



"Estudio de la hidrodinámica de dos dispersores de alto corte usando Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)"

TESIS

Que presenta el Ingeniero Químico:

Rubén Ramírez Gómez

Para obtener el grado de:

Maestro en Ingeniería de Procesos

Director de Tesis:

Dr. Jorge Ramírez Muñoz

Departamento de Energía, UAM-A

Co-director de tesis:

Dr. Sergio Alejandro Martínez Delgadillo

Departamento de Ciencias Básicas, UAM-A

México, D.F., 26 de Febrero de 2015

A

mi madre

con mucha admiración y respeto

Agradecimientos

Dr. Jorge Ramírez Muñoz	Sus conocimientos, sus orientaciones y su motivación han sido fundamentales para mi formación y para la realización de este trabajo.
Dr. Daniel García Cortes	Por su ayuda y consejos en el manejo del software.
M. en C. Javier Hernández Aguilar	Por sus críticas, sugerencias, apoyo en la parte experimental y por las correcciones de este trabajo.
Dr. José Luis Contreras Larios	Por tomar con mucha seriedad la revisión de este escrito y por todas sus correcciones.
Dr. Jesús Isidro Gonzales Trejo	Por su crítica constructiva acerca de mi metodología numérica.
Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez	Por su apoyo como coordinador durante mi estancia en este posgrado.
Dr. Fernando Guillen	Por su trato siempre amable en el tiempo de duración de la beca FESE-Comex.
Dra. Margarita González Brambila	Por sus orientaciones y por su ayuda para tener alojamiento cerca de la universidad.
Ing. Hugo Rodríguez Pérez	Por su apoyo en la parte experimental de este trabajo.
Al profesorado del posgrado en ingeniería de procesos	Por todas la enseñanzas recibidas.
Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología	Por el apoyo financiero otorgado para la realización del posgrado, para la estancia en el extranjero y para asistir al congreso CHISA 2014
FESE-COMEX	Por la beca otorgada, la cual me fue de mucha ayuda.

Resumen

En este trabajo se realizó un estudio numérico del desempeño hidrodinámico de dos impulsores comerciales de alto corte de escala de laboratorio tipo Hockmeyer® de dos (HockD-2A) y cuatro anillos (HockD-4A), y su desempeño se comparó con el de una turbina Rushton estándar (RT). Los resultados de las simulaciones fueron validados con mediciones experimentales de potencia. El estudio se llevó a cabo en un tanque agitado cilíndrico sin deflectores en el régimen de flujo de transición a turbulento. Los parámetros hidrodinámicos de macro-mezcla: números de potencia y de bombeo y locales: campos de velocidad y distribución de la tasa de disipación de energía, así como la tasa de disipación de energía promedio en el volumen barrido por el impulsor y sus cuchillas se obtuvieron a partir de los resultados de las simulaciones para cada impulsor estudiado.

A partir de los resultados de las simulaciones, se encontró que los números de potencia y de bombeo o su relación no pueden ser simplemente conectados para seleccionar adecuadamente un impulsor en aplicaciones en donde es deseable una alta disipación de energía localizada. Además se encontró que la relación de la tasa de disipación de energía promedio en el volumen barrido por los impulsores ($\bar{\epsilon}_{BI}$) y el promedio en todo el volumen ($\bar{\epsilon}$) a los tres consumos de potencia constante (P) evaluados en este trabajo, son inferiores para los dos impulsores de alto corte. Sin embargo, se encontró que la disipación de energía promedio adimensional en el volumen barrido por la cuchilla ($\bar{\epsilon}_{BP}/\bar{\epsilon}$) cuando P aumenta de 12.92 W a 23.45 W, es mayor para el HockD-2A en comparación con la RT, confirmando la ventaja del alto cizallamiento inducido por el HockD-2A cuando opera a velocidades más altas.

Contenido

<i>Agradecimientos</i>	ii
Resumen	iii
Índice de Figuras	vi
Lista de Tablas	viii
Notación	ix
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Justificación	2
1.2 Objetivos generales	3
1.2.1 Objetivos específicos	3
1.3 Descripción del contenido de la tesis	4
2. ANTECEDENTES	5
3. REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE	8
3.1 Introducción	8
3.2 Tipos de agitadores	8
3.3 Caracterización de los impulsores	11
3.3.1 Números de potencia (N_p) y de bombeo (N_Q)	11
3.3.2 Patrón de flujo	15
4. DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	17
4.1 Ecuaciones que describen el flujo	17
4.2 Discretización de las ecuaciones	18
4.3 Modelado del impulsor en Fluent®	19
4.3.1 Flujo en marcos de referencia rotativos	19

4.3.2	El modelo MRF	20
5.2.2	La formulación del modelo MRF.....	20
4.4	El modelo multifásico de volumen de fluido (VOF)	23
4.4.1	Ecuación de la fracción de volumen.....	24
5.	METODOLOGÍA	26
5.1	Mediciones experimentales del consumo de potencia.....	26
5.2	Metodología numérica	29
5.2.1	Generación de la geometría del modelo	30
5.2.2	Mallado del dominio computacional	33
5.2.3	Resolución de las ecuaciones	35
5.2.4	Post procesamiento de los resultados en Fluent®	39
5.2.5	Análisis de independencia de malla.....	42
6.	RESULTADOS.....	44
6.1	Análisis de independencia de malla.....	44
6.2	Validación de las simulaciones.....	47
6.3	Comparación del desempeño hidrodinámico de los tres impulsores estudiados ...	48
6.3.1	Simulación de la formación del vórtice.....	48
6.3.2	Parámetros de macro-mezcla.....	50
6.3.3	Campos de velocidad.....	53
6.3.4	Disipación de energía	54
7.	CONCLUSIONES	62
8.	REFERENCIAS	64

Índice de Figuras

Figura 3.1. Agitadores para fluidos de baja viscosidad.....	9
Figura 3.2. Agitadores para fluidos de alta viscosidad.....	9
Figura 3.3. Tipos de flujo producidos por los agitadores.	10
Figura 3.4. Patrón de flujo característico en un tanque sin baffles.....	11
Figura 3.5. Perfil de velocidad de una turbina radial.....	15
Figura 4.1. Marcos de referencia estacionario y móvil (Fluent, 2014).	21
Figura 5.1. Equipo de agitación Dispermat® tipo AE01.	26
Figura 5.2. Diagrama de la instalación experimental.	27
Figura 5.3. Planos a escala de los impulsores evaluados.....	28
Figura 5.4. Geometrías en 3D de los modelos elaborados. a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A.	30
Figura 5.5. Segmentación del dominio para la RT en dos regiones. a) vista isométrica y b) vista superior.	31
Figura 5.6. Dominio computacional usado para la RT. a) vista isométrica y b) vista superior.	31
Figura 5.7. Dominio computacional para la RT.	32
Figura 5.8. Malla utilizada para las simulaciones con la RT.....	34
Figura 5.9. Malla utilizada para las simulaciones con el impulsor HockD-2A.....	34
Figura 5.10. Malla utilizada para las simulaciones con el impulsor HockD-4A.....	35
Figura 5.11. Superficie lateral para calcular el caudal inducido por un impulsor radial. . a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A.	42
Figura 6.1. Análisis de independencia de malla y de tiempo de cómputo para la RT a 1200 rpm.....	45

Figura 6.2. Análisis de independencia de malla y tiempo de cómputo para el HockD-2A a 1200 rpm.....	45
Figura 6.3. Análisis de independencia de malla y tiempo de cómputo para el HockD-4A a 1200 rpm.....	46
Figura 6.4. Curvas de potencia para los tres impulsores evaluados: a) RT y b) HockD-2A y HockD-4A.	47
Figura 6.5. Número de bombeo para la RT en función del Re	48
Figura 6.6. Altura de la superficie libre del líquido en función del Re para los tres impulsores evaluados.....	49
Figura 6.7. Parámetros de macro-mezcla para los tres impulsores en función del Re : a) N_P y b) N_Q	50
Figura 6.8. N_P/N_Q en función del Re para los tres impulsores estudiados.....	51
Figura 6.9. Magnitudes de la velocidad a un mismo consumo de potencia ($P = 12.92 W$). 54	
Figura 6.10. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en un plano vertical para: a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A a una misma potencia ($P=12.92 W$). ..	55
Figura 6.11. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en planos horizontales para la RT ($P=12.92 W$).	56
Figura 6.12. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en planos horizontales para el HockD-2A ($P=12.92 W$).	57
Figura 6.13. Contornos en planos horizontales de la tasa de disipación de energía adimensional para el HockD-4A ($P=12.92 W$).....	58

Lista de Tablas

Tabla 5.1. Dimensiones de los impulsores en milímetros.	29
Tabla 5.2. Volumen de fluido utilizado para cada configuración de impulsor	29
Tabla 5.3. Número de bloques creados para cada impulsor.	32
Tabla 5.4. Volumen de fluido en cada región del volumen barrido por el impulsor.....	33
Tabla 5.5. Especificación del algoritmo de solución.....	36
Tabla 5.6. Especificación de los materiales.....	36
Tabla 5.7. Especificación de las condiciones de operación.....	37
Tabla 5.8. Especificación de las condiciones de frontera en el fluido.....	37
Tabla 5.9. Especificación de las condiciones de frontera en las paredes.	38
Tabla 6.1. Número de celdas, tipos de malla y tiempo de cómputo usado en las simulaciones.	46
Tabla 6.2. Predicciones de números de potencia y bombeo para un mismo consumo de potencia.....	52
Tabla 6.3. Efecto de la potencia suministrada en $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ para los tres impulsores evaluados.	59
Tabla 6.4. Efecto de la potencia suministrada en $\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$ y $\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$ para los impulsores RT, HockD-2A y HockD-4A.....	61

Notación

Símbolos:

<i>Símbolo</i>	Descripción	Unidades
b	Diámetro del eje	mm
b_l	Espesor del anillo	mm
C	Distancia del fondo del tanque al impulsor	mm
c	Espesor de la cuchilla	mm
c_l	Distancia entre anillos	mm
D	Diámetro del impulsor	mm
D_i	Diámetro interno del anillo	mm
e	Espesor del diente	mm
f	Ancho del diente	mm
g	Distancia entre el centro del impulsor y la cuchilla	mm
h	Altura de la cuchilla	mm
k	Diámetro del disco	mm
N	Velocidad rotacional del impulsor	s^{-1}
N_P	Número de potencia	-----
N_Q	Número de bombeo	-----
p	Espesor del disco	mm
P	Potencia suministrada	W
Q	Caudal	$m^3 s^{-1}$
R	Radio del impulsor	mm
Re	Número de Reynolds	-----
T	Diámetro del tanque	mm
\vec{v}	Vector de velocidad	$m s^{-1}$
V_{BP}	Volumen barrido por las cuchillas del impulsor	cm^3
V_{BC}	Volumen barrido por el centro del impulsor	cm^3
V_{BI}	Volumen barrido por el impulsor	cm^3
w	Largo de la cuchilla	mm

x, y, z	Coordenadas Cartesianas	mm
Z	Altura del líquido	mm
Z_g	Altura inicial del aire en las simulaciones	mm
Z_l	Altura inicial del líquido en las simulaciones	mm

Símbolos griegos:

<i>Símbolo</i>	Descripción	Unidades
α	Angulo entre cuchillas	°
β	Angulo entre dientes	°
I	Tensor unitario	-
ε	Disipación viscosa de energía	m^2s^{-3}
ε_i	Disipación turbulenta de energía	m^2s^{-3}
μ	Viscosidad del fluido	$\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$
ρ	Densidad	kg m^{-3}
$\bar{\tau}$	Tensor de esfuerzos viscosos	$\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-2}$
$\bar{\varepsilon}$	Tasa promedio de disipación de energía	m^2s^{-3}
$\bar{\varepsilon}_{BC}$	Tasa promedio de disipación de energía en V_{BC}	m^2s^{-3}
$\bar{\varepsilon}_{BM}$	Tasa promedio de disipación de energía en V_{BM}	m^2s^{-3}
$\bar{\varepsilon}_{BI}$	Tasa promedio de disipación de energía en V_{BI}	m^2s^{-3}
∇	Operador nabra	m^{-1}
τ	Torque	$\text{Kg m}^2\text{s}^{-2}$

Abreviaturas:

Abreviatura	Descripción
CAD	Dibujo Asistido por Computadora
CFD	Dinámica de Fluidos Computacional
HockD-2A	Disco tipo Hockmeyer D de 2 anillos
HockD-4A	Disco tipo Hockmeyer D de 4 anillos
HP	Caballos de Fuerza
MRF	Marco de Referencia Múltiple
rpm	Revoluciones por minuto
RRF	Marco de Referencia Rotatorio
RT	Turbina Rushton
SRF	Marco de Referencia Estacionario
VOF	Volumen de Fluido
°Bx	Grados Brix
PIV	Velocimetría de Imagen de Partículas
QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los problemas prácticos más relevantes para una amplia variedad de industrias es la dispersión de polvos en líquidos. El término dispersión se refiere al proceso de desaglomerar para después incorporar un polvo en un medio líquido, de forma tal que el producto final se compone de partículas finas distribuidas uniformemente en todo el medio (Harnby *et al.*, 1992). En este tipo de aplicaciones, para alcanzar el máximo desempeño del producto final es necesario que los aglomerados de partículas se reduzcan al menor tamaño posible. Por ejemplo, el dióxido de titanio (TiO_2) utilizado en la fabricación de pinturas para dar brillo y blancura tiene un tamaño de partícula primario de aproximadamente 0.25 micras, pero puede existir como un polvo con aglomerados de entre 10 a 100 micras, esto debido a la existencia de diversas fuerzas intermoleculares, una de las más importantes son las fuerzas atractivas tipo Van der Waals (Harnby *et al.*, 1992).

Las fuerzas que mantienen unidas a las partículas en los aglomerados podrían llegar a ser muy fuertes, por lo que la desaglomeración ocurrirá cuando las fuerzas ejercidas localmente sean más intensas que las fuerzas que las mantienen unidas. Los agitadores convencionales son mezcladores eficientes, pero generalmente no son capaces de generar la suficiente fuerza de corte para romper los aglomerados, esto sin importar el tiempo de agitación (Hockmeyer, 2010). En cambio, los discos dispersores suelen tener zonas de elevado cizallamiento y alto flujo en las cercanías de las cuchillas, lo que genera fuerzas de corte suficientes para primero desaglomerar las partículas aglomeradas y después distribuir las uniformemente en el medio (Paul *et al.*, 2004, Hockmeyer, 2010). Por este motivo, los discos dispersores son los preferidos para la desaglomeración de pigmentos sólidos.

En la industria de recubrimientos es muy importante que la dispersión de los pigmentos sea muy eficiente ya que esto disminuye los costos de fabricación (Harnby *et al.*, 1992). Para alcanzar una alta eficiencia es necesario suministrar la máxima potencia mecánica, pero manteniendo un flujo laminar con un patrón de flujo de circulación en forma de “rosquilla”, es decir, el producto debe de fluir de manera circular cercano a la

pared del tanque mientras se aproxima al centro del tanque para ser golpeado por el dispersor de alto corte.

A pesar de que el proceso de dispersión mecánica de aglomerados en la industria es una operación crítica, se han realizado pocos estudios sobre este tipo de procesos. Esta carencia de información no ha permitido desarrollar métodos robustos de elección que consideren todas las variables críticas que permitan obtener dispersiones óptimas para un sistema dado. En la práctica, la elección del tipo de dispersor y de las condiciones de operación se realiza generalmente por ensayo y error con la ayuda de la experiencia de los ingenieros de proceso y de la información proporcionada por los proveedores la cual está basada generalmente en reglas heurísticas, y por lo regular, es tendenciosa a resaltar las ventajas de los impulsores de alto corte que les interesa vender.

1.1 Justificación

Los pigmentos en la mayoría de los recubrimientos representan la parte más costosa de la formulación (Pal y Fleming, 2006). Por lo tanto, es de vital importancia lograr una rápida y eficaz dispersión del pigmento con una mínima aplicación de energía. Los costos asociados con el consumo de energía contribuyen de manera significativa a los costes de funcionamiento general de las instalaciones industriales (Ascanio *et al.*, 2002). Además, debido a la escasez de recursos como la ilmenita, empleada para la obtención del TiO_2 , se ha incrementado el valor comercial de esta materia prima (Davis, 1982).

Por lo discutido anteriormente, resulta trascendental la necesidad de aumentar el conocimiento del desempeño de los discos dispersores partiendo de las ecuaciones fundamentales de la mecánica de fluidos. Sin embargo, debido a la complejidad de los fenómenos de transporte involucrados en sistemas multifásicos sólido-líquido, este tipo de procesos resulta difícil de analizar y caracterizar a partir de sus ecuaciones gobernantes. Tradicionalmente, para superar estas dificultades se ha empleado el uso de ecuaciones de diseño basados en el uso de grupos adimensionales y correlaciones empíricas de parámetros globales (Zubitur, 1998). Estos métodos proporcionan buenos resultados en algunas aplicaciones pero no pueden proporcionar la información necesaria sobre los fenómenos locales que ocurren en las cercanías del impulsor. Por ejemplo, la tasa de disipación de

energía en el volumen barrido por el impulsor resulta de interés debido a que en procesos de dispersión sólido-líquido determina la tasa de desaglomeración de nano-partículas (Xie *et al.*, 2007).

En la bibliografía existen publicaciones en donde se realizan estudios en tanques agitados utilizando diferentes programas comerciales de CFD, pero en general en estos trabajos se estudian los impulsores tradicionales en tanques provistos de baffles y en la mayoría en el régimen de flujo turbulento. En contraste, en la revisión realizada de la literatura, no se encontraron trabajos previos donde se aborde un estudio usando herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) para determinar el desempeño hidrodinámico de discos dispersores de alto corte. En este trabajo se estudió la hidrodinámica de dos dispersores comerciales de alto corte del tipo disco con anillos (Hockmeyer[®]) suponiendo un fluido newtoniano con propiedades efectivas como fluido de proceso. El estudio se realizó usando el software comercial de dinámica de fluidos computacional (CFD) Fluent[®] 14.5. Además, debido a que los resultados de la simulación numérica son altamente dependientes de las suposiciones hechas y de las condiciones de frontera preestablecidas, los resultados numéricos se validaron comparándolos con mediciones experimentales de la potencia neta suministrada por cada impulsor, la cual en el estado estacionario del proceso de agitación, es igual a la potencia disipada por el fluido. Adicionalmente, se realizó un análisis de independencia de la densidad de la malla usando los valores calculados a partir de las simulaciones de números de potencia y de bombeo.

1.2 Objetivos generales

Caracterizar la hidrodinámica inducida por una turbina Rushton y dos impulsores comerciales de alto corte de escala laboratorio tipo Hockmeyer[®] de dos y cuatro anillos en condiciones isotérmicas usando el software comercial de Dinámica de Fluidos Computacional Fluent[®] 14.5.

1.2.1 Objetivos específicos

- Determinar el tamaño de malla computacional límite tal que las predicciones del modelo sean independientes de cualquier aumento en la densidad de la malla.

- Caracterizar el macro-mezclado de cada impulsor mediante la determinación de los números de potencia y bombeo.
- Determinar experimentalmente el número de potencia para cada impulsor.
- Validar las simulaciones comparando los valores obtenidos del número de potencia calculado a partir del torque obtenido de las simulaciones con los valores medidos experimentalmente.
- Comparar el consumo de energía calculado mediante el torque del eje y del agitador con el consumo de energía calculado mediante la integral de la tasa de disipación de energía.
- Determinar los parámetros hidrodinámicos claves que influyen en la eficiencia de dispersión: tasa de disipación de energía local y promedio en diferentes regiones dentro del volumen barrido por el impulsor, así como los perfiles y campos de velocidad.
- Comparar el desempeño hidrodinámico de los dos discos de alto corte evaluados con el de una turbina Rushton.

1.3 Descripción del contenido de la tesis

El trabajo realizado en esta tesis se ha organizado en 7 capítulos cuyo contenido se describe brevemente a continuación:

En el **capítulo 2** se aborda una revisión de la literatura científica sobre los dispersores de alto corte. En el **capítulo 3** se presenta una revisión bibliográfica de los conceptos más importantes relacionados con la agitación mecánica y su relación con el proceso de dispersión mecánica de pigmentos. En el **capítulo 4** se presentan los modelos matemáticos que se utilizaron para las simulaciones en este trabajo. Se describe el modelo matemático VOF para simular la interface gas-líquido y el modelo MRF para modelar la rotación del impulsor. En **capítulo 5** se describe la metodología seguida para la simulación hidrodinámica del tanque agitado en dos fases, así como la metodología experimental y el equipo usado para las mediciones de potencia. En el **capítulo 6** se presentan los resultados experimentales y numéricos y se aborda una discusión de los mismos. Finalmente, en el **capítulo 7** se presentan las conclusiones más relevantes de este trabajo.

2. ANTECEDENTES

En la revisión de la literatura científica sobre dispersores de alto corte únicamente se encontraron tres trabajos experimentales cuyos resultados más importantes se discuten a continuación.

Xie *et al* (2007) investigaron la tasa de ruptura de aglomerados de una suspensión de nano-partículas de Aerosil® 200 V en agua desionizada producida por los siguientes dispositivos de mezcla: 1) un impulsor de flujo axial hidroala de hoja estrecha (LE-20), 2) un impulsor de flujo mixto de cuatro paletas inclinadas a 45° (PBT, por sus siglas en inglés, 45° pitched four-blade turbine), 3) un impulsor de flujo radial Rushton estándar (RT), y 4) un impulsor de alto cizallamiento de diente de sierra tipo EkatoMizer, el cual se utilizó individualmente y en combinación con los otros impulsores de flujo radial/axial. Los experimentos de desaglomeración se realizaron en un tanque cilíndrico con fondo tori esférico equipado con cuatro deflectores igualmente espaciados.

Estos autores encontraron que la tasa de generación de agregados finos dentro del proceso de desaglomeración es controlada por la tasa máxima de disipación de energía (ϵ_{\max}) producida por el dispositivo de alto cizallamiento, y que el tamaño final de los agregados finos producidos no era afectado por cualquier entrada de energía adicional suministrada por los impulsores de flujo mixto/radial cuando éstos se usaron en combinación con el impulsor EkatoMizer. No obstante, experimentos independientes mostraron, que se requieren estos tipos de impulsores convencionales en combinación con el EkatoMizer para obtener una incorporación más rápida de los sólidos que flotan en la superficie y para la humectación de las partículas.

Estos autores asumieron que el valor de ϵ_{\max} se localiza en la zona de barrido del impulsor y realizaron una estimación de la tasa de disipación máxima suponiendo que alrededor del 40% de la potencia de entrada se disipa en la región cercana al impulsor lo que conduce a la siguiente ecuación.

$$\epsilon_{\max} = \frac{0.4P_0N^3D^5}{V_{\text{barrido}}} \quad (2.1)$$

Xie *et al* (2008) realizaron un estudio para un tanque agitado usado para la desaglomeración de sólidos utilizando un impulsor de alto corte EkatoMizer y un rotor estator y también utilizaron los siguientes impulsores convencionales: 1) un impulsor de flujo radial (RT), 2) un impulsor de alta eficiencia (HE3, por sus siglas en inglés, High Efficiency Impeller) y 3) un impulsor de flujo mixto (PBT, por sus siglas en inglés, Pitch Blade Turbine) y evaluaron diferentes velocidades de agitación. Con un método calorimétrico estimaron la potencia suministrada por unidad de volumen para cada una de las combinaciones de los impulsores, la cual relacionaron con el tamaño promedio final de partículas. Los resultados de este estudio mostraron que la cinética del proceso de desaglomeración es controlada por el valor de ϵ_{\max} producido por los dispositivos de alto cizallamiento. Encontraron que a bajas velocidades el impulsor EkatoMizer proporciona poca ruptura de aglomerados debido a los pequeños valores de ϵ_{\max} generados. Además de que casi toda la reducción de tamaño se produjo en los primeros minutos de operación (10-15 min.). A velocidades más altas, el EkatoMizer genera un ϵ_{\max} superior y los aglomerados de Aerosil se dividen en agregados con un tamaño promedio de 300 nm lo que es bastante lejos del tamaño de partículas primarias de 12 nm que fue lo que el fabricante reportó. Por lo tanto, estos finos aglomerados contienen partículas primarias, que están fuertemente unidas entre sí y no pueden ser desaglomeradas por los efectos hidrodinámicos. Encontraron que el dispositivos de dispersión más exitosos fue el tipo rotor-estator, esto se debe a que son capaces de generar valores muy altos de ϵ_{\max} .

Unadkat y col. (2011) utilizaron técnicas de velocimetría de imagen de partículas (PIV, por sus siglas en ingles) para estudiar la tasa local de disipación (ϵ) y el campo de flujo inducido por un impulsor EkatoMizer en un tanque con deflectores, operado en el régimen de flujo turbulento totalmente desarrollado.

Estos autores reportaron los contornos de la energía cinética turbulenta y las velocidades axiales, radiales y tangenciales alrededor del impulsor. Los gradientes de velocidad que obtuvieron les permitieron obtener los valores de ϵ mediante la siguiente ecuación:

$$\varepsilon = C_s^2 \Delta^2 \left\{ \frac{12}{10} \left[2 \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right] \right\}^{3/2} \quad (2.2)$$

Ellos encontraron que la relación entre la disipación de energía máxima (ε_{\max}) y la tasa de disipación promedio para la zona de descarga del impulsor EkatoMizer era muy similar a la reportada para diferentes impulsores convencionales, por lo que los autores cuestionan la información acerca de la ventaja de alta cizalladura de este tipo de impulsores de alto corte reportada. Sin embargo, como ellos señalan, los experimentos de velocimetría de imagen de partículas (PIV, por sus siglas en inglés, Particle image velocimetry) se llevaron a cabo fuera del volumen barrido por el impulsor EkatoMizer y es posible que la tasa máxima de disipación se produzca dentro del volumen de barrido del impulsor, donde puede ser significativamente mayor.

3. REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE

3.1 Introducción

En las industrias petroquímicas, químicas y de procesos, muchas operaciones dependen en alto grado del mezclado y de la agitación eficiente de los fluidos durante las etapas del proceso. La agitación se refiere a forzar a un fluido por medios mecánicos a que adopte un movimiento circulatorio en el interior de un recipiente. El movimiento circulatorio del fluido se utiliza para acelerar los procesos de transferencia de calor y masa, alcanzar uniformidad de concentración y temperatura, acelerar las reacciones químicas limitadas por transferencia de calor o masa, promover la transferencia de calor entre el fluido de proceso y el fluido de servicio que circula a través de un serpentín o chaqueta (Perry, 2001, Bondy y Lippa, 1983). Además, es necesario llevar a cabo estas operaciones en el mínimo tiempo y con el mínimo consumo de energía.

En el párrafo anterior se han mencionado algunas de las aplicaciones para los sistemas de agitación y resulta evidente que las características mecánicas en estos dispositivos son tan variadas como las aplicaciones dadas a ellos. El estudio de los sistemas de agitación depende de varias consideraciones básicas una de ellas es el efecto del recipiente. La geometría del recipiente y sus dimensiones pueden determinar la selección del agitador y el desempeño del mezclado. Frecuentemente, los recipientes utilizados en algunas plantas son seleccionados incorrectamente para un resultado específico de la agitación, esto a causa de que algunos procesos de mezclado se llevan a cabo de mejor manera en recipientes de forma y tamaño muy específicos (Oldshue, 1983).

A continuación se presenta una revisión de la literatura sobre sistemas agitados mecánicamente y su relación con la dispersión mecánica de pigmentos.

3.2 Tipos de agitadores

Existe una gran variedad de agitadores en el mercado y puede ser un problema seleccionar el más adecuado para un proceso en particular. El criterio de selección del agitador dependerá del tipo de mezcla, de la capacidad del recipiente y de las propiedades del fluido, principalmente de la viscosidad (Das, 2006).

Por lo general se distinguen dos categorías de agitadores según la viscosidad del fluido. Si los fluidos que se van a manejar son poco o medianamente viscosos, se utilizan casi siempre agitadores pequeños que giran a altas velocidades por lo que la mezcla tiene lugar en el régimen turbulento. Ejemplos de este tipo de agitadores son los agitadores de turbinas, paletas y hélices (Figura 3.1).



Figura 3.1. Agitadores para fluidos de baja viscosidad.

En el caso de fluidos muy viscosos, el régimen es laminar y los agitadores frecuentemente utilizados son agitadores grandes que giran a bajas velocidades por ejemplo los de tornillo, ancla y cintas helicoidales (Figura 3.2).



Figura 3.2. Agitadores para fluidos de alta viscosidad.

Otro criterio de clasificación está en función del patrón de flujo existente en el interior del tanque de agitación, el cual depende del agitador usado. Existen dos tipos básicos de patrones de flujo que pueden ser desarrollados por los impulsores: a) flujo axial y b) flujo radial (Oldshue, 1983). En la Figura 3.3 se muestran los diferentes tipos de flujo provocados por los agitadores en un tanque agitado con baffles. La función de los baffles es

la de romper las corrientes provocadas por el movimiento rotativo del agitador (i.e. suprimir el vórtice sobre la superficie libre del fluido), mejorando la turbulencia y por lo tanto también el mezclado.

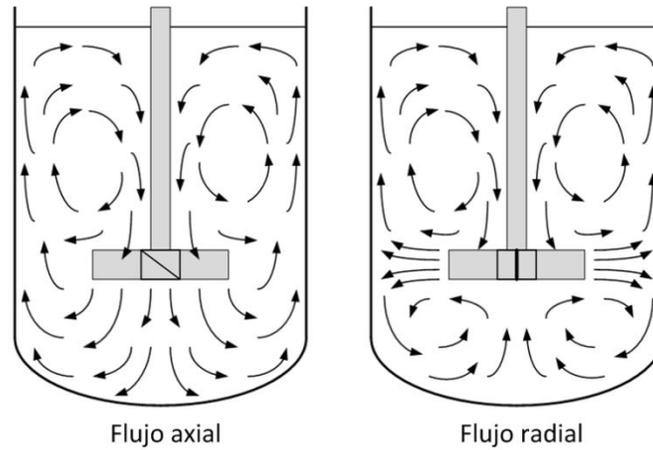


Figura 3.3. Tipos de flujo producidos por los agitadores.

Como puede observarse en la Figura 3.3, un impulsor de flujo axial produce un flujo casi paralelo a la flecha, creando un flujo hacia abajo en el centro del recipiente y un flujo hacia arriba en las paredes (Harnby *et al.*, 1992). Los agitadores de flujo radial impulsan al líquido radialmente contra las paredes laterales del tanque, desde donde la corriente se divide, una parte fluye hacia arriba y otra parte hacia el fondo, retornando ambas hacia el impulsor. Por lo que se producen dos corrientes de circulación separadas (Oldshue, 1983).

Por otra parte, si el recipiente está desprovisto de baffles, la rotación de fluido conduce a la formación de un vórtice, como se muestra en la Figura 3.4, lo cual distorsiona la superficie libre independientemente del tipo de flujo provocado por el agitador (Oldshue, 1983). Los vórtices causan un desbalance de fuerzas y limitan severamente un uso eficiente para el mezclado de la potencia suministrada al fluido. Esto causa un rendimiento de mezcla significativamente menor debido a la predominancia de la velocidad tangencial sobre los componentes de velocidad axial y radial.

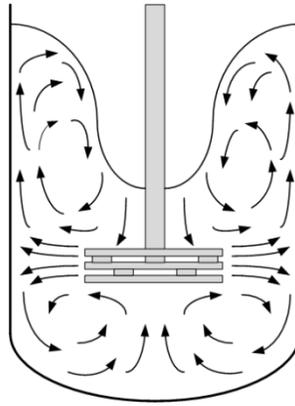


Figura 3.4. Patrón de flujo característico en un tanque sin baffles.

Sin embargo, hay casos en los que el uso de tanques sin baffles podría representar una cierta ventaja. Un ejemplo es en la incorporación de partículas flotantes de polvo seco a un fluido. En un recipiente con baffles, la superficie del líquido es prácticamente plana y se produce poco movimiento en esta zona. Por lo que al verter material en polvo sobre la superficie del líquido en un recipiente con baffles se puede formar un cúmulo por debajo del punto de alimentación, mientras que en un recipiente sin deflectores, el polvo es transportado desde el punto de alimentación hacia el impulsor, donde finalmente es incorporado dentro del líquido (Freudig *et al.*, 1999).

3.3 Caracterización de los impulsores

El número de potencia, el número de bombeo y el patrón de flujo son parámetros hidrodinámicos comúnmente utilizados para evaluar el desempeño de un impulsor. En los apartados siguientes se describirá cada uno de estos parámetros.

3.3.1 Números de potencia (N_p) y de bombeo (N_Q)

Para describir matemáticamente un sistema de agitación es necesario encontrar una relación funcional entre las variables que lo afectan. Se ha encontrado que es muy difícil obtener esa relación funcional partiendo del análisis fundamental de la mecánica de fluidos del sistema, incluso para régimen de flujo laminar y fluidos newtonianos. Esto se debe a la compleja geometría formada por el recipiente, impulsor, baffles, serpentines, etc. Por lo que en los estudios sobre agitación es una práctica común utilizar el análisis dimensional con el

fin de minimizar el número de variables que describen el problema y así facilitar la obtención de una expresión funcional (Harnby *et al.*, 1983).

Para producir mezclado es necesario suministrar energía, y esto es usualmente conseguido mediante la rotación de un impulsor. La velocidad a la que la energía es suministrada, es decir la potencia, no solo depende del tipo de impulsor usado y de la rapidez con que se lo haga girar, sino también depende de las características físicas del fluido, de la forma del recipiente y de la posición relativa de todas las partes que componen el sistema, tales como baffles y serpentines. De aquí que, para caracterizar el comportamiento de cualquier impulsor, es necesario tener en consideración la totalidad del sistema en el que está operando (Rushton *et al.*, 1950).

Cuando un impulsor es girado en un fluido contenido en un recipiente, se produce un movimiento del fluido y corrientes de remolino. Una vez que este patrón de flujo se ha establecido debido al impulsor, fluido y al tanque, el único cambio en la entrada de energía que puede ser impuesto al sistema es debido a un cambio en la velocidad de rotación del impulsor. Por esta razón es usual decir que la potencia es descargada por el impulsor. De esta manera distintas demandas de potencia son usadas para caracterizar a los impulsores en relación con los sistemas en que pueden operar (Rushton *et al.*, 1950).

El consumo de potencia de un impulsor en un tanque agitado para un fluido newtoniano se puede caracterizar a partir del número de potencia, el cual de manera general se expresa mediante la siguiente correlación (Cortes y Jáuregui, 2006):

$$N_p = f(Fr, Re, \text{"relaciones geométricas simples"}) \quad (3.1)$$

Donde:

N_p : Número de potencia.

Fr : Número de Froude.

Re : Número de Reynolds.

En particular, si se conserva similitud geométrica, todos los términos que representan una relación geométrica se pueden considerar constantes, y entonces la ecuación (3.1) se simplifica a:

$$N_p = f(Fr, Re) \quad (3.2)$$

Esta simplificación permite evaluar los grupos adimensionales en la ecuación (3.2). Inversamente, si los números de Re y Fr se mantienen constantes se puede evaluar cada una de las relaciones geométricas.

En el caso del Re , éste se utiliza para caracterizar el movimiento de un fluido y así representar la relación existente entre las fuerzas de inercia (asociadas al movimiento de la masa del fluido) y las fuerzas viscosas (asociadas a la fricción viscosa entre capas de fluido) que actúan sobre un fluido.

$$Re = \frac{\rho ND^2}{\mu} \quad (3.3)$$

Donde:

μ : Viscosidad dinámica del fluido de proceso, en $Pa \cdot s$.

N : Velocidad de agitación, en s^{-1} (revoluciones por segundo).

ρ : Densidad del fluido de proceso, en $kg \cdot m^{-3}$

D : Diámetro del impulsor, en m .

El valor del Re da una buena indicación del movimiento del fluido en el recipiente. Es decir, es un indicativo del régimen de flujo: laminar, de transición o turbulento.

El número de Froude cuantifica el efecto de la fuerza de gravedad cuando ésta juega un papel importante en la determinación del movimiento del fluido (como es el caso cuando existe un vórtice muy profundo). El número de Froude se define como:

$$Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (3.4)$$

El tercer grupo adimensional importante es el N_p , el cual se puede deducir de la siguiente manera. Primero desde un punto de vista fundamental podemos decir que la potencia impartida por el agitador al fluido se utiliza para bombear el fluido por el tanque y para crear cizallamiento. El flujo (Q) es proporcional a ND^3 (ecuación (3.5)), y la altura teórica (H), que está relacionada con el cizallamiento es proporcional a μN para flujo laminar, y a $N^2 D^2$ para flujo turbulento (ecuación (3.6)). Estas relaciones indican que para un tanque determinado y una potencia dada se puede utilizar un agitador grande que gire a una velocidad lenta para generar una alta velocidad de flujo, o por el contrario un agitador pequeño a alta velocidad para generar alta cizalla (Oldshue, 1983).

$$Q \propto ND^3 \quad (3.5)$$

$$H \propto N^2 D^2 \quad (3.6)$$

Para poder establecer una igualdad, el lado derecho de la ecuación (3.5) se multiplica por N_Q con lo que obtenemos la ecuación (3.7).

$$Q = N_Q ND^3 \quad (3.7)$$

En donde N_Q es el número de bombeo adimensional. La potencia consumida por un impulsor puede obtenerse multiplicando Q y H , con lo que se obtiene la ecuación(3.8).

$$P = N_p \rho N^3 D^5 \quad (3.8)$$

Como puede observarse en la ecuaciones (3.5) y (3.6) al igual que en el caso de una bomba, P es proporcional a Q y H . La medición cuantitativa de estos dos parámetros para el caso de un tanque agitado no es tan sencilla a diferencia de un sistema de bomba y tubería en donde la medición de Q y H es posible debido a que el fluido está confinado.

Por lo general, el flujo inducido por un impulsor se expresa como la capacidad de bombeo normal al plano de descarga de un impulsor ya sea de flujo radial o axial. El flujo total en un tanque consiste en el flujo desarrollado por el impulsor, además de cualquier flujo de arrastre. En general, hay un centro de rotación sobre el que se puede considerar que todo el flujo puede pasar.

Utilizando la velocidad media para un flujo turbulento o la velocidad real para el flujo laminar, el perfil de velocidad de una turbina de flujo radial es típicamente como se ilustra en la Figura 3.5. En términos cualitativos por medio de un diagrama de este tipo, se puede desarrollar el concepto de velocidad de cizallamiento.

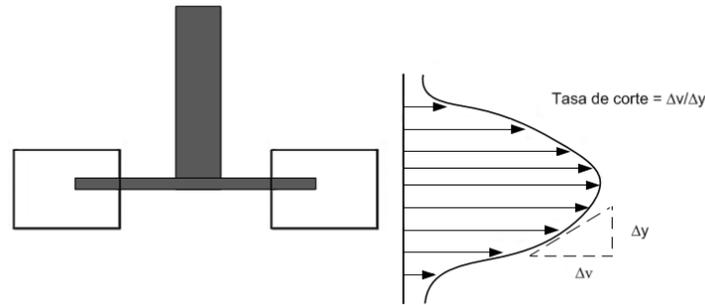


Figura 3.5. Perfil de velocidad de una turbina radial.

Primeramente se puede medir la pendiente del gradiente de velocidad ($\Delta v/\Delta y$), lo que da la velocidad de cizallamiento en cualquier punto del perfil. Si multiplicamos la velocidad de cizallamiento en un punto dado por la viscosidad obtenemos el esfuerzo cortante del fluido (τ), que es el responsable de los fenómenos de esfuerzo cortante en el fluido, como la dispersión de burbujas y gotas o la reducción de tamaños de partículas aglomeradas (Oldshue, 1983).

En general, todas las operaciones llevadas a cabo en tanques equipados con un agitador dependen de la alta velocidad de cizallamiento, de la alta velocidad de flujo o de una combinación de estas variables. Sin embargo es complicado determinar experimentalmente la distribución de la tasa de corte o gradientes de velocidad, por lo que las técnicas de Dinámica de Fluidos Computacional pueden ser usadas para determinar esta información (Paul *et al.*, 2004).

3.3.2 Patrón de flujo

Una herramienta comúnmente usada para comprender el desempeño de un agitador específico es la visualización del patrón de flujo. La importancia del conocimiento de las características del flujo, y dado que estos son casi imposibles de observar desde la superficie en movimiento, ha impulsado el desarrollo de técnicas experimentales y

numéricas para analizar y visualizar el flujo en su totalidad. Visualizando la dirección y la magnitud de las velocidades del fluido, es posible determinar por qué se produce una pobre o buena eficiencia de mezclado en aplicaciones específicas cuando se usan diferentes impulsores (Dickey y Hicks, 2004).

A continuación se presentan dos de las técnicas experimentales más populares para determinar el patrón de flujo (Zubitur, 1998):

- 1) La técnica de anemometría de hilo caliente en donde el detector está localizado dentro del fluido y determina su velocidad por la medición de diferencias de temperatura o presión. El problema de esta técnica es que el sensor afecta significativamente el flujo.
- 2) La técnica de velocimetría de imagen de partícula (PIV, por sus siglas en inglés) y de anemometría de láser Doppler (LDA), son métodos de visualización en donde los detectores se encuentran fuera del fluido y se mide la velocidad del fluido. Esta técnica no perturba el flujo pero solo se pueden utilizar fluidos transparentes o semitransparentes en tanques transparentes. Obviamente, tales condiciones ideales son limitadas cuando se trata de fluidos reales, que a menudo son opacos o incompatibles con tanques transparentes. (Dickey y Hicks, 2004; Panacek, 2012).

La necesidad de resolver los problemas encontrados al emplear correlaciones empíricas y técnicas experimentales ha motivado al desarrollo de las técnicas numéricas para modelar el patrón de flujo en los tanques de agitación. La ventaja principal de usar CFD es que permite predecir y visualizar el patrón de flujo de casi cualquier tipo de fluido en geometrías complejas y en la región barrida por los impulsores por lo que se elimina la necesidad de construir prototipos. La limitación de las técnicas CFD se centra a la capacidad del modelo para predecir con precisión los resultados reales. Sin embargo, en la literatura se encuentra un gran número de trabajos en donde se han comparado las observaciones experimentales con el análisis CFD validando con ello que los resultados promediados de velocidad se pueden modelar confiablemente (Dickey y Hicks, 2004).

4. DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La dinámica de fluidos computacional (CFD) es la ciencia de la predicción de flujo de fluidos, transferencia de calor y masa, las reacciones químicas, y los fenómenos relacionados, mediante la resolución de las ecuaciones matemáticas que gobiernan estos fenómenos utilizando un proceso numérico (Bakker, 2008).

El desarrollo de los métodos numéricos y el de computadoras de alta capacidad de procesamiento de información y cálculo, ha dado lugar a la aparición de programas comerciales de simulación en dinámica de fluidos computacional (CFD) que se han convertido en un método potente de diseño y extrapolación de los procesos industriales. Así el uso de CFD, en combinación con observaciones experimentales para el análisis de la hidrodinámica generada en tanques agitados, se ha convertido en una herramienta muy importante en las últimas décadas alcanzando resultados con una precisión aceptable, los cuales muestran una clara idea de las características hidrodinámicas del flujo dentro del tanque (Dickey y Hicks, 2004).

4.1 Ecuaciones que describen el flujo

En el caso de tanques mecánicamente agitados, donde interesa estudiar el movimiento de un medio continuo, isoterma y de composición constante las ecuaciones a resolver son:

- a) La ecuación de continuidad, que expresa el principio de conservación de la materia, y que puede escribirse como sigue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (4.1)$$

- b) La ecuación de movimiento para cada componente de la velocidad, que expresa el principio de conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (4.2)$$

donde la presión estática , p , y el tensor de esfuerzos viscosos, $\bar{\bar{\tau}}$, representan las fuerzas de superficie que se ejercen sobre el sistema: presiones y esfuerzos debidos a la deformación del fluido respectivamente, y $\rho\bar{g} + \bar{F}$ son las fuerzas exteriores de volumen que se ejercen sobre el sistema. En la ecuación(4.2) , $\bar{\bar{\tau}}$ para un fluido newtoniano compresible se define como:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left[(\nabla\bar{v} + \nabla\bar{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{v} I \right] \quad (4.3)$$

donde μ es la viscosidad dinámica, I es el tensor unitario, y el segundo término de la derecha es el efecto de la dilatación del volumen.

La solución de estas dos ecuaciones diferenciales que caracterizan el movimiento de todo medio continuo está limitada a situaciones físicas de flujos muy sencillos, en régimen laminar.

4.2 Discretización de las ecuaciones

En los métodos CFD, el sistema estudiado se divide en un número finito de celdas y las ecuaciones diferenciales que describen el flujo se transforman en ecuaciones algebraicas al ser integradas sobre cada celda. Existen diferentes métodos de discretización:

1. **Diferencias finitas:** En este método el dominio de cálculo se divide en una malla y sobre cada nodo se representa las derivadas por diferencias finitas. La desventaja de este método es que está limitado a geometrías simples.
2. **Elementos finitos:** En este método se divide la región en un número de subdominios llamados elementos finitos. Las variables dependientes se aproximan en cada elemento por funciones continuas definidas en términos de los valores de las variables dependientes en los nodos. La desventaja de este método es que consume mucho tiempo de cómputo y memoria de cálculo.
3. **Volúmenes finitos.** Este es el método utilizado por Fluent[®] en el cual el dominio de cálculo se divide en volúmenes finitos continuos rodeando cada punto de una malla y las ecuaciones diferenciales se integran sobre cada volumen de control y por medio de métodos de interpolación se obtienen una serie de ecuaciones algebraicas

que relacionan el valor de la variable en el centro del volumen de control, con los volúmenes de control vecinos para dar ecuaciones discretas que también conservan la masa, cantidad de movimiento, etc., en cada volumen de control. Es el método más utilizado porque puede aplicarse a problemas de geometría compleja y requiere menor memoria y tiempo de cálculo.

4.3 Modelado del impulsor en Fluent®

Para modelar el movimiento del impulsor Fluent® cuenta con tres diferentes modelos:

1. The multiple reference frame model (MRF).
2. The mixing plane model.
3. The sliding mesh model (SM).

Los dos primeros modelos asumen que el campo de velocidades es estacionario, esto significa que los efectos producidos por la interacción agitador-baffle son aproximados mediante medias. Esto es válido siempre y cuando la interacción rotor (agitador)-estator (baffle) sea débil o simplemente se quiera una solución aproximada del sistema. El tercer modelo, en cambio, asume que el campo de velocidades es transitorio y por lo tanto puede simular dicha interacción con más fidelidad. El modelo SM se usa cuando la interacción agitador/baffles es fuerte. Hay que tener en cuenta que este modelo requiere simulaciones en estado transitorio, lo que supone un coste computacional mucho mayor en comparación con los otros dos métodos (Marshall y Bakker, 2002; Fluent, 2014).

A continuación se explicará cómo se modela el flujo en marcos de referencia rotativos, y con más detalle el modelo MRF que es el que se ha usado para llevar a cabo las simulaciones en este trabajo.

4.3.1 Flujo en marcos de referencia rotativos

Fluent® tiene la capacidad de simular flujos en marcos de referencia rotativos que se aceleran. En este caso, la aceleración del sistema de coordenadas está incluida en las ecuaciones que describen el comportamiento del fluido. Un ejemplo sobre marcos de referencia acelerados es el caso de las máquinas rotativas. En estos casos, el flujo puede ser

modelado en un sistema de coordenadas que se mueve con el equipo rotativo y de esta manera experimenta una aceleración radial constante. Esta clase de flujos rotativos se pueden tratar con Fluent® mediante un marco de referencia rotativo o varios marcos que se muevan a velocidades diferentes dependiendo de cada caso. Por ejemplo, el flujo dentro de un tanque desprovisto de baffles, agitado por una sola turbina puede ser modelado con un solo marco de referencia rotativo, en cambio, si el tanque lleva deflectores, es necesario definir una región que envuelva al agitador que tenga un marco de referencia rotativo y un marco de referencia estático para el resto del fluido. De esta manera se consigue simular mejor la interacción entre el rotor y el estator.

4.3.2 El modelo MRF

El MRF es una modificación del modelo “Rotating Frame” (RF). La modificación consiste en que más de un marco de referencia rotativo (o no-rotativo) puede ser usado en una misma simulación. El modelo MRF ofrece una aproximación estacionaria del flujo que permite simular tanques con baffles o con geometrías internas complejas.

Para implementar el modelo MRF en Fluent® es necesario dividir el dominio de cálculo en diferentes subdominios. Se deberán usar marcos de referencia rotativos en aquellos subdominios que contengan elementos rotativos mientras que se usarán marcos de referencia estacionarios en aquellos que sean estacionarios (Fluent, 2014).

Mientras la solución del campo de flujo dentro del marco de referencia rotativo imparte la rotación del agitador, fuera de este marco el agitador no se mueve durante la simulación. Su posición es estática. Si el agitador está colocado en la parte central del tanque, la posición relativa de las palas del agitador respecto los baffles no cambia durante la simulación. Si la interacción rotor (agitador) – estator (baffle) es débil, la posición relativa de las palas del agitador respecto los baffles no importa. Por este motivo, el modelo MRF, se usa en aquellos casos en que las interacciones rotor-estator son débiles.

5.2.2 La formulación del modelo MRF

En esta formulación las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido se escriben en función del marco de referencia de cada subdominio. Así, las ecuaciones de un

fluido que está en un subdominio estacionario o que se mueve con movimiento de translación son diferentes que las ecuaciones del flujo que está dentro de un subdominio con movimiento rotacional. Para este primer caso las ecuaciones son las mismas que se han descrito en el capítulo 4.1. Para el caso de un marco de referencia rotacional las ecuaciones cambian, en especial la ecuación de cantidad de movimiento porque es la que tiene en cuenta la aceleración del sistema (Fluent, 2014).

Considere un sistema de coordenadas que se traslada con una velocidad lineal \vec{v}_t y que gira con una velocidad angular relativa $\vec{\omega}$ en relación a un marco de referencia de laboratorio en coordenadas cartesianas (x,y,z) , como se ilustra en la Figura 4.1. El origen del sistema móvil está ubicado por un vector de posición \vec{r}_0 .

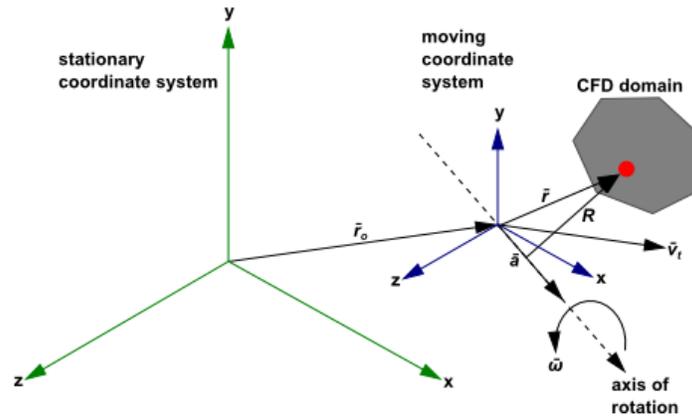


Figura 4.1. Marcos de referencia estacionario y móvil (Fluent, 2014).

El eje de rotación está definido por un vector unitario \hat{a} tal que

$$\vec{\omega} = \omega \hat{a} \quad (4.4)$$

El dominio computacional para el problema CFD se define con respecto al marco móvil de tal manera que un punto arbitrario en el dominio CFD está ubicado por un vector de posición \vec{r} desde el origen del marco móvil.

Las velocidades de fluido pueden ser transformados desde el marco estacionario para el marco móvil usando la siguiente relación:

$$\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{u}_r \quad (4.5)$$

donde

$$\vec{u}_r = \vec{v}_t + \vec{\omega} \times \vec{r} \quad (4.6)$$

En las ecuaciones anteriores, \vec{v}_r es la velocidad relativa (la velocidad vista desde el marco móvil), \vec{v} es la velocidad absoluta (la velocidad vista desde el marco estacionario), \vec{u}_r es la velocidad del marco móvil con respecto al marco de referencia inercial, \vec{v}_t es la velocidad de traslación del marco, y $\vec{\omega}$ es la velocidad angular. Cabe señalar que tanto $\vec{\omega}$ y \vec{v}_t pueden ser funciones de tiempo.

Cuando las ecuaciones de movimiento se resuelven en el marco de referencia en movimiento, la aceleración del fluido se ve aumentada por los términos adicionales que aparecen en las ecuaciones de momento. Por otra parte, las ecuaciones pueden formularse de dos maneras diferentes:

- Expresando las ecuaciones de momento utilizando las velocidades relativas como variables dependientes (conocida como la formulación de velocidad relativa).
- Expresando las ecuaciones de momento utilizando las velocidades absolutas como variables dependientes en las ecuaciones de momento (conocida como la formulación de velocidad absoluta).

En este trabajo se utilizó la formulación de velocidad absoluta. Las ecuaciones de gobierno del flujo de fluido para un marco que se mueve de forma constante usando la formulación de velocidad absoluta se pueden escribir como sigue:

Continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v}_r = 0 \quad (4.7)$$

Momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{v} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}_r \vec{v}) + [\vec{\omega} \times (\vec{v} - \vec{v}_t)] = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + \vec{F} \quad (4.8)$$

En esta formulación, las aceleraciones de Coriolis y centrípetas se simplificaron en un solo término ($[\vec{\omega} \times (\vec{v} - \vec{v}_t)]$).

No se incluirá la ecuación de energía para un sistema de referencia rotativo porque no se realizaron simulaciones con el MRF donde la ecuación de la energía estuviese activada.

4.4 El modelo multifásico de volumen de fluido (VOF)

Para investigar el comportamiento dinámico de las fases presentes en el sistema, el modelo VOF es usado para rastrear cada fase de fluido en la interfase líquido-aire (por ejemplo la formación del vórtice en un tanque agitado sin deflectores). En este modelo la ecuación de continuidad se escribe para cada componente mientras que la ecuación de cantidad de movimiento se escribe para la mezcla y se considera la viscosidad de cada fase constante si no existen variaciones de temperatura.

La formulación del modelo VOF considera que dos o más fases no se están interpenetrando. Para cada fase adicional que se agrega al modelo, una variable más es adicionada. En la fracción de volumen de control, la fracción de todas las fases suma la unidad. Las zonas de todas las variables y propiedades son compartidas por las fases y representan los valores promedio del volumen, mientras que la fracción volumen de cada una de las fases es conocida en cada posición. Así, las variables y propiedades en cualquier celda son puramente representativas de una de las fases, o representativa de una mezcla de las fases, dependiendo de los valores de la fracción volumen (Hirts y Nichols, 1981, Fluent, 2014).

En otras palabras, si la q -ésima fracción de volumen de un fluido en la celda esta denotada por α_q , entonces las tres condiciones posibles son las siguientes:

1. $\alpha_q = 0$, la celda no contiene a la q -ésima fase.
2. $\alpha_q = 1$, la celda está llena únicamente por la q -ésima fase.
3. $0 < \alpha_q < 1$, la celda contiene la interfase entre la q -ésima fase y una o más fases diferentes.

4.4.1 Ecuación de la fracción de volumen.

El rastreo de las fases entre las mismas fases es acompañada por la solución de una ecuación de continuidad para la fracción de volumen de una (o más) de las fases. Para la q-ésima fase, esta ecuación tiene la forma siguiente:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\delta}{\delta t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{qp} + \dot{m}_{pq}) \quad (4.9)$$

Donde \dot{m}_{qp} es la transferencia de masa desde la fase q hasta la fase p y \dot{m}_{pq} es la transferencia desde la fase p hasta la fase q. y \dot{m}_{pq} es la transferencia desde la fase p hasta la fase q. Por default, el termino fuente de la parte derecha de la ecuación, S_{α_q} , es cero, pero puede especificarse como una constante o como una fuente de masa definida por el usuario para cada fase.

La ecuación de la fracción volumen no puede ser resuelta para la fase primaria, así que esta se calcula en base a la siguiente restricción:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (4.10)$$

Las propiedades que aparecen en la ecuación de transporte son determinadas por la presencia del componente en cada volumen de control. En un sistema de dos fases, por ejemplo, si las fases están representadas por los subíndices 1 y 2, y si la fracción volumen de la segunda fase está siendo rastreada, propiedades como la densidad y la viscosidad estarán dadas por:

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \quad (4.11)$$

$$\mu = \alpha_2 \mu_2 + (1 - \alpha_2) \mu_1 \quad (4.12)$$

En general, para un sistema de n fases, la densidad promedio de fracción volumen se toma de la siguiente manera:

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (4.13)$$

Una sola ecuación de momento (ecuación (4.14)) es resuelta a través del dominio, y el campo de velocidad resultante es compartido entre las fases. La ecuación de momento, es dependiente de las fracciones de volumen de todas las fases a través de las propiedades de ρ y μ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (4.14)$$

5. METODOLOGÍA

La metodología se divide en dos secciones, en la sección 5.1 se presenta el procedimiento experimental para la medición de la potencia suministrada por cada uno de los impulsores y en la sección 5.2 se presenta la metodología numérica.

5.1 Mediciones experimentales del consumo de potencia

La agitación fue proporcionado por un equipo de agitación Dispermat® tipo AE01 (Figura 5.1), que puede ser operado a una velocidad máxima de 10,000 rpm. Los valores experimentales de potencia se pueden visualizar directamente en la pantalla del equipo, y capturados para su posterior procesamiento.



Figura 5.1. Equipo de agitación Dispermat® tipo AE01.

Para conseguir una mayor exactitud en las mediciones en este equipo, puede medirse la potencia neta suministrada restando la potencia no descargada en el fluido. El principio de este método consiste en determinar qué cantidad de la potencia descargada por el motor, se alimenta al fluido agitado y qué cantidad se pierde por la fricción en los sellos, engranes y otros factores que disminuyen la eficiencia del motor. Esto se consigue haciendo trabajar el motor con el impulsor girando en el aire, de esta manera se obtiene la potencia que no se descarga al fluido pero que el motor utiliza para moverse a sí mismo y para vencer las fricciones propias de la estructura de agitación. De esta manera cuando el impulsor está agitando un fluido específico a una velocidad determinada, a la potencia neta suministrada en estas condiciones, se le resta la potencia consumida cuando el motor gira a

la misma velocidad pero agitando aire, así se consigue una mayor exactitud en las mediciones.

Los experimentos se realizaron en un tanque cilíndrico de acero inoxidable el cual cuenta con un camisa de enfriamiento y está aislado en el exterior con una capa de 10 mm de poliestireno expandido, sin deflectores y con un diámetro $T=132$ mm, como se muestra en la Figura 5.2. Con el fin de mantener la temperatura del fluido de proceso a $23\text{ °C} \pm 0.5\text{ °C}$ se utilizó un baño de refrigeración con recirculación en todas las corridas experimentales.

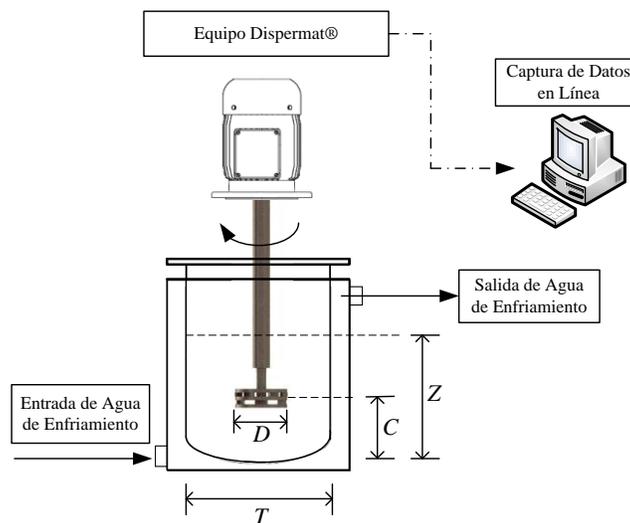


Figura 5.2. Diagrama de la instalación experimental.

Las relaciones geométricas adimensionales correspondientes a la distancia del fondo del tanque al centro del impulsor (C), la altura de líquido al inicio de la agitación (Z) y el diámetro del impulsor que se usaron fueron: $C/T=0,3848$, $Z/T=1$ y $D/T=0,3848$, respectivamente.

En la Figura 5.3 se muestran los impulsores estudiados en este trabajo y los detalles de sus dimensiones se incluyen en la Tabla 5.1. Como se muestra en las Figuras 5.3b y 5.3c, el impulsor Hockmeyer-D a escala de laboratorio es un disco dispersor de anillos, que está formado por un disco central que tiene a ambos lados dos (Figura 5.3b) o cuatro (Figura 5.3c) anillos y en el espacio entre anillos se tienen seis cuchillas, es decir hay 12

cuchillas en total para el impulsor de dos anillos (HockD-2A) y 24 cuchillas para el de cuatro anillos (HockD-4A).

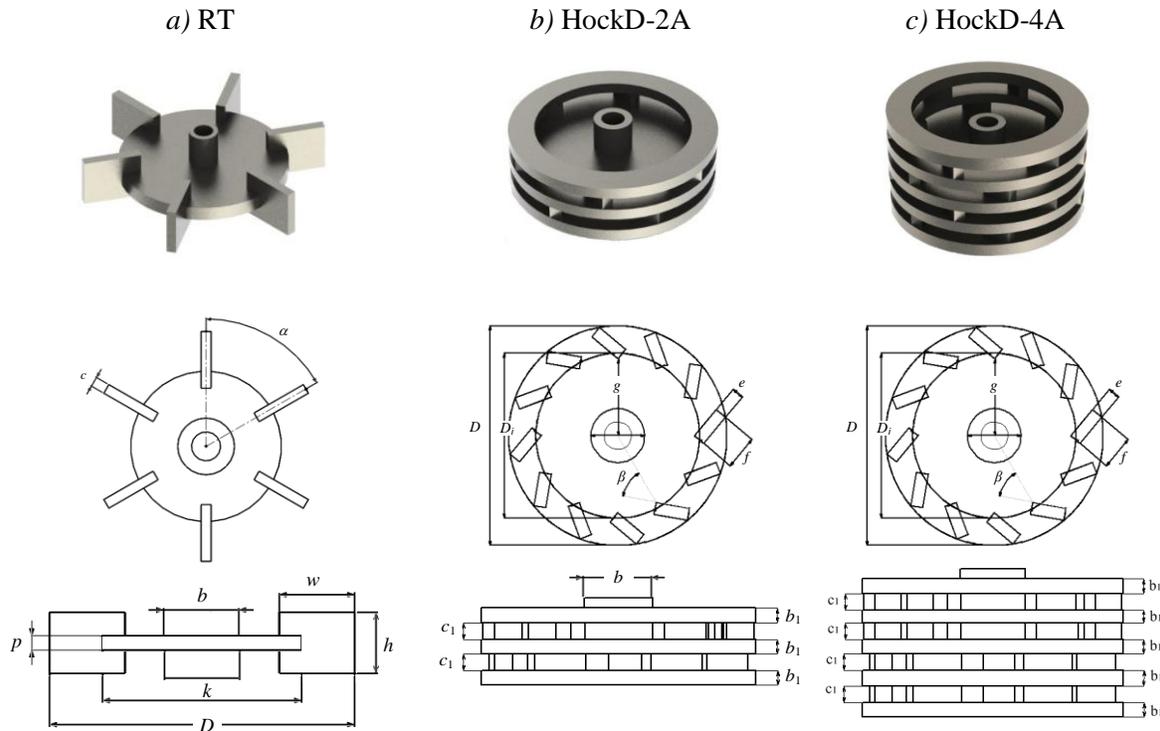


Figura 5.3. Planos a escala de los impulsores evaluados.

El fluido utilizado para los experimentos fue una solución de glucosa de grado alimenticio (45 °Bx) y agua destilada al 80% en peso de glucosa. La viscosidad de la solución fue medida a diferentes tasas de corte y presentó un comportamiento newtoniano. Las propiedades de los fluidos fueron: $\mu = 0.9455 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$ y $\rho = 1376.46 \text{ kg/m}^3$. Se eligió trabajar con un fluido newtoniano ya que de acuerdo a la metodología propuesta por Metzner y Otto (1961), es posible calcular la potencia de agitación en fluidos pseudoplásticos utilizando las curvas de potencia obtenidas a partir de fluidos newtonianos. Diferentes autores han comprobado la aplicabilidad de este método tanto para fluidos que siguen la ley de potencias como para fluidos que siguen leyes diferentes (Zubitur, 1998).

Tabla 5.1. Dimensiones de los impulsores en milímetros.

Símbolo	Dimensiones (mm)	Símbolo	Dimensiones (mm)
<i>b</i>	12.5	<i>g</i>	17.7
<i>bl</i>	2.8	<i>h</i>	10.2
<i>c</i>	2.2	<i>k</i>	33.2
<i>cl</i>	3.2	<i>p</i>	2.4
<i>D</i>	50.8	<i>w</i>	12.5
<i>Di</i>	38.1	α	60°
<i>e</i>	2.8	β	50°
<i>f</i>	7.9		

Debido a que en todos los experimentos la altura del líquido se mantuvo constante y el volumen desplazado por cada impulsor es dependiente del volumen del impulsor, la cantidad de solución utilizada fue diferente para cada configuración de impulsor/tanque. El volumen de fluido utilizado para cada impulsor se muestra en la Tabla 5.2.

Tabla 5.2. Volumen de fluido utilizado para cada configuración de impulsor

Impulsor	RT	HockD-2A	HockD-4A
Volumen de fluido (l)	1.636	1.629	1.621

Las mediciones experimentales del consumo de potencia en el sistema para cada impulsor se realizaron capturando los datos cada 5 s durante 5 min y posteriormente éstos se promediaron. Con el fin de verificar la exactitud de las mediciones experimentales de potencia con el equipo usado en este proyecto, en la sección 6.2 se comparan las mediciones experimentales de potencia con datos existentes en la literatura para la turbina Rushton.

5.2 Metodología numérica

La simulación numérica utilizando CFD consta principalmente de 4 etapas: (1) generación de la geometría del modelo, (2) mallado del dominio computacional, (3)

resolución de las ecuaciones, y (4) post procesamiento de los resultados en Fluent[®]. En este capítulo se describirá de forma breve estas etapas para la simulación del tanque agitado.

5.2.1 Generación de la geometría del modelo

En la Figura 5.4 se muestra la geometría del tanque y los diferentes impulsores con las mismas dimensiones mostradas en la sección experimental. Los modelos se elaboraron con el software comercial de dibujo asistido por computadora (CAD) SolidWorks[®].

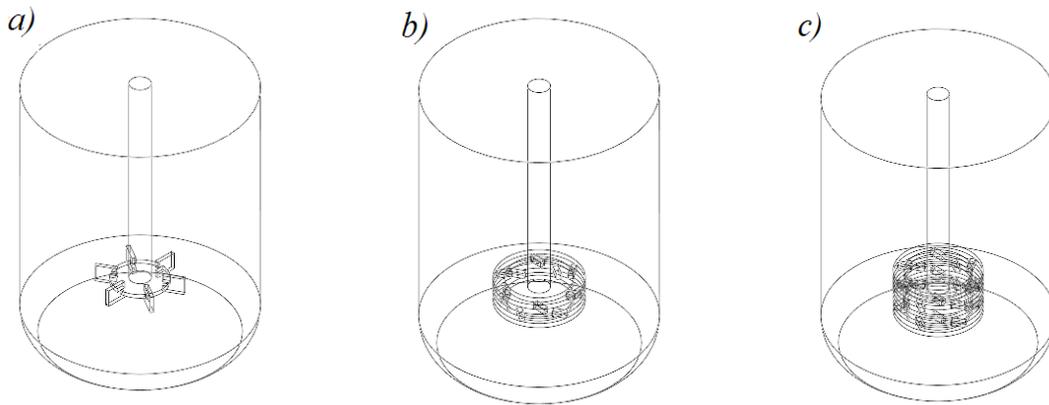


Figura 5.4. Geometrías en 3D de los modelos elaborados. a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A.

Antes de exportar el modelo a Fluent[®] es necesario modificarlos en el módulo DesignModeler de Ansys[®] como una estrategia para facilitar el mallado, así como para poder aplicar el método de solución MRF.

Primeramente hay que tomar en cuenta que el modelo exportado desde SolidWorks[®], está constituido por elementos sólidos, como un primer paso hay que extraer el impulsor del dominio de solución y después definir el dominio restante como un fluido. Para poder implementar el método de solución MRF, el dominio debe segmentarse en dos regiones principales, una que encierra al impulsor denominado Marco de Referencia Rotativo o Móvil (RRF, por sus siglas en inglés, Rotating Reference Frame) y la región fuera de ésta se define en un Marco de Referencia Estacionario (SRF, por sus siglas en inglés, Stationary Reference Frame). En la Figura 5.5 se muestran las divisiones realizadas para el caso de la RT. El tamaño del cilindro utilizado para dividir el dominio fue el mismo para los tres casos de estudio (altura de 33 mm y un diámetro de 31.45 mm), pero hay que

resaltar que no contiene la misma masa de fluido, ya que el volumen desplazado por cada uno de los impulsores es diferente.

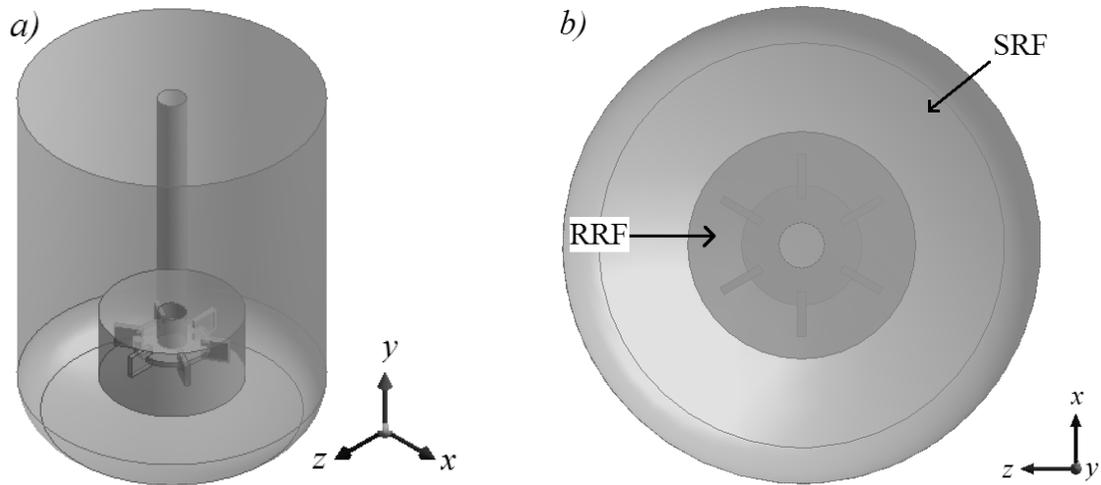


Figura 5.5. Segmentación del dominio para la RT en dos regiones. a) vista isométrica y b) vista superior.

Ahora, considerando que en los tres casos de estudio, la geometría de los discos presenta una periodicidad geométrica para una sección de un sexto, esto permite modelar únicamente una sexta parte del dominio y si se implementa una condición de periodicidad, es posible recuperar el dominio completo. Esta simplificación permite reducir significativamente el número de elementos y lo cual conlleva al ahorro del 83% del costo de cómputo. En la Figura 5.6 se muestra el dominio computacional usado para la RT.

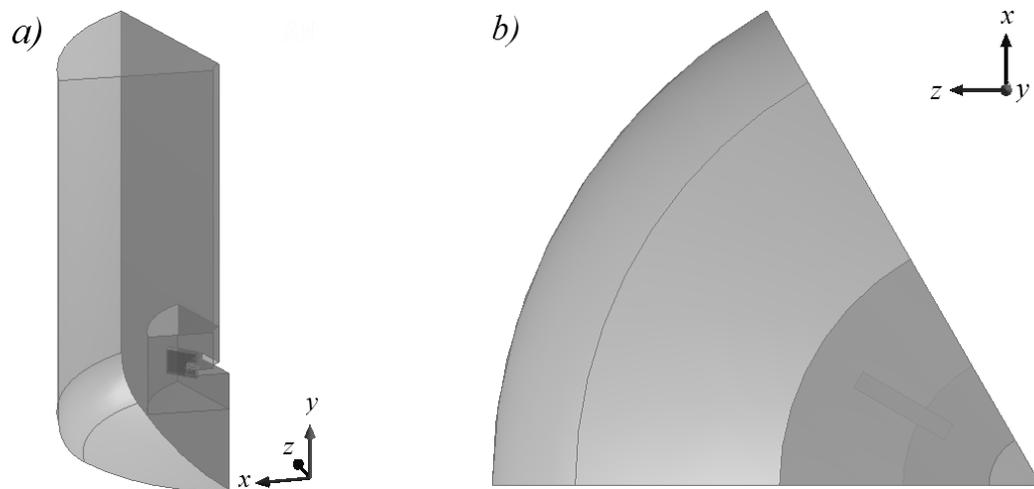


Figura 5.6. Dominio computacional usado para la RT. a) vista isométrica y b) vista superior.

Como siguiente paso, antes de exportar el modelo para su mallado, se procede a dividir el dominio en varios bloques, ya que la región en el interior del tanque es demasiado compleja para mallarla en un solo bloque. La división del dominio se realiza dividiendo la geometría en bloques topológicamente rectangulares que unidos dan lugar a una geometría más compleja. Como ejemplo de este paso en la Figura 5.7 se muestra la división del dominio para la RT.

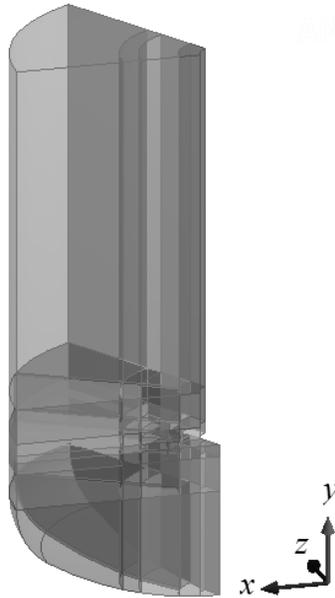


Figura 5.7. Dominio computacional para la RT.

En la Tabla 5.3 se muestra el número de bloques creados para cada impulsor, como se puede observar en la tabla, entre más complicada es la geometría es menor el número de bloques en los que se puede dividir el modelo y por lo tanto mayor es la complejidad para lograr un mallado totalmente hexaédrico. El cual para el mismo número de celdas, dará soluciones más precisas en comparación con las mallas tetraédricas, sobre todo si las líneas de la celdas están alineadas con la dirección del flujo (Bakker, 2008).

Tabla 5.3. Número de bloques creados para cada impulsor.

Impulsor	Número de bloques
RT	62
HockD-2A	32
Hockd-4A	24

Por último, con el fin de estudiar la tasa de disipación de energía en las cercanías de cada impulsor, se definieron tres regiones más de estudio dentro de la región RRF. La primera región es el volumen de barrido por el impulsor (V_{BI}), y este volumen se dividió en dos regiones más de fluido: volumen barrido por la paleta o cuchilla del impulsor (V_{BP}), y volumen barrido por el centro del impulsor (V_{BC}), las figuras de estas regiones se muestran en la siguiente sección. Una vez realizado lo anterior el modelo está listo para ser exportado al modulo de mallado Meshing de Ansys[®]. En la Tabla 5.4 se muestra el volumen de fluido ocupado por cada región para cada uno de los impulsores estudiados.

Tabla 5.4. Volumen de fluido en cada región del volumen barrido por el impulsor

Impulsor	V_{BI} (cm³)	V_{BP} (cm³)	V_{BC} (cm³)
RT	16.53	12.94	3.59
HockD-2A	17.76	5.81	11.95
HockD-4A	35.40	11.54	23.85

5.2.2 Mallado del dominio computacional

La generación de la malla es la parte más importante en los estudios de CFD. La densidad de la malla y el tamaño de los volúmenes de control, determina la exactitud de la solución. En las Figuras 5.8 a 5.10 se muestra el mallado realizado para cada uno de los impulsores. Se puede apreciar que en la zona cercana a las paredes y en las cercanías del impulsor la malla es mucho más fina, esto con el fin de que los cambios en la capa limite puedan ser capturados correctamente en los cálculos numéricos. Por otro lado, en las zonas donde no se esperan grandes gradientes de presión y velocidad, el mallado es menos denso con la finalidad de mantener bajo el número de celdas computacionales.

Es muy importante que antes de exportar la malla a Fluent[®] se definan los límites del dominio como son las paredes del tanque, del impulsor y del eje, así como la superficie libre del tanque. Además, es necesario definir como tipo periódico las dos superficies que se han generado al dividir el volumen de control en un sexto para que Fluent[®] interprete que el flujo es periódico, es decir, que lo que sale por una de las superficies periódicas es lo que entra por la otra superficie.

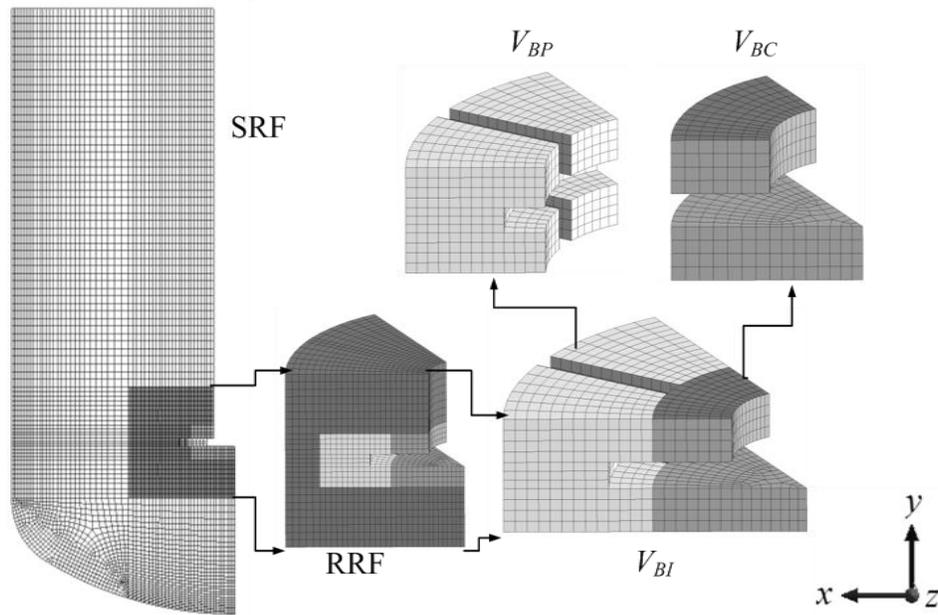


Figura 5.8. Malla utilizada para las simulaciones con la RT.

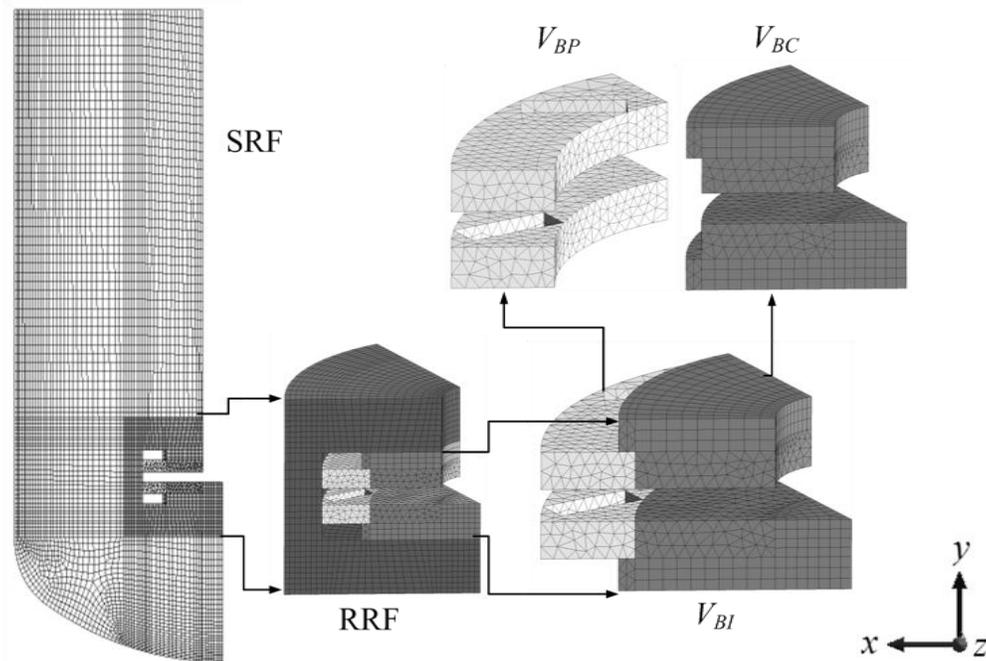


Figura 5.9. Malla utilizada para las simulaciones con el impulsor HockD-2A.

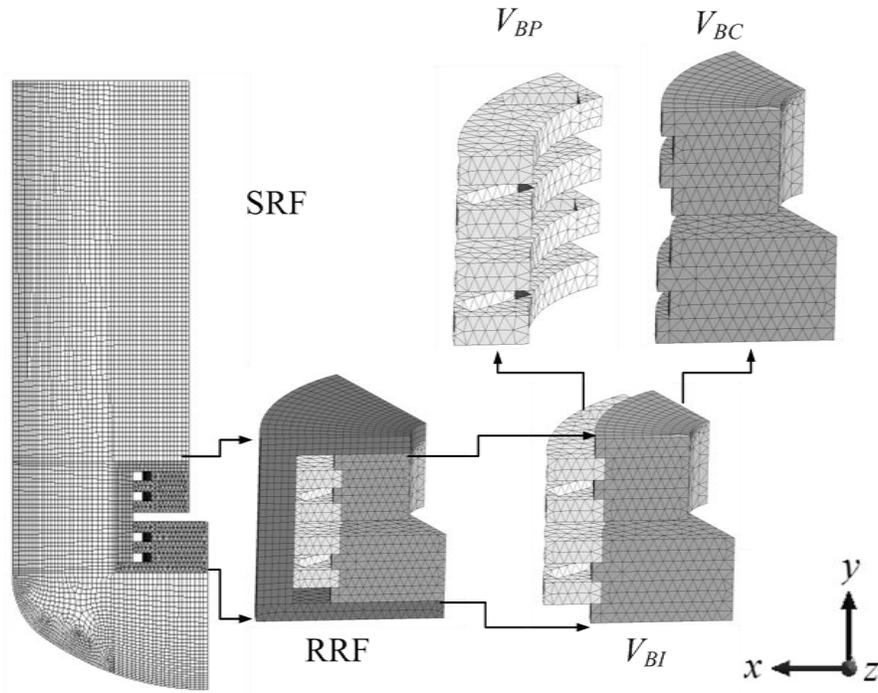


Figura 5.10. Malla utilizada para las simulaciones con el impulsor HockD-4A.

5.2.3 Resolución de las ecuaciones

Una vez realizada la malla de la geometría a simular, el modelo se carga en Fluent[®] para especificar y resolver las ecuaciones gobernantes por medio del software. Para especificar la solución del modelo matemático se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones:

- Estado isotérmico.
- Estado transitorio.
- Fluido Newtoniano.
- Flujo de transición a turbulento solamente en las cercanías del impulsor.
- Densidad constante (Fluido incompresible).
- La presión en la superficie es igual a la presión atmosférica.
- La fuerza gravitacional actúa sobre el eje y negativo.
- La rotación del impulsor es en el sentido de las manecillas del reloj.
- Los fluidos que se utilizaron en la simulación corresponden a dos fases inmiscibles.

- Se realizaron simulaciones para los tres impulsores a las siguientes velocidades de agitación: 800, 900, 1000, 1100, 1200, 1300, 1400 y 1500 rpm.
- Adicionalmente se realizaron simulaciones para el HockD-2A y HockD-4A en las que se alimentaba la misma potencia que la suministrada por la RT cuando esta opera a una velocidad de 800, 1200 y 1500 rpm.

A continuación se muestran los pasos, así como sus especificaciones para llevar a cabo la solución del modelo en Fluent®:

- **Algoritmo de solución:** En la Tabla 5.5, se muestran las especificaciones del algoritmo de solución utilizadas en este trabajo.

Tabla 5.5. Especificación del algoritmo de solución.

Tipo	Basado en la presión
Espacio	3D
Tiempo	Transitorio
Formulación de la velocidad	Absoluta

- **Modelos matemáticos:** Se activó el modelo de turbulencia Transition k-kl-omega y el modelo Euleriano multifásico VOF.
- **Materiales:** La Tabla 5.6 muestra las especificaciones de los materiales utilizados en las simulaciones, así como la especificación cada fase.

Tabla 5.6. Especificación de los materiales

Nombre	Aire	Líquido
Propiedades		
Densidad (kg/m ³)	1.225	1376.46
Viscosidad (kg/m-s)	1.7894e ⁻⁵	0.9455
Fase	Gaseosa	Líquida
Tipo de fase	Principal	Secundaria

- **Condiciones de operación y de referencia:** Para reducir el efecto de los errores numéricos, se debe especificar una ubicación de presión de referencia que esté siempre en el fluido menos denso, y una densidad de referencia igual a la densidad del fluido menos denso (Bakker, 2008). Por lo que se tomaron como valores de referencia la densidad del aire y la presión atmosférica la cual fue ubicada en la

parte más alta del tanque para garantizar que en ese punto siempre estará el fluido menos denso. La ubicación de la presión de referencia y la especificación de la fuerza de gravedad se muestra en la Tabla 5.7.

Tabla 5.7. Especificación de las condiciones de operación

Presión	101325 Pa
Densidad	1.225 kg/m ³
Ubicación de la presión de referencia	
	X(m)=0.03
	Y(m)=0.178
	Z(m)=0.03
Gravedad (m/s²)	
	X(m)=0
	Y(m)=-9.81
	Z(m)=0

- **Condiciones de frontera:** En las paredes (Impulsor, eje y paredes del tanque) se han impuesto condiciones de no deslizamiento. En las tablas 5.8 y 5.9 se muestran las especificaciones de las condiciones de frontera en el fluido y en las paredes respectivamente.

Tabla 5.8. Especificación de las condiciones de frontera en el fluido.

Fase	mezcla	mezcla
Zona	RRF	SRF
Dirección del eje de rotación		
	X(m)=0	
	Y(m)=-1	
	Z(m)=0	
Velocidad rotacional (rpm)	800 a 1500	0
Modelo de turbulencia	Turbulento	Laminar

Tabla 5.9. Especificación de las condiciones de frontera en las paredes.

Zona	tanque	impulsor	eje
Tipo	pared	pared	pared
Tipo de movimiento	Rotacional absoluto	Rotacional absoluto	Rotacional absoluto
Velocidad (rpm)	0	800 a 1500	800 a 1500
Dirección del eje de rotación	X(m)=0 Y(m)=-1 Z(m)=0	X(m)=0 Y(m)=-1 Z(m)=0	X(m)=0 Y(m)=-1 Z(m)=0

- **Esquemas de discretización:** Se utilizó el esquema Quick de segundo orden para la discretización de las ecuaciones utilizadas en el modelo. La resolución de las ecuaciones algebraicas presenta además el problema de acoplamiento de las ecuaciones de movimiento y de continuidad. La presión está en forma de gradiente en la ecuación de movimiento y no aparece en la ecuación de continuidad. Para resolver este problema se utilizó el algoritmo Coupled, el cual resuelve un sistema acoplado de ecuaciones que comprende las ecuaciones de momentum y la ecuación de continuidad por lo que la velocidad de convergencia de la solución mejora significativamente.
- **Especificación del criterio de convergencia:** Puesto que la solución de las ecuaciones se obtiene por medio de un proceso iterativo, es necesario definir un criterio de convergencia de la solución para dar por terminado el proceso iterativo. En este trabajo se utilizaron cuatro monitores para visualizar en tiempo real la convergencia.
 1. Residuales de las ecuaciones: Los cuales fueron definidos en un valor de $1e^{-5}$.
 2. Torque del impulsor.
 3. Velocidad axial en la cercanía de la pared del tanque a una altura de 0.125 m.
 4. Energía cinética en todo el volumen.

- **Calculo de la solución:** Se utilizó un tamaño de paso de tiempo igual a 0.01s y 20 iteraciones para cada paso de tiempo. En este trabajo todas las simulaciones se detuvieron en 10 s (1000 pasos de tiempo), ya que se observó un aumento en el volumen de la fase líquida debido a la incorporación de aire en las cercanías del eje para tiempos más largos de simulación. En este tiempo de cómputo, las soluciones se consideraron totalmente convergentes debido a que los residuales de las ecuaciones se mantuvieron constantes con un valor de aproximadamente 10^{-5} y ya no existían cambios significativos en los monitores de torque, velocidad axial y energía cinética.

Finalmente, cuando se ha alcanzado la convergencia, los últimos valores de las variables se graban como la solución final para así proceder al post-procesamiento de los resultados.

5.2.4 Post procesamiento de los resultados en Fluent®

La manera más usual de visualizar los resultados de la simulación es mediante los gráficos de contornos y de vectores de velocidad, así como con el cálculo de los parámetros de mezclado a partir de los resultados de la simulación. Para el cálculo de estos parámetros primero hay que obtener la potencia y el flujo inducido por el agitador mediante Fluent®, el procedimiento de obtención de estos parámetros se muestra en las siguientes secciones de este capítulo.

5.2.4.1 Calculo de la potencia suministrada al fluido en Fluent®

Para la estimación de la potencia mediante el software se tiene dos opciones. La primera opción es mediante el producto de la velocidad del impulsor, $2\pi N$, en *rad/s*, y el torque, τ , en *N-m*, que se obtiene mediante la integración de la presión en las paletas del impulsor:

$$P = 2\pi N\tau \quad (5.1)$$

En Fluent®, τ es obtenido de la manera siguiente: se calcula el vector de momento total sobre un centro especificado *A*, sumando los productos cruz de los vectores de fuerza de presión y viscoso para cada cara con el vector de momento \vec{r}_{AB} , que es el vector del

momento especificado desde el centro de momento A a la fuerza de origen B . Los términos de esta suma representan los vectores de momento de presión y viscoso:

$$\underbrace{\vec{M}_a}_{\text{momento total}} = \underbrace{\vec{r}_{AB} \times \vec{F}_p}_{\text{momento de presión}} + \underbrace{\vec{r}_{AB} \times \vec{F}_v}_{\text{momento viscoso}} \quad (5.2)$$

donde:

A = centro de momento especificado

B = origen de la fuerza

\vec{r}_{AB} = vector de momento

\vec{F}_p = vector de fuerza de presión

\vec{F} = vector de fuerza viscosa

La otra opción es mediante el uso de la distribución prevista de la disipación de energía turbulenta local (ε_t) y la tasa de disipación viscosa (ε_l), integrada sobre todo el volumen de fluido, como se muestra en la ecuación (5.3).

$$P = \int (\rho \varepsilon_t + \varepsilon_l) dV \quad (5.3)$$

La disipación de energía es una medida de la cantidad de energía transferida desde el impulsor al fluido. Tiene unidades de energía por unidad de masa de líquido y es muy valiosa para hacer comparaciones a escala de micromezclado (Mc-conville, 2002). En la ecuación (5.3), ε_t es la tasa de disipación de energía turbulenta por unidad de masa en la región que encierra el impulsor, la cual puede obtenerse directamente a partir de resultados de la simulación, y ε_l es la disipación de energía viscosa laminar que se obtiene a partir de la siguiente relación:

$$\varepsilon_l = -(\bar{\tau} : \nabla \vec{v}) = \mu \Phi_v(x, y, z), \quad (5.4)$$

En la ecuación (5.4), Φ_v es la función de disipación que para un fluido newtoniano, corresponde a la ecuación (5.5).

$$\Phi_v = \left\{ \begin{aligned} &2 \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \left[\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right]^2 + \left[\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right]^2 \\ &+ \left[\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right]^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad (5.5)$$

Como se aprecia en la ecuación (5.5), ε_l es función de los gradientes de velocidad, que se originan debido al movimiento del fluido. La ecuación (5.5) puede ser cargada en Fluent[®] como una función definida por el usuario y entonces calcular ε_l con la ecuación (5.4).

Finalmente los valores obtenidos en las ecuaciones (5.1) y (5.3) se pueden sustituir en la siguiente expresión para obtener el N_p (Rushton *et al.*, 1950):

$$N_p = 6 \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (5.6)$$

En la ecuación (5.6) el factor seis se introduce para considerar que los resultados obtenidos en Fluent[®] consideran únicamente un sexto de la geometría real del modelo.

5.2.4.2 Cálculo del flujo en la zona de descarga del impulsor

Para calcular el número de bombeo es necesario calcular el flujo producido por el impulsor, Q . En el cálculo del flujo inducido por un impulsor mediante Fluent[®], primero se crea una superficie que cubra la zona de descarga del impulsor. Esta superficie sería circular cubriendo el área proyectada por el impulsor si éste es de flujo axial, y es una sección cilíndrica con una altura igual al ancho de las paletas del impulsor si éste es de flujo radial, tal como se muestra en la Figura 5.11. Para después obtener la tasa de flujo, Q , mediante la integración total del flujo de salida a través de esta superficie [Ec. (5.7)].

$$Q = R \int_{-W/2}^{W/2} \int_0^{2\pi} v_{r=R} d\theta dz, \quad (5.7)$$

donde:

v_r : componente radial de la velocidad.

R : radio del impulsor.

W: ancho de las paletas o altura del impulsor.

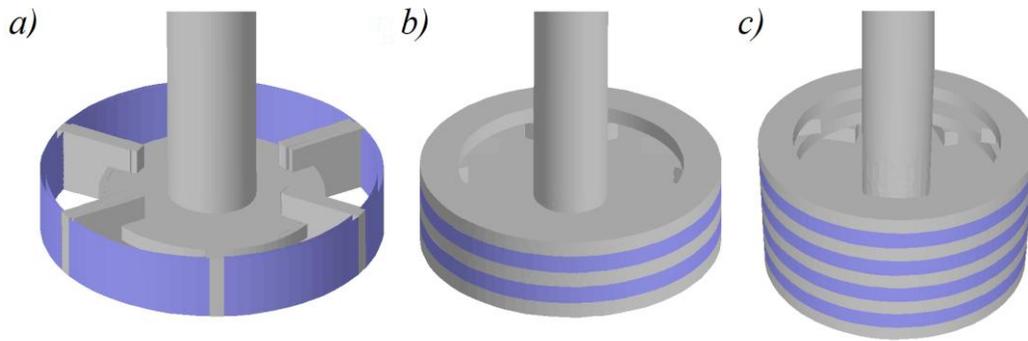


Figura 5.11. Superficie lateral para calcular el caudal inducido por un impulsor radial. . a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A.

Por último con el valor obtenido de la ecuación (5.8), se puede sustituir en la siguiente expresión para obtener el N_Q (Oldshue, 1983):

$$N_Q = \frac{6Q}{ND^3} \quad (5.8)$$

En la ecuación (5.8) el factor seis se introduce por la misma razón que la mencionada para la ecuación (5.6).

5.2.5 Análisis de independencia de malla

Una causa común de errores en los resultados en CFD ocurre cuando no se asegura que la solución obtenida es independiente de la densidad de la malla. Este tipo de análisis debe realizarse por lo menos una vez para cada caso que se desee modelar. El procedimiento utilizado para realizar el análisis de independencia de malla se resume a continuación:

- Se ejecuta una simulación con la malla inicial hasta asegurar la convergencia de la solución.
- Una vez que se tiene la simulación con la primera malla, se procede a refinar la malla en todo el dominio, para tener celdas más finas y se ejecuta la simulación hasta alcanzar la convergencia.

- Se comparan los valores de los monitores de la simulación 2 contra los de la simulación 1. Si son idénticos, entonces la malla 1 es lo suficientemente exacta para capturar los resultados correctos, si son diferentes los resultados esto significa que la solución está cambiando debido al tamaño de la malla, y por lo tanto, es necesario elaborar una malla más fina y ejecutar otra simulación.
- Se repite el proceso hasta que se tenga una solución que sea independiente de la densidad de la malla. Por lo regular, se usa siempre la malla con menor número de elementos y que proporcione una solución independiente de la densidad de la malla, esto es para reducir el costo de cómputo de cada simulación.

En el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos al aplicar esta metodología.

6. RESULTADOS

La presentación de los resultados se divide en tres secciones cuyo contenido se describe brevemente a continuación. En la sección 6.1 se muestra el análisis de independencia de malla. En la sección 6.2 se calculan los parámetros de macro-mezcla a partir de los resultados de las simulaciones para cada uno de los impulsores y los resultados de N_P se validan, comparándolos con los valores de N_P obtenidos a partir de las mediciones experimentales de consumo de potencia. Finalmente, en la sección 6.3, se compara el desempeño hidrodinámico de los tres impulsores.

6.1 Análisis de independencia de malla

Aplicando el procedimiento de la sección 5.2.5, se crearon varias mallas con un valor máximo de oblicuidad de cada malla por debajo de 0.9, con el fin de evaluar la independencia de las predicciones numéricas con respecto al tamaño de malla. Con los valores resultantes de los monitores (torque, tasa de disipación y caudal inducido por el agitador), se calcularon los números de potencia y bombeo a partir de las ecuaciones (5.6) y (5.8). Los valores obtenidos de N_P y N_Q se normalizaron con los números de potencia y bombeo calculados a partir de la malla más densa, y así se elaboro un grafico de los números de potencia y de bombeo adimensionales (N_P^* , N_Q^*) para diferentes valores del número de celdas de cada sistema de agitación estudiado. De la Figura 6.1 a la Figura 6.3 se muestra la dependencia de N_P^* , N_Q^* y del tiempo de cómputo en función del número de celdas para los tres impulsores a 1200 rpm. Los resultados muestran que incluso cuando las simulaciones CFD mostraron independencia de la malla para el número de potencia adimensional calculado a partir del torque, la solución no era independiente de la malla para las otras dos variables. Por lo cual, nuestros resultados muestran claramente que al hacer estudios de independencia de malla se deben considerar todas las variables relevantes para las conclusiones del trabajo. En estas figuras se muestra la malla que provee los resultados que están en un valor dentro de un rango aceptable para cada uno de los impulsores. Esto indica que hemos alcanzado un valor de la solución que es independiente del número de celdas de la malla

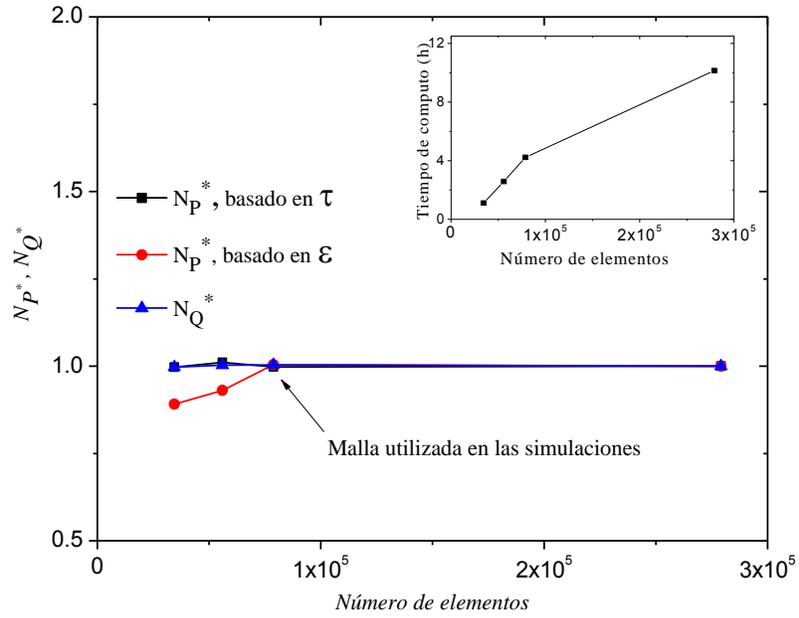


Figura 6.1. Análisis de independencia de malla y de tiempo de cómputo para la RT a 1200 rpm.

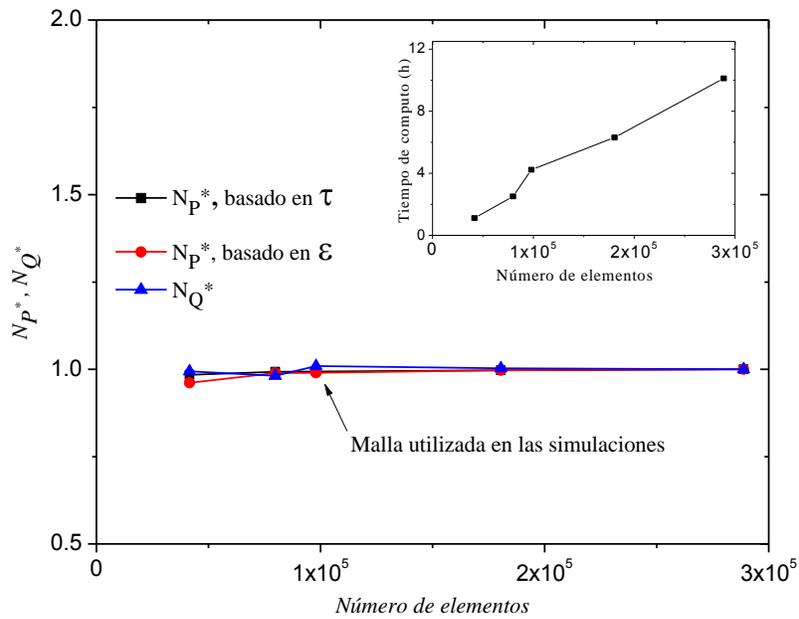


Figura 6.2. Análisis de independencia de malla y tiempo de cómputo para el HockD-2A a 1200 rpm.

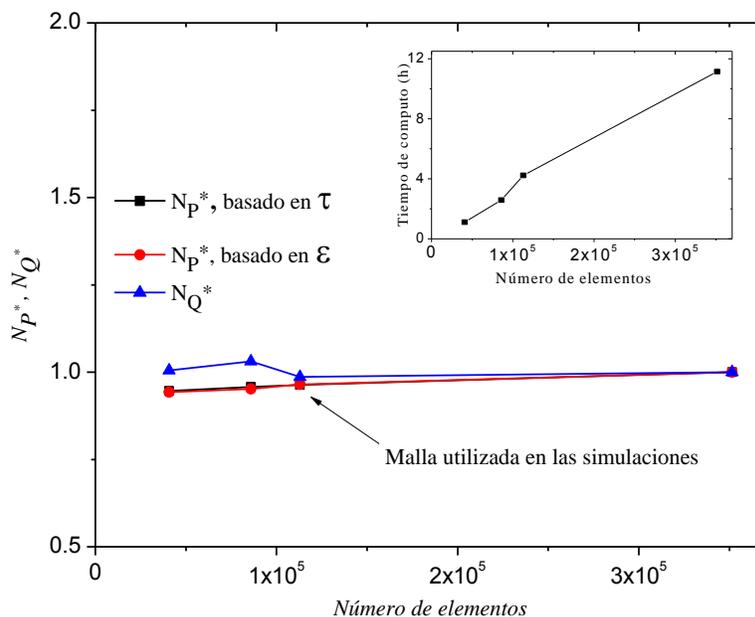


Figura 6.3. Análisis de independencia de malla y tiempo de cómputo para el HockD-4A a 1200 rpm.

En la Tabla 6.1 se muestra el número de celdas, los tipos de mallas utilizadas en las simulaciones y el tiempo de cómputo para cada impulsor. Estas mallas fueron las que se usaron en las demás simulaciones para las diferentes velocidades de agitación evaluadas en este trabajo. Puede observarse en esta tabla que para la RT la malla usada se compone únicamente de hexaedros, mientras que para los dos impulsores de alto corte también se tienen tetraedros y pirámides. Estos elementos se encuentran en el volumen barrido por los impulsores y se deben a que los impulsores de alto corte tienen geometrías más complejas.

Tabla 6.1. Número de celdas, tipos de malla y tiempo de cómputo usado en las simulaciones.

Impulsor	Hexaedros	Tetraedros	Pirámides	Total	Tiempo de cálculo (h)
RT	78866	0	0	78866	4.23
HockD-2A	58978	20286	552	98025	4.25
HockD-4A	59239	16070	951	112989	4.44

6.2 Validación de las simulaciones

Una estrategia comúnmente seguida para validar las simulaciones numéricas en tanques agitados consiste en calcular los parámetros de macro-mezcla como el N_P y N_Q a partir de las simulaciones y compararlos con mediciones experimentales (Lane, 1997). Para este estudio no se encontraron datos experimentales en la literatura de los dos impulsores de alto corte evaluados, por lo cual fue necesario realizar las mediciones experimentales de potencia y estas se usaron para validar los resultados obtenidos de las simulaciones. Para el caso de la RT los valores experimentales obtenidos en este trabajo se compararon con los reportados por Ibrahim y Nienow (1995). En la Figura 6.4a se puede observar que la diferencia entre los resultados de las simulaciones para la RT y los datos reportados por Ibrahim y Nienow (1995) es mínima (error relativo promedio menor al 1%). Por otra parte, al comparar los resultados de las simulaciones de los tres impulsores con los resultados experimentales se observa que también son muy parecidos (error relativo promedio menor al 5%), por lo que los resultados numéricos son confiables.

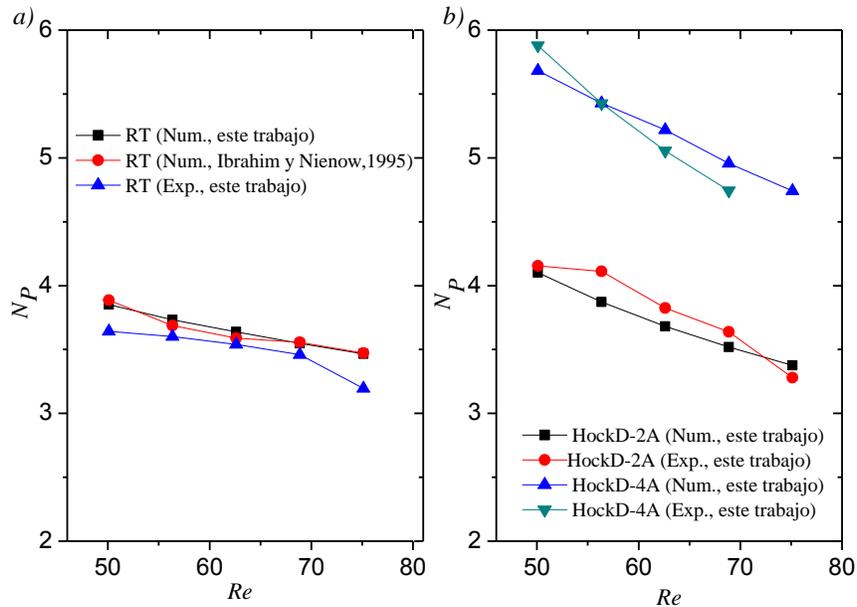


Figura 6.4. Curvas de potencia para los tres impulsores evaluados: a) RT y b) HockD-2A y HockD-4A.

En la Figura 6.5 se muestran los resultados numéricos obtenidos de N_Q en función del Re para la RT. Se puede ver que estos resultados muestran una diferencia mínima con

los valores reportados por Lamberto *et al.* (1996). Esta diferencia se debe a que en ese trabajo el flujo inducido por el impulsor, se calculó a distancias ligeramente mayores al radio del impulsor.

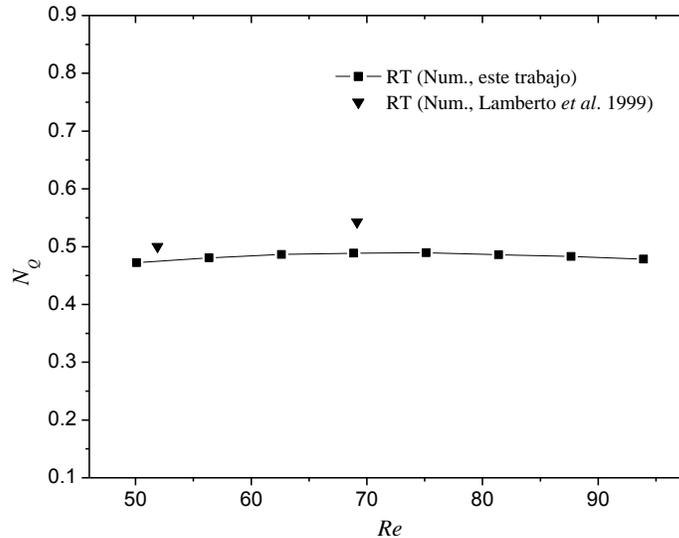


Figura 6.5. Número de bombeo para la RT en función del Re .

6.3 Comparación del desempeño hidrodinámico de los tres impulsores estudiados

En las siguientes secciones se compara el desempeño de los tres impulsores a diferentes velocidades de agitación que van desde 800 a 1500 rpm. Adicionalmente se tomó como referencia el consumo de potencia de la RT a 800 rpm (4.25 W), 1200 rpm (12.92 W) y 1500 rpm (23.45 W), y se comparó con la velocidad de agitación resultante de los impulsores HockD-2A y HockD-4A a estos mismos consumos de potencia.

6.3.1 Simulación de la formación del vórtice

La Figura 6.6 muestra la altura de la superficie libre del líquido a lo largo del eje x para los tres impulsores en el intervalo $50 \leq Re \leq 94$. La posición de la interfase fue definida a la altura a la cual la fracción volumen de la solución de glucosa era igual a 0.5. Estos resultados de las simulaciones muestran que el ancho y la profundidad del vórtice para la RT y el HockD-2A son muy parecidos, por su parte en el HockD-4A el vórtice es

más ancho y profundo a Reynolds mayores a 75. Sin embargo, en los tres casos la formación del vórtice sólo se produce en la cercanía del eje. Estos resultados son acordes a lo reportado por Rushton *et al.*, (1950) sobre la mínima influencia de la gravedad cuando el número de Reynolds está por debajo de 300.

Por otra parte, en la Figura 6.6 se observa que para el HockD-4A operando a números de Reynolds mayores a 75 ocurre un aumento considerable en el volumen de la fase líquida debido a la incorporación de aire. El aumento en el volumen de líquido también se observó al final de cada corrida experimental. En la práctica, la entrada de aire a la fase líquida es indeseable ya que esta provoca la disminución de la viscosidad y por lo tanto también disminuye la potencia que se puede suministrar. Además, la incorporación de aire podría provocar la generación excesiva de espuma lo que provocaría un posible derrame del contenido del tanque. Por lo tanto, no es recomendable utilizar el impulsor HockD-4A en regímenes de flujo superiores a los evaluados en este trabajo.

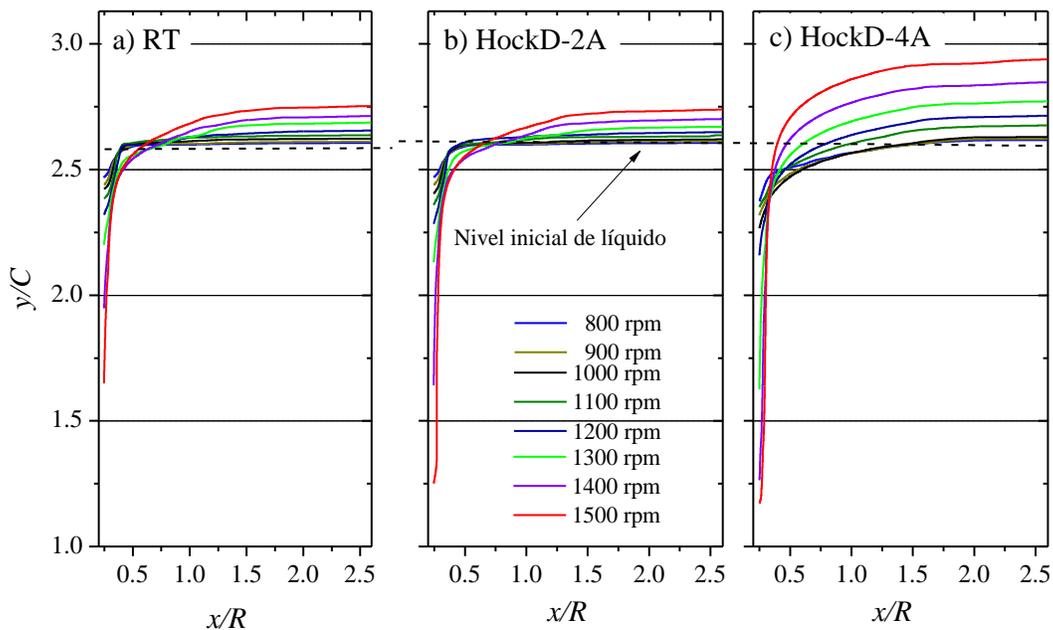


Figura 6.6. Altura de la superficie libre del líquido en función del Re para los tres impulsores evaluados.

6.3.2 Parámetros de macro-mezcla

La Figura 6.7 muestra los valores de N_P (Figura 6.7a) y N_Q (Figura 6.7b) para los tres impulsores a un Reynolds comprendido entre 50 y 94. Como puede observarse en la Figura 6.7a, la curva de N_P del HockD-4A tiene los valores más altos. También puede observarse que a Reynolds bajos la curva de N_P de la RT está por arriba de la curva del HockD-2A. Sin embargo conforme se va incrementando el Re los valores de N_P de la RT van disminuyendo hasta finalmente quedar por debajo de los valores de N_P para el HockD-2A. En el caso de los valores de N_Q , la RT presenta los valores más altos seguida del HockD-4A y finalmente el HockD-2A. Además, se puede ver que los valores de N_Q para la RT permanecen prácticamente constantes, no así los impulsores de alto corte en los cuales el N_Q aumenta conforme se incrementa el Reynolds.

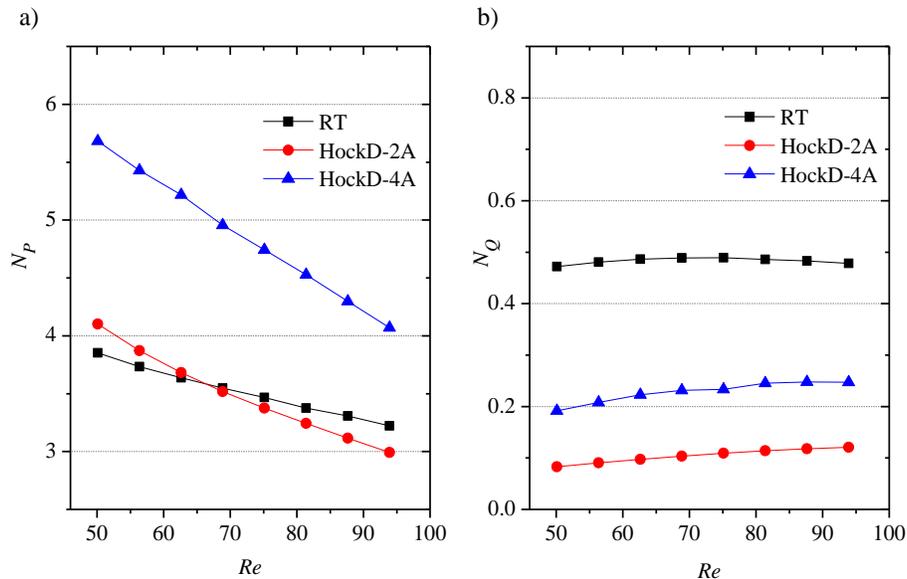


Figura 6.7. Parámetros de macro-mezcla para los tres impulsores en función del Re : a) N_P y b) N_Q .

Estos resultados muestran que el HockD-4A consume una mayor potencia para operar a la misma velocidad que los otros dos impulsores, por lo que los costos de operación en un proceso de dispersión para el HockD-4A serían mayores. Para la RT se encontró que aunque no tiene un consumo de potencia excesivo, gran parte de la potencia suministrada la utiliza para generar flujo, por lo que desde este enfoque la RT presentaría un bajo desempeño en procesos de dispersión. En cuanto al HockD-2A, los resultados

muestran que tiene un bajo consumo de potencia y que genera bajo flujo por lo que desde este punto de vista el HockD-2A sería el impulsor con el mejor desempeño en un proceso de dispersión.

En la Figura 6.8 se presentan las curvas de la relación de N_p/N_Q para los tres impulsores. Los resultados muestran que los valores del HockD-2A son los más altos, seguidos por el impulsor de cuatro anillos. Por otro lado, los valores más bajos de N_p/N_Q los exhibe la RT. Si comparamos el HockD-2A con los otros dos impulsores, éste tendría el peor desempeño para un proceso de mezclado de mezclas totalmente miscibles (Nienow, 1997). Sin embargo, en principio este impulsor sería el más adecuado para utilizarse en los procesos de dispersión de sólidos porque produce los valores más altos de N_p/N_Q . Es decir, induce al fluido en proporción una mayor cizalla que flujo. Desde este punto de vista, la RT exhibiría el peor desempeño para los procesos de dispersión de sólidos.

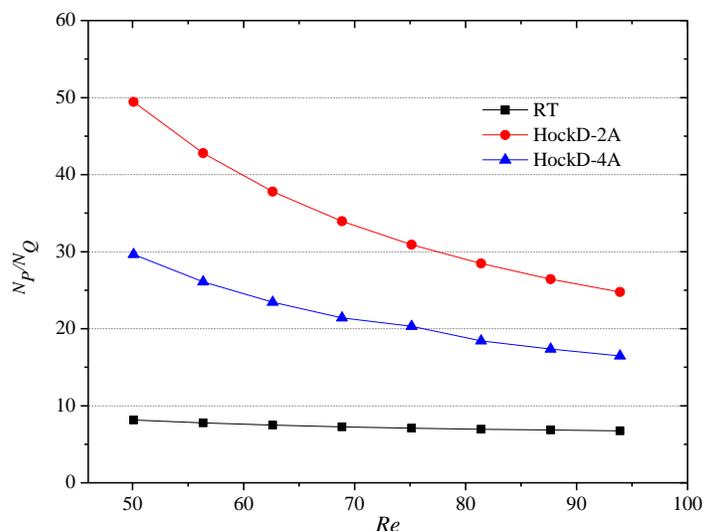


Figura 6.8. N_p/N_Q en función del Re para los tres impulsores estudiados.

Debido a que la RT también se considera un impulsor de alto cizallamiento (Oldshue, 1983), y además, es el impulsor más estudiado en la literatura, normalmente se usa como referencia para comparar el desempeño de otros impulsores. El consumo de potencia de este impulsor a 800 rpm (4.25 W), 1200 rpm (12.92 W) y 1500 rpm (23.45 W), se tomó como referencia y se comparó con la velocidad de agitación resultante de los

impulsores HockD-2A y HockD-4A a estos mismos consumos de potencia. En la Tabla 6.2 se muestran los resultados obtenidos y puede notarse que el impulsor HockD-4A gira siempre a una velocidad más baja con relación a la velocidad de la RT y del HockD-2A. En contraste, aunque el HockD-2A funciona a una velocidad menor que la correspondiente a RT en 4.25 W, su velocidad es mayor que la de la RT en 12.92 W y 23.45 W. Hay que notar que la única diferencia entre el HockD-4A y el HockD-2A es que el primero tiene cuatro anillos en lugar de dos y su volumen de barrido y el número de dientes de corte es también el doble (Ver Figura 5.4b y Figura 5.4c); esto causa que el HockD-4A funcione a una velocidad más baja que el HockD-2A para una misma potencia suministrada. En los procesos de dispersión se requiere que los impulsores de alto corte operen a altas velocidades sin necesidad de inyectar una potencia excesiva (Paul *et al.*, 1994), por lo que considerando sólo esta recomendación el HockD-4A tendría el peor desempeño.

Tabla 6.2. Predicciones de números de potencia y bombeo para un mismo consumo de potencia.

Impulsor	N (rpm)	P (W) (basado en τ)	N_p (basado en τ)	N_p (basado en $\tau : \nabla \mathbf{v}$)
RT	800	4.25	3.85	3.73
HockD-2A	781		4.15	4.16
HockD-4A	686		6.15	6.12
RT	1200	12.92	3.47	3.30
HockD-2A	1217		3.32	3.32
HockD-4A	1061		5.09	5.00
RT	1500	23.45	3.22	3.02
HockD-2A	1549		2.93	2.92
HockD-4A	1362		4.30	4.26

En cuanto a los métodos de cálculo del consumo de potencia, los resultados muestran que el consumo de potencia calculado como la integral de la disipación de energía viscosa en toda la masa es muy similar al consumo de potencia calculado a partir del torque del sistema de agitación, con errores del 1% para los impulsores de alto corte y errores menores al 5% para la turbina Rushton.

Es importante señalar que al comparar los valores obtenidos de la disipación de energía turbulenta en el volumen que encierra al impulsor para los tres impulsores, se encontró que ésta era al menos cinco órdenes de magnitud menor que la disipación laminar de energía viscosa. Por lo tanto, en este trabajo sólo se consideró la tasa de disipación laminar de energía viscosa para el cálculo del consumo de potencia a partir de la Ec. (5.3). De acuerdo a los resultados obtenidos, para $Re \leq 94$ se podría considerar un régimen de flujo laminar en todo el volumen de fluido. Estos resultados son acordes con los reportados por Gibbardo *et al.* (2006), quienes estudiaron numéricamente el campo de flujo laminar y el N_p inducido por una RT en un tanque agitado sin deflectores. Ellos encontraron que para $Re \leq 70$ utilizar un modelo de turbulencia en las simulaciones produce los mismos valores de N_p que un modelo laminar debido a que la turbulencia no está presente a estos Re .

6.3.3 Campos de velocidad

En la Figura 6.9 se muestran los patrones de flujo en términos de las magnitudes de los vectores de velocidad a un mismo consumo de potencia ($P=12.92$ W). Los vectores se muestran en un plano vertical ($z=0$). Las posiciones azimutales donde se evaluaron los vectores de velocidad para los tres impulsores se muestran en la parte superior de cada figura. En las figuras se observan dos lazos de circulación ubicados por encima y por debajo del centro de cada uno de los impulsores. Este patrón de flujo en donde se forman dos zonas de recirculación separadas ha sido reportado en estudios experimentales y numéricos en tanques agitados con una RT operando en régimen laminar y usando un fluido newtoniano (Lamberto, 1999; Rice, *et al.*, 1964; Rice, *et al.*, 2006). Por lo tanto, el patrón de flujo inducido por los dos impulsores de alto corte evaluados en este trabajo es similar al reportado para impulsores de flujo radial. Para el caso de los impulsores de alto corte las máximas velocidades se encuentran en el espacio comprendido entre los anillos y corresponden a la zona que barren las cuchillas. Además, puede observarse que en la zona debajo de los impulsores existe una mayor intensidad de la circulación del fluido con respecto a la parte superior de los mismos, y que en general, la circulación es más intensa para la RT. Por otro lado, el color y la densidad de los vectores muestran que el flujo que desciende hacia los centros de los impulsores se acerca con menor velocidad al centro en el

HockD-2A. Todo lo anterior justifica los resultados obtenidos en cuanto a la menor capacidad de bombeo y por lo tanto, un bajo desempeño desde el punto de vista del mezclado de mezclas miscibles para el HockD-2A.

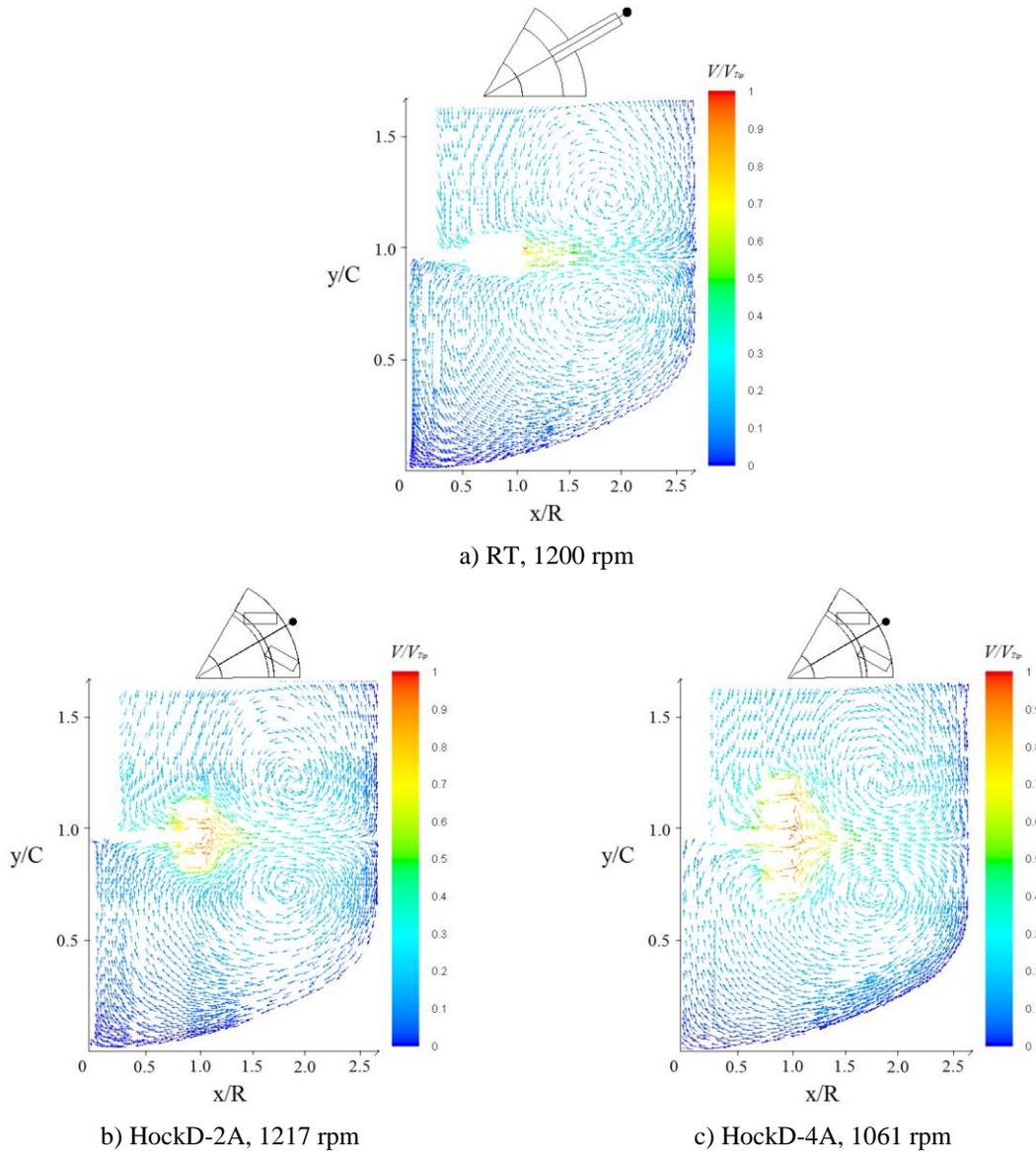


Figura 6.9. Magnitudes de la velocidad a un mismo consumo de potencia ($P = 12.92 \text{ W}$).

6.3.4 Disipación de energía

Tomando en cuenta que $\bar{\varepsilon}_{Bl}$ es un parámetro hidrodinámico clave que influye en la eficiencia de dispersión de los aglomerados de nano-partículas (Xie *et al.*, 1997; Xie *et al.*,

1998), los valores de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ se calcularon a partir de las simulaciones y éstos se analizan en esta sección. Con el fin de evaluar el desempeño de cada impulsor a una misma potencia suministrada, se calculó la tasa local de disipación de energía (ε) por medio de la ecuación (5.4) a $P=12.92$ W. En la Figura 6.10 se puede observar que, los valores máximos de disipación se limitan al borde de las cuchillas para la RT y a los bordes exteriores de los anillos para el caso de los impulsores de alto corte. Estos resultados están relacionados con los cambios repentinos de velocidad que pueden observarse para esos mismos planos en la Figura 6.9, lo cual produce un gradiente de velocidad de gran magnitud y esto se ve reflejado en valores más altos de la tasa de disipación de energía.

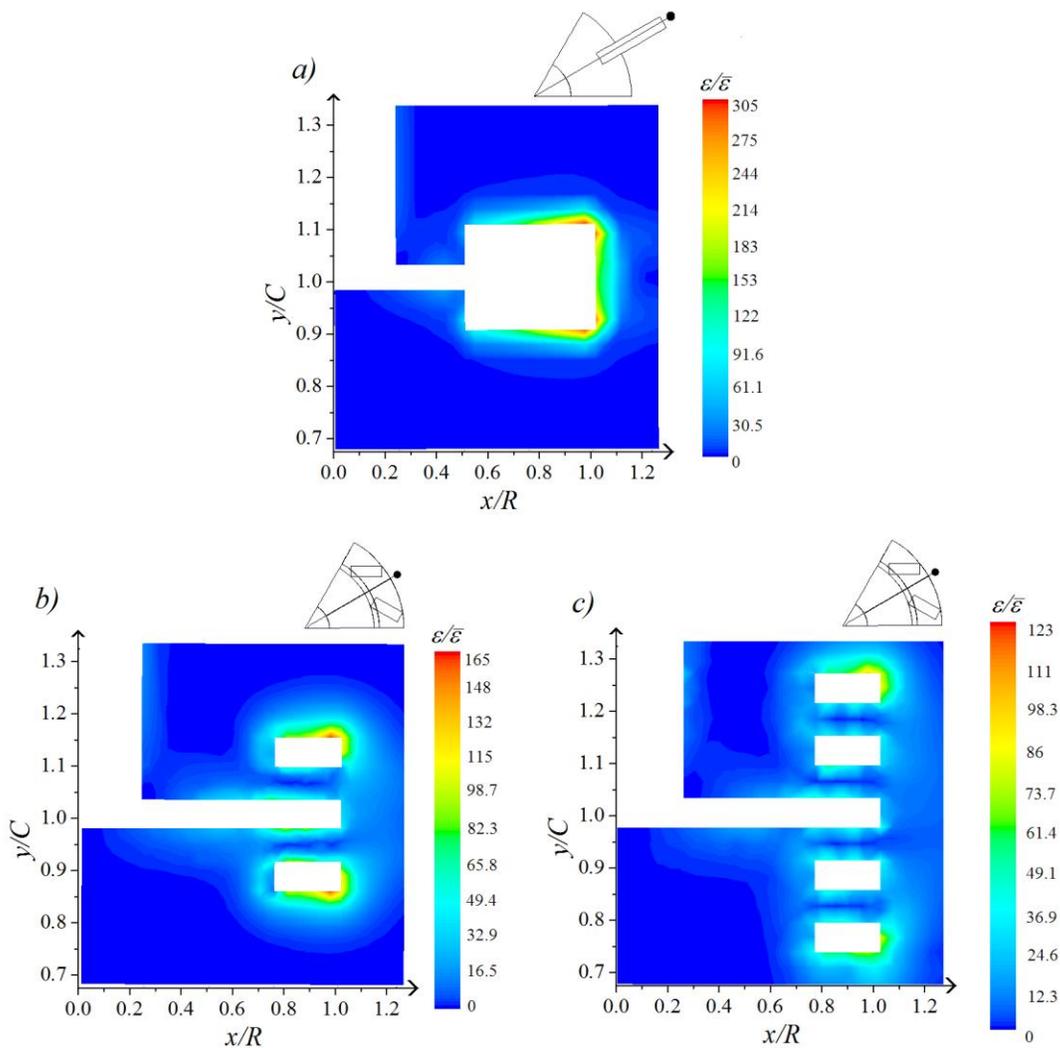


Figura 6.10. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en un plano vertical para: a) RT, b) HockD-2A y c) HockD-4A a una misma potencia ($P=12.92$ W).

Para realizar un análisis más detallado de la distribución de la tasa de disipación de energía a $P=12.92\text{ W}$, se realizaron cortes a diferentes alturas por arriba y por debajo del centro de los impulsores. En la Figura 6.11 se muestra la distribución de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$, así como las posiciones verticales de los planos para la RT. En esta figura puede apreciarse claramente que los valores máximos de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ se encuentran en los planos que están por arriba y por debajo de la paleta de la RT, en las que la tasa de disipación de energía adimensional alcanza valores aproximados de 212, pero estas son regiones muy localizadas justo por encima y debajo de la paleta del impulsor (Figura 6.11a y Figura 6.11d). En los planos intermedios (Figura 6.11b y Figura 6.11c) la máxima disipación ocurre en las cercanías de la punta de las paletas llegando a alcanzar valores de 200.

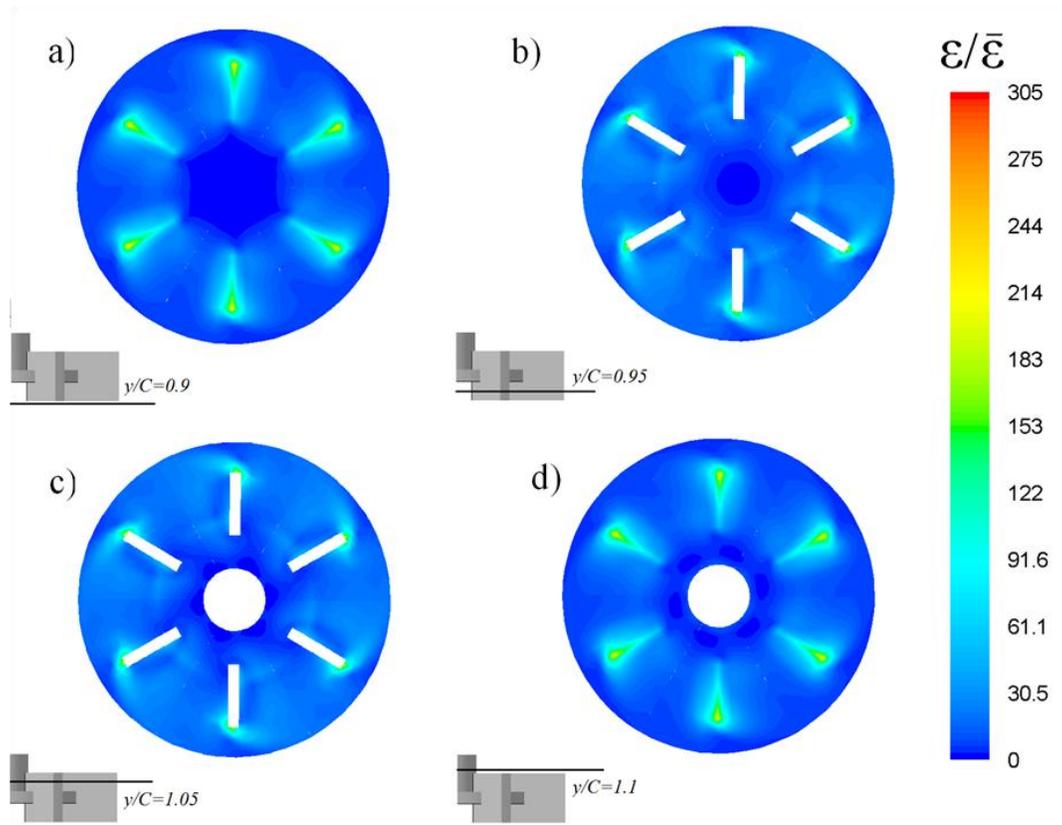


Figura 6.11. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en planos horizontales para la RT ($P=12.92\text{ W}$).

En la Figura 6.12 se presentan los planos con los contornos de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ para el HockD-2A y de manera similar a la RT, se observa que en los planos más alejados del centro del

impulsor (Figura 6.12a y Figura 6.12d) es donde se presentan las zonas de disipación más extensas y donde $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ alcanza valores de hasta 122. En los planos ubicados entre los anillos (Figura 6.12b y Figura 6.12c), la máxima disipación ocurre en la zona de descarga del impulsor y en las cercanías de las cuchillas con valores de hasta 55.

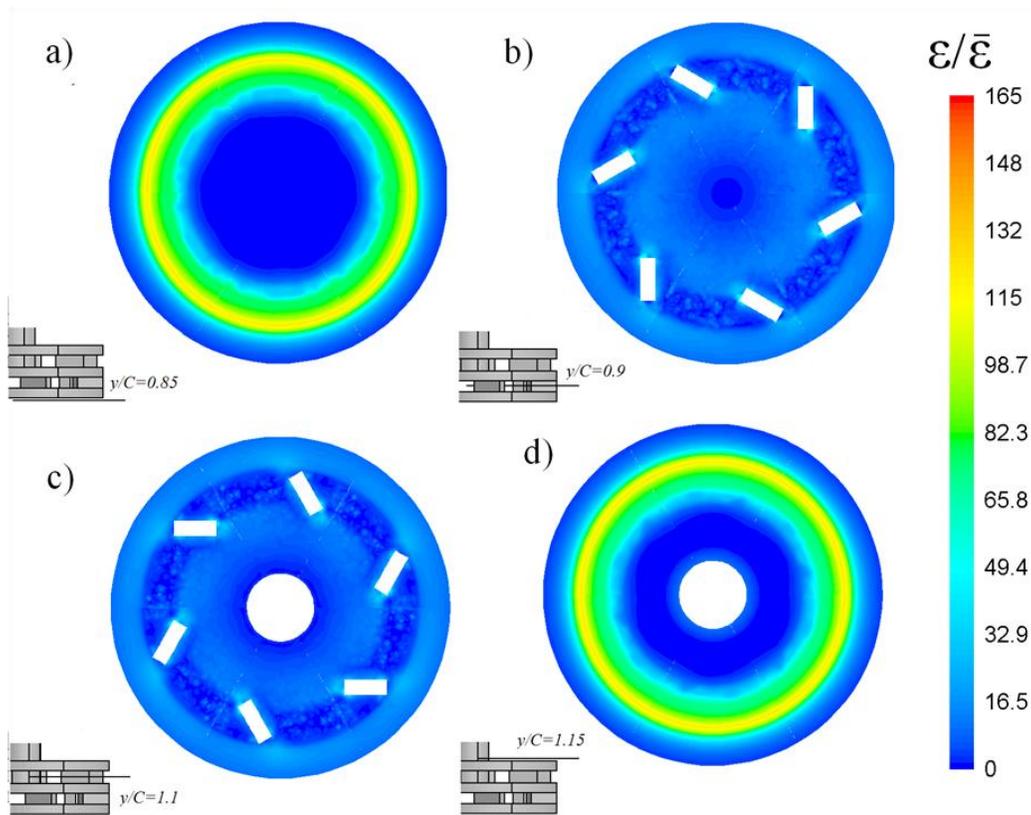


Figura 6.12. Contornos de la tasa de disipación de energía adimensional en planos horizontales para el HockD-2A ($P=12.92$ W).

Finalmente, en los contornos para el HockD-4A presentados en la Figura 6.13 puede apreciarse un comportamiento similar al del HockD-2A, en donde en los planos más alejados del centro del impulsor se localizan las regiones con los valores más altos de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$. Sin embargo, a diferencia del HockD-2A en donde los valores de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ son simétricos en los planos por arriba y por debajo del centro del impulsor, el HockD-4A presenta valores diferentes de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ en el plano superior con valores de 94 (Figura 6.13) y en el plano inferior valores de hasta 76. En los planos ubicados entre los anillos no se observan diferencias significativas para los valores de $\varepsilon/\bar{\varepsilon}$ y se tienen valores aproximados de 30.

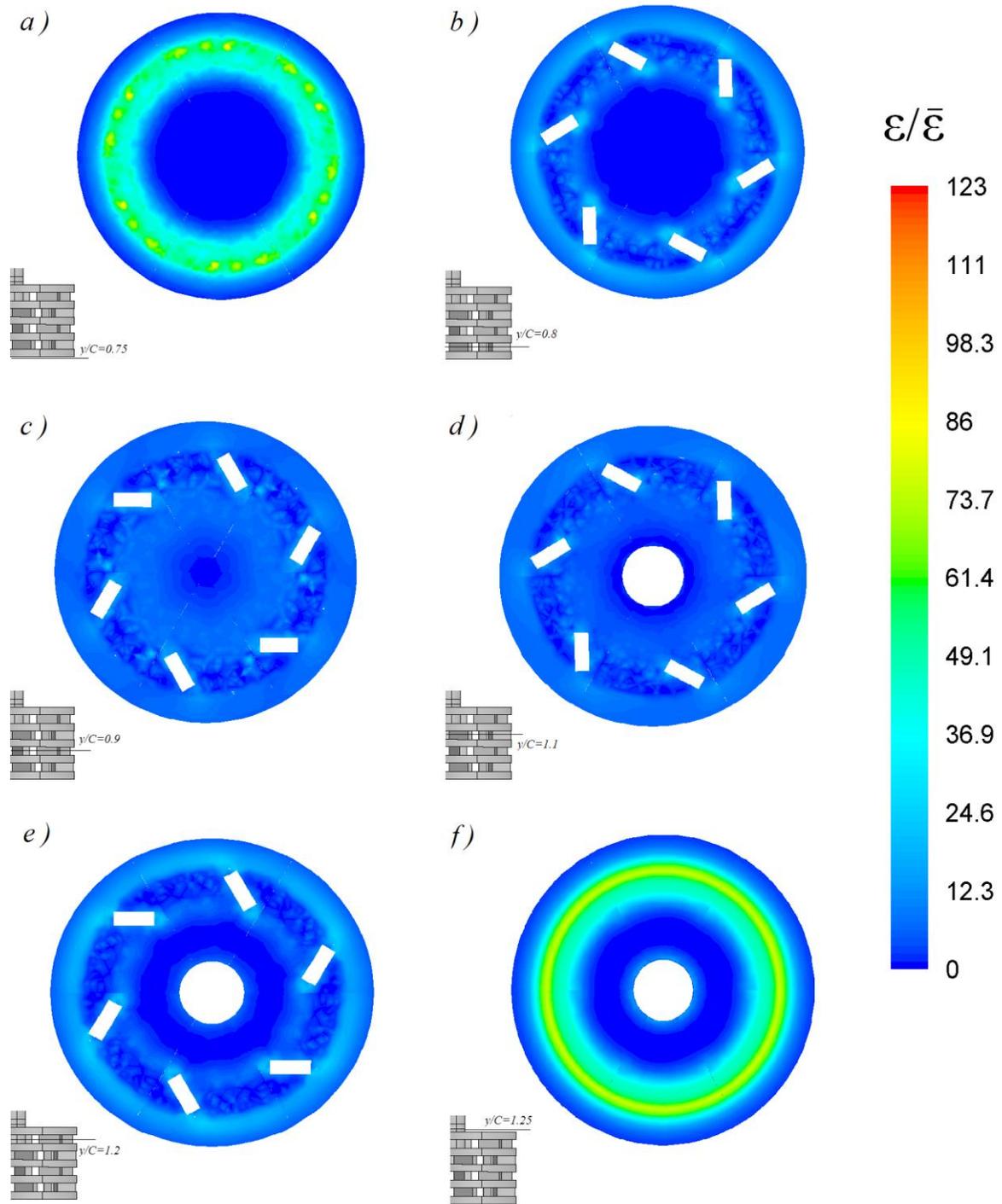


Figura 6.13. Contornos en planos horizontales de la tasa de disipación de energía adimensional para el HockD-4A ($P=12.92$ W).

En general, para los tres impulsores se observa que los valores máximos se ubican cerca del borde de la hoja externa. Sin embargo, el volumen de esta región en comparación con el volumen de fluido existente en el volumen barrido por el impulsor (V_{BI}) es muy pequeño (alrededor del 1%), y la probabilidad de que toda la cantidad de material pase a través de esta región y experimente los altos valores de la tasa de disipación de energía local es muy baja. Por lo cual se procedió a calcular la tasa de disipación de energía promedio en el volumen barrido por el impulsor.

En la Tabla 6.3 se muestran los valores de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ al mismo consumo de P (4.25 W, 12.92 W, 23.45 W). Como puede verse, la RT induce los valores más altos, mientras que el HockD-4A los valores más bajos. Sin embargo, cabe señalar que los valores de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ para los impulsores de alto corte, aumenta aproximadamente un 50% cuando el consumo de potencia aumenta de 4.25 W a 12.92 W, mientras que para la RT su aumento es de aproximadamente un 5%, y cuando el consumo de potencia aumento de 12.92 W a 23.45 W, los valores de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ aumentaron 30% para los impulsores de alto corte y 4% para la RT. Estos resultados sugieren que un aumento mayor de P podría producir valores más altos de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ para los impulsores de alto corte que para la RT. Sin embargo hay que recordar que el HockD-4A está limitado por la máxima velocidad a la que puede operar, por lo discutido en la sección 6.3.1, por lo que difícilmente el HockD-4A podría producir valores más altos de $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$.

Tabla 6.3. Efecto de la potencia suministrada en $\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$ para los tres impulsores evaluados.

Impeller	N (rpm)	$P(W)$ (basado en τ)	$\bar{\varepsilon}_{BI}/\bar{\varepsilon}$
RT	800	4.25	26.37
HockD-2A	781		12.03
HockD-4A	686		7.44
RT	1200	12.92	27.59
HockD-2A	1217		18.12
HockD-4A	1061		10.81
RT	1500	23.45	28.73
HockD-2A	1549		22.95
HockD-4A	1362		14.42

Con el fin de investigar la tasa de disipación de energía a través del volumen barrido por el impulsor (V_{BI}), este volumen se dividió en dos regiones de fluido: a) Volumen barrido por la cuchilla o paleta del impulsor (V_{BP}), y b) volumen barrido por el centro del impulsor (V_{BC}), es decir, $V_{BI} = V_{BP} + V_{BC}$. Cabe señalar que el volumen de cada región para el impulsor HockD-4A es casi el doble del volumen del impulsor HockD-2A. Mientras tanto, el V_{BP} de la HockD-2A es muy parecido al de la RT, sin embargo, para la RT, el 78.3% de este volumen corresponde al V_{BI} , mientras que para HockD-2A, V_{BI} corresponde sólo el 32.7%.

La Tabla 6.4 muestra la tasa de disipación de energía promedio adimensional en el volumen de barrido de la cuchilla ($\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$) y en el volumen barrido por el centro del impulsor ($\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$) para los tres impulsores, para los tres consumos de energía constante evaluados en este estudio. Se puede observar que para los tres impulsores $\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$ es mayor que $\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$ (al menos 3 veces para la HockD-2A), y por lo tanto, de acuerdo con Xie *et al.* (1997) y Xie *et al.* (1998), es probable que el tamaño de partícula final debido a la rotura de nano-partículas de aglomerados obtenido en un proceso de dispersión, se lleve a cabo en el V_{BP} . Los resultados muestran además que con un consumo de 4.24 W, los valores de $\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$ y $\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$ para la RT son más altos que los obtenidos para los dos impulsores de alto corte, pero cuando se incrementa P de 4.24 W a 12.92 W, estos valores son casi idénticos entre la RT y el HockD-2A, mientras que el HockD-4A induce los valores más bajos de $\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$. Estos resultados sugieren que si el tiempo de proceso de dispersión es lo suficientemente largo, la RT y la HockD-2A podrían tener el mismo desempeño a una potencia suministrada de 12.92 W. Finalmente al incrementar de 12.92 W a 23.45 W, se encontró que la tasa de disipación de energía promedio en V_{BP} y V_{BC} era mayor para el HockD-2A que la evaluada para la RT, confirmando la ventaja del alto cizallamiento inducido por el HockD-2A cuando opera a velocidades más altas.

Los resultados discutidos anteriormente indican que diferentes criterios producen diferentes desempeños hidrodinámicos sobre el desempeño de mezclado de impulsores de alto corte. Por lo que los valores de los parámetros de macro-mezcla como N_P y N_Q o su relación no pueden ser simplemente interrelacionados para la selección de un impulsor de

alto corte utilizado en un tanque sin deflectores. Así, el conocimiento de los parámetros hidrodinámicos locales y promedio en el impulsor de volumen barrido puede contribuir a mejorar la comprensión de estos dispositivos de mezcla.

Tabla 6.4. Efecto de la potencia suministrada en $\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$ y $\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$ para los impulsores RT, HockD-2A y HockD-4A.

Impeller	P (W) (basado en τ)	$\bar{\varepsilon}_{BP}/\bar{\varepsilon}$	$\bar{\varepsilon}_{BC}/\bar{\varepsilon}$
RT	4.25	31.07	9.24
HockD-2A		20.77	7.76
HockD-4A		15.10	3.73
RT	12.92	32.03	10.80
HockD-2A		32.00	11.28
HockD-4A		21.69	5.47
RT	23.45	32.97	12.12
HockD-2A		41.06	13.90
HockD-4A		28.53	7.26

7. CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó un estudio a $50 \leq Re \leq 94$ usando Dinámica de Fluidos Computacional en conjunto con mediciones experimentales de consumo de potencia para evaluar el desempeño hidrodinámico de dos impulsores comerciales de alto corte de tipo anillos Hockmeyer® (Hockmeyer® Equipment Corp. D-Blade) de escala laboratorio, y su desempeño se comparó con el de una turbina Rushton estándar.

Con el fin de mejorar nuestro entendimiento sobre su desempeño hidrodinámico se calcularon parámetros de macro-mezcla (números de potencia y de bombeo) y locales (vectores de velocidad y contornos de la tasa de disipación de energía), así como los valores promedios de la tasa de disipación de energía en el volumen barrido por los impulsores y las cuchillas. Los resultados muestran que la tasa de disipación calculada como la integral de la disipación de energía viscosa en toda la masa es muy similar al consumo de potencia calculado a partir del torque del sistema de agitación.

Los resultados muestran que a un mismo consumo de potencia la RT induce los valores más altos de $\bar{\epsilon}_{Bl}/\bar{\epsilon}$. Sin embargo, si se analiza solamente la tasa de disipación de energía promedio, únicamente en el volumen barrido por las cuchillas a una potencia suministrada de 23.45 W, ésta es mayor para el HockD-2A que la evaluada para la RT, corroborando la ventaja del alto cizallamiento inducido por el HockD-2A cuando opera a velocidades altas.

Los resultados indican que los valores de números de potencia y de bombeo y su relación no pueden ser relacionados de manera simple para la selección de un impulsor de alto corte utilizado en un tanque sin deflectores en donde se desean altos valores de velocidad de cizallamiento o disipación de energía local. Por lo cual, se requieren estimar parámetros hidrodinámicos locales para contribuir a mejorar la comprensión de los aspectos relevantes que surgen en el análisis de estos sistemas de agitación.

Los resultados discutidos en este trabajo pueden contribuir a mejorar el rendimiento de los procesos de dispersión existentes en la industria, ya que la geometría del tanque, impulsor y las condiciones de funcionamiento utilizadas en este trabajo se manejan

comúnmente en aplicaciones industriales, principalmente en la etapa de investigación y desarrollo.

8. REFERENCIAS

- Bakker, A. 2008, Free Surface Flows. *Computational Fluid Dynamics*. Recuperado Febrero 11, 2015 de: <http://www.bakker.org/dartmouth06/engs150/16-fsurf.pdf>.
- Bimlesh, K., 2012, CFD Simulation of Flow Patterns in Unbaffled Stirred Tank Whit CD-6 Impeller, *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.*, Vol. 18, No. 4, 535-546.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., 2002, *Transport Phenomena*, John Wiley y Sons, Inc., New Jersey, 2a ed.
- Bondy, F., Lippa, S., 1983, Heat Transfer in Agitated Vessels, *Chem. Eng.-New York*, Vol. 90, No. 7, 62-71.
- Cabaret, F., Fradette, L., Tanguy, P. A., 2008, New Turbine Impellers for Viscous Mixing. *Chem. Eng. Technol.*, Vol. 31, No. 12, 1806–1815.
- Conley, R. F., 1996, *Practical Dispersion: A Guide to Understanding and Formulating Slurries*, John Wiley y Sons, E.U.A.
- Das, S. K., 2006, *Process Heat Transfer*, Alpha Science International Ltd, India.
- Davis, K.A., 1982, Titanium Dioxide, *J. Chem. Educ.*, Vol. 59, 158-159.
- Dickey, D. S., Hicks, R.W., 1976, Fundamentals of Agitation, *Chem. Eng.-New York*, Vol. 6, No. 83, 93-100.
- Fluent Inc. 2014, *Fluent 14.5 User's Guide*. Lebanon, Fluent Inc.
- Freudig, B., Hogeckamp, S., Schubert, H., 1999, Dispersion of Powders in Liquids in a Stirred Vessel, *Chem. Eng. Process.*, Vol. 38, 525–532.
- García, D., Jáuregui, 2006, Hidrodinámica en Tanques Agitados con Turbinas de Disco con Paletas Planas, *Revista de Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, Vol. 38, 97-113.
- Gibbardo, B., Micalea, G., Grisafia, F., Brucato, A., Ciofalo, M., 2006, *12th European Conference on Mixing*, Bologna, Italy.
- Harnby, N., Edwards, M. F., Nienow, A. W., 1992, *Mixing in the Process Industries*, Butterworth-Heinemann Ltd., E.U.A., 2a ed.
- Hirt, C. W., Nichols, B. D., 1981, Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of free Boundaries, *J. Comput. Phys.*, Vol. 39, 201-225.
- Hockmeyer, H., 2010, Practical Guide to High-Speed Dispersion, *Paint Coat. Ind.*, Vol. 26, 32-36.
- Ibrahim, S., Nienow, A. W., 1995, Power Curves and Flow Patterns for a Range of Impellers in Newtonian Fluids, *Trans. IChemE.*, Vol. 73, 485-495.

- Joshi, J. B., Nere, N. K., Rane, C. V., Murthy, B. N., Mathpati, C. S., Patwardhan, A. W., Ranade, V. V., 2011, CFD Simulation of Stirred Tanks: Comparison of Turbulence Models. Part I: Radial Flow Impellers. *Can. J. Chem. Eng.*, Vol. 89, 23–82.
- Joshi, J. B., Nere, N. K., Rane, C. V., Murthy, B. N., Mathpati, C. S., Patwardhan, A. W., Ranade, V. V., 2011, CFD Simulation of Stirred Tanks: Comparison of Turbulence Models (Part II: Axial Flow Impellers, Multiple Impellers and Multiphase Dispersions), *Can J. Chem. Eng.*, Vol. 89, 754–816.
- Lane, G., Koh, P.T.L., 1997, CFD Simulation of a Rushton Turbine in a Baffled Tank, *Inter. Conf. on CFD in Mineral & Metal Processing and Power Generation*, Melbourne, Victoria, AU.
- Nienow, A. W., 1997, On Impeller Circulation and Mixing Effectiveness in the Turbulent Flow Regime, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 52, 2557-2565.
- Oldshue, J. Y., 1983, Fluid Mixing Technology, *Chemical Engineering*. McGraw-Hill Publications Co., New York, N.Y.
- Pal, L., Fleming, P. D., 2006, The Study of Ink Pigment Dispersion Parameters, *The Hilltop Review*, Vol. 2, No. 9.
- Paul, E.L., Atiemo-Obeng, V.A., Kresta, S.M., 2004, *Handbook of Industrial Mixing Science and Practice.*, Wiley Interscience.
- Patton T. C., 1979, *Paint flow and pigment dispersion*, John Wiley and Sons, 2a ed.
- Perry, R.H., Green, D.W., Maloney, J.O., 2001, *Manual del Ingeniero Químico*. McGraw Hill, España, 7a ed.
- Rushton, J. H., Costich, E. W., Everett, H. J., 1950, *Chem. Eng. Prog.*, Vol. 46, No. 8, 395-476.
- Steinmetz, M., 1999, *Method for Manufacturing Mixing Impeller*, Norstone, Inc., No 5888440.
- Unadkat, H., Rielly, Ch.D., Nagy, Z.K., 2011, PIV Study of the Flow Field Generated by a Sawtooth Impeller, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 66, 5374-5387.
- VMA-Getzmann, 2007, *Innovative Dispersion Systems for Laboratory and Pilot Plant*, DISPERMAT.
- Xie, L., Rielly, C.D., Ozcan-Taskin, G., 2008, Break-up of Nano-Particle Agglomerates by Hydrodynamically Limited Processes, *J. Dispers. Sci. Technol*, Vol. 29, No. 4, 573-569.
- Xie, L., Rielly, C.D., Eagles, W., Ozcan-Taskin, G., 2007, Dispersion of Nano-Particle Clusters Using Mixed Flow and High Shear Impellers in Stirred Tanks, *Chem. Eng. Res. Des.*, Vol. 85, No. 5, 676-684.

Zubitur, M., 1998, *Efecto de la Agitación en la Polimerización en Emulsión*. Tesis de doctorado en Ciencias Químicas. Universidad del País Vasco, España, 9-16.