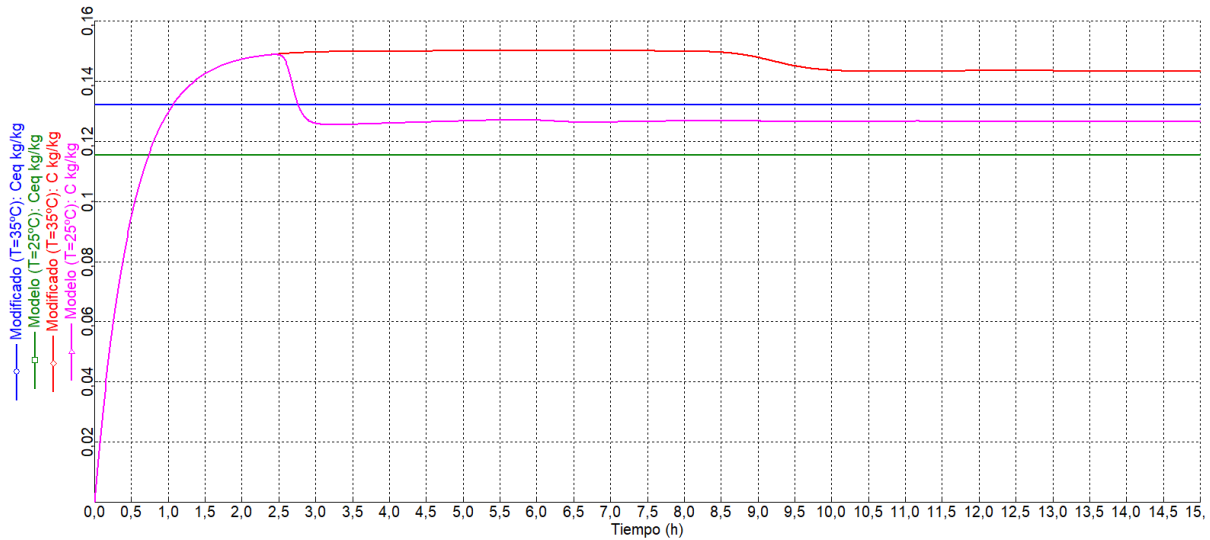
Esto que se observa permite ilustrar el proceso de cristalización, ya que la tendencia que sigue la curva de la concentración se debe a los fenómenos de sobresaturación, nucleación y crecimiento.

La subida de la concentración hasta situarse por encima de la de equilibrio genera el fenómeno de sobresaturación descrito en puntos anteriores, y que hace referencia a un aumento de soluto (sulfato de potasio) en la disolución. Esto a su vez, derivará en la formación y crecimiento de cristales, es decir, se impulsa el fenómeno de nucleación.

En esta situación, a medida que se van formando núcleos de cristales, otros van creciendo por medio de la incorporación de soluto a su hábito cristalino. A esto se puede deber el aumento inicial de la concentración, que proseguirá con una disminución debido a que los cristales están adsorbiendo el soluto en su superficie.

Además, se pueden observar distintas variaciones en esta gráfica, por ejemplo aumentando en 10 grados la temperatura tal y como se representa en la **Gráfica 24**.

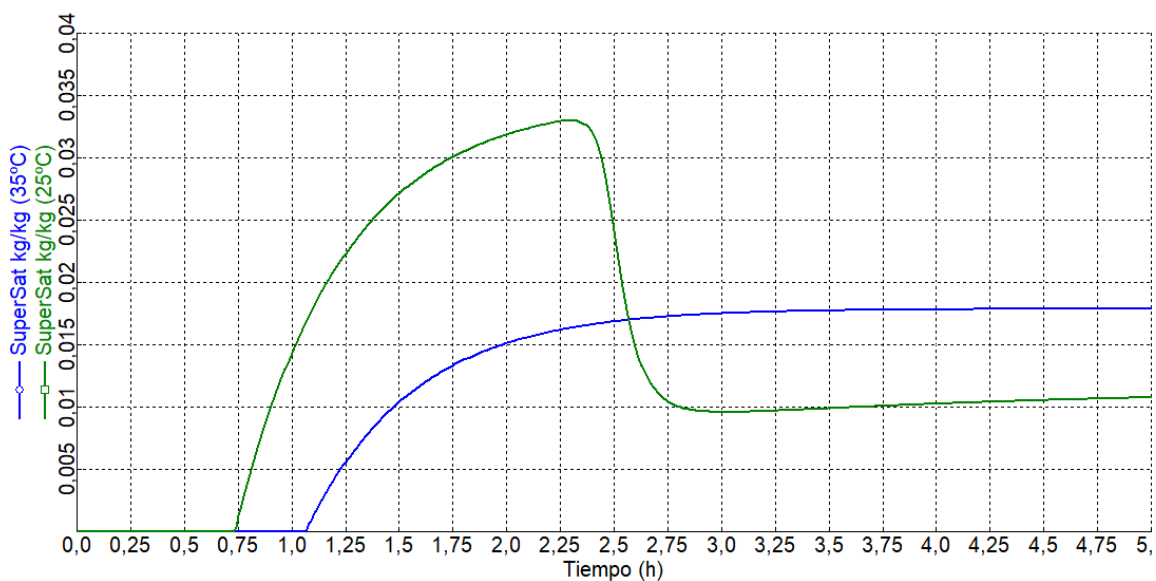
En este caso llama la atención que el tiempo en el que se produce la bajada que anteriormente se ha descrito y se debía a la incorporación del soluto por los cristales, es mucho más suave y menos pronunciada. Esto se puede deber a la interacción de la temperatura, cinética y equilibrio del sistema.



Gráfica 24: Comparación de la concentración frente al tiempo a distintas temperaturas

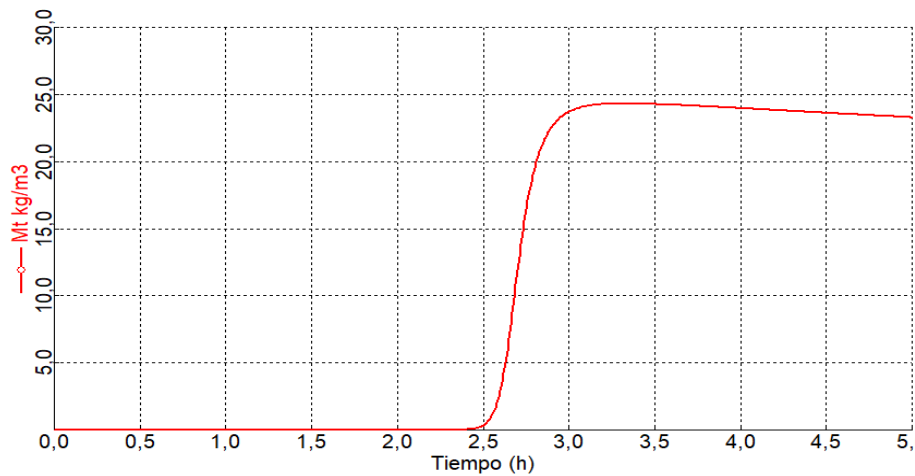
A la temperatura de 35 grados, la cinética de cristalización será más rápida que a 25, lo que implica a su vez una tasa de crecimiento de los cristales mayor. Dicho aumento de la velocidad de crecimiento de los cristales puede ser el causante de que la disminución de la concentración de soluto sea más prolongada en el tiempo.

No obstante, otros parámetros como la solubilidad también serán influyentes. Esto se debe a que a una mayor temperatura la solubilidad será mayor, derivando en una mayor concentración en el equilibrio que dificulta alcanzar una sobresaturación lo suficientemente elevada como para que se produzca una bajada tan brusca como en la gráfica anterior. Todo esto se observa con mayor claridad en la **Gráfica 25** donde tal y como se ha mencionado no se alcanza una sobresaturación lo suficientemente alta.



Gráfica 25: Sobresaturación a distintas temperaturas

Otro resultado a analizar es el obtenido en la gráfica de la densidad del magma que se muestra en la **Gráfica 26**.

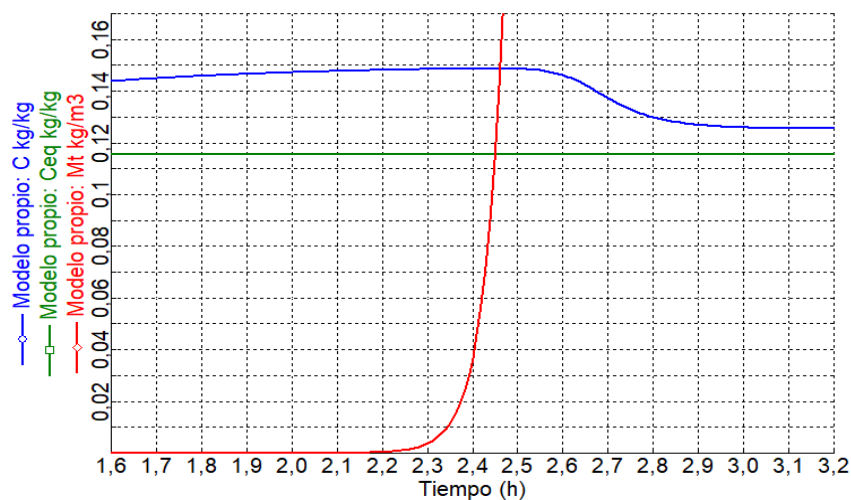


Gráfica 26: Representación de la densidad del magma en el tiempo

Tal y como cabe pensar, la tendencia de esta gráfica también seguirá el razonamiento anteriormente expuesto.

Cuando al inicio de la simulación la concentración del soluto es baja, la densidad del magma lo será también, mientras que a medida que se conforman los cristales, la densidad del magma aumentará.

Esta tendencia se puede observar de manera más clara en la **Gráfica 27** donde se superponen las tendencias de la concentración y el magma, y a su vez, donde se observa que la densidad del magma comienza a ser apreciable cuando se alcanza el punto más alto de la concentración.



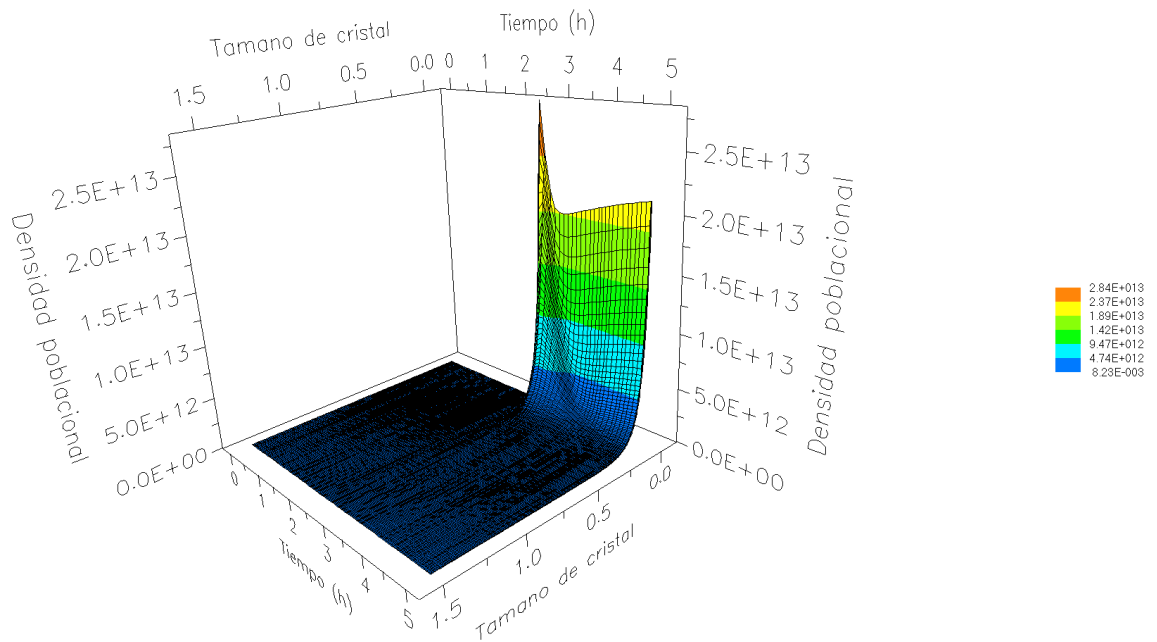
Gráfica 27: Representación de la densidad del magma y la concentración frente al tiempo

Por tanto, el aumento de la densidad del magma tal y como cabe esperar se debe al crecimiento de los cristales en el sistema.

Continuando con el análisis de los resultados, cabe hacer mención al gráfico tridimensional que se representa en la **Gráfica 12 a)** y que señala en sus ejes, el tiempo, la densidad poblacional y el tamaño de los cristales.

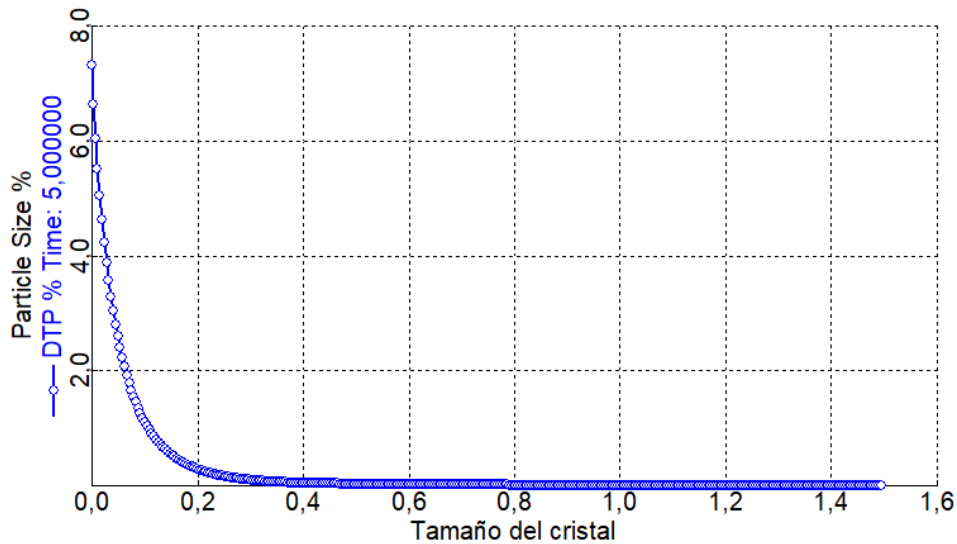
No obstante, en la **Gráfica 28** se puede apreciar mejor la dinámica del proceso de cristalización. En ella se puede observar cómo se distribuyen los cristales y como varía está a lo largo del tiempo, pudiendo decir que las regiones con mayor densidad poblacional están asociadas a un tamaño de cristales pequeños.

Además, habiendo observado en las gráficas anteriores de manera aproximada en que momento ocurre la nucleación y crecimiento de los núcleos, esta gráfica permite tener de manera más ilustrada lo que sucede.



Gráfica 28: Representación de la densidad poblacional, tiempo y tamaño del cristal

Por otro lado, cabe analizar el tamaño de distribución de partícula frente a los tamaños de cristal tal y como se observa en la **Gráfica 29** inferior.



Gráfica 29: Distribución de los tamaños de partícula frente al tamaño de cristal

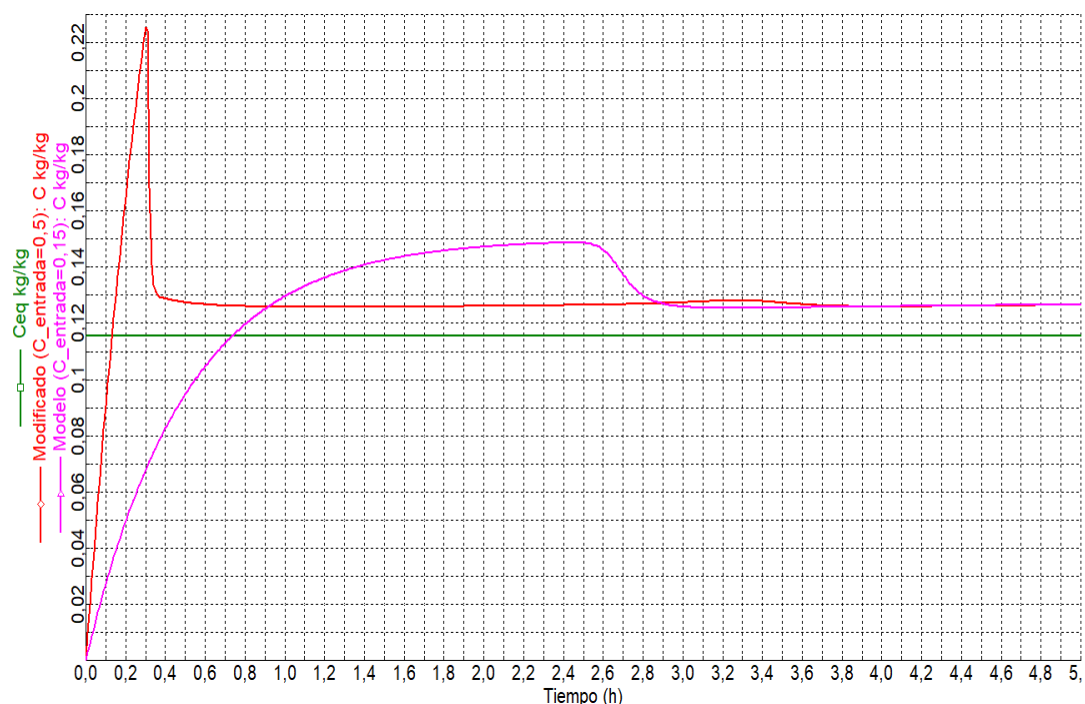
La distribución de tamaños de partícula que se observa puede ser el resultado de la combinación de varios factores, donde además cabe mencionar que se considera un caso ideal, es decir, en caso de tenerse en cuenta fenómenos de aglomeración y rotura de cristales, la distribución superior cambiaría.

Además, este gráfico nos permite comprobar lo analizado anteriormente, existen una mayor cantidad de cristales de menor tamaño posiblemente debido a la nucleación, que pese a ser completamente aleatoria y ocurrir en distintos puntos del sistema, presenta una mayor probabilidad de formar cristales de menor tamaño.

Del mismo modo influye la limitación de tamaño ya que tal y como se observa la gráfica presenta una tendencia hasta el tamaño de 1.5mm, tamaño establecido como máximo en el modelo realizado. Esta restricción del tamaño sumada a las restricciones físicas del sistema aumenta la probabilidad anterior de que se formen cristales pequeños.

A todo lo anterior, se le puede sumar la competencia interna de cristales por los recursos, es decir, el soluto que incorporan por adsorción para crecer. Según van aumentando de tamaño los cristales, estos van consumiendo el soluto de su entorno, lo que también jugará un papel importante impidiendo una formación de cristales de mayor tamaño.

En esta línea de estudio, al igual que en la **Gráfica 24** se observa lo que ocurre al aumentar la temperatura de operación, cabe realizar alguna comparación más como el caso en el que la concentración de entrada aumenta pasando de 0.15 kg/kg a 0.5 kg/kg. Para este estudio, en la **Gráfica 30** que representa la concentración se observa la misma tendencia, pero con una mayor subida de la concentración, es decir, una mayor sobresaturación, y una caída de la misma de una manera más abrupta.



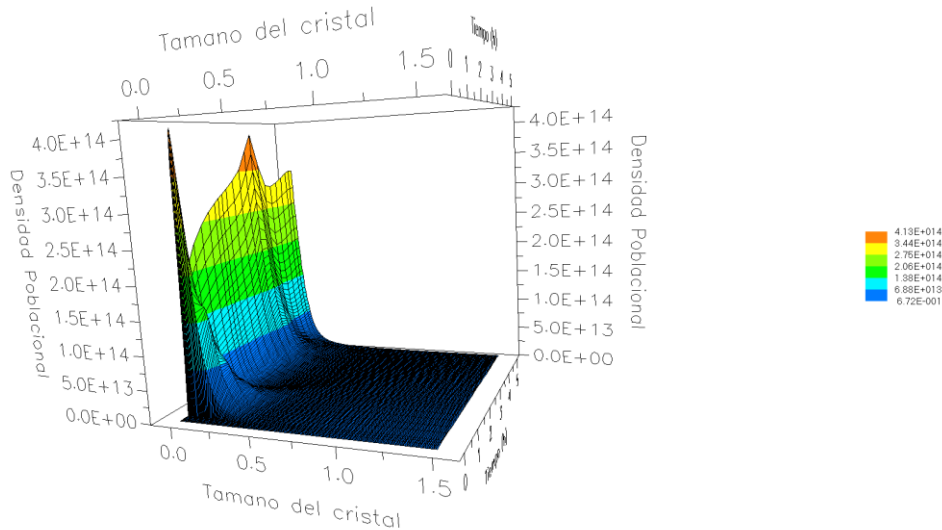
Gráfica 30: Representación de la variación de la concentración al variar la concentración de entrada

Pese a que se obtiene algo lógico, si se puede observar una pequeña variación en torno a un tiempo equivalente a 3-4 horas. Se aprecia una bajada suave de la concentración cuyo origen a ciencia exacta es difícil de concretar.

Esta pequeña variación puede ser causada por varios motivos, desde que se alcance un nuevo equilibrio en ese punto, o incluso que se produzcan eventos de nucleación adicionales que provoquen una nueva estabilización.

Siguiendo en este mismo análisis, si se realizara una comparación en el caso de la densidad del magma, no se obtendría nada más allá de un mayor valor final de la misma.

Sin embargo, si se analiza el gráfico 3D que se muestra en la **Gráfica 31** sí se aprecian variaciones interesantes. Pese a que sigue habiendo una mayor cantidad de cristales de menor tamaño, al aumentar la concentración de entrada, se produce una mayor tasa de nucleación, es decir, se producen una mayor cantidad de cristales pequeños. Esto se puede observar claramente dado que la densidad poblacional aumenta en una cantidad considerable respecto a casos anteriores.

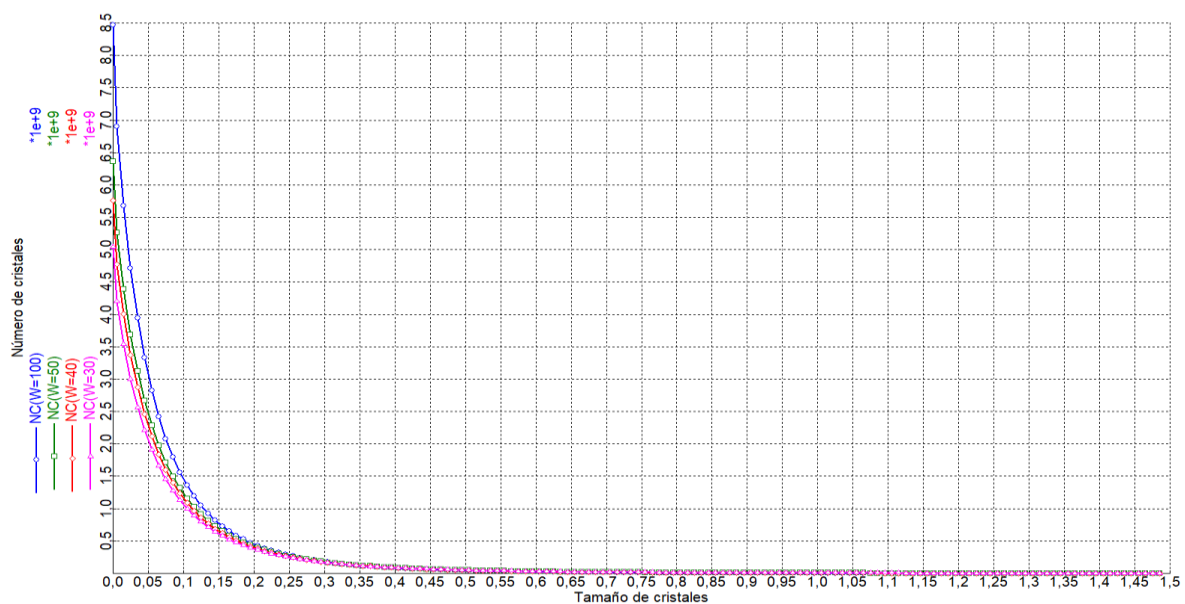


Gráfica 31: Representación tridimensional al variar la concentración de entrada al sistema

Por último, dado que en el modelo trata como componente a cristalizar el sulfato de potasio, cabría buscar una modificación que produjera un aumento de los tamaños de los cristales, de este modo su distribución en el terreno agrícola se facilitaría.

Esto se puede llevar a cabo reduciendo el caudal de entrada, lo que provocaría un aumento del tiempo de residencia que debería derivar en unos cristales de mayor tamaño. Esto se observa en la **Gráfica 32** donde se han calculado el número de cristales para cada tamaño posible para distintos caudales de entrada.

Para mayor claridad de la gráfica, cada eje x esta multiplicado por 10^{-9} , por lo que a cada valor de número de cristales que se saque habrá que multiplicarlo por 10^9 .



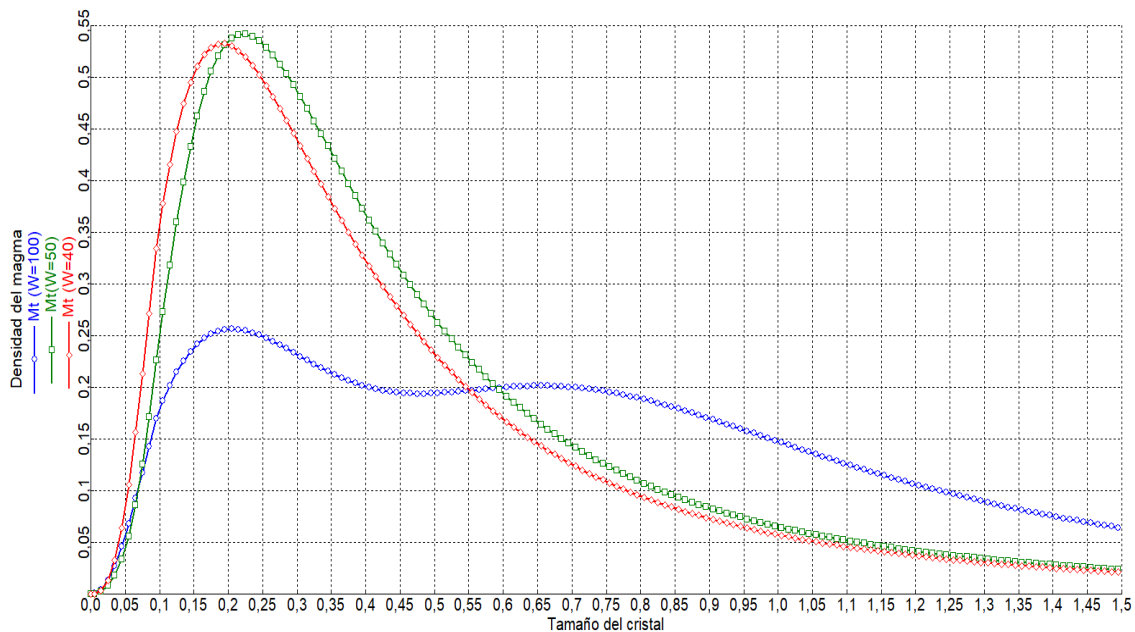
Gráfica 32: Representación del número de cristales para cada tamaño con distintos caudales de entrada

En la gráfica superior, se aprecia lo que cabría esperar, a mayor caudal hay una mayor cantidad de cristales, sin embargo, no se observa ninguna tendencia clara en la existencia de cristales de mayor tamaño.

Además, cabe relacionar la tendencia obtenida con la expresión (35) planteada al inicio. Tal y como se observa, se mantiene la tendencia exponencial que ya al comienzo del modelo se podía prever de dicha expresión. Esto afianza la fiabilidad del modelo realizado.

En relación a este estudio cabe analizar la densidad del magma, es decir, la masa en cada tamaño de cristal. En la **Gráfica 33** se observa esa representación para distintos caudales de entrada. Cabe notar, que pese a previamente haber observado en todos los casos una tendencia similar con mayor cantidad de cristales pequeños, esta gráfica permite observar que a mayor caudal hay una repartición más uniforme de las masas en relación a los tamaños.

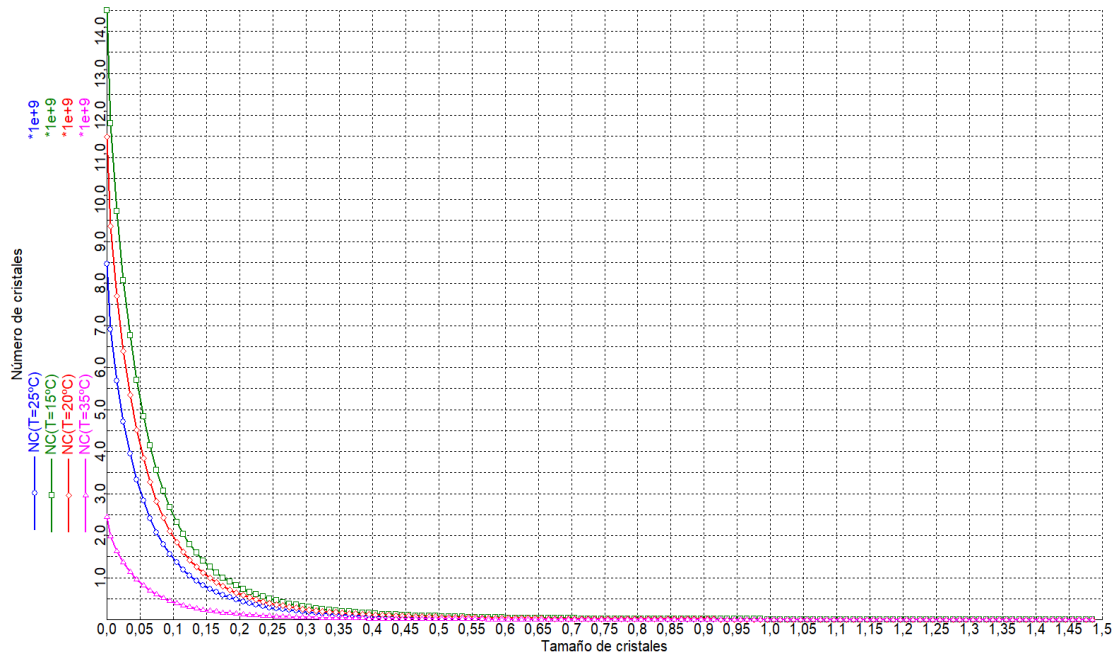
Según el caudal disminuye, no solo hay mayor cantidad de cristales pequeños, sino que, la masa será mayor para dichos tamaños.



Gráfica 33: Representación de la densidad del magma para tamaños del cristal para distintos caudales de entrada

Como segunda iteración para el propósito de obtener un mayor tamaño de cristal, se mantendrá el caudal de entrada de 100 kg/h, modificando en este caso la temperatura de operación.

Al igual que en el caso anterior, para mayor claridad de la gráfica, para obtener el valor real del número de cristales habrá que multiplicar cada eje x por 10^9 .



Gráfica 34: Representación del número de cristales para cada tamaño con distintas temperaturas de operación

En este caso, como muestra la **Gráfica 34** si se puede apreciar una ligera tendencia del aumento de tamaño de cristales a medida que se disminuye la temperatura. Esto puede ser debido a varios factores como la disminución de la velocidad de nucleación, lo que producirá una menor formación de núcleos permitiendo así, que los ya existentes crezcan y adquieran un mayor tamaño.

La velocidad de crecimiento y la solubilidad también jugaran un papel importante en este análisis. En el caso del primero, al disminuir la temperatura, también lo hará la velocidad de crecimiento, esto podría llevar a un razonamiento erróneo en el que se presuponga que por ello los cristales adquirirán un menor tamaño. Sin embargo, esta ralentización de la agregación del soluto al cristal, permite que estos adquieran un mayor desarrollo antes del equilibrio.

Por otro lado, como se ha mencionado, está la solubilidad, parámetro del sulfato de potasio que se verá disminuido al reducir la temperatura. Esto produce una sobresaturación que podría favorecer el crecimiento de los cristales, y que, a su vez, al irse reduciendo, aminora el crecimiento de los cristales pequeños.

Para este último caso de estudio analizado no se observan grandes cambios, es por ello que se podrá concluir que para la obtención de cristales de mayor tamaño se requiere de cristalizadores más complejos que permitan el control de finos, así como un mantenimiento del sistema en una zona metaestable. Además, se podría llegar a requerir de otros equipos como clasificadores u otros dispositivos para extraer los cristales grandes como producto final. Esto aseguraría un proceso más eficiente y controlado, generando cristales de mayor tamaño y mejor calidad.

6.1 Duración de las simulaciones

Como ha sido comentado previamente en estas simulaciones se busca el mejor resultado bajo el menor coste computacional posible, sin embargo, en relación a este último cabe mencionar un tercer parámetro que será de gran relevancia a tener en cuenta en las simulaciones, el tiempo de ejecución.

Previamente en el punto 5.3 de resolución del mallado, esto ya fue comentado, no obstante, dada la aplicación de distintos métodos de resolución al modelo, cabe analizarlo nuevamente.

En la **Tabla 5** se observa de manera esquemática el tiempo de resolución del programa para todos los casos tratados.

Tabla 5: Tiempos de ejecución para los distintos casos simulados

CASOS	MÉTODO DE RESOLUCIÓN	TIEMPO DE EJECUCIÓN
CASO I	Se aplica el método de diferencias centradas para el cálculo de la tasa de crecimiento, y el método <i>upwind</i> para el cálculo de la densidad poblacional.	32 segundos
CASO II	Se calcula la tasa de crecimiento en las caras del mallado y se calcula la densidad poblacional por el método <i>upwind</i> .	30 segundos
CASO III	Se emplea el esquema combinado de κ	36 segundos
CASO IV	Se emplea el esquema de alta resolución de Sweby.	2 minutos

Tal y como cabía esperar, según aumenta la dificultad del método empleado también aumenta el tiempo de ejecución, observando que en el caso IV, que es el más exacto es en el que más tiempo necesita.

7. CONCLUSIONES

Según el estudio realizado del proceso de cristalización continua de sulfato de potasio desde el desarrollo de su modelo hasta la simulación del mismo, se pueden realizar varias conclusiones.

Tras la realización del modelo, se ha empleado el método de discretización por volúmenes finitos para su validación de una manera sencilla y precisa. No obstante, se probaron varios casos en busca del modelo que más se acercara al original, pudiendo concluir que el modelo realizado con esquemas de alta resolución, concretamente el esquema de Sweby, es el que más adecuado para ello. Esto se debe a que los esquemas de TVD logran evitar una difusión excesiva y mantener la nitidez de las discontinuidades, consiguiendo así un balance ente la obtención precisa y fiable de resultados y la estabilidad numérica.

Además, para buscar una mayor aproximación se determinó el mallado más conveniente para la realización de la simulación, y de este modo, ser más rigurosos con el resultado. Por medio de iteración de la distribución de tamaños de partícula se concluyó que el mallado más adecuado estaba compuesto por 600 celdas.

Por medio del método seleccionado se estudiaron una serie de gráficos de gran ayuda para recopilar información sobre el comportamiento del cristizador en el caso de estudio. En lo que respecta a esto, se observó la concordancia entre el proceso teórico de la cristalización en comparación con gráficas como la de la concentración frente al tiempo, donde además se comprobó que un aumento de temperatura afecta a la solubilidad derivando en una dificultad para alcanzar una sobresaturación elevada. No obstante, si por el contrario lo que se aumenta es la concentración de entrada, si se produce una sobresaturación suficiente para la correcta formación de cristales. Sin embargo, este último caso requiere de un estudio profundo ya que se puede producir una saturación excesiva que derive en una formación de cristales indeseable. En relación a todo esto se puede determinar que la concentración de la disolución de entrada será un elemento clave para un correcto control del proceso y para lograr los niveles de concentración deseado en los cristales.

Del mismo modo cabe enfatizar en el control de la densidad del magma, ya que puede afectar la velocidad a la que los cristales se sedimentan y segregan.

Para facilitar la aplicación como fertilizante que se le pretende dar al sulfato de potasio cristalizado se modificaron una serie de parámetros con el objetivo de aumentar el tamaño de estos cristales. La tendencia de la distribución de tamaños de partícula no se vio modificada de manera notoria al aumentar el caudal de entrada, mientras que, por el contrario, este cambio si afecta a la distribución de las masas de cristales en los respectivos posibles tamaños, modificando su trayectoria.

Con el mismo objetivo de obtener unos cristales de mayor tamaño se disminuyó la temperatura de operación del sistema, obteniendo en este caso una mayor cantidad de cristales en tamaños pequeños a medida que se disminuye la temperatura, pero sin apreciar efecto en los cristales más grandes. Esto en parte se debe a que los cristales pequeños al tener una mayor área específica presentan una mayor tasa de crecimiento que dificulta en su crecimiento el proceso de adsorción de recursos, provocando de esta forma que haya una mayor cantidad de cristales

de menor tamaño. Este comportamiento también de refleja en la tendencia exponencial negativa que se observa en la distribución de tamaños de partículas, que presenta coherencia con el fundamento teórico del proceso.

Es por todo lo anterior que se puede concluir que el cristalizador planteado no presenta la sofisticación suficiente para hacer frente a la producción de cristales de mayor tamaño. Para llevar esto a cabo se podría plantar en estudios futuros la adición de un control de finos al sistema, así como equipos adicionales como clasificadores.

8. POSIBLES LÍNEAS FUTURAS DE ESTUDIO

Este estudio realizado presenta una base amplia para futuros estudios más completos. Algunas de las líneas de investigación futuras que puede tomar este TFG se exponen de manera superficial en este punto.

En primer lugar, cabe la posibilidad de profundizar más en la optimización de la cristalización del sulfato de potasio realizando un mayor estudio de las características de estos cristales. Con esta ampliación se podría conseguir aumentar la eficacia del proceso y la pureza de los cristales obtenidos, derivando así en una mayor calidad de los cristales.

Por otro lado, a lo largo del TFG se han considerado simplificaciones en el proceso de cristalización, como por ejemplo suponiendo que no se produce aglomeración o rotura de cristales, así como empleando expresiones obtenidas por métodos experimentales. Otra ampliación de este estudio podría tomar en consideración estas anotaciones realizadas y estudiarlas, pudiendo incluso analizar varios modelos de crecimiento de cristales como el crecimiento por difusión o el crecimiento por agregación.

Otra área intrigante de investigación futura, además de realizar el modelo por medio de otras formas de discretización, saliendo un poco del campo de estudio que se abarca, se podrían analizar estrategias de control del cristalizador de sulfato de. Este estudio podría contener métodos de control, como control de temperatura, control de flujo de alimentación o control de tamaño de cristal, que permitiría nuevamente mejorar la efectividad del proceso y la calidad de los cristales, garantizando a su vez una estabilidad en el proceso.

Por último, aplicando el conocimiento adquirido realizando este estudio, se podría plantear el ampliar su investigación a otros sistemas de cristalización, como por ejemplo compuestos orgánicos o sustancias biológicas, donde se además cabría estudiar otros tipos de cristalización como por ejemplo una cristalización por lotes.

9. EVALUACIÓN DE IMPACTO SOCIAL, AMBIENTAL, LEGAL Y ÉTICO

El estudio realizado en este trabajo de fin de grado debe analizarse desde la perspectiva social, ambiental, legal y ética, considerando los beneficios y riesgos de este.

En relación al impacto social, este estudio, pese a ser un caso simplificado puede contribuir al avance tecnológico en el campo de la cristalización. Los resultados pueden estudiarse y analizarse en mayor profundidad ayudando a la mejora y optimización de este proceso. Esto a su vez podría llevar a la mejora de los productos cristalizados, que podría tener efectos sociales, como el acceso a tratamientos farmacéuticos mejorados.

Si analizamos el impacto social, suponiendo que el caso simulado se lleva a cabo de manera física, también se podrían mencionar aspectos relevantes relacionados con algunos Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), como el 10, que fomenta la disminución de las desigualdades, y el cual se podría aplicar en la plantilla de trabajo del proyecto.

Desde el punto de vista legal, es fundamental garantizar el cumplimiento de las leyes y regulaciones vigentes. El análisis de este enfoque tiene más sentido si se realiza la hipótesis de que este proyecto se ha llevado a cabo de manera física. En ese caso al estar involucrados productos químicos, se deberá cumplir con el control y seguridad de estos productos. Un ejemplo de esto es la normativa REACH de la Unión Europea, es el Reglamento (CE) n° 1907/2006 donde se analiza el registro, evaluación, autorización y restricción de sustancias químicas en territorio europeo.

En cuanto al impacto ético, es esencial asegurar y la transparencia en el desarrollo y, en caso de llevarse a cabo, en la aplicación de tu trabajo. Este análisis desde una perspectiva ética se puede relacionar nuevamente con algunos Objetivos de Desarrollo Sostenible relacionados con el uso de recursos naturales, sostenibilidad o incluso, si se realizada, garantizar una plantilla de trabajadores mixta, equitativa y sin diferencias salariales.

Finalmente, tratando el aspecto ambiental, tal y como en cualquier proceso industrial, la cristalización también puede tener un impacto negativo en el medio ambiente si no se maneja de una manera medioambientalmente correcta.

Para mejorar el aspecto sostenible en la cristalización industrial existen gran cantidad de medidas que se pueden llevar a cabo, entre ellas será de gran importancia minimizar la cantidad de energía y recursos utilizados, así como los residuos y emisiones generados. Esto se puede lograr mediante el uso de tecnologías más eficientes y limpias o la optimización del proceso.

La sostenibilidad en la cristalización industrial está estrechamente relacionada con varios de los Objetivos de Desarrollo Sostenible. En particular, el ODS 9 se refiere a la industria, la innovación y la infraestructura sostenibles, y presenta cierta relevancia para la cristalización industrial, ya que se espera que la industria sea más respetuosa con el medio ambiente.

Este estudio también guarda cierta relación con el ODS 12 sobre producción y consumo sostenibles, que aborda la necesidad de reducir el consumo de recursos y minimizar la generación de residuos.

En relación al aspecto energético mencionado, se puede tratar el ODS 7 sobre energía limpia y asequible, que presenta cierta relevancia ya que se puede plantear el uso de energías limpias y renovables en el proceso de cristalización, para, de este modo, aportar un grano de arena en la reducción de la huella de carbono. Del mismo modo, el ODS 13 sobre acción climática también es importante, ya que la sostenibilidad en un proceso industrial tan empleado como la cristalización puede ayudar a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero y contribuir a mitigar el cambio climático.

Finalmente, se puede concluir que al igual que en cualquier proyecto, será de gran relevancia realizar un análisis de estos cuatro pilares, el impacto social, legal, ético y ambiental. Además, en relación a los Objetivos de Desarrollo Sostenible de las Naciones Unidas, en el **Anexo C**, se localiza un mayor estudio del impacto y relevancia todos ellos.

10. PLANIFICACIÓN TEMPORAL Y PRESUPUESTO

La planificación temporal y el presupuesto son dos aspectos críticos fundamentales en la correcta realización de un trabajo de fin de grado. La planificación temporal o programación del trabajo define las actividades necesarias para llevar a cabo el proyecto, establece un calendario de ejecución y asigna recursos a cada actividad. Por otro lado, el presupuesto desglosará los costes estimados asociados a la realización de este TFG, incluyendo costes en recursos necesarios, materiales y personal, entre otros.

Un buen plan de proyecto y un presupuesto bien elaborado pueden ayudar a garantizar que el trabajo de fin de grado se complete a tiempo y dentro de un presupuesto razonable. Además, una buena planificación es de gran ayuda para identificar posibles problemas y permitir que se tomen medidas a tiempo para mitigarlos.

10.1 Estructura de descomposición del proyecto (EDP)

La estructura de descomposición del proyecto (EDP) es una herramienta de gestión de proyectos utilizada para dividir un proyecto complejo en tareas más pequeñas y manejables.

En el contexto de este trabajo de fin de grado, la EDP será de gran utilidad para descomponerlo en tareas más r, lo que a su vez servirá para la planificación y administración el tiempo de su elaboración.

En la **Figura 15** se observa la representación del EDP que se ha seguido.

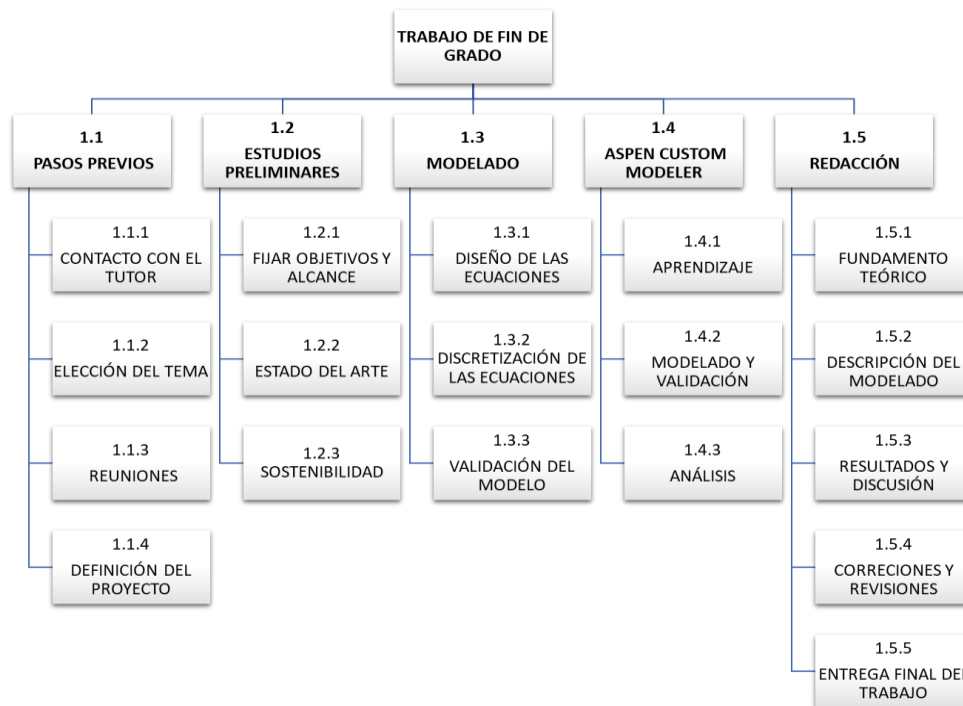


Figura 15: Estructura de descomposición del trabajo

10.2 Diagrama de Gantt

El diagrama de Gantt será otra de las herramientas de gestión de proyectos que se empleará para planificación de este trabajo de fin de grado. En él, se pretende visualizar el cronograma de las tareas que componen el mismo.

Este diagrama es una herramienta importante para mostrar el progreso del proyecto y para asegurar que todas las tareas se completen dentro del plazo previsto. Este se compone de una serie de barras horizontales que representan la duración de cada una tarea las tareas dispuestas en orden cronológico.

El diagrama de Gantt de este TFG se muestra en la **Figura 16** y **Figura 17** donde en la primera de ellas se detallan las fechas de inicio y finalización de cada actividad, además de las personas asignadas para cada una de ellas, donde la asignación “Todos” hará referencia al tutor más el alumno.

Nombre de la tarea	Fecha de inicio	Fecha de finalización	Asignado	Estado
1. TRABAJO FIN DE GRADO	31/10/2022	18/06/2022	Sofía	Terminado
1.1 PASOS PREVIOS	31/10/2022	10/12/2022	Sofía	Terminado
1.1.1 CONTACTO CON EL TUTOR	02/11/2022	05/11/2022	Sofía	Terminado
1.1.2 ELECCIÓN DEL TEMA	05/11/2023	09/11/2023	Sofía	Terminado
1.1.3 DEFINICIÓN DEL PROYECTO	06/11/2023	14/11/2023	Sofía	Terminado
1.2 ESTUDIOS PRELIMINARES	15/11/2023	14/02/2023	Sofía	Terminado
1.2.1 FIJAR OBJETIVOS Y ALCANCE	15/11/2023	01/12/2023	Sofía	Terminado
1.2.2 ESTADO DEL ARTE	18/11/2023	14/02/2023	Sofía	Terminado
1.2.3 SOSTENIBILIDAD	25/11/2023	10/12/2023	Sofía	Terminado
1.3 MODELADO	12/12/2023	15/05/2023	Sofía	Terminado
1.3.1 DISEÑO DE LAS ECUACIONES	12/12/2023	19/03/2023	Sofía	Terminado
1.3.2 DISCRETIZACIÓN DE ECUACIONES	19/03/2023	17/04/2023	Sofía	Terminado
1.3.3 VALIDACIÓN DEL MODELO	17/04/2023	15/05/2023	Sofía	Terminado
1.4 ASPEN CUSTOM MODELER	25/02/2023	22/05/2023	Sofía	Terminado
1.4.1 APRENDIZAJE	25/02/2023	15/05/2023	Sofía	Terminado
1.4.2 MODELADO Y VALIDACIÓN	19/03/2023	15/05/2023	Sofía	Terminado
1.4.3 ANÁLISIS	25/03/2023	22/05/2023	Sofía	Terminado
1.5 REDACCIÓN	19/12/2023	18/06/2023	Sofía	Terminado
1.5.1 FUNDAMENTO TEÓRICO	20/12/2023	15/03/2023	Sofía	Terminado
1.5.2 DESCRIPCIÓN DEL MODELADO	19/12/2023	15/05/2023	Sofía	Terminado
1.5.3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN	01/05/2023	27/05/2023	Sofía	Terminado
1.5.4 CORRECCIONES Y REVISIONES	27/05/2023	18/06/2023	Sofía	Terminado
1.5.5 ENTREGA FINAL DEL TRABAJO	18/06/2023	18/06/2023	Sofía	Terminado

Figura 16: Parte I del diagrama de Gantt del TFG

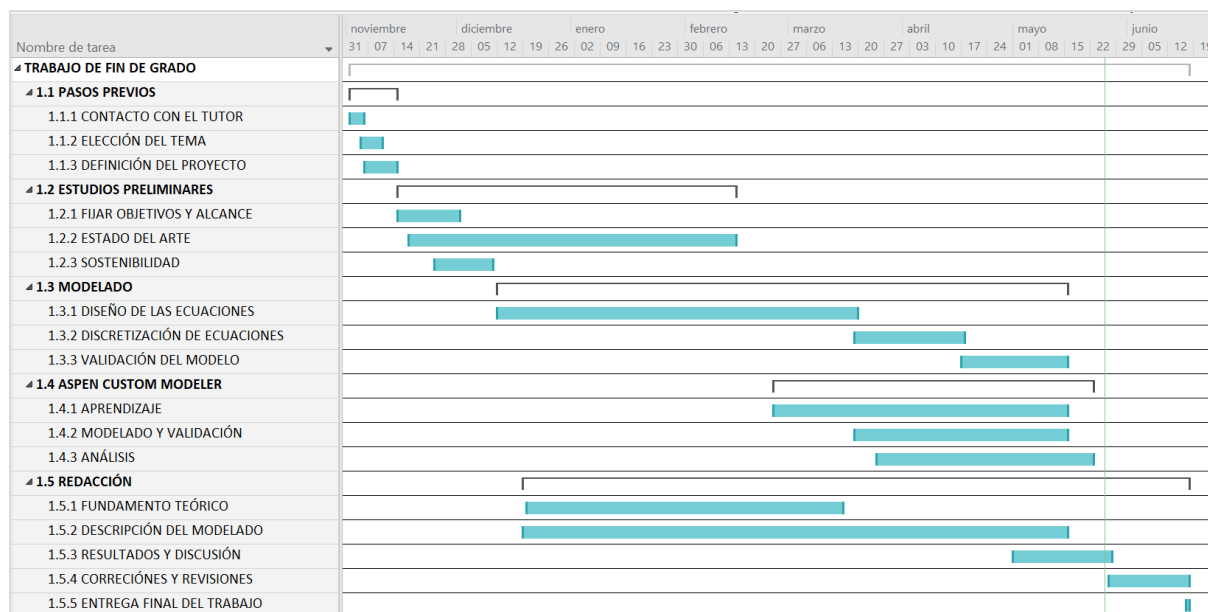


Figura 17: Parte II del diagrama de Gantt del TFG

10.3 Presupuesto

Tal y como se ha mencionado anteriormente, el presupuesto será una de las partes fundamentales de cualquier proyecto, y esto incluye el TFG.

El presupuesto de este estudio detalla los recursos necesarios para llevar a cabo el mismo, que son principalmente los costes materiales y de personal, así como los costes asociados a cada uno de ellos. En este sentido, el presupuesto permite asegurar que los recursos necesarios están disponibles y que el proyecto pueda llevarse a cabo dentro del presupuesto.

10.3.1 Personal

En la **Tabla 6**, se detallarán los puestos requeridos para la elaboración de este trabajo, que son un ingeniero senior (tutor del TFG) y un ingeniero junior, así como los costes que suponen cada uno de ellos tomando de referencia los salarios para los mismos en Estados Unidos [25][26].

Tabla 6: Costes de personal

Personal	Coste (€/h)	Horas	Total
Ingeniero senior	60	50	3.000,00 €
Ingeniero Junior	30	300	9.000,00 €

10.3.2 Otros

En este pequeño apartado se incluyen otros gastos que supone este estudio, incluyendo material inventariable y fungible como el ordenador empleado para llevar a cabo las simulaciones y material de escritorio e impresora respectivamente, así como las licencias requeridas. Todo esto se expone en la **Tabla 7**.

Cabe mencionar que la licencia del software Aspen Plus V12, esta proporcionada por la Universidad Politécnica de Madrid, por lo que, el coste presente en la tabla superior es un valor estimado bastante inferior al coste de una licencia de este tipo que estaría en torno a los 5.000€

Finalmente, teniendo en cuenta los gastos desarrollados en los dos subapartados anteriores, se puede estimar que el coste total de este proyecto es de 13.775,76 €.

Tabla 7: Coste de otros recursos necesarios

Partida	Importe (€)	Unidades	Coste total (€)
Ordenador Dell XPS 13	1.475,76 €	1	1.475,76 €
Material de oficina	50,00 €	1	50,00 €
Material de impresora	50,00 €	1	50,00 €
Licencia anual Microsoft Office	100,00 €	1	100,00 €
Licencia anual Aspen Plus V12	100,00 €	1	100,00 €
Coste total:			1.775,76 €

BIBLIOGRAFÍA

- [1] H. M. Schoen, C. S. Grove, and J. A. Palermo, “The Early History Of Crystallization,” no. 1556, pp. 373–375, 1935.
- [2] S. Universitario *et al.*, “Modelizado Y Simulación De Un Industrial .,” 2013.
- [3] A. Mersmann, “Crystallization Technology Handbook,”. Second Edition Revised and Expanded. 2001.
- [4] J. Li, B. L. Trout, and A. S. Myerson, “Multistage Continuous Mixed-Suspension , Mixed-Product Removal (MSMPR) Crystallization with Solids Recycle”, doi: 10.1021/acs.oprd.5b00306.
- [5] J. K. Reader, C. I. Crystal, and Y. Purity, “Pharmaceutical engineering,” 2007.
- [6] S. Palosaari, M. Louhi-kultanen, and Z. Sha, “Handbook of Industrial Drying,” no. July, 2015, doi: 10.1201/9781420017618.ch51.
- [7] A. S. Myerson *et al.*, *Handbook of Industrial Crystallization*. vol.5, 2001
- [8] A. Mersmann, “Crystallization Technology Handbook,” vol. 13, no. 4, pp. 1037–1038, 1995, doi: 10.1080/07373939508917003.
- [9] I. Sadrehighi, “Numerical Aspects of Finite Volume & Finite Element Analyses,” no. March, 2023, doi: 10.13140/RG.2.2.24924.87686/1.
- [10] J. H. Ferziger, M. Perić, and R. L. Street, *Computational Methods for Fluid Dynamics, Fourth Edition*. 2019. doi: 10.1007/978-3-319-99693-6.
- [11] M. Huysmans and A. Dassargues, “Review of the use of Péclet numbers to determine the relative importance of advection and diffusion in low permeability environments,” *Hydrogeol. J.*, vol. 13, no. 5–6, pp. 895–904, 2005, doi: 10.1007/s10040-004-0387-4.
- [12] Samir Hamdi et al., “Method of lines, Scholarpedia,” 2007. http://www.scholarpedia.org/article/Method_of_lines (accessed May 15, 2023).
- [13] A. Younes, M. Konz, M. Fahs, A. Zidane, and P. Huggenberger, “Modelling variable density flow problems in heterogeneous porous media using the method of lines and advanced spatial discretization methods,” *Math. Comput. Simul.*, vol. 81, no. 10, pp. 2346–2355, 2011, doi: 10.1016/j.matcom.2011.02.010.
- [14] J. Miguel and F. Marqu, “Introduction to the Finite Volumes Method . Application to the Shallow Water Equations .”.
- [15] S. Qamar, M. P. Elsner, I. A. Angelov, G. Warnecke, and A. Seidel-morgenstern, “A comparative study of high resolution schemes for solving population balances in crystallization,” vol. 30, pp. 1119–1131, 2006, doi: 10.1016/j.compchemeng.2006.02.012.
- [16] A. Mesbah, H. J. M. Kramer, A. E. M. Huesman, and P. M. J. Van Den Hof, “A control oriented study on the numerical solution of the population balance equation for crystallization processes,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 20, pp. 4262–4277, 2009, doi: 10.1016/j.ces.2009.06.060.

- [17] B. Van Leer, “Upwind and High-Resolution Methods for Compressible Flow : From Donor Cell to Residual-,” vol. 1, no. 2, pp. 192–206, 2006.
- [18] A. Sharma, *Introduction to Computational Fluid Dynamics*, vol. M. 2022. doi: 10.1007/978-3-030-72884-7.
- [19] Q. Xu and G. T. Rochelle, “Energy Procedia Solvent reclaiming by crystallization of potassium sulfate,” *Energy Procedia*, vol. 1, no. 1, pp. 1205–1212, 2009, doi: 10.1016/j.egypro.2009.01.158.
- [20] M. Oh, “Modelling And Simulation Of Combined Lumped And Distributed Processes,” 1995.
- [21] and B. M. A. Chianese, S. di Cave, “Crystallization kinetics of potassium sulphate in a MSMR cooling crystallizer,” *Ing. Chim. Ital.*, vol. 26: 28-38, 1987.
- [22] J.W.Mullin, *Crystallization*. Oxford, 2001.
- [23] R. H. Perry and C. H. Chilton, *Chemical Engineer’s Handboo*. McGraw-Hill, 1973.
- [24] and J. W. M. J. Budz, A. G. Jones, “On the shape-size dependence of potassium sulfate crystals.,” *Ind. Eng. Chem*, pp. 26-820–824, 1987.
- [25] Salarycom, “Hourly Wage for Junior Engineer Salary in the United States,” 2023. <https://www.salary.com/research/salary/listing/junior-engineer-hourly-wages> (accessed May 20, 2023).
- [26] Salarycom, “Hourly Wage for Senior Engineer Salary in the United States,” 2023. <https://www.salary.com/research/salary/alternate/senior-software-engineer-hourly-wages> (accessed May 20, 2023).

ÍNDICE DE GRÁFICAS

Gráfica 1: Representación 1 comparativa de las concentraciones de los modelos frente al tiempo	32
Gráfica 2: Representación 1 comparativa de las densidades de magma de los modelos frente al tiempo	32
Gráfica 3: Representación de las densidades poblacionales de los modelos: (a) Modelo propio; (b) Modelo original	32
Gráfica 4: Representación 2 comparativa de las concentraciones de los modelos frente al tiempo	33
Gráfica 5: Representación 2 comparativa de las densidades de magma de los modelos frente al tiempo	33
Gráfica 6: Representación 2 de las densidades poblacionales de los modelos: (a) Modelo propio; (b) Modelo original	34
Gráfica 7: Representación de la comparativa de concentraciones aplicando métodos de alta resolución	34
Gráfica 8: Representación de la comparativa de densidades del magma aplicando métodos combinado	35
Gráfica 9: Representación de las densidades poblacionales de los modelos aplicando métodos de alta resolución: (a) Modelo propio; (b) Modelo original	35
Gráfica 10: Representación de la comparativa de concentraciones aplicando métodos de alta resolución (Sweby)	36
Gráfica 11: Representación de la comparativa de densidades del magma aplicando métodos de alta resolución (Sweby)	36
Gráfica 12: Representación de las densidades poblacionales de los modelos aplicando métodos de alta resolución (Sweby): (a) Modelo propio; (b) Modelo original	36
Gráfica 13: Comparación de la densidad del magma obtenida con el modelo original erróneo y el corregido	38
Gráfica 14: Comparación de la concentración obtenida con el modelo original erróneo y el corregido	38
Gráfica 15: Comparación de la concentración entre el modelo original, el corregido y el modelo propio	39
Gráfica 16: Comparación de la densidad del magma entre el modelo original, el corregido y el modelo propio	39
Gráfica 17: Comparación de la densidad del magma para ambos modelos corregidos	40
Gráfica 18: Comparación de la concentración para ambos modelos corregidos	40
Gráfica 19: Comparación de los modelos realizando la integral de la densidad el magma por dos métodos	41
Gráfica 20: Comparación de los modelos realizando la integral de la densidad el magma por dos métodos aumentando el mallado	42
Gráfica 21: Influencia logarítmica en el cálculo de la densidad del magma	42
Gráfica 22: Influencia logarítmica en el cálculo de la concentración	43
Gráfica 23: Representación de la concentración frente al tiempo para el modelo validado	48
Gráfica 24: Comparación de la concentración frente al tiempo a distintas temperaturas	49
Gráfica 25: Sobresaturación a distintas temperaturas	49
Gráfica 26: Representación de la densidad del magma en el tiempo	50
Gráfica 27: Representación de la densidad del magma y la concentración frente al tiempo	50
Gráfica 28: Representación de la densidad poblacional, tiempo y tamaño del cristal	51
Gráfica 29: Distribución de los tamaños de partícula frente al tamaño de cristal	52
Gráfica 30: Representación de la variación de la concentración al variar la concentración de entrada	53
Gráfica 31: Representación tridimensional al variar la concentración de entrada al sistema	54
Gráfica 32: Representación del número de cristales para cada tamaño con distintos caudales de entrada	54
Gráfica 33: Representación de la densidad del magma para tamaños del cristal para distintos caudales de entrada	55
Gráfica 34: Representación del número de cristales para cada tamaño con distintas temperaturas de operación	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Variación de la energía libre con el tamaño del germen. (Fuente: [7])	12
Figura 2: Diagrama solubilidad y sobresaturación	14
Figura 3: Representación volúmenes finitos	18
Figura 4: Representación del método de diferencias regresivas aguas arriba	19
Figura 5: Representación de la difusión y convección en nodos	20
Figura 6: Representación del método de diferencias centradas	20
Figura 7: Representación de la relación de la ratio r y el limitador de flujo. (Fuente: [18])	22
Figura 8: Representación de las entradas y salidas del cristalizador	26
Figura 9: Representación de la discretización por tamaño de cristales	28
Figura 10: Representación del método de diferencias regresivas aguas arriba (upwind)	29
Figura 11: Captura del código erróneo del modelo de Aspen Custom Modeler	37
Figura 12: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al comienzo de la simulación para distintos tamaños de mallado. (a)150 celdas (b)250 celdas (c) 300 celdas (d) 350 celdas	44
Figura 13: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al final de la simulación para distintos tamaños de mallado. (a)150 celdas (b)250 celdas (c) 300 celdas (d) 350 celdas	45
Figura 14: Representaciones de la distribución de tamaños de partícula al final de la simulación para distintos tamaños de mallado. (e)600 celdas (f)700 celdas	45
Figura 15: Estructura de descomposición del trabajo	63
Figura 16: Parte I del diagrama de Gantt del TFG	64
Figura 17: Parte II del diagrama de Gantt del TFG	65

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Datos de las condiciones de operación del modelo _____	31
Tabla 2: Distribución de tamaños de partícula para unos tamaños concretos en distintos mallados _____	45
Tabla 3: Tiempos de ejecución de distintos mallados _____	46
Tabla 4: Distribución de tamaños de partícula para unos tamaños concretos en distintos mallados _____	46
Tabla 5: Tiempos de ejecución para los distintos casos simulados _____	57
Tabla 6: Costes de personal _____	65
Tabla 7: Coste de otros recursos necesarios _____	66

ANEXO A: Casos de Simulación en Aspen Custom Modeler

CASO 1: Cálculo de la tasa de crecimiento por diferencias centradas

```

1 // Parameters and variables
2 Max_Size as RealParameter (1.5, Description:"Maximum crystal size,
mm");
3 Size1 as RealParameter (0.1);
4 C as massfraction (Description: "Concentración", Record:True);
5 Ceq as massfraction (Description: "Equilibrium concentration,
kg/kg", Record:True);
6 Cout as massfraction (Description: "Concentración combinada,
kg/kg");
7 Cin as massfraction(Description: "Concentración de entrada,
kg_solido/kg_disolv", Fixed, 0.15);
8 SuperSat as massfraction (Description: "Super saturation");
9 Tau as time_ Description: "Residence time, 1/h");
10 Mt as conc_mass (Description: "Magma density, kg/m3", Record:True);
11 Temp as temperature(Description: "Temperatura, °C", Fixed, 25);
12 W as flow_mass (Description:"Liquid mass flow rate, kg/h", Fixed,
100);
13 Rho as dens_mass_liq (Description: "Liquid density, kg/m3", Fixed,
1000);
14 RhoS as dens_mass_sol (Description: "Crystal density, kg/m3",
Fixed, 2660);
15 V as volume (Description: "Crystalizer volume, m3", Fixed, 0.05);
16 //-----
17 // Discretization (FVM)
18 N_x AS IntegerParameter (150, Description: "Numero de celdas de
mallado");
19 NodosInt as Integerset ([1: N_x] , description : " Nodos internos");
20 NodosTotal as Integerset ([0:N_x+1] , description: "Nodos Tota-
les");
21 //-----
22 //Definir otras variables
23 Kv(NodosInt) AS NOTYPE (Description:"Factor de forma, mm");
24 G(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Tasa de crecimiento,mm/h");
25 n_i(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Densidad de cristales para
cada intervalo de tamaños, n°/m4");
26 PSD ([1:N_x]) AS percentu (Description:"Particle Size Distribu-
tion");
27 LC ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los tamaños,
mm");
28 G_caras([0:N_x]) AS NOTYPE (description: "Tasa de crecimiento en
las caras, mm/h");
29 //-----
30 // Definir el tamaño de celda y las posiciones de la cara
31 dx AS REALPARAMETER ( Max_Size/N_x , description : "tamaño de
celda");
32 NodoAux as IntegerParameter ( TRUNCATE(Size1/dx), description:
"Nodo auxiliar para el cálculo de kv");
33 //-----
34 //Defino un vector que en cada componente tenga el tamaño de cris-
tales de cada celda
35 FOR i IN [1:N_x+1] DO
36 LC(i) = dx/2 + (i-1)*dx;

```

```

37 ENDFOR
38 LC(0)=0;
39 //-----
40 //Factor de forma: cambia si es mayor o menor que 0,1mm que se ha
    definido al comienzo como Sizer
41 FOR x IN [1:NodoAux] DO
42 Kv(x) = 0.898 * EXP(0.168*(LC(x)*1e3)^0.5 - 8.234*(LC(x)));
43 ENDFOR
44 FOR x IN [NodoAux+1:N_x] DO
45 Kv(x) = 4.46 * EXP(-0.0797*(LC(x)*1e3)^0.5 + 6.76e-1*(LC(x)));
46 ENDFOR
47 //-----
48 //Concentracion y sobresaturación
49 Ceq      = 0.0735 + 1.675e-3 * (Temp);
50 SuperSat = max((C-Ceq), 1e-5);
51 //-----
52 //Tasa de crecimiento
53 FOR x IN [0:N_x] DO
54 G(x) = 892 * SuperSat^2 * (1 + 5.87*LC(x));
55 ENDFOR
56 G_caras(0)=847*SuperSat^2;
57 G_caras(N_x)=0;

58 FOR x IN [1:N_x-1] DO
59 G_caras(x)=(G(x)+G(x+1))/2;
60 endfor
61 //-----
62 //Densidad poblacional
63 n_i(0) = (4.12e14 * Mt * SuperSat^3.4 )/ (847.0 * SuperSat^2.0*1e-
    3);
64 //Caras internas: BALANCE POBLACIONAL
65 FOR x IN [1:N_x] DO
66 $n_i(x)+(G_caras(x)*n_i(x)-G_caras(x-1)*n_i(x-1))/(dx)+
    n_i(x)/Tau=0.0;
67 ENDFOR
68 //-----
69 // Balance de masa total en el soluto
70 V*Rho*$Cout = W*(Cin-Cout);
71 //-----
72 // Concentración combinada
73 Cout = C + Mt/Rho;
74 //-----
75 // Tiempo de residencia
76 Tau = V*Rho/W;
77 //-----
78 // Densidad del magma
79 Mt = RhoS*1E-12*SIGMA(Kv*LC^3*n_i*dx)/1.5;
80 //-----
81 //PSD (Particle Size Distribution) o Distribución de tamaños de
    partícula
82 FOR i IN [1:N_x] DO
83 PSD(i) = n_i(i)/sigma(n_i([1:N_x]))*100;
84 ENDFOR
85 //-----
86 // Condiciones Iniciales

```

```
87 C: 0.0, initial; // No soluto
88 FOR x IN [1:N_x] DO // No hay cristales
89 n_i(x): 1, initial;
90 ENDFOR
91 End
```

CASO 2: Cálculo de la tasa de crecimiento en las caras

Únicamente se proporciona el código que ha variado respecto al Caso 1.

```

1 // Parameters and variables
2 Max_Size as RealParameter (1.5, Description:"Maximum crystal size,
   mm");
3 Size1 as RealParameter (0.1);
4 C as massfraction (Description: "Concentración", Record:True);
5 Ceq as massfraction (Description: "Equilibrium concentration,
   kg/kg", Record:True);
6 Cout as massfraction (Description: "Concentración combinada,
   kg/kg");
7 Cin as massfraction(Description: "Concentración de entrada,
   kg_solido/kg_disolv", Fixed, 0.15);
8 SuperSat as massfraction (Description: "Super saturation");
9 Tau as time_ Description: "Residence time, 1/h");
10 Mt as conc_mass (Description: "Magma density, kg/m3", Record:True);
11 Temp as temperature(Description: "Temperatura, °C", Fixed, 25);
12 W as flow_mass (Description:"Liquid mass flow rate, kg/h", Fixed,
   100);
13 Rho as dens_mass_liq (Description: "Liquid density, kg/m3", Fixed,
   1000);
14 RhoS as dens_mass_sol (Description: "Crystal density, kg/m3",
   Fixed, 2660);
15 V as volume (Description: "Crystalizer volume, m3", Fixed, 0.05);
16 //-----
17 // Discretization (FVM)
18 N_x AS IntegerParameter (150, Description: "Numero de celdas de
   mallado");
19 NodosInt as Integerset ([1: N_x] , description : " Nodos internos");
20 NodosTotal as Integerset ([0:N_x+1] , description: "Nodos Tota-
   les");
21 //-----
22 //Definir otras variables
23 Kv(NodosInt) AS NOTYPE (Description: "Factor de forma, mm");
24 G(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Tasa de creci-
   miento,mm/h");
25 n_i(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Densidad de cristales
   para cada intervalo de tamaños, n°/m4");
26 PSD ([1:N_x]) AS percentu (Description: "Particle Size Distribu-
   tion");
27 LC ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los tamaños,
   mm");
28 LC_caras ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los ta-
   maños caras, mm");
29 G_caras([0:N_x]) AS NOTYPE (description: "Tasa de crecimiento en
   las caras, mm/h");
30 //-----
31 //Defino un vector que en cada componente tenga el tamaño de
   cristales de cada celda
32 FOR i IN [1:N_x+1] DO
33 LC(i) = dx/2 + (i-1)*dx;
34 ENDFOR
35 LC(0)=0;
36 //-----

```

```

37 FOR i IN [0:N_x] DO
38 LC_caras(i) =dx*i;
39 ENDFOR
40 //Tasa de crecimiento calculada directamente en cada cara del ma-
llado
41 FOR x IN [0:N_x] DO
42 G(x) = 892 * SuperSat^2 * (1 + 5.87*LC_caras(x));
43 ENDFOR
44 //-----
45 //Densidad poblacional:
46 //Nodo Izquierdo: n(0)
47 n_i(0) = (4.12e14 * Mt * SuperSat^3.4 )/ (847.0 * Super-
Sat^2.0*1e-3);
48 //Caras internas: BALANCE DE POBLACIÓN
49 FOR x IN [1:N_x] DO
50 $n_i(x)+(G(x)*n_i(x)-G(x-1)*n_i(x-1))/(dx)+ n_i(x)/Tau=0.0;
51 ENDFOR
52 //-----
53 // Condiciones Iniciales
54 C: 0.0, initial; // No soluto
55 FOR x IN [1:N_x] DO // No hay cristales
56 n_i(x): 1, initial;
57 ENDFOR
58 End

```

CASO 3: Modelos combinado

Únicamente se proporciona el código que ha variado respecto al Caso 1

```

1 // Parameters and variables
2 Max_Size as RealParameter (1.5, Description:"Maximum crystal size,
mm");
3 Size1 as RealParameter (0.1);
4 C as massfraction (Description: "Concentración", Record:True);
5 Ceq as massfraction (Description: "Equilibrium concentration,
kg/kg", Record:True);
6 Cout as massfraction (Description: "Concentración combinada,
kg/kg");
7 Cin as massfraction(Description: "Concentración de entrada,
kg_solido/kg_disolv", Fixed, 0.15);
8 SuperSat as massfraction (Description: "Super saturation");
9 Tau as time_ Description: "Residence time, 1/h");
10 Mt as conc_mass (Description: "Magma density, kg/m3", Record:True);
11 Temp as temperature(Description: "Temperatura, °C", Fixed, 25);
12 W as flow_mass (Description:"Liquid mass flow rate, kg/h", Fixed,
100);
13 Rho as dens_mass_liq (Description: "Liquid density, kg/m3", Fixed,
1000);
14 RhoS as dens_mass_sol (Description: "Crystal density, kg/m3",
Fixed, 2660);
15 V as volume (Description: "Crystalizer volume, m3", Fixed, 0.05);
16 E as notype (Description: "parámetro para evitar dividir entre
cero", Fixed, 1e-10);
17 //-----
18 // Discretization (FVM)
19 N_x AS IntegerParameter (150, Description: "Numero de celdas de
mallado");
20 NodosInt as Integerset ([1: N_x] , description : " Nodos internos");
21 NodosTotal as Integerset ([0:N_x+1] , description: "Nodos Tota-
les");
22 //-----
23 //Definir otras variables
24 Kv(NodosInt) AS NOTYPE (Description: "Factor de forma, mm");
25 G(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Tasa de creci-
miento, mm/h");
26 n_i(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Densidad de cristales
para cada intervalo de tamaños, n°/m4");
27 PSD ([1:N_x]) AS percentu (Description: "Particle Size Distribu-
tion");
28 LC ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los tamaños,
mm");
29 LC_caras ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los ta-
maños caras, mm");
30 G_caras([0:N_x]) AS NOTYPE (description: "Tasa de crecimiento en
las caras, mm/h");
31 Gn([0:N_x]) as notype (description: "G*n, mm*n°/m4*h");
32 r([2:N_x-1]) as notype (description: "Parámetro para métodos de
alta resolución");
33 Z([2:N_x-1]) as notype (description: "Parámetro para métodos de
alta resolución");

```

```

34 //-----
   /*BALANCE POBLACIÓN MÉTODOS ALTA RESOLUCIÓN
35 k=1--> CARA INTERNA = N_x = 1
36 k=-1 --> CARA EXTERNA = N_x = 10
37 k=1/3 --> CARAS INTERNAS = [1:N_x-1]
38 CASO 3:
39 r(i)=(n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E));
40 Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(1/3+2/3*r(i))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
41 Todo en una misma expresión, queda de la forma:
42 Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(1/3+2/3*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-
   n_i(i-1)+E)))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
43 */
44 Gn(0)=G(0)*n_i(0);
45 Gn(1)=G(1)*((n_i(2)+n_i(1))/2);
46 FOR i IN [2:N_x-1] DO
47 Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(1/3+2/3*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-
   n_i(i-1)+E)))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
48 Endfor
49 Gn(N_x)= G(N_x)*(n_i(N_x)+0.5*(n_i(N_x)-n_i(N_x-1)));
50 //-----
51 //Caras internos:
52 n_i(0) = (4.12e14 * Mt * SuperSat^3.4 )/ (847.0 * Super-
   Sat^2.0*1e-3);
53 FOR x IN [1:N_x] DO
54 $n_i(x)+(Gn(x)-Gn(x-1))/(dx)+ n_i(x)/Tau=0.0;
55 ENDFOR
56 //-----
57 // Condiciones Iniciales
58 C: 0.0, initial; // No soluto
59 FOR x IN [1:N_x] DO // No hay cristales
60 n_i(x): 1, initial;
61 ENDFOR
62 End

```

CASO 4: Modelos de alta resolución (Sweby)

Únicamente se proporciona el código que ha variado respecto al Caso 1

```

1 // Parameters and variables
2 Max_Size as RealParameter (1.5, Description:"Maximum crystal size,
mm");
3 Size1 as RealParameter (0.1);
4 C as massfraction (Description: "Concentración", Record:True);
5 Ceq as massfraction (Description: "Equilibrium concentration,
kg/kg", Record:True);
6 Cout as massfraction (Description: "Concentración combinada,
kg/kg");
7 Cin as massfraction(Description: "Concentración de entrada,
kg_solido/kg_disolv", Fixed, 0.15);
8 SuperSat as massfraction (Description: "Super saturation");
9 Tau as time_ Description: "Residence time, 1/h");
10 Mt as conc_mass (Description: "Magma density, kg/m3", Record:True);
11 Temp as temperature(Description: "Temperatura, °C", Fixed, 25);
12 W as flow_mass (Description:"Liquid mass flow rate, kg/h", Fixed,
100);
13 Rho as dens_mass_liq (Description: "Liquid density, kg/m3", Fixed,
1000);
14 RhoS as dens_mass_sol (Description: "Crystal density, kg/m3",
Fixed, 2660);
15 V as volume (Description: "Crystalizer volume, m3", Fixed, 0.05);
16 E as notype (Description: "parámetro para evitar dividir entre
cero", Fixed, 1e-10);
17 //-----
18 // Discretization (FVM)
19 N_x AS IntegerParameter (150, Description: "Numero de celdas de
mallado");
20 NodosInt as Integerset ([1: N_x] , description : " Nodos internos");
21 NodosTotal as Integerset ([0:N_x+1] , description: "Nodos Tota-
les");
22 //-----
23 //Definir otras variables
24 Kv(NodosInt) AS NOTYPE (Description: "Factor de forma, mm");
25 G(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Tasa de creci-
miento, mm/h");
26 n_i(NodosTotal) AS NOTYPE (description: "Densidad de cristales
para cada intervalo de tamaños, n°/m4");
27 PSD ([1:N_x]) AS percentu (Description: "Particle Size Distribu-
tion");
28 LC ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los tamaños,
mm");
29 LC_caras ([0:N_x+1]) as NOTYPE (description: " vector con los ta-
maños caras, mm");
30 G_caras([0:N_x]) AS NOTYPE (description: "Tasa de crecimiento en
las caras, mm/h");
31 Gn([0:N_x]) as notype (description: "G*n, mm*n°/m4*h");
32 r([2:N_x-1]) as notype (description: "Parámetro para métodos de
alta resolución");
33 Z([2:N_x-1]) as notype (description: "Parámetro para métodos de
alta resolución");
34 //-----

```

```

35 /*BALANCE POBLACIÓN MÉTODOS ALTA RESOLUCIÓN
36 k=1--> CARA INTERNA = N_x = 1
37 k=-1 --> CARA EXTERNA = N_x = 10
38 k=1/3 --> CARAS INTERNAS = [1:N_x-1]
39 OPCIÓN: CASO 4
40 r(i)=(n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E));
41 Z(i)=max(0, min(2*r(i), min(1/3+2/3*r(i),2)));
42 Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(Z(i)*r(i))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
43 >>>>Z(i)=max(0, min(2*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E)),
    min(1/3+2/3*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E)),2)));
44 >>>>Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(Z(i)*r(i))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
45 */
46 Gn(0)=G(0)*n_i(0);
47 Gn(1)=G(1)*((n_i(2)+n_i(1))/2);
48 for i in [2:N_x-1] do
49 Z(i)=max(0, min(2*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E)),
    min(1/3+2/3*((n_i(i+1)-n_i(i)+E)/(n_i(i)-n_i(i-1)+E)),2)));
50 Gn(i)= G(i)*(n_i(i)+0.5*(Z(i))*(n_i(i)-n_i(i-1)));
51 Endfor
52 Gn(N_x)= G(N_x)*(n_i(N_x)+0.5*(n_i(N_x)-n_i(N_x-1)));
53 //-----
54 //Caras internos:
55 n_i(0) = (4.12e14 * Mt * SuperSat^3.4 )/ (847.0 * Super-
    Sat^2.0*1e-3);
56 FOR x IN [1:N_x] DO
57 $n_i(x)+(Gn(x)-Gn(x-1))/(dx)+ n_i(x)/Tau=0.0;
58 ENDFOR
59 //-----
60 // Condiciones Iniciales
61 C: 0.0, initial; // No soluto
62 FOR x IN [1:N_x] DO // No hay cristales
63 n_i(x): 1, initial;
64 ENDFOR
65 End

```

ANEXO B: Abreviaturas, unidades y acrónimos

TFG: Trabajo de Fin de grado

ACM: Aspen Custom Modeler

ODS: Objetivos de Desarrollo Sostenible

EDP: Ecuaciones en Derivadas Parciales

EDO: Ecuación Diferencial Ordinaria

FVM: *Finite Volume Method* o Método de volúmenes finitos

DTP: Distribución de Tamaños de Partículas

SÍMBOLO	UNIDADES	DESCRIPCIÓN
A	mm ²	Área del cristal
B ₀	n°/m ³ ·h	Tasa de nucleación
C	kg/kg	Concentración del soluto en la disolución
C*	kg/kg	Concentración de saturación
C _{EQ}	kg/kg	Concentración en el equilibrio
C _i	kg/kg	Concentración del soluto en la interfase
D	m ² /s	Coefficiente de difusión
G	mm/h	Tasa de crecimiento
G ₀	mm/h	Tasa de crecimiento de los núcleos
k _d	m/s	Coefficiente de transferencia
k _r	mol/L·s	Constante cinética
m _c	g	Masa del cristal
M _t	kg/m ³	Densidad del magma
n	n°/m ⁴	Densidad poblacional
Q	m ³ /h	Caudal volumétrico
r	-	Ratio
S	-	Ratio de supersaturación
T	°C	Temperatura
V	m ³	Volumen del cristizador
W	kg/h	Caudal másico
Z	-	Función de flujo límite
ΔG	J	Energía libre de Gibbs
δ	mm	Grosor de la capa límite
σ	kg/kg	Supersaturación
ρ	kg/m ³	Densidad
Φ _v	-	Factor de forma
κ	-	Parámetro del métodos combinados
τ	h	Tiempo de residencia

ANEXO C: Evaluación de impactos de los Objetivos de Desarrollo Sostenible



Trabajo de Fin de Grado

Direct positive	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Indirect positive	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
No impact	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Indirect negative	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Direct negative	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Don't know - more knowledge needed																	
	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Description

Los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) son un conjunto de metas establecidas para lograr un futuro sostenible. En el contexto de los procesos industriales de cristalización, el análisis de ODS y sostenibilidad se enfoca en evaluar cómo estos procesos pueden contribuir, positiva o negativamente, al correcto desarrollo de dichos objetivos y cómo pueden ser mejorados para minimizar su impacto ambiental y social. Esto implica evaluar desde el uso de recursos naturales hasta la emisión de gases de efecto invernadero, pasando por la gestión de residuos y la inclusión de prácticas sociales responsables en la cadena de producción.

Strategic choices

These are the prioritised areas that we will take action on.

- Positive impacts we can strengthen even further
- Negative impacts we can eliminate or minimise
- Knowledge gaps we need to fill

Strategy

La cristalización es un proceso industrial que presenta implicaciones para los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), ya que puede tener un impacto significativo en el medio ambiente y la sociedad. Para mejorar los ODS en relación a los procesos de cristalización industrial, se

puede seguir una estrategia integrada que involucre prácticas de producción sostenibles, innovación, conciencia y compromiso social, y seguimiento y evaluación del desempeño.



NO POVERTY

End poverty in all its forms everywhere

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.



ZERO HUNGER

End hunger, achieve food security and improved nutrition and promote sustainable agriculture

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.



GOOD HEALTH AND WELL-BEING

Ensure healthy lives and promote well-being for all at all ages

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización se utiliza en la producción de muchos medicamentos, incluidos analgésicos, antidepresivos, antibióticos y otros tratamientos médicos importantes. Al garantizar que se produzcan productos farmacéuticos de alta calidad, la cristalización contribuye a mejorar la salud y el bienestar de las personas.



QUALITY EDUCATION

Ensure inclusive and equitable quality education and promote lifelong learning opportunities for all

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.



GENDER EQUALITY

Achieve gender equality and empower all women and girls

Impact

INDIRECT POSITIVE

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización. No obstante, a lo largo del proceso de cristalización, la plantilla de trabajadores necesaria podrá ser mixta de manera equitativa entre hombres y mujeres.



CLEAN WATER AND SANITATION

Ensure availability and sustainable management of water and sanitation for all

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización se utiliza en la producción de productos químicos y materiales que pueden contaminar el agua si no se manejan adecuadamente. Por lo tanto, será importante implementar prácticas de producción sostenibles.



AFFORDABLE AND CLEAN ENERGY

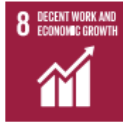
Ensure access to affordable, reliable, sustainable and modern energy for all

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización. No obstante, se podrán emplear energías limpias para el proceso de cristalización.



DECENT WORK AND ECONOMIC GROWTH

Promote sustained, inclusive and sustainable economic growth, full and productive employment and decent work for all

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización. No obstante, se podrá adoptar dicho ODS en la plantilla de trabajadores necesarios para el proceso de cristalización.



INDUSTRY, INNOVATION AND INFRASTRUCTURE

Build resilient infrastructure, promote inclusive and sustainable industrialization and foster innovation

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización es un proceso clave en la producción de productos químicos y materiales que se emplean en gran variedad de sectores. Mejorando la eficiencia y la sostenibilidad de los procesos de cristalización, se pueden mejorar la innovación y la infraestructura industrial.



REDUCED INEQUALITIES

Reduce inequality within and among countries

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.



SUSTAINABLE CITIES AND COMMUNITIES

Make cities and human settlements inclusive, safe, resilient and sustainable

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización. No obstante, se podrán adoptar las políticas sostenibles que propone este objetivo.



RESPONSIBLE PRODUCTION AND CONSUMPTION

Ensure sustainable consumption and production patterns

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización es un proceso intensivo en recursos que requiere una cantidad significativa de energía, agua y materias primas. Al implementar prácticas de producción sostenibles y minimizar el desperdicio, se puede promover una producción y consumo responsables.



CLIMATE ACTION

Take urgent action to combat climate change and its impacts

Impact

INDIRECT POSITIVE

Motivation

Pese a no ser un ODS estrechamente relacionado con el proceso de cristalización que se trata en este TFG, la acción por combatir el cambio climático estará presente, por ejemplo planteando una correcta gestión de residuos, tanto sólidos como hídricos tras el proceso de cristalización.



LIFE BELOW WATER

Conserve and sustainably use the oceans, seas and marine resources for sustainable development

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización puede tener un impacto en los ecosistemas acuáticos especialmente si se producen sustancias químicas tóxicas o se utilizan prácticas de producción insostenibles. En relación al ODS 6 previamente mencionado, será importante adoptar prácticas de producción sostenibles y respeten la vida submarina.



LIFE ON LAND

Protect, restore and promote sustainable use of terrestrial ecosystems, sustainably manage forests, combat desertification, and halt and reverse land degradation and halt biodiversity loss

Impact

DIRECT POSITIVE

Motivation

La cristalización puede tener un impacto en los ecosistemas terrestres, sobre todo si se producen sustancias químicas tóxicas o se utilizan prácticas de producción insostenibles. Tal y como se ha mencionado previamente, será importante adoptar prácticas de producción sostenibles y respeten los ecosistemas terrestres.



PEACE, JUSTICE AND STRONG INSTITUTIONS

Promote peaceful and inclusive societies for sustainable development, provide access to justice for all and build effective, accountable and inclusive institutions at all levels

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.



PARTNERSHIPS FOR THE GOALS

Strengthen the means of implementation and revitalize the global partnership for sustainable development

Impact

NO IMPACT

Motivation

Este Objetivo de Desarrollo Sostenible no se encuentra estrechamente relacionado con los procesos industriales de cristalización.