



Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana

Azcapotzalco

Intensificación de procesos de dispersión en sistemas
agitados mecánicamente

Doctorado en Ingeniería de Procesos

M. en I. Gastón Martínez de Jesús

Director de Tesis:

Dr. Jorge Ramírez Muñoz

Departamento de Energía, UAM-A



Resumen

Los impulsores de alto corte (IAC) son muy utilizados en la industria de recubrimientos y pinturas para recuperar el tamaño primario de pigmentos (i.e. desaglomeración), sin embargo, los parámetros hidrodinámicos que caracterizan su desempeño son muy escasos en la literatura científica. Esto origina que el escalamiento y puesta a punto los procesos en los que se utilizan se ejecuten siguiendo reglas heurísticas y la experiencia de ingenieros de proceso.

Por ello, en esta tesis, utilizando herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) y mediciones experimentales de consumo de potencia, se comparan los parámetros hidrodinámicos de los IAC tipo Norstone, Hockmeyer y Cowles. El estudio se realizó en el régimen de flujo laminar y de laminar a transición ($0.5 \leq Re \leq 263$). Se considera la naturaleza newtoniana y no newtonianos de tipo pseudoplástico de los fluidos de proceso. Se obtuvieron los campos de velocidad, la dependencia de los números de potencia (N_p) y de bombeo (N_Q) respecto al número de Reynolds (Re). También se comparan sus capacidades de disipación viscosa de energía en regiones cercanas a la superficie de los impulsores. Este parámetro es de particular interés ya que está relacionado con la capacidad de desaglomeración de partículas. Los valores de disipación viscosa en la zona de contacto con la superficie de los impulsores fueron de utilidad para definir la zona de bombeo efectivo.

La comparación de estos parámetros, a una misma potencia inyectada, indica que los impulsores tipo Norstone pueden generar los valores más altos de disipación viscosa, lo cual sugiere que este impulsor tendría un mejor desempeño con partículas difíciles de desaglomerar. Sin embargo, su capacidad de bombeo es la de menor magnitud. El impulsor Cowles presenta los valores más altos de bombeo y los valores de disipación viscosa en presencia de fluidos newtonianos es aproximadamente del 90%, mientras que con fluidos pseudoplásticos es cercana al 70% ambas comparadas con los tipo Norstone. El impulsor Hockmeyer presenta un desempeño intermedio. Tanto con los fluidos newtoniano y pseudoplásticos, este

genera cerca del 50% de la disipación respecto de los tipo Norstone, pero su capacidad de bombeo es aproximadamente el 70% del Cowles.

Los datos de simulación indican que existe una relación inversa entre las capacidades de disipación de energía y la viscosidad del fluido de proceso.

Para investigar el desempeño de los impulsores tipo Norstone con relación al tamaño de sus surcos, se evaluaron tres variantes de estos. El primero que presenta surcos de una profundidad de 3 mm, el segundo 1.5 mm y un disco plano. Los resultados numéricos indican que la función principal de los surcos es la generación de bombeo. Sin embargo, cuando se evaluaron altas velocidades de agitación, los surcos presentan valores de disipación viscosa comparable a los máximos generados por el Hockmeyer.

Utilizando la metodología de Metzner y Otto adaptada a herramientas de CFD se obtuvieron las constantes de Metzner y Otto, la cuales son utilidad práctica para estimar la potencia de impulsores operando con fluidos pseudoplásticos.

Además, para el Hockmeyer se obtuvieron datos experimentales de reducción de tamaños de partículas de polvos minerales, los cuales se relacionaron directamente con los datos numéricos de disipación viscosa. Y estos resultados fueron comparados con los generados por una turbina Rushton.

Contenido

| | |
|--|----|
| Capítulo 1. Introducción..... | 1 |
| 1.1 Motivación..... | 1 |
| 1.2 Justificación | 6 |
| 1.3 Hipótesis | 7 |
| 1.4 Objetivo general..... | 7 |
| 1.4.1 Objetivos Particulares | 8 |
| 1.5 Antecedentes | 8 |
| 1.5.1 Clasificación de impulsores de alto corte (IAC) | 8 |
| 1.5.2 Estudios previos sobre IAC | 10 |
| 1.5.2.1 Impulsor tipo Norstone | 10 |
| 1.5.2.2 Impulsores tipo Cowles y dientes de sierra | 10 |
| 1.5.2.3 Impulsor tipo Hockmeyer | 12 |
| Capítulo 2. Marco teórico | 13 |
| 2.1 Comportamiento reológico de los fluidos..... | 13 |
| 2.2 Desaglomeración de pigmentos para la industria de recubrimientos | 15 |
| 2.2.1 Composición de una pintura y la importancia del tamaño de partículas de pigmento | 15 |
| 2.2.2 Estructura de los aglomerados de pigmentos | 18 |
| 2.2.3 El Proceso de dispersión de pigmentos..... | 19 |
| 2.3 Tanques agitados mecánicamente..... | 20 |

| | |
|---|----|
| 2.4 Clasificación y caracterización de impulsores | 22 |
| 2.4.1 Potencia inyectada en fluidos newtonianos | 24 |
| 2.4.2 Potencia inyectada en fluidos no newtonianos..... | 27 |
| 2.4.3 Bombeo y el esfuerzo cortante generado por el impulsor | 29 |
| 2.4.4 Estimación de la potencia inyectada y disipación de energía | 32 |
| 2.5 Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)..... | 33 |
| 2.5.1.1 Pre-procesamiento | 33 |
| 2.5.1.2 Simulaciones..... | 34 |
| 2.5.1.3 Post-procesamiento | 34 |
| 2.5.2 Ecuaciones de conservación que describen el flujo | 35 |
| 2.5.3 El método de volúmenes finitos | 36 |
| 2.5.4 Esquemas de interpolación espacial | 42 |
| 2.5.4.1 Esquema lineal..... | 43 |
| 2.5.4.2 Esquema upwind (hacia atrás)..... | 44 |
| 2.5.4.3 Esquema por ley de potencia..... | 44 |
| 2.5.4.4 Esquema QUICK..... | 44 |
| 2.5.5 El modelo de volumen de fluido..... | 45 |
| 2.5.6 El enfoque de Múltiples Marcos de Referencia | 47 |
| 2.5.7 Mallado..... | 48 |
| Capítulo 3. Metodología..... | 52 |
| 3.1 Impulsores de alto corte estudiados | 52 |
| 3.2 Mediciones experimentales de consumo de potencia..... | 53 |
| 3.2.1 Equipos para determinar la potencia inyectada..... | 53 |

| | |
|---|----|
| 3.2.2 Fluidos de proceso utilizados | 55 |
| 3.3 Simulaciones CFD | 56 |
| 3.3.1 Consideraciones para la ejecución de las simulaciones..... | 58 |
| 3.3.2 Experimentos de desaglomeración de partículas de polvo mineral . | 60 |
| Capítulo 4. Resultados y discusiones..... | 61 |
| 4.1 Análisis de independencia de malla y validación experimental de las simulaciones | 61 |
| 4.2 Caracterización hidrodinámica de los IAC con fluidos newtonianos | 65 |
| 4.2.1 Patrones de flujo y generación de vórtice | 65 |
| 4.2.2 Número de potencia con fluidos newtonianos | 69 |
| 4.2.3 Disipación viscosa y bombeo efectivo..... | 71 |
| 4.3 Caracterización hidrodinámica de los IAC con fluidos pseudoplásticos | 78 |
| 4.3.1 Curva reológica y validación experimental de las simulaciones con fluidos pseudoplásticos | 78 |
| 4.3.2 Patrones de flujo y generación de vórtice con fluidos pseudoplásticos | 81 |
| 4.3.3 Determinación de la constante de Metzner y Otto para los IAC estudiados | 84 |
| 4.3.4 Disipación viscosa y bombeo efectivo con fluidos pseudoplásticos | 88 |
| 4.3.5 Desaglomeración de partículas de polvo mineral..... | 92 |
| Capítulo 5. Conclusiones | 94 |
| Capítulo 6. Referencias | 97 |

Índice de figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1-1. Impulsores comerciales de alto corte tipo abierto. | 9 |
| Figura 1-2. Impulsor de alto corte tipo anillos Hockmeyer® (Hockmeyer, 2010)..... | 10 |
| Figura 2-1. Comportamiento reológico de los fluidos. | 13 |
| Figura 2-2. Componentes de una película de recubrimiento. Tomada de (Curiel Villasana, 2004). | 15 |
| Figura 2-3. Poder de dispersión del dióxido de titanio como una función de su tamaño de partícula. Adaptado de (DuPont, 2007)..... | 16 |
| Figura 2-4. Relación entre el tamaño de partícula y la opacidad para una distribución típica de tamaños de partícula de TiO ₂ . Adaptado de (Kippax, 2005)..... | 17 |
| Figura 2-5. Estructura de los aglomerados de un TiO ₂ . Modificada de (Egerton y Tooley, 2014). | 18 |
| Figura 2-6. Componentes de un tanque agitado mecánicamente..... | 21 |
| Figura 2-7. Patrones de flujo y algunos impulsores que lo generan (Harnby et al., 1992)..... | 23 |
| Figura 2-8. Comparación del bombeo y esfuerzo cortante generado por impulsores (Mixtec- Impellers, 2012) | 24 |
| Figura 2-9. Curva de potencia (N_P vs Re) para un tanque cilíndrico con o sin deflectores (adaptado de McCabe et al., (1991))..... | 26 |
| Figura 2-10. Superficies donde se calcula Q y perfil de velocidad en la cercanía de la paleta del impulsor..... | 31 |
| Figura 2-11. Volumen de control..... | 37 |
| Figura 2-12. a) Dominio en 1D y (b) Dominio 2D. | 40 |
| Figura 2-13. Flujo multifásico. | 45 |
| Figura 2-14. Esquema para el modelado de tanques agitados mediante MRF..... | 48 |
| Figura 2-15. Mallas. | 49 |
| Figura 2-16. Elementos utilizados para la generación de las mallas. | 49 |
| Figura 3-1. Impulsores tipo Norstone. | 52 |
| Figura 3-2. Impulsor tipo Hockmeyer..... | 53 |

| | |
|--|----|
| Figura 3-3. Impulsor tipo Cowles. | 53 |
| Figura 3-4. Equipos utilizados para medir la potencia inyectada. | 54 |
| Figura 3-5. Configuración geométrica del sistema experimental. | 55 |
| Figura 3-6. Dominio computacional y mallas de los impulsores. | 56 |
| Figura 3-7. Malla generada para el impulsor NR-3.0. Se muestra un plano vertical de todo el dominio y detalles 2D y 3D de los volúmenes en los que se dividió el RRF..... | 57 |
| Figura 4-1. Análisis de independencia de malla considerando todo el dominio | 62 |
| Figura 4-2. Análisis de independencia de malla mediante la disipación calculada en regiones cercanas a los impulsores. | 63 |
| Figura 4-3. Validaciones experimentales de los resultados de simulación con fluido newtoniano ($\eta=2.4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ y $\rho=1363 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$)..... | 64 |
| Figura 4-4. Campos de velocidad generados por el impulsor Norstone® 3.0 (1393 rpm). | 66 |
| Figura 4-5. Campos de velocidad generados por el impulsor Hockmeyer® (1203 rpm). | 66 |
| Figura 4-6. Campos de velocidad generados por el impulsor Cowles® (1355 rpm)..... | 67 |
| Figura 4-7. Líneas de corriente generados a 36W. | 67 |
| Figura 4-8. Vórtice generado por el NR-3.0 a $Re= 128$ | 68 |
| Figura 4-9. Vórtice generado en la interfase líquido-gas del fluido newtoniano a 36 W. El número entre paréntesis corresponde al Re | 69 |
| Figura 4-10. Curva de potencia newtoniana. | 71 |
| Figura 4-11. Contornos de disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ sobre la superficie de los impulsores con fluido a $0.95 \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Los números entre paréntesis corresponden a la velocidad de agitación en rpm..... | 73 |
| Figura 4-12. Disipación viscosa, a) y b) como función de la potencia inyectada y la viscosidad para los impulsores NR-3.0 y NR-1.5. c) Como función de la potencia inyectada para el NR-0..... | 74 |
| Figura 4-13. Disipación viscosa para los HM y CW como función de la potencia inyectada El * en ZB es para señalar que el volumen de esta región fue multiplicado por un factor de 0.1. | 76 |
| Figura 4-14. Bombeo efectivo con fluidos newtonianos..... | 77 |
| Figura 4-15. a) Curvas reológicas de los fluidos pseudoplásticos y b) su ajuste a la ley de potencia. | 79 |

| | |
|---|----|
| Figura 4-16. Validación experimental de los resultados de simulación con fluido pseudoplástico (CMC al 2%, $k=21.58$ y $n=0.3938$). | 80 |
| Figura 4-17. Validación experimental de los resultados de simulación con fluido pseudoplástico (CMC al 1.5%, $k=14.33$ y $n=0.4074$). | 80 |
| Figura 4-18. Patrón de flujo generado por los IAC a una potencia inyectada de 13W con dos fluidos pseudoplásticos generados a partir de CMC. | 82 |
| Figura 4-19. Vórtice generado en la interfase líquido-gas de los fluidos pseudoplásticos a 13 W. El número entre paréntesis corresponde al Re | 83 |
| Figura 4-20. $\dot{\gamma}_{prom}$ vs N para determinar la constante de Metzner y Otto para los IAC estudiados. | 85 |
| Figura 4-21. Curva de potencia no newtoniana de los IAC estudiados. | 86 |
| Figura 4-22. Disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ sobre la superficie de los impulsores utilizando un fluido pseudoplástico, CMC 1.5%. Los números entre paréntesis corresponden a la velocidad de agitación en rpm. | 89 |
| Figura 4-23. Disipación viscosa como función de la reología del fluido a 4W de potencia inyectada. | 90 |
| Figura 4-24. Bombeo efectivo con fluido pseudoplástico. | 91 |

Índice de tablas

| | |
|--|----|
| Tabla 2-1. Calidad de la malla con base en la oblicuidad. | 50 |
| Tabla 3-1. Especificaciones del algoritmo de solución. | 58 |
| Tabla 3-2. Especificaciones de los modelos de flujo. | 58 |
| Tabla 3-3. Especificación de los materiales. | 59 |
| Tabla 3-4. Especificación de las condiciones de frontera en el fluido. | 59 |
| Tabla 3-5. Especificación de las condiciones de frontera en las paredes. | 59 |
| Tabla 3-6. Esquemas de discretización para las ecuaciones gobernantes. | 59 |
| Tabla 3-7. Especificación de los residuales como criterio de convergencia. | 60 |
| Tabla 4-1. Número de celdas en las mallas de cada impulsor. | 61 |
| Tabla 4-2. Error máximo y mínimo entre las mediciones experimentales y numéricas de N_P | 70 |
| Tabla 4-3. Parámetros de la ley de potencia de las soluciones de CMC. | 79 |

| | |
|--|----|
| Tabla 4-4. Error máximo y mínimo entre las mediciones experimentales y numéricas de potencia para el fluido pseudoplástico (CMC al 2%). | 81 |
| Tabla 4-5. K_s para diferentes impulsores..... | 87 |
| Tabla 4-7. Capacidad de reducción de tamaños de partículas para el HM y la turbina Rushton en función de su capacidad de disipación viscosa..... | 92 |

Capítulo 1. Introducción

1.1 Motivación

La intensificación de procesos es un área que ha recibido un gran interés en los últimos años. Ésta consiste en el desarrollo de equipos y/o técnicas innovadoras que permitan optimizar el uso de la energía y disminuir el volumen de los equipos, así como el uso de reactivos y la generación de residuos. Esto con el fin de obtener un producto con la misma o mejor calidad, generar procesos económicamente más viables y con menores efectos ambientales (Stankiewicz y Moulijn, 2000).

En la industria de pinturas y recubrimientos, uno de los aspectos de mayor interés para disminuir los costos de una formulación consiste en minimizar la cantidad de pigmento utilizado. Para este fin, la distribución de tamaño de partículas de pigmento es un parámetro que resulta relevante debido a que éste impacta en el poder cubriente, brillo, tonalidad y propiedades mecánicas de la pintura. Los fabricantes de pigmentos proveen una distribución de tamaño de partículas óptima. Sin embargo, debido a las condiciones de transportación, almacenamiento y al tamaño microscópico de las partículas de pigmento, éstas tienden a formar aglomerados de partículas que se mantienen fuertemente unidos debido a fuerzas electrostáticas tipo Van der Waals (Hansen et al., 1998).

El dióxido de titanio (TiO_2) es el pigmento blanco más utilizado en pinturas, alimentos y cosméticos, está compuesto de partículas de tamaño primario de aproximadamente $0.1 \mu\text{m}$., pero éstas tienden a formar agregados y aglomerados que pueden alcanzar tamaños hasta de $100 \mu\text{m}$. Sin embargo, para que las partículas de TiO_2 generen su mayor capacidad de dispersión de la luz, y se maximice su poder cubriente, deben ser desaglomeradas hasta alcanzar tamaños de partícula entre 0.2 y $0.3 \mu\text{m}$ (Curiel Villasana, 2004; DuPont, 2007). Así que, recuperando el tamaño óptimo de partículas de TiO_2 es posible reducir la cantidad utilizada en un

determinado producto (Patton, 1979) conservando e incluso mejorando su calidad, y además disminuyendo los costos de producción.

En la industria, el proceso con el cual se lleva a cabo la desaglomeración de partículas de pigmento en un medio líquido o vehículo es conocido como “*dispersión*”. Durante este proceso debe maximizarse la inyección de energía localmente con el fin de generar el esfuerzo cortante (τ) que sea capaz de vencer las fuerzas cohesivas que mantienen unidos a los aglomerados. Adicionalmente, debe generarse el bombeo necesario para garantizar que las partículas alcancen la zona de alto corte y simultáneamente sean distribuidas homogéneamente en todo el recipiente (Hockmeyer, 2010; Patton, 1979; Ramírez-Gómez et al., 2015). Una vez que se alcanza la reducción de tamaño de las partículas, éstas deben permanecer suspendidas y alejadas unas de otras (i.e., evitar que ocurra una reaglomeración), también es necesario que el producto adquiera propiedades reológicas adecuadas que faciliten su almacenamiento (evitar la sedimentación) y su aplicación. Por ello, se agregan otros componentes como humectantes, dispersantes, desgasificantes, modificadores reológicos y cargas. Así, durante la dispersión se produce un concentrado de partículas (también llamado “*slurry*” por su traducción del inglés) en el que los sólidos pueden alcanzar una concentración de hasta un 70% en peso de la masa del producto final (Paul et al., 2004) y con viscosidades efectivas en el intervalo de 0.8 a 9 Pa·s (Hockmeyer, 2010). Además, debido al alto contenido de sólidos, la interacción entre los diversos componentes aumenta y el fluido desarrolla propiedades no newtonianas (Foucault et al., 2005; Furling et al., 2001).

Comúnmente los procesos de dispersión se llevan a cabo en tanques agitados equipados con dispositivos conocidos como impulsores de alto corte (IAC). No obstante que estos dispositivos son ampliamente utilizados, la información sobre su desempeño hidrodinámico es relativamente escasa. Comúnmente, el desempeño de cualquier impulsor se determina en función de su consumo de energía y de cómo se utiliza ésta durante el proceso específico de mezclado. La energía es necesaria para cumplir dos funciones principales. La primera para producir el τ , que provoca la deformación y el intermezclado de las diferentes capas de fluido (micromezclado),

con lo que se disminuyen los gradientes locales de temperatura, concentración, densidad, etc. La segunda, es la generación del bombeo (Q) o circulación del fluido (macromezclado) que asegure un mezclado homogéneo y evite la aparición de zonas muertas o estancadas.

Durante su operación, los IAC giran a altas velocidades provocando que en su zona de barrido y en zonas cercanas a su superficie se presente un intenso flujo y gradientes de velocidad (∇v) de gran magnitud (Patton, 1979). Por ello, en éstas regiones también se presentan los valores más altos de τ (Oldshue, 1983; Patton, 1979) y de disipación de energía (ε), (Hockmeyer, 2010; Ramírez-Gómez et al., 2015; Ramírez-Muñoz et al., 2016), cuyas magnitudes también están determinadas por la viscosidad del fluido (η), i.e., $\tau = -\eta \nabla v$ y $\varepsilon \propto \eta (\nabla v)^2$. Así, durante el proceso de dispersión, las partículas de pigmento serán desaglomeradas hasta su último tamaño cuando las partículas ingresen a la región donde τ y ε son elevados (Hockmeyer, 2010).

En los procesos de dispersión a escala industrial pueden presentarse los tres regímenes de flujo, i.e. turbulento en la región cercana al volumen barrido por el impulsor y de transición a turbulento y laminar lejos del impulsor. Esto se debe a que los IAC giran a velocidades periféricas de alrededor de 25 ms^{-1} , y a que los slurries presentan viscosidad efectiva elevada y son de naturaleza pseudoplástica. Mientras que, en la escala de laboratorio, debido a que los dispersores giran a velocidades periféricas relativamente más bajas, la turbulencia prácticamente desaparece (Ramírez-Gómez et al., 2015). En estas condiciones, y con la utilización de técnicas de simulación, la potencia inyectada (P) puede determinarse al integrar la energía mecánica disipada en calor (disipación viscosa) en todo el dominio de fluido. Además, es posible determinar la cantidad de energía (o potencia) que se disipa en zonas específicas del dominio, por ejemplo, en la zona de barrido del impulsor o en regiones cercanas a éste, lo cual es de mucha utilidad al evaluar el desempeño de diferentes IAC a diferentes condiciones de operación.

En la práctica se ha observado que una dispersión óptima se alcanza cuando se genera un vórtice que permite visualizar la superficie superior del impulsor, patrón de flujo conocido como flujo de dona (VMA-Getzmann, 2017). Bajo estas condiciones se tiene el Q suficiente para que el fluido pase cerca de la superficie del impulsor y reciba los valores máximos de esfuerzo cortante (o disipación de energía) necesarios para lograr la desaglomeración de partículas de pigmento (Hockmeyer, 2010; Patton, 1979). Sin embargo, debido a que la zona de intensa agitación de los IAC es muy pequeña, en las zonas alejadas de este se presentara un mezclado deficiente, lo cual puede dar origen a la aparición de zonas muertas o cavernas. Por lo tanto, cuantificar el Q y el tiempo de mezclado generado por un IAC también puede ser un criterio para evaluar su desempeño.

Los diversos componentes de un tanque agitado mecánicamente (tanque-impulsor y en ocasiones otros componentes como deflectores y difusores) provocan que el flujo generado en su interior sea complejo. Por lo que plantear soluciones analíticas que lo describan sólo es factible en casos muy simplificados, que no serían útiles para una situación real. Por ello, inicialmente en el estudio de los fenómenos relacionados con la agitación mecánica se plantearon ecuaciones de diseño basadas en grupos adimensionales y correlaciones empíricas de parámetros globales (García-Cortés y Jáuregui-Haza, 2006; Harnby et al., 1992; Rushton et al., 1950). Estos métodos proporcionan buenos resultados en múltiples aplicaciones, pero no pueden proporcionar información de la hidrodinámica local existente en el reactor y su interacción con los fenómenos de transporte. Posteriormente, con la incorporación de técnicas experimentales como Velocimetría por Láser Doppler (LDV, por sus siglas en inglés), Velocimetría por Imagen de Partícula (PIV, por sus siglas en inglés) y Anemometría de Hilo Caliente se lograron avances importantes en cuanto a la generación de criterios de escalamiento y el entendimiento de los fenómenos de macro y micromezclado. Sin embargo, las dos primeras técnicas requieren del uso de fluidos transparentes (Kelly y Gigas, 2003; Panacek, 1998), por lo que su uso para el estudio en procesos de dispersión reales es muy limitado ya que los fluidos de trabajo distan mucho de ser transparentes. Por otro lado, la última técnica requiere de la implementación de sensores (Adams, 2009), mismos que alteran los patrones

de flujo que se generan. Además, la aplicación de estas técnicas puede tener un costo económico elevado y muchas veces no ofrecen toda la información necesaria y deseable; por ejemplo no es posible obtener información en la zona de barrido del impulsor (Unadkat et al., 2011), lo cual resulta de interés para el caso de IAC.

Una alternativa de bajo costo y de gran versatilidad para estudiar la hidrodinámica generada por los impulsores en tanques agitados es el uso de herramientas numéricas basadas en el uso de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés). Esta técnica hace uso de software especializados y del poder de cálculo de computadoras para simular el movimiento del fluido y los fenómenos de transporte que están asociados (transferencia de calor y masa, reacciones químicas, transporte de sólidos, etc). Esta técnica permite predecir el patrón de flujo de un fluido newtoniano o no-newtoniano en geometrías complejas. Algunos parámetros hidrodinámicos que pueden obtenerse mediante el uso de CFD son: la potencia inyectada, capacidad de bombeo, patrones de flujo, contornos de disipación de energía, contornos de presión, etc. Además, con CFD es posible obtener detalles del flujo en cualquier región del dominio, así, para los IAC, es posible obtener los detalles del flujo generado en su zona de barrido, lo cual como se mencionó anteriormente, no resulta fácil con técnicas experimentales si el fluido de trabajo es opaco.

En los últimos años, CFD se ha utilizado de manera exitosa para el estudio de la hidrodinámica generada por diferentes impulsores en muy variadas condiciones de operación (Coroneo et al., 2011; Dickey y Fasano, 2004; Lamberto et al., 1999; Ramírez-Gómez et al., 2015; Ramírez-Muñoz et al., 2016; Rice et al., 2006). Los resultados numéricos obtenidos mediante CFD pueden ser validados con mediciones experimentales del consumo de potencia y/o, si las condiciones experimentales lo permiten, con patrones de flujo generados mediante PIV o LDV (Kelly y Gigas, 2003; Luan et al., 2014; Rice et al., 2006).

1.2 Justificación

A diferencia de los impulsores convencionales, sobre los que existe una gran cantidad de estudios de la hidrodinámica que producen (Kumar, 2010; Montante et al., 2008; Oldshue, 1983; Paul et al., 2004), la literatura científica de los IAC y en específico, la información sobre su desempeño como son: patrones de flujo que generan, su capacidad de bombeo y la cantidad de energía que pueden inyectar en función del régimen de flujo y de las propiedades reológicas del fluido de proceso es muy escasa (Unadkat et al., 2011). La fuente principal de información son los proveedores de estos dispositivos, la cual comúnmente se basa en el uso de reglas heurísticas (VMA-Getzmann 2017) y en la experiencia de los ingenieros de proceso. Por lo tanto, la intensificación, escalamiento y puesta a punto de los procesos de dispersión en la industria puede consumir gran cantidad de tiempo, recursos materiales y financieros. En este sentido, el presente trabajo surge de la necesidad de aumentar y generar información fundamental útil para evaluar el desempeño hidrodinámico de IAC. Esto con el fin de: 1) realizar una comparación objetiva entre algunas de las opciones más comúnmente utilizadas y disponibles en el mercado, 2) intensificar las condiciones de operación de procesos de dispersión ya establecidos, y 3) diseñar e implementar procesos de dispersión nuevos con datos basados en los principios de la mecánica de fluidos.

En este trabajo se estudia la hidrodinámica generada por tres diferentes IAC de escala laboratorio: tipo Norstone[®], Hockmeyer[®] y Cowles[®]. Éstos son ampliamente utilizados a nivel industrial (Hockmeyer, 2010; Norstone, 2012; VMA-Getzmann, 2017). Se determinan y/o comparan sus respectivos desempeños hidrodinámicos a regímenes de flujo laminar y de transición a turbulento ($Re \leq 263$) y se analizan sus implicaciones sobre los procesos de dispersión. Debido a la importancia que tiene la reología del fluido en los procesos de dispersión, primeramente, el estudio se realiza considerando que el fluido de proceso tiene un comportamiento newtoniano, posteriormente, se incorpora la naturaleza no newtoniana de tipo pseudoplástica o adelgazante.

El estudio se realiza utilizando el software comercial de CFD ANSYS-Fluent[®] 17.1 y los resultados numéricos se validan con mediciones experimentales de consumo de potencia y con datos reportados en la literatura. Además, se compara el desempeño de los impulsores utilizando parámetros hidrodinámicos de disipación de energía viscosa y capacidad de bombeo, los cuales, se relacionan con la eficiencia experimental de reducción de tamaño de aglomerados de partículas de un polvo mineral.

1.3 Hipótesis

Las hipótesis de las que se parte para el presente estudio son las siguientes:

- Diferentes impulsores de alto corte operados a una misma potencia inyectada inducen diferentes valores de disipación viscosa.
- La reología del fluido de proceso (fluido newtoniano y pseudoplástico) puede afectar significativamente el patrón de flujo y la disipación de energía viscosa de impulsores de alto corte que operan a una misma potencia inyectada.
- Es posible correlacionar la eficiencia experimental de dispersión de polvos de impulsores de alto corte con su desempeño hidrodinámico obtenido mediante herramientas de CFD.

1.4 Objetivo general

Determinar la hidrodinámica generada por tres tipos de IAC de interés industrial tipo Norstone[®], Hockmeyer[®] y Cowles[®] en el régimen de flujo laminar y de transición a turbulento en condiciones isotérmicas, y correlacionar su capacidad de disipación de energía con la eficiencia de desaglomeración para procesos de dispersión polvos y/o de pigmentos.

1.4.1 Objetivos Particulares

- Mediante herramientas de CFD usando el software ANSYS Fluent® 17.1, evaluar el desempeño hidrodinámico de tres IAC de interés industrial operados con fluidos newtonianos y pseudoplásticos.
- Validar los resultados numéricos de consumo de potencia con mediciones experimentales usando fluidos newtonianos y pseudoplásticos.
- Determinar y comparar los siguientes parámetros hidrodinámicos inducidos por cada impulsor: consumo de potencia, capacidad de bombeo y disipación de energía viscosa de los IAC estudiados.
- Desarrollar una metodología sistemática que permita correlacionar la hidrodinámica inducida por un IAC con su eficiencia experimental de dispersión.

1.5 Antecedentes

1.5.1 Clasificación de impulsores de alto corte (IAC)

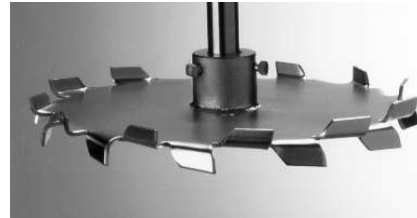
De acuerdo a su geometría, los IAC pueden clasificarse como impulsores abiertos y de anillos. Un tipo de IAC abierto es el Polyblade-Norstone®. Éste es construido sustrayendo la mitad de un número determinado de cilindros en ambas caras de un disco plano, lo cual genera surcos en su superficie, como puede verse en la Figura 1-1 a). De acuerdo al proveedor, este impulsor está fabricado usando polímeros de poliuretano, material más duro que el acero, lo que le permite resistir la abrasión generada cuando es operado en presencia productos altamente abrasivos (e.g. TiO_2 , óxido de hierro (Fe_2O_3), minerales y materiales cerámicos). Además, debido a la simetría de su construcción el impulsor puede voltearse, prolongando aún más su vida útil (Norstone, 2012; Steinmetz, 1993).

Otros IAC de tipo abierto, son el tipo Cowles (CW) y el dientes de sierra (Figura 1-1 b) - d)). Estos se fabrican a partir de una de una hoja metálica en cuyos bordes

se crean cuchillas o dientes. La capacidad de bombeo de este tipo de impulsores aumenta con el incremento del tamaño de los dientes (Hockmeyer, 2010). Su principal desventaja es el desgaste de los dientes debido a la abrasión, lo que provoca que de manera muy frecuente deba reemplazarse.



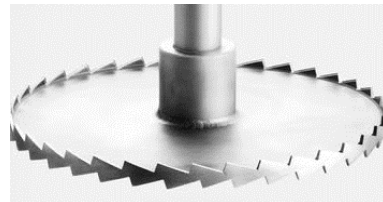
a) Polyblade-Norstone (Norstone, 2012).



b) Cowles (Paul et al., 2004).



c) Cowles (Foucault et al., 2005).



d) Diente de Sierra (Unadkat et al., 2011).

Figura 1-1. Impulsores comerciales de alto corte tipo abierto.

Los impulsores de anillo también son conocidos como impulsores tipo Hockmeyer[®]. Éstos son construidos con cuatro anillos que se distribuyen a ambos lados de un disco central. Una serie de cuchillas permite la unión entre los anillos y el disco. El ensamble permite que el fluido pueda circular por el espacio existente entre los anillos y cuchillas, ver Figura 1-2. De acuerdo al proveedor, cuando el impulsor rota a altas velocidades, en este espacio se generan gradientes de velocidad de gran magnitud y alta presión. Cuando el fluido es expulsado de esta región se encuentra con una región de baja presión y consecuentemente se presenta un efecto venturi lo cual coadyuva en la desaglomeración de partículas (Hockmeyer, 2010).



Figura 1-2. Impulsor de alto corte tipo anillos Hockmeyer® (Hockmeyer, 2010).

1.5.2 Estudios previos sobre IAC

1.5.2.1 Impulsor tipo Norstone

El desempeño hidrodinámico de los impulsores Polyblade-Norstone® es descrito, pero no cuantificado, en sus patentes (Firestone, 2011 y Steinmetz, 1993). Información técnica referida a sus condiciones de operación es mencionada por sus proveedores (Norstone, 2012). Sin embargo, de acuerdo a la revisión realizada de la literatura, los parámetros hidrodinámicos relevantes como N_P , N_Q , patrones de flujo generados y capacidad de disipación de energía de este tipo de impulsores no se han reportado.

1.5.2.2 Impulsores tipo Cowles y dientes de sierra

Además de la información que los proveedores proporcionan sobre el desempeño de los IAC tipo Cowles y dientes de sierra, información escasa puede encontrarse en las referencias mencionadas a continuación. Paul et al., (2004) reportan el número de potencia ($N_P=0.45$) en régimen de flujo turbulento completamente desarrollado para el impulsor tipo Cowles mostrado en la Figura 1-1 b).

Foucault et al., (2005), reportan el mismo valor de N_p , para el impulsor de la Figura 1-1 c), además, presentan la curva de potencia newtoniana desde régimen laminar hasta turbulento, y siguiendo la metodología Metzner y Otto (1957) reportan la curva de potencia no newtoniana.

Xie et al. (2007), utilizando soluciones diluidas del pigmento Aerosil 200V comparan la capacidad de desaglomeración del impulsor dientes de sierra mostrado en la Figura 1-1 d) con la de impulsores convencionales como la turbina Rushton, paletas inclinadas y de alta eficiencia (hydrofoil impeller LE-20). Reportan que, cuando utilizaron un solo impulsor como medio de agitación, el dientes de sierra fue capaz de generar partículas de tamaño de hasta de $0.1 \mu\text{m}$, mientras que cualquier impulsor convencional generó partículas de tamaño superiores a $30 \mu\text{m}$. Cuando se utilizó el dientes de sierra en combinación con cualquiera de los convencionales (i.e. un aporte adicional de energía) la eficiencia de dispersión no cambió. De acuerdo a los autores, estos resultados se deben a que la máxima disipación turbulenta de energía ocurre en el volumen que barre el impulsor dientes de sierra, y aunque los impulsores convencionales aporten energía adicional al fluido, la disipación de energía turbulenta local inducida por el impulsor dientes de sierra no cambia. Unadkat et al. (2011), utilizando PIV, investigaron el patrón de flujo y la disipación turbulenta de energía producida por el mismo impulsor dientes de sierra. Sus resultados sugieren que los valores de disipación de energía turbulenta en la zona cercana al impulsor son similares a los reportados para impulsores convencionales como la turbina Rushton y paletas inclinadas. Sin embargo, ellos señalaron que si se investigara el volumen que barre el impulsor, podrían encontrarse valores más grandes de disipación para el IAC, pero con la técnica de PIV no es posible investigar esa zona.

Además de los parámetros mencionados anteriormente para estos dos impulsores, otros aspectos de utilidad práctica, como sus capacidades de bombeo (N_Q), los patrones de flujo que generan y sus capacidades de disipación de energía en régimen laminar, y de ésta como función de la reología del fluido de proceso no están reportados en la literatura.

1.5.2.3 Impulsor tipo Hockmeyer

La información técnica y las condiciones de operación del IAC Hockmeyer[®] son descritas en la patente desarrollada por Klein y Hockmeyer (1963), en Hockmeyer (2010) y en la dirección electrónica del proveedor (Hockmeyer, 2017). En estas fuentes se describen las ventajas que tiene este impulsor para los procesos de desaglomeración.

Ramírez-Gómez et al. (2015) compararon el desempeño hidrodinámico de dos impulsores tipo Hockmeyer[®] de 2 y 4 anillos en régimen de flujo laminar y de transición ($50 \leq Re \leq 75$) utilizando un fluido newtoniano. Además de los N_P y N_Q de estos impulsores, también reportan patrones de flujo, contornos de disipación viscosa de energía, así como los valores promediados de este parámetro en el volumen barrido por los impulsores y en la zona de barrido de sus cuchillas. Los autores encontraron que la zona barrida por las cuchillas puede ser considerada como la región de máxima disipación viscosa de energía. Por lo tanto, señalaron (sin evidencia experimental) que el valor máximo de la disipación en esta región determinaría el tamaño más pequeño de partículas durante los procesos de desaglomeración.

En la literatura no existen estudios que incluyan el desempeño hidrodinámico de estos impulsores operando con fluidos no newtonianos.

Capítulo 2. Marco teórico

2.1 Comportamiento reológico de los fluidos

El esfuerzo cortante (τ), la rapidez de deformación ($\dot{\gamma}$) y la viscosidad (η) de un fluido están relacionados de acuerdo a la ecuación (2.1)

$$\tau = \eta \dot{\gamma} \quad (2.1)$$

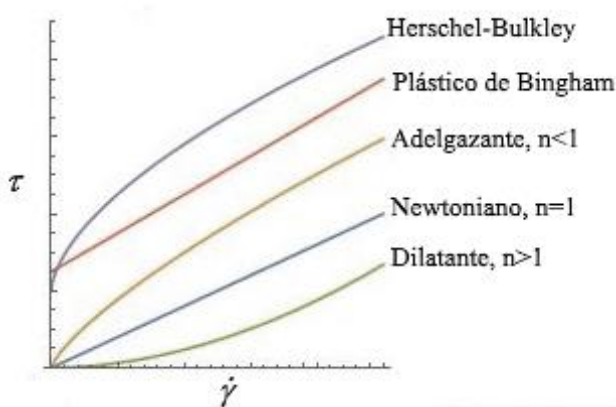


Figura 2-1. Comportamiento reológico de los fluidos.

En la Figura 2-1 se presentan las curvas reológicas que resultan al graficar τ como una función de $\dot{\gamma}$ para algunos fluidos comúnmente utilizados. La pendiente de estas curvas corresponde a la viscosidad del fluido. Si la gráfica resultante es una línea recta que pasa por el origen, entonces el fluido es de tipo newtoniano cuya viscosidad es la pendiente de esa recta. Si el fluido tiene un comportamiento diferente, entonces se trata de un fluido no newtoniano.

Si la pendiente de la curva crece al aumentar $\dot{\gamma}$ se dice que el fluido es de tipo dilatante, si disminuye entonces el fluido es de tipo adelgazante o pseudoplástico. El comportamiento de éstos dos tipos de fluidos se describe por

el modelo de Ostwald-de Waele, también llamado ley de potencia, ecuación (2.2)

$$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.2)$$

donde k es el índice de consistencia y n es el índice de flujo. El tipo de fluido queda determinado por valor de n , la cual también es una medida de la desviación del comportamiento newtoniano.

- Si $n < 1$, el fluido es no newtoniano de tipo pseudoplástico.
- Si $n > 1$, el fluido es no newtoniano de tipo dilatante.
- Si $n = 1$, se recupera la ecuación que describe a un fluido newtoniano.

Utilizando la ley de potencia que define la viscosidad, ecuación (2.2), entonces la ecuación (2.1) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\tau = k\dot{\gamma}^n \quad (2.3)$$

Si la curva reológica del fluido es una línea recta cuyo origen está desplazado en el eje de las ordenadas en τ_0 , entonces se dice que el fluido es un plástico de Bingham y su comportamiento puede ser descrito por la ecuación (2.4). Este comportamiento implica que el fluido permanecerá rígido cuando el esfuerzo cortante es $< \tau_0$, y se comporta como un fluido newtoniano por encima de este valor.

$$\tau = \tau_0 + \eta\dot{\gamma} \quad (2.4)$$

Finalmente, los fluidos Herschel-Bulkley presentan un efecto combinado de plástico de Bingham y ley de potencia y son caracterizados de acuerdo a la ecuación (2.5)

$$\tau = \tau_0 + k\dot{\gamma}^n \quad (2.5)$$

Para fluidos que cumplen con la ley de potencia, a partir de su curva reológica es relativamente sencillo determinar los parámetros n y k . Si se linealiza la ecuación (2.2) se obtiene una línea recta, cuya pendiente es $(n-1)$ y su ordenada al origen es $\log k$.

$$\log \eta = \log k + (n-1) \log \dot{\gamma} \quad (2.6)$$

2.2 Desaglomeración de pigmentos para la industria de recubrimientos

2.2.1 Composición de una pintura y la importancia del tamaño de partículas de pigmento

En la Figura 2-2 se muestra la composición de una película de pintura. Esta puede ser descrita como un medio ópticamente homogéneo y transparente de polímero (o resina) al que se agregan cantidades específicas de partículas microscópicas (pigmentos y cargas) que le dan a la película final diferentes propiedades de color, brillo y cubriente.

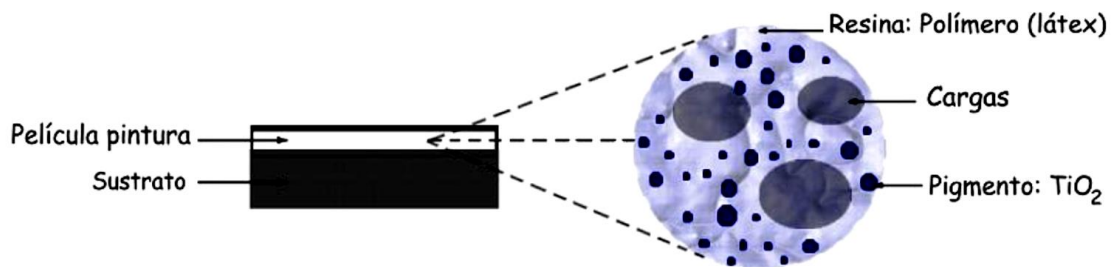


Figura 2-2. Componentes de una película de recubrimiento. Tomada de (Curiel Villasana, 2004).

Para pinturas blancas el pigmento más importante es el TiO_2 . Éste tiene una gran capacidad de dispersar la luz, (i.e. un índice de refracción alto) y un

gran poder cubriente. El diámetro óptimo de las partículas de TiO_2 (D_{op}) que maximiza la dispersión de la luz y el poder cubriente puede calcularse con la fórmula de Weber, ecuación (2.7), la cual, relaciona la longitud de onda de la luz incidente (λ) y los índices de refracción del pigmento (n_p) y de la resina que lo rodea (n_r), (AzoMateriales y Malvern Analytical, 2005).

$$D_{op} = \frac{2\lambda}{\pi(n_p - n_r)} \quad (2.7)$$

La tabla de la parte superior derecha de la Figura 2-3 fue generada con la fórmula de Weber para TiO_2 en su forma de rutilo, $n_p=2.76$, y considerando que la resina presenta un índice de refracción típico, $n_r=1.5$. De esa tabla se puede ver que el TiO_2 , en su forma de rutilo, tendrá la máxima capacidad de dispersión si tiene un tamaño de partícula entre 0.2 y 0.3 μm . Las curvas de la Figura 2-3 muestran el poder de dispersión del TiO_2 como función del tamaño de partícula. Si el diámetro de partícula es cercano a 0.2 μm la suma de la luz dispersada a todas las longitudes de onda se maximiza. Cuando el tamaño de partícula está entre 0.25 y 3 μm la dispersión de la luz azul decrece rápidamente, pero la dispersión de la luz rojo y verde aún es muy alta.

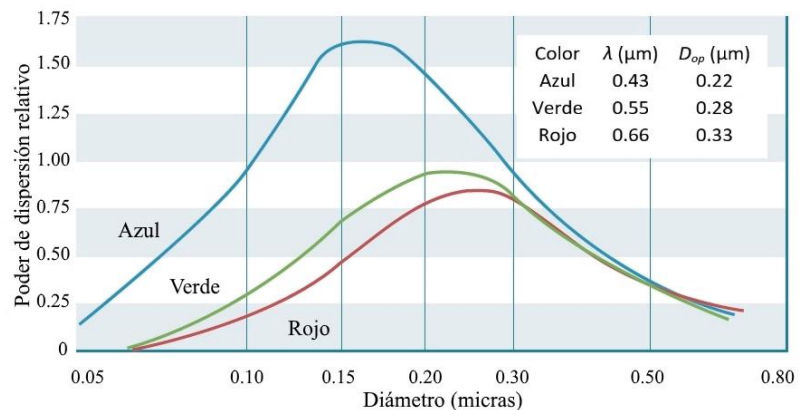


Figura 2-3. Poder de dispersión del dióxido de titanio como una función de su tamaño de partícula. Adaptado de (DuPont, 2007).

El tamaño de partícula también controla el poder cubriente u opacidad de del TiO_2 . Las partículas con tamaños entre 0.2 a 0.3 μm producirán el más alto grado de opacidad, ver Figura 2-4. Si se utiliza el pigmento con tamaños de partícula más grandes (i.e. aglomeradas) se puede alcanzar un mismo nivel de opacidad, sin embargo, será necesario utilizar una concentración mayor.

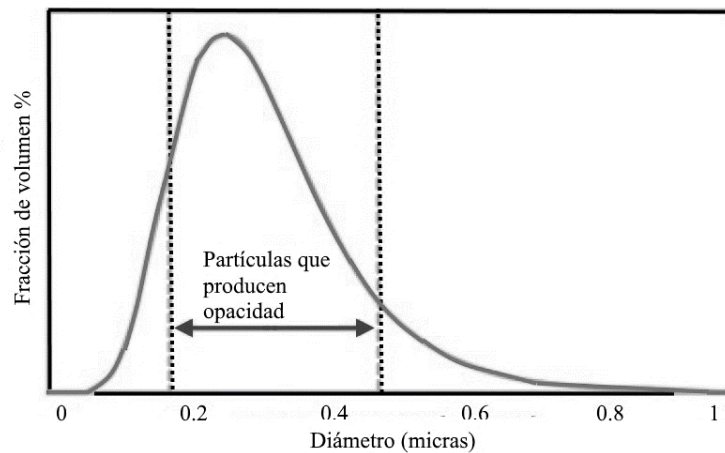


Figura 2-4. Relación entre el tamaño de partícula y la opacidad para una distribución típica de tamaños de partícula de TiO_2 . Adaptado de (Kippax, 2005).

Otros componentes importantes de las pinturas son las cargas y los aditivos. Las cargas son partículas inorgánicas que poseen una capacidad de dispersar la luz muy semejante a la resina, es decir, tienen índices de refracción muy similares, y por lo tanto son transparentes. Comparadas con el TiO_2 , son mucho más baratas, por lo que se utilizan para aumentar el rendimiento de las pinturas y de esta manera disminuir los costos. Su uso también es importante para mejorar propiedades como la viscosidad, permeabilidad y resistencia a la abrasión de la pintura. Además, el tamaño de las partículas de las cargas afecta el brillo de las pinturas. Para producir una película brillante se requiere que todas las partículas sean menores a 1.0 μm , tamaños más grandes a altas concentraciones producen superficies rugosas dando una apariencia mate. Los aditivos más utilizados son: tensoactivos (para estabilizar cargas y pigmentos en la mezcla), secantes, bactericidas, fungicidas y espesantes o modificadores reológicos. Todos se agregan en cantidades muy pequeñas (<1%) y son

transparentes por lo que no afectan las propiedades ópticas de la pintura (Curiel Villasana, 2004).

2.2.2 Estructura de los aglomerados de pigmentos

Como se ha descrito previamente, para que las partículas de TiO_2 tengan su máxima eficiencia de dispersión de la luz, deben tener un diámetro entre 0.2 y 0.3 μm . Sin embargo, desde su producción, y debido a las condiciones de almacenamiento y transportación, las partículas de TiO_2 tienden a formar aglomerados. Estas estructuras están formadas por agregados que a su vez se forman a partir de partículas de tamaño primario. En la Figura 2-5 se muestra un esquema de estas estructuras. Debido a que los aglomerados se conforman de agregados unidos mediante fuerzas atractivas tipo Van der Waals, es posible separarlos mediante la aplicación de un esfuerzo cortante, el cual, se puede generar mediante equipos de agitación mecánica como los IAC. La separación de los agregados hasta partículas de tamaño primario no es posible por estos medios, debido a que éstos están unidos fuertemente por enlaces químicos cuya fuerza de unión es muy superior a la inducida por los medios mecánicos.

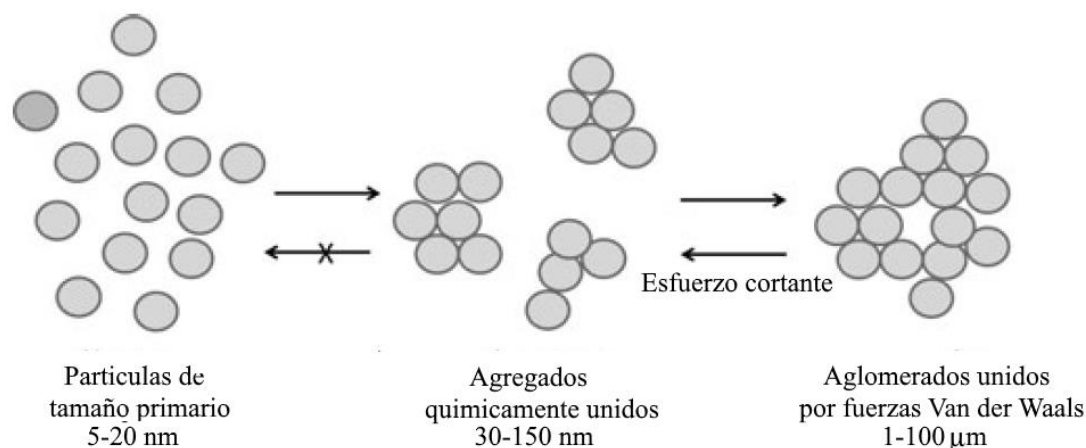


Figura 2-5. Estructura de los aglomerados de un TiO_2 . Modificada de (Egerton y Tooley, 2014).

2.2.3 El Proceso de dispersión de pigmentos

La desaglomeración sólo es una de las etapas involucradas en los procesos de dispersión. El proceso de dispersión completo involucra tres etapas: 1) humectación, 2) desaglomeración y 3) estabilización. Generalmente, estos procesos ocurren repetidamente y de manera simultánea, una vez que los tamaños de partícula de los pigmentos disminuyen, i.e. nueva superficie es expuesta. A continuación, se describirán brevemente cada una de las etapas y fenómenos involucrados (Patton, 1979):

1) Humectación. En ésta, se busca que el líquido desplace al aire contenidos en la superficie y en los poros de los aglomerados. La fuerza motriz para que el polímero penetre en los poros del aglomerado es la tensión superficial entre la superficie del pigmento y polímero (Duivenvoorde, 2000).

2) Desaglomeración. En esta etapa se separan los agregados que conforman los aglomerados. Debe suministrarse suficiente energía mecánica para vencer las fuerzas cohesivas que mantienen unidos a los agregados. Toda la reducción de tamaño ocurre por el esfuerzo de corte transmitido a través de las capas de fluido que rodea el aglomerado, por el choque entre los aglomerados de partículas o por el choque de éstos con una superficie dura que se desplaza a alta velocidad (e.g., la superficie del impulsor). Cuando un aglomerado es sometido a altos esfuerzos de corte, estos rotan y la reducción de partículas ocurre debido a un mecanismo de erosión (DuPont, 2007).

3) Estabilización. La disminución del tamaño de partícula aumenta el área superficial total expuesta del pigmento, consecuentemente, las interacciones partícula-partícula también aumentan y una reaglomeración puede ocurrir. Por ello, es necesario aplicar recubrimientos superficiales al pigmento para controlar la química de su superficie o cambiar las propiedades de la fase móvil.

Las propiedades reológicas del producto final también son importantes para definir cómo se comportará durante su almacenamiento y aplicación. Para garantizar que no se produzca sedimentación durante el almacenamiento se requiere que la viscosidad de la pintura sea alta. Sin embargo, durante su aplicación, se requiere que la pintura tenga la fluidez adecuada que permita la formación de una capa uniforme, entonces, la viscosidad debe modificarse de alta a baja o moderada en función del corte. Este comportamiento puede alcanzarse si la pintura tiene propiedades pseudoplásticas o adelgazantes (Kippax, 2005).

En la industria de recubrimientos las tres etapas previamente descritas se llevan a cabo simultáneamente en el interior de tanques cilíndricos equipados con IAC. En la bibliografía, se menciona que el impulsor tipo Cowles es el más utilizado en este tipo de operaciones (Abrahão, 2013; Paul et al., 2004). Sin embargo, también es conocido que industrialmente los impulsores tipo Hockmeyer[®] y Norstone[®] son ampliamente utilizados para estos procesos.

Los componentes principales de un tanque agitado y los conceptos que comúnmente se utilizan para caracterizar a los impulsores serán discutidos a continuación.

2.3 Tanques agitados mecánicamente

La agitación mecánica de fluidos es una de las operaciones más utilizadas en una gran variedad de industrias, e.g., petrolera, química, farmacéutica, papelera, minera, etc. En general la agitación mecánica se emplea para 1) mantener la distribución homogénea de los materiales involucrados, 2) favorecer el flujo de calor ya sea por remoción o por absorción y 3) aumentar el área de transferencia de masa y calor entre las distintas fases involucradas en la agitación. Algunos de los procesos que pueden llevarse a cabo son: suspensión de partículas sólidas, mezclado de líquidos miscibles, dispersión de un líquido

inmiscible con otro para formar una emulsión, dispersión de gases o sólidos en líquidos, reacciones químicas, etc. Cada proceso presenta un conjunto de condiciones hidrodinámicas que lo favorecen. Sin embargo, el conjunto de condiciones óptimas de un proceso no necesariamente es aplicable a otro. Por ello cada proceso debe analizarse de manera detallada para entender cómo el conjunto de condiciones reológicas y geométricas del sistema influyen en el desempeño de la agitación y en la eficiencia del proceso.

En la Figura 2-6 se muestra un esquema con las dimensiones y componentes más importantes de un tanque agitado mecánicamente. El tanque comúnmente es cilíndrico y de fondo curvo. El sistema de agitación tiene varios componentes: uno o más impulsores, una flecha, un sello de la flecha, un motor-reductor para la variación del par y un motor. Las dimensiones que se muestran en la figura son:

- Diámetro del impulsor (D)
- Altura del impulsor (W)
- Distancia desde el fondo del tanque hasta el centro del impulsor (C)
- Diámetro del tanque (T)
- Altura del líquido (Z)

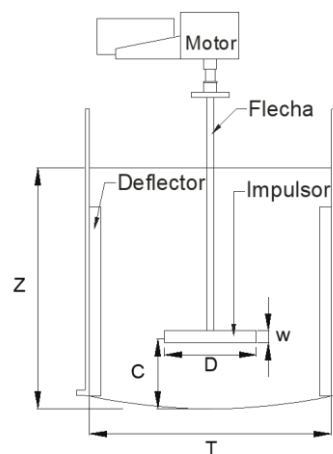


Figura 2-6. Componentes de un tanque agitado mecánicamente.

En el régimen de flujo turbulento, la presencia o ausencia de deflectores tiene un gran efecto sobre la agitación. Si no hay deflectores el fluido tiende a moverse en una trayectoria circular y la velocidad radial resulta pequeña. Esto provoca que el mezclado axial sea deficiente y ocurra la formación de un vórtice. Al instalar deflectores se evita que el fluido se mueva de forma circular y se inhibe la formación del vórtice, así, el flujo axial aumenta y se mejora la tasa de mezclado.

Si el fluido es altamente viscoso, la presencia de deflectores puede provocar la aparición de zonas muertas. Por otro lado, si el proceso involucra la incorporación de polvos o partículas, éstas pueden flotar y en estos casos la formación del vórtice es deseable ya que éste provocará que las partículas sean arrastradas hacia la zona del impulsor donde se tiene una agitación intensa y de esta manera puedan ser dispersados dentro del seno del fluido (Ciofalo et al., 1996; Hockmeyer, 2010).

2.4 Clasificación y caracterización de impulsores

Los impulsores se pueden clasificar de acuerdo al patrón de flujo que generan. Los impulsores de tipo axial provocan que el fluido se mueva de manera paralela al eje del impulsor. En los de tipo radial el fluido es expulsado de manera perpendicular al eje hacia las paredes del tanque. En la Figura 2-7 a) y b) se presentan los patrones de flujo generados por impulsores de tipo axial y radial, respectivamente. No obstante, esta clasificación, así como los patrones de flujo que generan, deben considerarse como ilustrativo, ya que dependiendo de las dimensiones del impulsor, de su posición en el tanque y la viscosidad del fluido, se pueden encontrar ambos patrones de flujo o dominar uno u otro (Dickey y Fasano, 2004; Paul et al., 2004).

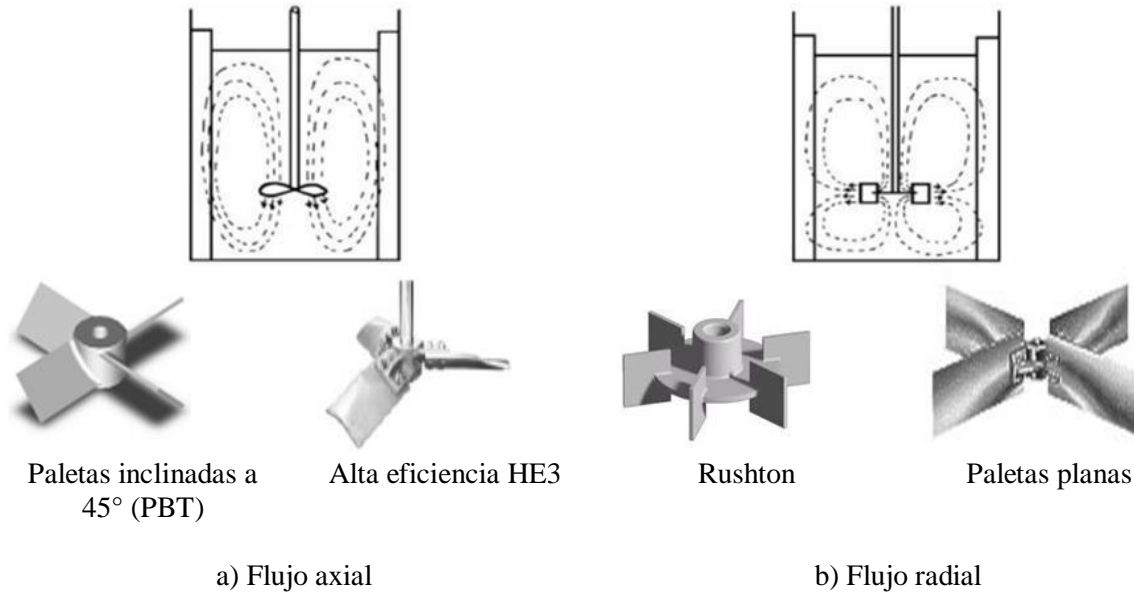


Figura 2-7. Patrones de flujo y algunos impulsores que lo generan (Harnby et al., 1992).

Otra clasificación toma en cuenta el nivel de cizallamiento o esfuerzo de corte que producen (Paul et al., 2004). En la Figura 2-8 se ilustra el esfuerzo cortante y el bombeo que pueden proporcionar los diferentes impulsores. En la parte inferior derecha se encuentran impulsores convencionales de flujo axial, caracterizados por generar alto bombeo y niveles de esfuerzo cortante bajos. Al centro de la figura se pueden encontrar los impulsores de flujo radial que proporcionan un mayor nivel de esfuerzo importante y bombeo intermedios. En el otro extremo, en la parte superior izquierda se encuentran los impulsores capaces de generar los más altos valores de esfuerzo cortante pero muy poco bombeo, i.e. IAC (Oldshue, 1983).

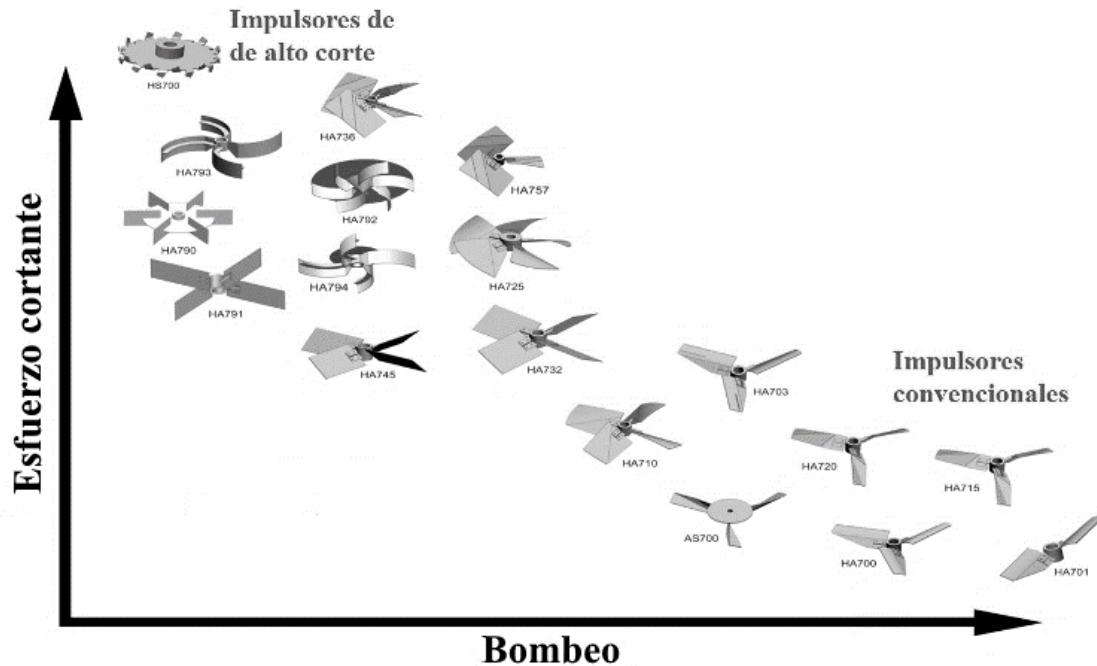


Figura 2-8. Comparación del bombeo y esfuerzo cortante generado por impulsores (Mixtec-Impellers, 2012) .

2.4.1 Potencia inyectada en fluidos newtonianos

La potencia inyectada por un impulsor es uno de los parámetros más importantes para los procesos con agitación mecánica. Ésta representa la energía que es disipada en el fluido en un intervalo de tiempo y por tanto será la energía que debe suministrarse para mantener el movimiento del fluido. Los costos asociados con el suministro de esta energía contribuyen de manera muy importante con el costo global de los procesos (Ascanio et al., 2004). Por ello, es deseable que el objetivo del proceso de agitación se alcance de manera eficiente y con el consumo mínimo de energía. El dimensionamiento y escalamiento de procesos son otros aspectos del diseño de procesos en los que la potencia inyectada también resulta de mucha utilidad (Paul et al., 2004).

Para establecer las variables de las que depende la potencia inyectada se parte de las siguientes suposiciones: un fluido newtoniano de viscosidad η y

densidad ρ , que llena un tanque cilíndrico de diámetro T hasta una altura Z . El fluido se agita con un impulsor de diámetro D , altura W , a una velocidad de rotación N y posicionado a una altura C respecto del fondo del tanque, ver Figura 2-6. Entonces, las variables de las que depende el consumo de potencia (P) quedan establecidas en la ecuación (2.8) (García-Cortés y Jáuregui-Haza, 2006).

$$P = f(\rho, \eta, g, N, D, T, W, Z, \text{otras dimensiones}) \quad (2.8)$$

Debido a la complejidad de la geometría de los componentes del sistema de agitación (recipiente, impulsor, deflectores, difusores, serpentines, etc.) la solución analítica de esta ecuación es muy compleja. Sin embargo, utilizando análisis dimensional, la ecuación (2.8) queda expresada en números adimensionales, como se muestra en la ecuación (2.9) (Harnby et al., 1992),

$$\frac{P}{\rho N^3 D^5} = f\left(\frac{\rho N D^2}{\eta}, \frac{N^2 D}{\text{gravedad } (g)}, \frac{T}{D}, \frac{W}{D}, \frac{Z}{D}, \text{etc}\right) \quad (2.9)$$

dónde pueden identificarse los siguientes números adimensionales:

$$\text{Número de Potencia, } N_p = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (2.10)$$

$$\text{Número de Reynolds, } Re = \frac{\rho N D^2}{\eta} \quad (2.11)$$

$$\text{Número de Froude, } Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (2.12)$$

El Re representa la relación entre las fuerzas inerciales y las viscosas, mientras que el Fr relaciona las fuerzas inerciales con la fuerza de gravedad. La dependencia del N_p respecto del Fr , sólo es importante cuando existe la

formación del vórtice y puede analizarse en los siguientes casos (Nagata, 1975; Rushton et al., 1950):

- Si existen deflectores en el tanque y $Re > 300$, se inhibe la formación del vórtice, i.e. el N_p ya no es función del Fr .
- Si no hay deflectores, y el $Re > 300$, se formará un vórtice de un tamaño importante, i.e. el N_p será función del Fr .
- Si no hay deflectores y el $Re < 300$, se formará un vórtice muy pequeño por lo que el efecto del Fr sobre el N_p puede ser despreciable.

Si en el sistema de agitación se mantiene similitud geométrica y no existe dependencia del Fr entonces el N_p sólo es función del Re (Harnby et al., 1992), ecuación (2.13).

$$\frac{P}{\rho N^3 D^5} = f\left(\frac{\rho N D^2}{\eta}\right) \quad (2.13)$$

La gráfica en la que se muestra la dependencia del N_p respecto del Re se conoce como “curva de potencia”. En la Figura 2-9 se muestra una curva típica.

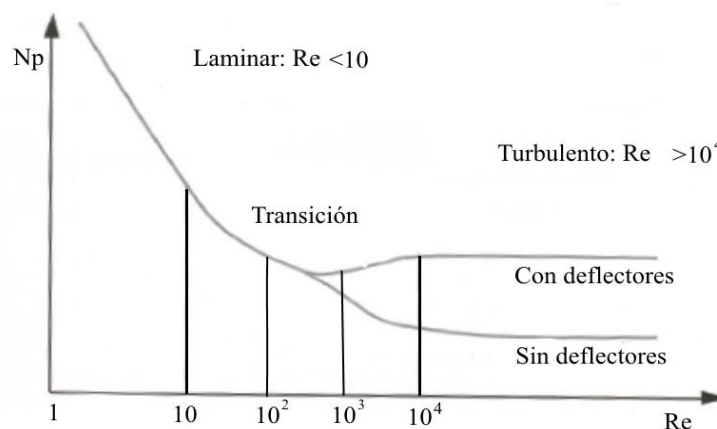


Figura 2-9. Curva de potencia (N_p vs Re) para un tanque cilíndrico con o sin deflectores (adaptado de McCabe et al., (1991)).

De la Figura 2-9 puede destacarse lo siguiente (Paul et al., 2004):

- El flujo laminar se encuentra a $Re < 10$ y aquí el N_p es inversamente proporcional al Re . i.e. $N_p = K_p / Re$, donde K_p es una característica del impulsor. La presencia o ausencia de deflectores no afecta al N_p .
- El régimen turbulento se establece a partir de $Re > 10^4$ y el N_p sólo depende de la presencia o ausencia de deflectores, pero en uno u otro caso el N_p es constante.
- El régimen de transición se encuentra en el intervalo $10 < Re < 10^4$. La presencia de deflectores sólo es importante a $Re > 300$.

2.4.2 Potencia inyectada en fluidos no newtonianos

Si bien existe una gran cantidad de información sobre los parámetros hidrodinámicos de diversos impulsores, normalmente ésta se refiere a fluidos newtonianos. Sin embargo, en las aplicaciones industriales la mayoría de los fluidos presentan un comportamiento no newtoniano de tipo pseudoplástico o adelgazante. Por lo que la metodología del consumo de potencia para fluidos newtonianos debe modificarse (Paul et al., 2004).

Durante la agitación en tanques agitados mecánicamente, la tasa de corte cambia respecto de la posición, cerca del impulsor se presentan los gradientes de velocidad de mayor magnitud, mientras que cerca de la pared se encontraran los más bajos. Para fluidos pseudoplásticos, de acuerdo a la ecuación (2.2), la viscosidad será baja cerca del impulsor y elevada cerca de la pared.

Para fluidos pseudoplásticos, Metzner y Otto (1957) desarrollaron una metodología que relaciona la potencia inyectada con un número de Reynolds aparente (Re_a), que a su vez se expresa en términos de una viscosidad aparente η_a .

$$Re_a = \frac{\rho ND^2}{\eta_a} \quad (2.14)$$

Este método se resume de la siguiente manera: dos tanques son agitados por el mismo impulsor en el régimen laminar y entre ellos existe similitud geométrica. Uno de ellos contiene un fluido newtoniano y el otro uno no newtoniano de tipo pseudoplástico. Cuando ambos tanques son agitados a una misma velocidad (N) registrarán un consumo de potencia diferente. Pero, debido a que la viscosidad del fluido newtoniano puede modificarse y medirse fácilmente, ésta puede ajustarse hasta que la potencia inyectada sea la misma que la registrada por el fluido no newtoniano. Entonces, como todas las variables son las mismas, puede considerarse que la viscosidad del fluido newtoniano es equivalente a la del no newtoniano, definiendo esta última como la viscosidad aparente o efectiva, η_a .

Metzner y Otto (1957) también propusieron que existe una región en la cercanía del impulsor que presenta una tasa de corte promedio, $\dot{\gamma}_{prom}$, que es proporcional a N , ecuación (2.15), y cuya constante de proporcionalidad, K_S , es la constante de Metzner y Otto. Esta constante es una característica de cada impulsor.

$$\dot{\gamma}_{prom} = K_S N \quad (2.15)$$

Conociendo η_a , y los parámetros k y n que ajustan la curva reología del fluido pseudoplástico a la ley de potencia, ecuación (2.2), entonces, $\dot{\gamma}_{prom}$, puede estimarse mediante la ecuación (2.16),

$$\dot{\gamma}_{prom} = \left(\frac{\eta_a}{k} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (2.16)$$

Si se grafican los valores de $\dot{\gamma}_{prom}$ obtenidos a diferentes valores de N , resultaría una línea recta cuya pendiente es K_S .

Una vez determinado K_S , la ecuación (2.2) de la ley de potencia, puede combinarse con la ecuación (2.15) para obtener la siguiente expresión:

$$\eta_a = k(K_S N)^{n-1} \quad (2.17)$$

y entonces Re_a , puede expresarse en términos K_S y los parámetros n y k de la ley de potencia.

$$Re_a = \frac{\rho N^{2-n} D^2}{k K_S^{n-1}} \quad (2.18)$$

La utilidad de la metodología de Metzner y Otto es tal que, con simples parámetros, se puede determinar la potencia inyectada en fluidos adelgazantes. Una vez conocida K_S se determina $\dot{\gamma}_{prom}$, después Re_a , con este el N_p y finalmente la potencia inyectada puede ser calculada.

2.4.3 Bombeo y el esfuerzo cortante generado por el impulsor

Una parte de la potencia inyectada por el impulsor es destinada a la generación de bombeo, Q , que produce la circulación interna del fluido, otra parte se utiliza para producir el esfuerzo cortante o cizallamiento (que también es expresado como una altura teórica, H).

Q es proporcional a la velocidad de agitación y al diámetro del impulsor, ecuación (2.19). H depende de la velocidad de agitación y del diámetro del impulsor, ecuación (2.20).

$$Q \propto ND^3 \quad (2.19)$$

$$H \propto \rho N^2 D^2 \quad (2.20)$$

Entonces, la potencia consumida puede obtenerse multiplicando Q y H , ecuación (2.21)

$$P = N_p (\rho N^2 D^2) (ND^3) \quad (2.21)$$

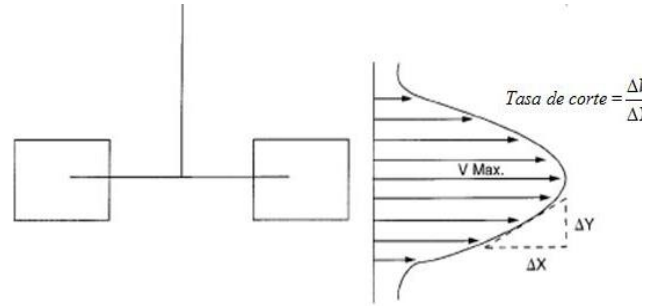
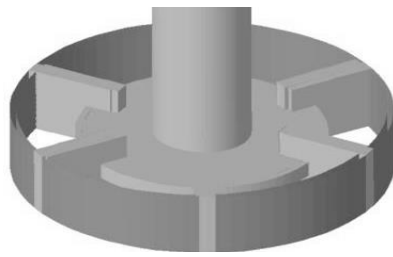
en dónde el factor de proporcionalidad es el número de potencia, N_p . Considerando una potencia dada, de la ecuación (2.21) puede deducirse que, si el diámetro del impulsor se incrementa, una mayor proporción de la potencia se dirige a la generación de bombeo, y en menor proporción se destinará para la generación de corte. También resulta que, si un impulsor de diámetro grande rota a velocidades bajas, producirá altos valores de bombeo y poco corte, en contraste, si un impulsor pequeño gira a altas velocidades producirá poco bombeo y un alto corte (Paul et al., 2004).

Para establecer la igualdad en la ecuación (2.19) se define el número adimensional conocido como el número de bombeo, N_Q , el cual es característico de cada impulsor.

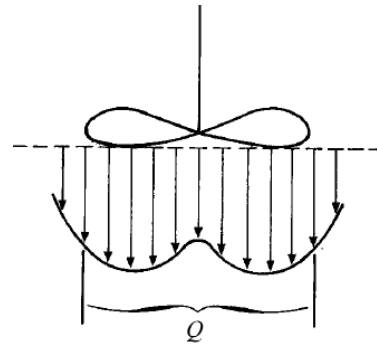
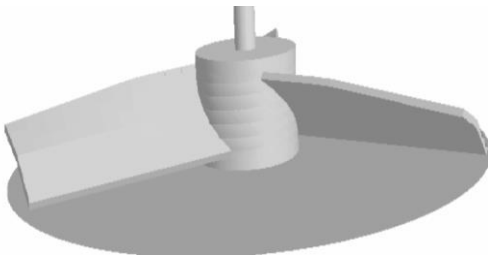
$$Q = N_Q ND^3 \quad (2.22)$$

La capacidad de bombeo del impulsor puede determinarse mediante el flujo normal al plano de descarga del impulsor, ya sea radial o normal (Nienow, 1997). En el caso de impulsores de tipo radial, Figura 2-10 a), el valor de Q se determina calculando el flujo que sale proyectado a través de un cilindro de diámetro D y altura W iguales a los del impulsor, ecuación (2.23). En el caso de impulsores de tipo axial deberá calcularse el flujo que atraviesa el área que barre el impulsor, Figura 2-10 b).

$$Q = 2\pi r \int_w v_r dy \quad (2.23)$$



a) Bombeo radial



b) Bombeo axial

Figura 2-10. Superficies donde se calcula Q y perfil de velocidad en la cercanía de la paleta del impulsor.

El perfil de flujo radial de la Figura 2-10 a), permite visualizar el origen del esfuerzo cortante, τ . El cual, simplemente será el producto de la viscosidad del fluido y el gradiente de velocidades provocado por el impulsor (Oldshue, 1983).

Tradicionalmente, las relaciones N_Q/N_P o N_P/N_Q son utilizadas para comparar la eficiencia de diferentes impulsores (Nagata, 1975; Ramírez-Gómez et al., 2015).

2.4.4 Estimación de la potencia inyectada y disipación de energía

Experimentalmente, la potencia, P , puede determinarse a través del par mecánico (M_T), medido en la flecha del impulsor y la velocidad de agitación (N), ecuación (2.24). Numéricamente, P también se puede estimar integrando la disipación turbulenta de energía ($\rho\varepsilon_t$) y la disipación viscosa ($\varepsilon = -\boldsymbol{\tau} : \nabla\mathbf{v}$), ecuación (2.25).

$$P = 2\pi N M_T \quad (2.24)$$

$$P = \int (\rho\varepsilon_t - (\boldsymbol{\tau} : \nabla\mathbf{v})) dV \quad (2.25)$$

Para un fluido newtoniano incompresible $\boldsymbol{\tau}$ está dado por:

$$\boldsymbol{\tau} = -\eta(\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T) \quad (2.26)$$

La disipación viscosa puede determinarse utilizando la función de disipación, Φ_v , ecuación (2.27)

$$\varepsilon = -(\boldsymbol{\tau} : \nabla\mathbf{v}) = \eta\Phi_v(x, y, z) \quad (2.27)$$

Para un fluido newtoniano, en coordenadas cartesianas, Φ_v queda expresado de acuerdo a la ecuación (2.28).

$$\Phi_v = \left\{ \begin{array}{l} 2 \left[\left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \left[\frac{\partial v_y}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial y} \right]^2 + \left[\frac{\partial v_z}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial z} \right]^2 \\ + \left[\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right]^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \end{array} \right\} \quad (2.28)$$

Como se aprecia en la ecuación (2.28), Φ_v es función de los gradientes de velocidad (Bird et al., 2007). Como ha sido mencionado antes, la disipación viscosa y turbulenta, y más específicamente los valores de disipación máxima resultan de interés debido a que en los procesos de dispersión ésta determina el tamaño más pequeño que de las partículas (Ramírez-Muñoz et al., 2016; Xie et al., 2007).

2.5 Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

Para describir el movimiento de un fluido es necesario resolver las ecuaciones de conservación que lo describen. Estas ecuaciones constituyen un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales parciales no lineales cuya solución analítica es posible sólo en casos muy simplificados y su solución mediante técnicas numéricas no es sencilla. Para las aplicaciones de importancia práctica pueden aplicarse herramientas de CFD que apoyadas con un software especializado permiten obtener soluciones numéricas aproximadas. Para la implementación de simulaciones con CFD se requiere de la ejecución de las etapas que a continuación se describen.

2.5.1.1 Pre-procesamiento

En esta etapa, mediante software de dibujo por computadora, se genera la representación del dominio que interesa estudiar. Posteriormente, en otro software especial, se realiza mallado, en la que el dominio es dividido en un número finito volúmenes, también llamadas celdas. Posteriormente, en cada una de éstas se resolverán y almacenarán las variables que definen el flujo del fluido (presión, los componentes de la velocidad, densidad, etc).

La generación de la malla es una de las etapas más importantes en la implementación de una simulación con CFD. La calidad y el tamaño de la malla

tienen un impacto significativo sobre la velocidad, exactitud, convergencia y tiempo de cómputo requerido para el cálculo de la solución. Una malla de poca calidad generará resultados erróneos. Para determinar la cantidad óptima de elementos de la malla que se usarán en las simulaciones es necesario realizar un análisis de independencia de malla; con ello se garantiza que los resultados sean confiables y que el tiempo de cálculo empleado no sea desperdiciado.

Además, si se conocen las regiones del dominio en donde el flujo pueda presentar los más altos gradientes de velocidad o de presión, es recomendable generar una malla que presente una resolución adecuada en estas regiones, i.e. un número de celdas suficientes para capturar los fenómenos de interés.

2.5.1.2 Simulaciones

En esta etapa se especifican las propiedades del fluido (densidad y viscosidad), se establecen los modelos que describirán la física del proceso (flujo laminar o turbulento, flujo multifásico, flujo con reacción, etc). Por último, sobre cada cara del dominio se definen las condiciones de frontera (paredes, entradas, salidas, superficies libres, etc.). Si el dominio presenta un eje de rotación simétrico se puede establecer una condición de frontera de simetría, lo cual es muy útil cuando se trabaja con sistemas que rotan (e.g., impulsores). Una vez que se establecen todos estos parámetros ya es posible correr la simulación.

2.5.1.3 Post-procesamiento

En esta etapa se obtiene la visualización de la solución. Los resultados para los campos de velocidad, presión y cualquier otra variable de interés pueden ser obtenidos cualitativamente como contornos. También es posible obtener resultados cuantitativos para parámetros como par, disipación de energía, flujos en determinadas regiones, etc.

2.5.2 Ecuaciones de conservación que describen el flujo

El movimiento de un fluido incompresible dentro de un tanque agitado en condiciones isotérmicas puede describirse por las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento.

La ecuación de continuidad, ecuación (2.29), es un enunciado de conservación de la masa y para un fluido incompresible se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i) = 0 \quad (2.29)$$

La ecuación (2.30) corresponde a la conservación de cantidad de movimiento para un fluido homogéneo

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\eta \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho F_i \quad (2.30)$$

dónde $v_{i,j,k}$ corresponde al componente del vector velocidad del fluido cuya dirección, en un plano cartesiano, está determinada por $i=x$, $j=y$, $k=z$. La ecuación (2.30) es conocida como la ecuación de Navier-Stokes.

En la ecuación (2.30) los dos términos del lado izquierdo representan la aceleración local y convectiva de una partícula de fluido, respectivamente. A la derecha, los dos primeros términos representan las fuerzas de superficie que se ejercen sobre el sistema, el gradiente de presión y el tensor de esfuerzos viscosos, respectivamente. Finalmente, F_i , representa las fuerzas externas volumétricas que se ejercen sobre el sistema, como las fuerzas de gravedad, centrífuga, electromagnetismos, etc.

Incorporando condiciones iniciales y de frontera y resolviendo estas ecuaciones se encuentra la velocidad del fluido y la presión en cualquier punto del dominio estudiado.

En las ecuaciones (2.29) y (2.30) se pueden identificar las siguientes incógnitas: 6 componentes del tensor de esfuerzos, 3 componentes de la velocidad y la presión. Se trata entonces de un sistema abierto, que tiene más incógnitas que ecuaciones. Para cerrar el sistema se introducen las leyes reológicas que relacionan el tensor de esfuerzos, ($\boldsymbol{\tau}$), con el tensor de velocidades de deformación ($\dot{\boldsymbol{\gamma}}$). Para un fluido newtoniano basta utilizar la ecuación (2.1) con η =constante. Para fluidos no newtonianos de tipo adelgazantes se utilizaría la ecuación (2.2), que puede definir a una viscosidad aparente, η_a . Si $n=1$ la ecuación (2.2) describe a un fluido newtoniano.

Entonces, si se considera estado estacionario, la ecuación (2.30) de cantidad de movimiento puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\eta_a \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho F_i \quad (2.31)$$

Si el flujo es laminar, con fluido newtoniano o adelgazante, entonces el sistema de ecuaciones a resolver está cerrado.

2.5.3 El método de volúmenes finitos

Para resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales que describen el movimiento, se requiere realizar una discretización, i.e. cambiar la velocidad del fluido de un dominio continuo a discontinuo. Varios métodos han sido aplicados para resolver numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes: diferencias finitas, elementos finitos y métodos de volúmenes finitos. El software utilizado en este trabajo para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes

emplea el método de volúmenes finitos, por lo que en a continuación éste será revisado.

Para ilustrar la discretización con el método de volúmenes finitos se utilizará una ecuación de transporte generalizada de una variable arbitraria ϕ y el volumen de control que se muestra en la Figura 2-11. La ecuación escalar tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S_\phi \quad (2.32)$$

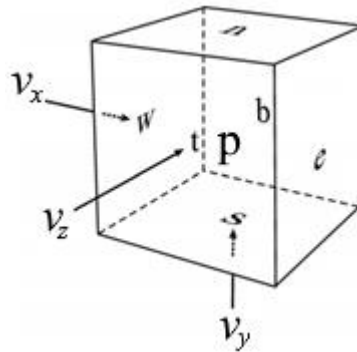


Figura 2-11. Volumen de control.

En la ecuación (2.32) el parámetro Γ se usa para representar el coeficiente de difusión del escalar ϕ . Por ejemplo, si ϕ es uno de los componentes de velocidad, Γ puede representar la viscosidad. Todas las fuentes están incluidas en el término S_ϕ , nuevamente si ϕ es uno de los componentes de velocidad, S_ϕ podría representar los gradientes de presión, la fuerza de gravedad o cualquier otra fuerza adicional que esté presente. El volumen de control tiene su centro en el nodo, P, y es aquí donde todas las variables del problema (presión y los tres componentes de la velocidad) serán calculadas y almacenadas. Como veremos, cada miembro de la ecuación diferencial (2.32) se integra sobre el 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 P con los volúmenes de control vecinos.

La primera etapa de la discretización de la ecuación de transporte (2.32) es la integración de cada término sobre el volumen de control como se expresa en la ecuación (2.33).

$$\int_{v.c} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{v.c} \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i \phi) dV = \int_{v.c} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) dV + \int_{v.c} S_\phi dV \quad (2.33)$$

El teorema de Gauss permite convertir cada integral de volumen de la ecuación (2.33) a una integral de superficie. Si consideramos el caso estacionario entonces resulta la ecuación (2.34):

$$\int_{s.c} (\rho \phi v_i) \cdot \vec{n} dA = \int_{s.c} (\Gamma \nabla \phi) \cdot \vec{n} dA + \int_{v.c} S_\phi dV_C \quad (2.34)$$

dónde $S.C$ se refiere a las superficies que rodean al volumen de control (V.C.). \vec{n} , es el vector unitario normal a la superficie dA .

En una malla estructurada, el miembro del lado izquierdo de la ecuación (2.34), término convectivo, puede expresarse en términos del flux de ϕ que atraviesa cada una de las caras del volumen de control de la Figura 2-11, ecuación (2.35)

$$\int_{s.c} (\rho v_i \phi) \cdot \vec{n} dA = \rho \left[(Av_x \phi_e - Av_x \phi_w) + (Av_y \phi_n - Av_y \phi_s) + (Av_z \phi_b - Av_z \phi_t) \right] \quad (2.35)$$

dónde las caras del volumen de control son expresadas como: este (e), oeste (w), norte (n), sur (s), fondo (b) y superior (t).

Siguiendo una metodología similar, el primer miembro del lado derecho de la ecuación (2.34), término difusivo, queda expresado como:

$$\left(A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_e - A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_w \right) + \left(A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dy} \right)_n - A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dy} \right)_s \right) + \left(A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_b - A\Gamma \left(\frac{d\phi}{dz} \right)_t \right) \quad (2.36)$$

Finalmente, el término fuente, puede expresarse como:

$$\int_{v.c} S_{\phi} dV \approx \bar{S}_{\phi} V \quad (2.37)$$

dónde \bar{S}_{ϕ} es el valor promedio de S_{ϕ} en el volumen de control.

De esta manera, la ecuación de transporte (2.32), se transforma a una suma de la ecuaciones, (2.35), (2.36) y (2.37), que pueden resolverse algebraicamente (Andersson et al., 2012).

En general, la ecuación (2.34) toma la forma de la ecuación (2.38)

$$\sum_f^{N_f} \rho_f v_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_f} \Gamma_{\phi} \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_{\phi} V \quad (2.38)$$

dónde:

N_f = número de caras que envuelven al volumen de control.

$\rho_f v_f \cdot \vec{A}_f$ = flujo másico que atraviesa la cara f

\vec{A}_f = área de la cara f

ϕ_f = valor de ϕ que atraviesa la cara f

$\nabla \phi_f$ = gradiente de ϕ en la cara f

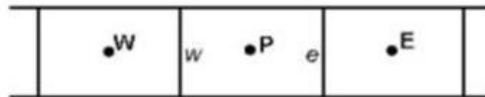
V = volumen de la celda

La ecuación (2.38) se plantea para cada una de las celdas que forman el dominio, siendo esta aplicable a problema con geometrías en 2D y 3D con dominios compuestos por elementos rectangulares (malladas estructuradas) o poliedros de formas irregulares (malladas no estructuradas) (Ansys, 2013).

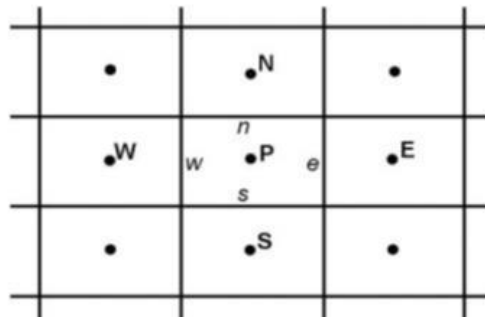
Para encontrar el valor de ϕ_P , se emplea un esquema numérico que a continuación será brevemente discutido. Para simplificar se utilizará un caso en

la dirección x , sin término fuente y en estado estacionario. Considerando el dominio 1D de la Figura 2-12 a), en dónde los límites de integración de P van de w a e , la ecuación (2.33) toma la siguiente forma algebraica:

$$[(\rho v_x \phi)_e - (\rho v_x \phi)_w] = \left[\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w \right] \quad (2.39)$$



a)



b)

Figura 2-12. a) Dominio en 1D y (b) Dominio 2D.

Una aproximación de ϕ_e y ϕ_w , los valores de ϕ en las fronteras, se puede plantear en términos de los valores de ϕ en el centro de las celdas vecinas, ϕ_E y ϕ_P .

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (2.40)$$

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (2.41)$$

De manera similar, los gradientes pueden aproximarse por:

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W} \quad (2.42)$$

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (2.43)$$

Entonces, sustituyendo (2.42) y (2.43) en (2.39) se obtiene:

$$\left[\left(\rho v_x \frac{\phi_P + \phi_E}{2}\right) - \left(\rho v_x \frac{\phi_W + \phi_P}{2}\right)\right] = \left[\left(\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P}\right) - \left(\Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{x_P - x_W}\right)\right] \quad (2.44)$$

Los términos de la ecuación (2.44) pueden reordenarse para obtener:

$$\left(\frac{\Gamma}{x_E - x_P} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W}\right)\phi_P + \left(\frac{\rho v_x}{2} - \frac{\Gamma}{x_E - x_P}\right)\phi_E + \left(-\frac{\rho v_x}{2} - \frac{\Gamma}{x_P - x_E}\right)\phi_W = 0 \quad (2.45)$$

Si se definen los siguientes términos:

$$a_E = \left(-\frac{\rho v_x}{2} + \frac{\Gamma}{x_E - x_P}\right) \quad (2.46)$$

$$a_W = \left(\frac{\rho v_x}{2} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W}\right) \quad (2.47)$$

$$a_P = \frac{\Gamma}{x_E - x_P} + \frac{\Gamma}{x_P - x_W} \quad (2.48)$$

de (2.45) resulta la ecuación (2.49):

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (2.49)$$

que puede resolverse mediante iteraciones. Para obtener el valor de ϕ_1 , es necesario declarar una celda ϕ_0 , que estrictamente no existe en el dominio. Además, al *inicializar* la simulación deben suponerse valores para cada ϕ_i . Cuando se obtiene el valor para ϕ_1 , el siguiente objetivo será ϕ_2 . Para el cálculo de ϕ_2 se utilizará el valor obtenido de ϕ_1 y un valor supuesto para ϕ_3 . El proceso se repite hasta que todos los ϕ_i sean calculados. El método descrito es conocido como algoritmo Gauss-Siedel. Este método presenta el siguiente inconveniente: puesto que inicialmente ϕ_1 fue calculado suponiendo ϕ_0 y ϕ_2 , y posteriormente ϕ_2 fue calculado, entonces la ecuación original para ϕ_1 ya no es válida. Entonces el proceso debe repetirse muchas veces hasta que la variación de ϕ_i sea menor que la de un criterio de *convergencia* establecido (Andersson et al., 2012).

Para el dominio 2D de la Figura 2-12 b) la ecuación que resulta es:

$$a_P\phi_P = a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_E\phi_E + a_W\phi_W \quad (2.50)$$

Y en 3D:

$$a_P\phi_P = a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_B\phi_B + a_T\phi_T \quad (2.51)$$

2.5.4 Esquemas de interpolación espacial

Una vez que todos los valores de las variables son almacenados en los centros de las celdas, los valores de las caras pueden ser expresados en términos de éstos. Si se plantea la ecuación (2.32) en una sola dirección, en estado estacionario y despreciando el término fuente se obtiene:

$$\frac{d}{dx}(\rho v_x \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (2.52)$$

La ecuación (2.52) puede resolverse de manera exacta definiendo un dominio lineal que se extiende de $x=0$ hasta $x=L$ y que corresponden a la localización de dos nodos de celdas adyacentes, con $\phi = \phi_0$ en $x=0$ y $\phi = \phi_L$ en $x=L$, de tal forma que la solución para cualquier punto intermedio, incluyendo las caras, tiene la forma:

$$\phi = \phi_0 + (\phi_L - \phi_0) \frac{e^{\left[Pe\left(\frac{x}{L}\right)-1\right]}}{e^{(Pe-1)}} \quad (2.53)$$

en donde Pe es el número de Péclet que representa la relación del efecto de la convección y la difusión del término ϕ .

$$Pe = \frac{\rho v_x L}{\Gamma} \quad (2.54)$$

Dependiendo de los valores que tome Pe , pueden usarse diferentes esquemas que a continuación se resumen (Marshall y Bakker, 2001):

2.5.4.1 Esquema lineal

Este esquema fue utilizado cuando se obtuvieron las ecuaciones (2.40) y (2.41) que permitieron definir los coeficiente a_e y a_w definidos por la ecuación (2.46) y (2.47). Si el término de la velocidad tiene una gran magnitud (negativa o positiva) estos coeficientes serán negativos y surgirán problemas de convergencia. Esto también se verán reflejado en que $Pe \gg 0$. Esta inestabilidad se debe a que el valor de la velocidad en celdas vecinas es muy diferente, por lo que el que el valor de ϕ en las caras no puede ser aproximado como un simple promedio. Entonces este esquema solo será estable si la magnitud de la convección es comparable con el de la difusión. Un criterio aceptado para esto es que $|Pe| < 2$.

2.5.4.2 Esquema upwind (hacia atrás)

Se puede utilizar cuando domina el término convectivo, $Pe \gg 1$. En un esquema de primer orden se supone que los valores de la solución para los nodos y las caras son los mismo (e.g. $\phi_w = \phi_W$). En un esquema de segundo orden el valor de ϕ en la cara será aproximado mediante una serie de Taylor. Este último esquema tendrá una mayor precisión, pero requiere un mayor esfuerzo de cálculo.

2.5.4.3 Esquema por ley de potencia

Este esquema puede emplearse cuando $0 \leq Pe \leq 10$ y para aproximar el valor de ϕ en la cara se utiliza la ecuación (2.53)

2.5.4.4 Esquema QUICK

El esquema QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) se basa en un promedio ponderado de las interpolaciones de segundo orden y diferencias centrales. Puede utilizarse en un rango amplio del Pe . En este esquema se usan los valores de ϕ en las dos celdas vecinas. Se utiliza una función cuadrática que se ajuste a los tres nodos. Suele tener mayor precisión y estabilidad en mallas estructuradas alineadas con la dirección del flujo. Sin embargo, los softwares actuales permiten el uso del esquema QUICK para mallas no estructuradas o híbridas; en tales casos se usará el habitual esquema de discretización de segundo orden Upwind en las superficies no hexaédricas (o no cuadriláteras, en 2D).

2.5.5 El modelo de volumen de fluido

Los flujos que involucran más de dos fases, líquidas, sólidas o gaseosas son referidos como flujos multifásicos. Se pueden distinguir dos clases principales, flujo estratificado y disperso, Figura 2-13.

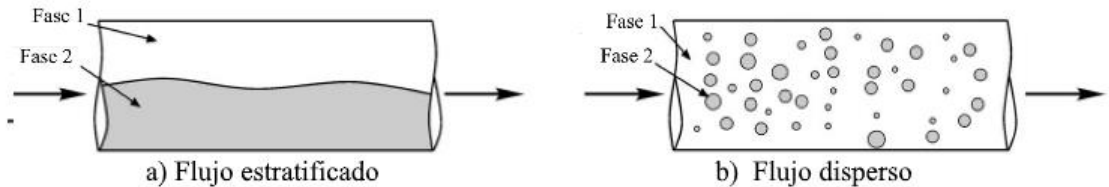


Figura 2-13. Flujo multifásico.

En el flujo disperso, una de las fases está presente en forma de gotas o partículas por lo que existen diversas interfases entre la fase dispersa y la continua. En el flujo estratificado las fases están prácticamente separadas y la interacción entre las fases es mínima.

La fracción de volumen, α_i , determina el volumen ocupado por cualquiera de las fases en un volumen concreto del dominio. La fracción de volumen de la fase dispersa puede expresarse como:

$$\alpha_q = \frac{\sum_i^{N_q} V^i}{V} \quad (2.55)$$

dónde N_q es la cantidad de gotas o burbujas y V^i es el volumen ocupado por cada una de ellas. Una expresión similar puede plantearse para la fase continua, α_p , de tal manera que la suma de las fracciones igual a la unidad, ecuación (2.56)

$$\alpha_q + \alpha_p = 1 \quad (2.56)$$

Dependiendo de la importancia de la interacción entre las fases se emplean diferentes modelos para describir el flujo. Si $\alpha_q < 10\%$ (i.e. soluciones diluidas) la interacción entre las partículas es despreciable y entonces el flujo estará dominado por la fase continua. En estas situaciones se recomienda utilizar un modelo *Euleriano-Lagrangiano* en el que el flujo de la fase continua se resuelve mediante las ecuaciones de Navier-Stokes y la fase dispersa se modela siguiendo la trayectoria de cada partícula o burbuja.

Si el valor de α_d no es despreciable, entonces ambas fases son tratadas como continuas y las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelven para cada fase. En estos casos se emplea el modelo *Euleriano-Euleriano*. Además, en este modelo se considera que la fase dispersa es miscible en la continua. Una aplicación típica de este modelo son los lechos fluidizados.

El modelo de *volumen de fluido* (VOF) puede describir la interacción de dos o más fluidos inmiscibles, i.e. flujos estratificados, flujos en superficie libre y en el movimiento de burbujas de gran tamaño. Otra aplicación típica es el seguimiento de la interfase aire-líquido en tanques agitados y de esta manera predecir la formación del vórtice generado. En este modelo se resuelve una sola ecuación de momento aplicable a toda la mezcla, por lo que el campo de velocidad es compartido por las fases. Otras variables y propiedades también son compartidos por las fases siendo representados por promediados ponderados en el volumen.

Para el seguimiento de la deformación de la interfase, se utiliza una ecuación de continuidad para la fracción de volumen de una de las fases. Para la q -ésima fase esta ecuación tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q q_q) + \nabla \cdot (\alpha_q q_q v_q) = S_q + \sum_{p=1}^n \dot{m}_{pq} \quad (2.57)$$

dónde S_q es una fuente externa de masa a la fase q y \dot{m}_{pq} es la tasa de transferencia de masa de la fase p a la q . Por lo general el término S_q es cero, pero puede especificarse como una constante o como una fuente de masa definida por el usuario para cada fase. La fracción volumen para la otra fase puede determinarse de acuerdo a la restricción de la ecuación (2.56).

Si las fases están representadas por los subíndices 1 y 2, y si la fracción volumen de la segunda fase se rastrea, propiedades como la densidad y la viscosidad estarán dadas por:

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \quad (2.58)$$

$$\eta = \alpha_2 \eta_2 + (1 - \alpha_2) \eta_1 \quad (2.59)$$

2.5.6 El enfoque de Múltiples Marcos de Referencia

Una aproximación para la simulación de flujos alrededor de partes móviles, como es el caso de los tanques agitados mecánicamente, consiste en simular un marco de referencia rotativo (RRF, por sus siglas en inglés) que encierre al impulsor mediante una superficie de revolución. A la par, se define una región fuera de ésta, definida como un Marco de Referencia Estacionario (SRF, por sus siglas en inglés), ver Figura 2-14. De esta manera, se tienen marcos de referencia múltiple (MRF, por su sigla en inglés,) cuyo objetivo principal es convertir el movimiento de la parte móvil que está en estado transitorio a un problema más sencillo en estado estacionario, siempre y cuando la velocidad de rotación sea constante (ANSYS Inc., 2001; Marshall y Bakker, 2001). El enfoque MRF también puede emplearse con tanques agitados por más de un impulsor. Con esta estrategia de simulación, ambas regiones (RRF y SRF) están acopladas mediante una superficie común, la interfase, por lo que la transferencia de información es constante durante la simulación.

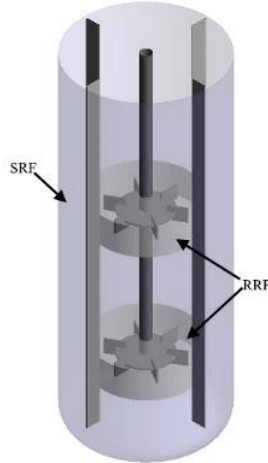


Figura 2-14. Esquema para el modelado de tanques agitados mediante MRF.

Por lo descrito anteriormente, en la zona del RRF, el campo de flujo se calcula resolviendo las ecuaciones de momentum y de continuidad en un marco de referencia rotativo y en el resto del tanque, el flujo se calcula resolviendo las ecuaciones anteriores en un marco de referencia estacionario.

2.5.7 Mallado

Como ha sido mencionado, para resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales que describen el movimiento del fluido es necesario dividir el dominio en un número finito de celdas o volúmenes de control, operación comúnmente denominada como mallado. En la Figura 2-15 se muestra un plano del dominio de dos impulsores. Con ésta se ilustran los dos tipos de mallado. En una malla estructurada: cada punto de la malla está inequívocamente identificado, en coordenadas cartesianas, por los índices i, j, k . Los elementos geométricos que forman la malla son cuadriláteros en 2-D y hexaedros en 3-D. 2) En una malla no estructura: las celdas y los nodos de la malla no tienen un orden particular, es decir, las celdas o nodos cercanos, no pueden identificarse directamente por sus índices. Los elementos de la malla, en este caso, son una mezcla de cuadriláteros y triángulos en 2-D y tetraedros y hexaedros en 3-D, ver Figura 2-16.

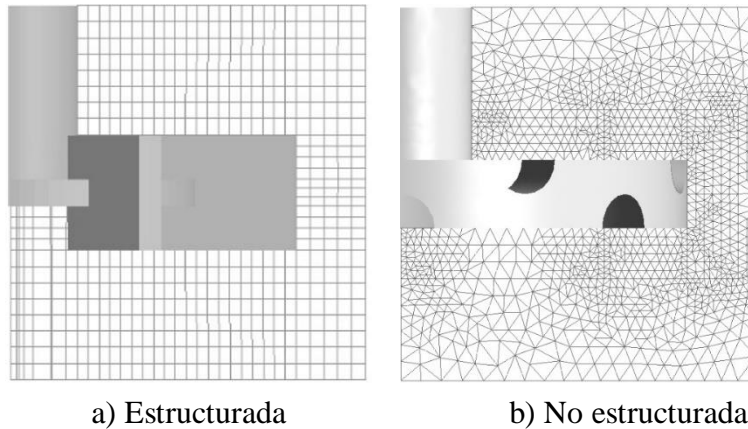


Figura 2-15. Mallas.

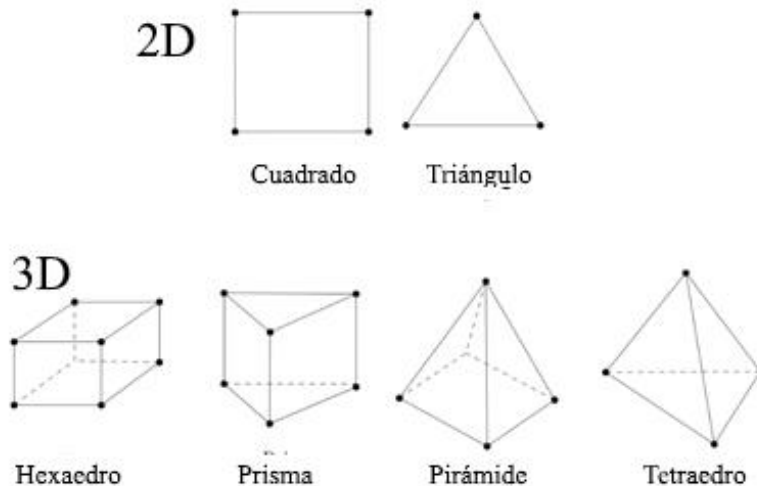


Figura 2-16. Elementos utilizados para la generación de las mallas.

La principal ventaja de los mallados estructurados reside en la ordenación de los elementos, de esta forma, el acceso a las celdas vecinas resulta muy rápido y fácil, sin más que sumar o restar un número al valor del índice correspondiente. Las mallas estructuradas pueden representarse en un sistema cartesiano o curvilíneo. En el primer caso, las líneas que configuran las celdas son siempre paralelas al sistema de ejes coordenados. Por el contrario, en los

sistemas curvilíneos, el sistema de coordenadas se deforma para adaptarse a la geometría del objeto de estudio.

Las mallas no estructuradas ofrecen gran flexibilidad en el tratamiento de geometrías complejas, los triángulos (2-D) o los tetraedros (3-D), se adaptan fácilmente, independientemente de la complejidad del dominio. El tiempo utilizado por el diseñador para generar un mallado no estructurado es mucho menor que el que requiere para uno estructurado. Sin embargo, las mallas no estructuradas consumen más memoria computacional que la requerida por el mallado estructurado.

La generación de la malla es una de las etapas más importantes y laboriosas en la implementación de una simulación con CFD. Debe tenerse especial cuidado para que la calidad de la malla sea adecuada ya ésta afecta de manera significativa en la velocidad, exactitud y convergencia del cálculo. Si la malla es de mala calidad, además de presentarse problemas de convergencia, el fenómeno estudiado podría describirse erróneamente.

Un parámetro de calidad de la malla utilizado comúnmente es la oblicuidad o *skewness*, el cual, se define de la siguiente manera:

$$skewness = \left(\frac{\theta_{max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{min}}{\theta_e} \right) \quad (2.60)$$

dónde θ_{max} y θ_{min} corresponden al ángulo más grande y más pequeño, que se forman entre los lados de una celda. θ_e toma el valor de 90° para elementos cuadriláteros o 60° si son triangulares (Ansys, 2013). En la Tabla 2-1 se resume la calidad de la malla en función de la oblicuidad.

Tabla 2-1. Calidad de la malla con base en la oblicuidad.

| Excelente | Muy buena | Buena | Aceptable | Mala | Inaceptable |
|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|
| 0-0.25 | 0.25-0.50 | 0.50-0.80 | 0.80-0.94 | 0.95-0.97 | 0.98-1.00 |

En regiones de la geometría donde el flujo puede presentar altos gradientes de velocidad o de presión es recomendable que la malla tenga una alta densidad de elementos. Así, el flujo en dichas regiones será descrito de una mejor manera. En el resto de las regiones la malla puede ser menos densa. La cantidad óptima de celdas que forman una malla se determina a partir de un análisis de independencia de malla. De este análisis, por un lado, se asegura que la malla contenga la cantidad de celdas que describan de manera adecuada el flujo, y, por otro lado, se evita utilizar mallas con un excesivo número de elementos, que no mejoran los resultados de manera significativa, pero si consumen recursos de cómputo de manera drástica e innecesaria.

Para el análisis de independencia de malla se generan mallas en las que se incrementa el número de elementos. Con cada una de ellas se ejecuta la simulación y se obtienen parámetros hidrodinámicos de interés. La malla seleccionada será aquella que contenga la cantidad de celdas con la que los valores de los parámetros ya no cambian de manera significativa. (Ramírez-Gómez et al., 2015; Ramírez-Muñoz et al., 2016). Finalmente, los datos numéricos obtenidos de la simulación se validan con datos experimentales o con datos reportados en la literatura.

Capítulo 3. Metodología

3.1 Impulsores de alto corte estudiados

En las Figura 3-1 a Figura 3-3 se muestran los detalles de los IAC que fueron estudiados en este trabajo. El impulsor tipo Norstone ($W=0.006$ m) es construido sustrayendo la mitad de 7 cilindros en ambas caras de un disco plano, lo cual genera surcos en su superficie. En el presente estudio se evaluó el efecto del tamaño de los surcos sobre su desempeño hidrodinámico, por ello, uno de estos impulsores presenta surcos de diámetro $a=3$ mm y el otro de $a=1.5$ mm (i.e. NR-3.0 y NR-1.5). Además, se comparan con el desempeño de un disco plano (NR-0) del mismo diámetro y altura.

El IAC tipo Hockmeyer (HM) consta de un disco central, en la parte superior e inferior de éste se unen 6 cuchillas y a éstas se une un anillo, tiene una altura $W=0.0148$ m.

El tipo Cowles (CW) ($W=0.00115$ m) se construye a partir de un dodecaedro al que se le han substraído 12 parábolas en la periferia, a partir del material que permanece se crean sus cuchillas (6 cuchillas por arriba y 6 por debajo del disco central), doblando alternadamente hacia arriba y hacia abajo los tetraedros resultantes.

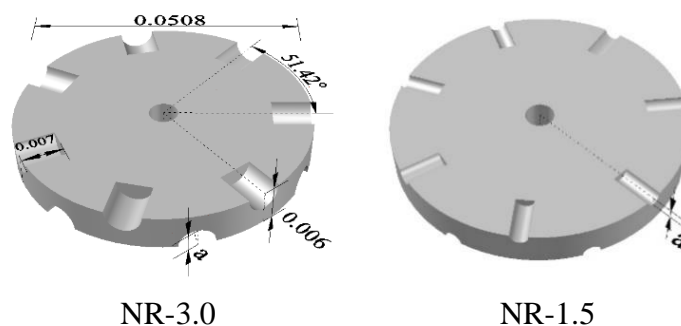
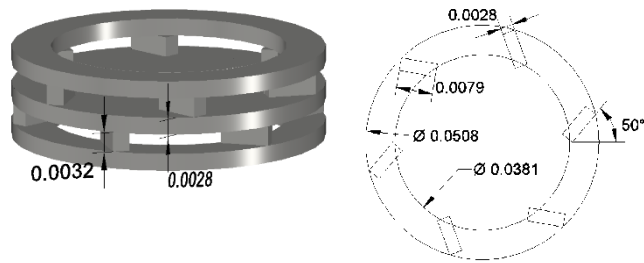


Figura 3-1. Impulsores tipo Norstone.



Vista isométrica

Vista superior

Figura 3-2. Impulsor tipo Hockmeyer.

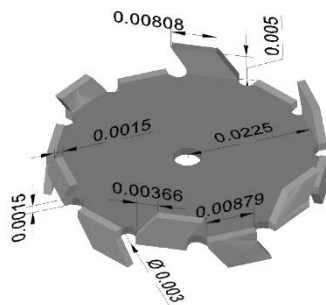


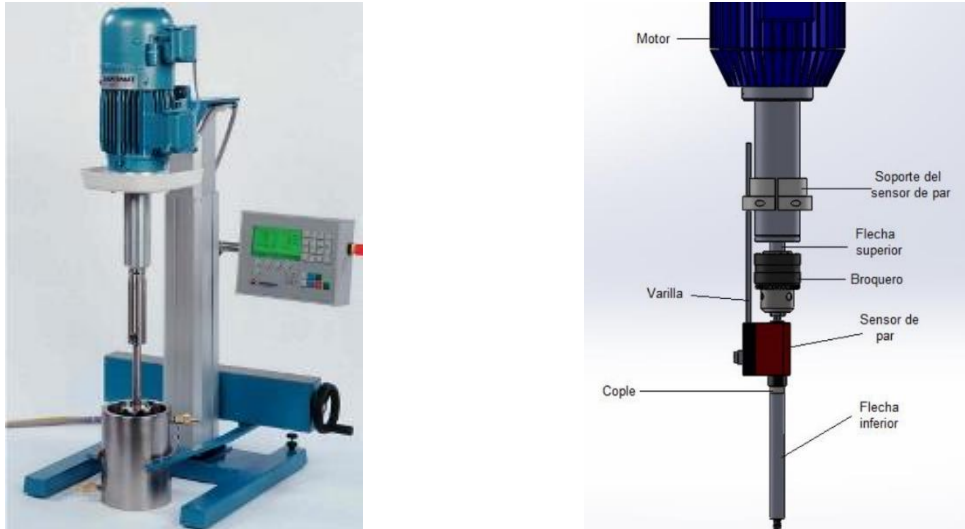
Figura 3-3. Impulsor tipo Cowles.

3.2 Mediciones experimentales de consumo de potencia

3.2.1 Equipos para determinar la potencia inyectada

En la Figura 3-4 a) se muestra el equipo de agitación Dispermat AE01[®] utilizado para medir el consumo de potencia de los diferentes impulsores estudiados. Este es un equipo ampliamente utilizado para realizar investigación a nivel laboratorio y planta piloto para la elaboración de pinturas (VMA-Getzmann, 2017). El equipo tiene un motor de 0.75 HP y puede proporcionar velocidades de agitación hasta de 10,000 rpm. En su display puede leerse directamente la potencia que es inyectada con una precisión de ± 1 W. Durante la calibración del equipo es posible eliminar las pérdidas de potencia provocadas por la fricción de las partes mecánicas del motor, los sellos mecánicos y el sistema de enfriamiento, de tal manera que

durante los experimentos las pérdidas de potencia debido estas fricciones ya no es registrada.



a) Equipo de agitación Dispermat AE01® b) Sensor de par adaptado al Dispermat AE01®

Figura 3-4. Equipos utilizados para medir la potencia inyectada.

Debido a que en algunas mediciones requieren registrar valores de potencia por debajo de 1 W fue necesaria la implementación de un sistema de medición más preciso, por ello, al Dispermat AE01®, se le adaptó un sensor de par marca Futek modelo TRH300, Figura 3-4 b). Este sensor puede medir hasta 6Nm con una precisión de 0.6mNm y puede operarse hasta 3000 rpm (Futek, 2017). Las mediciones de par son obtenidas en tiempo real mediante un transductor Andilog® modelo CNR-EA-TRD6 y enviadas a una computadora en la que son procesadas con el software Caligraph versión 1.3.0. Una vez que se obtiene el par, la potencia puede ser fácilmente calculada con la ecuación (2.24).

La Figura 3-5 muestra la configuración geométrica del tanque utilizado para las mediciones de consumo de potencia. Éste tiene un diámetro $T=0.132$ m con fondo curvo y no tiene deflectores. Las relaciones geométricas de este sistema de agitación son: $C/T=D/T=0.3848$ y $Z/T=1$. En todas las mediciones la temperatura se mantuvo a $23 \pm 0.5^\circ\text{C}$ mediante el flujo de agua en la chaqueta de calentamiento del tanque.

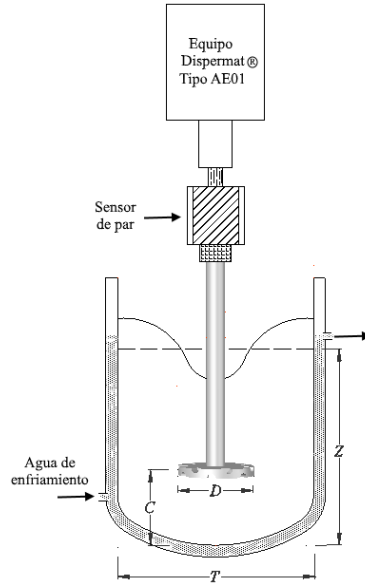


Figura 3-5. Configuración geométrica del sistema experimental.

3.2.2 Fluidos de proceso utilizados

Los fluidos newtonianos empleados como fluidos de proceso fueron preparados a partir de un concentrado de glucosa de 45° Brix de grado alimenticio. Fueron preparadas tres soluciones al 36, 36.8 y 37.5% en agua destilada, resultaron con viscosidades $\eta=1.1, 1.7$ y 2.4 y densidades $\rho=1352.46, 1363.32, 1365.25$ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, respectivamente.

El fluido no newtoniano de tipo adelgazante se preparó como una solución de carboximetilcelulosa (CMC) al 1.5 y 2.0 % p/v con agua destilada. Los parámetros n y k de la ley de potencia que describen su viscosidad, son presentados en la sección de resultados.

Utilizando una geometría de cilindros concéntricos y controlando la temperatura a $23 \pm 0.1^\circ\text{C}$, la reología de los fluidos de proceso se determinó con un reómetro marca Anton Paar, modelo MCR-502. La densidad fue calculada a partir de la masa de fluido contenida en una probeta de 100 ml.

3.3 Simulaciones CFD

Para llevar a cabo cada una de las etapas involucradas de las simulaciones con CFD de esta tesis se utilizó el software ANSYS 17.1. El modelo computacional de los dominios fue creado con el módulo *DesignModeler*. El mallado fue realizado con el módulo *Meshing*. Las simulaciones fueron ejecutadas en *Fluent* y para el post-procesamiento nuevamente se empleó *Fluent* en conjunto con el módulo *CFD-Post*.

En la Figura 3-6 se muestran los dominios y las mallas generadas para tres de los impulsores estudiados. Debido a que los impulsores presentan periodicidad geométrica, el IAC Norstone de una séptima parte, y los HM y CW de una sexta parte, entonces, fue posible simular las respectivas fracciones del dominio. Para ello, en las caras verticales que limitan el dominio, se declara una condición de periodicidad, con esta condición el software interpreta que los datos que salen de una de las caras, son los que entran en la otra. Posteriormente, con las herramientas de post-procesamiento es posible recuperar y visualizar todo el dominio. Con esta estrategia, sólo se utilizaron 16.6 y 17.3% de los recursos cómputo, respectivamente. Con fines ilustrativos, en la Figura 3-6 se muestra la fracción del dominio que fue modelada y el RRF ha sido destacado del SRF.

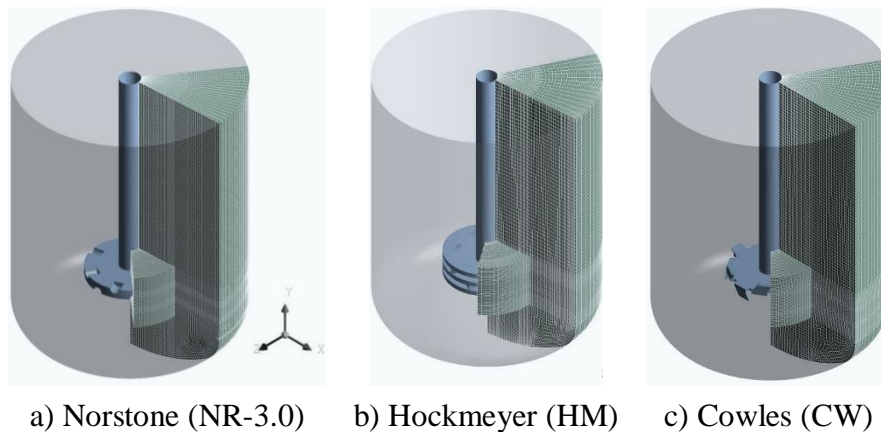


Figura 3-6. Dominio computacional y mallas de los impulsores.

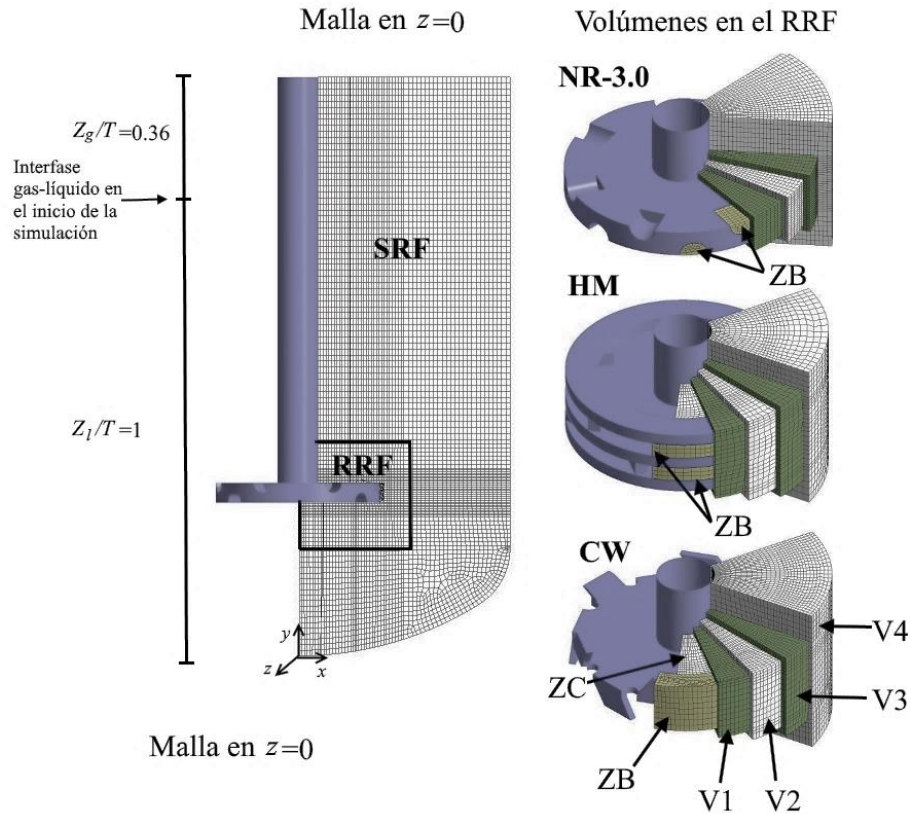


Figura 3-7. Malla generada para el impulsor NR-3.0. Se muestra un plano vertical de todo el dominio y detalles 2D y 3D de los volúmenes en los que se dividió el RRF.

La Figura 3-7 muestra el plano $z=0$ de la malla del impulsor NR-3.0, en ésta, se ilustra la posición de la interface gas-líquido al inicio de las simulaciones y la división del dominio para la aplicación del enfoque MRF. Además, debido a que es de interés determinar y comparar el desempeño de los impulsores en la cercanía de su zona de barrido, también en la Figura 3-7 se muestran las divisiones del RRF de los tres impulsores. El volumen de fluido que llena los surcos del impulsor tipo NR-30 fue denominado como su zona de bombeo (ZB), en los impulsores HM y del CW esta zona es equivalente al volumen que barren las cuchillas. Los impulsores HM y CW presentan una zona central (ZC) comprendida entre el eje de rotación y sus cuchillas (y anillos, en el caso del HM). La zona V1 está en contacto con la superficie del impulsor y la interfase con la ZB y ZC. La zona V2 envuelve a la V1 y la V2 a la V3, estas tres zonas tienen un espesor de 1.5 mm en las direcciones axial y radial. Finalmente, el volumen V4 es la región que complementa al RRF.

Como fue mencionado anteriormente, la calidad de la malla debe presentar una calidad al menos aceptable, por ello, todas las mallas generadas para esta tesis presentan una oblicuidad máxima de 0.9.

3.3.1 Consideraciones para la ejecución de las simulaciones

Para ejecutar las simulaciones se hicieron las siguientes consideraciones:

- Condiciones isotérmicas.
- Estado estacionario.
- Densidad constante.
- La presión en la superficie es igual a la presión atmosférica.
- La fuerza gravitacional actúa sobre el eje y negativo.
- Los fluidos que se utilizan en la simulación corresponden a dos fases inmiscibles.
- La rotación del impulsor se da en el sentido de las manecillas del reloj.

De la Tabla 3-1 a la Tabla 3-7 se indican las especificación y opciones para el algoritmo de solución

Tabla 3-1. Especificaciones del algoritmo de solución.

| | |
|--------------------------|-----------------------------|
| Algoritmo de solución | Basado en presión |
| Tipo de algoritmo | Segregado |
| Formulación de velocidad | Absoluta |
| Estimación del gradiente | Green-Gauss basado en celda |

Tabla 3-2. Especificaciones de los modelos de flujo.

| | |
|--------------------|-----------|
| Modelo | Laminar |
| Modelo multifásico | VOF |
| Formulación | Implícita |

Tabla 3-3. Especificación de los materiales.

| | Aire | Glucosa | | CMC | |
|---|------------------------|----------|-------|-------------|------------|
| | | 36% | 37.8% | 1.5% | 2% |
| Densidad (kg m^{-3}) | 1.225 | 1346.76 | 1373 | 1003 | 1003 |
| Viscosidad ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$) 1) | 1.789×10^{-5} | 1.1 | 1.7 | | |
| Modelo reológico. | - | - | - | $k=14.33$ | $k=21.58$ |
| Ley de potencia | | | | $,n=0.4074$ | $n=0.3938$ |
| Tipo de fase | Secundaria | Primaria | | Primaria | |

Tabla 3-4. Especificación de las condiciones de frontera en el fluido.

| Fase | mezcla | mezcla |
|-------------------------------|--------|--------|
| Zona | RRF | SRF |
| Dirección del eje de rotación | | |
| X | 0 | |
| Y | -1 | |
| Z | 0 | |

Tabla 3-5. Especificación de las condiciones de frontera en las paredes.

| Zona | Tanque | Impulsor | Eje |
|-------------------------------|---------------------|----------|-----|
| Tipo | Pared | | |
| Tipo de movimiento | Rotacional absoluto | | |
| Dirección del eje de rotación | | | |
| X | 0 | | |
| Y | -1 | | |
| Z | 0 | | |
| Condición de frontera | No deslizamiento | | |

Tabla 3-6. Esquemas de discretización para las ecuaciones gobernantes.

| | |
|--------------------------------|-------------|
| Acoplamiento presión-velocidad | Coupled |
| Momentum | QUICK |
| Presión | PRESTO! |
| Fracción volumen | Compressive |

Tabla 3-7. Especificación de los residuales como criterio de convergencia.

| Normalización | Escala |
|----------------|--------------------------|
| Residual | Criterio de convergencia |
| Continuidad | |
| Velocidad en X | 1×10^{-4} |
| Velocidad en Y | |
| Velocidad en Z | |

3.3.2 Experimentos de desaglomeración de partículas de polvo mineral

Para evaluar la capacidad de reducción del tamaño de partículas en función de la capacidad de disipación de energía se utilizó un polvo de la industria minera.

Para la realización de estos experimentos, se utilizaron tamices de 325 y 400 poros por pulgada (mesh) de tal manera que fue posible seleccionar polvo con un tamaño de partícula de entre 44 y 37 μm . 8 gramos de este polvo fueron agregados al tanque conteniendo solución de glucosa de 0.95 Pa·s (fracción masa de los sólidos fue de 0.26%). Para generar una solución homogénea el sistema fue agitado por 30 minutos a 400 rpm. Después de este tiempo el sistema fue sometidos a agitación mantenido la potencia constante durante 10 minutos. Los impulsores evaluados fueron el HM y una turbina Rushton. Se evaluaron tres potencias 4, 13 y 24 W. El polvo fue recuperado, lavado, secado y tamizado con el tamiz de 400 mesh. Aquellas partículas que no quedaran atrapadas durante esta última operación tendrían un tamaño $<37 \mu\text{m}$. Entonces, la diferencia polvo recuperado con el inicial fue cuantificada.

Las capacidades de reducción de tamaño de partícula entonces fueron correlacionadas la capacidad de disipación viscosa obtenida con datos de simulación.

Capítulo 4. Resultados y discusiones

4.1 Análisis de independencia de malla y validación experimental de las simulaciones

Las mallas que fueron utilizadas en las simulaciones fueron seleccionadas a partir de un análisis de independencia de malla. En la Tabla 4-1 se enlistan las mallas y el número de elementos de los que estaban compuestas. Para cada impulsor se crearon cuatro mallas con un número creciente de elementos. Todas éstas cumplieron con el criterio de calidad basado en oblicuidad menor a 0.9. Para determinar la independencia de los resultados respecto del número de celdas en las mallas se comparó la potencia calculada por par, ecuación (2.24), y la calculada con la integración de la disipación viscosa, ecuación (2.27), cabe aclarar que esta expresión debe ser introducida a Fluent[®] como una función personalizada. En este análisis, las simulaciones se realizaron considerando un fluido newtoniano, $\eta=0.95$ Pa·s y $\rho=1346.76$ kg·m⁻³ con una velocidad de agitación de 1200 rpm.

Tabla 4-1. Número de celdas en las mallas de cada impulsor

| Mallas | NR-3.0 | NR-1.5 | NR-0 | HM | CW |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| #1 | 29821 | 29464 | 16717 | 72017 | 121351 |
| #2 | 131787 | 165560 | 52344 | 155585 | 213661 |
| #3 | 331747 | 289620 | 103264 | 320035 | 344968 |
| #4 | 470859 | 485499 | 207301 | 653043 | 533625 |

En la Figura 4-1 se muestra la potencia adimensional (P^*) calculada con par y con disipación viscosa en todo el dominio de fluido. Cada punto de esta gráfica corresponde a la potencia determinada en la totalidad de las celdas de cada malla. Los valores fueron normalizados con la potencia obtenida de la malla #4, i.e. la más densa. Puede observarse que para las mallas menos densas (mallas #1), la potencia calculada con par y con disipación tienen variaciones importantes y que estas

disminuyen con el incremento del número de elementos de cada malla. Para todos los impulsores, la diferencia de P^* de la malla #2 respecto de la #4 son menores al 3%. Por lo que, si el análisis de independencia se basara sólo en esta gráfica, entonces, podría seleccionarse la malla #2 de cada uno de los impulsores. Sin embargo, la potencia calculada de esta manera no considera la densidad de las mallas en las zonas cercanas a la superficie de los impulsores. Por ello, debe verificarse que los valores de la potencia disipada también sean independientes de la densidad de elementos en regiones cercanas a los impulsores.

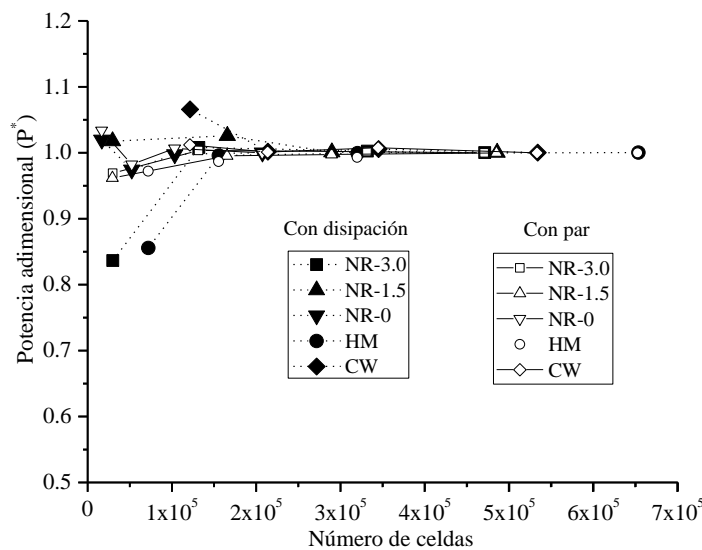


Figura 4-1. Análisis de independencia de malla considerando todo el dominio

En las Figura 4-2 a) - d) se presentan los valores de disipación obtenidos en los volúmenes ZB, V1, V2 y V3 definidos en la Figura 3-7 para los impulsores, NR-3.0, NR-15, HM y CW. En el eje de las abscisas, de cada uno de los cuatro puntos que forman a una curva, puede leerse la cantidad de elementos que cada volumen aporta a cada una de las cuatro mallas evaluadas. Para el NR-1.5, Figura 4-2 b), cuando se comparó la disipación en el V1 de la malla #2 respecto del más denso (malla #4), se obtienen diferencias del 12.7%. De manera similar, en el V2 de las mallas #2 del CW y HM se obtienen diferencias de 6.5 y 3.4% respectivamente. Por ello, el resultado del análisis de independencia de malla que consideró solamente todo el volumen debe ser descartado. Cuando se realizó el mismo análisis para los diferentes

volúmenes de las mallas #3, de todos los impulsores (incluido el NR-0, que no se presenta aquí) en todos los casos se obtienen diferencias menores al 3%. Entonces, para la ejecución de las simulaciones subsecuentes, se determinó utilizar las mallas #3 de cada uno de los impulsores.

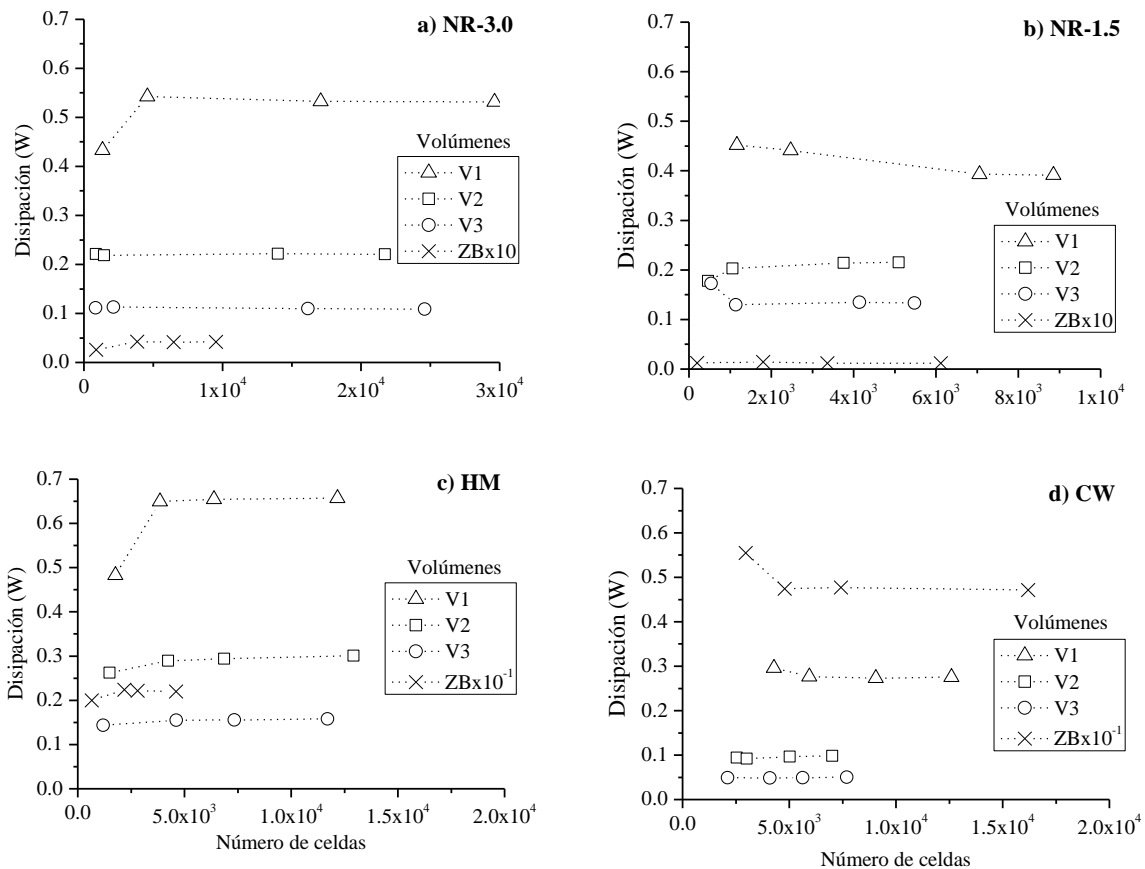


Figura 4-2. Análisis de independencia de malla mediante la disipación calculada en regiones cercanas a los impulsores.

Para validar las mallas computacionales, con todos los impulsores se hicieron mediciones experimentales de par en el intervalo de 200 a 600 rpm y mediante la ecuación (2.24) se calculó la potencia experimental. En estas mediciones se utilizó un fluido newtoniano con $\eta=2.4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ y $\rho=1365.25 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. De manera paralela, se ejecutaron simulaciones con un fluido de las mismas propiedades y en el mismo intervalo de velocidades de agitación. De los resultados numéricos se obtuvieron los

valores de par y disipación de energía en todo el dominio. Puesto que solo se simula una fracción del dominio, un séptimo para NR-3.0 y NR-1.5, y un sexto para NR-0, HM y CW, para calcular la potencia mediante el par numérico y disipación de energía, las ecuaciones (2.24) y (2.25) deben multiplicarse por los factores siete o seis según sea el caso.

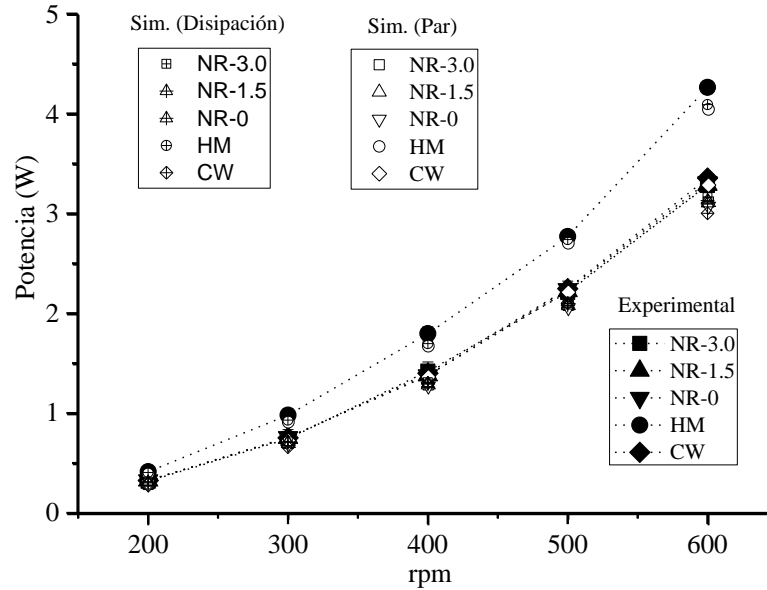


Figura 4-3. Validaciones experimentales de los resultados de simulación con fluido newtoniano ($\eta=2.4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ y $\rho=1363 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$).

En la Figura 4-3 se muestra la potencia experimental obtenida y las calculadas con los datos numéricos, puede observarse que las potencias de las simulaciones predicen de manera muy aproximada a los resultados experimentales. El error máximo entre las mediciones experimentales y las numéricas (de par) fue del 9.2% el cual se obtuvo con el impulsor NR-3.0 a 400 rpm. Las potencias numéricas calculadas por par y por disipación son prácticamente las mismas. Debido a estos resultados, se puede afirmar que las mallas seleccionadas del análisis de independencia de malla son adecuadas para predecir las potencias experimentales.

4.2 Caracterización hidrodinámica de los IAC con fluidos newtonianos

4.2.1 Patrones de flujo y generación de vórtice

En las Figura 4-4 a Figura 4-6 se muestran los campos de velocidad generados por los impulsores NR-3.0, HM y CW, respectivamente, éstos fueron obtenidos de simulaciones a una potencia inyectada de 13 W. En ellas se observa la aparición de dos lazos de circulación, uno por arriba y otro por debajo del centro del impulsor. De los planos mostrados en diferentes posiciones angulares se observa que estas estructuras son tridimensionales. Puede observarse que son muy similares independientemente del impulsor utilizado. Las velocidades máximas se encuentran en los bordes de los impulsores desde donde el fluido es proyectado radialmente hasta chocar con las paredes del tanque y se divide en dos corrientes. Una parte del fluido sube por las paredes del tanque y después regresa al impulsor, mientras que la otra desciende hasta el fondo del tanque y también regresa al impulsor. Esto provoca la formación de dos zonas de segregación del flujo, de tal forma que el fluido de la parte superior difícilmente se mezclaría con el de la parte inferior. Para una turbina Rushton, este patrón de flujo ha sido reportado por Lamberto et al. (1999) en el intervalo $8 < Re < 70$. Ramírez-Gómez et al. (2015), a $50 < Re < 75$, también reportaron un patrón de flujo similar para la turbina Rushton y para el HM.

Unadkat et al. (2011), al estudiar el impulsor dientes de sierra de la Figura 1-1 d), en régimen de flujo turbulento, reportaron la formación de dos lazos vórtices en la zona de descarga del impulsor.

Los lazos de lazos de circulación también son presentados en las líneas de corriente de todos los impulsores estudiados a una potencia inyectada de 36 W, Figura 4-7.

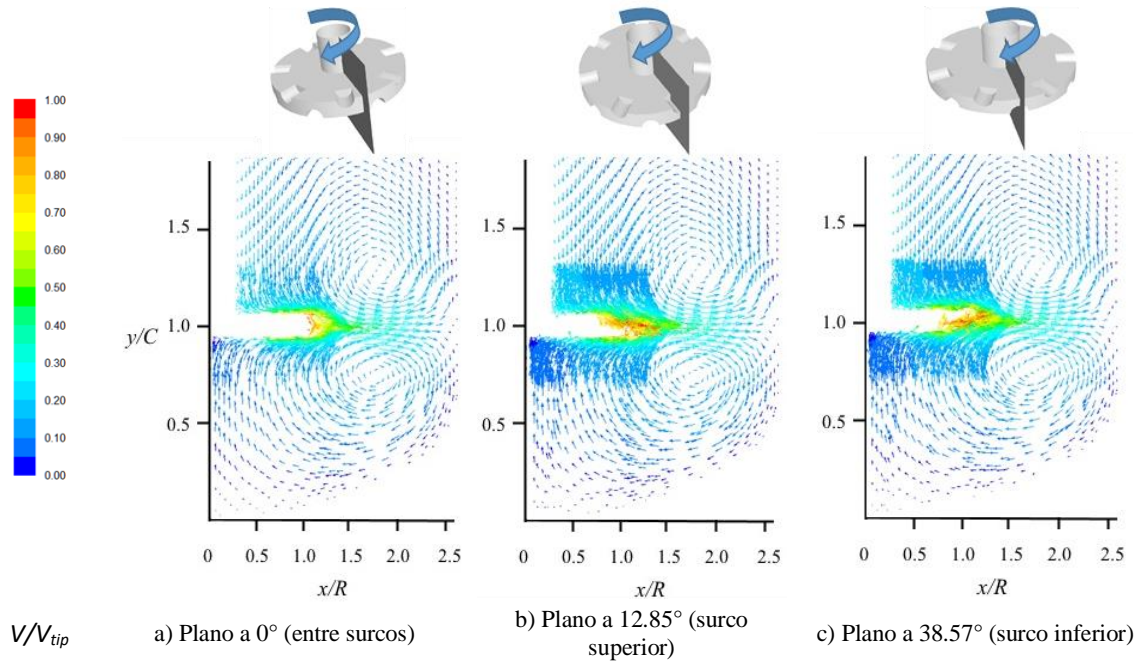


Figura 4-4. Campos de velocidad generados por el impulsor Norstone® 3.0 (1393 rpm).

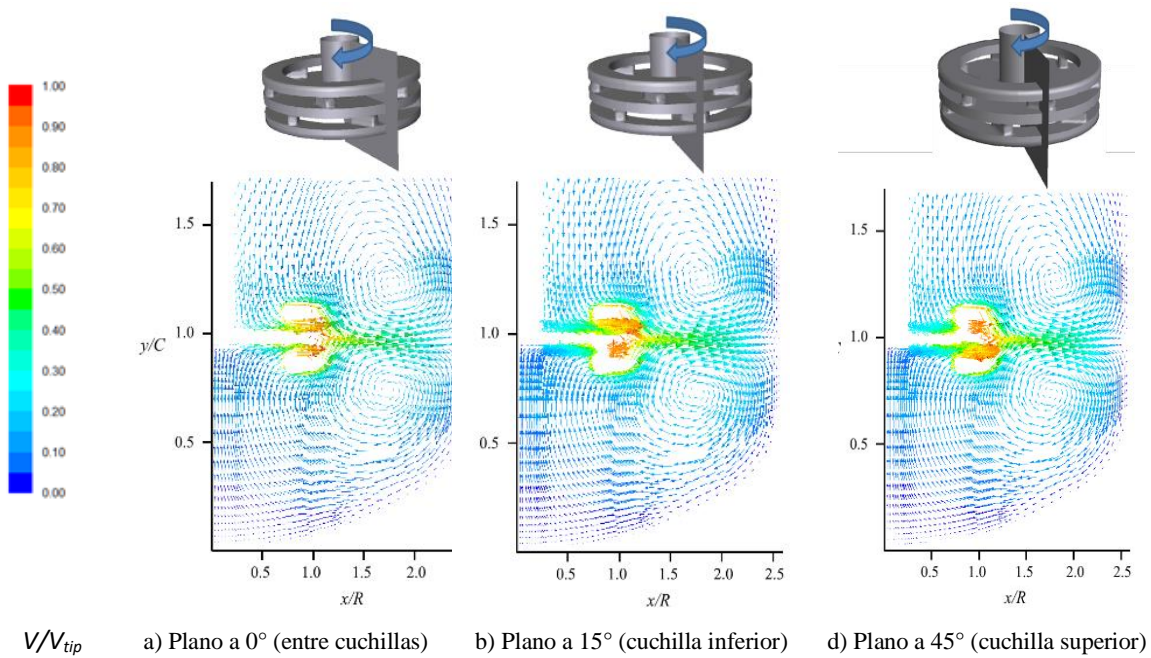


Figura 4-5. Campos de velocidad generados por el impulsor Hockmeyer® (1203 rpm).

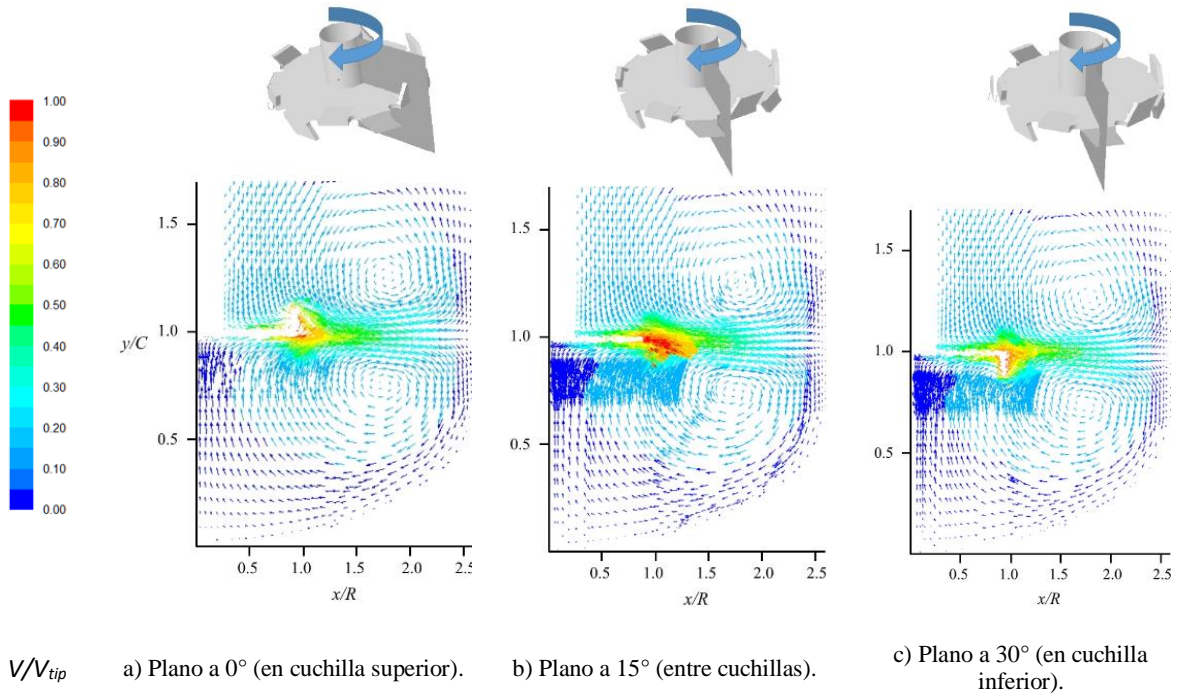


Figura 4-6. Campos de velocidad generados por el impulsor Cowles® (1355 rpm).

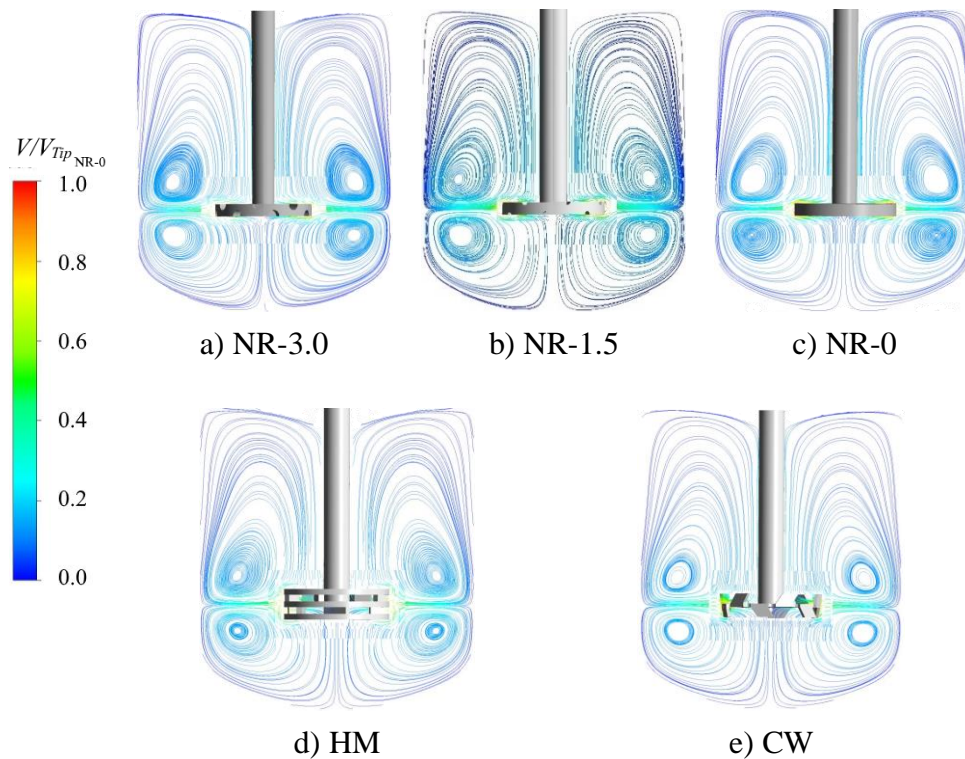


Figura 4-7. Líneas de corriente generados a 36W.

En las figuras previas, claramente se aprecian los vórtices que corresponden a los observados en la práctica durante los procesos de dispersión sólido-líquido, aunque visualmente sólo se observe el vórtice superior, el inferior siempre está presente. Estos vórtices permiten que las partículas presentes en el líquido sean arrastradas hasta la zona de alto corte. Las partículas alejadas del impulsor sería acarreadas en las capas de fluido que se mueven de manera ordenada, pero, cuando se aproximan al impulsor se encuentran con gradientes de velocidad de gran magnitud y de esta manera se les transfiere una gran cantidad de energía capaz de lograr la reducción de los tamaños de partícula (Hockmeyer, 2010).

En la Figura 4-8, se muestra el vórtice generado durante los experimentos para la determinación de potencia, la forma de éste es muy similar a la que se obtiene de las simulaciones. En la Figura 4-9 se muestra el contorno de fases de cada impulsor, en el plano $z=0$, generado en las simulaciones a 36 W. Éstas figuras muestran que todos los impulsores forman un pequeño vórtice, que en general está muy cercano a la superficie del eje de rotación. Debido a que el vórtice formado es muy pequeño, la influencia de la gravedad, i.e. el efecto del Fr , se desprecia (Rushton et al., 1950)



Figura 4-8. Vórtice generado por el NR-3.0 a $Re= 128$.

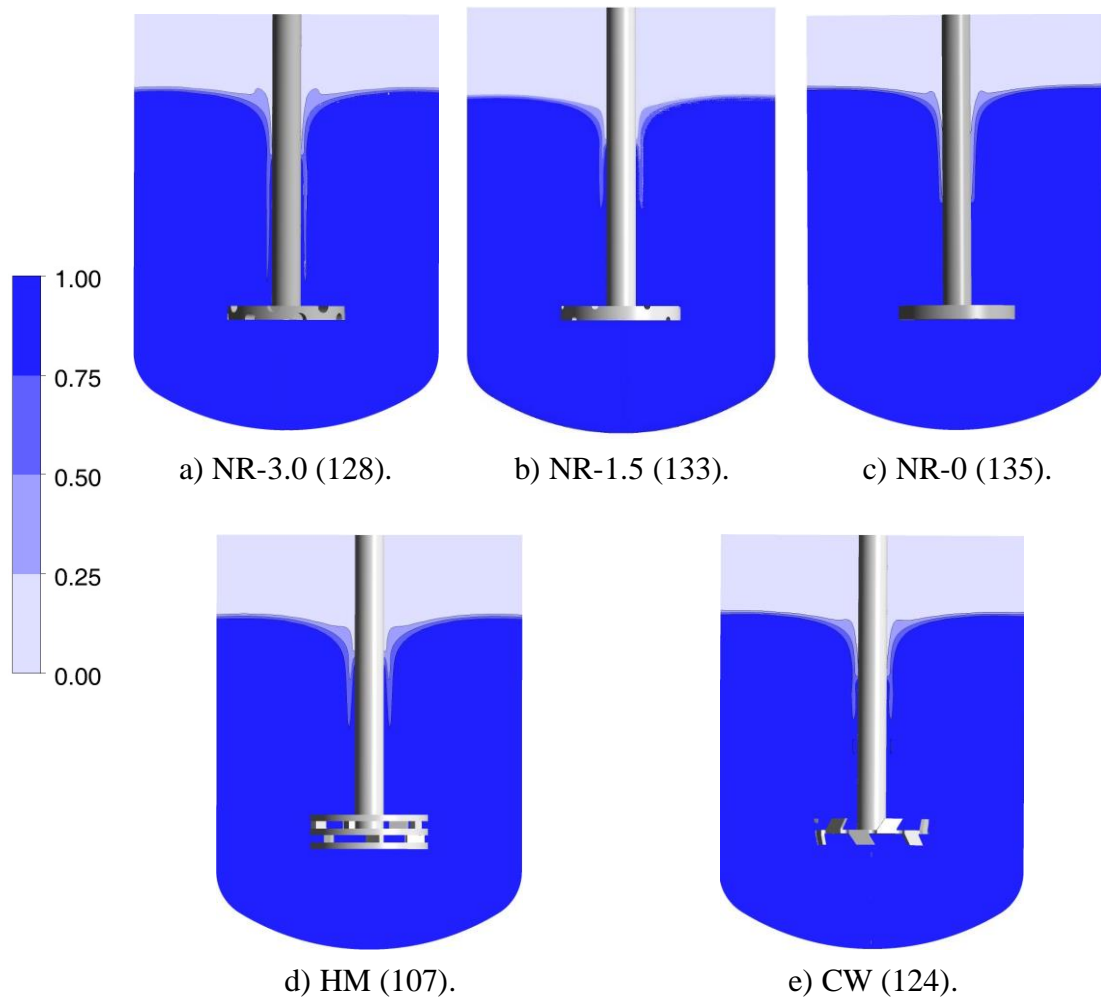


Figura 4-9. Vórtice generado en la interfase líquido-gas del fluido newtoniano a 36 W. El número entre paréntesis corresponde al Re .

4.2.2 Número de potencia con fluidos newtonianos

A partir de los resultados de las simulaciones y de las mediciones experimentales de potencia fueron calculados los N_P de los impulsores. Los experimentales fueron calculados directamente de la ecuación (2.10), y los de la simulación fueron calculados a partir de la ecuación (4.1)

$$N_P = \frac{(X_{sim})^{-1}(P_{sim})}{\rho N^3 D^5} \quad (4.1)$$

donde X_{sim} es la fracción del dominio que fue simulada, un séptimo para NR-3.0 y NR-1.5 y un sexto para los impulsores HM y CW. P_{sim} puede ser calculada de los datos numéricos mediante la ecuación (2.24) y/o mediante la ecuación (2.25).

Las curvas de potencia de los IAC estudiados se presentan en la Figura 4-10. En todos los casos el error relativo del N_P numérico, el obtenido por par y por disipación es menor al 1.5%, por ello en la curva de potencia solo se presenta el N_P calculado a partir del par con el que se predice de manera muy aproximada al N_P experimental. Los errores máximos y mínimos entre estas mediciones son presentados en la Tabla 4-2.

Tabla 4-2. Error máximo y mínimo entre las mediciones experimentales y numéricas de N_P .

| IAC | % error máximo | Re | % error mínimo | Re |
|--------|----------------|------|----------------|------|
| NR-3.0 | 15.3 | 31.3 | 0.35 | 41.4 |
| NR-1.5 | 16 | 36.5 | 1.2 | 41.4 |
| NR-0 | 17.6 | 41.4 | 1.35 | 36 |
| HM | 6.6 | 9.5 | 0.098 | 52 |
| CW | 17.2 | 62 | 0.2 | 20 |

En la Figura 4-10 también se incluyen los valores de N_P reportados en la literatura para el HM y para el Cowles de la Figura 1-1 c). Puede observarse que en general, el N_P del HM es el más alto i.e. consume mayor potencia a un determinado Re . En contraste, el N_P del resto de los impulsores es más bajo, lo cual implica que éstos pueden operar a velocidades más altas a una misma potencia inyectada. Sin embargo, las curvas de potencia de estos últimos no permiten encontrar diferencias significativas en cuanto a su consumo de potencia. Un comportamiento similar fue reportado por Foucault et al., (2005) al evaluar las turbinas Sevin y Deflo, impulsores también utilizados en procesos de dispersión.

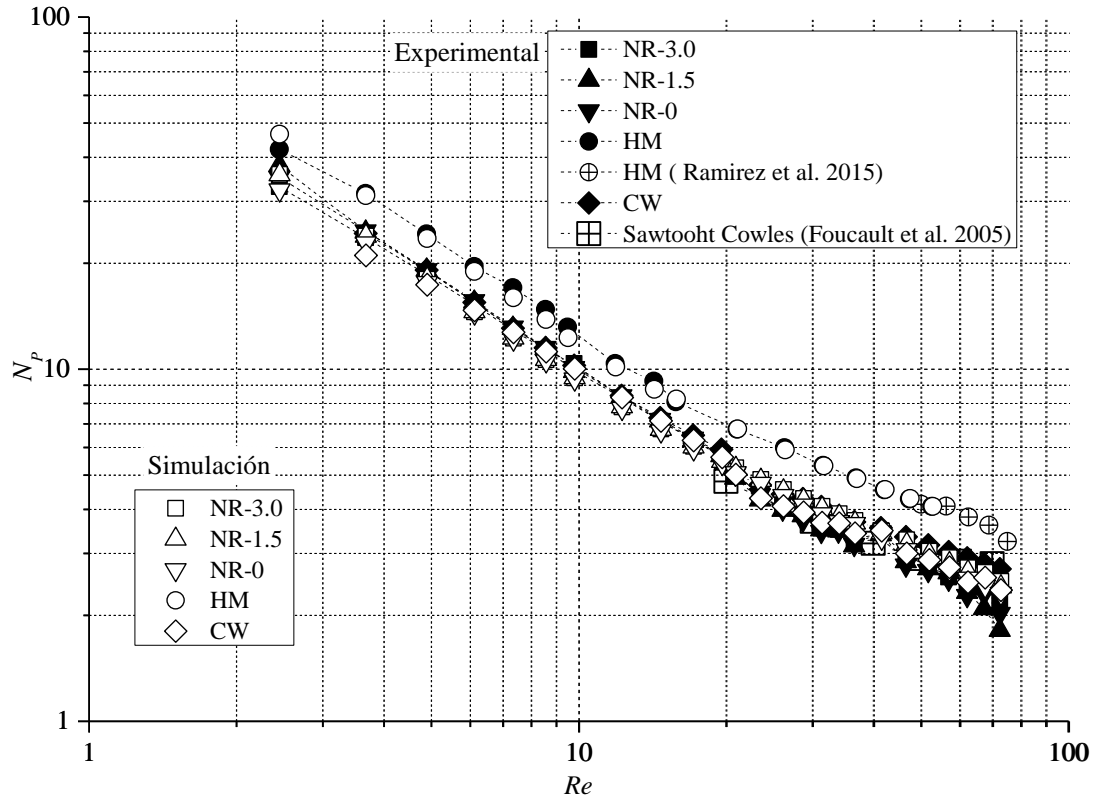


Figura 4-10. Curva de potencia newtoniana.

4.2.3 Disipación viscosa y bombeo efectivo

La disipación de energía, y más específicamente la tasa de disipación máxima resultan de interés debido a que en procesos de dispersión de polvos y pigmentos ésta determina el tamaño mínimo de las partículas (Hockmeyer, 2010; Xie et al., 2007).

Como se mencionó previamente, mediante la ecuación (2.27) es posible determinar la disipación viscosidad, ε (Wm^{-3}). Además, del cociente de esta ecuación con ρ es posible obtener los valores de potencia por unidad de masa (Wkg^{-1}). Con el fin de tener una imagen tridimensional de la distribución ε/ρ generada por cada uno de los impulsores, en la Figura 4-11 se presenta la distribución de ε/ρ sobre la superficie de los impulsores. Estas figuras fueron obtenidas de simulaciones a 4, 13

y 24 W de potencia inyectada. Sólo se presentan aquellos valores que superaran 300 Wkg^{-1} . De tal manera que la superficie de los impulsores que no esta coloreada, presenta valores de ε/ρ por debajo de ese valor.

Cuando se incrementó la potencia inyectada de 4 hasta 24 W, i.e. un aumento en la velocidad de agitación, el área cubierta y la magnitud de los valores de disipación se incrementaron de manera importante para todos los IAC presentados. Lo que sugiere que éstos presentarían un mejor desempeño cuando operan a altas velocidades de agitación. También puede observarse que los valores más altos de disipación aparecen en los bordes de los impulsores. En los surcos del NR-3.0 los valores de disipación $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ aparecen hasta 13W, a una menor potencia éstos no están coloreados, lo que indicaría que su función principal es arrastrar el fluido que entra en ellos y de esta manera generar bombeo.

En el HM, se observa que los valores más altos de ε/ρ se encuentran sobre la superficie de los anillos. En el espacio entre las cuchillas la disipación es menor a $<300 \text{ Wkg}^{-1}$ cuando éste opera a 4 W. Sin embargo, al aumentar la potencia, esta región adquiere mayor importancia. Ramírez-Gómez et al., (2015) señalaron que a velocidades de agitación altas (i.e. potencias más elevadas), la disipación viscosa en la zona que barren las cuchillas del HM aumenta en mayor proporción que en el resto de las regiones. De tal manera, que cuando el HM gira a altas revoluciones se aprovecha de manera más eficiente su geometría; por un lado, la disipación viscosa que se puede generar en la periferia de los anillos y la que se generaría en la región que barren las cuchillas. Además, debido a su geometría, el fluido eventualmente tiene que circular por la región entre las cuchillas. Por lo que esta zona del HM tendría gran importancia para los procesos de desaglomeración.

En el caso del CW, se observa que, la zona de las cuchillas es la más importante para la disipación viscosa, además, comparando con el NR-3.0 y el HM, estas regiones están más focalizadas y en la punta de sus cuchillas se presentan valores más altos que en los otros impulsores.

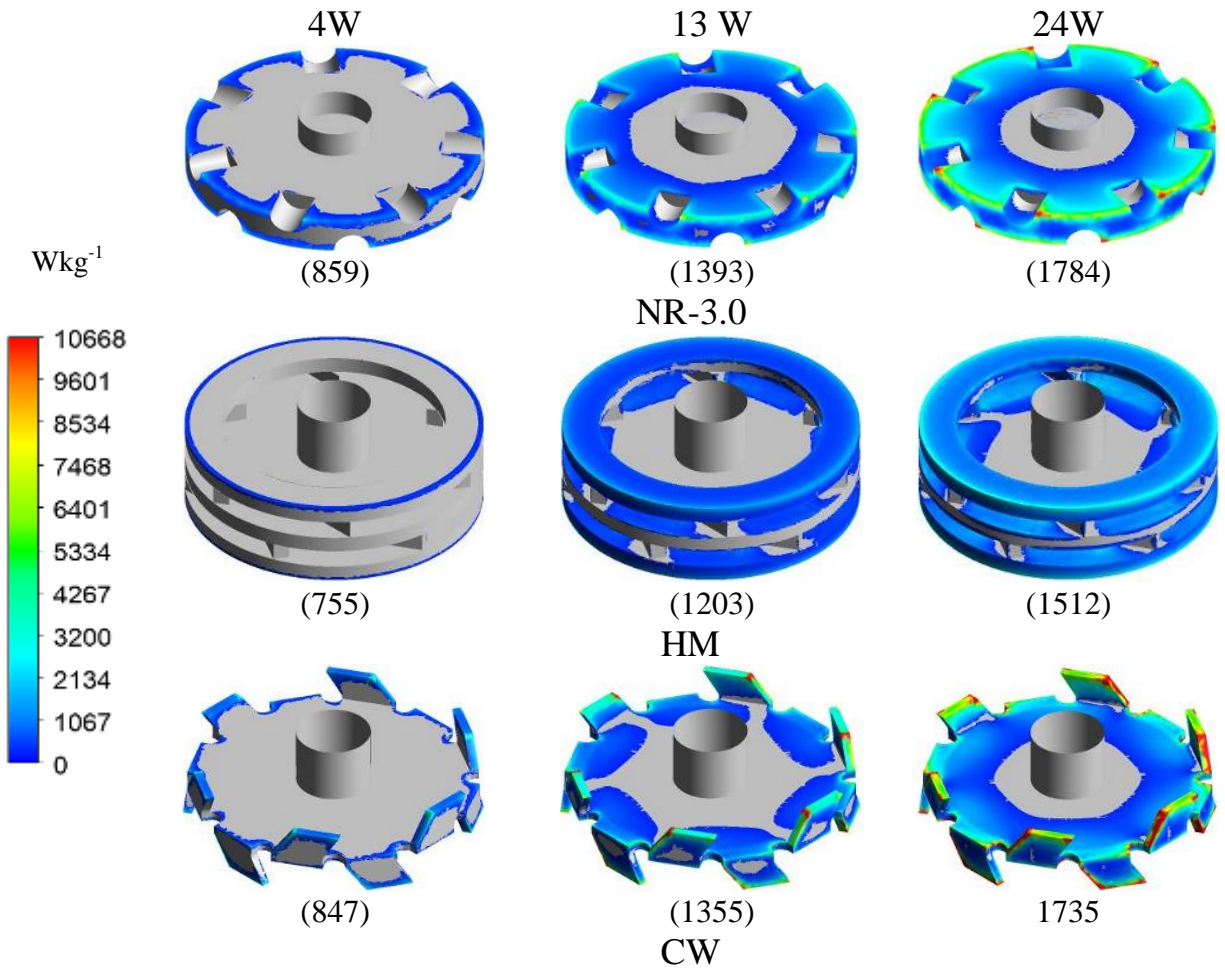


Figura 4-11. Contornos de disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ sobre la superficie de los impulsores con fluido a $0.95 \text{ Pa}\cdot\text{s}$. Los números entre paréntesis corresponden a la velocidad de agitación en rpm.

La Figura 4-11 permite hacer una comparación cualitativa de las capacidades de disipación viscosa de para los tres tipos de impulsores que se estudian en esta tesis. De esta resultó que el HM es el que presenta una menor capacidad de disipación. Sin embargo, de éstas no es posible diferenciación concluyente entre las capacidades del NR30 y el CW. Además, los valores presentados en estas figuras sólo corresponden a los obtenidos sobre la superficie de los impulsores y no considera su posible zona de influencia. Debido a esto, resulta de interés hacer una comparación cuantitativa entre todos los impulsores y en zonas cercanas a sus superficies. Para ello, se realizó un análisis de los valores de ε/ρ promediados en los

diferentes volúmenes definidos en las mallas (ver Figura 3-7), i.e. $\bar{\varepsilon}_i$ donde $i=ZC$, ZB, VI, V2, V3 y V4. Los resultados de la comparación de los impulsores tipo Norstone se muestran en la Figura 4-12. En éstos gráficos se presentan valores de $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$, donde $\bar{\varepsilon}$ es el valor promedio de disipación en todo el tanque, como función, primero, de la potencia inyectada (13, 24 y 36 W), y segundo, para cada potencia ensayada, del efecto de la viscosidad (0.95, 1.7 y 2.5 Pa·s).

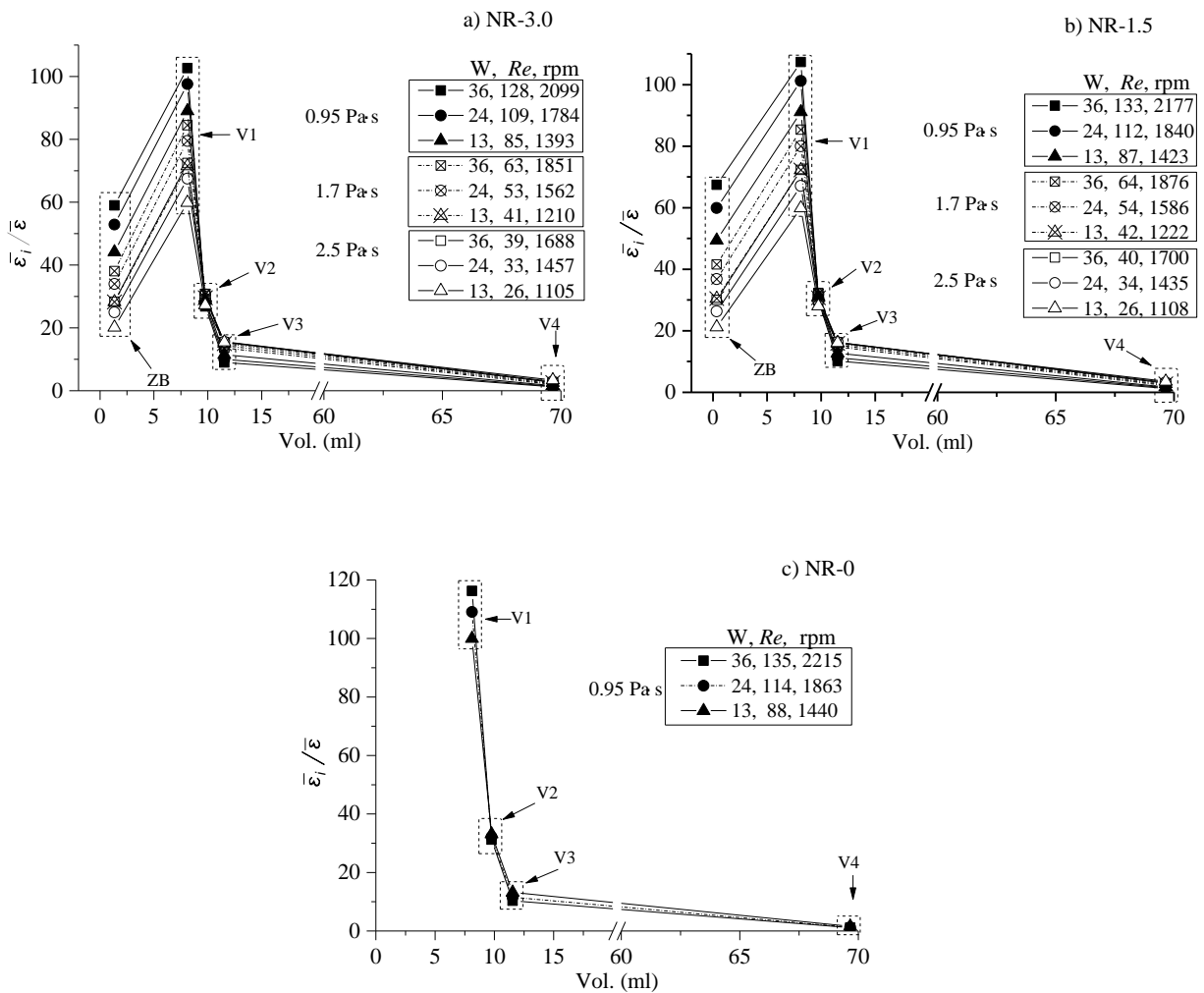


Figura 4-12. Disipación viscosa, a) y b) como función de la potencia inyectada y la viscosidad para los impulsores NR-3.0 y NR-1.5. c) Como función de la potencia inyectada para el NR-0.

Observando sólo la variación de la potencia, es claro que en la región V1 (la que se encuentra en contacto con la superficie de los impulsores y los surcos) se presentan los valores más altos $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$; en los volúmenes alejados de la superficie del impulsor, V2, V3, y V4 ésta disminuye drásticamente. Aunque los valores en ZB son pequeños comparados con los de V1, los valores de disipación que ahí se generan son comparables con los máximos generados por el HM, ver Figura 4-13 a). Si se comparan los valores $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$ entre los diferentes impulsores tipo Norstone, se observa que NR-0 presenta los valores más altos, i.e, bajo las condiciones evaluadas, la presencia de los surcos no favorece la disipación de energía.

Por otro lado, con relación a la variación de la viscosidad, se observa una relación inversa con los valores $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$, si tomamos como referencia la potencia de 36 W en el impulsor NR-3.0, en la Figura 4-13 a) con 0.95 Pa·s se obtienen los valores más altos, en contraste con 2.5 Pa·s los más pequeños. Este patrón se repite para las otras potencias estudiadas en donde se evaluó $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$ como función de la viscosidad.

Analizando la ecuación (2.27), podemos deducir que el incremento de la viscosidad provoca que los gradientes de velocidad disminuyan drásticamente. En una descripción física del fenómeno, se puede inferir que el aumento de la viscosidad provocaría que la diferencia de velocidad entre las diferentes capas de fluido sea mínima. El fluido circula de manera más ordenada y de manera global circularía como un solo sólido. Estos resultados serían de mucha importancia práctica para los procesos de dispersión sólido-líquido, en especial para la etapa de desaglomeración ya que esta debería llevarse a cabo a las viscosidades más bajas posibles.

En la Figura 4-13 a) y b) se presenta los valores de $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$ para el HM y el CW, respectivamente, éstas fueron obtenidas a tres potencias inyectadas (13, 24, y 36 W) a una viscosidad de 0.95 Pa·s. La región de máxima disipación para el HM es V1 y para el CW es ZB. Sin embargo, los valores de $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$ en estas regiones son menores que aquellos generados por los impulsores tipo Norstone, aproximadamente 50%

para el HM y un 90% para el CW. También, en regiones alejadas de estas zonas la disipación también disminuye drásticamente.

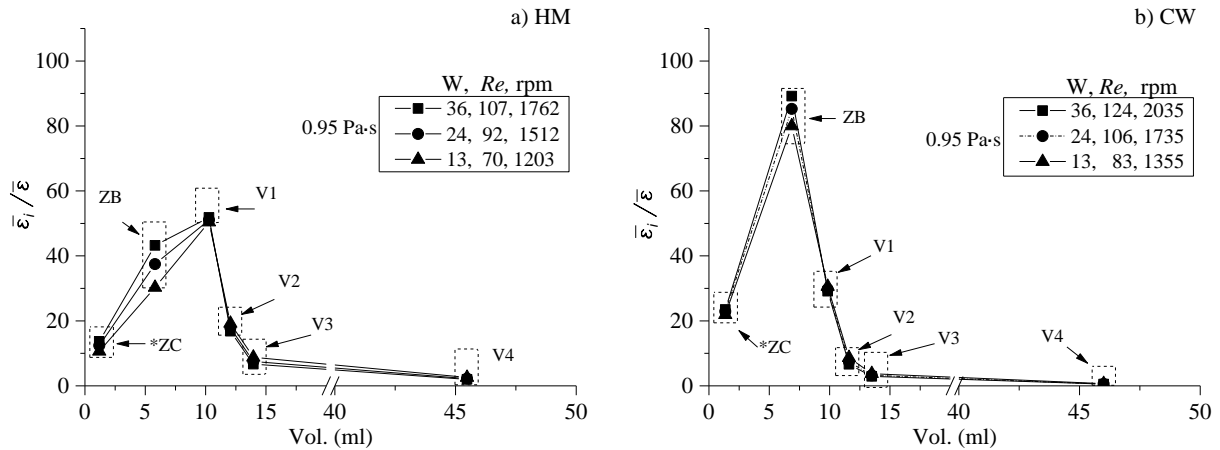


Figura 4-13. Disipación viscosa para los HM y CW como función de la potencia inyectada El * en ZB es para señalar que el volumen de esta región fue multiplicado por un factor de 0.1.

De las Figura 4-12 y Figura 4-13 queda claro que cada impulsor presenta una región dónde la disipación es máxima y por lo tanto ésta región es la que determinaría el tamaño más pequeño de las partículas o polvos durante los procesos de dispersión sólido-líquido. Por otro lado, el tiempo necesario para alcanzar el tamaño mínimo de las partículas y una distribución homogénea dependerá del flujo que atraviese la zona de máxima disipación. Normalmente, para impulsores de flujo radial, se considera el flujo que atraviesa radialmente al cilindro que lo rodea, Figura 2-10 a). Sin embargo, para IAC debería considerarse el flujo que circula por la zona de máxima disipación de energía, i.e. lo se conoce como bombeo efectivo, Q_{ef} . Este concepto ya ha sido previamente definido por Bates y Fondy (1963). Tomando en cuenta esto, para cuantificar la capacidad de bombeo de los IAC aquí estudiados, de los resultados de las simulaciones, se extrajo el flujo que atraviesa radialmente un cilindro que cubre la región V1 de los impulsores tipo Norstone y HM, y el cilindro que cubre la ZB del impulsor CW. En la Figura 4-14 se presentan el $N_{Q_{ef}}$ y el N_Q , como función del Re de los IAC estudiados, mismos que se obtienen aplicando la ecuación (2.22) (el N_Q se calculó considerando solo la altura del impulsor; notar que

éste concepto sería de poca utilidad para los impulsores tipo Norstone). Puede observarse que, en el intervalo de Re evaluado, el CW es el impulsor que presenta el N_{Qef} más grande, 0.37, seguido del HM con 0.30. Los impulsores NR-3.0, NR-1.5 y NR-0, presentan 0.20, 0.14 y 0.13 respectivamente. Sin embargo, en esta misma figura se observa que mientras el CW y los tipo Norstone han alcanzado asintóticamente su N_{Qef} máximo, el del HM aún podría seguir aumentando, incluso hasta superar el del CW. Además, si sólo se considera el N_Q de HM, su tendencia también es superar los N_{Qef} del NR-3.0 y, posiblemente también alcanzar valores de N_Q del CW. Con relación a los impulsores tipo Norstone, el hecho de que no existan diferencias significativas entre la capacidad de bombeo del NR-1.5 y el NR-0, pero sí de éstos con el NR-3.0 indica que la función principal de los surcos de estos impulsores es la generación de bombeo.

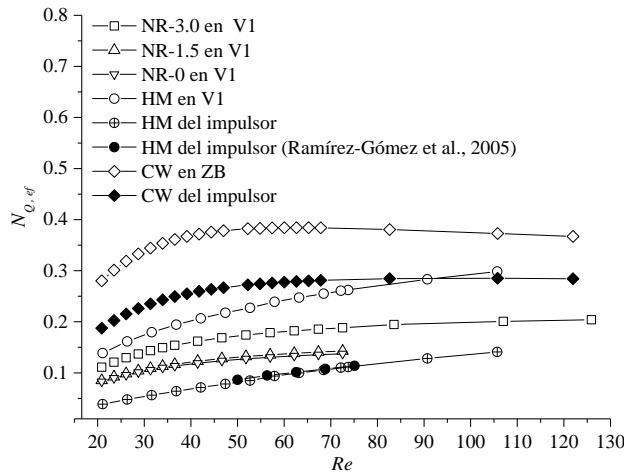


Figura 4-14. Bombeo efectivo con fluidos newtonianos.

De los resultados que se han presentado, si el criterio de desempeño es la capacidad de disipación viscosa, entonces los impulsores tipo Norstone son los mejores, ver Figura 4-12, además, estos también tienen los menores consumo de potencia, ver Figura 4-10. Por ello, éstos deberían utilizarse con partículas que son difíciles de desaglomerar. Por otro lado, como sus valores de N_{Qef} no son muy altos, debería emplearse cuando los tiempos de proceso no sean una limitante. Por otro lado, si el criterio es la capacidad de bombeo, entonces, en el intervalo de Re

analizado, el CW es el mejor, además este puede generar alrededor del 90% de los valores de disipación viscosa respecto de los tipos Norstone. Sin embargo, la principal desventaja de este tipo de impulsores resulta de su geometría, ya que sus cuchillas tienden a desgastarse rápidamente y deben reemplazarse con mucha frecuencia (Norstone, 2012). Respecto del impulsor HM, si bien, en el intervalo de Re analizado, éste presenta aproximadamente el 50% de la disipación de los tipos Norstone, su capacidad de bombeo es superior a éstos. Además, la tendencia de su capacidad de bombeo indica que para $Re > 107$, superaría la capacidad de bombeo del impulsor CW. Entonces, en el régimen de flujo estudiado, para partículas fácilmente dispersables y si el tiempo de proceso es una limitante, sería recomendable utilizar el impulsor Cowles.

4.3 Caracterización hidrodinámica de los IAC con fluidos pseudoplásticos

4.3.1 Curva reológica y validación experimental de las simulaciones con fluidos pseudoplásticos

Las curvas reológicas de las soluciones preparadas con CMC se muestran en la Figura 4-15 a). Para determinar el intervalo de $\dot{\gamma}$ en el que estas curvas se ajustarían a la ley de potencia, se ejecutaron simulaciones en un intervalo de velocidades de agitación de 0.83 y 42 s^{-1} . Todas las velocidades de agitación utilizadas en esta tesis estuvieron dentro de ese intervalo. Considerando lo anterior, las curvas reológicas fueron linealizadas con la ecuación (2.6), en la Figura 4-15 b) se muestra los resultados del ajuste y en la Tabla 4-3 se muestran los parámetros k y n que ajustan las curvas, así como el intervalo de $\dot{\gamma}$ utilizado.

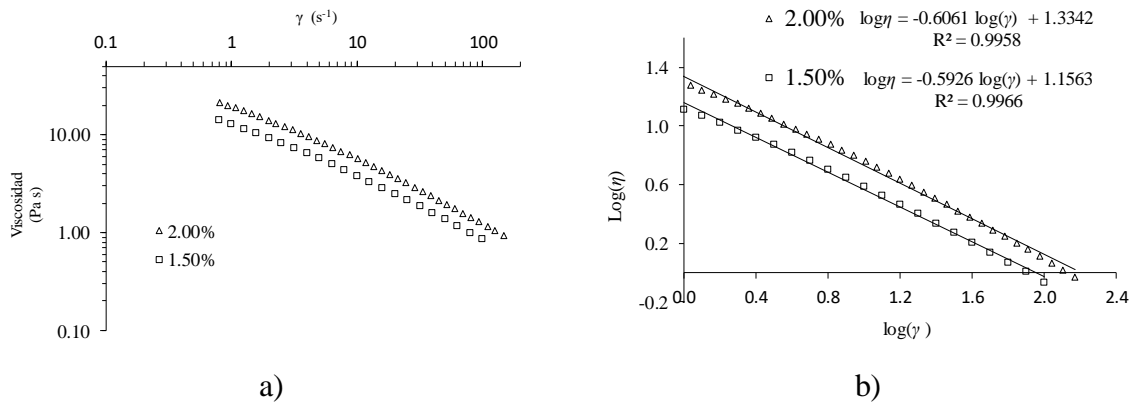


Figura 4-15. a) Curvas reológicas de los fluidos pseudoplásticos y b) su ajuste a la ley de potencia.

Tabla 4-3. Parámetros de la ley de potencia de las soluciones de CMC.

| CMC% | k (Pa·s ⁿ) | n | Intervalo de $\dot{\gamma}$ (s ⁻¹) | ρ (kgm ³) |
|------|--------------------------|--------|--|----------------------------|
| 2.00 | 21.58 | 0.3939 | 0.8 a 148 | 1003 |
| 1.50 | 14.33 | 0.4074 | 1 a 100 | 1003 |

Posteriormente, en un intervalo de 50 a 500 rpm, con las dos soluciones de CMC, se midió la potencia consumida experimentalmente por cada impulsor. De manera paralela, para validar las simulaciones, con los parámetros de la ley de potencias de las soluciones de CMC, se ejecutaron simulaciones. La comparación de los resultados experimentales y los numéricos se presentan en las Figura 4-16 y 4-19. Como puede observarse, los resultados numéricos predicen a los resultados experimentales. Los errores máximos y mínimos entre los resultados obtenidos con de CMC al 2% se presentan en la Tabla 4-4.

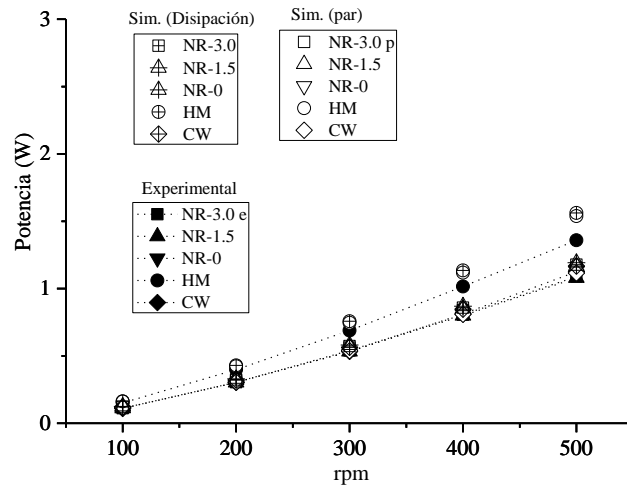


Figura 4-16. Validación experimental de los resultados de simulación con fluido pseudoplástico (CMC al 2%, $k=21.58$ y $n=0.3938$).

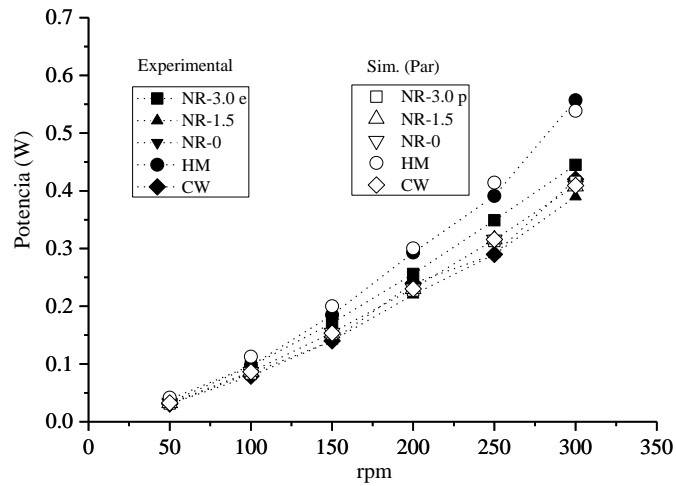


Figura 4-17. Validación experimental de los resultados de simulación con fluido pseudoplástico (CMC al 1.5%, $k=14.33$ y $n=0.4074$).

Tabla 4-4. Error máximo y mínimo entre las mediciones experimentales y numéricas de potencia para el fluido pseudoplástico (CMC al 2%).

| IAC | % error máximo | rpm | % error mínimo | rpm |
|--------|----------------|-----|----------------|-----|
| NR-3.0 | 9.1 | 100 | 3.9 | 300 |
| NR-1.5 | 10.5 | 100 | 6.5 | 400 |
| NR-0 | 8.5 | 200 | 3.2 | 500 |
| HM | 13.2 | 500 | 6.0 | 200 |
| CW | 5.8 | 100 | 0.3 | 400 |

4.3.2 Patrones de flujo y generación de vórtice con fluidos pseudoplásticos

En las Figura 4-18 y 4-22 se muestran los patrones de flujo y los contornos de fases, respectivamente, generados por los impulsores NR-3.0, NR-0, HM y CW a 13 W de potencia inyectada en presencia de los fluidos pseudoplásticos. En estas figuras, el lado izquierdo de cada impulsor presenta resultados de la simulación obtenido con CMC al 2.0% ($k=21.58$, $n=0.3939$) y el derecho con CMC al 1.5% ($k=14.33$, $n=0.4074$). Los números que los acompañan corresponden a las velocidades de agitación en rpm. El plano donde se presentan los resultados corresponde a $z=0$.

Los patrones de flujo que se generaron en planos equivalentes a los de la Figura 4-4 a 4-6 tiene una estructura similar a los presentados en la Figura 4-18. En general, puede observarse que éstos forman los ya mencionados vórtices, uno arriba y otro por debajo del centro de los impulsores. Los patrones de flujo sugieren que el fluido circula por todo el tanque, i.e. eventualmente todo el fluido pasaría en la cercanía de los impulsores, donde los gradientes de velocidad alcanzan los valores más altos. Puede observarse que el impulsor NR-0 gira a la velocidad más alta, seguido por el NR-3.0, el CW y finalmente el HM. Este mismo orden se presentó cuando los IAC fueron evaluados con los diferentes fluidos newtonianos, ver Figura 4-4 a 4-6 y Figura 4-12 y 4-16. Respecto a los dos fluidos pseudoplásticos evaluados, puede

verse que al simular con CMC a 1.5% los impulsores rotan a mayor velocidad que con CMC 2.0%.

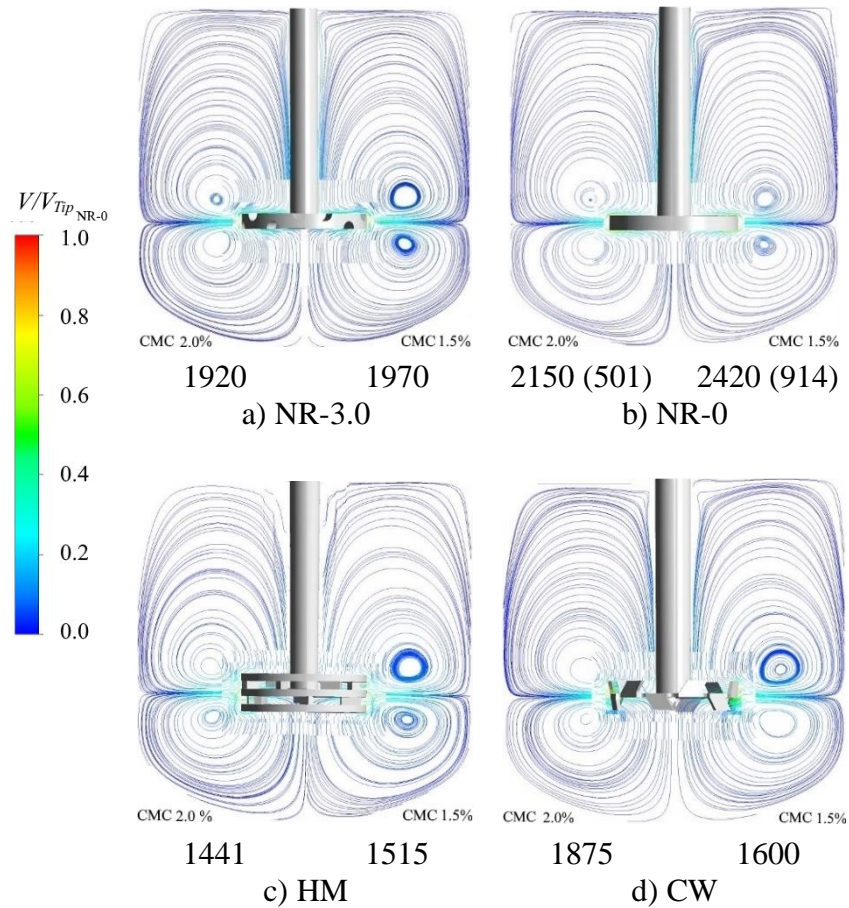


Figura 4-18. Patrón de flujo generado por los IAC a una potencia inyectada de 13W con dos fluidos pseudoplásticos generados a partir de CMC.

Comparando las velocidades de rotación de los IAC a 13 W de potencia inyectada en presencia de los fluidos newtonianos y adelgazantes, se observa que los impulsores rotan a velocidades significativamente más altas en presencia de los últimos. Por ejemplo, en el caso del NR-3.0 a 0.95 Pa·s éste gira a 1393 rpm, Figura 4-4 , mientras que con CMC 1.5% gira a 1970 rpm, Figura 4-18 a). Entonces resulta claro que, la reología del fluido de proceso influye significativamente en la velocidad de rotación de los impulsores. Esto provocaría que los gradientes de velocidad en la cercanía de los impulsores sean de mayor magnitud, y consecuentemente, como veremos más adelante, se generen valores de disipación de energía más altos.

Los contornos de fases de la Figura 4-19 muestran que el vórtice que se forma con los fluidos no newtonianos evaluados presenta poca profundidad, lo cual también concuerda con las observaciones experimentales, y por lo tanto el efecto de la gravedad i.e. el Fr , al igual que con los fluidos newtonianos, podría ser despreciado.

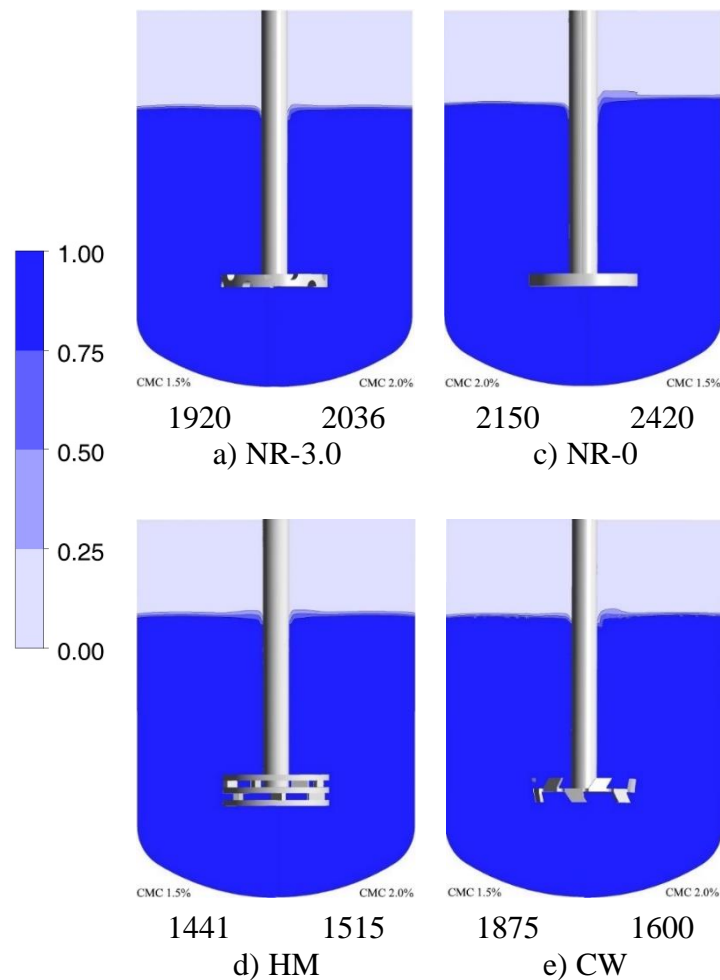


Figura 4-19. Vórtice generado en la interfase líquido-gas de los fluidos pseudoplásticos a 13 W. El número entre paréntesis corresponde al Re .

4.3.3 Determinación de la constante de Metzner y Otto para los IAC estudiados

Como fue descrito en la sección 2.4.2, en el régimen de flujo laminar, la tasa de corte promedio, $\dot{\gamma}_{prom}$, está relacionada linealmente con la velocidad de agitación (N). Y la constante de proporcionalidad es la constante de Metzner y Otto, K_s . Entonces, para determinar K_s bastaría determinar la pendiente de la gráfica de $\dot{\gamma}_{prom}$ vs N . A su vez, para determinar $\dot{\gamma}_{prom}$, debe encontrarse la viscosidad aparente, η_a , y utilizar los datos reológicos k y n de la ley de potencias, ecuación (2.16).

Experimentalmente, de acuerdo al método de Metzner y Otto (1957), para determinar η_a , habría que diluir o concentrar al fluido newtoniano hasta que el sistema agitado que lo contiene registre la misma potencia que el tanque que contiene a un fluido pseudoplástico. Sin embargo, para determinar η_a , en esta tesis se utilizó la metodología de Metzner y Otto (1957) adaptada a herramientas de CFD. Esta adaptación, recientemente ha sido utilizada por Ramírez-Muñoz et al. (2017). La metodología se describe a continuación. Si los resultados numéricos de consumo de potencia del fluido pseudoplástico, P_s , son conocidos, entonces, se establece una viscosidad newtoniana, η y una densidad, ρ , que se ajusten a las ecuaciones (4.2) y (4.3), las cuales son aplicables para las soluciones preparadas a partir del concentrado de glucosa que se utilizó en este trabajo, donde x es la fracción masa de glucosa (Ramírez-Muñoz et al., 2017).

$$\eta = 4.169x^3 - 42242x^2 + 14259x - 1603 \quad (4.2)$$

$$\rho = 974.92x + 997.62 \quad (4.3)$$

Con los parámetros η y ρ establecidos se ejecuta una simulación y se obtiene la potencia newtoniana, P_n . Si P_s y P_n son iguales, entonces la viscosidad propuesta corresponde a η_a . Si no, se propone otra η y se ajusta ρ , nuevamente se ejecuta la simulación y el proceso se repite hasta que P_s y P_n sean aproximadamente iguales.

Entonces, para determinar K_s de los IAC estudiados en este trabajo se utilizaron los valores de P_s , obtenidos con CMC al 1.5 %, La η_a seleccionada fue aquella que generó diferencias de P_s y P_n menores al 0.5%. En la Figura 4-20 se muestra la gráfica de $\dot{\gamma}_{prom}$ vs N . En esta figura se muestran los valores de la pendiente, i.e. K_s , que se ajustan a las rectas. En esta figura también se presentan los valores de K_s para los impulsores NR-1.5 y NR-0, pero, para fines de claridad, no fueron incluidas en la gráfica.

Por otro lado, una vez que se determinó η_a y ρ para cada velocidad de agitación de cada impulsor, entonces es posible generar la curva de potencia no newtoniana de los IAC estudiados. Las curvas de potencia no newtoniana se muestran en la Figura 4-21, en la que el Re_a es definido de acuerdo a la ecuación (2.14).

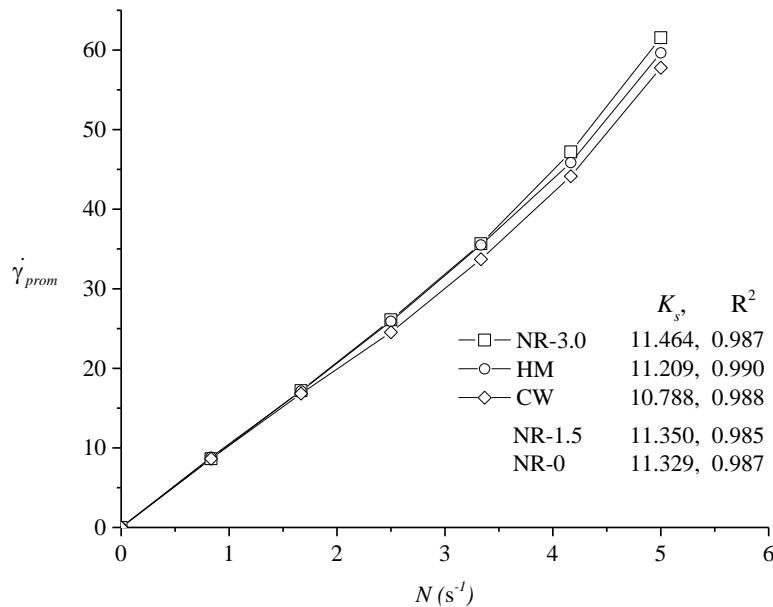


Figura 4-20. $\dot{\gamma}_{prom}$ vs N para determinar la constante de Metzner y Otto para los IAC estudiados.

La utilidad de la metodología de Metzner y Otto ha quedado demostrada de manera efectiva por muchos años, durante el escalamiento de equipos de mezclado, permitiendo predecir los consumos de potencia con errores del 25-30% (Kelly y Gigas, 2003). Para un impulsor que operará a una determinada velocidad, y del que

se conoce su K_s , entonces es posible conocer su $\dot{\gamma}_{prom}$, con ésta se puede determinar la η_a , a su vez el Re_a y en consecuencia el N_p , del que es posible determinar la potencia demandada por el impulsor.

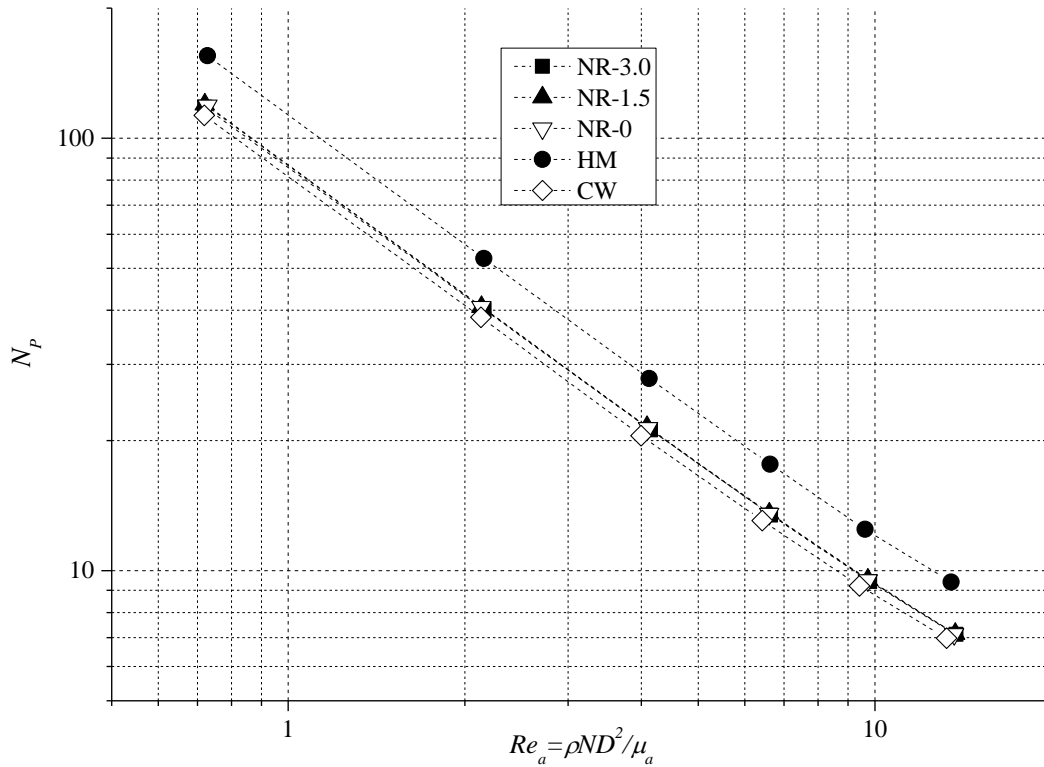


Figura 4-21. Curva de potencia no newtoniana de los IAC estudiados.





Es aceptado que el valor de K_s depende del tipo de impulsor, pero es independiente del tamaño de este, i.e. el escalamiento es directo (Harnby et al., 1992). La dependencia del valor de K_s respecto de la reología de los fluidos que se ajustan a la ley de potencia también ha sido investigada. Tanguy et al. (1996) determinaron que el valor de K_s , depende de manera muy débil respecto del índice de flujo (n), por lo tanto, puede considerarse como un valor constante. Ramírez-Muñoz et al. (2017) encontraron que K_s es independiente de la reología del fluido.


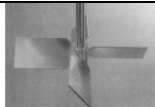

Al comparar la demanda de potencia de los IAC estudiados en este trabajo, en la curva de potencia no newtoniana, Figura 4-21, puede observarse que el impulsor HM es el que consume mayor potencia, mientras que el resto de los impulsores

tienen los menores consumos y son muy parecidos entre sí. Por otro lado, como fue mencionado previamente, la reducción del tamaño de partículas en los procesos de desaglomeración está relacionada con la tasa de corte, entonces si se comparan dos impulsores a la misma velocidad de agitación, en principio, el que presente el K_s más grande debería tener el mejor desempeño. En este sentido, puesto que los impulsores tipo Norstone tiene los valores más altos de K_s y presentan un menor consumo de potencia, estos presentarían mayores ventajas.

En la Tabla 4-5 se muestran los valores de K_s reportados para varios impulsores. Puede observarse que, en general, los que son considerados IAC presentan los más altos valores de K_s . En contraste, los impulsores que favorecen la generación de bombeo (A200 y A315), presentan los valores más pequeños. Aunque la turbina Rushton se encuentra entre los impulsores que pueden generar altos niveles de esfuerzo cortante (ver Figura 2-8), estrictamente este impulsor no se considera como un IAC, no obstante, sus valores de K_s reportados en la literatura son similares, incluso algunos autores lo reportan más grande, a los reportados para IAC. Por lo tanto, debido a que las diferencias entre los valores de K_s de los diversos IAC que se han presentado son mínimas, no sería posible establecer una correlación concluyente entre la capacidad de desaglomeración de los diversos IAC y sus valores de K_s .

Tabla 4-5. K_s para diferentes impulsores.

| | Impulsor | K_s | Referencia |
|-----|---|-------|------------------------|
| IAC |  | 11 | Foucault et al. (2005) |
| |  | 11 | |
| |  | 11 | |
| |  | 12 | |

| | | | | |
|----------------|---|---------|------|-----------------------------|
| Convencionales |  | Rushton | 11.1 | Ramírez-Muñoz et al. (2017) |
| | | | 12 | Paul et al. (2004) |
| | | | 11.8 | Nagata (1975) |
| | | | 11.5 | Harnby et al. (1992) |
| | | | 10 | Foucault et al. (2005) |
| |  | A200 | 8.5 | (Kelly y Gigas, 2003) |
| |  | A315 | 8.5 | |

4.3.4 Disipación viscosa y bombeo efectivo con fluidos pseudoplásticos

Para obtener un mejor entendimiento de las capacidades de disipación viscosa de los tres tipos de impulsores estudiados se ejecutaron simulaciones con los fluidos pseudoplásticos a 4 y 12 W de potencia inyectada. Los contornos de disipación viscosa presentes sobre la superficie de los impulsores obtenidos de simulaciones con CMC al 1.5% se presentan en la Figura 4-22. Las imágenes mostradas en esta figura fueron elaboradas con la misma estrategia utilizada en la Figura 4-11, es decir, sólo se muestran los valores de disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$.

Al comparar los contornos generados con el fluido pseudoplástico, Figura 4-22, y con el fluido newtoniano, Figura 4-11 es evidente que, a una misma potencia inyectada, se generan disipaciones de mayor magnitud con el fluido no newtoniano. Por ejemplo, a 4W, con el fluido pseudoplástico los contornos de disipación $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ cubren gran parte de la superficie del impulsor NR-3.0; con el newtoniano, solo los bordes del impulsor sobrepasan ese valor. Para el HM la disipación en las cuchillas ya es mayor a ese valor y se extiende en gran parte esta región; en su contraparte newtoniana, solo los bordes de los anillos presentan disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$. A 13 W las diferencias son aún más importantes, toda la superficie de los surcos del NR-3.0 operando con el fluido pseudoplástico ya

presentan disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$. En el caso del CW, los contornos de disipación con el fluido pseudoplástico respecto del newtoniano, también aumentan, pero esto no es tan marcado como en el NR-3.0 y el HM.

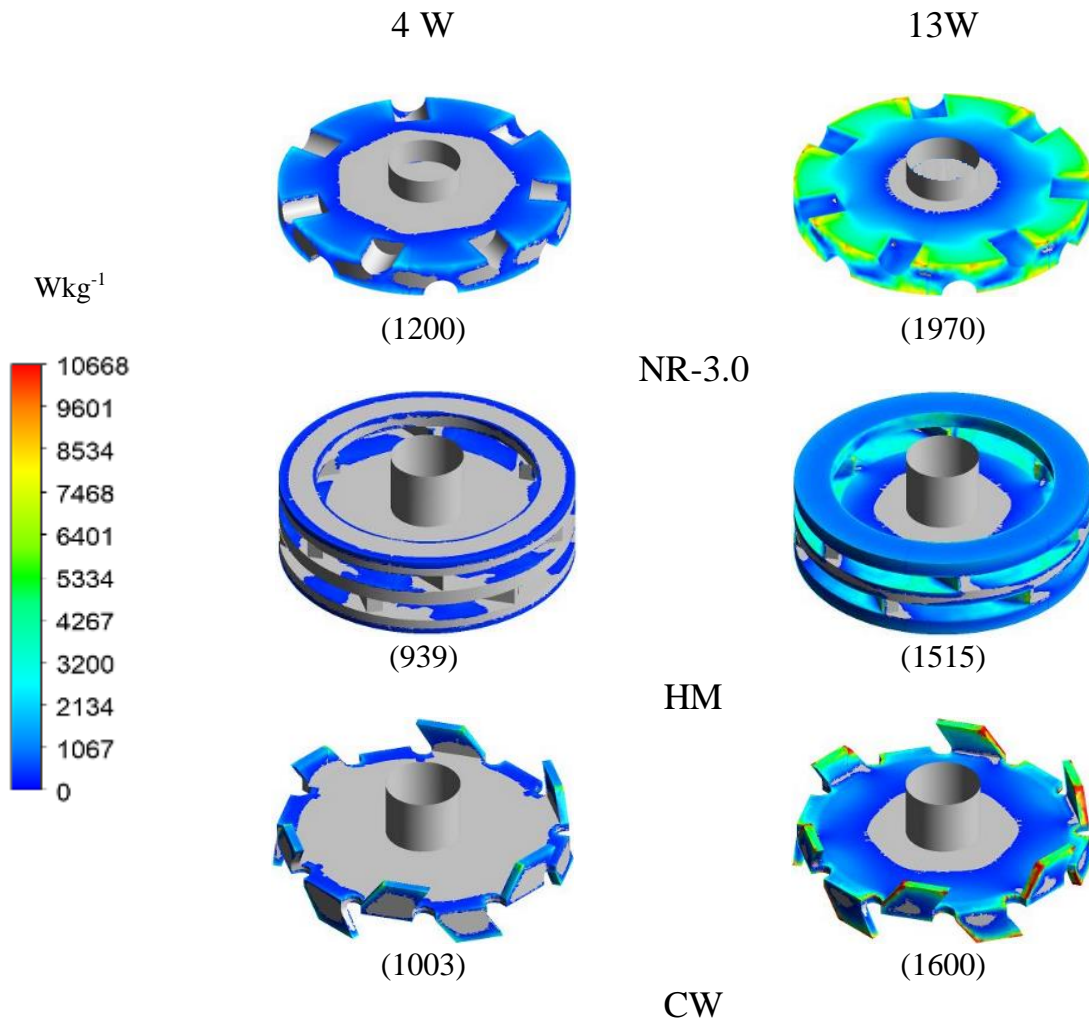


Figura 4-22. Disipación viscosa $>300 \text{ Wkg}^{-1}$ sobre la superficie de los impulsores utilizando un fluido pseudoplástico, CMC 1.5%. Los números entre paréntesis corresponden a la velocidad de agitación en rpm.

Para investigar los valores promediados de la disipación viscosa en los volúmenes cercanos a la superficie de los diferentes IAC se ejecutaron simulaciones a 4W de potencia inyectada con los dos fluidos pseudoplásticos y con el fluido

newtoniano a 0.95 Pa·s. Los valores de $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$ obtenidos de las simulaciones se comparan en la Figura 4-23. Nuevamente, $\bar{\varepsilon}_i$ es la disipación viscosa promediada en el i volumen definido en la Figura 3-7 ($i=ZC, ZB, V1, V2, V3$ y $V4$), y $\bar{\varepsilon}$ es la disipación viscosa promediada en todo el tanque.

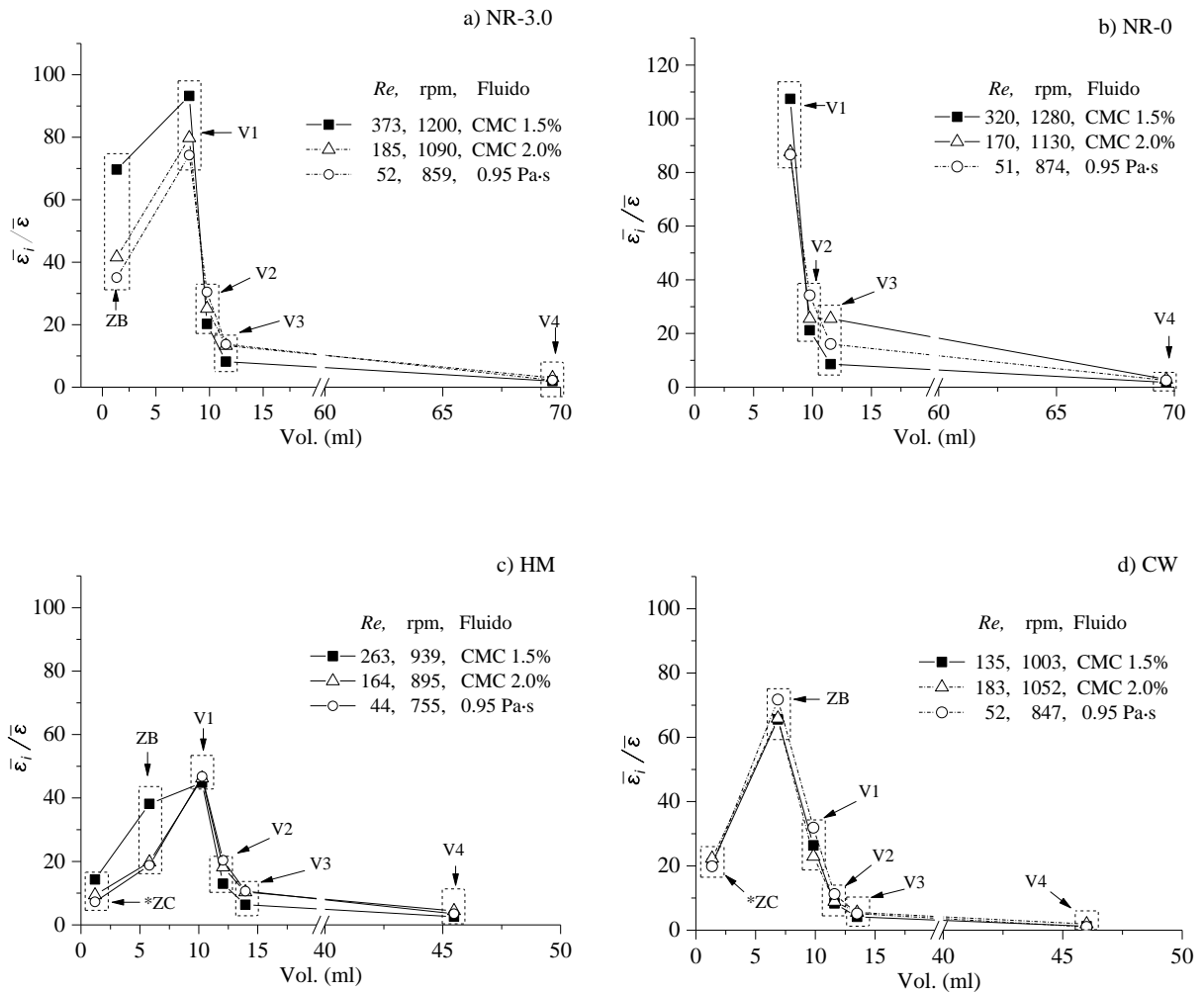


Figura 4-23. Disipación viscosa como función de la reología del fluido a 4W de potencia inyectada

Al igual que en las Figura 4-12 y 4-13, se observa que la disipación de energía, se focaliza en regiones cercanas a los impulsores, ZB y V1, disminuyendo drásticamente para zonas más alejadas. Los impulsores tipo Norstone, siguen presentando los valores más altos de $\bar{\varepsilon}_i / \bar{\varepsilon}$. Respecto de la reología, se observa que

con el fluido de CMC al 1.5% se presentan los valores más altos de disipación seguido del CMC al 2.0% y finalmente el fluido newtoniano. Se puede ver una relación directa entre la velocidad de rotación y los valores de disipación generados por los impulsores. Para calcular el Re de las curvas de los fluidos pseudoplásticos primero se calculó la respectiva η_a como se describió en la sección 4.3.3. Puede verse que los fluidos que más se adelgazan (i.e. Re más elevados) permiten generar mayores gradientes de velocidad y en relación directa mayores valores de disipación son generados.

Para comparar la capacidad de bombeo de los IAC operando en presencia de un fluido pseudoplástico, de manera similar que para la Figura 4-14, de los resultados de las simulaciones fueron extraídos los valores de Q en donde la disipación es máxima, V1 para los impulsores tipo Norstone y el HM, y ZB para el CW. Con éstos se calcularon los $N_{Q,ef}$ y la comparación para los diferentes IAC se muestran en la Figura 4-24. En ésta se observa que el CW, nuevamente, es el que presenta los valores de $N_{Q,ef}$ más grandes, seguido del HM y finalmente los tipo Norstone. En el Re_a más grande evaluado las capacidades de bombeo, del HM y NR-3.0, representan el 69 y 40%, respectivamente, de la del CW. En el caso de los impulsores tipo Norstone, nuevamente destaca que el tamaño del surco del NR-3.0 favorece a la generación de bombeo.

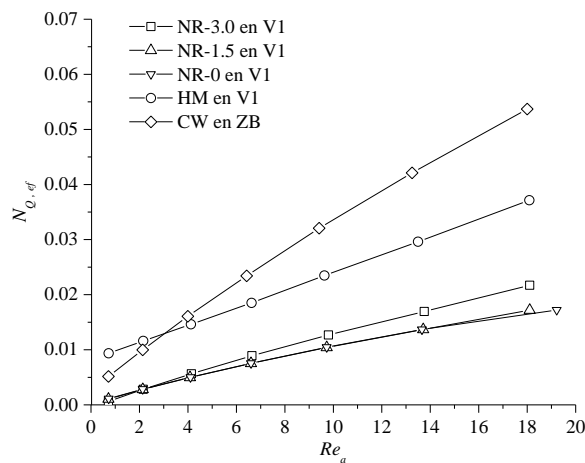


Figura 4-24. Bombeo efectivo con fluido pseudoplástico.

4.3.5 Desaglomeración de partículas de polvo mineral.

Hasta ahora las simulaciones han sido validadas principalmente con mediciones experimentales de consumo de potencia. Sin embargo, también es de importancia práctica correlacionar las capacidades de disipación viscosa de los impulsores con datos experimentales de reducción de tamaños de partícula. Para este fin se utilizaron resultados de simulaciones reportados por Ramírez-Gómez et al. (2015) para el HM y de la turbina Rushton. Los resultados numéricos de estos autores fueron correlacionados con las capacidades experimentales de reducción de tamaños de partícula de estos impulsores, ver sección 3.3.2.

Los resultados se muestran en la Tabla 4-6. En este caso V_{imp} corresponde al volumen barrido por el impulsor, en el caso del HM este corresponde al definido como la suma de ZB y VC de las Figura 3-7. Para la turbina Rushton, ZB sería la región que barren sus paletas y VC es la región comprendida ente el eje de rotación y las paletas. Como puede observarse en los resultados de simulación, a las tres potencias probadas, la turbina Rushton presenta valores más grande de $\bar{\varepsilon}_{V_{imp}}/\bar{\varepsilon}$, en cambio, para $\bar{\varepsilon}_{ZB}/\bar{\varepsilon}$ los valores de la Rushton sólo son más grandes a 4 W. A 12.9 W se igualan y a 23.5 W el HM supera a la Rushton.

Tabla 4-6. Capacidad de reducción de tamaños de partículas para el HM y la turbina Rushton en función de su capacidad de disipación viscosa

| Potencia inyectada Experimental/ Simulación (W) | Impulsor | Simulaciones | | Experimentos | | |
|---|----------|---|--|--|----------------|-------|
| | | $\bar{\varepsilon}_{V_{imp}}/\bar{\varepsilon}$ | $\bar{\varepsilon}_{VB}/\bar{\varepsilon}$ | Masa que pasó por la malla de 400 mesh (g) | Diferencia (%) | DS |
| 4/4.3 | Rushton | 26.4 | 31.1 | 0.590 | -5.64 | 0.005 |
| | HM | 12.0 | 20.8 | 0.557 | | 0.011 |
| 13/12.9 | Rushton | 27.6 | 32.0 | 0.661 | +0.27 | 0.063 |
| | HM | 18.1 | 32.0 | 0.663 | | 0.075 |
| 24/23.5 | Rushton | 28.7 | 33.0 | 0.804 | +45.02 | 0.027 |
| | HM | 22.9 | 41.1 | 1.166 | | 0.088 |

Los resultados de $\bar{\varepsilon}_{ZB}/\bar{\varepsilon}$ de las simulaciones están de acuerdo con las capacidades de reducción de tamaño de las partículas, en particular, en el experimento a 24 W, el HM tuvo mayor eficiencia en la generación de polvos finos. En contraste a 4 W la Rushton resulto ser mejor. Estos resultados evidencian que la zona efectiva para la reducción de tamaño de las partículas es ZB, además, en el caso del HM, ZB adquiere mayor importancia cuando la potencia se incrementa, i.e. cuando el impulsor gira a velocidades más elevadas.

Capítulo 5. Conclusiones

Mediante el empleo de herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional y mediciones experimentales de potencia, se estudió la hidrodinámica generada por los impulsores de alto corte tipo Norstone, Hockmeyer y Cowles. Estos impulsores son muy utilizados en la industria en procesos de dispersión sólido-líquido, e.g. en la producción de pinturas y recubrimientos, pero su desempeño hidrodinámico ha sido escasamente estudiado. El estudio se realizó en el régimen de flujo laminar y de transición y se consideró el efecto de la reología del fluido de proceso. Para ello, a partir de un concentrado de glucosa grado alimenticio, se generaron fluidos newtonianos en un intervalo de viscosidades de 0.95 a 2.5 Pa·s, mientras que, fluidos pseudoplásticos fueron preparados a partir de soluciones al 1.5 y 2.0% de carboximetilcelulosa (CMC). Se generaron las curvas de potencia newtoniana y no newtoniana. Las curvas de potencia indican que el impulsor Hockmeyer presenta el consumo más alto de potencia, mientras que los impulsores tipo Norstone y Cowles presentan un consumo muy parecido. Los resultados numéricos de consumo de potencia predicen, con un error máximo del 13.2%, a los obtenidos de forma experimental.

Los campos de velocidad obtenidos de las simulaciones muestran la formación de dos vórtices, uno arriba y otro por debajo del centro de los impulsores y muestran un patrón de flujo característico de los impulsores de tipo radial. Los vórtices desempeñarían una función importante para la incorporación de polvos y partículas que tienden a flotar durante los procesos de dispersión, ya que promueven que eventualmente todo el fluido y las partículas que transporta circulen por zonas cercanas a la superficie de los impulsores. Estas zonas son de interés especial para los procesos de desaglomeración, debido a ahí se presentan los valores más altos de disipación viscosa y las partículas que circulen por esta zona recibirían la energía necesaria que provocaría la reducción de su tamaño. Los datos de simulación permitieron cuantificar la energía disipada en estas zonas. En particular, las zonas en contacto directo con la superficie de los impulsores presentan los valores más

altos de disipación viscosa. De esta manera la cuantificación del flujo que circula por esta región permite definir el bombeo efectivo generado por cada impulsor.

Cuando los impulsores se compararon a una misma potencia inyectada, con fluidos newtonianos y pseudoplásticos, se encontró que los impulsores tipo Norstone son capaces de generar los valores más altos de disipación viscosa, seguido por el impulsor Cowles y finalmente el impulsor tipo Hockmeyer. Por otro lado, el impulsor Cowles produce los más altos valores de bombeo efectivo, seguido del Hockmeyer, y por último, los tipo Norstone.

Al comparar los valores de disipación viscosa en función de la reología del fluido de proceso se encontró que a valores altos de viscosidad se presentan menores valores de disipación. Una viscosidad elevada provocaría que el fluido circule de manera más ordenada por lo que los gradientes de velocidad disminuirían de manera importante. Este efecto fue más pronunciado cuando se evaluó el desempeño de los impulsores con los fluidos pseudoplásticos. Ya que la viscosidad de éstos disminuye con el aumento de la tasa de corte, i.e, con el incremento de la velocidad de agitación, a una misma potencia inyectada, pudieron obtenerse valores de disipación más altos que los conseguidos con el fluido newtoniano.

Aplicando la metodología de Metzner y Otto (1957) adaptada a herramientas de CFD fue posible obtener las constantes de Metzner y Otto (K_s) de los impulsores de alto corte estudiados. Los valores de estas constante son similares a las reportadas para otros impulsores de alto corte reportados en la literatura.

El estudio también fue planteado para evaluar el efecto del tamaño de los surcos de los impulsores tipo Norstone. Los resultados indican que la función principal de los surcos es la generación de bombeo. Sin embargo, cuando estos impulsores giran a altas velocidades, en los surcos se generan altos valores de disipación viscosa, los cuales son de magnitudes similares a los máximos encontrados para el impulsor Hockmeyer.

Para el impulsor Hockmeyer fue posible correlacionar los resultados numéricos de disipación viscosa con experimentos de reducción de tamaño de partículas de polvos de la industria minera. Los resultados fueron comparados con los producidos por una turbina Rushton. Comparando la disipación viscosa en la zona que barren las cuchillas o paletas de ambos impulsores, el Hockmeyer presenta valores más grandes y en relación directa, este impulsor fue capaz de generar una mayor cantidad de polvos finos. De acuerdo a la revisión de la literatura, en el régimen laminar, no existen estudios previos que relacionen la reducción de tamaños de partículas con la disipación viscosa generada por impulsores.

Capítulo 6. Referencias

- Abrahão, R. T. (2013). *Study on the Dispersion of Titanium Dioxide Pigment Particles in Water*. PhD. Thesis, Universidad de Sao Paulo, Sao Paulo, Brasil.
- Adams, L. W. (2009). *Experimental and Computational Study of Non-Turbulent Flow Regimes and Cavern Formation of Non-Newtonian Fluids in a Stirred Tank*. PhD. Thesis, University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham, UK.
- Andersson, B., Andersson, R., Hakansson, L., Mortensen, M., Sudiyo, R., & Van Wachen, B. (2012). *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. United Kingdom, Cambridge: Cambridge University Press.
- Ansys. (2013). *ANSYS Fluent Theory Guide*.
- ANSYS Inc. (2001). Modeling Flows in Moving Zones. *FLUENT 6.0 User's Guide*, 1–68. Recuperado a partir de <http://www.afs.enea.it/fluent/Public/Fluent-Doc/PDF/>
- Ascanio, G., Castro, B., & Galindo, E. (2004). Measurement of power consumption in stirred vessels—a review. *Chemical Engineering Research and Design*, 82(September), 1282–1290. <https://doi.org/10.1205/cerd.82.9.1282.44164>
- AzoMateriales y Malvern Analytical. (2005). Titanium Dioxide Dispersion Monitoring for Pigment Applications Using the Mastersizer 3000 From Malvern Instruments. Recuperado el 30 de noviembre de 2017, a partir de <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=2809#>
- Bates, R. L., & Fondy, P. L. (1963). WM mwfj United States Patent 0.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2007). *Transport Phenomena*. Wiley. Recuperado a partir de <https://books.google.com.mx/books?id=L5FnNIIaGfcC>
- Ciofalo, M., Brucato, A., Grisafi, F., & Torracca, N. (1996). Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers. *Chemical Engineering Science*, 51(14), 3557–3573.

- Coroneo, M., Montante, G., Paglianti, A., & Magelli, F. (2011). CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks : Numerical issues about the RANS simulations. *Computers and Chemical Engineering*, 35(10), 1959–1968. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.12.007>
- Curiel Villasana, F. A. (2004). *Predicción de propiedades ópticas de películas inhomogéneas por medio de modelos de transferencia radiativa y su aplicación en pinturas*. Tesis de Doctorado, Universidad Nacional Autónoma de México. Recuperado a partir de 123
- Dickey, D., & Fasano, J. B. (2004). How Geometry & Viscosity Influence Mixing. *Chemical Engineering*, 2, 42–46.
- Duivenvoorde, F. L. (2000). *Pigment dispersing in powder coatings - synthesis and use of block copolymer dispersing agents*. Department of Chemical Engineering and Chemistry. PhD. thesis, TECHNISCHE UNIVERSITEIT EINDHOVEN, EINDHOVEN, NETHERLAND. <https://doi.org/10.6100/IR539336>
- DuPont. (2007). DuPont™ Ti-Pure Titanium Dioxide. Recuperado a partir de https://www.chemours.com/Titanium_Technologies/es_US/tech_info/literature/Plastics/PL_B_Polymers_Light_Science.pdf
- Egerton, T. A., & Tooley, I. R. (2014). Physical characterization of titanium dioxide nanoparticles. *International Journal of Cosmetic Science*, 36(3), 195–206. <https://doi.org/10.1111/ics.12113>
- Firestone, D. (2011). Mixing impeller with grinding pegs. United States. Recuperado a partir de Oct. 4
- Foucalt, S., Ascanio, G., & Tanguy, P. A. (2005). Power Characteristics in Coaxial Mixing : Newtonian and Non-Newtonian Fluids, 5036–5043.
- Furling, O., Tanguy, P. A., Henric, P., Denoel, D., & Choplin, L. (2001). New dispersing turbines for the preparation of concentrated suspensions. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 34(5), 634–639. <https://doi.org/10.1252/jcej.34.634>
- Futek. (2017). Rotary Torque Sensor – Hex-Drive. Recuperado el 20 de julio de 2011, a partir de http://www.futek.com/files/pdf/Product_Drawings/trh300.pdf
- García-Cortés, D., & Jáuregui-Haza, U. (2006). Hidrodinámica en tanques

- agitados con turbinas de disco con paletas planas. *Revista Facultad de Ingeniería*, 38(Septiembre), 97–113. Recuperado a partir de http://www.scielo.org.co/scielo.php?pid=S0120-62302006000400009&script=sci_pdf
- Hansen, S., Khakhar, D. V., & Ottino, J. M. (1998). Dispersion of solids in nonhomogeneous viscous flows. *Chemical Engineering Science*, 53(10), 1803–1817. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00010-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00010-4)
- Harnby, N., Edwards, M. F., & Nienow, A. W. (1992). *Mixing in the process industries* (Second edi). Oxford: Butterworth-Heinemann Ltd.
- Hockmeyer. (2017). Hockmeyer wed. Recuperado el 21 de noviembre de 2017, a partir de <http://www.hockmeyer.com/products/high-viscosity-mixers/disperser-blades/d-style-ring-blade-detail.html>
- Hockmeyer, H. (2010). *A practical Guide to High-Speed Dispersion*.
- Kelly, W., & Gigas, B. (2003). Using CFD to predict the behavior of power law fluids near axial-flow impellers operating in the transitional flow regime. *Chemical Engineering Science*, 58(10), 2141–2152. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(03\)00060-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(03)00060-5)
- Kippax, P. (2005). Why Particle Sizing? *Paint & Coatings Industry magazine*, 3, 2–4.
- Klein, S., & Hockemeyer, H. (1963). Rotary Mixing Blade.
- Kumar, B. (2010). Energy Dissipation and Shear Rate with Geometry of Baffled Surface Aerator. *Chemical Engineering Research Bulletin*, 14(2), 92–96. <https://doi.org/10.3329/cevb.v14i2.4910>
- Lamberto, D. J., Alvarez, M. M., & Muzzio, F. J. (1999). Experimental and computational investigation of the laminar flow structure in a stirred tank. *Chemical Engineering Science*, 54(7), 919–942. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(98\)00275-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(98)00275-9)
- Luan, D., Chen, Q., & Zhou, S. (2014). Numerical simulation and analysis of power consumption and Metzner-Otto constant for impeller of 6PBT. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 27(3), 635–640. <https://doi.org/10.3901/CJME.2014.03.635>
- Marshall, E. M., & Bakker, A. (2001). TECHNICAL NOTES TN144

- Computational Fluid Mixing. *Fluid Dynamics*, 1–94.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (1991). *Operaciones unitarias en Ingeniería Química* (cuarta edi). Madrid, España: McGraw-Hill/Interamericana.
- Metzner, A., & Otto, R. E. (1957). Agitation of Non-Newtonian Fluids. *A.LCh.E Journal*, 3(1), 3–10.
- Mixtec-Impellers. (2012). Mixers, Agitators and Pumps. Recuperado a partir de <https://get.google.com/albumarchive/117654828674615633303/album/AF1QipMJpYKBm2De0SxQHgxFSyEGmFpDcjAWO29dbibL>
- Montante, G., Bourne, J. R., & Magelli, F. (2008). Scale-Up of Solids Distribution in Slurry , Stirred Vessels Based on Turbulence Intermittency, 3438–3443.
- Nagata, S. (1975). *Mixing Principles and application*. Tokyo: Jonh Wiley & Sons.
- Nienow, a. W. (1997). On impeller circulation and mixing effectiveness in the turbulent flow regime. *Chemical Engineering Science*, 52(15), 2557–2565. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(97\)00072-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(97)00072-9)
- Norstone, I. (2012). Polyblade Impellers. Recuperado el 6 de marzo de 2017, a partir de <http://www.norstoneinc.com/our-products/polyblade/>
- Oldshue, J. Y. (1983). *Fluid mixing technology and practice*.
- Panacek, M. (1998). *hydrodynamics of STR portugal.pdf*. PhD Thesis, Universidade do Porto, Porto, Portugal.
- Patton, T. C. (1979). *Paint Flow and Pigment Dispersion: A Rheological Approach to Coating and Ink Technology*. Wiley. Recuperado a partir de <https://books.google.com.mx/books?id=rZhfQgAACAAJ>
- Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., & Kresta, S. M. (2004). *HANDBOOK OF INDUSTRIAL MIXING Edited by*. New Jersey.
- Ramírez-Gómez, R., García-Cortés, D., Martínez-de Jesús, G., González-Brambila, M. M., Alonso, A., Martínez-Delgadillo, S. A., & Ramírez-Muñoz, J. (2015). Performance Evaluation of Two High-Shear Impellers in an Unbaffled Stirred Tank. *Chemical Engineering & Technology*, 38(9),

1519–1529. <https://doi.org/10.1002/ceat.201400792>

- Ramírez-Muñoz, J., Guadarrama-Pérez, R., & Márquez-Baños, V. E. (2017). A direct calculation method of the Metzner-Otto constant by using computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Science*. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2017.09.023>
- Ramírez-Muñoz, J., Martínez-de-Jesús, G., Soria, A., Alonso, A., & Torres, L. G. (2016). Assessment of the effective viscous dissipation for deagglomeration processes induced by a high shear impeller in a stirred tank, 27, 1885–1897. <https://doi.org/10.1016/j.appt.2016.06.019>
- Rice, M., Hall, J., Papadakis, G., & Yianneskis, M. (2006). Investigation of laminar flow in a stirred vessel at low Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science*, 61(9), 2762–2770. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2005.10.074>
- Rushton, J. H., Costich, E. W., & Everett, H. J. (1950). Power characteristics of mixing impellers. *Chem. Eng. Progr.*, 46, 395–404.
- Stankiewicz, A. I., & Moulijn, J. A. (2000). Process Intensification: Transforming Chemical Engineering. *Chemical Engineering Progress*, 96(1), 22–33. <https://doi.org/10.1205/psep.04241>
- Steinmetz, M. (1993). Composite Polyurethane Mixing Impeller. United States. Recuperado a partir de Apr. 13
- Tanguy, P. A., Thibault, F., & Brito De la Fuente, E. (1996). A New Investigation of the Metzner-Otto Concept for Anchor Mixing Impellers. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 74(2), 222–228. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450740207>
- Unadkat, H., Rielly, C. D., & Nagy, Z. K. (2011). PIV study of the flow field generated by a sawtooth impeller. *Chemical Engineering Science*, 66(21), 5374–5387. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.07.046>
- VMA-Getzmann. (2003). *Innovative Dispersion Systems for Laboratory and Pilot Plant*.
- VMA-Getzmann. (2017). Introduction to Dispersion Technology with the DISPERMAT Dissolver. Recuperado el 20 de julio de 2011, a partir de http://www.vma-getzmann.com/english/products_for_lab_and_pilot_plant_/dissolver/diss

olver_dispermat_ds/page_sta_1859.html

Xie, L., Rielly, C. D., Eagles, W., & Özcan-Taşkin, G. (2007). Dispersion of Nano-Particle Clusters Using Mixed Flow and High Shear Impellers in Stirred Tanks. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(5), 676–684. <https://doi.org/10.1205/cherd06195>