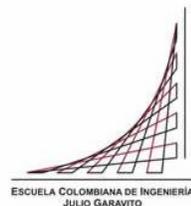


Maestría en Ingeniería Civil

**Modelación de Flujo en 3-D en Procesos de Mezcla Rápida en
Plantas de Tratamiento Utilizando OpenFOAM**

Sebastián Alonso Aponte Pérez

Bogotá, D.C., 28 de noviembre de 2017



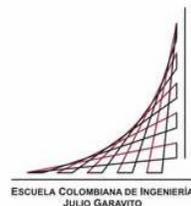
**Modelación de Flujo en 3-D en Procesos de Mezcla Rápida en
Plantas de Tratamiento Utilizando OpenFOAM**

**Tesis para optar al título de Magíster en Ingeniería Civil, con
Énfasis en Recursos Hidráulicos y Medio Ambiente**

**Ing. Germán Ricardo Santos Granados, MSc., PhD.
Director**

**Ing. Oscar Eduardo Hernández Murcia, MSc., PhD.
Codirector**

Bogotá, D.C., 28 de noviembre de 2017



La tesis de maestría titulada “Modelación de Flujo en 3-D en Procesos de Mezcla Rápida en Plantas de Tratamiento Utilizando OpenFOAM”, presentada por Sebastián Alonso Aponte Pérez, cumple con los requisitos establecidos para optar al título de Magíster en Ingeniería Civil con énfasis en Recursos Hidráulicos y Medio Ambiente.

Director de la tesis

Germán Ricardo Santos Granados

Jurado

Oscar Eduardo Hernández Murcia

Jurado

Andrés Humberto Otálora Carmona

Bogotá, D.C., 28 de noviembre de 2017 (fecha de aceptación del trabajo por parte del jurado)

Resumen

La hidrodinámica del proceso de mezcla en tanques en procesos industriales con una hélice fue analizada a través de la modelación computacional del flujo en tres dimensiones. Se compararon los resultados para distintos refinamientos de mallas y modelos de turbulencia con resultados de la literatura. En el modelo computacional propuesto se emplearon los modelos de turbulencia $\kappa - \epsilon$ estándar, RNG $\kappa - \epsilon$, $\kappa - \omega$ y $\kappa - \epsilon$ realizable, para poder predecir computacionalmente el comportamiento del fluido en la fase líquida

El modelo se realizó en el software de código libre OpenFOAM, con un conjunto de códigos que permitió modelar el flujo con el propósito de comparar los resultados con los datos experimentales. Para el modelo se plantearon múltiples mallas y modelos de turbulencia, verificando el comportamiento del fluido en cada caso. En la simulación se empleó el solucionador pimpleDyMFoam, el cual es una variante del solucionador pimpleFoam, de tipo transitorio para flujo incompresible y turbulento de fluidos Newtonianos que permite realizar cálculos con pasos de tiempo relativamente grandes y que además permite el uso de mallas dinámicas.

Se empleó una malla dinámica con una zona interna que rota con lo cual se pretende simular el movimiento de las aspas de la turbina posibilitando la simulación de la transición de flujo. Este tipo de enfoque requiere del uso extenso de recursos computacionales debido a la complejidad de las diferentes ecuaciones que gobiernan el comportamiento del fluido en una malla cambiante.

La geometría base modelada corresponde a un tanque de mezcla con una hélice tipo Rushton de seis aletas y cuatro paredes deflectoras ubicadas a la misma distancia empleada en la modelación experimental realizada por Murthy y Joshi (2008).

Para validar el modelo computacional propuesto se compararon los resultados con datos experimentales (Murthy y Joshi, 2008) y con los resultados del modelo de turbulencia $k - \epsilon$ (Huang y Li, 2012). La comparación se realizó con base en los perfiles de

velocidad axial en z , velocidad tangencial, velocidad radial, la energía cinética turbulenta k y el campo de velocidades.

La simulación permitió establecer que los diferentes modelos de turbulencia empleados son adecuados en predecir el comportamiento de la velocidad axial. La energía cinética turbulenta presenta valores menores a los valores experimentales, lo cual concuerda con los datos obtenidos con otras simulaciones. En este sentido, se determinó que se deben aplicar otros métodos para poder cuantificar adecuadamente la turbulencia, considerando que la mezcla depende principalmente de este fenómeno.

Las diferencias que se encontraron en la simulación con respecto a los datos experimentales se deben probablemente a que se trabajó con ecuaciones promediadas de Reynolds. Igualmente, se determinó que una malla de gran refinamiento genera mejores resultados pero a un costo elevado en tiempo, lo cual puede hacer inviable una modelación para aplicaciones prácticas. En este sentido, el tiempo empleado en la simulación con una malla con bajo refinamiento fue de 3 días, mientras que una malla con un alto grado de refinamiento fue de 25 días. Finalmente, se compararon los resultados para diferentes esquemas numéricos, encontrándose que los esquemas de segundo orden son más precisos que los de primer orden. Además se evidenció que los modelos híbridos entre primer y segundo orden presentan resultados similares a los de segundo orden.

En el documento se presenta el código del esquema numérico y los algoritmos de control que se utilizaron en la modelación con el fin de que estos sean empleados en el planteamiento de problemas similares y sirvan de guía en modelaciones futuras. En este sentido, existe una amplia gama de posibilidades de estudio para esta misma investigación para las cuales se pueden emplear los códigos mencionados, como la determinación de la geometría que produzca una mezcla más eficiente a un menor costo, tiempos de concentración e influencia de la velocidad angular.

Tabla de contenido

Introducción	14
Objetivos	16
Organización del documento	17
CAPÍTULO 1 Conceptos básicos y marco teórico.....	19
1.1. Concepto general	19
1.2. Teoría de la mezcla	20
1.2.1. Definición.....	20
1.2.2. Categorías de aplicación	21
1.3. Mecanismos de transporte.....	22
1.3.1. Advección.....	22
1.3.2. Turbulencia.....	22
1.4. Modelos de turbulencia.....	23
1.4.1. Modelos clásicos basados en las ecuaciones de Navier Stokes promediadas de Reynolds (RANS).....	23
1.4.2. Modelo de turbulencia $k - \omega$	28
1.4.3. Modelo de turbulencia RNG $k - \epsilon$	29
1.4.4. Modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable	31
1.4.5. Comparación entre modelos de turbulencia.....	32
1.5. Tecnología empleada en el proceso de mezcla	33
1.6. Hélices y tanques en mezclas rápidas	34
1.6.1. Hélices.....	34
1.6.2. Tanque de mezcla rápida	38
1.6.3. Descripción CFD.....	42
1.6.4. Clasificación de mallas	43
CAPÍTULO 2 Antecedentes	46

CAPÍTULO 3	Metodología	48
3.1.	Modelo geométrico y proceso de generación del mallado.....	48
3.2.	Condiciones de frontera.....	54
3.2.1.	Definición de la malla dinámica.....	54
3.2.2.	Vectores y campos escalares	55
3.2.3.	Condiciones de frontera.....	57
3.2.4.	Otras condiciones de frontera.....	58
CAPÍTULO 4	Simulación numérica.....	61
4.1.	Estructura de los archivos.....	61
4.2.	Ajustes de discretización, solucionadores y control de salida de datos.....	63
4.3.	Ejecución de la simulación.....	66
4.4.	Documentos generados por OpenFOAM.....	67
CAPÍTULO 5	Resultados y discusión.....	69
5.1.	Residuos.....	69
5.2.	Comparación entre esquemas numéricos y diferentes tipos de refinamiento de malla	72
5.3.	Comparación entre modelos de turbulencia.....	79
5.4.	Tiempo de ejecución.....	84
5.5.	Campo de velocidades	85
5.6.	Distribución de presiones.....	91
5.7.	Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta ϵ	93
5.8.	Esfuerzos cortantes	95
CAPÍTULO 6	CONCLUSIONES	97
	RECOMENDACIONES.....	102
	BIBLIOGRAFÍA.....	103
	Anexo 1. Esquema numérico empleado en openFOAM.....	110
	Anexo 2. Solución y algoritmos de control en openFOAM.....	113

Anexo 3 Evolución de residuos..... 118

LISTADO DE TABLAS

Tabla 1 Ventajas y desventajas de los modelos de turbulencia empleados en dinámica de fluidos computacional.	33
Tabla 2 Tecnologías empleadas en los procesos de mezcla en plantas de tratamiento... 33	
Tabla 3 Investigaciones llevadas a cabo en tanques de mezcla rápida empleando dinámica de fluidos computacional.	47
Tabla 4 Resumen de dimensiones del tanque de mezcla rápida empleada en la modelación.	49
Tabla 5 Número de celdas y composición de las mallas evaluadas determinados por medio de la función checkMesh en OpenFOAM.	49
Tabla 6 Parámetros de calidad para las diferentes tipos de mallas evaluadas.....	51
Tabla 7 Valores empleados en las condiciones iniciales según el contorno.....	58
Tabla 8 Tipo de condición de frontera.....	59
Tabla 9 Tipos de condiciones de frontera	59
Tabla 10 Representación de OpenFOAM de términos con divergencia	64
Tabla 11 Modelos de turbulencia, esquemas de divergencia y grado de refinamiento de las mallas empleadas en las simulaciones.....	74
Tabla 12 Error relativo porcentual determinado para la velocidad axial en $z=0.154m$	75
Tabla 13 Error relativo porcentual de la energía cinética turbulenta determinado para $z=0.154m$	79
Tabla 14 Modelos de turbulencia, esquemas de divergencia y grado de refinamiento de mallas empleadas en las simulaciones	80
Tabla 15 Comparación en el tiempo de ejecución requerida para los modelos computacionales.....	84
Tabla 16 Velocidades máximas obtenidas en los modelos de turbulencia empleados.....	89

LISTADO DE FIGURAS

Figura 1 Esquema de procesos llevados a cabo en el tratamiento de a) agua potable y b) aguas negras.....	20
Figura 2 Ejemplos de tecnologías empleados en el proceso de mezcla.....	34
Figura 3 Esquemas de hélices empleadas en tanques de mezcla rápida	35
Figura 4 Patrones de flujo en tanques de mezcla rápida.....	40
Figura 5 Respuesta de la concentración después de inyectar un trazador en un tanque de mezcla rápida.	41
Figura 6 Variación del tiempo de concentración para diferentes valores del número de Reynolds para una turbina tipo Rushton de 6 caras.....	42
Figura 7 Mallas estructuradas a) tipo O y b) tipo C, en 2D realizada en GMSH.	44
Figura 8 Malla no estructurada en 3D de una hélice de cuatro caras planas realizada en GMSH.....	45
Figura 9 Malla híbrida en 2D compuesta por una malla estructurada (izquierda) y una malla no estructurada (derecha) realizada en GMSH.....	45
Figura 10 Esquema del tanque de mezcla rápida empleado para la modelación.....	48
Figura 11 Superficie triangulada (STL) del tanque de mezcla rápida.	50
Figura 12 Corte en el eje x de las mallas empleadas en la modelación del volumen.	52
Figura 13 Corte en el eje z de las mallas empleadas en la modelación del volumen.	53
Figura 14 Esquema de la superficie de la hélice	54
Figura 15 Esquema del tanque con una zona de rotación interior cercana a la hélice modelado en FreeCAD.	55
Figura 16 Condiciones de frontera para las diferentes partes del tanque de mezcla.....	60
Figura 17 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en la geometría base.....	61
Figura 18 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en la implementación de la malla.....	62
Figura 19 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en el directorio de control.....	62
Figura 20 Directorio raíz con las diferentes carpetas necesarias para ejecutar la simulación.....	66

Figura 21 Archivos generados por OpenFOAM para esquemas numéricos de segundo orden en el solucionador pimpleDyMFoam.	68
Figura 22 Criterio de convergencia de residuos iniciales y finales.	70
Figura 22 Evolución de residuos para el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$ empleando el software Gnuplot.	71
Figura 23 Evolución de residuos para el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable empleando el software Gnuplot.	72
Figura 25 Ubicación de las mediciones en el tanque y posición de la hélice para diferentes alturas.	73
Figura 26 Resultados de la modelación para la velocidad axial con el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar para diferentes esquemas numéricos	76
Figura 27 Resultados de la modelación para la energía cinética turbulenta	78
Figura 28 Resultados de la modelación de la velocidad axial de las mallas de refinamiento intermedio para diferentes modelos de turbulencia	81
Figura 29 Resultados obtenidos para la energía cinética turbulenta en los modelo de turbulencia	83
Figura 30 Vectores de velocidad obtenidos en la simulación en el tanque de mezcla para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden.	86
Figura 31 Vectores de velocidad en la zona de la hélice para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden.	86
Figura 32 Vectores de velocidad observados en el eje de la hélice ($z=0.100m$).	87
Figura 33 Contorno de velocidades en m/s en el tanque para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden para el modelo $k - \omega$	88
Figura 34 Campo de velocidades (m/s) en el eje de la hélice ($z=0.100m$).	89
Figura 35 Contorno de velocidades para una malla de refinamiento medio con esquemas de divergencia de segundo orden. Se observa difusión de la velocidad a medida que se aleja del eje de la hélice ($z=0.100m$).	91
Figura 36 Distribución de presiones estáticas (m^2/s^2) en el tanque para el modelo de turbulencia $k - \omega$	92
Figura 37 Distribución de presiones estáticas (m^2/s^2) en el tanque en $z=0.100m$ para el modelo de turbulencia $k - \omega$	92

Figura 38 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta (m^2/s^3) en el modelo de turbulencia $k - \omega$	94
Figura 39 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta (m^2/s^3) en el modelo de turbulencia $k-\omega$ en $z=0.100m$	94
Figura 40 Esfuerzos cortantes (m^2/s^2) en el tanque con un corte horizontal en $z=0.150m$ en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar.	95
Figura 41 Esfuerzos cortantes (m^2/s^2) en el tanque con un corte vertical en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar.	96

LISTADO DE ECUACIONES

Ecuación 1 Viscosidad cinemática turbulenta	24
Ecuación 2 Ecuación de Prandtl para la viscosidad cinemática turbulenta.....	24
Ecuación 3 Relación de los esfuerzos de Reynolds con el gradiente de velocidad media	25
Ecuación 4 Viscosidad turbulenta	25
Ecuación 5 Energía cinética media.....	25
Ecuación 6 Energía cinética turbulenta.....	26
Ecuación 7 Energía cinética instantánea	26
Ecuación 8 Energía turbulenta cinética asumiendo turbulencia isotrópica	26
Ecuación 9 Viscosidad turbulenta conocidos k y ϵ	26
Ecuación 10 Ecuación parcial diferencial para determinar la energía cinética promedio.	27
Ecuación 11 Ecuación parcial diferencial para determinar la disipación de la energía cinética turbulenta.....	28
Ecuación 12 Viscosidad turbulenta del modelo de turbulencia $k - \omega$	29
Ecuación 13 Energía cinética turbulenta para flujos incompresibles sin fuerzas de cuerpo actuales.....	29
Ecuación 14 Variable de la tasa de generación de la ecuación de la energía cinética turbulenta para flujos incompresibles sin fuerzas de cuerpo actuales.....	29
Ecuación 15 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta en el modelo RNG $k - \epsilon$	30
Ecuación 16 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable	31
Ecuación 17 Viscosidad turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable	32
Ecuación 18 Coeficiente C_μ de Viscosidad turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable	32
Ecuación 19 Caudal de flujo debido a la rotación de la hélice.....	36
Ecuación 20 Potencia transferida a la hélice.....	37
Ecuación 21 Potencia disipada en el fluido	37
Ecuación 22 Relación entre los esfuerzos cortantes y la tasa de flujo.....	38
Ecuación 23 Relación de aspecto en mallas en 3D.....	51

Ecuación 24 Número de Courant..... 64

Introducción

La dinámica de fluidos computacional en los últimos años ha tenido un avance significativo debido al mejoramiento en el procesamiento de datos en ordenadores, de esta forma se ha convertido en una herramienta útil para determinar el comportamiento de los fluidos en procesos industriales. En plantas de tratamiento, así como en procesos químicos, está muy extendido el uso de tanques para la mezcla rápida de elementos con múltiples fases o en una sola fase. Entender el proceso requiere investigar los fenómenos físicos como la turbulencia, por lo que se han desarrollado experimentos para determinar el comportamiento de los fluidos (Aubin et al., 2001; Mishra et al., 1998; Mavros et al., 1996, 1998; Jaworski et al., 1996a; Ranade y Joshi, 1989; Meyers et al., 1997; Ranade et al., 2001, Patterson, 1991; Mishra y Joshi, 1991; Rousar y Van den Akker, 1994; Deen and Hjertager, 1999; Ranade et al., 2001).

En los experimentos se emplean líquidos y paredes transparentes, lo cual no se presenta generalmente en los procesos industriales. Consecuentemente, las herramientas computacionales cobran cada vez más importancia para entender el comportamiento de los fluidos. Sin embargo, los modelos matemáticos empleados para representar el comportamiento físico son aproximaciones de la realidad, por lo que se debe verificar su validez. Varios estudios se han hecho para comparar los resultados de las modelaciones numéricas con respecto a los datos experimentales (Ranade y Joshi, 1990; Jaworski et al., 1997; 1998; 2001; Sheng et al., 1998; Ng and Yianneskis, 2000, Ranade et al., 1989; Kresta and Wood, 1991; Sahu y Joshi, 1995; Ranade y Dometti, 1996; Brucato et al., 1998). Los resultados obtenidos muestran que la velocidad axial y la velocidad radial son adecuados, comparados con los datos obtenidos experimentalmente, pero los resultados para la velocidad tangencial, la energía cinética turbulenta κ y la disipación de energía turbulenta ε pueden ser subdimensionados o sobredimensionados. Los resultados obtenidos pueden variar significativamente dependiendo de las condiciones de frontera empleadas así como de la geometría, las mallas y de los esquemas numéricos.

Se han utilizado esquemas con marcos de referencia múltiple (MRF), mallas dinámicas (SM), y de las condiciones cerca de las zonas de alta turbulencia como las hélices (IBC).

También se han empleado modelos de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas según Reynolds (RANS), entre los que se encuentran el modelo $\kappa - \varepsilon$ estándar, el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$, el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable y el modelo $\kappa - \omega$, y los modelos de Eddy de gran tamaño (LES). El modelo LES es el que presenta mejores resultados (Dersken y Van den Akker, 1999; Dersken, 2001). Los modelos RANS en general presentan resultados similares, con variaciones poco significativas según estudios realizados (Oshinowo et al., 2000, Jaworski et al., 2000). Por otra parte, se han hecho pocos estudios referentes a la evaluación del comportamiento para distintos esquemas de aproximación numérica. Sahu y Joshi (1995) encontraron que los esquemas de primer orden generan resultados poco satisfactorios mientras que esquemas híbridos entre esquemas de primer y segundo orden y los de segundo orden tienen resultados similares.

Resultados más parecidos a los experimentales se han encontrado considerando la presencia de flujo anisotrópico, con modelos de turbulencia $\kappa - \varepsilon$, y el modelo algebraico de esfuerzos (ASM) usando el método IBC (Armenante y Chou, 1996).

En este estudio se busca realizar la modelación de un tanque de mezcla rápida con una hélice tipo Rushton por medio de tres mallas de refinamiento; bajo, medio y alto, esquemas numéricos de primer orden, híbridos y de segundo orden, y para los modelos de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ standar, el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$, el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable y el modelo $\kappa - \omega$ para la malla de refinamiento medio. Las mallas utilizadas son dinámicas (SM), y se compara la precisión de cada uno de las combinaciones con datos experimentales con el fin de que modelaciones futuras tengan una base consolidada de información en términos de precisión y tiempo empleado.

Objetivos

Objetivo General

Modelación y análisis del comportamiento del flujo en un tanque de mezcla rápida con una hélice tipo Rushton de seis aletas y cuatro paredes deflectoras, con los modelos de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar, $k - \varepsilon$ realizable, RNG $k - \varepsilon$ y $k - \omega$, por medio del software OpenFOAM.

Objetivos específicos

- ✓ Realizar un estudio de independencia de las mallas por medio de la modelación y el análisis del comportamiento del flujo para tres grados de refinamiento de la malla, comparado con datos experimentales y la simulación por medio del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar con el método RSM.
- ✓ Análisis de la sensibilidad de los esquemas numéricos del software por medio de la simulación del comportamiento del flujo comparado con datos experimentales y la simulación por medio del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar con el método RSM.
- ✓ Modelación y análisis de la velocidad axial y energía cinética turbulenta para los modelos de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar, $k - \varepsilon$ realizable, RNG $k - \varepsilon$ y $k - \omega$, comparándolos con datos experimentales y la simulación por medio del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar con el método RSM.
- ✓ Comparación de la velocidad máxima obtenida en los modelos con respecto a resultados obtenidos para modelos de turbulencia LES.
- ✓ Análisis del campo vectorial de velocidades, contorno de presiones, velocidades, esfuerzos cortantes y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta determinados en las simulaciones.

Organización del documento

CAPÍTULO 1 Conceptos básicos y marco teórico: Son descritos los conceptos básicos y el marco teórico que son necesarios para poder entender el proceso de mezcla que ocurre en tanques de mezcla de rápida, los modelos de turbulencia aplicables, diferentes tecnologías empleadas en procesos de mezclas y los distintos tipos de tanques y hélices usados.

CAPÍTULO 2 Antecedentes: Son presentados los documentos realizados, con anterioridad, por distintos autores con referencias a tanques de mezcla rápida empleando diferentes tipos de hélices.

CAPÍTULO 3 Metodología: Capítulo que contiene el método empleado para poder realizar la simulación del comportamiento del fluido en un tanque de mezcla rápida por medio de la dinámica de fluidos computacional, empleando el software OpenFOAM. Adicionalmente se describe la geometría empleada, las condiciones de frontera, la generación de la malla dinámica y los campos escalares y vectoriales empleados.

CAPÍTULO 4 Simulación numérica: Son presentados los esquemas numéricos, ajustes de discretización, ajustes de control de entradas y salidas y el procedimiento llevado a cabo en el software OpenFOAM para poder realizar la simulación.

CAPÍTULO 5 Resultados y discusión: Son presentados los resultados de la simulación realizada en OpenFOAM, comparados con los datos experimentales obtenidos por Murthy y Joshi (2008) y datos de simulaciones realizadas por Huang y Li (2013), analizados a partir de los conceptos básicos del funcionamiento de los tanques de mezcla rápida que se encuentran en la literatura. Se comparan los resultados del comportamiento de la velocidad, la energía cinética turbulenta, el campo y de vectores de velocidad, contornos de velocidad, presión, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, para diferentes grados de refinamiento de las mallas, diferentes modelos de turbulencia y diferentes esquemas numéricos de discretización.

CAPÍTULO 6 Conclusiones: Son presentadas las consideraciones más importantes obtenidas en el estudio realizado.

CAPÍTULO 1 Conceptos básicos y marco teórico

1.1. Concepto general

Los tanques de mezcla rápida son estructuras comunes en procesos industriales como la homogenización, dispersión de gases, suspensión de sólidos y transferencia de calor. El proceso de mezcla depende principalmente del tipo de hélice y velocidad angular, lo que define el tipo de flujo en el sistema. Tres tipos de movimientos se presentan, el flujo axial usado en mezcla de gas-líquido, líquido-líquido y en múltiples fases, el flujo radial usado en suspensión de sólidos y transferencia de calor, y el movimiento mixto entre axial y radial. Predecir con exactitud el comportamiento del fluido en el tanque y cerca de las hélices tiene grandes beneficios para quien diseña los tanques (Ge et al., 2014).

Experimentalmente el comportamiento del flujo en los tanques se determina por medio de tubos Pitot, velocímetros Doppler (LDV, por sus siglas en inglés), fluorescencia inducida por láser (LIF, por sus siglas en inglés) y velocímetros de partículas (PIV por sus siglas en inglés). Los avances en la tecnología han permitido desarrollar modelos computacionales más exactos gracias a la generación de mallas más refinadas con modelos de flujo más complejos empleando menos tiempo computacional. Lo anterior debe ser complementado con experimentos debido a la complejidad de la física del movimiento del fluido (Ge et al., 2014).

En los tanques, el rendimiento en la mezcla se debe principalmente al tipo de hélice, tal como se mencionó antes. A medida que el flujo se desarrolla, la energía cinética promedio se convierte en energía turbulenta cinética y cuya distribución depende la geometría de los elementos del tanque (Ge et al., 2014).

1.2. Teoría de la mezcla

1.2.1. Definición

El proceso de mezcla se define como el proceso de inducir la distribución aleatoria de dos o más fases separadas al pasar una a través de la otra (McCabe et al., 1993). Este proceso, se lleva a cabo en varias etapas en plantas de tratamiento, por ejemplo; la mezcla rápida, la floculación, la desinfección, los tratamientos anaeróbicos y la disolución de gases. Para la mayoría de procesos es una parte esencial, permitiendo el contacto entre varios reactivos, la generación de áreas de interconexión entre estos y la reducción de los espesores de las capas de los fluidos (Hendricks, 2011).

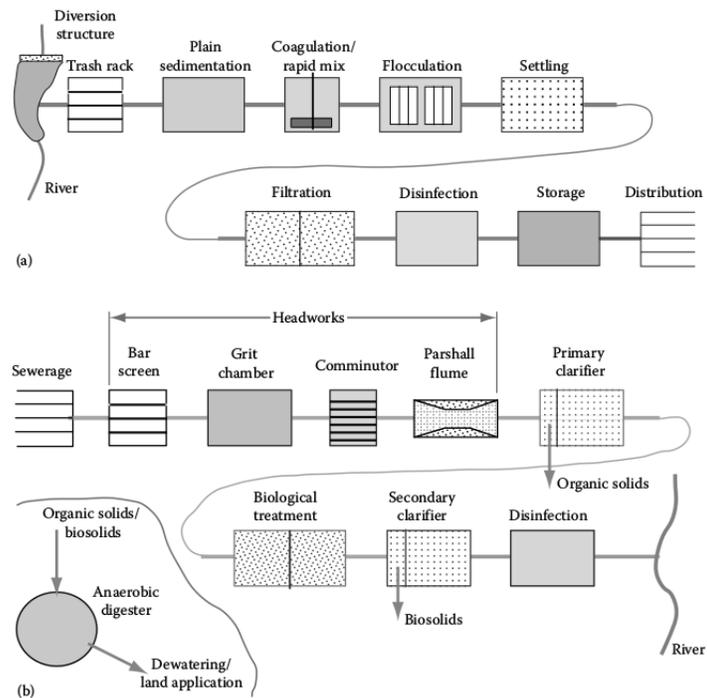


Figura 1 Esquema de procesos llevados a cabo en el tratamiento de a) agua potable y b) aguas negras.

Fuente: Hendricks D. (2011). *Fundamentals of Water Treatment Unit Processes Physical, Chemical and Biological*.

1.2.2. Categorías de aplicación

En el caso específico de plantas de tratamiento de agua se pueden clasificar en 5 pares de procesos de mezcla; 1) en líquido y sólido, 2) en líquido y gas, 3) en dos líquidos no miscibles, 4) dos líquidos miscibles y 5) la locomoción de flujo, como lo describe Hendricks (2011).

A continuación se describe brevemente las categorías mencionadas:

1.2.2.1. Líquido-sólido

Mezcla en la cual una partícula se disuelve en el agua.

1.2.2.2. Líquido-gas

Un gas emerge de un tubo y es dispersado por una turbina a través del líquido por esfuerzo proceso en el cual se crean burbujas. Posteriormente se dispersa simultáneamente por empuje y esfuerzo a través del chorro el cual dispersa el gas.

1.2.2.3. Líquidos no miscibles

Son procesos en los que polímeros de alto peso molecular son disueltas en una base de petróleo. Para realizar lo anterior se induce la emulsión en un flujo pequeño de agua el cual pasa por una zona de altos esfuerzos cortante y posteriormente se introducen al flujo principal.

1.2.2.4. Líquidos miscibles

Mezcla de dos líquidos miscibles por ejemplo en el caso de aluminio líquido en el agua.

1.2.2.5. Locomoción de flujo

Cuando la locomoción del flujo es alcanzada las otras partes del proceso de mezcla se satisfacen. En el caso de tanques con hélices, la locomoción se caracteriza por los patrones de flujo, la zona de esfuerzos y su extensión, y por la capacidad de empuje de la hélice.

1.3. Mecanismos de transporte

La mezcla de fluidos se hace por medio de tres formas distintas: 1) la advección, 2) la difusión turbulenta y 3) la difusión molecular. La advección y la difusión turbulenta pueden ser modelados por medio de las ecuaciones de Navier-Stokes, mientras que la difusión molecular se puede modelar por medio de la primera ley de Fick (Hendricks, 2011).

1.3.1. Advección

La advección es el movimiento de una masa de fluido en el que la inercia entrante genera vórtices grandes, lo que requiere que se mueva una masa de fluido a través de otra. El proceso se genera a una escala entre decímetros y metros dependiendo de la velocidad de entrada del fluido. Además, se generan vórtices grandes, algunos vórtices de menor tamaño se generan alrededor debido al esfuerzo cortante.

1.3.2. Turbulencia

El gradiente de velocidad generado por la hélice causa esfuerzos en el fluido que producen vórtices que son técnicamente turbulencia. Los vórtices generados hacen que debido al esfuerzo cortante se generan más vórtices, lo que hace que al final las fuerzas viscosas predominen y la energía se disipe en forma de calor. Gracias a la turbulencia generada en el tanque 1) se produce la mezcla entre dos agentes, 2) haya colisión entre dos macro-reactivos, 3) aumente la difusión del gradiente de concentración y 4) se

mantenga la suspensión de partículas, que de otro modo se asentarían. La intensidad media de la turbulencia determina la tasa de mezcla, mientras que el tamaño de los vórtices controlan qué tanto las partículas pueden ser transportadas (Hendricks, 2011).

1.4. Modelos de turbulencia

1.4.1. Modelos clásicos basados en las ecuaciones de Navier Stokes promediadas de Reynolds (RANS)

1.4.1.1. Modelos de turbulencia más usados

Existen modelos de turbulencia que comúnmente se emplean para determinar la turbulencia teórica, entre estas se encuentran: 1) los modelos de cero ecuaciones correspondiente al modelo de longitud de mezcla, 2) los modelos de una ecuación correspondiente al modelo Spalart-Allmaras, 3) los modelos de 2 ecuaciones correspondientes a los modelos $\kappa - \varepsilon$ (Estándar, RNG, realizable), el modelo $\kappa - \omega$ y ASM, y 4) los modelos de 7 ecuaciones correspondiente al modelo de esfuerzos de Reynolds.

Los modelos de turbulencia mencionados se encuentran en función del tiempo en los que se calculan de manera explícita los vórtices grandes y se toma en cuenta el comportamiento del fluido para determinar los vórtices pequeños.

1.4.1.2. Modelo de longitud de mezcla

La viscosidad cinemática turbulenta se puede expresar como el producto de una escala de longitud y una escala de tiempo, como se muestra a continuación:

$$v_t(m^2/s) \propto \vartheta(m/s)l(m)$$

Ecuación 1 Viscosidad cinemática turbulenta

Asumiendo que la escala de velocidad es proporcional a la escala de longitud y al gradiente de velocidad, Prandtl(1925) desarrolló la siguiente ecuación para una dimensión:

$$\vartheta \propto l \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right|$$

$$v_t = l_m^2 \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right|$$

Ecuación 2 Ecuación de Prandtl para la viscosidad cinemática turbulenta

El modelo presenta ventajas debido a la facilidad de su implementación, a los cálculos rápidos y a las buenas predicciones para flujos simples, sin embargo, no es posible describir flujos con diferentes escalas de turbulencia.

1.4.1.3. Modelo Spalart-Allmaras

En el modelo Spalart-Allmaras se resuelve una ecuación parcial diferencial para la viscosidad turbulenta, ecuación que contiene términos de convección y difusión así como expresiones para la producción y la disipación de la viscosidad cinemática turbulenta. El modelo es apropiado para flujos alrededor de paredes y flujos con poca separación y recirculación. Por el contrario son inadecuados para flujos con disminución de la turbulencia, flujos con separación y flujos libres de esfuerzos.

1.4.1.4. Modelo de turbulencia estándar $\kappa - \epsilon$

El modelo de esfuerzos de Reynolds puede ser utilizado cuando debido a cambios en el flujo se presenta una rápida respuesta de la turbulencia. Un método común para simularlo

es por medio de la hipótesis de Boussinesq que relaciona los esfuerzos de Reynolds con el gradiente de velocidad media (Ge, 2014), relación que se presenta en la siguiente ecuación:

$$-\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho \kappa + \mu_t \frac{du_i}{dx_i} \right) \delta_{ij}$$

Ecuación 3 Relación de los esfuerzos de Reynolds con el gradiente de velocidad media

Donde κ es la energía cinética turbulenta y ε la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

La viscosidad turbulenta se calcula como sigue:

$$\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Ecuación 4 Viscosidad turbulenta

En el modelo estándar $\kappa - \varepsilon$ se asume la existencia de turbulencia isotrópica y de equilibrio espectral (Joshi y Murthy, 2008), por lo general debe contarse con información confiable de experimentos físicos debido a que se asume que la energía turbulenta cinética y la tasa de disipación son necesarias, además de la presencia de suficiente turbulencia. Comparado con métodos como el LES (Large Eddy Simulation) los recursos computacionales son menores y es por esta razón que se aplican en gran cantidad de simulaciones (Ge, 2014).

La energía cinética instantánea, $k(t)$, de un flujo turbulento es la suma de la energía cinética media K y la energía cinética turbulenta k y se calcula como sigue:

$$K = \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + W^2)$$

Ecuación 5 Energía cinética media

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$$

Ecuación 6 Energía cinética turbulenta

$$k(t) = K + k$$

Ecuación 7 Energía cinética instantánea

Al asumir turbulencia isotrópica, la energía turbulenta cinética puede expresarse de la siguiente manera (Gabriela et al., 2009):

$$k = 3/4 (\overline{u'^2} + \overline{v'^2})$$

Ecuación 8 Energía turbulenta cinética asumiendo turbulencia isotrópica

La viscosidad turbulenta se calcula por medio de la siguiente relación:

$$\nu_t \propto \vartheta l \propto kl^2 \frac{k^{3/2}}{\epsilon}$$

Ecuación 9 Viscosidad turbulenta conocidos k y ϵ

El modelo $\kappa - \epsilon$ estándar presenta ventajas gracias a la relativa facilidad para implementarse, ya que los cálculos generalmente son estables y convergen rápidamente, realizando predicciones razonables para muchos flujos. Entre sus desventajas está la mala predicción en casos de vórtices y flujo rotacional, impulsores axisimétricos, ciertos tipos de flujo inconfinado y en flujos completamente desarrollados en ductos no circulares. Presenta una ecuación simple para el cálculo de la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

1.4.1.4.1. *Energía cinética promedio K*

La ecuación parcial diferencial para determinar K es la siguiente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla(\rho k U) = \nabla \left(-\overline{\rho' u'} + 2\overline{\mu u' e_{ij}'} - \rho \overline{1/2 u_i' \cdot u_i' u_j'} \right) - 2\overline{\mu e_{ij}' \cdot e_{ij}'} + \left(-\overline{\rho u_i' u_j'} \cdot E_{ij} \right)$$

Ecuación 10 Ecuación parcial diferencial para determinar la energía cinética promedio

Donde

$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}$ es la tasa de cambio de k

$\nabla(\rho k U)$ es el transporte de k por convección

$-\overline{\rho' u'}$ es el transporte de k por la presión

$2\overline{\mu u' e_{ij}'}$ es el transporte de k por los esfuerzos viscosos

$\rho \overline{1/2 u_i' \cdot u_i' u_j'}$ es el transporte de k por esfuerzos de Reynolds

$2\overline{\mu e_{ij}' \cdot e_{ij}'}$ es la tasa de disipación de k

$\overline{\rho u_i' u_j'} \cdot E_{ij}$ es la producción de turbulencia

1.4.1.4.2. *Disipación de la energía cinética turbulenta ϵ*

La ecuación parcial diferencial para determinar ϵ se obtiene de multiplicar la ecuación para k por ϵ/k e introducir constantes al modelo como sigue:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla(\rho\varepsilon U) = \nabla \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad}\varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$$

Ecuación 11 Ecuación parcial diferencial para determinar la disipación de la energía cinética turbulenta

Donde

$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t}$ es la tasa de incremento

$\nabla(\rho\varepsilon U)$ es el transporte convectivo

$\nabla \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad}\varepsilon \right]$ es el transporte difusivo

$C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} E_{ij}$ es la tasa de producción

$C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$ es la tasa de destrucción

Valores típicos usados para σ_ε o número de Prandtl es 1.3, para $C_{1\varepsilon}$ y para $C_{2\varepsilon}$ son 1.44 y 1.92 respectivamente, los cuales son obtenidos experimentalmente.

1.4.2. Modelo de turbulencia $k - \omega$

El modelo $k - \omega$ es similar al modelo de turbulencia estándar $k - \varepsilon$ pero se calculan dos condiciones adicionales: 1) una versión modificada del modelo $k - \varepsilon$ y 2) una ecuación de transporte para ω (André Bakker, 2002).

La viscosidad turbulenta se calcula como sigue

$$\mu = \rho \frac{k}{\omega}$$

Ecuación 12 Viscosidad turbulenta del modelo de turbulencia $k - \omega$

El comportamiento es similar al del modelo $k - \varepsilon$ e igualmente μ se considera isotrópico.

1.4.3. Modelo de turbulencia RNG $k - \varepsilon$

El modelo RNG $k - \varepsilon$ o modelo de turbulencia por el método de grupos renormalizados determina las ecuaciones por medio de rigurosas técnicas estadísticas. Es un modelo similar al modelo $k - \varepsilon$ estándar, que incluye el efecto de vórtices en la turbulencia. La fórmula analítica para determinar el número de Prandtl y términos adicionales en la ecuación de ε , que consideran la interacción entre la disipación de la turbulencia y el esfuerzo medio. Predice mejor los efectos de flujos transicionales, transferencia de masa y líneas de corriente con alta curvatura. Aun así, no predice correctamente el flujo en propulsores.

Las ecuaciones escritas para flujo incompresible sin fuerzas de cuerpo son las siguientes:

1) Energía turbulenta cinética:

$$\rho U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \mu_t S^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) - \rho \varepsilon$$

Ecuación 13 Energía cinética turbulenta para flujos incompresibles sin fuerzas de cuerpo actuantes

$$S \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right)$$

Ecuación 14 Variable de la tasa de generación de la ecuación de la energía cinética turbulenta para flujos incompresibles sin fuerzas de cuerpo actuantes

Donde

$\rho U_i \frac{\partial k}{\partial x_i}$ es el término de convección

$\mu_t S^2$ es la tasa de generación

$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right)$ es la difusión

$\rho \varepsilon$ es la disipación

2) Tasa de disipación:

$$\rho U_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = C_{1\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{k} \right) \mu_t S^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) - C_{2\varepsilon} \rho \left(\frac{\varepsilon^2}{k} \right) - R$$

Ecuación 15 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta en el modelo RNG k – ε

Donde,

$\rho U_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}$ es el término de convección

$C_{1\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{k} \right) \mu_t S^2$ es el término de generación

$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right)$ es el término de difusión

$C_{2\varepsilon} \rho \left(\frac{\varepsilon^2}{k} \right)$ es el término de destrucción

R es un término adicional relacionado a los esfuerzos medios y cantidades de turbulencia

1.4.4. Modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ realizable

Comparte la misma ecuación de la energía turbulenta cinética, con una mejora en la ecuación para ε , que es variable. Predice mejor el comportamiento en flujos rotacionales y de recirculación, en flujos con curvatura fuerte de las líneas de corriente, en paredes con fuerte gradiente de presión y en propulsores planos o redondos.

Las ecuaciones que lo diferencian del modelo estándar son las siguientes:

1) Tasa de disipación

$$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho c_{1S} \varepsilon - \rho c_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b$$

Ecuación 16 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ realizable

Donde,

$\rho \frac{D\varepsilon}{Dt}$ es la convección

$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right]$ es la difusión

$\rho \varepsilon$ es la tasa de generación

$\rho c_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}}$ es la tasa de destrucción

$c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b$ es la flotabilidad

2) La viscosidad turbulenta

$$\mu_t \equiv \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Ecuación 17 Viscosidad turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ realizable

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{U_* K}{\varepsilon}}$$

Ecuación 18 Coeficiente C_μ de Viscosidad turbulenta en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ realizable

Donde

$$A_0 = 4.04$$

$$A_s = \sqrt{6} \cos \phi$$

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6}W)$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{ji}S_{ki}}{S}$$

$$S = \sqrt{S_{ij}S_{ij}}$$

1.4.5. Comparación entre modelos de turbulencia

A continuación se presentan las ventajas y desventajas para los distintos modelos mencionados

Tabla 1 Ventajas y desventajas de los modelos de turbulencia empleados en dinámica de fluidos computacional.

Modelo	Ventajas	Desventajas
Modelo estándar k- ϵ	Robusto, usa pocos recursos computacionales, relativamente preciso	Resultados mediocres para flujos complejos con gradientes altos de presión, alta curvatura de las líneas de corriente, vórtices y rotación.
Modelo por el método de grupos renormalizados (RNG) k- ϵ	Adecuado para flujos complejos como con propulsores, remolinos y flujos secundarios.	Limitado debido a suposición de viscosidad isotrópica de Eddy
Modelo realizable k- ϵ	Relativamente preciso para propulsores, similar al modelo RNG con mejoras para propulsores redondos.	Limitado debido a suposición de viscosidad isotrópica de Eddy
Modelo de esfuerzos de Reynolds	Modelo que mejor representa el comportamiento físico	Requiere esfuerzos computacionales altos, entre dos a tres veces comparado con los modelos de turbulencia RANS

Fuente: Adaptado y recuperado de Bakker, A. (1996). Applied Computational Fluid Dynamics, turbulence Models.

1.5. Tecnología empleada en el proceso de mezcla

Para facilitar los procesos de mezcla se pueden emplear los resaltos hidráulicos, series de codos, propulsores sumergidos, grillas en tuberías, mezcladores estáticos, bombeo y tanques de mezcla rápida (Hendricks, 2011). A continuación se resumen los tipos de tecnologías:

Tabla 2 Tecnologías empleadas en los procesos de mezcla en plantas de tratamiento

Hélices	Propulsores	Estáticos
Tanques abiertos	Pulverizador	Orificios
Tubo difusor	Orificios	Estrechamiento en tuberías
Mezcla en línea	Salto hidráulico	Burbujas de aire
Bombeo	Canaleta parshall	Veletas de bifurcación
	Obstáculos encima y abajo	Codos en secuencia
	Obstáculos al final y alrededor	Obstrucción de flujo

Fuente: Adaptado de Hendricks, D. (2011). *Fundamentals of Water Treatment Unit Processes, Physical, Chemical and Biological.*

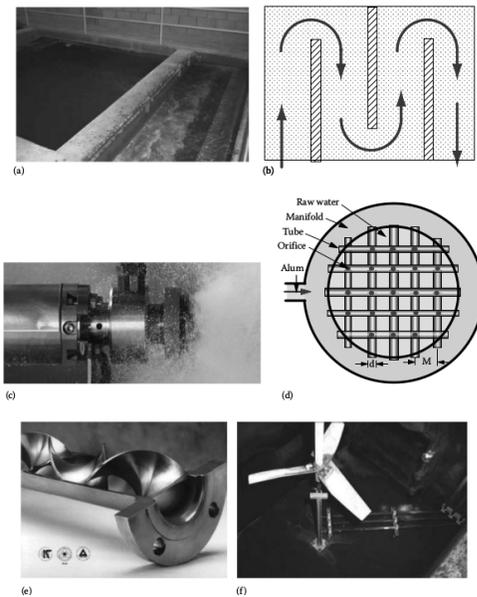


Figura 2 Ejemplos de tecnologías empleados en el proceso de mezcla.

Convenciones: a) Salto hidráulico, b) laberintos, c) inducción química, d) rejillas en tuberías, e) mezclador estático y f) tanques de mezcla.

Fuente: Hendricks, D. (2011). Fundamentals of Water Treatment Unit Processes, Physical, Chemical and Biological.

1.6. Hélices y tanques en mezclas rápidas

En los tanques de mezcla rápida son empleadas hélices movidas por rotores que generan turbulencia, favoreciendo el proceso de mezcla entre elementos. El tiempo requerido para que una mezcla alcance un grado de homogeneidad suficiente depende de las características geométricas tanto de las hélices como del tanque y de la velocidad de giro de las hélices.

1.6.1. Hélices

Existe variedad en los diseños de hélices las cuales se clasifican en términos del perfil de velocidad que producen, básicamente son dos tipos 1) las de flujo axial y 2) las de flujo radial como explica Hendricks (2011).

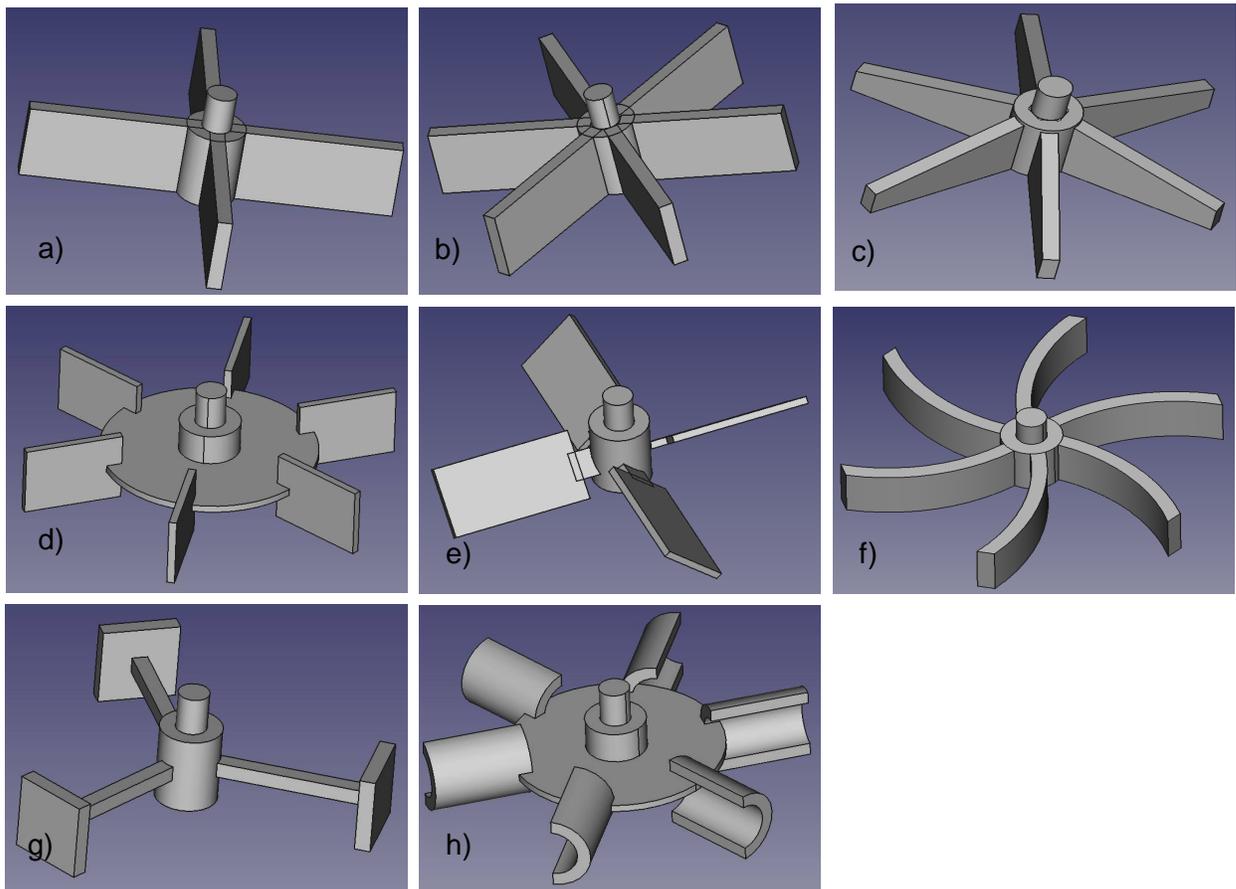


Figura 3 Esquemas de hélices empleadas en tanques de mezcla rápida

Convenciones: a) turbina hoja plana abierta de 4 caras (flujo radial), b) turbina de hoja plana abierta de 6 caras (flujo radial), c) turbina Chemshear (altos esfuerzos), d) turbina Rushton (flujo radial), e) turbina de paletas inclinadas (flujo axial), f) turbina paso atrás (flujo radial), g) turbina de paletas de punta (flujo radial), y h) turbina Scaba SRGT (flujo radial). Los esquemas se realizaron en el software FreeCAD.

Fuente: Elaboración propia.

1.6.1.1. Hélices de flujo axial

En las hélices de tipo axial el flujo viaja paralelamente al eje de la hélice.

1.6.1.2. Hélices de flujo radial

El flujo que se presenta en las hélices de flujo radial se caracteriza por presentar altos esfuerzos cortantes y bajo movimiento del fluido. Los tres principales aspectos son: 1) un flujo radial de alta velocidad que crea zonas de alto esfuerzo cortante cerca de las puntas de la hélice, 2) la parte plana de la hélice genera un efecto de separación en el fluido y 3) el flujo radial genera corrientes de advección que se mueven hacia arriba y hacia abajo al contacto con las paredes del tanque que luego recirculan al centro, generando esfuerzos que se transforman en vórtices.

1.6.1.3. Empuje de las hélices

El movimiento de las hélices tiene como propósito generar turbulencia lo que produce zonas en donde se presentan esfuerzos cortantes y en zonas en las que se presenta advección. Por otra parte, los patrones de flujo dependen de la configuración de la hélice. Los dos patrones que se presentan son principalmente el de circulación y el de paso. El flujo de paso es en el cual el flujo pasa una sola vez a través de una zona de turbulencia o donde no hay recirculación por un mismo punto.

Las características que se presentan en el flujo son mencionadas a continuación:

- ✓ Tasa de empuje: La tasa de empuje es proporcional a la velocidad en la punta de la hélice y se calcula como sigue:

$$Q_{hélice} = N_{Q_p} nD^3$$

Ecuación 19 Caudal de flujo debido a la rotación de la hélice

Donde

$Q_{hélice}$ es el caudal de flujo empujado por la hélice en m^3/s

N_{Q_p} es una constante empírica o “número de flujo” (adimensional)

D es el diámetro de la hélice en m
 n es la velocidad de rotación en *rad*

- ✓ Número de flujo: El “número de flujo” caracteriza la capacidad de empuje de la hélice. Valores propuestos son presentados por Oldshue (1983) y McCabe et al. (1993).
- ✓ Potencia transferida: La potencia transferida a la hélice depende del torque aplicado y la velocidad de rotación y se calcula como sigue:

$$P = T * \omega$$

Ecuación 20 Potencia transferida a la hélice

Donde

P es la energía disipada por la hélice (W)
 T es el torque generado por la hélice ($N * m$)
 ω es la velocidad de rotación (rad/s)

- ✓ Potencia disipada: En la hélice se genera una disipación de energía distribuida entre la advección y la turbulencia, Myers et al. (1990) plantea la siguiente ecuación para la potencia disipada:

$$P = Q_{hélice} * \gamma_w H$$

Ecuación 21 Potencia disipada en el fluido

Donde

γ_w es el peso específico del fluido
 H es la cabeza de energía disipada debido a la rotación de la hélice

- ✓ Relación entre esfuerzos cortantes y tasa de flujo: La relación entre los esfuerzos cortantes y la tasa de flujo está dada por la siguiente ecuación planteada por Myers et al (1999):

$$\frac{H}{Q_{helice}} = \left[\frac{P}{gQ^2} \right] \left(\frac{n}{D} \right)$$

Ecuación 22 Relación entre los esfuerzos cortantes y la tasa de flujo

Donde n es la velocidad de rotación en *rev/s*.

De la ecuación se determina que para valores únicos de P y de Q, la relación entre esfuerzos cortantes y flujo es proporcional a la relación de $\frac{n}{D}$.

1.6.2. Tanque de mezcla rápida

1.6.2.1. Geometría

Los tanques por lo general son circulares o cuadrados con una relación de altura de la lámina de agua contra el ancho de 1 en tanques circulares. McCabe et al. (1993) recomiendan diámetros externos de las hélices de entre 0.5 m y 0.8 m del ancho del tanque.

1.6.2.2. Obstáculos

En caso de no tener obstáculos en el tanque se produce un solo vórtice debido al giro del flujo. Al colocar obstáculos, la rotación del flujo se reduce y consecuentemente el único vórtice puede desaparecer.

1.6.2.3. Mecanismo de mezcla

En tanques de mezcla rápida se generan ciclos de movimiento largos que para que sean efectivos deben recorrer la totalidad del tanque en un tiempo relativamente corto, lo que depende de la velocidad y configuración de las hélices. En el proceso se presentan tres fenómenos físicos: la distribución, la dispersión y la difusión.

La distribución es el proceso por el cual el flujo es transportado a todas las regiones del tanque debido al módulo de elasticidad volumétrica del fluido, que establece qué tan fácilmente cambia el volumen al aplicar presión. La distribución es un proceso lento que en tanques grandes toma más tiempo y que se encuentra relacionado con la velocidad de rotación de las hélices. Adicionalmente, el movimiento del flujo genera turbulencia que ayuda al proceso de distribución.

La energía cinética del flujo turbulento produce vórtices de distintos tamaños. Los vórtices más grandes se forman continuamente en el tanque y se rompen en vórtices de menor tamaño hasta que estos no pueden seguir su movimiento rotacional y se disipan en forma de calor.

La dispersión es el proceso en el cual debido al movimiento de flujo se generan vórtices cada vez de menor tamaño. Este proceso hace que haya transferencia rápida de material en el tanque. La homogeneidad de la mezcla depende de qué tan pequeños sean los vórtices formados.

Dentro de los vórtices se genera poca mezcla debido a que estos siguen las corrientes de flujo. En escalas muy pequeñas, del orden de 30 a 100 μm , la mezcla se produce debido al fenómeno de difusión que genera una mezcla homogénea.

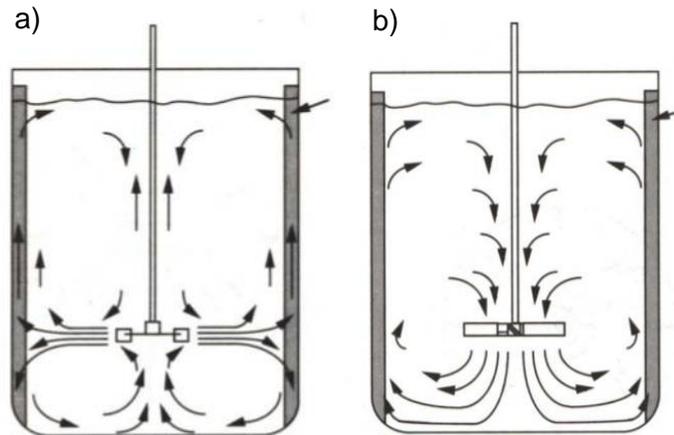


Figura 4 Patrones de flujo en tanques de mezcla rápida.

Convenciones: a) flujo radial y b) flujo axial.

Fuente: *Bioprocess Engineering Lessons*, capítulo 6 (Sin fecha).

1.6.2.4. Mezcla efectiva

Un parámetro para definir qué tan efectivo es el proceso de mezcla es el tiempo de mezcla (t_m), el cual es el tiempo que se requiere para alcanzar cierto grado de homogenización a partir del estado de segregación. El tiempo de mezcla puede ser medido a través de la inyección de un trazador en el tanque y la determinación de su concentración en algún punto del mismo. Los trazadores pueden variar entre elementos ácidos, básicos y soluciones con concentraciones de sal. También se puede medir el tiempo de mezcla determinando la respuesta de la temperatura para pequeñas adiciones de líquidos calientes.

Al colocar un trazador en un tanque con líquido de concentración inicial (C_i), la concentración del trazador en un punto variará de manera sinusoidal debido a las altas concentraciones cada vez que el flujo mueve el trazador al mismo punto. Los picos en las concentraciones quedarán separados por un período de tiempo (t_c). Después de cierto

número de periodos se alcanza la homogeneidad en la mezcla. A continuación se muestra el esquema de este fenómeno:

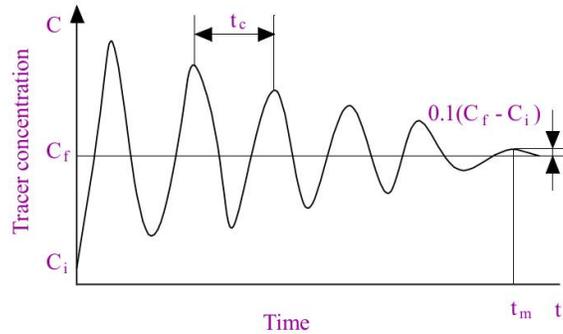


Figura 5 Respuesta de la concentración después de inyectar un trazador en un tanque de mezcla rápida.

Fuente: Bioprocess Engineering Lessons, capítulo 6. (Sin fecha).

El tiempo de concentración efectivo (t_m) se presenta cuando se ha alcanzado un grado de homogeneidad. Un valor adecuado es cuando se presenta una concentración final del trazador con una diferencia del 10% de la concentración total. En este sentido, el tiempo de mezcla depende: del tamaño del tanque, la configuración de las hélices, las propiedades del fluido, como la viscosidad, y de la velocidad angular. Valores experimentales se han determinado para distintos escalas del número de Reynolds como se muestra en la Figura 6:

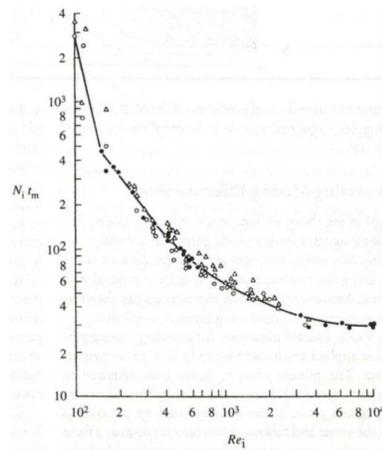


Figura 6 Variación del tiempo de concentración para diferentes valores del número de Reynolds para una turbina tipo Rushton de 6 caras.

Fuente: *Bioprocess Engineering Lessons*, capítulo 6. (Sin fecha).

1.6.3. Descripción CFD

La dinámica de fluidos computacional, o CFD (por sus siglas en inglés), es un área del conocimiento que busca proveer soluciones a las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad de la mecánica de fluidos, empleando esquemas numéricos para poder resolver las ecuaciones diferenciales las cuales no tienen solución analítica. Para resolver las ecuaciones se discretiza el problema por medio de grillas o mallas. Su uso inicia en 1940 y se ha extendido con el avance en el desarrollo de ordenadores. En el tratamiento de aguas residuales pocos grupos académicos se han dedicado a la investigación por medio de la dinámica de fluidos computacional (Smastag et al., 2016).

En la dinámica de fluidos se emplean las ecuaciones de Navier-Stokes o simplificaciones de las mismas para poder resolver problemas particulares que incluyen fluidos. Las ecuaciones representan modelos matemáticos de los fenómenos físicos, expresados en forma de ecuaciones diferenciales parciales o ecuaciones integro-diferenciales, junto con las condiciones de frontera. Las ecuaciones derivadas parciales en un ordenador se realizan mediante una discretización temporal y espacial transformando las ecuaciones

diferenciales en ecuaciones algebraicas. Es así que la solución obtenida no es continua, sino que es discreta en el tiempo y el espacio (Cárdenas, 2014).

1.6.3.1. Métodos de volúmenes finitos

Método en el que se emplea la formulación integral de las ecuaciones, para lo cual el dominio se divide en volúmenes de control en los que se resuelven las ecuaciones mediante aproximaciones. Los nodos evaluados se encuentran en el centro del volumen y se interpolan para obtener los valores en las caras del volumen. Este método se aplica a todo tipo de mallas. Se caracteriza por ser un método que es conservativo y en el que los términos empleados tienen un sentido físico. OpenFOAM emplea este método.

1.6.3.2. Método de elementos finitos

Método en el cual una ecuación diferencial es multiplicada por funciones llamadas pesos y posteriormente son integradas. El dominio se divide en partes en las que la solución de cada una de ellas es aproximada ya que evalúa la función en los vértices de cada una de las partes. A continuación la aproximación se sustituye por una ecuación integral a la que se le asignó un peso y se establece que la derivada en dicha integral sea cero. Es un método adecuado para mallas complejas.

1.6.4. Clasificación de mallas

Se presentan tres tipos de malla: 1) mallas estructuradas, 2) mallas no estructuras y 3) mallas híbridas

1.6.4.1. Mallas estructuradas

Las mallas estructuradas son las que están formadas por nodos identificados de forma única por medio de índices ordenados (i, j, k) , equivalentes a una malla cartesiana

mediante cambios en las coordenadas. Cada nodo tiene 4 nodos vecinos en 2D y 6 nodos vecinos en 3D, a los cuales se puede acceder cambiando los índices i , j y k . Solo se pueden aplicar en geometrías sencillas. Se dividen en tres tipos: mallas tipo O, tipo C y tipo H. Las mallas tipo O son las que se forman debido a que los puntos se encuentran organizados circularmente, las mallas tipo C son en las que las líneas que unen los nodos se doblan formando una C y el resto componen las mallas tipo H.

De igual forma, las mallas pueden generarse en múltiples bloques de distintos tamaños cada uno con divisiones de diferentes tamaños. En general las mallas de múltiples bloques se usan para refinar de mejor manera las zonas con diferentes grados de complejidad.

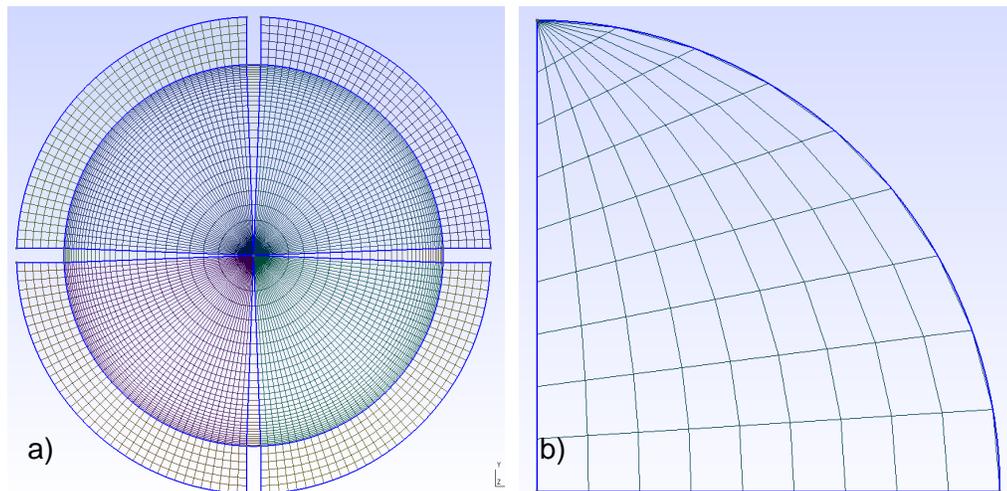


Figura 7 Mallas estructuradas a) tipo O y b) tipo C, en 2D realizada en GMSH.

Fuente: Elaboración propia

1.6.4.2. Mallas no estructuradas

Mallas que se emplean en geometrías complejas ya que su aplicación es flexible pudiendo adaptarse a distintas formas en el dominio. Se construyen en general por medio de triángulos o cuadriláteros en 2D y tetraedros o hexaedros en 3D.

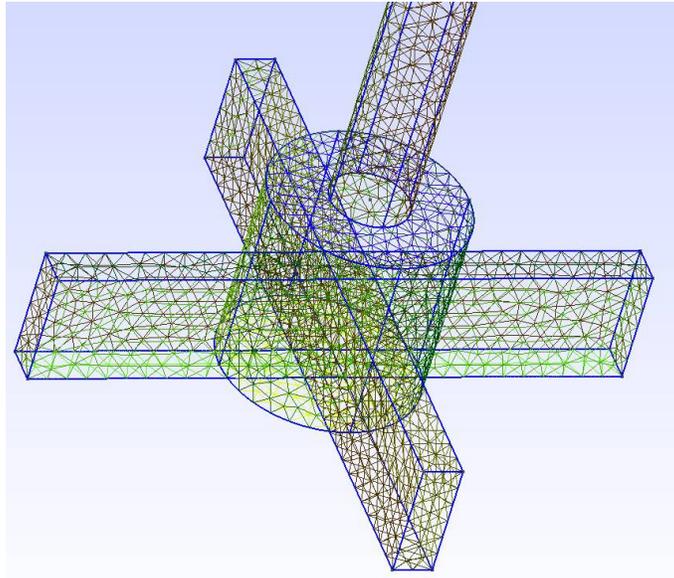


Figura 8 Malla no estructurada en 3D de una hélice de cuatro caras planas realizada en GMSH.

Fuente: Elaboración propia

1.6.4.3. Mallas híbridas

Mallas en las que se combinan las mallas estructuradas y no estructuradas en el mismo dominio.

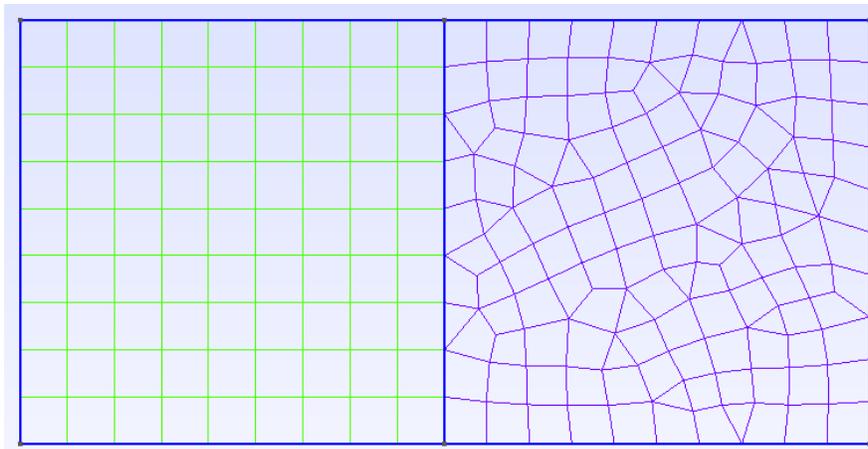


Figura 9 Malla híbrida en 2D compuesta por una malla estructurada (izquierda) y una malla no estructurada (derecha) realizada en GMSH.

Fuente: Elaboración propia

CAPÍTULO 2 Antecedentes

Se han desarrollado estudios con diferentes modelos de turbulencia comparando los resultados con los obtenidos en experimentos con velocímetros Doppler. Hartman et al. (2004), Joshie et al. (2011) y Wu (2012) desarrollaron modelos de turbulencia en los que se predecía con relativa exactitud la velocidad axial y tangencial, mientras que la velocidad radial no presentaba resultados adecuados lejos de las hélices. Hartman et al. (2004) empleó el modelo estándar de turbulencia $\kappa - \varepsilon$, el modelo de esfuerzos de Reynolds (RSM) y simulaciones para vórtices grandes (Large Eddy Simulation LES). Joshie et al. (2011) realizó la modelación para una sola fase para el modelo estándar de turbulencia $\kappa - \varepsilon$, el modelo del grupo renormalizado (RNG) RNG $\kappa - \varepsilon$, el modelo de esfuerzos de Reynolds RSM y el modelo LES. Wu (2012) evaluó seis modelos con ecuaciones de Navier-Stokes promediadas con valores de Reynolds (RANS) y modelos LES, para tres distintas escalas de grillas. Li et al. (2011) y Pan et al. (2008) desarrollaron estudios para tanques con dos hélices tipo Rushton encontrando que los modelos RANS tienen resultados similares a los resultados para el modelo LES. Khopar et al. (2003) determinó que el modelo estándar $\kappa - \varepsilon$ permite establecer el comportamiento adecuadamente para las fases gas-líquido.

En general los modelos LES son los que presentan la mejor precisión en los resultados pero requieren de mayores recursos computacionales por lo cual no todos pueden desarrollar este tipo de modelo.

Kumeresan et al. (2006) desarrollo una investigación para distintos tipos de hélices de flujo axial variando el ángulo de las aspas, número de aspas y su ancho entre otros, encontrando que para valores de consumo de energía iguales, las hélices con ángulo de inclinación de 15° generan el mayor número de flujo. Bugay et al. (2002) analizó el flujo para una hélice A310 centrado en los parámetros de turbulencia. Ankamma et al. (2010) analizó el consumo del número de poder en simples y dobles hélices rectangulares. Ge et al. (2013) propuso y analizó el uso de un nuevo tipo de hélice la m-PBT.

A continuación se presentan algunos de los documentos publicados con metodologías similares a la de este estudio:

Tabla 3 Investigaciones llevadas a cabo en tanques de mezcla rápida empleando dinámica de fluidos computacional.

Autores	Año	Nombre del documento	Resumen	Modelo de turbulencia	Software empleado
Ayala, Ramírez, Munoz y Ramírez	2015	Optimal location of axial impellers in a stirred tank applying evolutionary programming and CFD	Optimización de la localización de una y dos hélices en tanques de mezcla rápida empleando programación evolucionaria y dinámica de fluidos computacional	K-e factible	ANSYS FLUENT v14.0
Sung, Ni, Chen, Li, Lu y Yu	2015	Designing and optimizing a stirring system for a cold model of lithium electrolysis cell based on CFD simulations and optical experiments	Simulación de flujo y evaluación experimental de tanques de mezcla rápida en el proceso de electrólisis por litio usando MRF y mallas dinámicas.	K-e estándar, RNG k-e y k-e realizable	No se menciona
Wu	2014	Computational Fluid Dynamics Study of Large-Scale Mixing Systems with Side-Entering Impellers	Simulación de flujo en tanques de gran escala circulares y rectangulares con hélices laterales usando técnicas dinámicas computacionales	K-e realizable	ANSYS FLUENT 13.0
Huang y Li	2013	CFD Simulation of Flows in Stirred Tank Reactors Through Prediction of Momentum Source	Simulación de flujo en tanques de mezcla rápida con una hélice tipo Rushton empleando una ecuación modificado de predicción del momento evaluado con mallas dinámicas y MRF	K-e estándar y ecuaciones de esfuerzos de Reynolds	No se menciona
Ge, Wang, Gu y Feng	2013	CFD simulation and PIV measurement of the flow field generated by modified pitched blade turbine impellers	Simulación de flujo en tanques de mezcla rápida con hélices de cara plana m-PBT usando dinámica de fluidos computacional	K-e estándar	ANSYS FLUENT 6.3.26
Driss, Karray, Chtourou, Kchaou y Abid	2012	A STUDY OF MIXING STRUCTURE IN STIRRED TANKS EQUIPPED WITH MULTIPLE FOUR-BLADE RUSHTON IMPELLERS	Evaluación del efecto de múltiples hélices tipo Rushton en tanques de mezcla rápida empleando dinámica de fluidos computacional	No se menciona	CFD desarrollado en laboratorio
Aubin y Xuereb	2006	Design of Multiple Impeller Stirred Tanks for the Mixing of Highly Viscous Fluids Using CFD	Evaluación del efecto de múltiples hélices en el comportamiento del fluido y rendimiento de mezcla empleando dinámica de fluidos computacional en tanques de mezcla rápida	No se menciona	ANSYS CFX 5.7
Jian y Zhenming	2006	Large Eddy Simulations of Mixing Time in a Stirred Tank	Evaluación del comportamiento de flujo por medio del modelo de esfuerzos de Reynolds en términos de los vórtices de gran escala por medios computacionales en tanques de mezcla rápida.	K-e estándar	ANSYS FLUENT
Sahu, Kumar, Parwardhan y Joshi	1999	CFD modelling and mixing in stirred tanks	Estudio del comportamiento del flujo en tanques de mezcla rápida empleando cinco configuraciones de hélices de flujo axial por medio de dinámica de fluidos computacional	K-e estándar	No se menciona

Fuente: Elaboración propia

CAPÍTULO 3 Metodología

3.1. Modelo geométrico y proceso de generación del mallado

El modelo geométrico básico fue adaptado de los experimentos de Murthy y Joshi (2008), en el cual se tomó como base un tanque de mezcla rápida con cuatro paredes deflectoras ubicadas a la misma distancia en las paredes laterales del tanque y una hélice tipo Rushton de seis aletas. El diámetro del tanque, tanto de la modelación propuesta como del experimento, es de $T = 0.30m$, un diámetro del rotor $d = 0.012m$, un diámetro del eje de la hélice $b = 0.020m$ y una altura del tanque de $H = 0.30m$. Las demás características geométricas son mostradas en la tabla 4. Las características hidráulicas empleadas son agua con una densidad $\rho = 998.2 kg/m^3$ y una viscosidad $\mu = 1.003 * 10^{-3} Pa * s$, una velocidad de rotación de la hélice de $N = 250rpm$ o $26.18rad/s$, una velocidad periférica $U_{tip} = 1.31 m/s$ y un número de Reynolds $\Re = 41,467$. Los parámetros adoptados son los mismos que los empleados por Murthy y Joshi (2008).

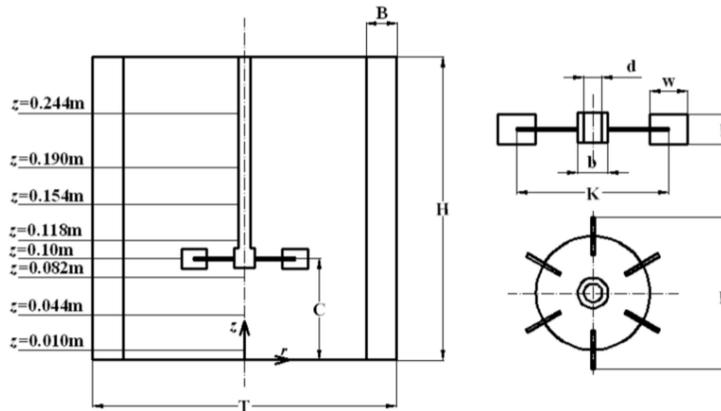


Figura 10 Esquema del tanque de mezcla rápida empleado para la modelación.

Fuente: Huang, W. y Li, K. (2013). CFD Simulation of Flows in Stirred Tank Reactors Through Prediction of Momentum Source.

Las escalas de las dimensiones son mostradas a continuación:

Tabla 4 Resumen de dimensiones del tanque de mezcla rápida empleada en la modelación.

H/T	C/T	B/T	D/T	K/D	w/D	h/D
1	1/3	1/10	1/3	3/4	1/4	1/5

Fuente: Adaptada de Huang, W. y Li, K. (2013). *CFD Simulation of Flows in Stirred Tank Reactors Through Prediction of Momentum Source.*

A partir del modelo geométrico se realizaron 3 mallas para cada modelo de turbulencia. La primera malla, basada en un bloque cuadrado de 0.40x0.40x0.40m dividido en hexaedros de 0.005mx0.005mx0.005m con divisiones en los hexaedros adyacentes a las paredes y eje del rotor de 8 celdas y en la hélice de 64 celdas, un zona cilíndrica 3 cm por encima y por debajo de la hélice de 0.15 m de radio en la cual los hexaedros de 0.005 m se dividen en 8 celdas cada uno. La segunda malla con las mismas condiciones de la primera, pero con hexaedros principales de 0.01mx0.01mx0.01m, sin la zona cilíndrica, y una tercera malla con las mismas condiciones, pero con hexaedros principales de 0.05mx0.05mx0.05m sin la zona cilíndrica.

Tabla 5 Número de celdas y composición de las mallas evaluadas determinados por medio de la función checkMesh en OpenFOAM.

Tipo de refinamiento	Número de celdas	Composición		
		Hexaedros	Prismas	Poliedros
Sin refinar	118955	101114	4987	12854
Refinamiento intermedio	280592	231117	17960	31515
Refinada	746920	615301	46729	84890

Fuente: Elaboración propia

La malla en los tres casos se realizó con la librería snappyHexMesh del software OpenFOAM. Esta librería divide iterativamente y automáticamente en hexaedros una superficie triangulada con anterioridad y la convierte en una estereolitografía (STL) con

base en una malla inicial correspondiente al bloque cuadrado mencionado. La librería permite refinar flexiblemente en niveles la malla.

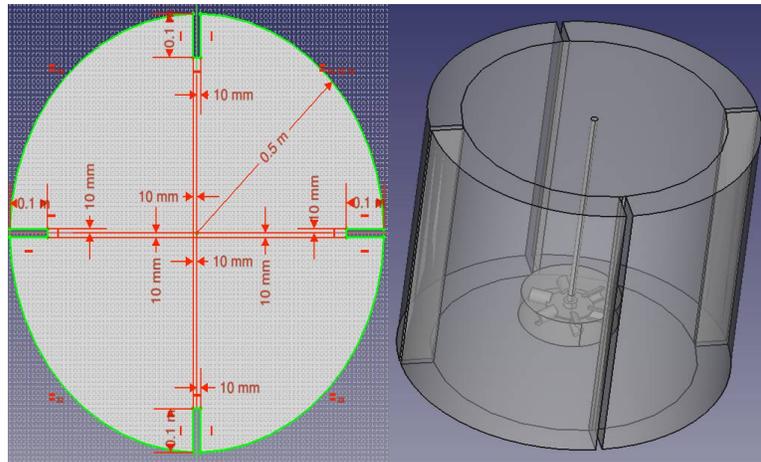


Figura 11 Superficie triangulada (STL) del tanque de mezcla rápida.

Convenciones: a) Esquema de generación de geometría en FreeCAD de la base del tanque de mezcla y b) superficie triangulada del tanque terminada.

Fuente: Elaboración propia

La superficie triangulada se realizó con FreeCAD, un software de uso libre que permite diseñar geometrías en tres dimensiones a través de técnicas de modelado paramétrico, es decir, a través de limitaciones en los parámetros y no solo por medio de coordenadas espaciales.

Para cada una de las mallas se revisó lo siguiente:

1) Oblicuidad: Parámetro que mide la distancia entre las intersecciones de una línea que conecta los centros de dos celdas con su cara en común y el centro de esa cara. A menores valores es mejor. Los valores no superaron un valor de 4 estando en el orden de 2 y 4.

2) Relación de aspecto: Parámetro que mide la relación entre la distancia mayor y menor de una celda. Los valores no superaron un valor de 6 estando entre 3 y 6. Este resulta de la evaluación de la siguiente ecuación:

$$\frac{1.0}{6.0} * |a_x| + |a_y| + |a_z|$$

$$v^{2/3}$$

Ecuación 23 Relación de aspecto en mallas en 3D

Donde a_x, a_y y a_z son las áreas de la caja que rodea la celda y v es el volumen de la celda.

3) No ortogonalidad: Parámetro que mide el ángulo entre la línea que conecta el centro entre dos celdas y la normal entre sus caras en común. Cero es el mejor valor. Un valor adecuado es el que se sea menor a 65.

Los parámetros de calidad mencionados se determinaron por medio de la función checkMesh, función en la cual se resumen la composición de la malla en términos del número de puntos, celdas, caras y cantidad de celdas, la topología y la geometría incluyendo la oblicuidad, relación de aspecto y la no ortogonalidad. A continuación se resumen los valores obtenidos:

Tabla 6 Parámetros de calidad para las diferentes tipos de mallas evaluadas.

Tipo de refinamiento	Máximo relación de aspecto	No ortogonalidad promedio	No ortogonalidad máxima	Máxima oblicuidad
Sin refinar	3.4277738	10.568943	40.05639	2.4309017
Refinamiento intermedio	3.4462907	10.50224	40.156813	2.4912058
Refinada	5.68422	10.3791	48.1023	3.90828

Fuente: Elaboración propia

La máxima oblicuidad calculada se presenta en la malla con mayor grado de refinamiento sin embargo la no ortogonalidad promedio es menor para esta misma malla. Debido al

proceso de generación de la malla en snappyHexMesh y los parámetros máximos adoptados el valor de oblicuidad puede ser mayor como en este caso. La máxima oblicuidad se presenta en un número muy pequeño de celdas teniendo un impacto no tan significativo en los resultados.

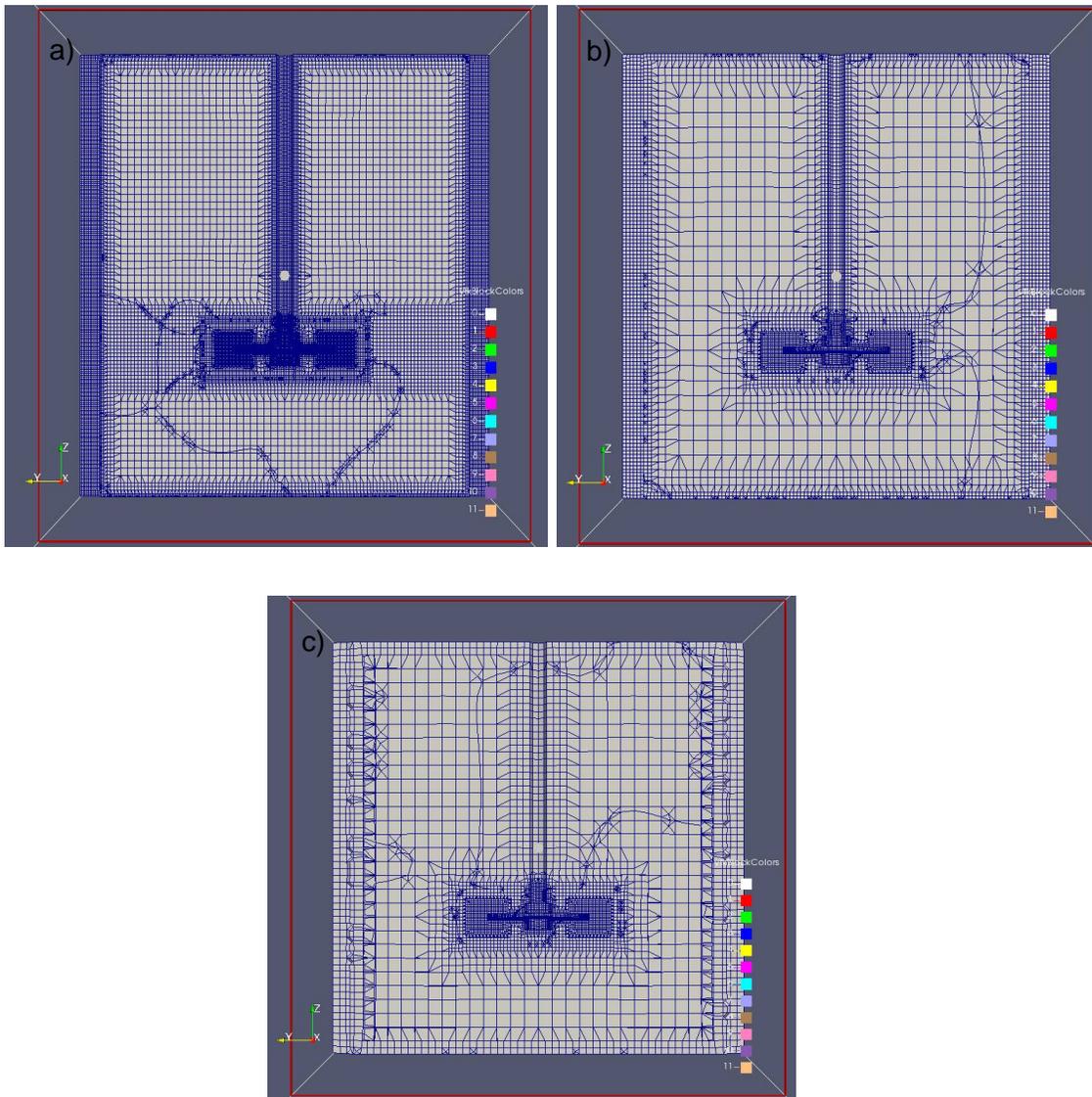
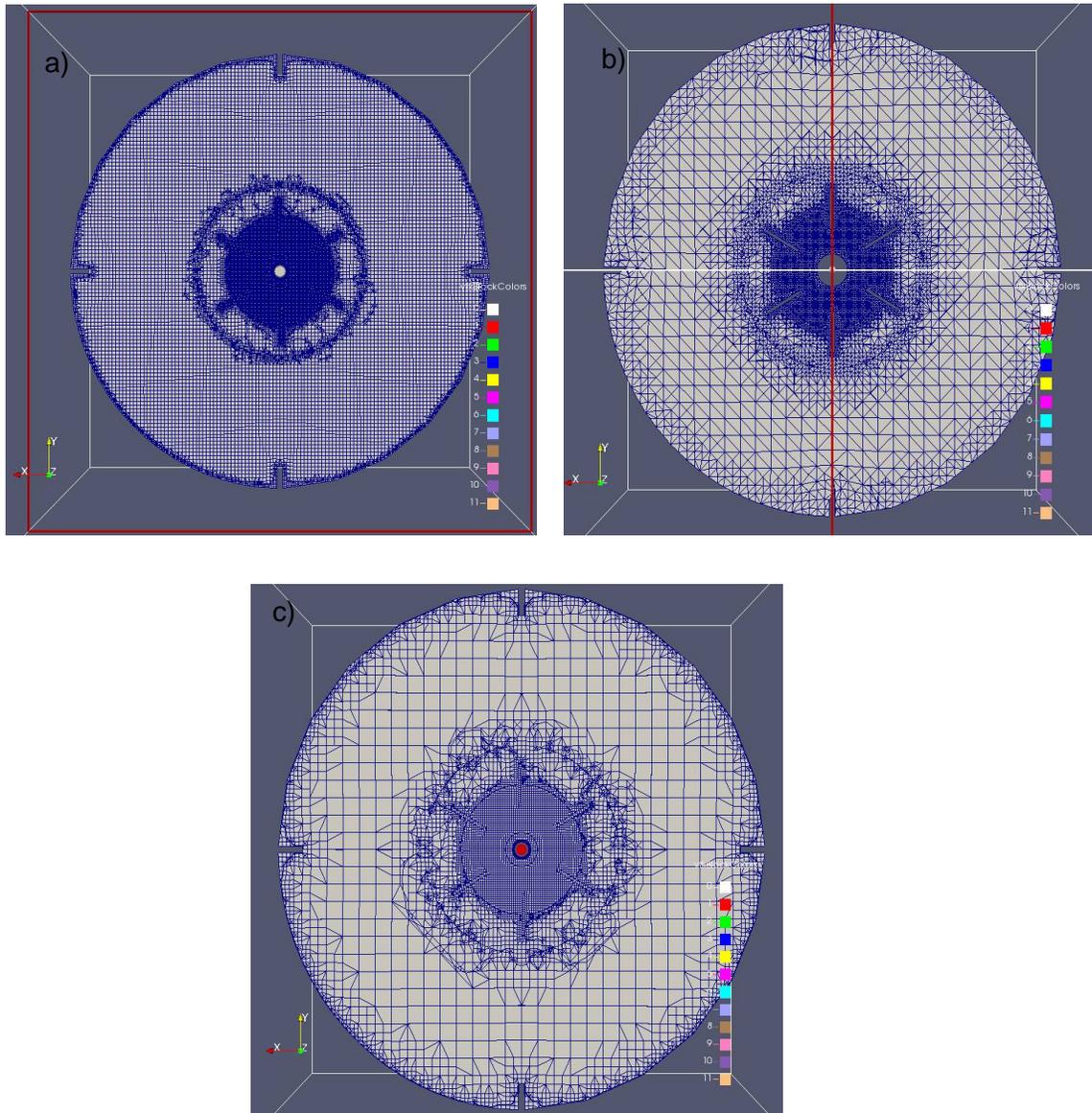


Figura 12 Corte en el eje x de las mallas empleadas en la modelación del volumen.

Convenciones: a) malla refinada, b) malla con un refinamiento medio y c) una malla sin refinar. Se emplean tres mallas con el fin de comparar los resultados encontrados entre sí.



*Figura 13 Corte en el eje z de las mallas empleadas en la modelación del volumen.
 Convenciones: a) malla refinada, b) malla con un refinamiento medio y c) una malla
 sin refinar.*

Fuente: Elaboración propia

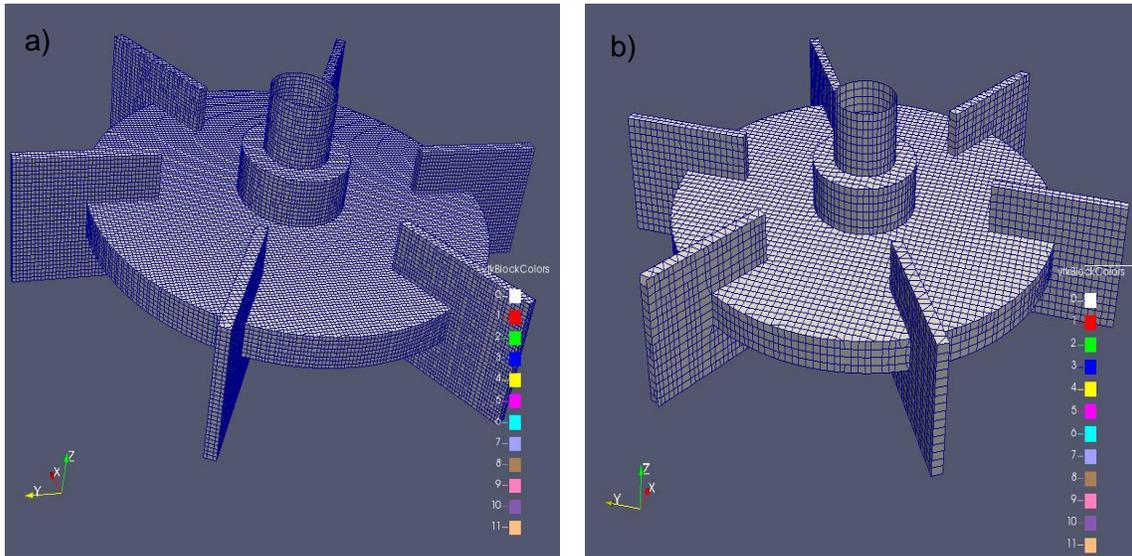


Figura 14 Esquema de la superficie de la hélice

Convenciones: a) malla refinada, y la b) malla de refinado intermedio y la malla sin refinar.

Fuente: Elaboración propia

3.2. Condiciones de frontera

3.2.1. Definición de la malla dinámica

La malla se dividió en 2 regiones, una región donde la malla es estacionaria y una región donde la malla gira con respecto al eje Z. La región que gira se tomó como un cilindro centrado en el eje de la hélice, mientras que la región estacionaria estaba compuesta por el resto del tanque.

La hélice se hace girar por medio de una malla dinámica compuesta por un cilindro de altura y radio de 6cm centrada en el eje z a una altura de 8cm, con una velocidad de 26.18 rev/s o 250rpm con una velocidad en la punta de $U_{tip} = 1.31 m/s$.

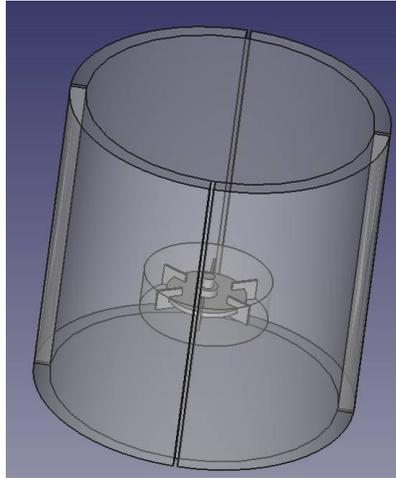


Figura 15 Esquema del tanque con una zona de rotación interior cercana a la hélice modelado en FreeCAD.

Fuente: Elaboración propia

3.2.2. Vectores y campos escalares

En la carpeta 0 del código propio de OpenFOAM se genera un archivo para cada una de las variables necesarias:

- ✓ **U:** El vector de velocidades en las paredes del tanque, eje del rotor y rotor fueron definidas como paredes sin movimiento, es decir, con la restricción de que la velocidad fuera cero en x, y y z . La velocidad de la hélice está dada por la rotación que se da a la malla, es decir 250 rev/min.
- ✓ **P:** El campo de presiones se estableció con un gradiente igual a cero en las superficies del tanque y en su interior. La presión dinámica se especifica en las paredes con gradiente cero mientras que en el plano de simetría es cero debido a que la condición de frontera se obtiene considerando su imagen como un espejo, lo que se simplifica con un gradiente normal cero para campos escalares (Rusche, 2002).
- ✓ **nut:** El campo de escalares de la viscosidad turbulenta (ν_t) se definió como cero siendo este un campo escalar. OpenFoam realiza el cálculo iterativamente. Las funciones de pared emplean este valor además de los parámetros de altura de

rugosidad (k_s) y la rugosidad constante (C_s), definidas por defecto para paredes lisas como $k_s=0$ y $C_s=0.5$.

- ✓ **k:** Se estima un valor inicial de la energía cinética turbulenta local (κ) y se asigna como un campo uniforme dentro del tanque, con un valor de $0.0046 \frac{m^2}{s^2}$, el valor se adopta como un campo uniforme debido a que la velocidad varía en cada uno los puntos del tanque. OpenFOAM calcula el valor iterativamente para obtener un resultado adecuado.

Se calcula por medio de la siguiente ecuación:

$$k = \frac{3}{2} * (U * T_i)^2$$

Donde U es la velocidad característica y T_i la intensidad turbulenta.

La intensidad turbulenta (T_i) y la escala de longitud turbulenta (l), se estiman para adoptar un valor inicial de k como sigue (Villamizar, 2014):

$$T_i = 0.16 * (Re)^{\left(-\frac{1}{8}\right)}$$

$$T_i = 0.16 * (41,471)^{\left(-\frac{1}{8}\right)} = 0.0423$$

$$l = 0.07 * L = 0.07 * 0.2m = 0.014m$$

$$k = 3/2 * (\bar{U} * T_i)^2$$

$$k = 3/2 * \left(1.31 \frac{m}{s} * 0.0423\right)^2 = 0.0046 \frac{m^2}{s^2}$$

La profundidad hidráulica (L) se toma como la profundidad hasta la hélice del tanque.

- ✓ **épsilon:** El campo escalar de épsilon (ε) o tasa de disipación de energía turbulenta por unidad de masa, se estima inicialmente como un campo uniforme de valor $0.003668 \frac{m^2}{s^3}$ en el tanque, este varía según la velocidad, que no es constante en el tanque por lo que OpenFOAM lo calcula iterativamente.

El valor se calcula de la siguiente manera:

$$\varepsilon = C_u^{3/4} * \frac{k^{3/2}}{l}$$

$$\varepsilon = (0.09)^{3/4} * \frac{\left(0.0046 \frac{m^2}{s^2}\right)^{3/2}}{0.014m} = 0.003668 \frac{m^2}{s^3}$$

3.2.3. Condiciones de frontera

Los tipos de condiciones de frontera empleados en la modelación se presentan en la Tabla 8 y se explican a continuación:

- ✓ Plano de simetría: Se estableció una condición de simetría para la tapa. Aunque el fluido puede presentar olas en la parte superior, la superficie libre fue tratada como un elemento plano y rígido. Esta condición de frontera también la utiliza Huang y Li (2013). Se optó con el fin de comparar con dicho trabajo.
- ✓ Zona de rotación y zona estacionaria: La zona de rotación y la zona estacionaria deben definirse en OpenFOAM para lo cual se aplicó el tipo de contorno cyclicAMI que se emplea para conectar dos regiones en mallas que presentan geometrías que rotan.
- ✓ Paredes: Las demás superficies incluidas la hélice y el rotor son tomadas como tipo “muro sólido” o Wall, cuya característica principal es que no presenta flujo.

3.2.4. Otras condiciones de frontera

Los modelos de turbulencia empleados son válidos en las áreas donde el flujo está completamente desarrollado. Para determinar el comportamiento del flujo en regiones cercanas a las paredes se emplean funciones basadas en ecuaciones empíricas llamadas funciones de pared. En la Tabla 9 se identifican los tipos condiciones empleadas en la simulación. Los otros tipos de condiciones son mencionados en el capítulo 3.2.2.

Las condiciones iniciales empleados se presentan a continuación:

Tabla 7 Valores empleados en las condiciones iniciales según el contorno

Nombre del contorno	$\epsilon\left(\frac{m^2}{s^3}\right)$	$k\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$	$\nu\left(\frac{m^2}{s}\right)$	$U\left(\frac{m}{s}\right)$	$P\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$
baffles.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
base.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
impeller.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
inner_volume.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
shaft.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
tank.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
tapa.stl	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	-
AMI1	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	0
AMI2	0.003668	0.0046	0	(0,0,0)	0

Fuente: Elaboración propia

Tabla 8 Tipo de condición de frontera

Nombre del contorno	Frontera asignada	Tipo de contorno
baffles.stl	Deflectores del tanque	wall
base.stl	Superficie del agua	slip
impeller.stl	Hélice	wall
inner_volume.stl	Volumen que rota	wall
shaft.stl	Rotor	wall
tank.stl	Paredes del tanque	wall
tapa.stl	Base del tanque	wall
AMI1	Zona de rotación	cyclicAMI
AMI2	Zona estática	cyclicAMI

Fuente: Elaboración propia

Tabla 9 Tipos de condiciones de frontera

Nombre del contorno	$\epsilon\left(\frac{m^2}{s^3}\right)$	$k\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$	$\nu\left(\frac{m^2}{s}\right)$	$U\left(\frac{m}{s}\right)$	$P\left(\frac{m^2}{s^2}\right)$
baffles.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
base.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	slip	zeroGradient
impeller.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
inner_volume.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
shaft.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
tank.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
tapa.stl	epsilonWallFunction	kqRWallFunction	nutkWallFunction	movingWallVelocity	zeroGradient
AMI1	ciclycAMI	ciclycAMI	ciclycAMI	ciclycAMI	ciclycAMI
AMI2	ciclycAMi	ciclycAMi	ciclycAMi	ciclycAMi	ciclycAMi

Fuente: Elaboración propia

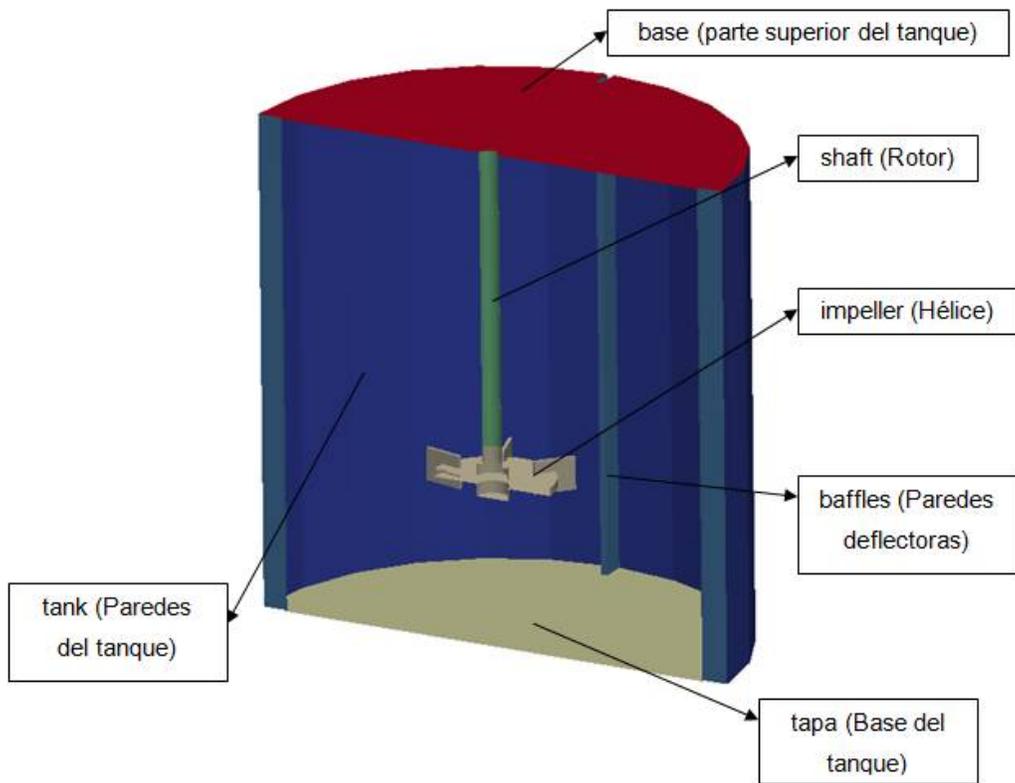


Figura 16 Condiciones de frontera para las diferentes partes del tanque de mezcla

CAPÍTULO 4 Simulación numérica

La modelación se hace en tres dimensiones para capturar efectos y fenómenos que ocurren que no se pueden determinar con modelos en dos dimensiones (Lui y García, 2011). La simulación se realizó por medio del software de uso libre OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) que emplea el lenguaje de programación C++ y en el que se incluyen solucionadores numéricos para problemas de la mecánica de medios continuos y diferentes herramientas para la manipulación de los datos. Este se divide en tres módulos; el pre-procesamiento en el cual se incluyen herramientas para manipulación de datos y creación de mallas, el módulo de resolución, en el que se incluyen distintos solucionadores, y el post-procesamiento, en el que se pueden observar y manipular los datos obtenidos. Para el funcionamiento correcto de los solucionadores se deben generar archivos estructurados y que son presentados a continuación:

4.1. Estructura de los archivos

A continuación se presentan la estructura de los archivos empleados en OpenFOAM:

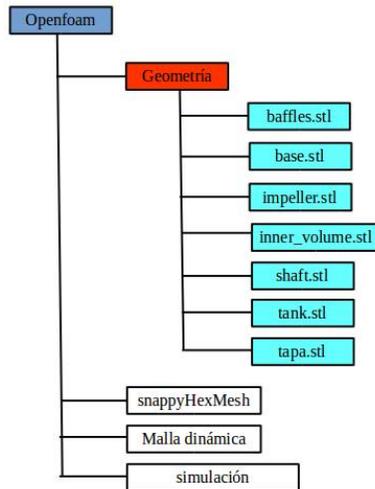


Figura 17 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en la geometría base.

Fuente: Elaboración propia

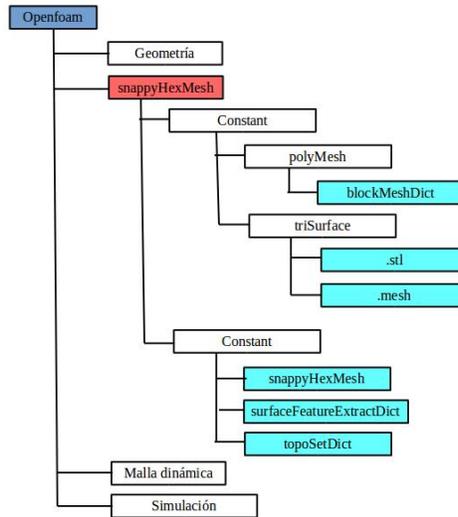


Figura 18 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en la implementación de la malla.

Fuente: Elaboración propia

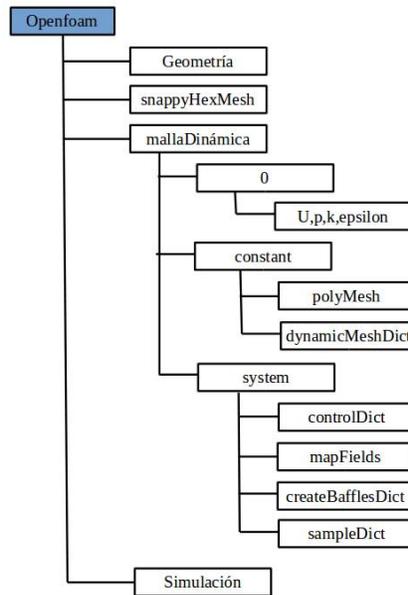


Figura 19 Estructura del modelo en OpenFOAM; documentos empleados en el directorio de control.

Fuente: Elaboración propia

La simulación numérica se hace por medio del software OpenFOAM aplicando los modelos de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar, $k - \varepsilon$ realizable, RNG $k - \varepsilon$ y $k - \omega$ (Ver capítulo 1.4.) para distintos esquemas numéricos y de refinamiento de la malla. Se empleó el solucionador pimpleDyMFOam, el cual es una variante de pimpleFoam que permite el uso de mallas dinámicas. PimpleFoam es un solucionador no permanente que permite pasos relativamente grandes al ser un algoritmo híbrido entre PISO y SIMPLE (Ferziger y Perik, 2001).

4.2. Ajustes de discretización, solucionadores y control de salida de datos

Los datos de salida y ajustes de discretización son guardados en el directorio *system*. Entre los archivos más importantes de este directorio se encuentran: *blockMesh* donde se establecen las características geométricas del bloque base de la malla; el archivo *snappyHexMeshDict* en el cual se establecen los parámetros para la construcción de la malla; el archivo *topoSetDict* donde se establecen la región de la malla que rota y la que es estática; y el archivo *meshQualityDict* en el que establecen algunos de los parámetros de calidad máximos de la malla a emplear por *snappyHexMesh*. Finalmente, dentro de este directorio se encuentra los archivos principales de control y discretización, los cuales son:

- ✓ *controlDict*: En este se elige el solucionador, en este caso *pimpleDyMFOam*, el control del tiempo, iniciando en cero (*startTime*) y terminando en un valor de 60 (*endTime*), un paso de tiempo variable (*runTimeModifiable* y *adjustTimeStep*) con un valor inicial de 0.0001 (*deltaT*), un valor máximo del número de Courant de entre 1 y 0.2 (*maxCo*), que se hizo disminuir a medida que avanzaba el tiempo de la simulación con el fin de disminuir errores por pasos de tiempo altos, guardando los datos cada 0.1s (*writeControl*).

El número de Courant se limitó a un rango entre 0.2 y 1 con el fin de obtener resultados más precisos a un costo mayor de tiempo en la simulación. El cálculo del número de Courant para el eje x se presenta a continuación:

$$C = \frac{\Delta t}{\frac{\Delta x}{u}} = \frac{u * \Delta t}{\Delta x}$$

Ecuación 24 Número de Courant

Donde u es el componente de la velocidad en x , Δt es el paso de tiempo y Δx es el cambio en el espacio.

- ✓ fvSchemes: Archivo en el que se elige el esquema de discretización temporal. En este caso, se optó por un esquema de primer orden: Euler. Para la discretización del gradiente, se escoge Gauss linear, el cual es un esquema de integración Gaussiana de segundo orden con interpolación lineal de diferencias centrales, siendo este el esquema de mayor precisión. Para la discretización del Laplaciano, se adopta “Gauss Linear Corrected” el cual es un esquema de interpolación lineal y normal a la superficie de segundo orden, conservativo. Se elige un esquema de interpolaciones lineal o de diferencias centradas, el cual se usa para interpolar la velocidad en el centro de las caras de las celdas usado en el cálculo del flujo en las caras. En el esquema del gradiente normal a la superficie se emplea la entrada “limited Corrected” o de corrección no ortogonal de carácter explícito y limitado, este gradiente se requiere para evaluar el laplaciano empleando integración Gaussiana.

A continuación se presentan los esquemas numéricos de discretización según la notación en OpenFOAM:

Tabla 10 Representación de OpenFOAM de términos con divergencia

Representación en OpenFOAM	Notación
div(phi,U)	$\nabla \cdot (UU)$
div(phi,k)	$\nabla \cdot (Uk)$
div(phi,epsilon)	$\nabla \cdot (U\epsilon)$
div((nuEff* dev 2(T(grad(U)))))	$\nabla \cdot [\mu_e \mathbf{dev}(\nabla \bar{U}^T)]$

Nota: **dev** es el tensor desviador, μ_e es la viscosidad efectiva ($\mu + \mu_t$), $\nabla \bar{U}^T$ es la transpuesta del gradiente de velocidad y phi es el flujo a través de las caras de las celdas.

- ✓ fvSolution: Archivo en el que se asignan solucionadores lineales o iterativos junto con las matrices pre-condicionadas. Se empleó el solucionador GAMG o solucionador generalizado multi-grilla geométrico-algebraico para la presión, con un suavizador GaussSeidel, usado en la mayor parte de los tutoriales de OpenFOAM, y el solucionador smoothSolver el cual usa el suavizador symGaussSeidel o suavizador simétrico de Gauss-Seidel para la velocidad, ϵ y k . Los suavizadores son solucionadores lineales de la dispersión, como Jacobi y Gauss Seidel, que se usan para disminuir los errores en la dispersión de los residuos. Para la variables se emplearon tolerancias de $1 * 10^{-8}$. El uso de los solucionadores tiene un componente de experiencia por parte del usuario quien a través de las modelaciones puede determinar el conjunto de solucionadores y suavizadores que mejor se adapten a la solución según el tipo de problema. Los tutoriales de OpenFOAM son una buena base para iniciar las modelaciones y a medida que se desarrolla la simulación se puede escoger el esquema que mejor se adapte al problema si es necesario (Ver anexo 2).

El solucionador GAMG usa el principio de una solución rápida para una sección de malla con pocos puntos, mapeando la solución a una sección de malla más refinada para lo cual adivina la solución en primera instancia y luego mejora el resultado con la malla más refinada.

Para los factores de relajación se tomó el valor de 1 para la presión, velocidad, ϵ y k lo cual busca que haya igualdad y dominancia de la diagonalidad de la matriz del dominio. Se toma un valor que garantice una solución más precisa, valores menores a 1 se emplean con el fin de mejorar la convergencia de las ecuaciones al limitar la cantidad en la que las variables cambian de una iteración a otra, modificando la matriz solución o modificando el campo de una variable directamente.

En el desarrollo de la simulación se pudo observar que el flujo llegaba a un estado permanente en alrededor de cinco segundos de tiempo físico. El tiempo adicional en la modelación se usó para obtener resultados con mayor precisión. Lo anterior se debe a que se inicializó la simulación con un esquema numérico de tiempo de primer orden

(Euler) y posteriormente se modificó a un esquema de segundo orden (Crank-Nicolson y backward)

4.3. Ejecución de la simulación

El programa se ejecuta por medio del comando “pimpleDyMFoam > log#”. Este comando permite llamar al solucionador y guardar los valores de los residuos (Ver capítulo 5.1) para la presión, la energía cinética turbulenta, la disipación de la energía cinética turbulenta, y los componentes de la velocidad en el eje x, y y z en un archivo tipo log. Los residuos son el error entre la solución exacta y la solución aproximada. Los signos “log#” hacen referencia al nombre del archivo de tipo log donde se guardan los valores de los residuos.

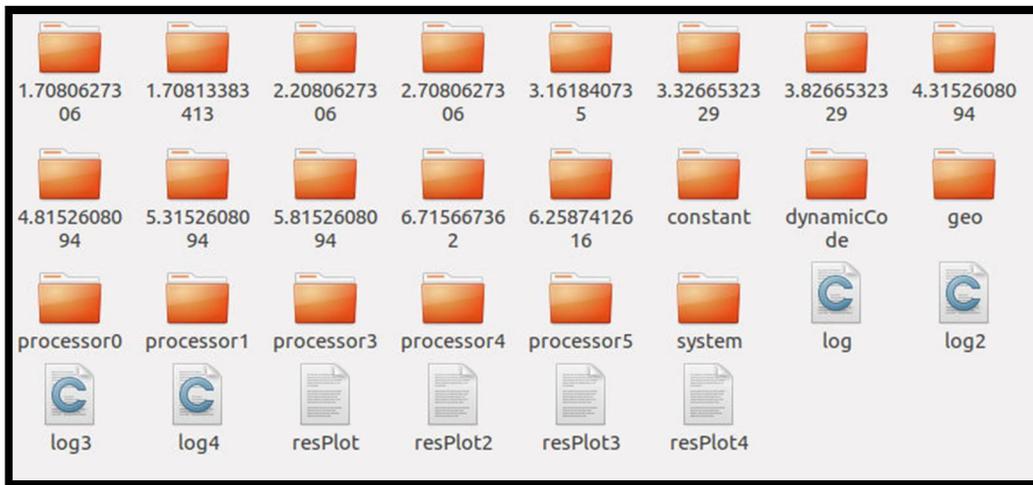


Figura 20 Directorio raíz con las diferentes carpetas necesarias para ejecutar la simulación.

Las carpetas dynamicCode y geo contienen la geometría base y el código para la malla dinámica. La malla es descompuesta en secciones por medio de la función decomposePar en una serie de carpetas llamadas processor con el fin de correr paralelamente el software en el ordenador y disminuir el tiempo de la modelación. La descomposición se hace por medio del método scotch que no requiere que el usuario

ingrese información de la geometría y el cual se busca que se minimice el número de fronteras en los procesadores. Los archivos resPlot contienen el código para graficar en gnuPlot los residuos que se encuentran en los archivos log.

Las carpetas correspondientes a números flotantes son las que almacenan los datos de las variables encontrados para el valor de tiempo correspondiente.

4.4. Documentos generados por OpenFOAM

OpenFOAM automáticamente genera archivos que contienen los resultados para cada una de las variables definidas inicialmente. Los archivos resultantes son: U, que contiene la información de los componentes de la velocidad en el eje x, y y z en cada uno de los puntos de la malla; p, que contiene la información de la presión estática; k, que contiene la información la energía cinética turbulenta; phi, que contiene la información del flujo volumétrico en las caras de las celdas; nut, que contiene la información del campo de escalares de la viscosidad turbulenta; los archivos ddt0, que contienen los valores de la segunda derivada de las variables que se encuentran entre paréntesis; Uf; que contiene la información del valor del campo de velocidades corregida según los parámetros adoptados en la modelación; y wallShearStress, que contiene la información de los esfuerzos cortantes en la paredes.

El archivo wallShearStrees es un documento que se genera en el post-procesamiento al emplear la función “pimpleDyMFoam -func wallShearStress”. La función permite determinar los esfuerzos cortantes en todas las paredes del modelo.

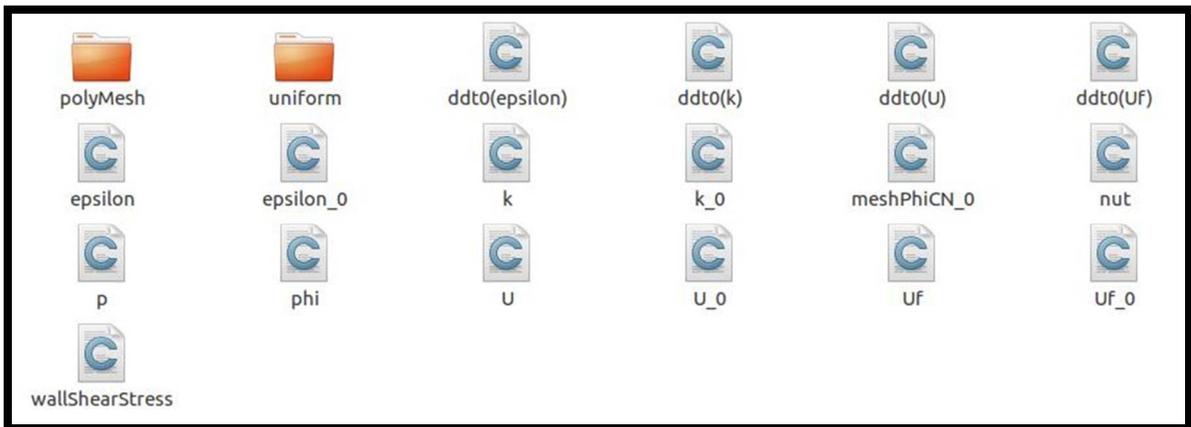


Figura 21 Archivos generados por OpenFOAM para esquemas numéricos de segundo orden en el solucionador pimpleDyMFoam.

Fuente: Elaboración propia

CAPÍTULO 5 Resultados y discusión

Los datos obtenidos en el modelo se compararon con los obtenidos en el modelo numérico desarrollado por Huang y Li (2013), en el que emplearon términos de momento modificados para las caras de las hélices, y con los datos experimentales obtenidos por Wu y Patterson (1989).

Los programas que permitieron obtener la información necesaria son los siguientes:

- a) gnuplot: Software de uso libre que permite extraer, leer y graficar datos de archivos tipo log con el cual se graficó la evolución de los residuos para la presión, la energía cinética turbulenta, la disipación de la energía cinética turbulenta, y los componentes de la velocidad en el eje x , y y z .
- b) ParaView: Módulo de lectura de datos de OpenFOAM que permite graficar y animar las diferentes variables para los pasos de tiempo guardados.

5.1. Residuos

Los residuos permiten medir el error entre la solución numérica aproximada y la solución exacta, entre más pequeño el valor mejor será la solución numérica de un problema. En matrices estos se obtienen de manera iterativa por lo que la tolerancia que se adopte es el criterio que se considera para que la solución sea convergente. La convergencia permite establecer que se cumplen las ecuaciones de conservación de masa y conservación de cantidad de movimiento.

OpenFOAM permite evaluar tanto los residuos iniciales como los residuos finales para cada una de los pasos de tiempo realizados, así como el valor del número Courant máximo y promedio. El criterio principal para determinar la convergencia se asocia a los residuos iniciales. Los residuos iniciales son los errores entre la solución exacta y la solución aproximada que se presentan en la primera iteración, mientras que el residuo

final es el error que se presenta en la última iteración. El residuo inicial para un paso de tiempo está asociado al residuo final obtenido en el paso de tiempo anterior como se observa en la Figura 22.

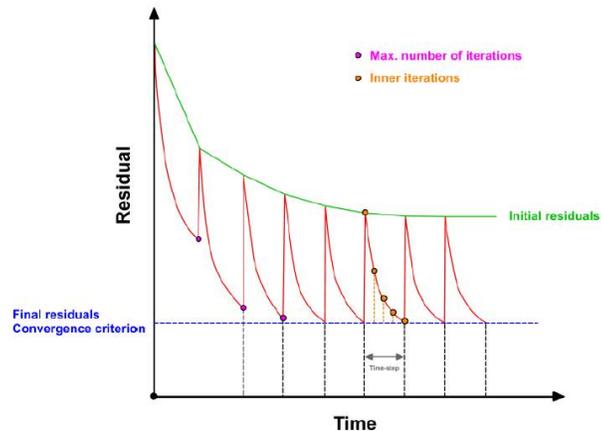


Figura 22 Criterio de convergencia de residuos iniciales y finales

Fuente: Guerrero Joel (2013). *Introductory OpenFOAM Course*

Para cada una de las modelaciones realizadas se verificó que se cumpliera la convergencia de cada una de las variables revisando que los residuos iniciales estuvieran por debajo de 1×10^{-4} para κ, ε y la velocidad “y” en (x, y, z) , y por debajo de 1×10^{-5} para la presión.

Se emplearon los algoritmos GAMG y smoothsolver, para resolver la presión, velocidad, k y épsilon, con tolerancias de 1×10^{-8} . La presión presentó la mayor dificultad para converger. Se emplearon hasta 3 correctores de no ortogonalidad, dependiendo del modelo de turbulencia.

Cada modelo evaluado presentó diferente evolución en los residuos obtenidos. El modelo RNG $\kappa - \varepsilon$ presentó las mayores oscilaciones, mientras que el para el resto de modelos la oscilación fue menor.

De las simulaciones se determinó que el cumplimiento de los residuos no garantiza una solución precisa por lo que los modelos deben ser comparados con datos experimentales.

En la Figura 23 se presenta la evolución de los residuos iniciales por iteración para el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$. Se observan oscilaciones para las diferentes variables, que disminuyen a medida que avanza la simulación. En la Figura 24 se presenta la evolución para el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable el cual no presenta las mismas oscilaciones. Otros residuos encontrados se pueden observar en el anexo 3.

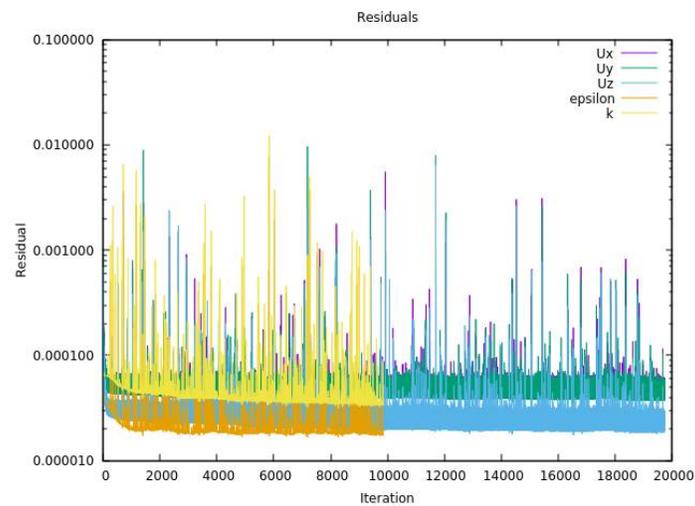


Figura 23 Evolución de residuos para el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$ empleando el software Gnuplot.

Fuente: Elaboración propia

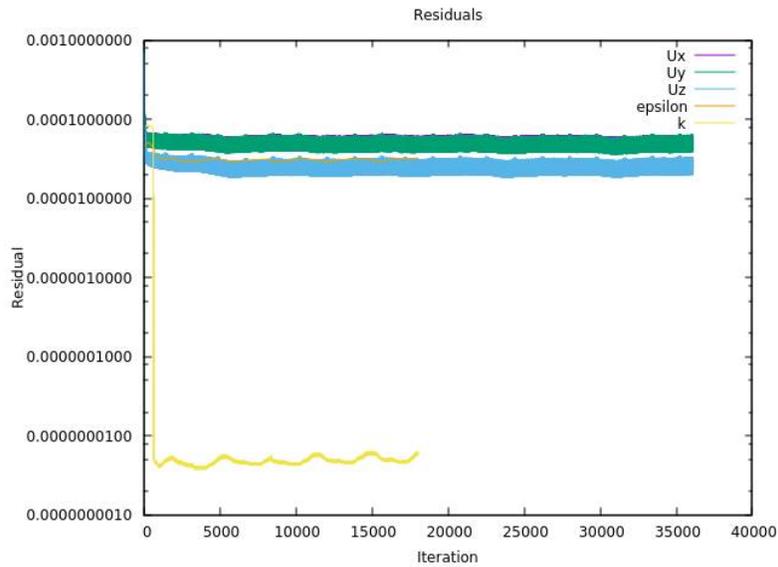


Figura 24 Evolución de residuos para el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable empleando el software Gnuplot.

Fuente: Elaboración propia

5.2. Comparación entre esquemas numéricos y diferentes tipos de refinamiento de malla

Se compararon los resultados obtenidos para la velocidad axial y la energía cinética turbulenta en las alturas $z = 0.010m$, $z = 0.044m$, $z = 0.082$, $z = 0.100m$, $z = 0.118m$, $z = 0.154$, $z = 0.190$ y $z = 0.244m$ con los resultados experimentales y los obtenidos en la modelación de Huang y Li (2013). Se emplearon tres tipos de refinamiento de mallas diferentes con esquemas numéricos de divergencia distintos (Ver tabla 11). Los datos son tomados cuando una de las aspas de la hélice se encuentra equidistante de dos de las paredes deflectoras en una línea desde el centro del tanque hasta las paredes en un ángulo de 45 grados.

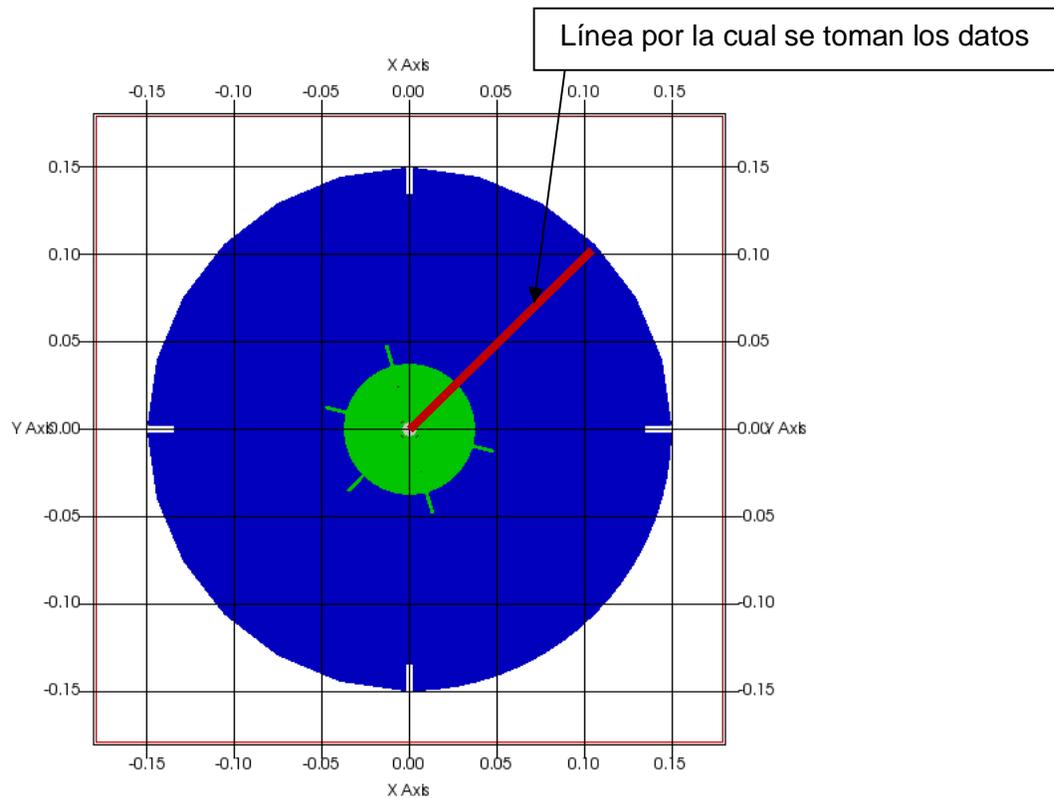


Figura 25 Ubicación de las mediciones en el tanque y posición de la hélice para diferentes alturas.

El comportamiento de la velocidad axial para las distintas alturas se presenta en la Figura 26. Los modelos con esquemas numéricos de segundo orden con valores de $\Delta t = 10^{-5}$ y mallas de refinamiento intermedio y alto arrojaron datos semejantes a los experimentales menos en eje de la hélice ($z = 0.100m$). Los esquemas de primer orden y mallas con bajo refinamiento presentan ondulaciones que difieren considerablemente de los resultados experimentales.

Para la malla de menor refinamiento se obtuvieron resultados que se acercan a los experimentales con un costo computacional en tiempo 10 veces menor que para una malla refinada. Solamente el esquema de numérico de segundo orden para k, ϵ y U muestra resultados similares a los experimentales en el centro del tanque bajo la hélice. Los demás presentan velocidades axiales cercanas o menores a cero, debido a la baja

precisión al modelar la turbulencia donde las corrientes del tanque chocan. En el eje de la hélice ($z = 0.100m$) se presentan diferencias considerables entre la velocidad axial determinada en los ensayos experimentales y los valores obtenidos en la modelación, en todos los esquemas y refinamientos de malla, los valores más adecuados se presentan para Δt muy pequeños. En caso contrario, la velocidad axial en esta sección diverge ondulantemente, presentando números de Courant altos.

Los modelos de turbulencia y esquemas numéricos empleados en las modelaciones se presentan en la Tabla 11. En esta sección, se presenta el modelo de turbulencia k- ϵ estándar con diferentes esquemas numéricos para diferentes grados de refinamiento con el fin de verificar la precisión de los resultados entre modelos.

Tabla 11 Modelos de turbulencia, esquemas de divergencia y grado de refinamiento de las mallas empleadas en las simulaciones.

Simulación	Modelo de turbulencia		Esquema numérico	Grado de refinamiento de malla
Malla refinada primer orden	k- ϵ estándar	U	Upwind (Primer orden)	Refinada
		k	Upwind (Primer orden)	
		Epsilon	Upwind (Primer orden)	
		U	Linear (Segundo orden)	
Malla refinada segundo orden	k- ϵ estándar	k	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	Refinada
		Epsilon	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
		U	Linear (Segundo orden)	
		k	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
Malla sin refinar segundo orden	k- ϵ estándar	Epsilon	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	Sin refinar
		U	Linear (Segundo orden)	
		k	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
		Epsilon	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
Malla refinamiento medio segundo orden	k- ϵ estándar	U	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		k	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
		Epsilon	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
		U	Linear (Segundo orden)	
Malla refinamiento medio segundo orden linear	k- ϵ estándar	k	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		Epsilon	Linear (Segundo orden)	
		U	Linear (Segundo orden)	

Fuente: Elaboración propia

En la tabla se presenta el error relativo entre las distintas simulaciones y los datos experimentales de Murthy y Joshi (2008).

Tabla 12 Error relativo porcentual determinado para la velocidad axial en $z=0.154m$

Punto (Derecha a izquierda)	1	2	5	6	7	8	9	10	11	Error promedio (%)
Simulación	Error (%)	Error promedio (%)								
Malla refinamiento intermedio 2do orden lineal	6.855	-26.797	22.642	21.324	16.667	11.979	7.538	-11.161	-26.360	15.929
Malla refinada 2do orden	6.855	-25.490	38.679	31.618	10.714	-1.562	-3.518	-18.304	-26.360	17.168
Malla refinada 1er orden	9.274	-37.908	3.774	-3.676	-25.000	-23.958	-16.583	-18.304	-26.360	17.351
Malla sin refinar 2do orden	16.532	-22.222	-25.472	-15.441	-1.190	16.667	29.146	24.107	-33.473	19.395
Malla refinamiento intermedio híbrido	5.242	-50.327	-1.887	-10.294	-13.690	-10.938	-7.538	-23.214	-33.473	16.484
Huang y Li	32.661	-16.340	-4.717	8.088	16.667	21.354	28.643	27.232	23.849	18.900
Error promedio (%)	12.903	29.847	16.195	15.074	13.988	14.410	15.494	20.387	28.312	17.538

Fuente: Elaboración propia

En las siguientes gráficas se presentan los resultados de la velocidad axial para los distintos modelos empleados (ver Tabla 11), los resultados obtenidos en la modelación realizada por Huang y Li (2013), y los resultados experimentales de Murthy y Joshi (2008). Se grafica la relación ente la velocidad axial dividido la velocidad en la punta de la hélice con $1.31m/s$ (V_z/U_{tip}) contra la posición con respecto al radio del tanque (r/R).

Valores más cercanos a los resultados experimentales son presentados en el capítulo 5.4 donde se emplean esquemas numéricos de segundo orden.

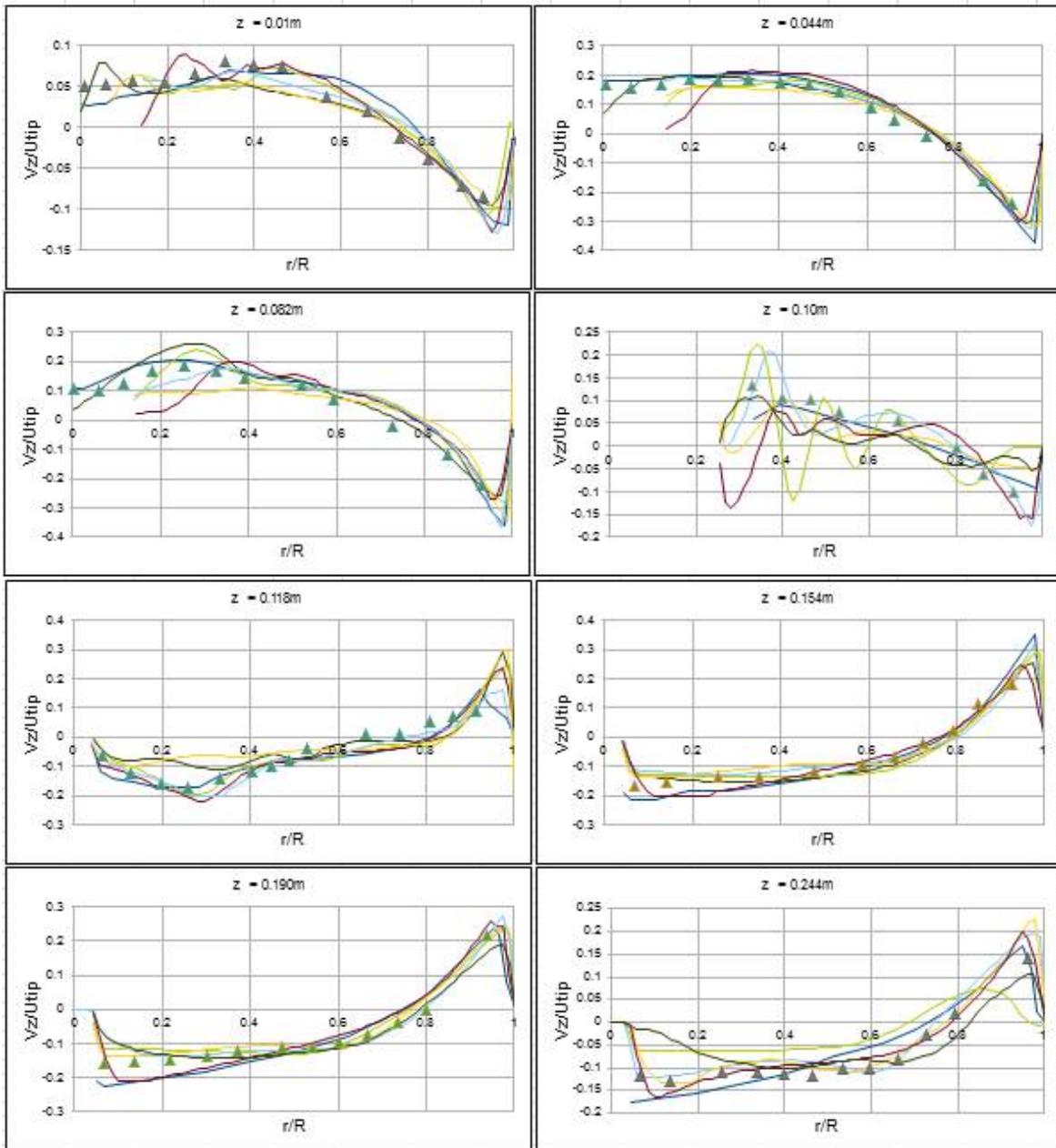


Figura 26 Resultados de la modelación para la velocidad axial con el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar para diferentes esquemas numéricos

Convenciones: malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), malla refinada con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), malla refinada con esquemas numéricos de primer orden (—), malla sin refinar con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), una malla de refinamiento intermedio con esquemas de segundo orden lineales (—), datos experimentales (▲) (Murthy y Joshi, 2008) y datos obtenido en el modelo de predicción RSM (—) (Huang y Li, 2013).

La macroinestabilidad que se presenta en los resultados de la figura 22 se debe a la compleja interacción entre el chorro de agua con el flujo en la cara superior e inferior del tanque. La oscilación resultante es llamada inestabilidad de chorro (Murthy y Joshi, 2008).

La energía cinética turbulenta κ , obtenida a distintas alturas es menor que los valores experimentales y que los valores obtenidos por Huang y Li (2013) para las distintas alturas como se observa en la Figura 26. El comportamiento predicho es similar cualitativamente, pero los valores son menores para todos los refinamientos de mallas y esquemas de divergencia. Distintos autores han reportado que los valores de κ son subestimados o sobreestimados para distintos modelos de turbulencia como $\kappa - \varepsilon$ estandar y RNG $\kappa - \varepsilon$ (Armenante and Chou, 1996; Bakker and Van den Akker, 1994; Bakker et al., 1996; Sheng et al., 1998; Aubin et al., 2004). La mayor diferencia se presenta para alturas cercanas a la base del tanque. Los resultados obtenidos por Huang y Li (2013) son más cercanos a los experimentales para la velocidad axial por lo que es importante considerar que las estructuras físicas pueden ser reemplazadas por valores teóricos o experimentales en la modelación. Dersken (2001) publicó las mejores predicciones para la turbulencia empleando el modelo de turbulencia LES o simulación de vórtices grandes.

A continuación se presentan los resultados de la modelación gráficamente para las distintas alturas. Se grafica la relación entre la turbulencia y la velocidad en la punta de la hélice al cuadrado (κ/U_{tip}^2), donde U_{tip} es la velocidad en la punta, igual a $1.31m/s$, contra la posición con respecto al radio del tanque (r/R).

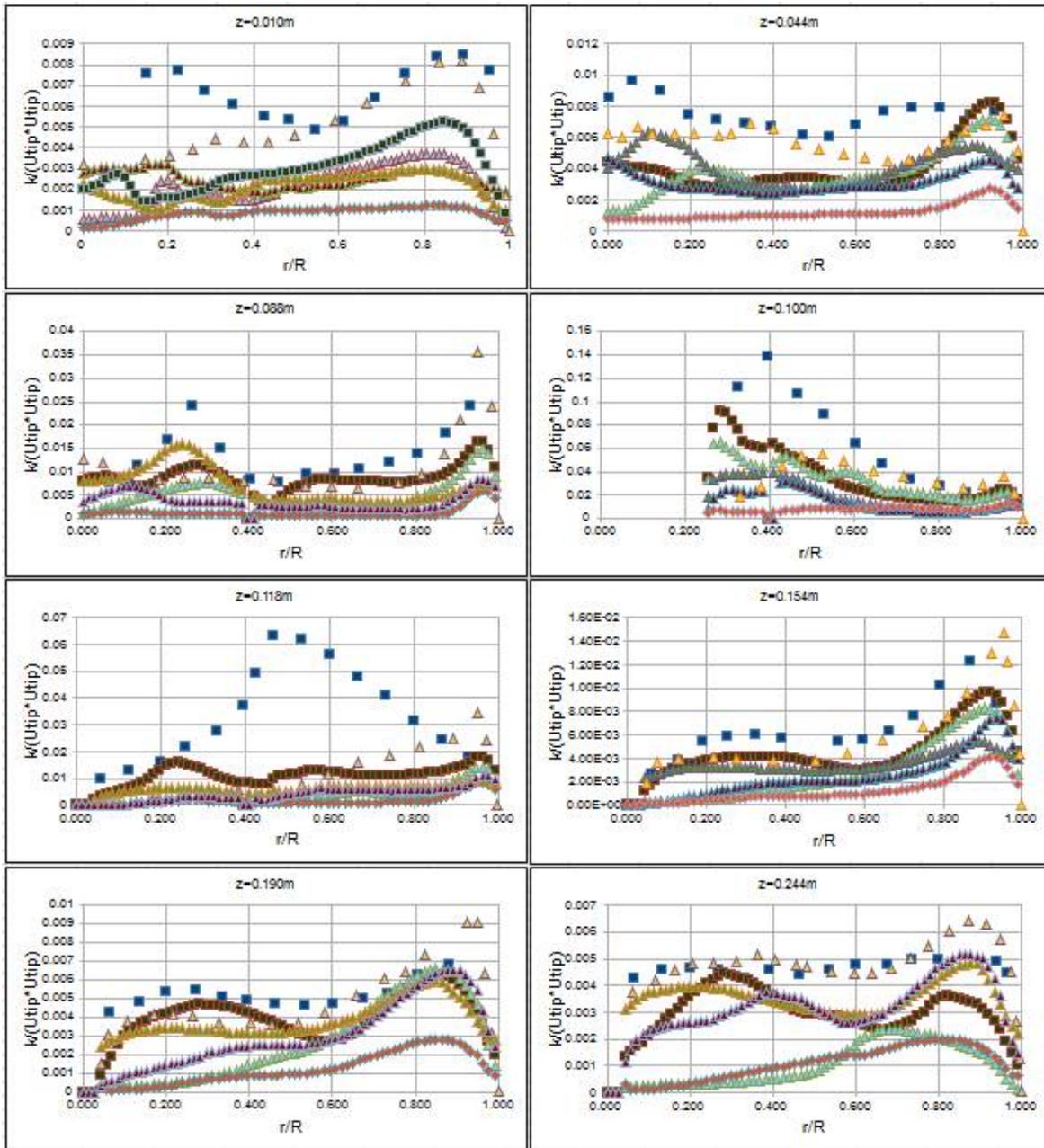


Figura 27 Resultados de la modelación para la energía cinética turbulenta

Convenciones: malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden lineales (■), malla refinada con esquemas numéricos de segundo orden lineales (▲), malla refinada con esquemas numéricos de primer orden (◆), malla sin refinar con esquemas numéricos de segundo orden lineales (▲), malla de refinamiento intermedio con esquemas de segundo orden híbridos (▲), evaluados por el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar, datos experimentales (■) (Murthy y Joshi, 2008) y datos obtenido en el modelo de predicción RSM (▲) (Huang y Li, 2013).

En la tabla se presenta el error relativo entre las distintas simulaciones y los datos experimentales de Murthy y Joshi (2008).

Tabla 13 Error relativo porcentual de la energía cinética turbulenta determinado para $z=0.154m$.

Punto (Derecha a izquierda)	1	2	5	6	7	8	9	10	11	
Simulación	Error	Error	Error	Error	Error	Error	Error	Error	Error	Error promedio (%)
Malla refinamiento intermedio 2do orden lineal	6.855	-26.797	22.642	21.324	16.667	11.979	7.538	-11.161	-26.360	15.929
Malla refinada 2do orden	6.855	-25.490	38.679	31.618	10.714	-1.562	-3.518	-18.304	-26.360	17.168
Malla refinada 1er orden	9.274	-37.908	3.774	-3.676	-25.000	-23.958	-16.583	-18.304	-26.360	17.351
Malla sin refinar 2do orden	16.532	-22.222	-25.472	-15.441	-1.190	16.667	29.146	24.107	-33.473	19.395
Malla refinamiento intermedio híbrido	5.242	-50.327	-1.887	-10.294	-13.690	-10.938	-7.538	-23.214	-33.473	16.484
Huang y Li	32.661	-16.340	-4.717	8.088	16.667	21.354	28.643	27.232	23.849	18.900
Error promedio (%)	12.903	29.847	16.195	15.074	13.988	14.410	15.494	20.387	28.312	17.538

Fuente: Elaboración propia

5.3. Comparación entre modelos de turbulencia

Considerando que los resultados más precisos entre diferentes mallas, presentados en el capítulo 5.2, son los obtenidos para una de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden y esquemas híbridos entre primer y segundo orden con el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ estándar, se procedió a simular utilizando las mismas condiciones con los modelos de turbulencia por *RNG* $\kappa - \varepsilon$, $\kappa - \varepsilon$ realizable y $\kappa - \omega$.

La caracterización más precisa de la componente axial de la velocidad se presentó para el modelo de turbulencia *RNG* $\kappa - \varepsilon$ con las mayores diferencias presentándose en las centro del tanque. Los distintos modelos presentan diferencias considerables en el eje de la hélice por lo que es recomendable realizar un mejor mallado en esta zona.

En la Tabla 14 se presentan los modelos de turbulencia, esquemas numéricos por variable y el grado de refinamiento de la malla para las simulaciones comparadas.

Tabla 14 Modelos de turbulencia, esquemas de divergencia y grado de refinamiento de mallas empleadas en las simulaciones

Simulación	Modelo de turbulencia		Esquema numéricos	Grado de refinamiento de malla
k-e estándar híbrido	k-e estándar	U	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		k	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
		Epsilon	Linear limited v1 (Primer y segundo orden)	
k-e estándar lineal	k-e estándar	U	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		k	Linear (Segundo orden)	
		Epsilon	Linear (Segundo orden)	
RNG k-e	RNG k-e	U	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		k	Linear (Segundo orden)	
		Epsilon	Linear (Segundo orden)	
k-e realizable	k-e realizable	U	Linear (Segundo orden)	Intermedio
		k	Linear (Segundo orden)	
		Epsilon	Linear (Segundo orden)	

Fuente: Elaboración propia

A continuación, se comparan gráficamente los resultados obtenidos en las simulaciones con los datos determinados por Huang y Li (2013) y los resultados experimentales realizados por Murthy y Joshi (2008).

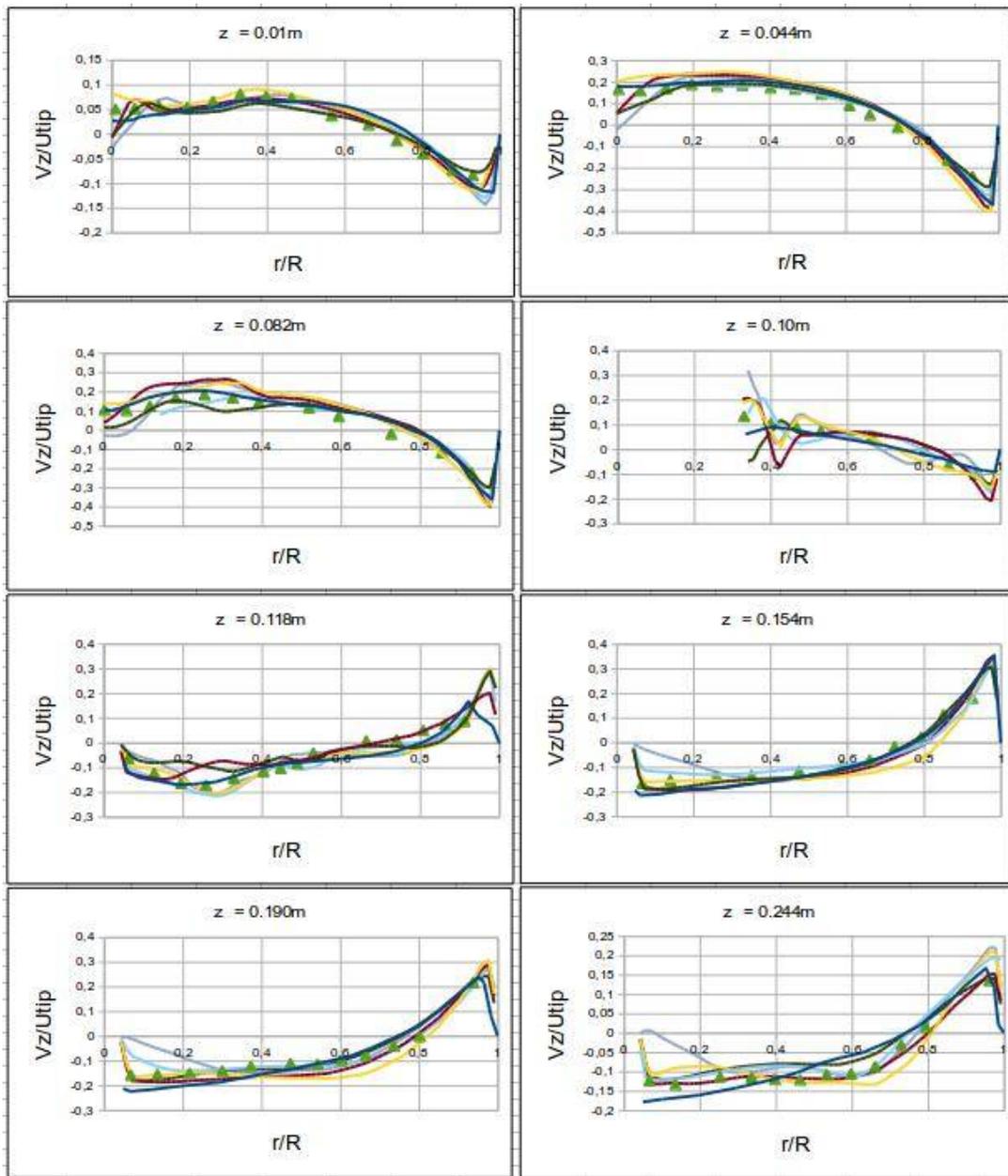


Figura 28 Resultados de la modelación de la velocidad axial de las mallas de refinamiento intermedio para diferentes modelos de turbulencia

Convenciones: modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar con esquemas numéricos de segundo orden híbridos (—), modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), modelo de turbulencia RNG $k - \epsilon$ con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), y modelo de turbulencia $k - \omega$ con esquemas numéricos de segundo orden lineales (—), datos experimentales (▲) (Murthy y Joshi, 2008) y datos obtenido en el modelo de predicción RSM (—) (Huang y Li, 2013).

La energía turbulenta cinética es simulada de manera más precisa por el modelo estándar $\kappa - \varepsilon$ de segundo orden, sin embargo todos los modelos subdimensionan el valor como se observa en la Figura 29. El modelo RNG $\kappa - \varepsilon$, $\kappa - \varepsilon$ realizable y $\kappa - \omega$ presentan, en la mayoría de casos, resultados similares. El subdimensionamiento de los valores se debe a la complejidad e inestabilidad del flujo en la región de la hélice. Los resultados deberían ser contrastados con mallas más refinadas para verificar su validez.

En las simulaciones se observa el subdimensionamiento de la energía cinética turbulenta principalmente en $z=0.010\text{m}$, $z=0.044\text{m}$, $z=0.100\text{m}$ y $z=0.118$, para los diferentes modelos empleados debido a la complejidad e inestabilidad del flujo en la zona de rotación del flujo y a la continua generación de energía cinética (Lines y Escudie, 2003). Se puede inferir que los modelos de turbulencia fallan en determinar los detalles de los cambios en la energía cinética. Los resultados obtenidos para $z=0.100\text{m}$ son mejores que los obtenidos para los diferentes modelos a excepción del modelo LES. Para $z=0.118\text{m}$ todos los modelos, a excepción del modelo LES, presentan resultados bastante alejados de los experimentales.

Al obtener valores en general menores de la energía cinética turbulenta, tanto en los esquemas numéricos de primer como de segundo orden, la modelación para distintos valores de concentración y tiempos de mezcla pueden no ser precisos. Debido a que la energía cinética está asociada directamente con la formación de vórtices en el tanque, se puede esperar que la modelación genere mayores tiempos de mezcla que los reales.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para la energía cinética turbulenta en los diferentes modelos de manera gráfica comparados con los datos de las simulaciones de Huang y Li (2013) y los datos experimentales.

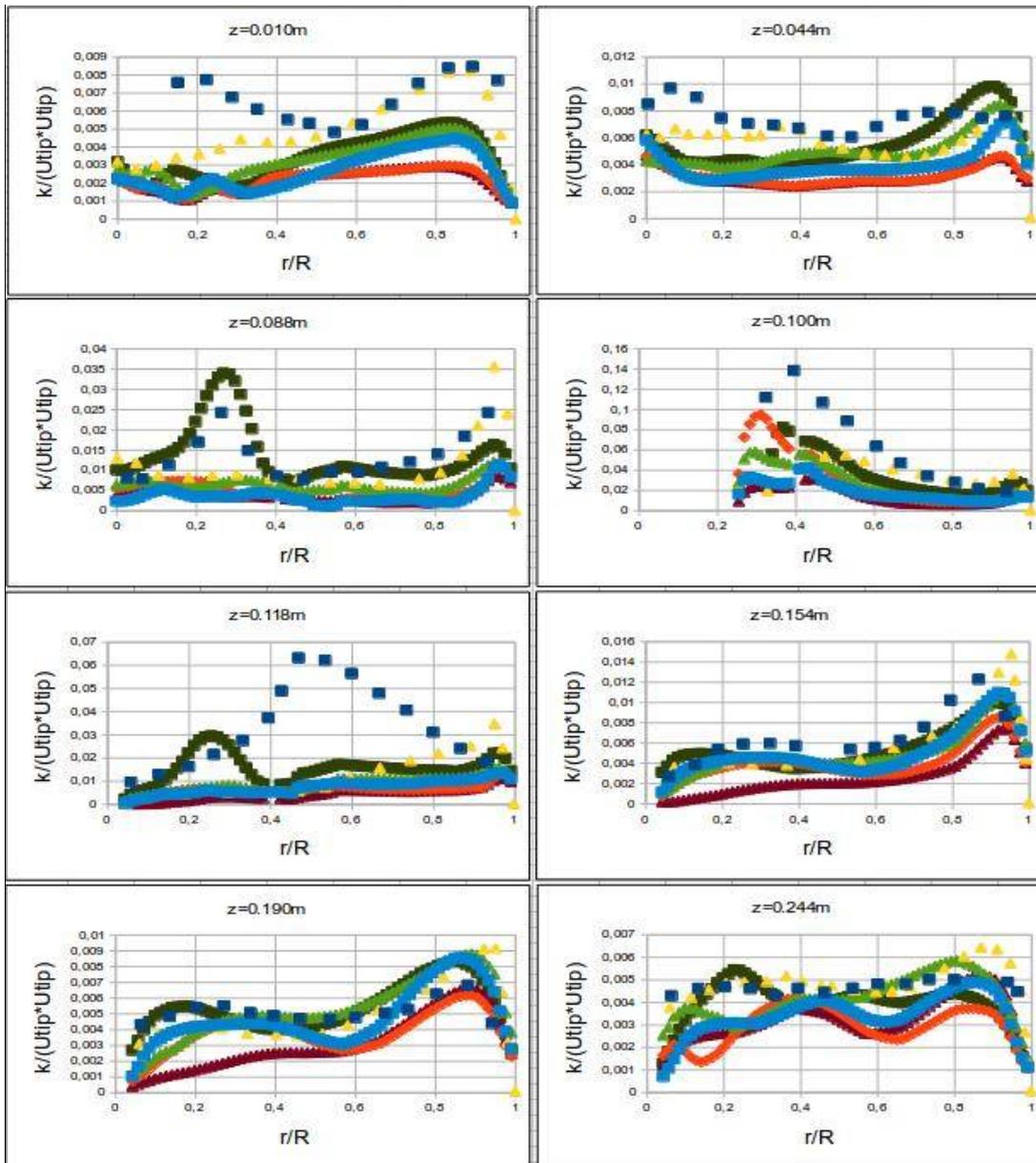


Figura 29 Resultados obtenidos para la energía cinética turbulenta en los modelo de turbulencia

Convenciones: $\kappa - \varepsilon$ estándar con esquemas de divergencia segundo orden lineal (■), $\kappa - \varepsilon$ estándar con esquema de divergencia segundo orden híbrido entre esquema de segundo orden y primer orden (▲), $\kappa - \varepsilon$ realizable con esquema de divergencia de segundo orden lineal (◆), $RNG \kappa - \varepsilon$ con esquema de divergencia de segundo orden lineal (▲) y $\kappa - \omega$ con esquemas de divergencia de segundo orden lineal (■), comparados con datos experimentales (■) (Murthy y Joshi, 2008) y datos obtenido en el modelo de predicción RSM (▲) (Huang y Li , 2013).

5.4. Tiempo de ejecución

Las simulaciones se llevaron a cabo en un computador portátil Toshiba Satellite P755-S5269 con procesador core i7 de segunda generación, 1gb de video, 6gb de memoria ram y caché de 6mb. Los modelos se corrieron con 6 procesadores. El tiempo de ejecución en horas para los tres distintos tipos de malla varió principalmente según el tipo de refinamiento y en menor medida varió según el modelo de turbulencia empleado. Los tiempos de ejecución promedio se presentan a continuación:

Tabla 15 Comparación en el tiempo de ejecución requerida para los modelos computacionales

Tipo de malla	Tiempo de ejecución (h)
Sin refinar	72
Refinado medio	144
Refinada	480

Fuente: Elaboración propia

Mejores resultados pueden obtenerse en la medida en la que se generen mallas suficientemente finas (Deglon y Meyer, 2006), sin embargo el tiempo de modelación aumenta considerablemente.

Huang y Li (2013) realizaron la modelación del tanque de mezcla por medio del método de múltiples zonas de referencia, o MRF por sus siglas en inglés. En el método MRF el tanque se divide en dos zonas; una zona interna que rota y una externa que permanece estática, este tiene un costo computacional menor pero tiene baja precisión y requiere más tiempo para converger (Huang y Li, 2013). Los autores mencionados también realizaron la modelación por medio de la predicción de la fuente de momento con resultados similares a los obtenidos por el método de las mallas dinámicas (SM) con un tiempo mayor que el del método MRF. En este modelo se añade una fuente de momento a las celdas que representan a las hélices mientras que las hélices reales son ignoradas. Sin embargo, es importante considerar que los datos de momento son obtenidos de datos

experimentales. Perng y Murthy (1994) proponen el uso de malla dinámicas y deformables pero el tiempo de la simulación es incluso mayor que el de las mallas dinámicas.

5.5. Campo de velocidades

En la Figura 30 se muestra el campo de velocidades en el eje central del tanque en un corte vertical. En este, los mayores gradientes se presentan en el eje de la hélice. De igual manera, se puede observar que el flujo se desplaza desde las aspas de las hélices horizontalmente, posteriormente choca con las paredes del tanque y en estas el flujo se divide en dos. El flujo se divide, una fracción viaja hacia arriba y la otra hacia abajo. Se presentan dos regiones de movimiento circular, una arriba y otra abajo de la hélice en la cual el flujo se devuelve hasta las hélices repitiéndose el movimiento. El flujo circular en la parte superior llega al 90% de la altura del tanque, lo cual concuerda con simulaciones hechas por Ng et al (1998), Yapici et al (2008) y Huang y Li (2013).

La distribución de los vectores de velocidad observada concuerda con los obtenidos en el trabajo de Huang y Li (2013), sin embargo los dos difieren de los obtenidos por Murthy y Joshi (2008) específicamente en la parte superior de la hélice, en el cual se presenta un vórtice poco definido. En la zona inferior en el centro del tanque ($z=0.010\text{m}$), se presentaron velocidades axiales negativas en todos los modelos de turbulencia a excepción del modelo $k - \varepsilon$ realizable, como se observa Figura 28, que no concuerdan con los datos experimentales. Lo anterior, se debe a que el flujo presenta un cambio fuerte en su dirección que no es captado correctamente en el modelo y a que en la parte inferior la presión hidrostática es mayor debido a la columna de agua que en otra condición haría que el líquido baje. En este caso, se recomienda hacer una malla más fina en la parte inferior que permita determinar el comportamiento del flujo en esa zona.

Con base en los análisis anteriores se propone refinar la malla de manera adecuada entre $z=0.000\text{ m}$ y $z=0.030$ para captar los efectos de la interacción entre el choque de flujos.

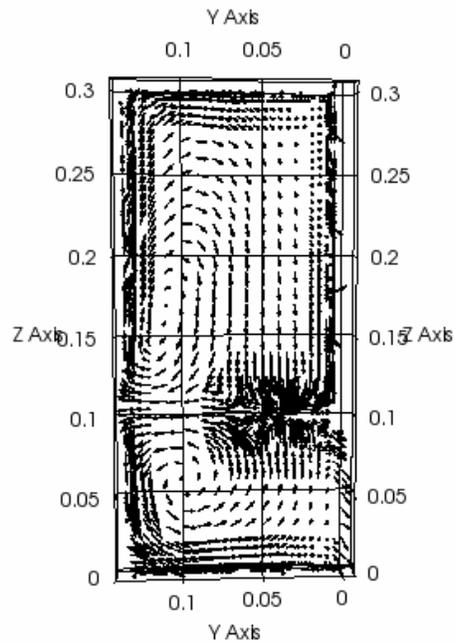


Figura 30 Vectores de velocidad obtenidos en la simulación en el tanque de mezcla para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden.

Fuente: Elaboración propia

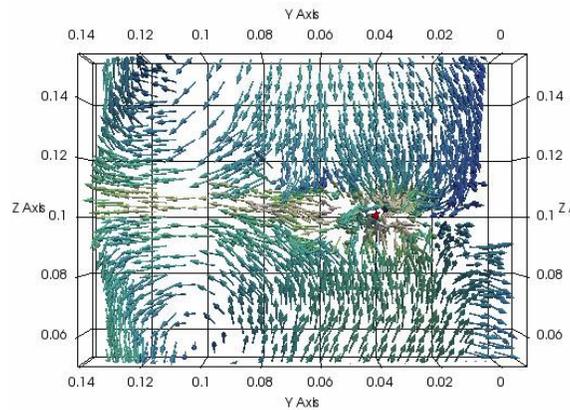


Figura 31 Vectores de velocidad en la zona de la hélice para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden.

Fuente: Elaboración propia

En el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$) se observa que la distribución de la velocidades no es simétrica, sino que tiende a elevarse como se observa en la Figura 31, siendo congruente

con los datos obtenidos por Huang y Li (2013). Se observa que los vectores de la velocidad son densos y de gran magnitud en la zona de la hélice ya que no se encuentran afectados por el flujo circundante.

De igual forma, los vectores de velocidad vistos en planta muestran la concentración de estos alrededor de la hélice ($z=0.100\text{m}$) hasta 0.1m del centro del tanque y en las paredes del tanque, como se observa en la figura 32. Lo anterior, se debe a que alrededor de la hélice la velocidad del flujo es mayor por la rotación de las aspas, mientras que en el caso de las paredes hay cambios fuertes en la dirección del flujo, que como se mencionó, el flujo choca en la pared y se desplaza verticalmente hacia arriba y hacia abajo.

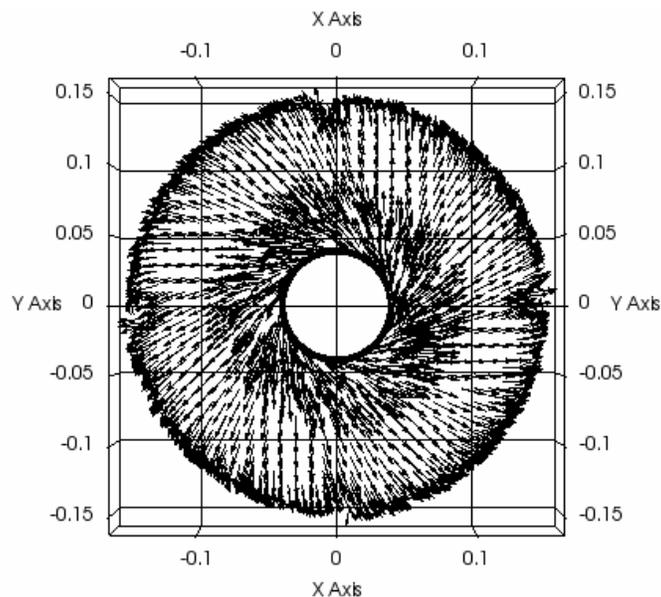


Figura 32 Vectores de velocidad observados en el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$).

Fuente: Elaboración propia

Del contorno de velocidades se observa que el flujo se encuentra bien definido en el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$), con mayor difusión a medida que se aleja de esta zona, específicamente, en la base del tanque ($z=0.010\text{m}$) y en la cara superior del tanque ($z=0.244\text{m}$). Se observa nuevamente que la velocidad no es simétrica, sino que tiende a ser ligeramente mayor arriba del eje que por debajo de este debido a que la hélice no se

encuentra en el centro del tanque. La velocidad, por otra parte, es mayor en las paredes que en el centro del tanque y más alta en la parte inferior del tanque que en la sección superior. La última afirmación se debe a que la distancia entre el eje de la hélice es menor con respecto a la base del tanque que con respecto a la tapa del mismo, como se observa en la Figura 33.

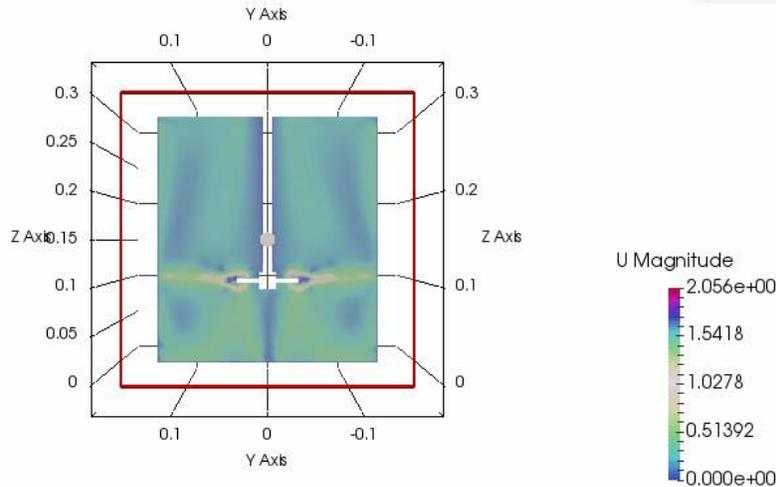


Figura 33 Contorno de velocidades en m/s en el tanque para una malla de refinamiento medio con esquemas numéricos de segundo orden para el modelo $k - \omega$.

Fuente elaboración propia

Las mayores velocidades se encuentran en la parte posterior de las aspas de las hélices llegando a valores de 2.1 m/s y 2.52m/s (ver Figura 34), dependiendo del modelo de turbulencia. Estos valores son mayores que la velocidad en la punta de la hélice (1.31m/s) y que fueron identificados por medio de los modelos LES (Eggles, 1996), en los cuales se determinó que llegaba hasta 2 veces la velocidad en la punta. La velocidad disminuye a medida que se aleja de las hélices y es mayor cerca a las paredes que en el centro del tanque. Las paredes evitan que en el flujo se forme un solo vórtice y que el flujo pueda viajar hacia la tapa y la base, favoreciendo el proceso de mezcla. Se observa simetría en los resultados por lo que es posible modelar el tanque con la mitad de este, incluso un cuarta parte del mismo, sin embargo es necesario considerar que la entrada, la salida y la hélice pueden tener una configuración que no es simétrica con respecto a los ejes. También es importante considerar que en la zona abajo del tanque cerca a la hélice y en

el eje de la hélice, el flujo viaja de un lado del tanque al otro por lo que al evaluar solo una parte del tanque pueden estar dejándose de evaluar todas las condiciones no simétricas del flujo.

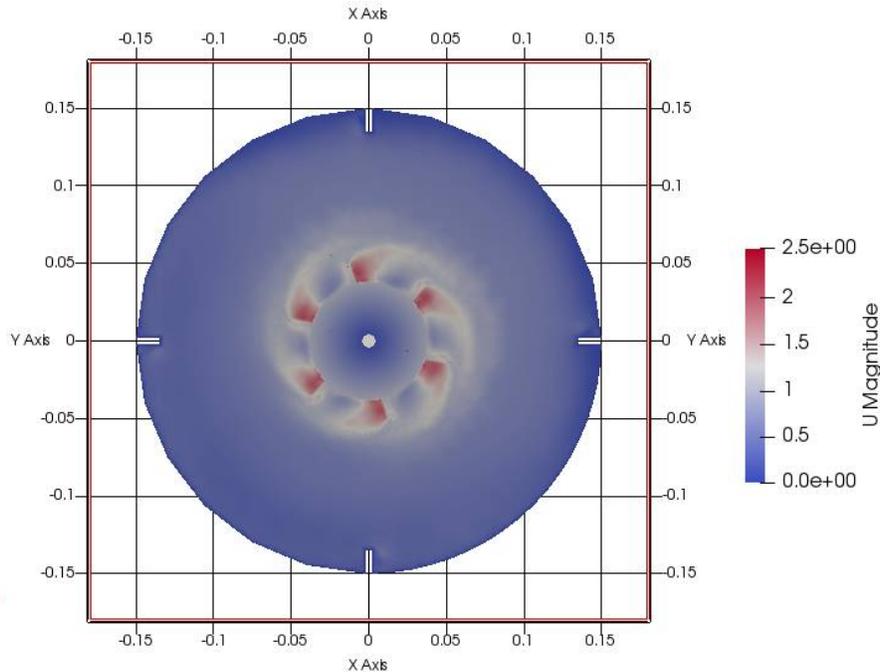


Figura 34 Campo de velocidades (m/s) en el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$)

Fuente: Elaboración propia

Tabla 16 Velocidades máximas obtenidas en los modelos de turbulencia empleados.

Modelo de turbulencia	Velocidad máxima (m/s)	Velocidad máxima obtenida en modelos LES (m/s)	Diferencia (%)
RNG $\kappa - \varepsilon$	2.50199	2.62	4.50
$\kappa - \varepsilon$ estándar	2.10554	2.62	19.64
$\kappa - \varepsilon$ realizable	2.26291	2.62	13.63
$\kappa - \omega$	2.52371	2.62	3.68

Fuente: Elaboración propia

El modelo evaluado permite establecer los tiempos promedios de la modelación, que pueden ser usados si se desea modelar con casos en los que el flujo no sea simétrico debido a la geometría.

En la Figura 35 se presentan los contornos de velocidad para distintas alturas, determinadas en la simulación realizada con el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ estándar para la malla de refinamiento medio. En la figura mencionada, se observa un efecto directo en la velocidad de las hélices para una altura de $z=0.082\text{m}$ mientras que para $z=0.010\text{m}$ y $z=0.244\text{m}$ la velocidad es difusa. En la base del tanque se observan velocidades más altas que las encontradas en la tapa considerando que la base se encuentra más cercana de la hélice que la tapa llegando a un pico de 0.447m/s y 0.36m/s respectivamente. De igual forma, se observan velocidades más altas en el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$) que para las demás alturas.

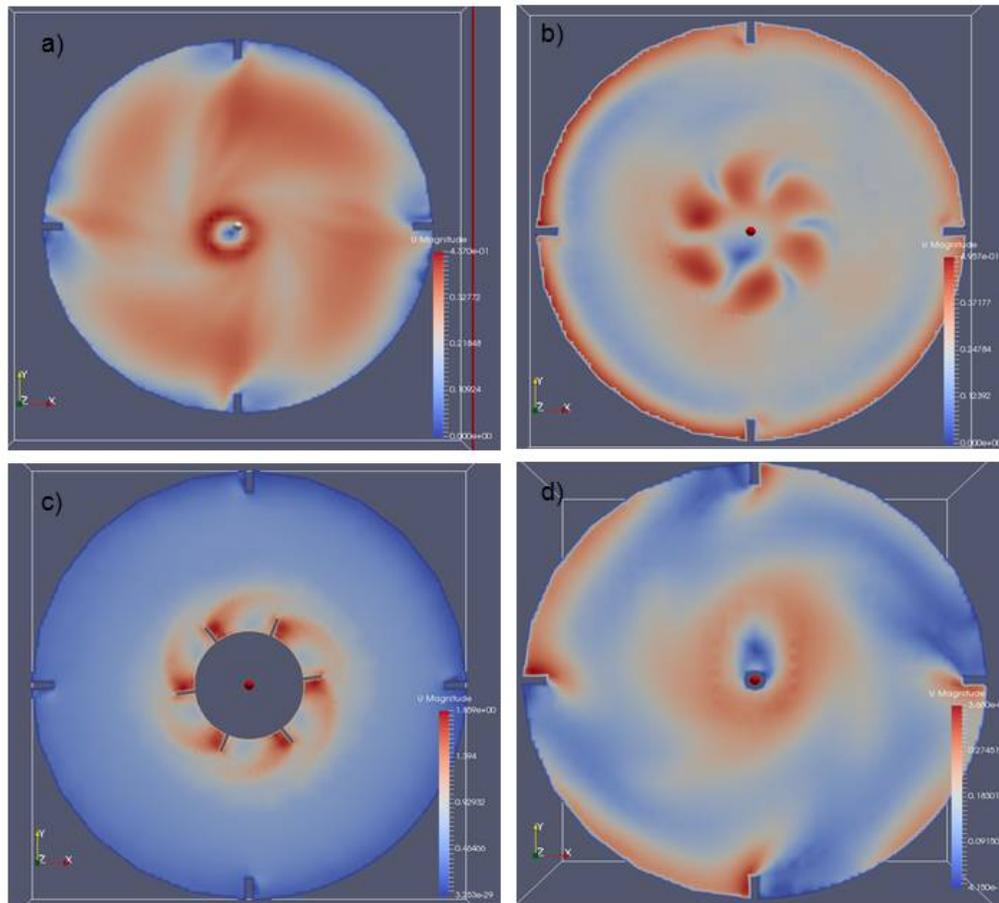


Figura 35 Contorno de velocidades para una malla de refinamiento medio con esquemas de divergencia de segundo orden. Se observa difusión de la velocidad a medida que se aleja del eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$).

Convenciones: En la altura a) $z=0.010\text{m}$, b) $z=0.082\text{m}$, c) $z=0.100\text{m}$ y d) $z=0.244\text{m}$.

Fuente: Elaboración propia

5.6. Distribución de presiones

En la Figura 36 y la Figura 37 se observa la distribución de presiones determinada para el modelo de turbulencia $k - \omega$. En el tanque se presentan regiones de alta presión negativa en la parte posterior de las hélices, esto se debe a la diferencia de velocidades en la región circundante a las hélices con respecto al resto del tanque resultando en la disminución de la presión.

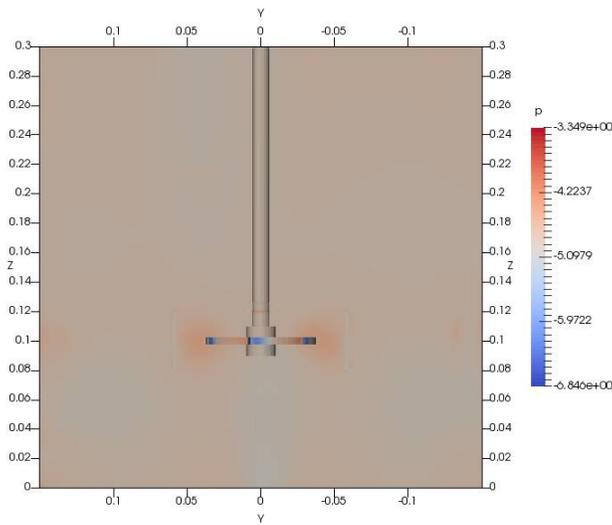


Figura 36 Distribución de presiones estáticas (m^2/s^2) en el tanque para el modelo de turbulencia $k - \omega$.

Fuente: Elaboración propia

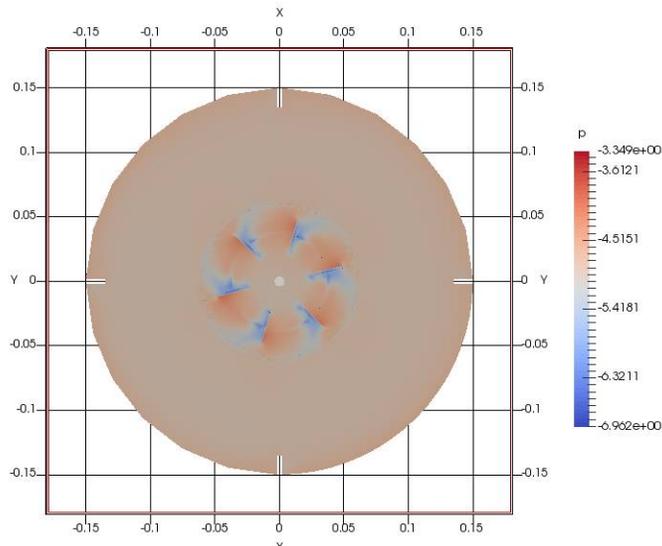


Figura 37 Distribución de presiones estáticas (m^2/s^2) en el tanque en $z=0.100m$ para el modelo de turbulencia $k - \omega$.

Fuente: Elaboración propia

Los valores de p presentados en OpenFOAM, en modelos con flujos incompresibles, corresponden a la presión estática.

Rajavathsavai (2012) determinó que en un tanque de mezcla, bajo condiciones similares a las de este estudio; 1) a medida que aumenta la velocidad de rotación de las hélices el área que presenta valores negativos de presión aumenta, 2) el incremento de la presión cerca a la hélice es directamente proporcional a la velocidad de la hélice y 3) que la variación de la presión no depende del diámetro del tanque. En los dos estudios se observa una distribución uniforme de la presión negativa en el tanque a excepción de la zona de rotación de las hélices en donde se concentran las presiones negativas más altas.

La presión estática varía según el modelo de turbulencia y los esquemas numéricos empleados. Los valores más cercanos a cero son reportados en el modelo de turbulencia k-e estándar con esquemas numéricos híbridos y los valores más alejados son reportados en el modelo de turbulencia k – ω con esquemas numéricos híbridos. Los modelos de turbulencia k – ε realizable, k – ε estándar con esquema numéricos de segundo orden, y RNG k – ε presentan valores que varían en hasta 20%.

A mayor caída de presión menor es el diámetro del tanque y menor es el tiempo necesario para mezclar satisfactoriamente los compuestos de una mezcla. Mayor velocidad de rotación de la hélice genera menor valor de la presión dentro del tanque.

Debido a la presencia de presiones negativas en el tanque es importante considerar instalar válvulas de liberación de presión para evitar que se presenten fallos. De igual forma, es necesario analizar cuando se presentan tubos de entrada y salida, lo cual es común en tanques de mezcla, que puedan ser afectados.

5.7. Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta ε

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta presenta los mayores valores en la parte posterior de las hélices y en la zona alrededor de estas. Los datos obtenidos

conducen con los resultados obtenidos por Berry (2002). Se observa una distribución uniforme de la tasa de disipación en el resto del tanque con valores cercanos a cero. Los resultados obtenidos son observados en la Figura 38 y Figura 39.

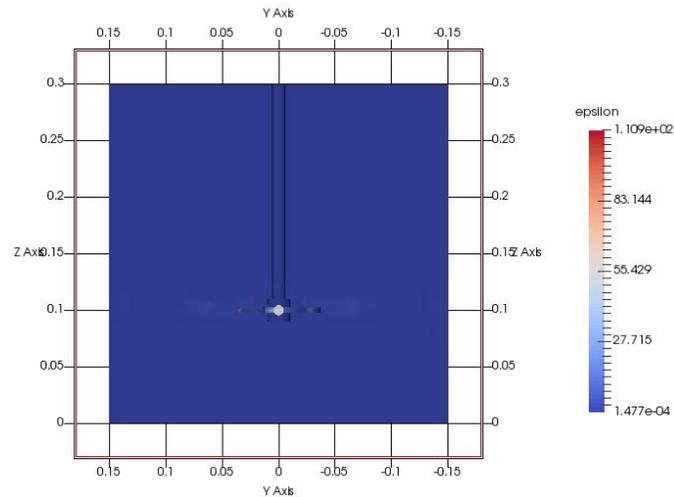


Figura 38 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta (m^2/s^3) en el modelo de turbulencia $k - \omega$.

Fuente: Elaboración propia

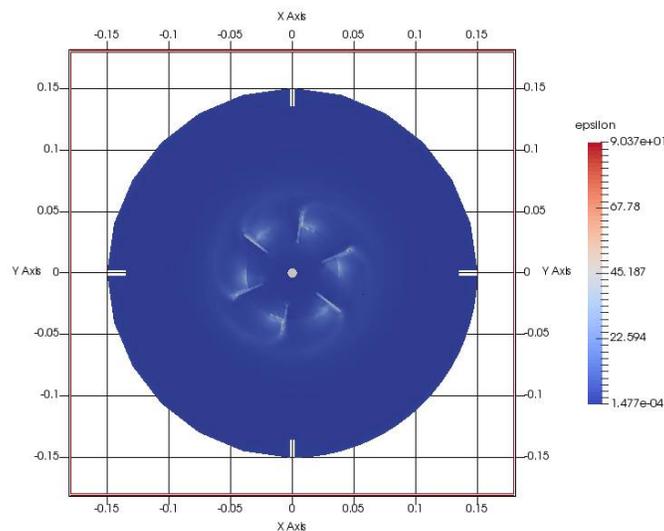


Figura 39 Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta (m^2/s^3) en el modelo de turbulencia $k-\omega$ en $z=0.100m$.

Fuente: Elaboración propia.

La energía cinética se disipa principalmente alrededor de la hélice mientras que en el resto del tanque se disipa de manera constante.

5.8. Esfuerzos cortantes

Los esfuerzos cortantes en tanques de mezcla son responsables de producir la mezcla y la homogenización por lo cual tienen relevancia en el proceso de mezcla.

En el estudio se encontró que los esfuerzos cortantes de mayor magnitud se presentan en la hélice, específicamente en las aspas. En las caras de la hélice se presentan esfuerzos cortantes altos debido al cambio de dirección del fluido generado por la rotación de las aspas. La generación de esfuerzos cortantes puede aumentar la temperatura del fluido debido a que la energía mecánica es convertida en calor. Los resultados obtenidos se observan en la Figura 40 y la Figura 41.

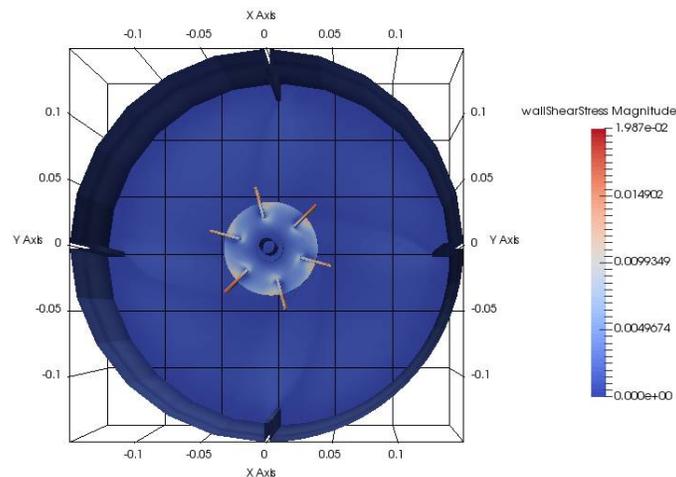


Figura 40 Esfuerzos cortantes (m^2/s^2) en el tanque con un corte horizontal en $z=0.150m$ en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar.

Fuente: Elaboración propia



Figura 41 Esfuerzos cortantes (m^2/s^2) en el tanque con un corte vertical en el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar.

Fuente: Elaboración propia.

Debido a la presencia de esfuerzos cortantes altos en las hélices, los materiales que se emplean en estas deben ser más resistentes. En general, las aspas de las hélices son de poco espesor por lo que debe tenerse en cuenta los esfuerzos cortantes para evitar que estas se doblen.

La turbulencia en un fluido decae a menos que exista un esfuerzo cortante o un aporte continuo de la energía cinética (Veersteg y Malasekera, 1995). En este sentido, la presencia de esfuerzos cortantes relativamente altos en la región cercana a la hélice están asociados a una energía cinética alta en la misma región. En esta región, la mezcla se producirá más rápido que en el resto del tanque debido a la formación de vórtices.

Debido a los esfuerzos cortantes, en la región cercana a la hélice los fluidos presentan una baja viscosidad aparente la cual aumenta a medida que se aleja de la hélice.

Los esfuerzos cortantes tienen un impacto incluso cuando hay presencia de células vias debido a los daños que se pueden generar por los esfuerzos altos, en estos casos se emplean hélices helicoidales, que además mejoran el rendimiento de la mezcla en suspensiones viscosas (Bioprocess Engineering Lessons, capítulo 6, sin fecha).

CAPÍTULO 6 CONCLUSIONES

En este estudio se aplicaron los conceptos de la dinámica de fluidos computacional para modelar un tanque de mezcla rápida con una hélice tipo Rushton para distintos esquemas numéricos, refinamiento de mallas y modelos de turbulencia. Los resultados se validaron con datos experimentales. Se empleó el sistema de mallas dinámicas donde la malla interna, cercana a la hélice, giraba a la misma velocidad que la hélice, mientras el resto permanecía estática.

El comportamiento del fluido en tanques de mezcla rápida puede ser modelado satisfactoriamente empleando la dinámica de fluidos computacional con modelos de turbulencias RANS, lo cual se verificó por medio de la comparación de los resultados de la modelación realizada en el estudio con datos experimentales para un caso específico. Es necesario seguir estudiando el comportamiento de los fluidos por este método, debido a que los modelos de turbulencia RANS no son precisos en caracterizar todas las variables físicas que intervienen en el proceso.

Los esquemas numéricos tienen un papel importante en la exactitud de las soluciones especialmente en zonas en donde el flujo es más complejo como las que se encuentran alrededor del eje de rotación tanto en el sentido vertical como en el horizontal. Los esquemas, tanto de primer orden como de segundo orden, presentan resultados que se asemejan al comportamiento real. Sin embargo, los órdenes de magnitud pueden variar considerablemente, especialmente en zonas de alta turbulencia. Los esquemas de segundo orden, que son más complejos, generan resultados más cercanos a los valores experimentales pero presentan mayores dificultades en la convergencia, como se observa en los resultados obtenidos en las figuras 22 y 23. A diferencia de Sahu y Joshi (1995), se encuentran diferencias significativas entre los esquemas de numéricos híbridos y de segundo orden específicamente en las zonas de alta turbulencia, pero concuerda en que los esquemas de primer orden presentan resultados poco precisos aunque converjan más rápido.

El refinamiento de la malla es un factor que afecta los resultados considerablemente. A un mayor refinamiento, los resultados suelen ser mejores pero el tiempo que se requiere en la modelación aumenta, por lo que se debe encontrar un equilibrio adecuado. Se debe considerar si una malla con un alto grado de refinación, que brinda resultados mucho más cercanos a la realidad, sea un motivo suficiente para que el tiempo empleado en la modelación no sea el factor decisivo para escoger entre una malla u otra. En nuestro caso, la malla que se presentó con refinamiento intermedio tuvo resultados adecuados en la cuarta parte del tiempo que lo que se observó en una malla de mayor grado de refinamiento. En mallas más refinadas se deben considerar pasos de tiempo mucho más pequeños para poder modelar adecuadamente las zonas de alta turbulencia y velocidad.

Mallas de bajo refinamiento, contrario a lo que se puede esperar, dieron resultados cercanos a los experimentales especialmente en zonas con menor velocidad, con un costo en tiempo, en este caso, 10 veces menor que una malla de alto grado de refinamiento. Se observó que para una malla de bajo refinamiento y una malla de alto refinamiento las zonas en las que se presentan mayores diferencias entre los datos modelados y los experimentales suelen ser las mismas con órdenes de magnitud más bajas para las mallas de mayor refinamiento. De igual forma se encontró que una malla de menor refinamiento presentaba resultados de la energía cinética turbulenta similares o incluso más precisos que una malla de alto refinamiento.

Es recomendable hacer una evaluación previa del modelo con mallas de bajo refinamiento que permitan determinar las zonas en las que puedan presentar mayores diferencias con un bajo costo en tiempo y así plantear mallas más refinadas donde lo requiera el modelo y poder disminuir el tiempo de la modelación sin sacrificar precisión.

La velocidad axial se modeló satisfactoriamente para esquemas de segundo orden con una malla de refinamiento intermedio. Los valores de la energía cinética turbulenta se encuentran subdimensionados con respecto a los valores experimentales. Este hecho también lo reportan otros autores (Armenante y Chou, 1996; Bakker y Van den Akker, 1994; Bakker et al., 1996; Sheng et al., 1998; Aubin et al., 2004). Es así que si bien un parámetro como la velocidad axial se pudo modelar con cierta exactitud, la turbulencia no,

por lo cual los resultados obtenidos en las modelaciones deben ser sujetos a revisión en cada caso. En este caso en particular, los fenómenos de turbulencia se subdimensionan lo que genera que los procesos de mezcla asociados a los tanques de mezcla rápida, puedan no ser válidos. Es importante que en las modelaciones numéricas se revisen parámetros como la turbulencia y la disipación en la energía turbulenta ya que si bien se pueden obtener resultados que satisfagan un parámetro como lámina de agua, caudal y velocidad, pueden subdimensionar o sobredimensionar otros parámetros, como en este caso la energía cinética turbulenta.

Los modelos de turbulencia evaluados $\kappa - \varepsilon$ estándar, RNG $\kappa - \varepsilon$, $\kappa - \varepsilon$ realizable y $\kappa - \omega$, no difieren en gran medida en los resultados; siendo adecuados para los valores de velocidad axial pero sub-dimensionan la energía cinética turbulenta como se observa en las figuras 24 y 25. Se reportan modelos con mejores resultados en términos de κ empleando el modelo de turbulencia LES. El modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ estándar presentó los mejores resultados para la velocidad axial mientras que el modelo RNG $\kappa - \varepsilon$ presentó los mejores resultados para la energía cinética turbulenta en comparación con los modelos de turbulencia evaluados.

Los mayores valores de velocidad, energía cinética turbulenta, tasa de disipación de energía cinética turbulenta y esfuerzos cortantes determinados se presentan alrededor de la hélice y disminuyen a medida que se alejan de esta. La presión es constante y negativa en el tanque.

La velocidad máxima obtenida en las simulaciones varió entre 3.68% y 19.64% comparado con la obtenida en simulaciones que emplean los modelos LES (ver Tabla 16). Esta velocidad siempre se presenta en la parte posterior de las aspas de las hélices y se debe a la rotación de las aspas de la hélice y a la recirculación de flujo. El modelo de turbulencia en el que se determinan los valores más cercanos es el modelo $\kappa - \omega$ y el que presenta las mayores diferencias es el modelo $\kappa - \varepsilon$ estándar. El proceso de mezcla está asociado a la velocidad, a la energía cinética turbulenta y a la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, por lo cual, la velocidad máxima debe considerarse ya que afecta el tiempo efectivo de mezcla.

Se determinaron valores negativos de la presión en el tanque debido a la diferencia de velocidad que se produce en la región cercana a la hélice con respecto al resto del tanque (Ver Figura 36). Rajavathsavai (2012) encontró que la presión en el tanque disminuye a medida que aumenta la velocidad de la hélice y es independiente del diámetro del tanque. La presión negativa debe ser controlada por medio de válvulas.

A mayor caída de presión menor es el diámetro del tanque y menor es el tiempo necesario para mezclar satisfactoriamente los compuestos de una mezcla. Mayor velocidad de rotación de la hélice genera menor valor de la presión dentro del tanque.

Debido a la presencia de presiones negativas en el tanque es importante considerar instalar válvulas de liberación de presión para evitar que se presenten fallos. De igual forma, es necesario analizar cuando se presentan tubos de entrada y salida, lo cual es común en tanques de mezcla, que puedan ser afectados.

Debido a la alta concentración de velocidad, esfuerzos cortantes, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de energía cinética turbulenta cerca a la hélice, se espera que la mezcla entre elementos sea mayor en esta zona. Es importante considerar que la geometría de la hélice puede tener un impacto en la mezcla y que requiere más estudios.

Continuamente se genera energía cinética turbulenta debido a la rotación de la hélice lo cual favorece el proceso de mezcla. El mayor valor se presenta en el eje de la hélice ($z=0.100\text{m}$) con un pico en $r=6\text{cm}$. En la región cercana a la hélice (entre $z=0.088\text{m}$ y $z=0.112\text{m}$) se presentan picos acentuados en la energía mientras en las regiones alejadas no, como se observa en la Figura 29. Esto se confirma con mayores valores de la tasa de disipación alrededor de la hélice como se observa en la Figura 38.

Los esfuerzos cortantes de mayor magnitud modelados se presentan en la hélice, específicamente en las aspas. En las caras de la hélice se presentan esfuerzos cortantes altos debido al cambio de dirección del fluido generado por la rotación de las aspas

La presencia de esfuerzos cortantes relativamente altos en la región cercana a la hélice están asociados a una energía cinética alta en la misma región. En esta región, la mezcla se producirá más rápido que en el resto del tanque debido a la formación de vórtices.

Las paredes deflectoras tienen un papel importante en el desempeño de la mezcla ya que permite una mejor recirculación del fluido, evitando que se genere un solo vórtice dentro del tanque. Estas hacen que el fluido viaje verticalmente hacia la base y la tapa del tanque, y posteriormente recirculen por la hélice como se observa en la Figura 30 y la Figura 31.

RECOMENDACIONES

1. Para dar continuidad con el trabajo realizado, se recomienda estudiar el comportamiento de la variación de la concentración y la verificación de los tiempos de mezcla para al menos dos fluidos.
2. Contrastar los resultados con simulaciones que empleen el modelo de turbulencia LES, las cuales, en general, presentan resultados más precisos para las diferentes variables estudiadas.
3. Emplear mallas más refinadas, especialmente alrededor de la hélice y en la punta de las aspas, donde se presentan las mayores velocidades, esfuerzos cortantes, presiones y energía cinética turbulenta, con el fin de determinar de manera más precisa el comportamiento del fluido.
4. Realizar la comparación de las presiones y esfuerzos cortantes obtenidos en las simulaciones con datos experimentales.
5. Verificar el comportamiento del fluido para diferentes tipos de hélices y geometría del tanque.
6. Analizar el número de poder para la hélice con respecto a valores teóricos.

BIBLIOGRAFÍA

Ankamma R.D., y Sivashanmugam P. (2010). *Experimental and CFD simulation studies on power consumption in mixing using energy saving turbine agitator. J. Ind. Eng. Chem.* 16,157–161.

Armenante P.M. y Chou C.C. (1996). *Velocity Profiles in a Baffled Vessel with Single or Double Pitched-Blade Turbines. AIChE J.*, 42, 1, 42-54.

Aubin J., P., Mavros, D.F., Fletcher, J., Bertrand y Xuereb, C. (2001). *Effect of Axial Agitator Configuration (Up- Pumping, Down-Pumping, Reverse Rotation) on Flow Patterns Generated in Stirred Vessels. Trans IChemE.*

Aubin J., Fletcher D. F., y Xuereb C. (2004). *Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. Experimental Thermal and Fluid Science*, 28(5), 431-445.

Ayala A., Ayala R., Gallegos M. y Uribe R. (2015). *Optimal location of axial impellers in a stirred tank applying evolutionary programming and CFD. Chemical engineering research and design* 100 203–211.

Bakker A. y Van den Akker H.E.A.. (1994). *Single-Phase Flow in Stirred Reactors. Trans IChemE*, 72 A, 583-593.

Bakker A., Meyers K.J., Ward R.W. y Lee C.K. (1996). *The Laminar and Turbulent Flow Pattern of a Pitched Blade Turbine. Trans IChemE*, 74 A, 485-491,

Berry A. (2002). *The effects of shear and Mixing on a continuous fed stirred tank reactor for aerobic, biological wastewater treatment. Cranfield University.*

Bioprocess Engineering Lessons, capítulo 6. (Sin Fecha). Recuperado de: <https://www.researchgate.net/file.PostFileLoader.html?id=56aa0b365cd9e3eb848b459f&assetKey=AS%3A322848827084801%401453984566680>.

Brucato A., Ciofalo M., Grisafi F. y Micale G. (1998). *Numerical Prediction of Flow Fields in Baffles Stirred Vessels: A Comparison of Alternative Modelling Approaches*. *Chemical Engineering Research and Desing*, 53, 21, 3653-3684,

Bugay S., Escudie R., Line A. (2002). *Experimental analysis of hydrodynamics in axially agitated tank*. *AIChE J.* 48,463–475.

Cardenas J. (2014). *Notas sobre dinámica de fluidos*. Rev. 0.5.5, GNU Free Documentation License.

Deglon D. A., y Meye, C. J. (2006). *CFD modeling of stirred tanks: Numerical Considerations*. *Minerals Engineering*, 19 (10), 1059-1068.

Dersken J. y Van den Akker H.E.A.. (1999). *Large Eddy Simulations on the Flow Driven by a Rushton Turbine*. *AIChE J.*, 45, 2, 209-221.

Driss Z., Karray S., Chtourou W., Kchaou H. y Abid S. (2012). *A study of mixing structure in stirred tanks equipped with multiple four-blade Rushton impellers*. *The Archive of Mechanical*, Vol. LIX.

Egges J.G.M. (1996). *Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using the lattice-Boltzmann scheme*. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 17, 307-323.

Ferziger J. H. y Peric M. (2001). *Computational method for fluid Dynamics*. Springer.

Ge C., Wang J., Gu X. y Fang L. (2013). *CFD simulation and PIV measurement of the flow field generated by modified pitched blade turbine impellers*. *Chemical Engineering Research and Desing*, CHERD-1357.

Guerrero J. (2013). *Introductory OpenFOAM Course*. University of Genoa, DICCA.

Hartmann H., Derksen J.J., Montavon C., Pearson J., Hamill I.S., Van den Akker H.E.A. (2004). *Assessment of large eddy and RANS stirred tank simulations by means of LDA. Chem. Eng.Sci.* 59, 2419–2432.

Hendricks D. (2001). *Fundamentals of water treatment unit processes, Physical, Chemical, and Biological.* Taylor and Francis Group.

Huang W. y Li K. (2013). *CFD Simulation of Flows in Stirred Tank Reactors Through Prediction of Momentum Source.* Intech.

Jaworski Z., Nienow A.W. y Dyster K.N.. (1996). *An LDA Study of the Turbulent Flow Field in a Baffled Vessel Agitated by an Axial, Down-pumping Hydrofoil Impeller. Can. J.Chem. Eng.,*74, 3-15.

Jaworski Z., Wyszynski M.L., Badham R.S., Dyster K.N., Moore I.P.T, Nienow A.W. y McKemie J. (1996). *Sliding Mesh Simulation of Transitional, Non-Newtonian Flow in a Baffled Stirred Tank. Notes on Numer. Fluid Mech.,* 53, 109-115,

Jaworski Z., Dyster K.N., Moore I.P.T., Nienow A.W. y Wyszynski M.L.. (1997). *The Use of Angle Resolved LDA Data to Compare Two different Turbulence Models Applied to Sliding Mesh CFD Flow Simulations in a Stirred Tank. Récents Progrès en Génie des Procédés,* 11, 51, 187-194

Jaworski Z., Buljalski W., Otomo N. y Nienow A.W. (2000). *CFD Study of Homogenisation with Dual Rushton Turbines – Comparison with Experimental Results. Trans IChemE,* 78 A, 327-333.

Jaworski Z., Wyszynski M.L., Dyster K.L., Mishra V.P. y Nienow A.W. (1998). *A Study of an Up- and a Down- Pumping Wide-Blade Hydrofoil Impeller: Part II. CFD Analysis. Can. J. Chem. Eng.,* 76, 866-876.

Jian M. y Zhengming G. (2006). *Large Eddy Simulations of Mixing Time in a Stirred Tank. Chinese J. Chem. Eng.,* 14(1) 1–7.

Joshi, J.B., Nere N.K., Rane C.V., Murthy B.N., Mathpati C.S., Patwardhan A.W. y Ranade V.V. (2011). *CFD simulation stirred tanks: comparison of turbulence models. Part I: radial flow impellers. Can. J. Chem. Eng.* 89, 23–82.

Joshi, J. B., y Murthy, B. N. (2008). *Assessment of standard k-epsilon, RSM and LES turbulence models in a baffled stirred vessel agitated by various impeller designs. Chemical Engineering Science*, 63(22), 5468-5495.

Khopkar A.R., Aubin J., Xuereb C., Le Sauze N., Bertrand J. y Ranade V.V. (2003). *Gas–liquid flow generated by apitched-blade turbine: particle image velocimetry measurements and computational fluid dynamics simulations. Ind. Eng. Chem. Res.* 42, 5318–5332.

Kumaresan T. y Joshi J.B.(2006). *Effect of impeller design on the flow pattern and mixing in stirred tanks. Chem. Eng. J.* 115,173–193.

Li Z., Hu M., Bao Y. y Gao Z. (2011). *Particle image velocimetry experiments and large Eddy simulations of merging flow characteristics in dual rushton turbine stirred tanks. Ind. Eng.Chem. Res.* 51, 2438–2450.

Line A., y Escudie G.K. (2003). *Experimental analysis of hydrodynamics in a radially agitated tank'. Aiche Journal*, 49(3), 585-604.

Liu X y García H. (2011). *Computational Fluid Dynamics Modeling for the Design of Large Primary Settling Tanks. Journal of Hydraulic Engineer- ing*, Vol. 137, No. 3, March 1.

Mavros P., Xuereb C. y Bertrand J.. (1996). *Determination of 3-D Flow Fields in Agitated Vessels by Laser Doppler Velocimetry: Effect of Impeller Type and Liquid Viscosity on Liquid Flow Patterns. Trans IChemE*, 74 A, 658-668.

Mavros P., Xuereb C. y Bertrand J.. (1998). *Determination of 3-D Flow Fields in Agitated Vessels by Laser Doppler Velocimetry: Use and Interpretation of RMS Velocities. Trans IChemE*, 74 A, 223-233.

McCabe W. L., Smith J. C., y Harriott P. (1993). *Unit Operations of Chemical Engineering*. 5th edn., McGraw-Hill, New York.

Myers K.J., Ward R.W. y Bakker A.. (1997). *A Digital Particle Velocimetry Investigation of Flow Field Instabilities of Axial Flow Impellers*. *J. Fluids Eng.*, 119, 623-631.

Mishra V.P., Dyster K.N., Jaworski Z., Nienow A.W., y McKemmie J.. (1998). *A Study of an Up- and a Down-Pumping Wide Blade Hydrofoil Impeller: Part I. LDA Measurements*. *Can. J. Chem. Eng.*, 76, 577-588

Ng K. y Yianneskis M. (2000). *Observations on the Distribution of Energy Dissipation in Stirred Vessels*. *Trans IChemE*, 78, A, 334-341.

Ng K., Fentiman, N. J., Lee K. C., et al. (1998). *Assessment of sliding mesh CFD predictions and LDA measurements of the flow in a tank stirred by a Rushton impeller*. *Chemical Engineering Research & Design*, 76(A6), 737-747.

Oldshue J. Y. (1983). *Fluid Mixing Technology*. McGraw-Hill, New York.

Pan C.M., Mi J., Li X.H., Gao Z.M. (2008). *Investigation of fluidflow in a dual Rushton impeller stirred tank using particleimage velocimetry*. *Chin. J. Chem. Eng.* 16, 693–699.

Peng C.Y., y Murthy J. Y. (1994). *A moving deformation mesh technique for simulation of flow in mixing tanks*. Cambridge, UK, *Proceeding of 8th Europe Conference on Mixing*, 37-39.

Rajavathsavai D. (2012). *Study of Hydrodynamic and Mixing Behaviour of Continious Stirred Tank reactor using CFD tools*. National Institute of Technology, Rourkuela, Odisha.

Ranade V.V. y Dometti S.M.S. (1996). *Computational Snapshot of Flow Generated by Axial Flow Impellers in Baffled Stirred Vessels*. *Trans IChemE*, 74 A, 476-484.

Ranade V.V. y Joshi J.B. (1989). *Flow Generated by Pitched Blade Turbines I: Measurements using Laser Doppler Anemometer*. *Chem. Eng. Comm.*, 81, 197-224.

Ranade V.V., Joshi J.B. y Marathe A.G. (1989). *Flow Generated by Pitched Blade Turbines II: Simulations Using k-e Model*. *Chem. Eng. Comm.*, 81, 225-248.

Ranade V.V. y Joshi J.B. (1990). *Flow Generated by a Disc Turbine: Part II. Mathematical Modelling and Comparison with Experimental Data*, *Trans IChemE*, 68 A, 34-50.

Rusche H. (2002). *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*. Imperial College of Science, Technology & Medicine, Department of Medical Engineering.

Sahu A.K. y Joshi J.B. (1995). *Simulation of Flow in Stirred Vessels with Axial Flow Impellers : Effects of Various Numerical Schemes and Turbulence Model Parameters*. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 34, 626-639.

Sheng J., Meng H. y Fox R.O. (1998). *Validation of CFD Simulations of a Stirred Tank Using Particle Image Velocity Data*. *Can. J. Chem. Eng.*, 76, 611-625.

Sun Z., Ni H., Chen H., Li S., Lu G. y Yu J. (2015). *Designing and optimizing a stirring system for a cold model of lithium electrolysis cell based on CFD simulations and optical experiments*. National Engineering Research Center for Integrated Utilization of Salt Lake Resource, East China University of Science and Technology.

Villamizar H. (2014). *Aplicación de un modelo de turbulencia bidimensional para la simulación de flujo a superficie libre en un canal horizontal*. Universidad Nacional de Colombia.

Wu B. (2012). *Computational Fluid Dynamics Study of Large-Scale Mixing Systems With Side-Entering Impellers' Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics Vol. 6, No.1, pp. 123-133*.

Wu H. y G.K. Patterson. (1989). *Laser-Doppler Measurements of Turbulent Flow Parameters in a Stirred Mixer*. *Chem. Eng. Sci.*, 44, 2207-2221.

Yapici K., Karasozen B., Schafer M., et al. (2008). *Numerical investigation of the effect of the Rushton type turbine design factors on agitated tank flow characteristics*. *Chemical Engineering and Processing*, 47, 1340-1349.

Versteeg H. y Malalasekera W. (1995). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, Prentice Hall. Londres.