



SEP
SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



GOBIERNO DEL
ESTADO DE MÉXICO



TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE ECATEPEC
DIRECCIÓN ACADÉMICA
DIVISIÓN DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOQUÍMICA
MAESTRÍA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

*“Estudio CFD de la hidrodinámica generada por impulsores de alto corte
para su aplicación en procesos de polimerización”*

T E S I S

QUE COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

I.Q JOSÉ ALFREDO PARRA REYES

COMITÉ TUTORIAL

Dr. Gastón Martínez de Jesús, director

Dr. Gustavo Aparicio Mauricio, revisor

Dr. Miguel Ángel Vaca Hernández, revisor

Ecatepec de Morelos, México, junio de 2025



GOBIERNO DEL
ESTADO DE MÉXICO

DICTAMEN DE LIBERACIÓN DE
PROYECTO DE TESIS

FO-TESE-DA-90

TIT05-ANEXO PM



DIRECCIÓN ACADÉMICA
DIVISIÓN ACADÉMICA DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOQUÍMICA
PROGRAMA DE POSGRADO: MAESTRÍA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

Fecha: 26 DE JUNIO DE 2025

LIC. MARICELA REYES ALONSO
Jefa de la Unidad de Registro y Certificación
Presente

Datos generales

Nombre del alumno:

PARRA

Apellido paterno

REYES

Apellido materno

JOSÉ ALFREDO

Nombres (s)

Matrícula: 202311538

PROYECTO: ESTUDIO CFD DE HIDRODINÁMICA GENERADA POR IMPULSORES DE ALTO CORTE PARA SU APLICACIÓN EN PROCESOS DE POLIMERIZACIÓN

DIRECTOR: DR. GASTÓN MARTÍNEZ DE JESÚS

Dictamen:

Con base en el registro No. 2 correspondiente al periodo escolar 2023-1 asignado al proyecto de tesis

Estudio CFD de la hidrodinámica generada por impulsores de alto corte para su aplicación en procesos de polimerización presentado por el alumno referido; y después de haber sido desarrolladas las actividades requeridas, el Comité Tutorial, conformado por los integrantes que firman al calce, ha determinado que SI (X) NO () han sido cubiertos en su totalidad los requisitos que permitan a esta División Académica liberar al alumno de los trámites académicos para tal efecto e iniciar el trámite de obtención de grado de maestría en la Unidad de Registro y Certificación de este Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec.

Observaciones:

Comité Tutorial

DR. GUSTAVO APARICIO MAURICIO

Asesor

DR. MIGUEL ÁNGEL VACA HERNÁNDEZ

Asesor

DR. GASTÓN MARTÍNEZ DE JESÚS

Director

c.c.p. Director de Tesis
Alumno
Expediente



Elaboró: DR. MIGUEL ÁNGEL VACA HERNÁNDEZ

Coordinador de Posgrado

Revisó y Visto Bueno: DR. ISABEL DE LA LUZ MEMBRILLO VENEGAS

Jefa de la División de Ingeniería Química y Bioquímica

Enterado: MTRO. JUAN CARLOS BRETÓN POZAS

Director Académico

Agradecimientos

El autor de este trabajo agradece al Consejo (CONACyT), hoy secretaria de Ciencia, Humanidades y Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca para estudios de posgrado, con número CVU 1281586

Dedicatorias

A mis padres, que convirtieron el miedo a fracasar en gasolina para seguir. Josefina, tus motivaciones me salvaron más de lo que te imaginas.

Alfredo, tu silencio cómplice frente a mis divagaciones fue mi mejor respaldo.

A Jenderson, Paris y Nidia que siempre apoyaron la decisión de seguir aprendiendo y estudiando.

A mis amigos y compañeros que fueron mis cómplices en crisis existenciales y proveedores oficiales de memes a la 3 a.m.

A Dafne, que siempre me apoyo en las decisiones que tome, regañándome y dándome consejos para poder seguir adelante, mi eterna gratitud.

Al Dr. Gastón que siempre me estuvo ayudando, corrigiendo y enseñando.

A todos mis profesores que me transmitieron el conocimiento necesario para lograr esta investigación.

“A la Luna, que vio más noches en vela que a cualquier poeta; a mis estrellas, que desde algún lugar me susurraba ‘sigue’; y a mí, por no soltar el barco en la tormenta. Esto es por los que creen que las preguntas valen más que las respuestas.”

Índice

Resumen	6
Abstract	8
Introducción	9
1.1 Problemática	11
1.2 Justificación	13
1.3 Antecedentes	15
1.4 Objetivos	17
1.5 Hipótesis	17
Marco teórico	18
2.1 Polimerización por suspensión y su relación con la agitación	18
2.3 Sistemas de mezclado	20
2.4 Impulsores de alto corte y bombeo	23
2.5 Parámetros hidrodinámicos	25
2.6 Macro mezcla y micro mezcla	31
2.7 Tiempo de mezclado	31
2.8 Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)	33
2.9 Aplicación y estructura de la malla estructurada	33
2.10 Ecuaciones que describen el flujo.	35
2.12 El método de volumen finito	43
2.13 Mallado	47
2.14 Esquemas de interpolación espacial	49
2.15 Esquema de rotación por múltiples marcos de referencia	50
Metodología	52
3.1 Comparación de modelos multifásicos (E-L y E-E)	52
3.2 Simulación E-E con turbina Rushton	55
3.1 Validación de simulación	56
3.2 Equipo para el seguimiento de la evolución de la temperatura	56
Resultados	58

4.1	Comparación de modelos E-L vs E-E-granular.....	58
4.2	Simulación vs experimental acoplado con el modelo E-E-granular con turbina Rushton.....	61
4.3	Utilización del modelo E-E con turbina Rushton y pulso de temperatura (glicerol-hexano)	64
4.4	Utilización del modelo E-E con turbina Rushton y pulso de temperatura (agua-hexano)	66
Conclusiones		70
Bibliografía.....		71
Apéndice y/o anexos		75
Índice de figuras		75
Productos de la tesis		76

Resumen

En la industria de procesos, como la producción de polímeros y recubrimientos, existe una falta de conocimiento preciso sobre el impacto que tienen las distintas configuraciones de sistemas de agitación mecánica en la eficiencia de la manufactura y la calidad del producto final. La optimización de estos procesos se ve obstaculizada por la complejidad y el alto costo de los análisis experimentales, especialmente en sistemas multifásicos donde fenómenos como la aglomeración de partículas o la mala dispersión de fases generan pérdidas económicas. Las herramientas de simulación mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) surgen como una alternativa efectiva para estudiar la hidrodinámica de estos sistemas, permitiendo analizar variables locales y predecir el comportamiento del reactor de manera más accesible y detallada. Por ello, el objetivo general de esta investigación fue estudiar la hidrodinámica de un tanque agitado equipado con un impulsor de alto corte y bombeo para su aplicación en mezclas multifásicas, como las que se presentan en procesos de polimerización. Para lograrlo, la metodología se basó en el uso del software ANSYS Fluent para realizar simulaciones CFD en 3D. Inicialmente, se comparó el modelo multifásico Euler-Euler (E-E) granular con el modelo Euler-Lagrange (E-L) reportado en la literatura para validar la estrategia de simulación. Posteriormente, se evaluó la hidrodinámica de una turbina Rushton en sistemas líquido-sólido (agua y perlas de poliacrilamida) y líquido-líquido (glicerol-hexano y agua-hexano), empleando el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ y el enfoque de Marcos de Referencia Múltiples (MRF). Los resultados numéricos se validaron comparándolos con datos experimentales de tiempos de mezclado, dispersión de fases y evolución de la temperatura.

Los resultados mostraron que se validó exitosamente el enfoque de simulación E-E granular, obteniendo un error relativo del 1.55% en el cálculo de la potencia en comparación con datos de la literatura. Los patrones de flujo y las zonas de recirculación, visualizados mediante mapas de Poincaré, también mostraron una alta similitud. Además, el estudio demostró que aumentar la velocidad de agitación (de 360 a 540 RPM) mejora significativamente la dispersión de la fase secundaria, promoviendo una mezcla más homogénea. Las simulaciones de transferencia de calor lograron predecir el comportamiento térmico del sistema con buena concordancia, con errores relativos promedio entre 5.4% y 11.5% frente a los datos experimentales. La principal contribución es la demostración de que el modelo multifásico Euler-Euler granular es una herramienta eficiente y computacionalmente accesible para caracterizar y optimizar la hidrodinámica de estos sistemas de agitación.

En conclusión, el estudio CFD permitió analizar y validar la hidrodinámica del tanque agitado, mostrando una concordancia adecuada con los resultados experimentales. El modelo Euler-Euler granular demostró ser una herramienta robusta para predecir patrones de flujo y distribución de energía, confirmando que una correcta selección del impulsor y la velocidad de agitación es fundamental para maximizar la homogeneidad.

Para futuros trabajos, se recomienda incorporar modelos reológicos más complejos, ajustar las condiciones de frontera dinámicas y realizar estudios a escala piloto para mejorar la precisión.

Palabras Clave: *Reactor de agitación, CFD, modelo Euler-Euler granular, hidrodinámica multifásica, impulsores de alto corte y bombeo.*

Abstract

In the process industry, such as the production of polymers and coatings, there is a lack of precise knowledge about the impact of different mechanical agitation system configurations on manufacturing efficiency and final product quality. The optimization of these processes is hindered by the complexity and high cost of experimental analysis, especially in multiphase systems where phenomena like particle agglomeration or poor phase dispersion lead to economic losses. Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation tools emerge as an effective alternative to study the hydrodynamics of these systems, allowing for the analysis of local variables and the prediction of reactor behavior in a more accessible and detailed manner. Therefore, the general objective of this research was to study the hydrodynamics of a stirred tank equipped with a high-shear and high-pumping impeller for its application in multiphase mixtures, such as those present in polymerization processes. To achieve this, the methodology was based on the use of ANSYS Fluent software to perform 3D CFD simulations. Initially, the multiphase Euler-Euler (E-E) granular model was compared with the Euler-Lagrange (E-L) model reported in the literature to validate the approach. Subsequently, the hydrodynamics of a Rushton turbine were evaluated in liquid-solid (water and polyacrylamide beads) and liquid-liquid (glycerol-hexane and water-hexane) systems, using the $k-\epsilon$ turbulence model and the Multiple Reference Frames (MRF) technique. The numerical results were validated by comparing them with experimental data on mixing times, phase dispersion, and temperature evolution.

The most important results showed that the E-E granular simulation approach was successfully validated, obtaining a relative error of 1.55% in the calculation of power consumption compared to literature data. The flow patterns and recirculation zones, visualized through Poincaré maps, also showed high similarity. Furthermore, the study demonstrated that increasing the agitation speed (from 360 to 540 RPM) significantly improves the dispersion of the secondary phase, promoting a more homogeneous mixture. The heat transfer simulations successfully predicted the thermal behavior of the system with good agreement, showing average relative errors between 5.4% and 11.5% compared to experimental data. The main contribution is the demonstration that the multiphase Euler-Euler granular model is an efficient and computationally accessible tool for characterizing and optimizing the hydrodynamics of these agitation systems.

In conclusion, the CFD study made it possible to analyze and validate the hydrodynamics of the stirred tank, showing adequate agreement with experimental results. The Euler-Euler granular model proved to be a robust tool for predicting flow patterns and energy distribution, confirming that a correct selection of the impeller and agitation speed is fundamental to maximizing homogeneity. For future work, it is recommended to incorporate more complex rheological models, adjust dynamic boundary conditions, and conduct pilot-scale studies to improve accuracy.

Keywords: *Stirred reactor, CFD, Euler-Euler granular model, multiphase hydrodynamics, and high-shear and pumps impellers.*

Introducción

En las industrias químicas de procesos y otras semejantes, muchas operaciones dependen en gran medida de la agitación y el mezclado eficaz de los fluidos. El mezclado desempeña un papel muy importante en una amplia gama de industrias químicas, como las agroquímicas, farmacéuticas, petroquímicas, biotecnológicas, procesamiento de polímeros, papel, minerales, así como la elaboración de pinturas y acabados automotrices (Mao & Yang, 2017). Comúnmente, el mezclado se lleva a cabo en recipientes cilíndricos equipados con impulsores que rotan para aumentar las tasas de transferencia de masa y la homogeneidad de los fluidos.

La importancia de estudiar sistemas multifásicos radica en su amplio uso en procesos como la síntesis de catalizadores, fermentaciones donde ocurren interacciones gas-líquido-sólido, cristalizaciones o separaciones por membranas. Optimizar estas operaciones requiere comprender las interacciones hidrodinámicas entre fases, ya que fenómenos como la distribución de burbujas en biorreactores, la suspensión de partículas en lodos o la coalescencia de gotas en emulsiones impactan directamente en la eficiencia energética y la calidad del producto. Investigaciones recientes, como las de Wang y col. (2021) en fluidización de lechos granulares, destacan que incluso variaciones locales en la fracción de fase pueden alterar drásticamente la transferencia de calor o masa. Profundizar en estas dinámicas es clave para reducir costos, mejorar escalamientos y cumplir normativas ambientales, especialmente en industrias donde las mezclas heterogéneas son la norma, no la excepción.

Dado su impacto en la eficiencia de los procesos industriales, la mezcla ha sido objeto de estudio durante décadas. Sin embargo, a pesar de numerosos esfuerzos de investigación, aún existen aspectos fundamentales que no se comprenden por completo. Esta falta de conocimiento genera incertidumbres significativas y pérdidas económicas (Smith, 1990) %esta referencia no está en la lista%, dificultando el diseño confiable de procesos de mezcla a gran escala. Uno de los principales problemas radica en que muchas investigaciones han intentado establecer correlaciones basadas únicamente en parámetros promediados, como temperatura, concentración de reactivos, disipación de energía y coeficientes de transferencia de masa, bajo la suposición de una mezcla perfectamente homogénea %alguna referencia de esto%.

El comportamiento no newtoniano de los fluidos, especialmente el pseudoplástico y el dilatante, es común en muchas aplicaciones industriales. Ejemplos de estos líquidos incluyen polímeros, biopolímeros, caldos de fermentación, pulpa de papel y lodos (slurries) de partículas finas (Ameur et al., 2017). Los líquidos altamente viscosos con estas propiedades presentan desafíos significativos para el mezclado, como la formación de regiones estancadas. Esto ocurre principalmente porque no es posible alcanzar un flujo turbulento, situación crítica en procesos donde la turbulencia puede ser perjudicial para el líquido o cuando la viscosidad es demasiado alta.

Para superar estas limitaciones, es fundamental considerar las propiedades físicas de los fluidos, siendo la viscosidad una de las más importantes. Incorporar la reología de los

líquidos de proceso permite describir con mayor precisión la dinámica del mezclado, así como fenómenos relacionados con la interacción de superficies y el tamaño de partículas. La importancia de la reología de los fluidos que se utilizan en la industria es importante, así como la mezcla de dos o más fases. La hidrodinámica generada por estas mezclas no es estudiada a detalle.

Para abordar estas limitaciones, el modelo multifásico Euler-Euler granular emerge como una opción más accesible. Este enfoque permite caracterizar simultáneamente el comportamiento de cada fase (líquida, gaseosa o sólida) mediante ecuaciones de conservación acopladas, considerando interacciones como el arrastre viscoso, colisiones partícula-partícula o efectos de turbulencia dispersa. A diferencia de modelos simplificados, el marco Euler-Euler granular captura la microestructura de las fases, como la estratificación de partículas en suspensiones o la segregación de tamaños en lechos fluidizados, lo que lo hace idóneo para simular sistemas industriales realistas donde la homogeneidad es una idealización poco práctica.

1.1 Problemática

En la actualidad, no se conoce con precisión el impacto que cada configuración de sistemas de agitación mecánicos tiene en los procesos de manufactura, especialmente en operaciones como la polimerización, la mezcla de fluidos altamente viscosos y la mezcla de dos o más fases, que además presentar cambios en su reología cuando ocurre una reacción química. Un ejemplo, concretos es la industria de producción de recubrimientos donde no se dispone de información completa sobre el comportamiento hidrodinámico de las diversas configuraciones de reactores de agitación y agitadores (Herrera-Mendoza A., 2020).

La investigación de sistemas multifásicos tiene alta importancia industrial, ya que procesos como emulsificaciones, dispersiones de partículas en matrices poliméricas o reacciones gas-líquido-sólido son fundamentales en sectores como el farmacéutico, alimentario y de materiales avanzados.

Dada la complejidad de los sistemas multifásicos, algunos estudios aplican el enfoque de propiedades efectivas, los resultados de estos análisis pueden resultar útiles para procesos que en la realidad involucran más de una fase. Así, estudios como los de Martínez-de-Jesús, (2017) evalúan la homogeneidad de pigmentos, analizan la hidrodinámica que permite reducir defectos como sedimentación o aglomeración, mejorando rendimientos y cumpliendo especificaciones técnicas.

El análisis experimental en sistemas de mezclado es complicado debido a la complejidad de estos sistemas y la gran cantidad de componentes involucrados (impulsores, ejes, deflectores y difusores). Además, la opacidad natural de la mayoría de los fluidos de trabajo incrementa esta dificultad, elevando los costos de los estudios experimentales (Kelly & Gigas, 2003).

Las técnicas ópticas, como la velocimetría de imágenes de partículas y la observación de patrones de flujo mediante tinción, están limitadas por la opacidad de los fluidos. Estas solo son aplicables a escala de laboratorio en recipientes de paredes transparentes. Por su parte, las técnicas que evalúan variables macroscópicas, como el consumo de energía y los tiempos de mezclado, no brindan información detallada sobre lo que ocurre dentro del reactor.

Debido a estas limitaciones experimentales, se ha recurrido al uso de herramientas de simulación CFD como una alternativa efectiva. Esta técnica facilita la resolución de las ecuaciones gobernantes del flujo y su acoplamiento con otros fenómenos de transporte. De esta forma, permite obtener de manera numérica el campo de velocidad y calcular variables de interés a partir del análisis de datos basados en la geometría real del sistema estudiado.

Para sistemas multifásicos el modelo multifásico Euler-Euler granular puede resultar de mucha utilidad. Este enfoque permite simular interacciones entre fases discretas (como

partículas sólidas en suspensiones) y continuas (líquidos o gases), resolviendo ecuaciones de conservación de masa, momento y energía para cada fase. A diferencia de modelos simplificados, el marco Euler-Euler granular considera fenómenos clave como colisiones partícula-partícula, efectos de arrastre no lineal y segregación por tamaños, lo que es crítico en sistemas como reactores de polimerización, donde la distribución de partículas influye en la estabilidad del proceso. Su integración con modelos reológicos no newtonianos, como los empleados en fluidos pseudoplásticos típicos de recubrimientos, permite capturar la dependencia de la viscosidad con la tasa de deformación, ofreciendo una representación realista de la hidrodinámica en condiciones industriales (Chhabra & Richardson, 2008).

Las herramientas de CFD se han empleado con éxito para evaluar el comportamiento hidrodinámico de reactores agitados mecánicamente utilizados en la polimerización por suspensión (Vonka et al., 2016). Gracias a su flexibilidad y capacidad para generar datos valiosos, se han realizado numerosos análisis de reactores agitados mediante esta técnica.

En este trabajo de investigación, se lleva a cabo un estudio hidrodinámico de un tanque agitado mecánicamente que simula las condiciones hidrodinámicas presentes en un proceso de polimerización por suspensión, utilizando herramientas de simulación CFD en el programa ANSYS Fluent.

1.2 Justificación

En diversas empresas del estado de México que se dedican a la producción de resinas sintéticas en emulsión, como las acrílicas y vinil-acrílicas, depende críticamente del desempeño de los reactores con agitación mecánica. Las propiedades finales del polímero, como su viscosidad, tamaño de partícula y estabilidad, están directamente relacionadas con las condiciones hidrodinámicas dentro del reactor, determinadas por el tipo de impulsor, la potencia suministrada y el régimen de agitación. Sin embargo, muchas empresas del estado de México enfrentan dificultades para optimizar estos parámetros debido a la complejidad y el alto costo de realizar estudios experimentales detallados en planta, especialmente al tener que evaluar múltiples configuraciones de operación. Esta limitación ha afectado la capacidad de mejorar procesos, reducir tiempos de producción y garantizar la uniformidad del producto.

Realizar estudios experimentales que relacionen todas estas variables puede ser muy complejo y puede resultar muy costoso. Por ello, las herramientas de CFD son sumamente útiles, ya que mediante simulaciones se pueden representar las condiciones que ocurren en el reactor de polimerización.

Durante las reacciones de polimerización la interacción entre fases (líquido-líquido, líquido-sólido) determina propiedades clave como la distribución de tamaños de partícula, estabilidad coloidal y morfología del producto final. Investigaciones recientes enfatizan que incluso variaciones locales en la energía de disipación pueden alterar la cinética de reacción en polimerizaciones por suspensión, subrayando la necesidad de modelos que integren fenómenos multifásicos (Yao et al., 2015).

La CFD es una herramienta de uso común para estudiar tanques agitados. Márquez-Baños, (2020) estudia la hidrodinámica de un impulsor de paletas inclinadas empleando fluidos newtonianos o pseudoplásticos de referencia. Hoseini et al., (2021), se enfocaron en la hidrodinámica interna del reactor simulando agua. Analizaron la estructura del impulsor Rushton y sus pequeñas modificaciones para optimizar el reactor. Mittal & Issao Kikugawa, (2021) realizaron un análisis de un agitador de alto bombeo. En estos estudios el análisis se centra en sistemas de una sola fase. Muy pocos trabajos investigan mezclas multifásicas que involucren la interacción de fases (líquido-líquido o líquido-sólido (Stuparu et al., 2021)

Aunque algunas investigaciones que abordan la naturaleza multifásica suelen utilizar fases inmiscibles o partículas que no interactúan directamente con el fluido (Frijters et al., 2012). Esta limitación tiene implicaciones importantes para las industrias químicas. Una mejor interpretación que involucre la interacción de dos o más fases podría ayudar a optimizar procesos, reducir costos y tiempos de fabricación, y minimizar el desperdicio energético.

Para abordar la parte multifásica de los procesos industriales, el modelo multifásico Euler-Euler granular es una gran opción ya que no tiene costo computacional muy alto y los resultados son confiables. Este enfoque permite simular simultáneamente el

comportamiento de múltiples fases interactuantes (ej. gotas de monómero en una fase continua acuosa) mediante ecuaciones de conservación acopladas para cada fase. A diferencia de modelos simplificados, el marco Euler-Euler granular considera fenómenos como la coalescencia-rotura de gotas, arrastre turbulento y distribución de esfuerzos cortantes, factores determinantes en procesos como la polimerización en suspensión.

Para lograr un estudio más detallado de los reactores de agitación, una herramienta fundamental es la simulación mediante CFD. Esta técnica permite ahorrar tiempo y costos asociados a la experimentación. Por ello, el presente trabajo se enfoca en el estudio hidrodinámico de un tanque agitado con impulsores de alto corte y bombeo, utilizando una mezcla bifásica (líquido-líquido y líquido-sólido). El objetivo es analizar propiedades hidrodinámicas y en el tamaño de gota del reactor de agitación, sin dejar de lado la importancia de la correcta selección o diseño del impulsor para el mezclado.

1.3 Antecedentes

En la industria química, particularmente en la producción de polímeros, uno de los aspectos de mayor interés para optimizar procesos es el control del tamaño de partícula del polímero generado. Este parámetro impacta en la morfología, la calidad del producto final y en operaciones posteriores como filtrado, secado y almacenamiento. Sin embargo, debido al carácter multifásico de muchos de estos procesos y a la naturaleza microscópica de las partículas, existe una tendencia a la aglomeración, lo que dificulta su control. Estas aglomeraciones suelen mantenerse unidas por fuerzas tipo Van der Waals (Montgomery T., 2012).

Estudios recientes han destacado la influencia de la hidrodinámica del reactor en la distribución de tamaños de partícula y en la eficiencia del mezclado durante la polimerización. Herrera-Mendoza, (2020) analizó mediante simulaciones CFD el comportamiento hidrodinámico de distintos impulsores (PBT4, PBT6 y HE3) en regímenes turbulentos con fluidos newtonianos y no newtonianos. Se observó que el número de potencia fue mayor para el impulsor PBT4 y menor para el PBT6. Además, en cuanto a eficiencia de mezclado, el impulsor HE3 mostró mejor desempeño para fluidos newtonianos. Este estudio evidenció que, con solo modificar el tipo de impulsor, es posible mejorar sustancialmente la eficiencia del mezclado, lo cual es relevante para procesos de polimerización.

Así mismo, Ramírez-Gómez, (2015) comparó el rendimiento hidrodinámico de impulsores comerciales de alto corte (HockD-2A y HockD-4A) con una turbina Rushton estándar. A través de simulaciones validadas experimentalmente, mostró que la selección del impulsor no puede basarse únicamente en relaciones entre números de potencia y bombeo, ya que otros factores como la disipación localizada también deben ser considerados.

Por su parte, Hoseini y col, (2021) estudiaron agitadores tipo Rushton con modificaciones geométricas (paletas en forma de U y V) utilizando agua como fluido de trabajo. Aunque su estudio no abordó sistemas multifásicos ni polimerización, sus resultados mostraron que el diseño del impulsor influye directamente en variables hidrodinámicas como la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación, aspectos que también impactan en la mezcla de sistemas más complejos.

Stuparu et al., (2021) utilizaron un modelo robusto para el diseño de impulsores en una mezcla bifásica líquido-sólido, con un fluido newtoniano de densidad 690 kg/m^3 y una fase sólida de densidad 1520 kg/m^3 y tamaño de partícula de 0.000171 m . Los resultados mostraron que entre el 25% y el 40% de la fase sólida se sedimentaba en el fondo del reactor, impidiendo una suspensión adecuada para completar la reacción química. Esto evidenció que el impulsor utilizado no era adecuado para mantener la fase sólida suspendida.

El modelo multifásico Euler-Euler granular permite modelar simultáneamente la fase continua (líquido) y las fases dispersas (sólidos, gotas o burbujas) resolviendo

ecuaciones de conservación acopladas que consideran interacciones como arrastre, colisiones partícula-partícula y efectos de turbulencia (Andrews IV et al., 2005). A diferencia de estudios previos centrados en una sola fase, el modelo Euler-Euler granular captura la microhidrodinámica crítica en sistemas como los analizados por Stuparu et al. (2021), donde la sedimentación de partículas compromete la eficiencia del reactor. Además, su capacidad para incorporar modelos reológicos no newtonianos (ej. ley de potencia o Herschel-Bulkley) lo hace idóneo para simular fluidos complejos como polímeros fundidos o suspensiones pigmentadas, donde la viscosidad depende de la tasa de deformación y la concentración de sólidos (Bird et al., 2006).

Finalmente, Ananda J. & Mostafa, (2022) realizaron una simulación de una mezcla bifásica líquido-sólido utilizando un impulsor PB6 (impulsor de seis paletas inclinadas) y un modelo Euleriano-Lagrangiano. Aunque su enfoque difiere del adoptado en el presente trabajo, subraya la necesidad de comprender a fondo la configuración adecuada del impulsor y la selección de modelos de simulación que capturen correctamente las complejas interacciones multifásicas.

Las técnicas experimentales para llevar a cabo este tipo de estudios son muy costosas y complicadas como lo sería el seguimiento de partículas por emisión de positrones (PEPT), esta técnica permite registrar trayectorias tridimensionales de partículas tanto en la fase líquida como en la sólida, incluso en medios opacos, durante tiempos prolongados de operación. Y así obtener mapas de velocidad y de Poincaré, los cuales permiten representar visualmente la estructura del flujo mediante el registro de las intersecciones de trayectorias de partículas con planos bidimensionales definidos (Windows-Yule et al., 2020).

1.4 Objetivos

Objetivo general

- Estudiar la hidrodinámica de un tanque agitado equipado con un impulsor de alto corte y bombeo para su aplicación en mezclas multifásicas que pueden resultar en procesos de polimerización.

Objetivos particulares

- Construir dominios computacionales con 2 diferentes impulsores y sus respectivas mallas computacionales seccionadas en regiones que permitan el cálculo de variables hidrodinámicas de interés.
- Evaluar la hidrodinámica del reactor con modelos multifásicos.
- Evaluación de la hidrodinámica con impulsor de alto corte y bombeo.
- Validar los resultados de simulación con datos experimentales.

1.5 Hipótesis

Los resultados de la técnica CFD en un reactor agitado con impulsor de alto corte pueden predecir el comportamiento de una mezcla bifásica relacionar los resultados en la obtención de polímeros.

Marco teórico

2.1 Polimerización por suspensión y su relación con la agitación

El proceso de polimerización por suspensión permite la obtención de polímeros hidrosolubles mediante la reacción de una solución monomérica acuosa dispersada. Este proceso ocurre con agitación mecánica en un medio orgánico, donde se forman gotas que actúan como microreactores batch. Uno de los principales objetivos de la polimerización por suspensión es lograr una dispersión uniforme de las gotas de monómero dentro de la fase continua, evitando su coalescencia durante la reacción. Para ello, se emplean sustancias como coloides protectores, estabilizantes o agentes de suspensión, que ayudan a mantener las gotas aisladas (Lloreda S., 2005).

Cuando finaliza la polimerización, se obtienen partículas esféricas, cuya forma se define en las primeras etapas del proceso, cuando las dos fases inmiscibles son agitadas. Existen dos tipos principales de polimerización por suspensión: la polimerización en perlas y la polimerización por precipitación. En la primera, ni el polímero ni el monómero son solubles en el medio acuoso, por lo que la reacción ocurre dentro de las gotas de monómero, con diámetros aproximados de 10-1000 μm . En la segunda, el monómero es soluble en el medio acuoso, pero el polímero no, lo que provoca su precipitación durante la polimerización.

Las partículas poliméricas primarias suelen tener un diámetro aproximado de 1 μm y tienden a aglomerarse en partículas secundarias porosas con un diámetro de 100-200 μm . Sin embargo, estas partículas tienden a coagularse en una de las fases de polimerización, por lo que deben ser separadas nuevamente mediante fuerzas de cizallamiento en el campo de flujo. La potencia de agitación es un factor clave y está determinada por la viscosidad efectiva del contenido del reactor. Esta viscosidad depende tanto de las características de la fase dispersa como de la viscosidad de la fase continua, por lo que es fundamental mantenerla en un valor bajo durante todo el proceso de polimerización (Jaisinghani & Ray, 1977).

Uno de los principales desafíos de este tipo de polimerización es controlar la dinámica de rompimiento y coalescencia de las gotas, lo cual se logra mediante la adición de agentes de suspensión, la selección de una velocidad de agitación adecuada y la geometría del agitador. La disipación de energía desempeña un papel fundamental en la polimerización por suspensión, ya que está directamente relacionada con el tipo de agitador y la velocidad de agitación, influyendo en el tamaño final de las partículas. En otras palabras, la energía disipada determina la capacidad de reducir el tamaño de gotas y burbujas finales.

Durante la polimerización, se distinguen dos fases: la fase dispersa y la fase continua. La fase dispersa está compuesta por los monómeros, el iniciador y el agente activador,

mientras que la fase continua contiene la fase acuosa y los estabilizadores. Al finalizar la polimerización, se obtienen partículas esféricas, cuyo tamaño depende de varios factores, como la velocidad de agitación, la naturaleza y la concentración del dispersante. Sin embargo, un incremento en la viscosidad puede generar problemas en la agitación.

De acuerdo con Martinez R., (1990), algunos aspectos clave a considerar en la reología de este proceso incluyen la prevención de la coalescencia de las gotas durante la polimerización, evitando la coalescencia catastrófica que ocurre cuando las gotas alcanzan un estado gomoso, así como el control de la distribución de pesos moleculares en las especies poliméricas, asegurando una distribución con media y dispersión preestablecidas. En la **Figura 1** se muestra una representación esquemática del proceso de polimerización por suspensión en un reactor de agitación, donde se observa la obtención del polímero precipitado.

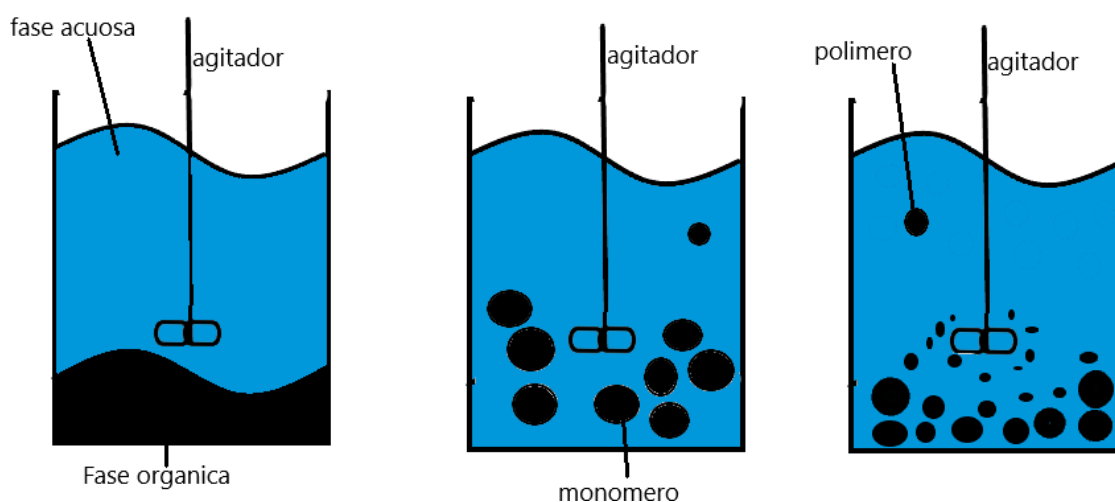


Figura 1 Polimerización por suspensión

La agitación en este sistema de polimerización es un elemento de suma importancia, ya que influye en la velocidad de reacción y en el tamaño de las partículas finales. La velocidad de agitación y el tipo de impulsor utilizado determinan la variación en la distribución del tamaño de partículas. Es esencial mantener el líquido en suspensión durante la reacción, pero la agitación cumple un papel más complejo que simplemente mezclar las fases.

Un ejemplo de esto es la polimerización del estireno, donde se ha observado que un aumento en la velocidad de agitación reduce la velocidad de polimerización y prolonga el periodo de inducción. Esto puede atribuirse a la presencia de oxígeno introducido por la agitación, el cual inhibe el crecimiento de la cadena y disminuye el peso molecular promedio del polímero. En la polimerización de estireno y acetato de vinilo, se presentan diferencias en la influencia de la velocidad de agitación. Cuando la velocidad de agitación es baja, pero suficiente para evitar la separación de fases, la conversión del estireno

aumenta con la velocidad de agitación debido a una mejor difusión del monómero. No obstante, en el caso del acetato de vinilo, no se evidencia un aumento en la conversión al incrementar la velocidad de agitación, debido a que este monómero presenta una solubilidad relativamente alta en agua, lo que favorece su difusión y reduce la influencia del régimen hidrodinámico sobre la conversión.

En sistemas de polimerización por emulsión como el del estireno, la agitación no solo influye en la distribución del monómero, sino también en los mecanismos de nucleación. A velocidades elevadas de agitación, se incrementa el área interfacial entre las gotas de monómero y la fase acuosa, lo que demanda una mayor cobertura por parte del emulsificante. Esto reduce la disponibilidad de emulsificante para formar micelas, disminuyendo así el número de partículas nucleadas y afectando negativamente la velocidad de polimerización. En contraste, en sistemas como el del acetato de vinilo, donde predomina la nucleación homogénea, este efecto no es tan relevante, lo que sugiere que la reducción de micelas tiene un impacto menor en la cinética del proceso.

Por otro lado, en la polimerización del butadieno, se ha observado que un aumento en la velocidad de agitación puede llevar a una disminución en la velocidad de polimerización. Este efecto se asocia a que, al intensificarse la agitación, se incrementa el área interfacial entre el monómero y la fase acuosa, lo que obliga al emulsificante a distribuirse sobre una superficie mayor. Como resultado, aunque la cantidad total de emulsificante no cambie, su concentración efectiva disponible para la formación de micelas disminuye, ya que una parte considerable queda adsorbida en la interfaz. Esto afecta la estabilidad coloidal del sistema y reduce el número de partículas poliméricas nucleadas, ralentizando así el proceso de polimerización (Zubitur S., 1998).

2.3 Sistemas de mezclado

En diversas industrias, como la química, farmacéutica, alimentaria, entre otras, es común el uso de tanques agitados mecánicamente con el objetivo de lograr una adecuada homogeneización de los fluidos. La eficiencia del mezclado es un factor crítico, ya que una agitación deficiente puede comprometer la calidad del producto final, reducir el rendimiento del proceso y afectar la eficiencia operativa general.

La agitación mecánica, comúnmente implementada mediante tanques agitados equipados con impulsores, es una estrategia ampliamente utilizada para favorecer la mezcla eficiente en procesos industriales. Estos sistemas permiten mejorar la uniformidad en la distribución de concentración y temperatura dentro del recipiente, lo cual optimiza la transferencia de calor y masa, y acelera las reacciones químicas, especialmente en sistemas limitados por fenómenos de transporte (Paul et al., 2004). La velocidad de rotación del impulsor es un parámetro clave, ya que regula la energía transmitida al fluido y, por tanto, la eficacia del mezclado. Un diseño y operación adecuados del sistema de agitación son fundamentales para garantizar el desempeño óptimo en procesos que involucran fases líquidas, sólidas o gaseosas.

La elección inadecuada de la velocidad de agitación puede generar efectos adversos en diversos procesos industriales. En particular, en aplicaciones relacionadas con la síntesis de polímeros, velocidades excesivamente altas pueden interferir negativamente en el proceso de polimerización. Una agitación intensa y sostenida en el tiempo puede alterar la estructura del polímero, afectando sus propiedades finales y, por tanto, la calidad del producto obtenido (Vonka et al., 2016).

Los tanques agitados mecánicamente suelen tener forma cilíndrica y están equipados con un eje vertical (flecha) ubicado en el centro del recipiente. En función del diseño y la aplicación, la parte superior del tanque puede estar cerrada herméticamente o permanecer abierta al ambiente. Las relaciones geométricas del tanque de agitación mecánica suelen cambiar un poco, dependiendo del uso que se le dará. Sin embargo, comúnmente se utiliza un diseño estandarizado como se observa en la **Figura 2**. La altura del líquido (H) es aproximadamente igual al diámetro del tanque (T). El diámetro del impulsor D suele ser un tercio del diámetro del tanque. El movimiento de la flecha es dado por un motor en la parte superior, conectado una caja reductora de velocidad. También es posible encontrar adaptados accesorios como baffles, tubos de entrada y salida, serpentines, chaquetas, etc.

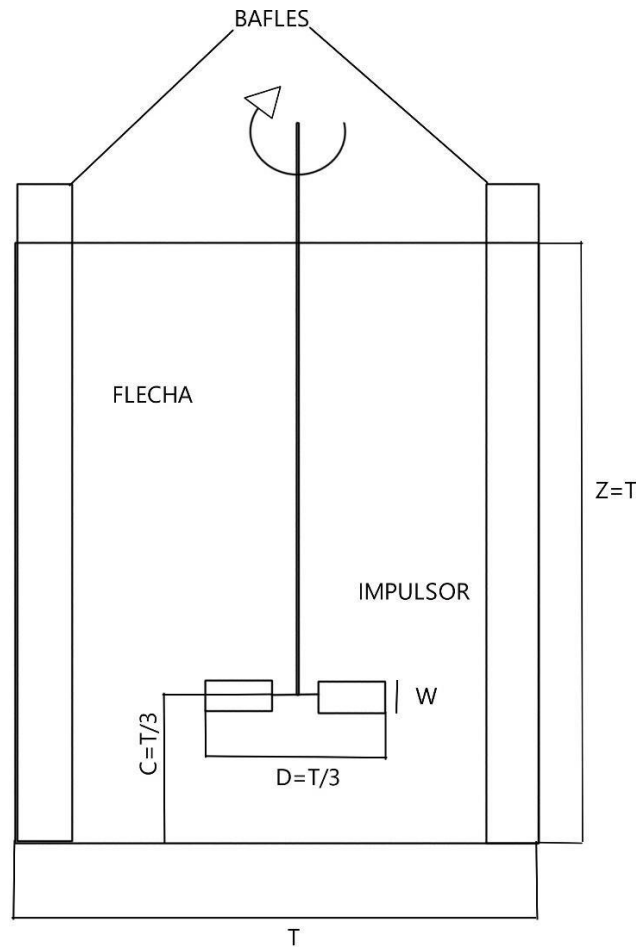


Figura 2 Geometría del tanque de agitación (Derksen, 2003).

Cuando el régimen de flujo es turbulento, la presencia o ausencia de deflectores influye significativamente en la eficiencia de la agitación. En ausencia de deflectores, el fluido sigue una trayectoria circular con una baja velocidad radial, lo que provoca un mezclado axial deficiente y la formación de un vórtice. La instalación de deflectores evita el movimiento circular del fluido, inhibe la formación del vórtice y mejora la tasa de mezclado al aumentar el flujo axial. Sin embargo, en fluidos altamente viscosos, la presencia de deflectores puede generar zonas muertas, afectando la eficiencia del proceso.

En procesos donde se incorporan polvos o partículas, la formación de un vórtice puede ser beneficiosa, ya que ayuda a arrastrar las partículas hacia la zona del impulsor, donde la agitación es más intensa, facilitando su dispersión en el fluido (Tamburini et al., 2021).

La eficiencia del sistema de mezclado también depende del diseño y la selección adecuada del impulsor. Existen múltiples diseños en la industria, y la elección del impulsor depende del tipo de proceso, las propiedades del fluido (especialmente la viscosidad), la capacidad de bombeo y la tasa de corte requerida. Cada impulsor genera

un patrón de flujo específico dentro del tanque, permitiendo la recirculación del líquido hacia el impulsor.

Los impulsores se clasifican principalmente en dos tipos según su patrón de flujo: axial y radial. En los impulsores axiales, el fluido se mueve en dirección paralela al eje del impulsor, mientras que, en los impulsores radiales, el fluido es expulsado de manera perpendicular al eje, dirigiéndose hacia las paredes del tanque (**Figura 3**). Sin embargo, la clasificación y los patrones de flujo deben considerarse de manera flexible, ya que factores como las dimensiones del impulsor, su posición en el tanque y la viscosidad del fluido pueden influir en la combinación o predominio de uno u otro patrón de flujo (Paul et al., 2004).

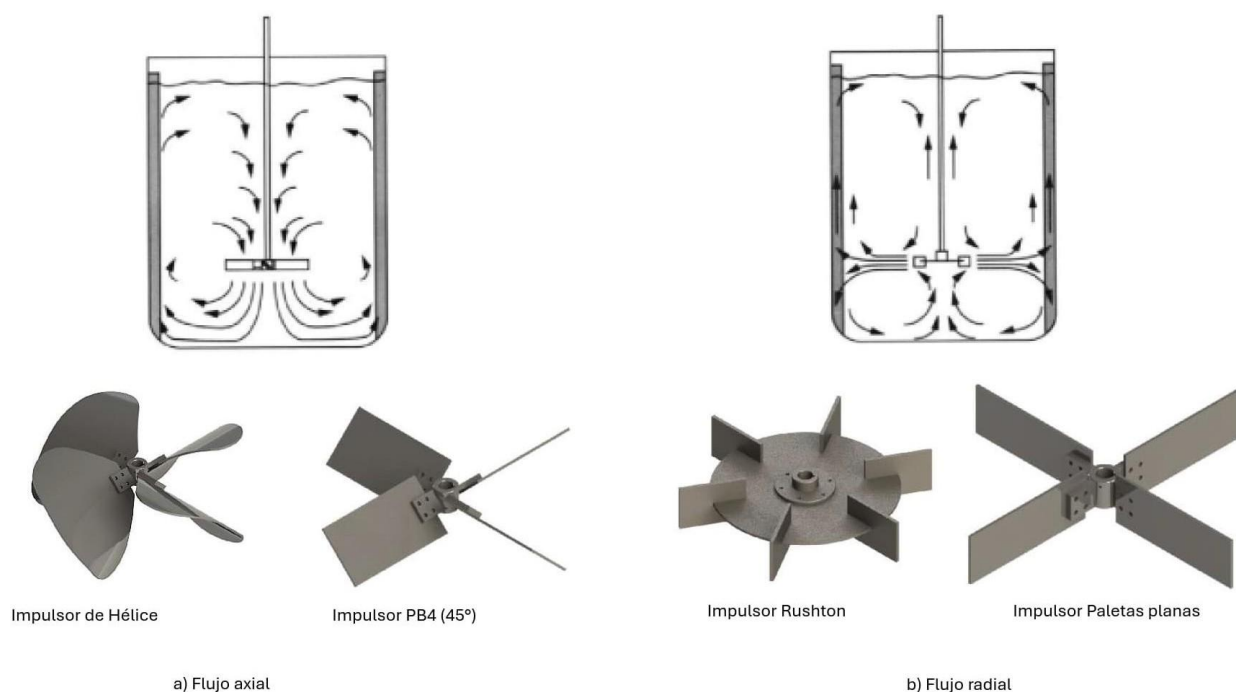


Figura 3 Patrones de flujo e impulsores que generan estos patrones (Doran, 2013)

El consumo de energía y la capacidad de generar movimiento al fluido son otros criterios importantes para la selección de impulsores. Estos parámetros son expresados de manera adimensional como número de potencia (N_P) y número de bombeo (N_Q), respectivamente. Estos parámetros son descritos más adelante.

2.4 Impulsores de alto corte y bombeo

Los impulsores de alto bombeo (**Figura 4-a**), caracterizados por sus amplias aspas o paletas, están diseñados para inducir un movimiento eficaz del fluido dentro del tanque. La mayor parte de la energía mecánica transmitida desde el impulsor al fluido se emplea en fomentar la recirculación del líquido, lo cual es fundamental para mantener una mezcla homogénea y una distribución uniforme de propiedades dentro del sistema (Holland, 1966).

En contraste, se encuentran los impulsores denominados de alto corte (*High Shear Impeller*, HSI, por sus siglas en inglés). Comúnmente, estos no generan un bombeo tan alto, pero su diseño (**Figura 4-b**), basado en cuchillas que barren un volumen pequeño de fluido a altas velocidades, provoca una agitación intensa en las cercanías del impulsor, con un alto esfuerzo de corte y una elevada disipación de energía local. Esta característica les otorga una ventaja en procesos de la industria cosmética, de pinturas, alimentos y fármacos, entre otros.

Un ejemplo importante y de gran uso en procesos de polimerización se basa en sistemas líquido-líquido, donde los impulsores de alto corte se utilizan para producir emulsiones con una distribución uniforme de pequeñas gotas. En sistemas sólido-líquido, se emplean para la incorporación de polvos en el líquido, así como para el rompimiento de aglomerados y su posterior distribución dentro del medio (Ramírez-Muñoz et al., 2016).



a) Impulsor de alto bombeo



b) Impulsor de alto corte

Figura 4 Ejemplo de impulsor de alto corte y bombeo (Doran, 2013).

En la **Figura 5** se puede observar el esfuerzo cortante y el bombeo que pueden proporcionar los diferentes impulsores. En la parte inferior derecha se encuentran los impulsores convencionales de flujo axial, caracterizados por generar un alto bombeo y niveles bajos de esfuerzo cortante. Al centro de la figura se pueden ver los impulsores de flujo radial, los cuales proporcionan un nivel de esfuerzo cortante más elevado y un bombeo intermedio. En el otro extremo, en la parte superior izquierda, se encuentran los impulsores capaces de generar los valores más altos de esfuerzo cortante, pero con muy poco bombeo (Oldshue Y., 1983).

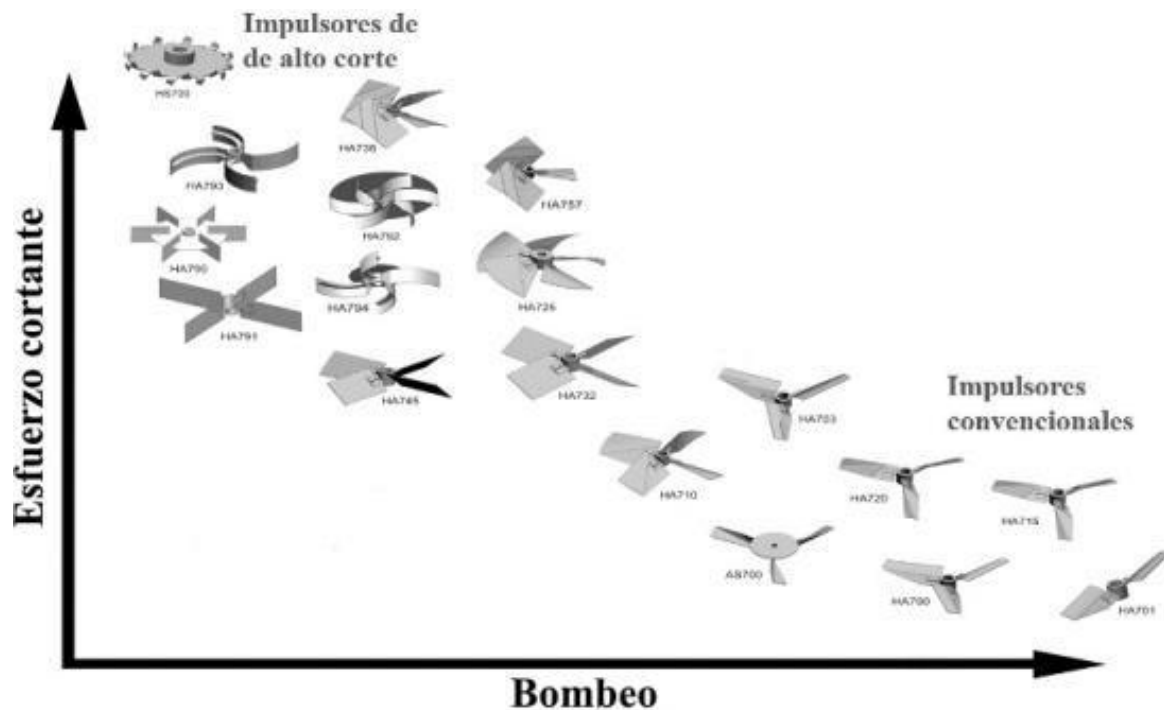


Figura 5 Comparación del bombeo y esfuerzo cortante generado por impulsores
(Mixtec-Impellers, 2012)

2.5 Parámetros hidrodinámicos

La viscosidad se define como la resistencia que presenta un líquido al movimiento. La fuerza requerida para mover el fluido se relaciona con el área en contacto, a esta relación se le denomina esfuerzo de corte (τ). De acuerdo con la ley de viscosidad de newton para fluidos newtonianos, la fuerza de corte por unidad de área es proporcional al gradiente negativo de la velocidad local, donde la constante de proporcionalidad es la viscosidad, por lo que el tensor de esfuerzos viscosos (τ) depende directamente del tensor de velocidad de corte ($\dot{\gamma}$) y se puede escribir como:

$$\tau = -\mu\dot{\gamma} \quad (1)$$

Los fluidos no newtonianos son aquellos que no cumplen con la ley de viscosidad de Newton. Dependiendo de cómo varía la viscosidad con la tasa de deformación el comportamiento se puede caracterizar por:

- Fluido pseudoplástico: la viscosidad disminuye con la velocidad de corte o deformación.
- Fluido dilatante: la viscosidad aumenta con la velocidad de corte o deformación.
- Fluido plástico (viscoplástico): exhibe el llamado esfuerzo umbral o esfuerzo de cedencia, se debe aplicar cierto esfuerzo para que ocurra el flujo.

Las curvas de flujo o reo gramas en escalas lineales y logarítmicas para estos tipos de comportamiento al flujo se muestran en la **Figura 6**.

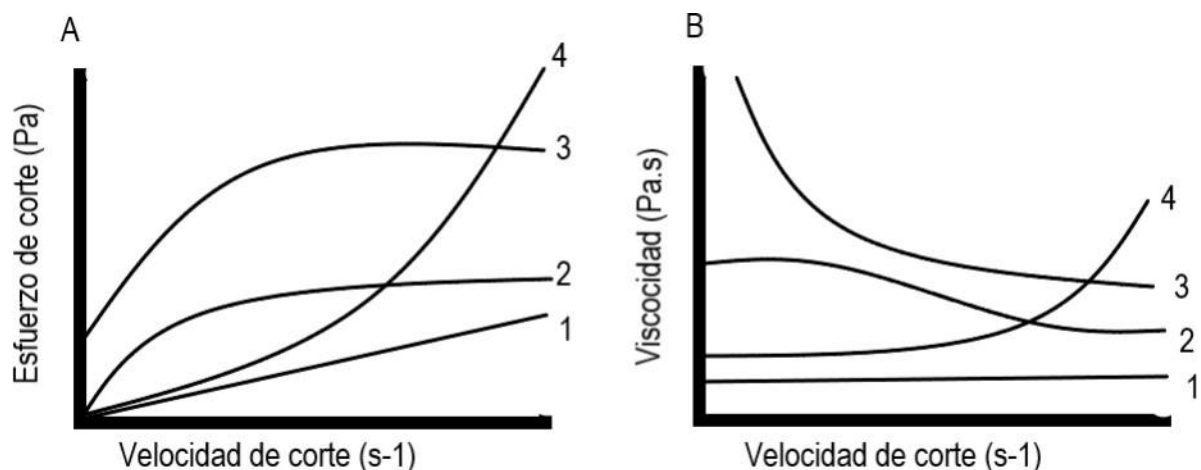


Figura 6 Comportamientos generales de flujo de fluido, fluido newtoniano (1), Pseudoplástico (2), Plástico (3), Dilatante (4) (Meira R. & Gugliotta M., 2022)

El esfuerzo cortante (τ), la rapidez de deformación ($\dot{\gamma}$) y la viscosidad (η) de un fluido están relacionados de acuerdo con la ecuación (2)

$$\tau = \eta \dot{\gamma} \quad (2)$$

El consumo de energía de un fluido durante el proceso de agitación se limita a la disipación de la energía mecánica del impulsor en el fluido, como resultado de la fricción entre las capas de este. En el estado estacionario del proceso de agitación, la potencia suministrada por el impulsor es igual a la potencia consumida por el fluido. La energía disipada en el fluido durante un período de tiempo y que debe ser constantemente proporcionada para mantener el movimiento del fluido a una velocidad de agitación específica se conoce como potencia inyectada.

Para generar mezclado, se requiere energía, la cual generalmente se obtiene mediante la rotación de un impulsor. La potencia, o la velocidad a la que se suministra la energía, depende de múltiples factores, no solo del tipo de impulsor utilizado, sino también de la geometría del recipiente, las propiedades físicas del fluido y la disposición de los componentes del sistema, como baffles y serpentines. Por lo tanto, para describir el comportamiento de un impulsor, es necesario considerar todo el sistema en el que opera (Márquez-Baños et al., 2019).

Para establecer las variables de las que depende la potencia inyectada, se parte de las siguientes suposiciones: un fluido newtoniano de viscosidad η y densidad ρ que llena un tanque cilíndrico de diámetro T hasta una altura Z . El fluido es agitado con un impulsor de diámetro D y altura W , operando a una velocidad de rotación N y posicionado a una altura C respecto al fondo del tanque (ver **Figura 2**). Así, las variables que determinan el

consumo de potencia (P) quedan establecidas en la ecuación (4) (García-Cortés & Jáuregui-Haza, 2006).

$$P = f(\rho, \eta, g, N, D, T, W, Z, \text{entre otras}) \quad (3)$$

Debido a la complejidad de la geometría de los componentes del sistema de agitación (recipiente, impulsor, deflectores, difusores, serpentines, etc.,) la solución analítica de esta ecuación es muy compleja. Sin embargo, utilizando análisis dimensional, la ecuación (3) queda expresada en números adimensionales (Ascanio et al., 2004).

$$\frac{P}{\rho N^3 D^5} = f\left(\frac{\rho N D^2}{\eta}, \frac{N^2 D}{\text{gravedad}(g)}, \frac{T}{D}, \frac{W}{D}, \frac{Z}{D}, \text{etc.}\right) \quad (4)$$

Dónde pueden identificarse los siguientes números adimensionales:

Número de Potencia,

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

Número de Reynolds,

$$Re = \frac{\rho N D^2}{\eta} \quad (6)$$

Número de Froude,

$$Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (7)$$

El N_p es proporcional a la relación entre la fuerza de rozamiento que actúa sobre una unidad de área del impulsor y la fuerza de inercia

El Re es una expresión adimensional que permite caracterizar el movimiento de un fluido. Relaciona densidad, viscosidad, velocidad y la dimensión típica de un flujo. La presencia o ausencia de turbulencia en un fluido que se agita se puede relacionar con un número de Reynolds.

El Fr es una medida que relaciona la fuerza de inercia y la fuerza gravitacional por unidad de área que actúa sobre el fluido. Se utiliza en la estimación del consumo de potencia en condiciones donde, por la ausencia de placas deflectoras, se generan movimientos superficiales significativos inducidos por el impulsor.

El valor del número de Re define si el carácter del flujo es turbulento o laminar. Además, se considera que el paso entre el régimen laminar y el turbulento no es inmediato, pasando por una zona de transición. Se define de la siguiente manera:

- Régimen laminar: $Re < 10$
- Régimen transitorio: $300 < Re < 10000$
- Régimen turbulento: $Re > 10000$

El Re representa la relación entre las fuerzas inerciales y las viscosas, mientras que el Fr relaciona las fuerzas inerciales con la fuerza de gravedad. La dependencia del N_p respecto del Fr sólo es importante cuando existe la formación del vórtice y puede analizarse en los siguientes casos (Márquez-Baños et al., 2019).

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

Si en el sistema de agitación se mantiene similitud geométrica y no existe dependencia del Fr entonces el N_p sólo es función del Re (Ascanio et al., 2004), ecuación 8.

$$\frac{P}{\rho N^3 D^5} = f\left(\frac{\rho N D^2}{\eta}\right) \quad (8)$$

A continuación, se muestra una gráfica en la que se muestra la dependencia del N_p respecto del Re se conoce como “curva de potencia”. En la **Figura 7** se muestra una curva típica.

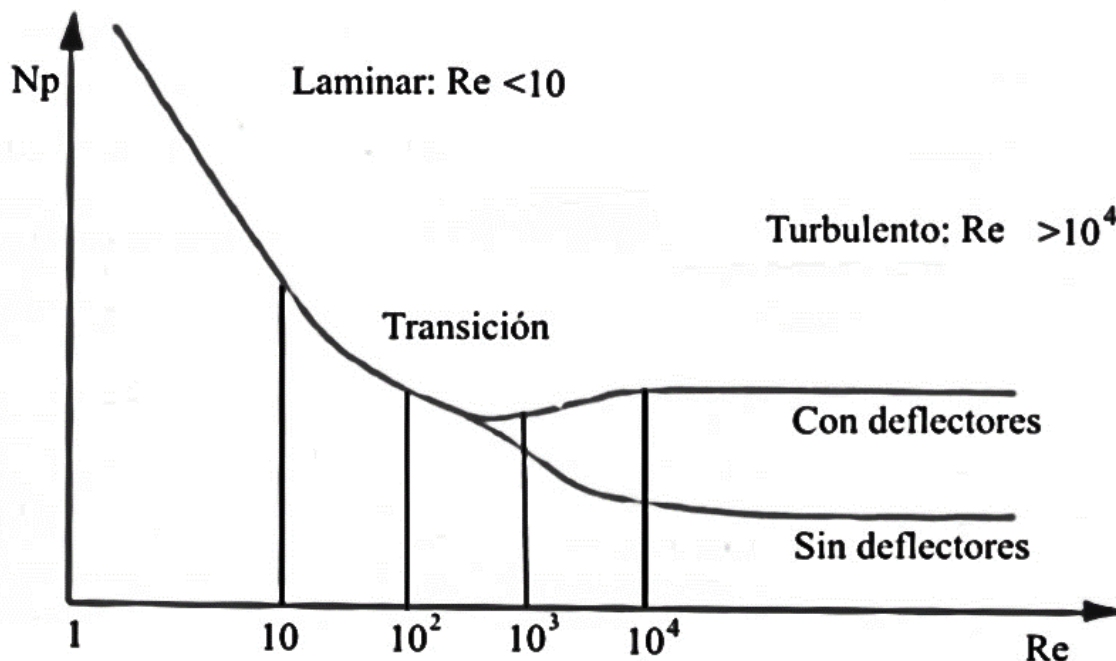


Figura 7 Curva de potencia (N_p vs Re) para un tanque cilíndrico con y sin deflectores (adaptado de McCabe et al., (1991)).

De la **Figura 7** se destaca lo siguiente (Paul et al., 2004):

- El flujo laminar se encuentra a $Re < 10$ y aquí el N_p es inversamente proporcional al Re . i.e. $N_p = KP/Re$, donde KP es una característica del impulsor. La presencia o ausencia de deflectores no afecta al N_p .
- El régimen turbulento se establece a partir de $Re > 104$ y el N_p sólo depende de la presencia o ausencia de deflectores, pero en uno u otro caso el NP es constante.
- El régimen de transición se encuentra en el intervalo $10 < Re < 10^4$. La presencia de deflectores sólo es importante a $Re > 300$.

El flujo (Q) es proporcional a ND^3 (ecuación 9), y la altura teórica (H), que está relacionada con el cizallamiento es proporcional a N para flujo laminar, y a N^2D^2 para flujo turbulento (ecuación 10). Estas relaciones muestran que, para un tanque y una potencia específica, un agitador grande que gira a una velocidad lenta puede producir una alta velocidad de flujo o un agitador pequeño que gira a una velocidad alta puede producir alta tasa de corte (Holland, 1966).

$$Q \propto \rho N^2 D^2 \quad (9)$$

$$H \propto N^2 D^2 \quad (10)$$

Para poder observar mejor la igualdad, el lado derecho de la ecuación 9 se multiplica por NQ con lo que obtenemos la ecuación 11.

$$Q \propto N_\rho N^2 D^2 \quad (11)$$

En donde N_ρ es el número de bombeo adimensional. La ecuación 12 se puede obtener multiplicando Q y H para obtener la potencia consumida por un impulsor.

$$P = N_p \rho N^3 D^5 \quad (12)$$

El flujo normal al plano de descarga del impulsor ya sea radial o normal, puede usarse para determinar la capacidad de bombeo del impulsor (Nienow, 1997). En el caso de impulsores de tipo radial, **Figura 8-a**), el valor de Q se determina calculando el flujo que sale proyectado a través de un cilindro de diámetro D y altura W del mismo tamaño que los del impulsor, ecuación 13. En el caso de impulsores de tipo axial deberá calcularse el flujo que atraviesa el área que barre el impulsor, **Figura 8-b**).

$$Q = 2\pi r \int_{\Delta y}^0 \int_{\Delta x}^0 V_r dy dx \quad (13)$$

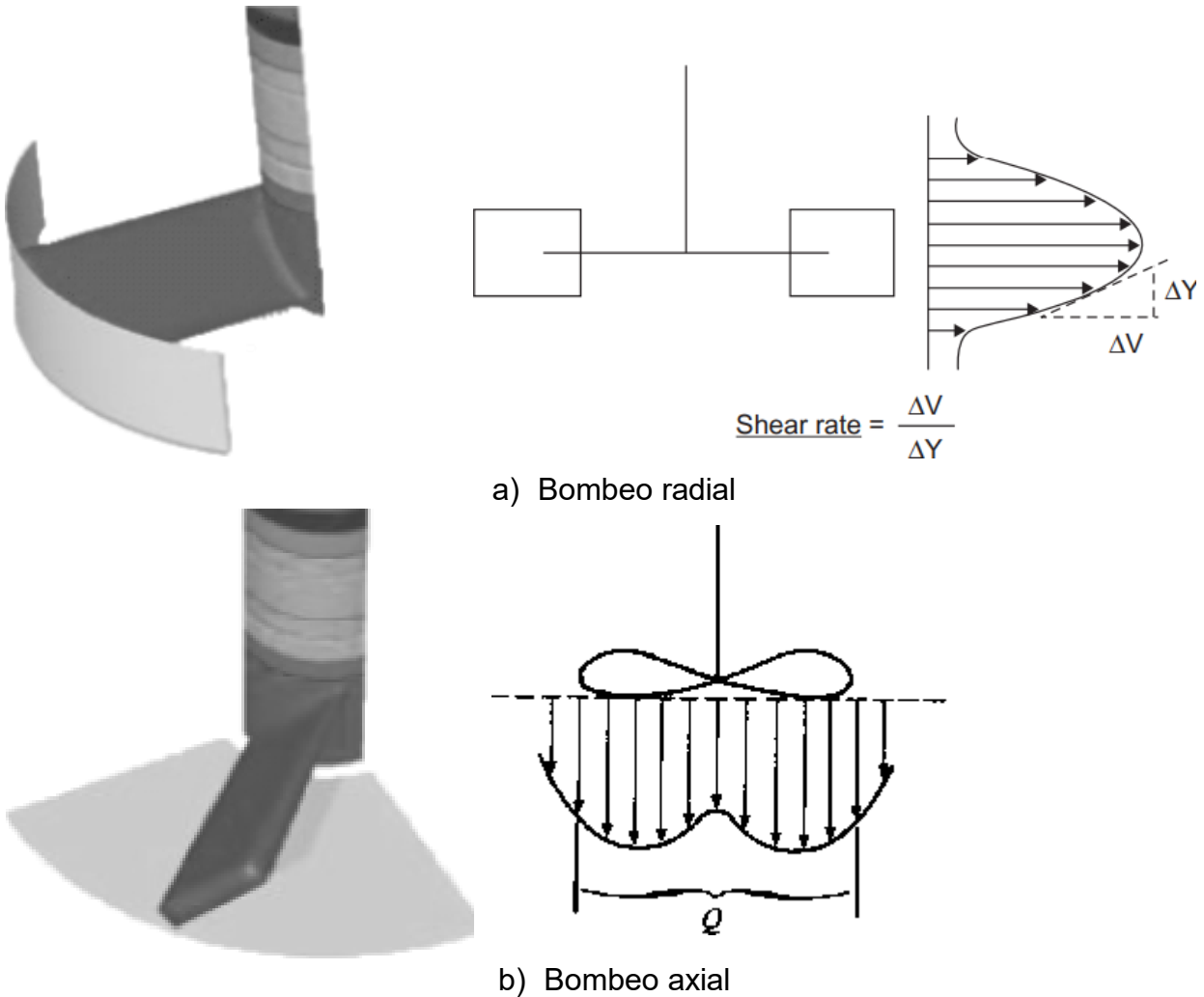


Figura 8 Superficies cerca de la paleta del impulsor donde se calcula Q y el perfil de velocidad

Primero, se puede calcular la pendiente del gradiente de velocidad, que proporciona la velocidad de cizallamiento en cualquier lugar del perfil. El esfuerzo cortante del fluido se puede obtener multiplicando la velocidad de cizallamiento en un punto dado por la viscosidad. Este responsable de los fenómenos de esfuerzo cortante en el fluido, como la dispersión de burbujas y gotas o la reducción del tamaño de las partículas aglomeradas (Hoseini et al., 2021).

Comúnmente, todas las operaciones realizadas en tanques equipados con un agitador dependen de la alta velocidad de cizallamiento, la alta velocidad de flujo o una combinación de estos factores. La distribución de la tasa de corte o los gradientes de velocidad es una tarea complicada de obtener experimentalmente, por lo que se puede obtener esta información utilizando técnicas de dinámica de flujo computacional (Paul et al., 2004).

Sin embargo, estas relaciones de números adimensionales son parámetros globales de todo el sistema, esto implica que para conocer qué sucede localmente, los parámetros mencionados anteriormente tienen limitaciones, por ejemplo, si se requiere determinar la potencia en una parte específica del reactor, las ecuaciones anteriores no serían de utilidad ya que están en una relación global del sistema; estos parámetros se refieren al macro mezclado del sistema. En cambio, para conocer que ocurre a nivel local del sistema se utilizan otras técnicas y parámetros para tener en cuenta como son la disipación viscosa, disipación de energía cinética turbulenta, entre otras.

2.6 Macro mezcla y micro mezcla

La macro mezcla, está asociada a la circulación del fluido y a los movimientos turbulentos de gran escala. Esto se refiere a la distribución de concentraciones a lo largo de todo el reactor. Por otro lado, la micro mezcla, a escala molecular, está relacionada con la difusión molecular y los movimientos microscópicos dentro del fluido. Para un estudio óptimo de cualquier reacción química, es fundamental considerar ambos aspectos de la mezcla, ya que influyen directamente en el desarrollo de la reacción (Zubitur S., 1998).

En un sistema real, el flujo no es uniforme en todas las zonas del reactor, lo que genera regiones de estancamiento conocidas como *zonas muertas*. Incluso si la macro mezcla es eficiente, la micro mezcla puede ser incompleta cuando las reacciones químicas ocurren rápidamente. Se considera que una reacción es rápida cuando el tiempo requerido para la etapa de micro mezcla es mayor que el tiempo necesario para que la reacción química tenga lugar. En procesos con cinética química, es esencial identificar la etapa que controla la velocidad de reacción, como ocurre en las reacciones heterogéneas. En este sentido, se pueden distinguir dos tipos principales de regímenes (Zubitur S., 1998):

- **Control por cinética química:** Ocurre cuando las reacciones químicas son lo suficientemente lentas como para que la velocidad del proceso esté limitada por la cinética de reacción. En estos casos, los reactivos suelen estar completamente mezclados antes de que se produzca una conversión apreciable, por lo que la micro mezcla no es un factor determinante.
- **Control difusional:** Se presenta en reacciones extremadamente rápidas, donde la velocidad del proceso está gobernada por la difusión de los reactivos. En estos casos, la micro mezcla juega un papel crucial y debe considerarse con detalle en el análisis del sistema.

2.7 Tiempo de mezclado

El tiempo de mezclado (Θ) se puede definir como el intervalo necesario para alcanzar un grado específico de uniformidad en la composición del sistema, de acuerdo con los requerimientos del proceso. Este parámetro es fundamental en operaciones donde se mezclan líquidos miscibles, tanto al inicio de una reacción como durante la incorporación de corrientes de alimentación. Su importancia es especialmente crítica en procesos como

la polimerización en emulsión, donde una mezcla rápida y eficiente impacta directamente en la cinética, la selectividad y la calidad del producto final.

El tiempo de mezclado depende de múltiples variables, entre ellas: la viscosidad (μ) y densidad (ρ) de la mezcla, la diferencia de densidad entre los líquidos antes y después de la mezcla ($\Delta\rho$), el diámetro del agitador (D), el diámetro del tanque (D_t), el volumen del tanque (V), así como la capacidad de bombeo del agitador y el nivel de turbulencia generado dentro del sistema.

Se puede expresar el tiempo de mezcla en función de diferentes números adimensionales como son: número de Fr, número de Re, también se puede expresar como tiempo de mezcla adimensional (Θ_m) y diferentes relaciones geométricas ($\frac{\rho}{\Delta\rho}, \frac{D}{D_t}, \frac{H_l}{D_t}$), esta se puede expresar de la siguiente forma:

$$\Theta_m = \frac{\Theta ND^3}{V} \quad (14)$$

Las relaciones geométricas que dan las dimensiones del agitador en comparación con el volumen total del líquido tienen una gran importancia, si el tanque es demasiado grande con respecto al agitador se formarían zonas muertas que contribuyen a aumentar el tiempo de mezcla, estas relaciones dependen del tipo y diseño del agitador (Kramers et al., 1952).

Existen diversas técnicas para estimar los parámetros que caracterizan el mezclado en reactores. La mayoría de estos métodos se basan en enfoques de tipo estímulo-respuesta, los cuales requieren el uso de un trazador para representar el comportamiento del mezclado dentro de un tanque agitado. Este trazador debe ser detectable mediante un sensor apropiado y, en lo posible, debe existir una relación lineal entre la concentración del trazador y la señal registrada por el sensor. El trazador se introduce en forma de pulso, representando una fracción del volumen total del fluido, al cual se le ha alterado alguna propiedad medible, como el pH, la conductividad, la temperatura u otra característica física que pueda monitorearse sin alterar significativamente el comportamiento reológico del fluido. El tiempo de mezclado se define como el intervalo necesario para alcanzar un determinado nivel de homogeneidad tras la adición del pulso. Este nivel puede establecerse según los requerimientos específicos del proceso, siendo común el uso de indicadores como t_{60} o t_{95} , que representan el tiempo requerido para alcanzar un 60% o 95% de homogeneización, respectivamente, dentro del tanque. Se va a utilizar un pulso de temperatura, las cuales fueron registradas y guardadas utilizando un sistema de adquisición de datos, y posteriormente se normalizaron conforme a la siguiente ecuación:

$$C_i^* = \frac{C_i - C_0}{C_\infty - C_0} \quad (15)$$

donde C_i^* representa la temperatura normalizada; C_i es la temperatura registrada en un tiempo determinado t , C_0 corresponde a la temperatura medida antes de la inyección del

pulso, y C_{∞} es la temperatura alcanzada una vez que se ha logrado la homogeneidad en el sistema.

Estos datos de temperatura se normalizan y se analizan utilizando la siguiente ecuación, la cual calcula el logaritmo de la varianza a partir de un promedio logarítmico de las desviaciones. Estas desviaciones se grafican en función del tiempo para cada valor de temperatura normalizada. Se considera que se alcanza un 85% de homogeneidad cuando en la siguiente ecuación se sustituye $C'_{t,n} = 60$, lo que equivale a un valor de $\log \sigma^2_{RMS} = -0.8$. Este valor se representa en la gráfica como una línea horizontal, y el punto donde interseca con la curva obtenida a partir de los datos experimentales.

$$\log \sigma^2_{RMS} = \log \left\{ \frac{1}{2} [(C'_{t,1} - 1)^2 + (C'_{t,2} - 1)^2] \right\} \quad (16)$$

2.8 Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

La CFD es un campo de estudio que se ocupa de la simulación y análisis computacional del flujo de fluidos. Utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver las ecuaciones fundamentales que describen el comportamiento de los fluidos, como las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía. CFD se basa en la discretización del dominio de estudio en una malla computacional, donde se resuelven las ecuaciones diferenciales que describen el flujo. Estas simulaciones permiten obtener información detallada sobre las propiedades del flujo, como la velocidad, presión, temperatura, y otros parámetros relevantes. Su aplicación ha sido de gran utilidad en la ingeniería y la investigación científica para comprender y mejorar el comportamiento de los fluidos en una amplia gama de aplicaciones. El uso de CFD permite obtener información local detallada sobre el dominio simulado. Un ejemplo, es en el uso de un reactor de agitación, se pueden definir regiones de interés y en estas, determinar valores de distintos parámetros (esfuerzo de corte, tasa de corte, disipación de energía, entre otros) (Andersson, 2012).

Para la correcta implementación de simulaciones con CFD se requiere de la teoría detrás de las simulaciones, así como modelos que describan los tipos de flujos, modelos que se aproximen a las soluciones de unas mezclas multifásicas, entre otros modelos de solución (van Wachem & Almstedt, 2003).

2.9 Aplicación y estructura de la malla estructurada.

Una malla estructurada está compuesta por celdas con elementos de forma regular, caracterizados por tener cuatro puntos nodales en dos dimensiones y ocho puntos nodales en tres dimensiones, adoptando una configuración hexaédrica. Estas mallas son ampliamente utilizadas en investigaciones de CFD, ya que facilitan la generación de mallas ortogonales en sistemas cartesianos.

Debido a su relativa facilidad de construcción, las mallas estructuradas proporcionan una base sólida para la experimentación con nuevas metodologías o conceptos enfocados en resolver las complejidades de los flujos multifásicos. No obstante, aunque resultan

útiles en muchas aplicaciones, la mayoría de los problemas prácticos de flujo multifásico involucran geometrías complejas que no se ajustan fácilmente a coordenadas cartesianas. Esto hace necesario un análisis detallado de la calidad de la malla, junto con otras consideraciones técnicas, para garantizar la precisión de los resultados.

Para ejemplificar la malla, consideremos el flujo multifásico, donde dos fases fluyen simultáneamente dentro de un conducto rectangular. Se puede crear una malla cartesiana uniformemente distribuida, donde el espaciado de los puntos de la cuadrícula en la dirección x es uniforme y el espaciado en la dirección y también es uniforme, como se muestra en la **Figura 9**. También se presenta una vista expandida de una sección de la malla discreta en el plano xy para representar la disposición de los puntos discretos dentro del dominio. Se observan los puntos de la cuadrícula de forma rectangular, como se describe en la **Figura 9** (Yeoh & Tu, 2009).

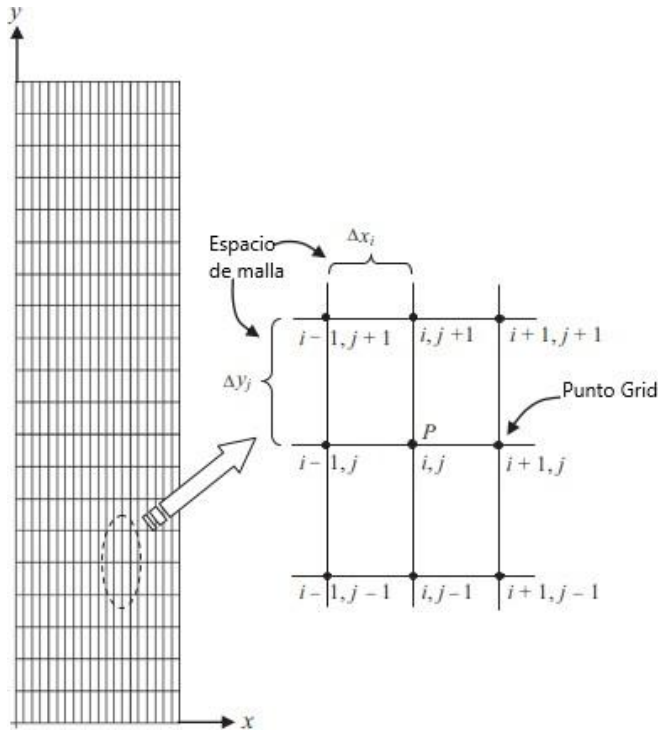


Figura 9 Malla rectangular uniforme (Yeoh & Tu, 2009).

En una malla estructurada bidimensional, los puntos de la cuadrícula suelen identificarse mediante los índices (i,j) (i, j), donde i representa la distancia en la dirección x y j la distancia en la dirección y . Si (i,j) son los índices para el punto P , sus vecinos inmediatos a la derecha, izquierda, arriba y abajo se definen mediante la variación de uno de los índices. Asignando valores discretos apropiados a $i\Delta x$ y $j\Delta y$, las coordenadas en ambas direcciones dentro del espacio físico pueden determinarse incrementalmente, generando así una malla rectangular que cubre todo el dominio.

En el caso de una distribución no uniforme de los puntos de la cuadrícula, el espaciado Δx o Δy puede tomar diferentes valores discretos. Esto permite la creación de mallas

con espaciamentos desiguales en las direcciones x y y . Un ejemplo claro es la generación de una malla con refinamiento en la dirección x para resolver adecuadamente la capa límite viscosa del flujo multifásico cerca de una pared, mientras que en la dirección y se mantiene un espaciado uniforme.

En tres dimensiones, cualquier punto de la cuadrícula debe identificarse mediante los índices (i,j,k) , donde k representa los puntos en la dirección z . La consideración de una dimensión adicional requiere el conocimiento del espaciado $k\Delta z$ además de $i\Delta x$ y $j\Delta y$, con el fin de construir una malla adecuada que cubra la geometría tridimensional (Yeoh & Tu, 2009).

Dada la complejidad de algunas geometrías, se buscan estrategias para generar mallas no estructuradas con características similares a las estructuradas.

2.10 Ecuaciones que describen el flujo.

El flujo de un fluido incompresible en un tanque agitado en condiciones isotérmicas puede ser explicado mediante las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento.

1. Ecuación de continuidad o conservación de la masa para un flujo incompresible, esta ecuación refleja la relación entre la velocidad y el área de la sección transversal en un flujo incompresible, asegurando que la cantidad de masa que entra y sale de un punto en el flujo sea siempre la misma (Andersson, 2012).

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\vec{v}_i) = 0 \quad (17)$$

2. Ecuación de momento es otra parte fundamental en la mecánica de fluidos, que se utiliza para describir cómo cambia el movimiento de un fluido en función de las fuerzas que actúan sobre él. La ecuación de momento es esencial para analizar cómo las fuerzas afectan el movimiento de un fluido y es fundamental para comprender el comportamiento de los fluidos en diversos contextos (ANSYS Inc., 2021).

$$\frac{\partial(\rho_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} [\eta (\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i})] + \rho F_i \quad (18)$$

dónde v_i (ó v_j) corresponde al componente del vector velocidad del fluido cuya dirección, en un plano cartesiano, está determinada por las coordenadas x , y , z .

En la ecuación anterior los dos términos del lado izquierdo representan aceleración local y convectiva de una partícula de fluido, respectivamente. Los términos en el lado derecho son el gradiente de presión (fuerzas de presión), la divergencia del tensor de esfuerzos viscosos (o fuerzas viscosas), responsables de la difusión del momento. Finalmente, F_i , representa las fuerzas externas volumétricas que se ejercen sobre el sistema, como las fuerzas de gravedad, centrífuga, electromagnetismos, etc. La ecuación puede

modificarse para tomar en cuenta que el sistema es estacionario o transitorio, la reología del fluido y si el sistema es cerrado o abierto.

Ahora suponiendo que se tiene más de una fase en nuestro sistema, se volvería un estudio de flujos multifásicos, se emplean varios parámetros adimensionales para caracterizar y comprender estos sistemas complejos. La fracción de volumen es uno de los parámetros más importantes. Esta define la proporción del volumen total que está ocupado por cada una de las fases presentes. En particular, la fracción volumétrica de la fase dispersa mide el volumen que ocupan las partículas o burbujas en relación con el volumen total de la mezcla en una unidad de volumen(ANSYS Inc., 2021).

$$\alpha_d = \frac{\sum_{i=1}^{N_d} V^i}{V} \quad (19)$$

Donde V^i es el volumen ocupado por la partícula o gota i y N_d es la cantidad total de partículas o gotas presentes en el volumen V . Además, el tamaño característico de la fase dispersa se establece mediante este cálculo. Estos conceptos son relevantes para entender cómo se distribuyen las partículas o gotas en un flujo multifásico y cómo se relacionan con el volumen total y la cantidad de partículas presentes. El tamaño característico de la fase dispersa está dado por:

$$D_{d,i} = \frac{6(V^i)^{1/3}}{\pi} \quad (20)$$

la suposición de que las partículas tienen una forma esférica puede ser una aproximación adecuada en algunos casos, pero no en todos. Para ciertos tipos de partículas, como fibras o gotas deformadas, esta simplificación no es precisa. En tales situaciones, es fundamental considerar la geometría real de las partículas para lograr una caracterización más exacta del flujo multifásico y su comportamiento.

La forma y la deformación de las partículas influyen significativamente en su interacción con el flujo y entre sí. Estas variaciones geométricas pueden afectar la dinámica del sistema, modificando parámetros como la distribución de velocidades, la transferencia de masa y los coeficientes de arrastre. Por ello, en el análisis y modelado de flujos multifásicos, es esencial incorporar modelos que representen de manera más realista la morfología de las partículas involucradas. La fracción de volumen de la fase continua se describe como:

$$\alpha_f = 1 - \alpha_d \quad (21)$$

la densidad total de la mezcla se calcula sumando las densidades de la fase dispersa y la fase continua.

Para comprender mejor los sistemas multifásicos, se emplean modelos de aproximación. En este caso, se utilizará el modelo Euler-Euler y Euler-Euler (granular), el cual trata las fases como continuas y resuelve las ecuaciones de momento y continuidad por separado

para cada una. Este enfoque permite manejar flujos complejos que involucran múltiples fases, como sólidos suspendidos en líquidos o gases.

El desarrollo del modelo de dos fluidos se basa en un promedio conjunto o un promedio volumétrico de las ecuaciones relevantes. Un concepto clave en este modelo es la fracción de volumen, denotada como α_k , que representa la proporción del volumen ocupado por una fase específica.

La fracción de volumen indica el espacio que ocupa cada fase dentro del sistema. La derivación de las ecuaciones de conservación puede realizarse mediante el promedio conjunto del equilibrio instantáneo local para cada fase o a través del enfoque de la teoría de la mezcla (ANSYS Inc., 2021).

La fase de volumen q , V_q es definido por:

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (22)$$

donde:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (23)$$

la densidad efectiva para la fase q es:

$$\hat{\rho}_q = \alpha_q \rho_q \quad (24)$$

donde ρ_q es la densidad física para la fase q .

Así mismo se resuelven las ecuaciones de conservación de la masa y momento para la fase q , las cuales son respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (25)$$

donde $\vec{v}_q$ es la velocidad de la fase q , $\dot{m}_{pq}$ es la transferencia de masa para la fase q desde p^{th} a q^{th} , $\dot{m}_{qp}$ caracteriza la transferencia de masa desde la fase q a la fase p .

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) \\
= -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} \\
+ \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}^{\rightarrow\rightarrow\rightarrow}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{vm,q})
\end{aligned} \tag{26}$$

donde $\bar{\bar{\tau}}_q$ es el tensor de esfuerzos de cada fase:

$$\bar{\bar{\tau}}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left(\lambda_q - \frac{3}{2} \mu_q \right) \nabla \cdot \vec{v}_q \mathbf{I} \tag{27}$$

μ_q y λ_q son la viscosidad debido al esfuerzo cortante y la viscosidad aparente de cada fase, F_q es una fuerza externa, $F_{lift,q}$ es una fuerza de empuje hacia arriba o fuerza de elevación, $F_{vm,q}$ es una fuerza virtual, $R^{\rightarrow\rightarrow}_{pq}$ es una fuerza entre las fases y p es la presión compartida por todas las fases, $v_{\rightarrow pq}$ es la velocidad de la interfase. Si $\dot{m}_{pq} > 0$ (la masa de la fase p se transfiere a la fase q) La interacción de las fases puede describirse como una interacción entre ellas que es descrita mediante una fuerza ($\vec{R}_{pq}$) que depende de la fricción, presión cohesión y otros efectos, y son sujetas a las condiciones de $R^{\rightarrow\rightarrow}_{pq} = -R^{\rightarrow\rightarrow}_{qp}$ y $R^{\rightarrow\rightarrow}_{qq} = 0$. Usando la simple interacción de la fuerza de la interfase se puede escribir como:

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n k_{pq} (\vec{v}^{\rightarrow\rightarrow}_{\vec{p}} - \vec{v}^{\rightarrow\rightarrow}_{\vec{p} \rightarrow}) \tag{28}$$

donde $k_{pq} = k_{qp}$ es el coeficiente de intercambio de momento de interfase.

En flujos multifásicos, se puede considerar el efecto de las fuerzas de elevación sobre las partículas de la fase secundaria, como gotas o burbujas. Estas fuerzas de sustentación actúan sobre las partículas debido a los gradientes de velocidad en el campo de flujo de la fase primaria.

La magnitud de la fuerza de sustentación es más significativa en partículas de mayor tamaño. Sin embargo, su inclusión no es apropiada para partículas muy compactas o demasiado pequeñas, ya que su efecto es mínimo en estos casos. La fuerza de sustentación actúa para la fase secundaria p en la fase primaria q y viene dada por:

$$\vec{F}_{lift} = -0.5\rho_p\alpha_p(\vec{v}_{\vec{q}} - \vec{v}_{\vec{p}}) \times (\nabla \times \vec{v}_{\vec{q}}) \quad (29)$$

para flujos multifásicos, se incluye el efecto de masa virtual que ocurre cuando una fase secundaria p acelera en relación con la fase primaria q . La inercia de la masa de la fase primaria encontrada por las partículas en aceleración (o gotas o burbujas) ejerce una fuerza de masa virtual sobre las partículas.

$$\vec{F}_{vm} = 0.5\alpha_p\rho_q\left(\frac{d\vec{v}_q}{dt} - \frac{d\vec{v}_p}{dt}\right) \quad (30)$$

También se resuelve la ecuación de energía para cada fase la cual se describe:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q\rho_q h_q) + \nabla \cdot (\alpha_q\rho_q \vec{u}_q \vec{h}_q) \\ = -\alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \tau_{\vec{q}} \cdot \nabla \vec{u}_{\vec{q}} - \nabla \cdot \vec{q}_{\vec{q}} + S_q \\ + \sum_{p=1}^n (Q_{pq} + \dot{m}_{pq}h_{pq} - \dot{m}_{qp}h_{qp}) \end{aligned} \quad (31)$$

donde h_q es la entalpia especifica de la fase q^{th} , $\vec{q}_{\vec{q}}$ es el flux de calor, S_q es un término fuente que incluye fuentes de entalpía (en caso de que hubiera reacción química o radiación).

Para simular el coeficiente de arrastre, se utiliza un modelo Morsi-Alexander ya que es el más completo porque ajusta la definición de función a los rangos del número del Reynolds, donde se definen de nuevo K_{pq}

$$K_{pq} = \frac{\alpha_q\alpha_p\rho_p f}{\tau_p} \quad (32)$$

$$\tau_{pq} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_q} \quad (33)$$

$$f = \frac{C_D R_e}{24} \quad (34)$$

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{R_e} + \frac{a_3}{R_e^2} \quad (35)$$

donde a_1 , a_2 y a_3 se definen dependiendo del número de Re .

$$a_1, a_2, a_3 = \left(\begin{array}{ll} 0, 25, 0 & 0 < Re < 0.1 \\ 3.690, 22.73, 0.0903 & 0.1 < Re < 1 \\ 1.222, 29.1667, -3.8889 & 1 < Re < 10 \\ 0.6167, 46.50, -116.67 & 10 < Re < 100 \\ 0.3644, 98.33, -2778 & 100 < Re < 1000 \\ 0.357, 148.62, -47500 & 1000 < Re < 5000 \\ 0.46, -490.546, 578700 & 5000 < Re < 10000 \\ \{0.5191, -1662.5, 5416700 & Re \geq 10000 \end{array} \right) \quad (36)$$

Dado que se presentan diferentes números de Reynolds, es necesario considerar la turbulencia en el análisis del flujo. La turbulencia es un fenómeno caracterizado por movimientos caóticos e irregulares del fluido. En lugar de fluir de manera suave y ordenada, el fluido se vuelve agitado y presenta fluctuaciones intensas en su velocidad y dirección. (Andersson, 2012)

La turbulencia puede tener efectos tanto positivos como negativos. Por un lado, puede ser útil para mejorar la mezcla y transferencia de calor en sistemas como son los reactores químicos. Por otro lado, también puede aumentar la resistencia y las pérdidas de energía en sistemas de tuberías, generando ineficiencias en el transporte de fluidos (Martínez-de-Jesús, 2017).

En el flujo turbulento, ocurren variaciones en la velocidad promedio y en otras magnitudes. Para que un modelo de CFD pueda ofrecer resultados relevantes, es fundamental considerar estos efectos. Esto se logra mediante la inclusión de un modelo de turbulencia, el cual es una alternativa más económica que la realización de experimentos, ya que permite obtener datos más detallados que los disponibles en la práctica experimental.

Existen diversos modelos de turbulencia que difieren en la complejidad de su resolución y en su representación física. Algunos incluyen promedios temporales o estructuras específicas, mientras que otros se basan en aproximaciones estadísticas, análisis dimensional, datos experimentales o modelado. Los modelos existentes de turbulencia son:

- Los modelos completos de tensión de Reynolds (ASM, RSM o DSM) son capaces de modelar la anisotropía en el flujo al considerar las seis componentes del tensor de esfuerzos de Reynolds en su forma promediada en el tiempo.
- Un modelo de dos ecuaciones como el k- ϵ asume que la turbulencia es isotrópica.
- Las simulaciones de grandes escalas (LES) modelan las escalas de turbulencia anisotrópicas más grandes al seguir directamente su movimiento que varía en el tiempo.
- Las simulaciones numéricas directas (DNS) resuelven el campo de flujo en cada instante en el tiempo, almacenando registros tridimensionales completos de la

velocidad fluctuante mediante la forma instantánea de las ecuaciones de Navier-Stokes.

Mientras más precisa sea la solución proporcionada por el modelo de turbulencia, mayor será el tiempo de cómputo y el costo de procesamiento asociado. Para simplificar el modelado, Reynolds propuso una formulación promediada en el tiempo de las ecuaciones de Navier-Stokes. Estas ecuaciones, conocidas como ecuaciones promediadas de Reynolds (RANS), describen el flujo mediante cantidades promediadas en el tiempo en lugar de valores instantáneos dependientes del tiempo (Tamburini et al., 2021).

Nos basaremos en el modelo **k-ε**, el cual forma parte de una familia de modelos de dos ecuaciones que resuelven dos ecuaciones de transporte adicionales para calcular los esfuerzos de Reynolds. Es un modelo robusto y estable computacionalmente, incluso en presencia de fenómenos físicos complejos. Su aplicabilidad abarca una amplia variedad de flujos turbulentos y ha sido fundamental en la comunidad de modelado de fluidos durante muchos años (Nienow, 1997).

El modelo **k-ε** se basa en gran medida en observaciones empíricas de flujos con números de Reynolds elevados. Las dos ecuaciones de transporte que requiere este modelo corresponden a la energía cinética de la turbulencia (**k**) y la tasa de disipación de la turbulencia (**ε**). En el caso de flujos multifásicos, se asume que tanto la fase continua como la fase dispersa comparten la misma energía cinética turbulenta (**k**) y la misma tasa de disipación de energía turbulenta (**ε**), lo cual se expresa matemáticamente en la ecuación 37.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{pq} \rho_{pq} k) + \nabla^{\rightarrow} \cdot [\alpha_{pq} \rho_{pq} \vec{U}_{pq} k - \alpha_{pq} (\mu_{pq} + \frac{\mu_{tpq}}{\sigma_k}) \nabla^{\rightarrow} k] & \quad (37) \\
 = \alpha_{pq} (\mu_{tpq} \nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq} (\nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq} + (\nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq})^T)) & \\
 - \rho_{pq} \epsilon) \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_{pq} \rho_{pq} \epsilon) & \\
 + \nabla^{\rightarrow} \cdot [\alpha_{pq} \rho_{pq} \epsilon - \alpha_{pq} (\mu_{pq} + \frac{\mu_{tpq}}{\sigma_\epsilon}) \nabla^{\rightarrow} \epsilon] & \\
 = \alpha_{pq} (C1_k \bar{\mu}_{pq} \nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq} (\nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq} + (\nabla^{\rightarrow} \cdot \vec{U}_{pq})^T) - C2 \rho_{pq} \frac{\epsilon^2}{k}) &
 \end{aligned}$$

donde:

$$\mu_{pq} = \rho_{pq} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (38)$$

Para obtener resultados precisos, es crucial realizar simulaciones en 3D del sistema que se desea analizar. Hay varios métodos de solución disponibles para incorporar el

movimiento del impulsor, y la malla computacional utilizada debe adaptarse al método de solución empleado (Yeoh & Tu, 2009).

2.11 Aspectos de discretización por el método de diferencias finitas.

Sabemos que el método de diferencias finitas se basa en una aproximación de ecuaciones diferenciales, esto implica que tendremos aproximaciones para nuestras primeras derivadas y segundas derivadas.

Consideremos las ecuaciones gobernantes ((17) notamos que al expandir estas ecuaciones tendremos derivadas parciales, entonces suponiendo un punto de nuestro sistema para representar las derivadas parciales en las ecuaciones fundamentales es la expansión en series de Taylor. Refiriéndonos a la **Figura 9**, si en los índices (i, j), en el punto P, existe una propiedad genérica del campo de flujo $\vec{v}_q$, entonces la variable en el punto (i + 1, j) puede ser expresada mediante una serie de Taylor expandida alrededor del punto (i, j).

$$\vec{v}_{i+1,j} = \vec{v}_{i,j} + \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{2} + \left(\frac{\partial^3 \vec{v}}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^3}{6} + \dots \quad (39)$$

Similar, con la misma variable en el punto (i-1, j) se puede expresar en términos de una serie de Taylor con los puntos (i, j) como:

$$\vec{v}_{i-1,j} = \vec{v}_{i,j} - \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial x^2}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^2}{2} - \left(\frac{\partial^3 \vec{v}}{\partial x^3}\right)_{i,j} \frac{\Delta x^3}{6} + \dots \quad (40)$$

al restar las dos ecuaciones anteriores, obtenemos la aproximación de diferencia central para la derivada de primer orden de $\vec{v}$:

$$\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial x}\right) = \frac{\vec{v}_{i+1,j} - \vec{v}_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (41)$$

donde el termino $O(\Delta x^2)$ significa un error de truncamiento de la aproximación de diferencia finita y determina la tasa en que disminuye el error a medida que se reduce el espaciado entre los puntos. La ecuación (39) se considera precisa de segundo orden porque el error de truncamiento es de orden 2. Obviamente, cuanto menor sea el espaciado de la malla Δx , mejor será el error. Igualmente es posible formar otras expresiones para la derivada de primer orden hacia adelante, y derivada de primer orden hacia atrás, que obtenemos las ecuaciones (42)(43).

$$\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial x}\right) = \frac{\vec{v}_{i+1,j} - \vec{v}_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (42)$$

$$\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial x}\right) = \frac{\vec{v}_{i,j} - \vec{v}_{i-1,j}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (43)$$

La derivada parcial de segundo orden también puede obtenerse mediante la expansión en series de Taylor, similar a la aproximación de la derivada parcial de primer orden. Al sumar las ecuaciones (42 y (43), obtenemos:

$$\left(\frac{\partial^2 \vec{v}}{\partial x^2}\right) = \frac{\vec{v}_{i+1,j} - 2\vec{v}_{i,j} + \vec{v}_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2) \quad (44)$$

2.12 El método de volumen finito

Desarrolla la integración de las ecuaciones de transporte para cada una de las celdas computacionales (volúmenes de control) del dominio computacional, con una ecuación que satisfaga la ley de conservación de cada volumen de control para el transporte de una cantidad escalar ϕ , la cual es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (45)$$

donde ρ y $\mathbf{u}$ representan la densidad y el vector de velocidad, respectivamente, Γ_ϕ el coeficiente de difusión para ϕ y S_ϕ es un termino fuente para ϕ por unidad de volumen.

La integral del volumen de control arbitrario V_c , es la clave para el método del volumen finito, y se expresa de la siguiente manera:

$$\int_{V_c} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV_c + \int_{V_c} \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) dV_c = \int_{V_c} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dV_c + \int_{V_c} S_\phi dV_c \quad (46)$$

considerando en estado estacionario, la acumulación es cero y por lo tanto la ecuación anterior se escribe como:

$$\int_{V_c} \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u}) dV_c = \int_{V_c} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dV_c + \int_{V_c} S_\phi dV_c \quad (47)$$

la primera integral de lado izquierdo de la ecuación representa la convección, y la primera integral de lado derecho representa la difusión. Estos términos pueden reescribirse como integrales sobre la superficie delimitada por el volumen de control utilizando el teorema de la divergencia de Gauss. Para el vector $\mathbf{a}$, el teorema dice que:

(48)

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \mathbf{a} dV_c = \oint_{S_c} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S}_c$$

donde S_c denota la superficie de control, las caras que rodean el volumen de control y $d\mathbf{S}_c = \mathbf{n} dS_c$, siendo $\mathbf{n}$ un vector normal a la superficie $d\mathbf{S}_c$. Aplicando el teorema de Gauss obtenemos:

(49)

$$\oint_{S_c} (\rho \phi \mathbf{u}) \cdot d\mathbf{S}_c = \oint_{S_c} (\Gamma_\phi \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S}_c + \int_{V_c} S_\phi dV_c$$

la ecuación anterior se aplica para cada volumen de control del dominio computacional. La discretización de esta ecuación en una celda determinada se tiene como resultado:

(50)

$$\sum_{f=1}^{N_f} (\rho_f \phi_f \mathbf{u}_f) \cdot \mathbf{S}_f = \sum_{f=1}^{N_f} (\Gamma_\phi \nabla \phi_f) \cdot \mathbf{S}_f + S_\phi V_c$$

donde:

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

$\rho_f \phi_f S_f$ = flujo masico que atraviesa la cara f .

S_f = área de la cara de f

ϕ_f = valor de ϕ que atraviesa la cara f .

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

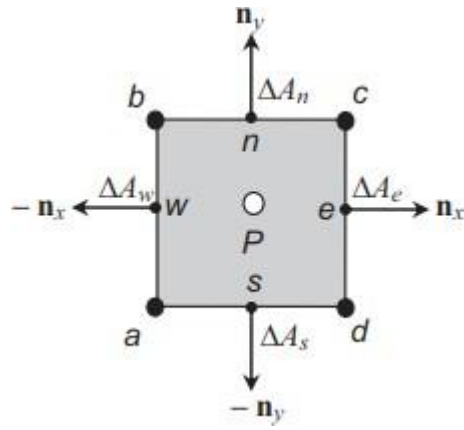
V_c = volumen de la celda

Esta ecuación se formula para todas las celdas dentro del dominio, siendo válida tanto para problemas con geometrías en 2D como en 3D, donde los dominios pueden estar compuestos por elementos rectangulares (mallas estructuradas) o poliedros de formas irregulares (mallas no estructuradas), ("ANSYS FLUENT UDF Manual," 2011) .

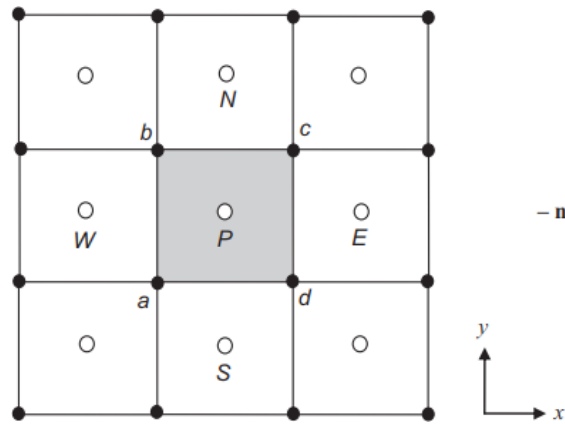
Para determinar el valor de ϕ_f , se utiliza un esquema numérico. Para simplificar el caso, se empleará la dirección x , sin término fuente y en estado estacionario. Se considera el dominio unidimensional mostrado en la **Figura 10-a**, donde los límites de integración de P van de w a e , obteniendo la siguiente ecuación:

(51)

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



a)



b)

Figura 10 . a) Dominio en 1D y (b) Dominio 2D.

podemos plantear una forma de calcular ϕ_e y ϕ_w , los valores de ϕ en los límites, basándonos en los valores de ϕ en el centro de las celdas adyacentes, ϕ_E y ϕ_P .

$$\phi_w = \frac{\phi_w + \phi_P}{2} \quad (52)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (53)$$

Igualmente, los gradientes pueden aproximarse por:

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_w = \frac{\phi_P + \phi_w}{x_P - x_w} \quad (54)$$

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{x_E - x_P} \quad (55)$$

sustituyendo ambas ecuaciones anteriores, obtenemos:

$$[(pv_x \frac{\phi_P + \phi_E}{2}) - (pv_x \frac{\phi_W + \phi_P}{2})] = [(\Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{X_E - x_P}) - (\Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{X_P - x_W})] \quad (56)$$

los términos de la ecuación anterior pueden reordenarse para obtener:

$$\begin{aligned} & (\frac{\Gamma}{X_E - x_P} + \frac{\Gamma}{X_P - x_W}) \phi_P + (\frac{pv_x}{2} - \frac{\Gamma}{X_E - x_P}) \phi_E \\ & + (-\frac{pv_x}{2} - \frac{\Gamma}{X_P - x_W}) \phi_W = 0 \end{aligned} \quad (57)$$

por lo cual se definen los siguientes términos:

$$a_E = (-\frac{pv_x}{2} + \frac{\Gamma}{X_E - x_P}) \quad (58)$$

$$a_W = (\frac{pv_x}{2} + \frac{\Gamma}{X_P - x_W}) \quad (59)$$

$$a_P = (\frac{\Gamma}{X_E - x_P} + \frac{\Gamma}{X_P - x_W}) \quad (60)$$

de la ecuación (57) resulta:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (61)$$

Esta ecuación se puede resolver haciendo iteraciones. Para obtener el valor de ϕ_1 , es necesario establecer una celda llamada ϕ_0 , que no existe en el dominio. Además, al iniciar la simulación, debemos suponer valores para cada ϕ_i . Una vez obtenido el valor para ϕ_1 , el próximo objetivo será ϕ_2 . Para calcular ϕ_2 , utilizaremos el valor obtenido de ϕ_1 y un valor supuesto para ϕ_3 . Este proceso se repite hasta que todos los ϕ_i sean calculados. Este método se conoce como algoritmo Gauss-Siedel. Sin embargo, presenta un inconveniente: dado que inicialmente ϕ_1 fue calculado suponiendo ϕ_0 y ϕ_2 , y luego ϕ_2 fue calculado, la ecuación original para ϕ_1 ya no es válida. Por lo tanto, debemos repetir el proceso muchas veces hasta que la variación de ϕ_i sea menor que un criterio de convergencia establecido (Andersson, 2012).

Para el dominio 2D de la **Figura 10-b)** resulta la ecuación:

$$a_P \phi_P = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W \quad (62)$$

y en tercera dimensión:

$$a_P \phi_P = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_B \phi_B + a_T \phi_T \quad (63)$$

2.13 Mallado

Como se ha mencionado, para resolver las ecuaciones que describen el flujo mediante el método del volumen finito, es necesario dividir el dominio en un número finito de celdas y/o volúmenes de control, operación conocida como mallado. Este paso es crucial, ya que la calidad de la malla influye directamente en la precisión y estabilidad de la simulación.

Como se detalló anteriormente, se requiere una malla estructurada o un mallado uniforme, lo que implica que la malla esté compuesta principalmente por formas geométricas regulares, como cuadriláteros en 2D y hexaedros en 3D. En la **Figura 11**, se ilustran dos tipos de mallas: en la parte superior, una malla no estructurada, mientras que en la parte inferior se muestra una malla estructurada, caracterizada por su organización ordenada y regularidad geométrica.

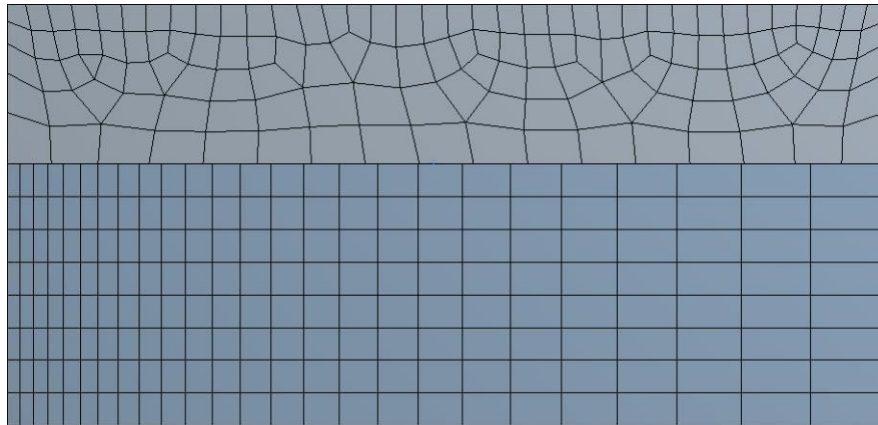


Figura 11 Ejemplo de malla uniforme no estructurada (malla inferior horizontal), uniforme estructurado (malla inferior vertical) y no estructurada (malla superior)

El uso de mallas estructuradas presenta varias ventajas, entre las cuales destaca el orden en la disposición de los elementos. Este orden facilita el acceso a las celdas vecinas durante los cálculos numéricos, ya que basta con sumar o restar un número al valor del índice correspondiente. Además, estas mallas pueden representarse en sistemas cartesianos o curvilíneos.

- En sistemas cartesianos, la forma de las celdas se mantiene regular y no sufre deformaciones.
- En sistemas curvilíneos, las celdas se deforman para adaptarse a la geometría del sistema estudiado.

Por otro lado, la principal ventaja de las mallas no estructuradas es su flexibilidad para adaptarse a geometrías complejas con múltiples curvaturas o formas irregulares. Los elementos triangulares en 2D o tetraédricos en 3D permiten una mejor conformación al dominio de estudio.

En términos de tiempo de generación y demanda computacional, existen diferencias clave entre ambos tipos de malla:

Mallas no estructuradas:

- Se generan rápidamente y requieren menos tiempo del investigador.
- Consumen más memoria computacional debido a su estructura irregular.

Mallas estructuradas:

- Requieren un mayor tiempo de preparación y modificaciones para mantener la uniformidad en la geometría del sistema.
- Consumen menos memoria computacional, ya que su organización facilita la optimización de cálculos.

Dado que la generación de la malla es una de las etapas más críticas y laboriosas en simulaciones CFD, se debe prestar especial atención a la calidad del mallado. Una malla de baja calidad puede ocasionar problemas de convergencia numérica y representar erróneamente la fenomenología del sistema. Por ello, es fundamental evaluar parámetros de calidad de la malla para garantizar una representación adecuada del flujo y una simulación estable.

Un parámetro de calidad de la malla utilizado comúnmente es la oblicuidad o **skewness**, el cual, se define de la siguiente manera(ANSYS Inc., 2021):

$$skewness = \left(\frac{\theta_{max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{min}}{\theta_e} \right) \quad (64)$$

dónde θ_{max} y θ_{min} corresponden al ángulo más grande y pequeño, que se forman entre los lados de una celda. θ_e toma el valor de 90° para elementos cuadriláteros o 60° si son triangulares (ANSYS Inc., 2021). En la **Figura 12** se resume la calidad de la malla en función de la oblicuidad.

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

Figura 12 Calidad de la malla con base a la oblicuidad

En regiones de la geometría donde el flujo presenta altos gradientes de velocidad o presión, es recomendable que la malla tenga una mayor densidad de elementos. Esto permite describir con mayor precisión el comportamiento del flujo en dichas zonas. En el resto del dominio, la malla puede ser menos densa para optimizar el uso de recursos computacionales.

La cantidad óptima de celdas en una malla se determina mediante un análisis de independencia de malla. Este análisis tiene dos objetivos principales: garantizar que la malla contenga el número suficiente de celdas para describir adecuadamente el flujo y evitar el uso excesivo de elementos, ya que un número elevado de celdas no siempre

mejora significativamente la precisión de los resultados, pero sí incrementa el costo computacional de manera drástica.

El proceso del análisis de independencia de malla consiste en generar diferentes mallas con un número creciente de elementos. Para cada una de ellas, se ejecuta la simulación y se obtienen los parámetros hidrodinámicos de interés. Posteriormente, los resultados de cada mallado se comparan entre sí. La malla óptima será aquella en la que los valores de los parámetros ya no presenten cambios significativos al aumentar la cantidad de celdas (Ramírez-Muñoz et al., 2016).

Finalmente, los datos numéricos obtenidos en la simulación deben validarse con datos experimentales para asegurar la precisión y fiabilidad del modelo computacional.

2.14 Esquemas de interpolación espacial.

Una vez que se obtuvieron los valores de las variables en los centros de las celdas computacionales, expresamos los datos de todas las caras en función de estos mismos valores. Si consideramos que la ecuación (45) representa una dirección, en estado estacionario y sin tener en cuenta el término fuente, obtenemos lo siguiente:

$$\frac{d}{dx}(\rho v_x \phi) = \frac{d}{dx}(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) \quad (65)$$

la cual puede resolverse definiendo un dominio lineal que se extiende de $x=0$ hasta $x=L$ y que corresponden a la localización de dos nodos de celdas adyacentes, con $\phi=\phi_0$ y $\phi=\phi_L$ en $x=L$ de forma que la solución para cualquier punto intermedio tiene la siguiente forma incluyendo las caras.

$$\phi = \phi_0 + (\phi_L - \phi_0) \frac{e^{(Pe(\frac{x}{L})-1)}}{e^{(Pe-1)}} \quad (66)$$

Donde pe es el número de péclét que representa la relación del efecto de la convección y el efecto de la difusión del término ϕ .

$$Pe = \frac{\rho v_x L}{\Gamma} \quad (67)$$

El uso de diferentes esquemas depende de los valores que se asignen a Pe (Oshinowo L. & Marshall E., 2001).

El esquema QUICK suele tener mayor precisión y estabilidad en mallas estructuradas alineadas con la dirección del flujo. Sin embargo, se permite el uso del esquema QUICK para mallas no estructuradas o híbridas; en tales casos se usará el habitual esquema de discretización de segundo orden Upwind en las superficies no hexaédricas (o no cuadriláteras, en 2D).

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

2.15 Esquema de rotación por múltiples marcos de referencia

La simulación de flujos alrededor de partes móviles, como los impulsores en tanques agitados mecánicamente, se realiza comúnmente mediante el uso de un marco de referencia rotatorio (RRF). Este enfoque transforma el sistema de coordenadas para que las zonas alrededor del impulsor parezcan rotativas, lo que simplifica el problema y reduce la complejidad del cálculo de las interacciones entre el fluido y el impulsor en movimiento.

Además, se define una región estacionaria, conocida como SRF, que abarca las zonas alejadas del impulsor. Al combinar estas dos técnicas, se obtiene un sistema de Marcos de Referencia Múltiple (MRF), cuyo propósito es transformar el movimiento transitorio de las partes móviles en un problema estacionario en algunas regiones. Esto es particularmente útil cuando la velocidad de rotación del impulsor es constante.

El enfoque MRF también se aplican a tanques agitados que contienen más de un impulsor, permitiendo así la simulación eficiente de sistemas con múltiples partes móviles.

El campo de flujo se determina resolviendo las ecuaciones de continuidad y de cantidad de movimiento formuladas en un sistema de coordenadas en rotación. En el resto del dominio, estas ecuaciones se resuelven en un marco de referencia inercial.

La simulación del flujo en tanques agitados mecánicamente con partes móviles, como impulsores, se lleva a cabo frecuentemente mediante la técnica de Marcos de Referencia Múltiple (MRF, por sus siglas en inglés). Este enfoque consiste en descomponer el dominio computacional en regiones con diferentes marcos de referencia: una región rotatoria, denominada marco de referencia rotatorio (RRF), que abarca el entorno inmediato del impulsor, y una región estacionaria o marco de referencia fijo (SRF), que comprende el resto del tanque. En la zona rotatoria, las ecuaciones de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento se reformulan en un sistema de coordenadas no inercial, incorporando términos adicionales que representan las fuerzas centrífugas y de Coriolis, permitiendo modelar el efecto de la rotación sin necesidad de utilizar mallas móviles. En contraste, en la región estacionaria las mismas ecuaciones se resuelven en un marco de referencia inercial, utilizando las velocidades absolutas del fluido. La técnica MRF transforma así un problema transitorio en uno cuasi-estacionario, lo que reduce significativamente los costos computacionales sin comprometer la precisión en configuraciones con velocidad de rotación constante. Además, este método es extensible a configuraciones más complejas que involucran múltiples impulsores u otros componentes móviles, facilitando una simulación eficiente de sistemas hidrodinámicamente acoplados (ANSYS Inc., 2021).

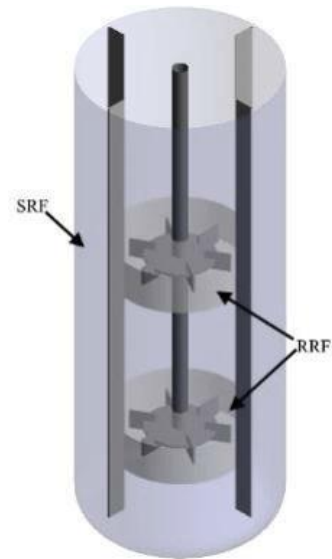


Figura 13 Representación del modelo de múltiples referencias (Martínez-de-Jesús, 2017)

Metodología

El software utilizado para realizar todas las simulaciones fue ANSYS 2022-R2 en su versión estudiantil, el equipo utilizado contó con un procesador 13th Gen Intel(R) Core(TM) i5-13420H a 2.10 GHz, con 8.00 GB de memoria RAM DDR5.

3.1 Comparación de modelos multifásicos (E-L y E-E)

Como fu mencionado, existen varios modelos multifásicos, no obstante, las estrategias de simulación en CFD para describir los sistemas multifásicos son un tópico que se encuentra en desarrollo (Ananda J. & Mostafa, 2022), es decir no hay metodología general reportada en la literatura para implementarse en los estudios CFD de sistemas multifásicos. En este trabajo como primera estrategia, se llevó a cabo un estudio comparativo de los modelos E-L y E-E (granular) para estimar la potencia inyectada y comparar el campo de velocidades de ambos modelos. Resultados, experimentales y de simulación CFD, del enfoque E-L fueron los reportados por Ananda J. & Mostafa, (2022), donde se utilizó como fase continua agua a temperatura 23°C, mientras que, como fase dispersa se definió un material con una densidad de 2485 kg/m³, con un diámetro de 0.001 m. La intención de esta parte del trabajo fue comparar la estrategia de simulación que se utilizara en el estudio con datos de simulación y experimentales reportados en la literatura.

La **Figura 14** describe la geometría del impulsor empleada por Ananda J. & Mostafa, (2022). La cual fue replicada para este estudio y simulada utilizando el enfoque E-E (granular). Primeramente, para generar resultados numéricos consistentes se ejecutó un estudio de análisis de independencia de malla, el cual esencialmente consiste en incrementar el número de elementos del dominio hasta que no existan diferencias significativas en los valores de parámetros analizados. A continuación, se presentan la geometría del impulsor y la malla utilizada en esta parte del estudio, ver **Figura 15** y **Figura 16**, respectivamente.

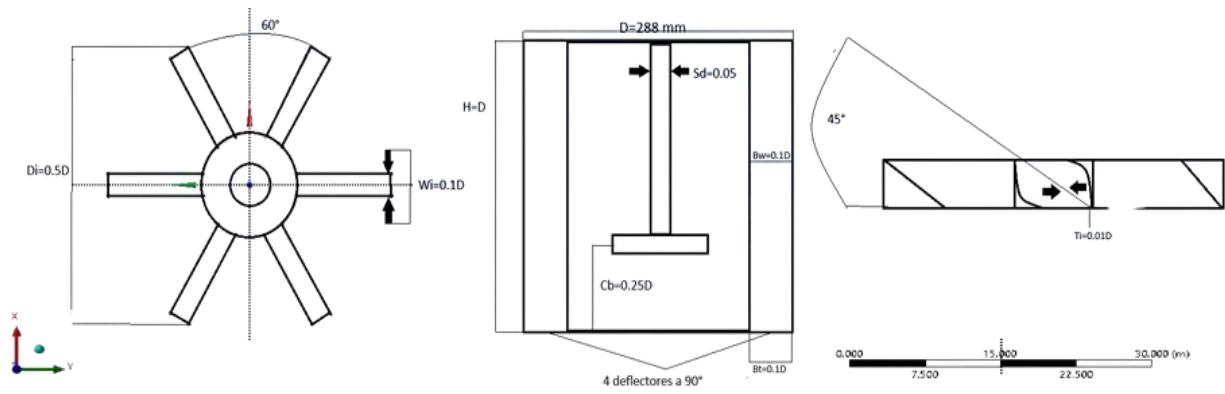


Figura 14 Geometría del tanque e impulsor

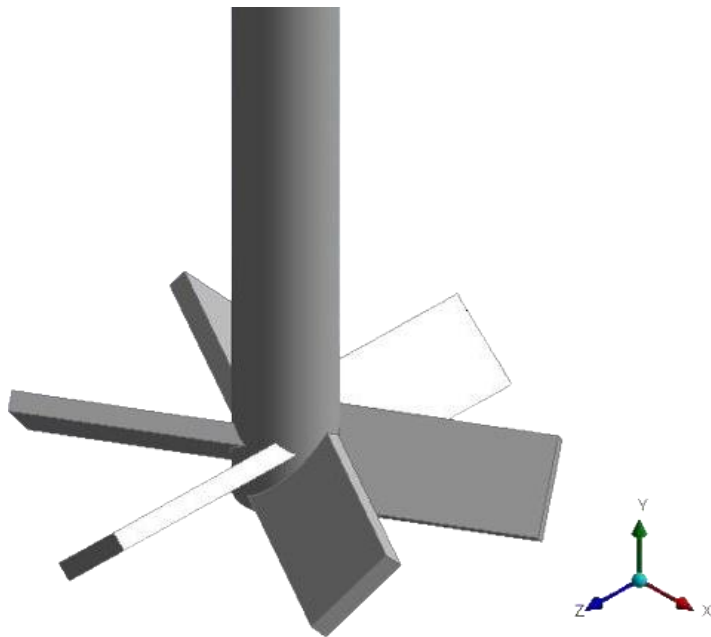


Figura 15 Geometría del impulsor

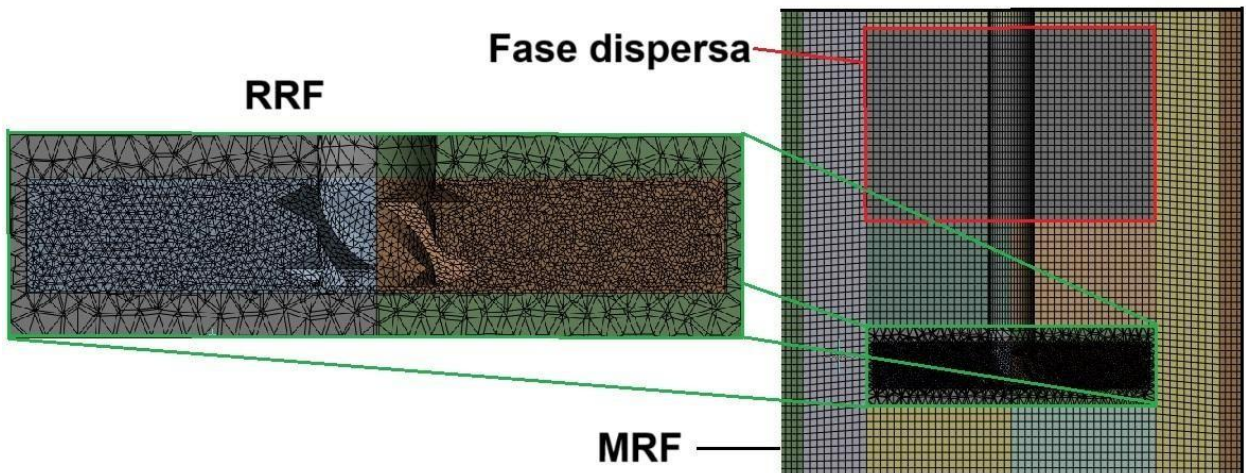


Figura 16 Mallado del reactor

La **figura 17** resume los pasos de la implementación de una simulación CFD.

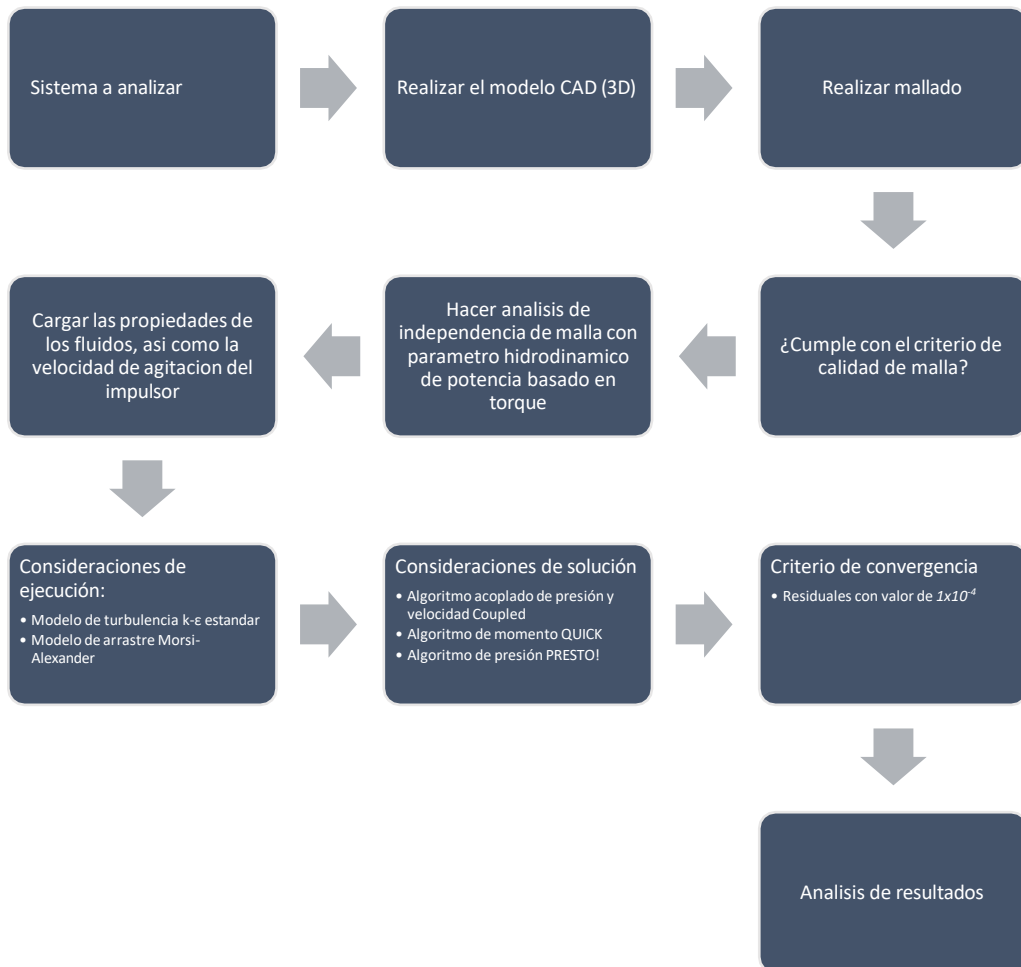


Figura 17 Diagrama de flujo del desarrollo del estudio CFD.

3.2 Simulación E-E con turbina Rushton

En la siguiente fase del estudio se evaluó la hidrodinámica del impulsor Rushton. Se utilizaron dos enfoques de simulación. En el primero, el sistema de agitación estuvo compuesto por agua como fase continua y como fase dispersa se utilizaron perlas de poliacrilamida de diámetro 0.00146 m, con una concentración del 5% en masa, en estas simulaciones se utilizó el enfoque E-E-granular. En el segundo se empleó agua como fase continua y hexano como fase dispersa y las simulaciones fueron ejecutadas con el enfoque E-E.

Se utilizó un sistema de mezclado a escala de laboratorio, compuesto por un tanque de vidrio enchaquetado sin deflectores y con fondo plano. Las relaciones geométricas del tanque e impulsor experimental se presentan en la **Figura 18-a**. Se diseñó un modelo CAD de este sistema para replicar con precisión la geometría experimental.

Con el objetivo de analizar la región de fluido cercana al impulsor, se delimitaron volúmenes en una región cercana al impulsor, donde se esperan las mayores tasas de corte. Se definieron 6 volúmenes. El primero corresponde al volumen barrido por las paletas del impulsor (ZB). A partir de este, se establecieron cinco volúmenes concéntricos adicionales, denominados V1 a V5. Más allá de V5, no se segmentó la malla computacional y el volumen de líquido restante se denominó fluido restante. La segmentación de la malla se muestra en la **Figura 18-b**.

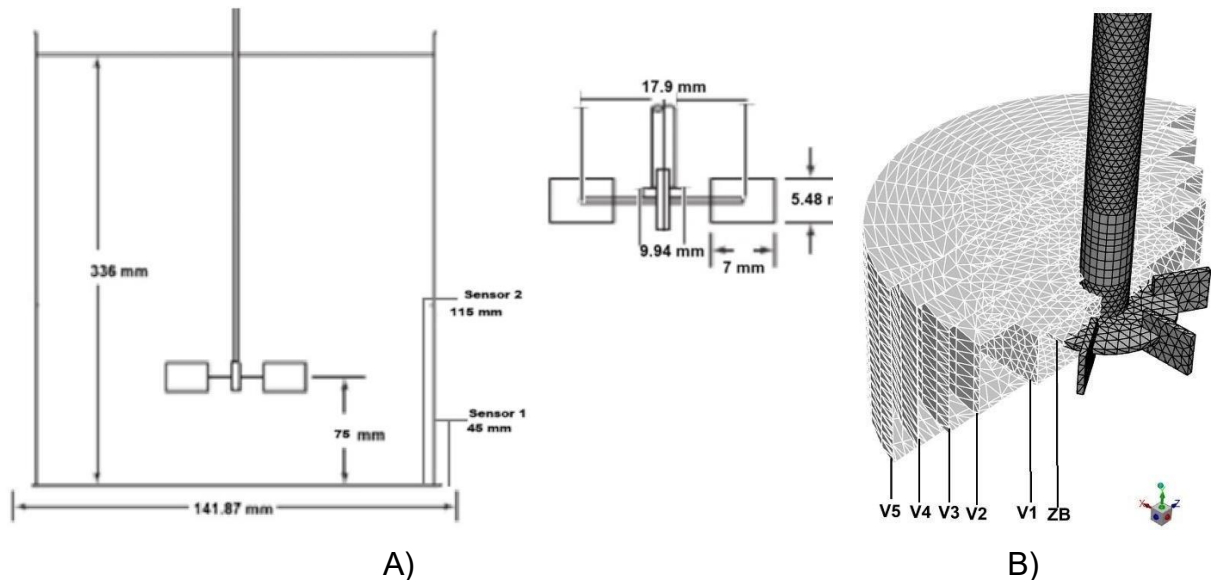


Figura 18. A) Geometría del reactor, b) Volúmenes cercanos al impulsor.

En todas las simulaciones, para modelar la turbulencia, se empleó el modelo estándar $k-\epsilon$. Para el enfoque E-E-granular se utilizó el modelo de viscosidad granular Syamlal-O'Brien en conjunto con el modelo de fuerza de arrastre Wen-Yu. Como método de solución, se utilizó un algoritmo acoplado de presión-velocidad. Para la discretización, se

aplicó el esquema QUICK para los términos de velocidad y el esquema PRESTO para la presión.

Cuando se utilizó el enfoque Euleriano-Euleriano se emplearon los parámetros implícitos para las fracciones de volumen, acoplado con un coeficiente de arrastre de Schiller-Naumann y un coeficiente de tensión superficial de 0.0655 N/m. Para evaluar la evolución de la temperatura se utilizó el coeficiente de transferencia de calor del modelo Ranz-Marshall ANSYS Inc. (2021).

3.1 Validación de simulación

Con el objetivo de simular nuestra simulación (Euleriano-Euleriano granular), se optó por realizarlo por medio de tiempos de mezclado.

3.2 Equipo para el seguimiento de la evolución de la temperatura

Se utilizó el reactor descrito en la figura 18 en el cual se incorporaron dos sensores de temperatura (Termopar Max6675) acoplados a un microcontrolador Arduino uno. Los sensores se colocaron a 2 diferentes alturas. El fluido de trabajo primario (fase primaria) fue glicerina a diferentes temperaturas (11, 7 y 4 °C), mantenidas con agua fría circulando por la chaqueta del reactor. La viscosidad de este fluido fue determinada con un reómetro Anton Paar MCR-72 a las temperaturas señaladas; las viscosidades fueron 2147, 2510 y 3014 mPa·s. Mientras que las densidades fueron obtenidas utilizando una probeta de 10 ml y una balanza analítica y se obtuvieron los siguientes valores 1.263, 1.266 y 1.268 g/cm³. El pulso de fluido caliente (fase secundaria) hexano a 50°C con una concentración de 5% en masa, fue agregado de manera por la parte superior del reactor, fue agregado lo más rápido posible vertiéndolo por las paredes del reactor. Se llevaron a cabo tres experimentaciones a diferentes velocidades de agitación: 180, 240 y 300 RPM.

Las imágenes que se generaron fueron con obtenidas con una cámara con las siguientes características: video en cámara lenta de 4K a 240 cps, grabación de video en formato HEVC. Respecto a la simulación se utilizaron dichas propiedades físicas obtenidas experimentalmente. Las simulaciones se realizaron en estado transitorio con un tamaño de paso de 0.001 s hasta alcanzar los 10 segundos

Finalmente, para reproducir experimentalmente la mezcla de fases que pueden generarse mediante el enfoque de simulación E-E. Los fluidos de trabajo fueron: agua a 25°C como fase primaria. Para la fase secundaria se utilizó hexano a 50 °C el cual fue coloreado con Rojo Sudan III. Esta fase secundaria fue agregada para que representara una concentración de 5% en masa. La agitación se llevó a cabo a 360, 480 y 540 RPM, Entonces en esta fase del estudio se obtuvieron las visualizaciones de las fases y la evolución de la temperatura en el tanque. En las simulaciones se utilizaron los mismos modelos para coeficiente de arrastre, coeficiente de transferencia de calor y turbulencia k-ε estándar, y el coeficiente de tensión superficial por 0.050 N/m. Las simulaciones se

realizaron en estado transitorio con un tamaño de paso de 0.001 s hasta alcanzar los 20 segundos.

Resultados

4.1 Comparación de modelos E-L vs E-E-granular

Con la finalidad de validar la estrategia de simulación con el enfoque E-E-granular, se compararon los valores de potencia inyectada reportados por Ananda J. y Mostafa (2022) con los obtenidos en el presente estudio. Este análisis permitió evaluar el desempeño hidrodinámico de ambos modelos multifásicos y determinar si existen diferencias significativas de un parámetro hidrodinámico entre ellos. Los resultados de este análisis pueden observarse en la siguiente figura.

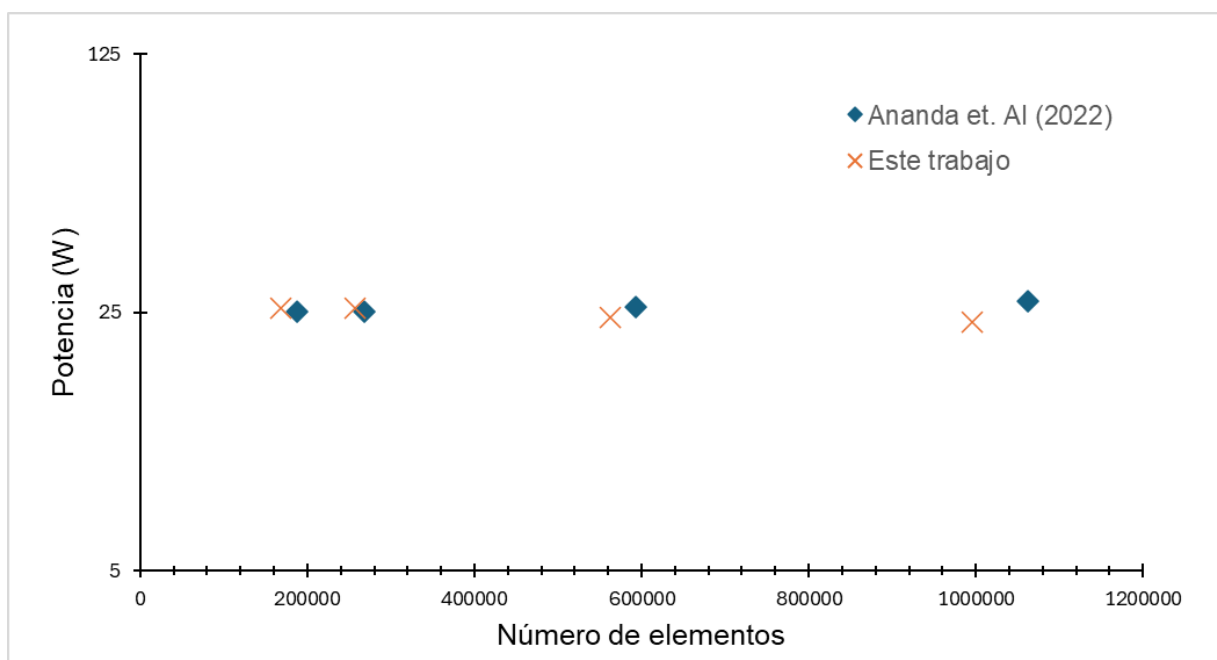


Figura 19 Grafica de número de elementos vs potencia (literatura vs este trabajo)

Al comparar numéricamente el consumo de potencia obtenido en este esquema de simulación con los resultados reportados por Ananda J. y Mostafa (2022), se obtuvo un error relativo del 1.55%. Este bajo margen de error sugiere una buena concordancia entre ambos modelos en términos de la potencia calculada. Con base en esta validación inicial, se procedió a realizar comparaciones numéricas adicionales con el fin de evaluar con mayor profundidad el desempeño de los modelos multifásicos.

A continuación, en la **Figura 20** se muestran contornos de velocidad normalizada (u/u_{tip}) de la fase líquida, mostrada de color rojo, y la fase sólida de color azul, este mapa de contorno muestra donde existe mayor fluencia de velocidad.

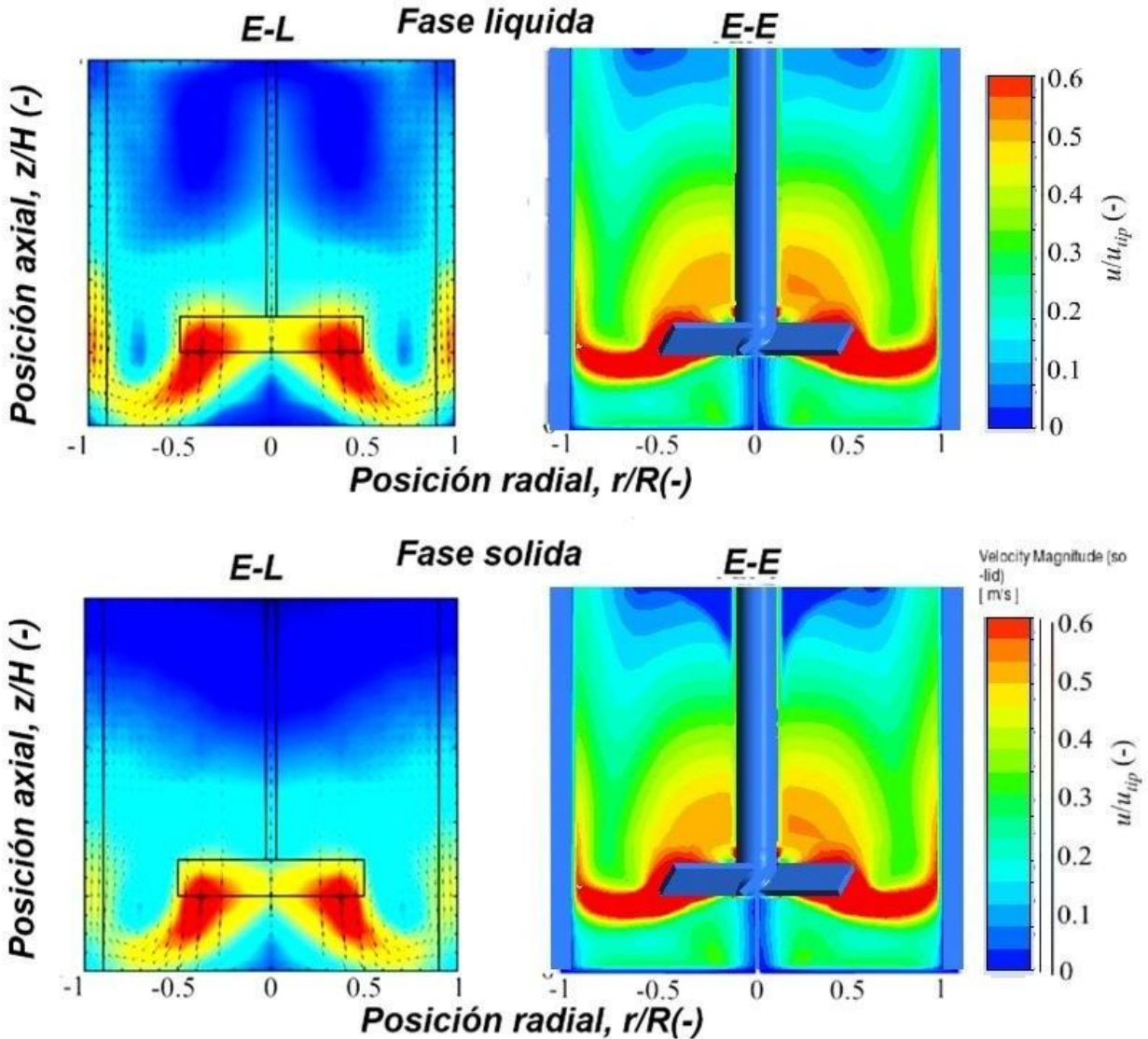


Figura 20 Contornos de velocidad de la fase liquida y la fase solida normalizados u/u_{tip}

El impulsor PB6 fue diseñado para generar una mezcla efectiva dentro del reactor. Se utilizó la velocidad de las fases líquida y sólida normalizada respecto a la velocidad en la punta del impulsor. En las alturas $0.083H$ y $0.33H$, se registran las velocidades más bajas, lo cual es característico de la zona cercana al fondo del reactor, donde la energía del flujo inducida por el impulsor se disipa. Se observa un incremento notable en la velocidad a alturas como $0.17H$, lo que indica que el flujo generado por el impulsor es más intenso en esta región, posiblemente debido al arrastre de partículas hacia arriba.

La simetría observada en las gráficas sugiere que el flujo generado por el impulsor es relativamente equilibrado. Sin embargo, las variaciones en la magnitud de la velocidad entre las diferentes alturas reflejan que la distribución de partículas y el patrón de flujo no son completamente uniformes en todo el reactor.

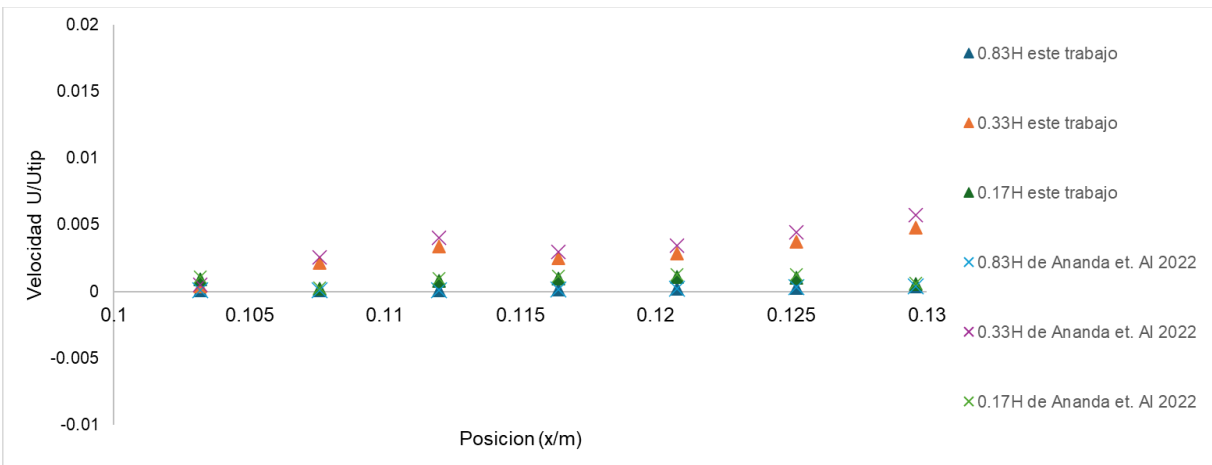


Figura 21 Distribución de velocidad a través de diferentes alturas.

El mapa de Poincaré es una herramienta eficiente para analizar sistemas en un reactor de agitación, permitiendo estudiar la complejidad y estabilidad del flujo. Su utilidad radica en la capacidad de visualizar cómo las partículas o fases se distribuyen y mezclan dentro del reactor. Un mapa con puntos bien distribuidos sugiere una buena mezcla, mientras que la presencia de agrupaciones de puntos puede indicar zonas de recirculación o mal mezclado. Además, estos mapas permiten predecir comportamientos periódicos o caóticos, detectar zonas muertas y optimizar el diseño del reactor.

Se obtuvo un mapa de Poincaré en planos horizontales a alturas de 0.29H y 0.03H. En este mapa, los puntos se distribuyen principalmente en patrones circulares concéntricos, con ciertas variaciones en las áreas exteriores. Esta distribución sugiere que el flujo en el reactor sigue una estructura periódica o cuasi-periódica, con trayectorias relativamente repetitivas de las partículas o elementos del fluido.

Las zonas con mayor concentración de puntos, particularmente cerca del centro, indican regiones donde las partículas o fases cruzan la sección de Poincaré con mayor frecuencia. Esto puede estar relacionado con zonas de recirculación o regiones donde el flujo es más lento, lo que proporciona información valiosa sobre la eficiencia de la mezcla y la dinámica del reactor.

El patrón circular y la simetría observados en el mapa de Poincaré indican que el impulsor PB6 genera un flujo estructurado y estable, con celdas de recirculación bien definidas. En un reactor de agitación con este tipo de impulsor, la mezcla sigue un patrón predecible, lo que sugiere un diseño eficiente para mantener una distribución homogénea de las fases dentro del reactor.

El mapa obtenido, mostrado en la **Figura 22**, revela zonas de recirculación claras y posibles áreas de baja velocidad o flujo estancado. En esta figura el inciso a) se muestra el mapa reportado por (Ananda J. & Mostafa, 2022) (Euler-Lagrange) y en el inciso b) se presenta el mapa generado en esta investigación (Euler-Euler-granular). La similitud entre ambos refuerza la validez del modelo utilizado y confirma que el esquema de simulación empleado describe aproximadamente la fenomenología del sistema.

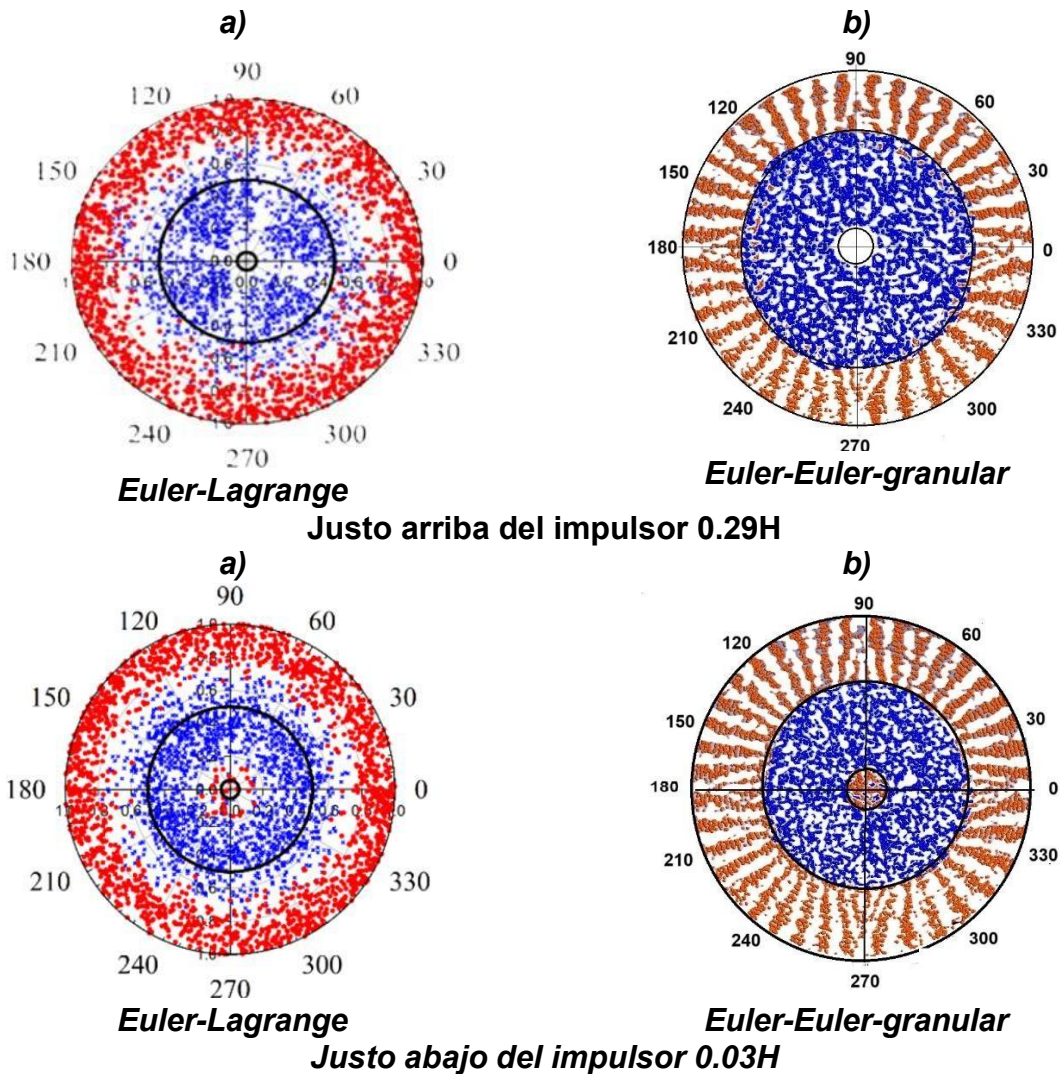
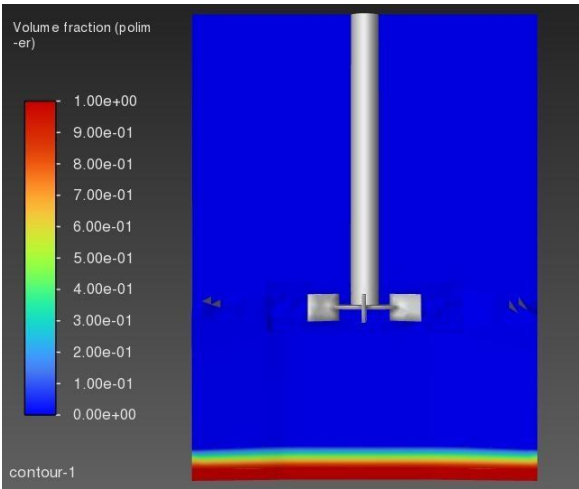


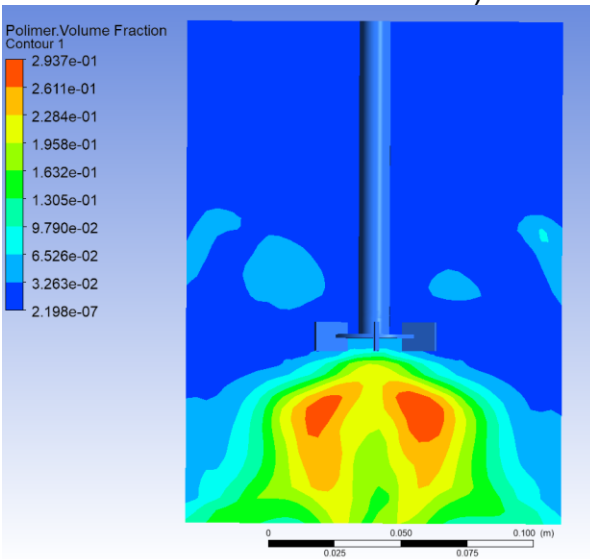
Figura 22 Mapa de Poincaré: los puntos rojos indican flujo ascendente y los puntos azules indican flujo descendente.

4.2 Simulación vs experimental acoplado con el modelo E-E-granular con turbina Rushton

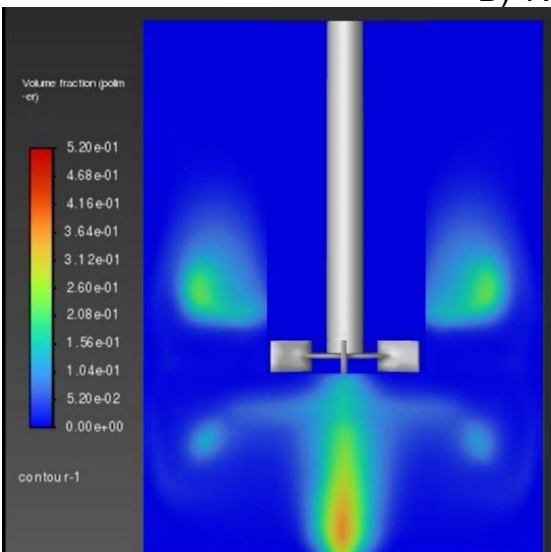
A continuación, se realizó una comparación de imágenes obtenidas a partir de simulaciones transitorias con aquellas obtenidas experimentalmente mediante la captura de un video. Las imágenes generadas de la simulación y comparadas con las imágenes obtenidas del video muestran similitudes cualitativas, como se pueden observar en la **Figura 23**.



A) Reactor al inicio (0 segundos)



B) Reactor a los 7 segundos



C) Reactor al final (15 segundos)

Figura 23 Comparacion por imágenes de simulacion vs experimental

La **Figura 23-b** de la izquierda representa la simulación CFD de la distribución de una fase secundaria, partículas de polímero. En este mapa, las zonas en rojo y amarillo indican una mayor concentración de la fase secundaria, mientras que las áreas en verde y azul muestran una menor presencia. La estructura del impulsor y la dirección del flujo permiten analizar cómo se dispersan las partículas dentro del sistema. La imagen de la derecha muestra el experimento físico de un reactor con un impulsor en la parte superior y partículas azules acumuladas en el fondo. Estas partículas representan la fase secundaria observada en la simulación. Con el tiempo, deberían dispersarse dentro del fluido, siguiendo un patrón similar al predicho por la simulación CFD.

En la **Figura 23-c**, en la parte izquierda, se observa que la fase secundaria se ha dispersado dentro del reactor, con regiones de mayor concentración en la parte inferior y en zonas específicas cercanas al impulsor. La escala de colores indica que las concentraciones más altas aparecen en tonos rojos y naranjas, mientras que las regiones con menor presencia de la fase secundaria se muestran en azul. Esto sugiere que la mezcla ha avanzado y que las partículas han seguido un patrón de flujo determinado por el impulsor. Se distingue una estructura de circulación en la dispersión de las partículas, lo que sugiere que el flujo observado experimentalmente se asemeja al comportamiento predicho por la simulación CFD.

Al comparar ambas representaciones, se observa que la simulación captura aproximadamente la formación de regiones de alta concentración cerca del fondo del reactor, lo que coincide con la acumulación inicial de partículas en la imagen experimental. Esta comparación es fundamental para validar la precisión del modelo numérico y evaluar su capacidad de predecir el comportamiento real del sistema.

En la **Figura 24** se muestra la energía cinética turbulenta adimensional (k^* en m^2/s^2), la cual desempeña un papel fundamental en estos procesos, ya que influye directamente en la reducción del tamaño de gotas y burbujas. k^* se obtuvo como la energía cinética promedio de cada región ($k_{i,t}$) entre la suma de energía cinética de los 4 volúmenes (k_{sum}).

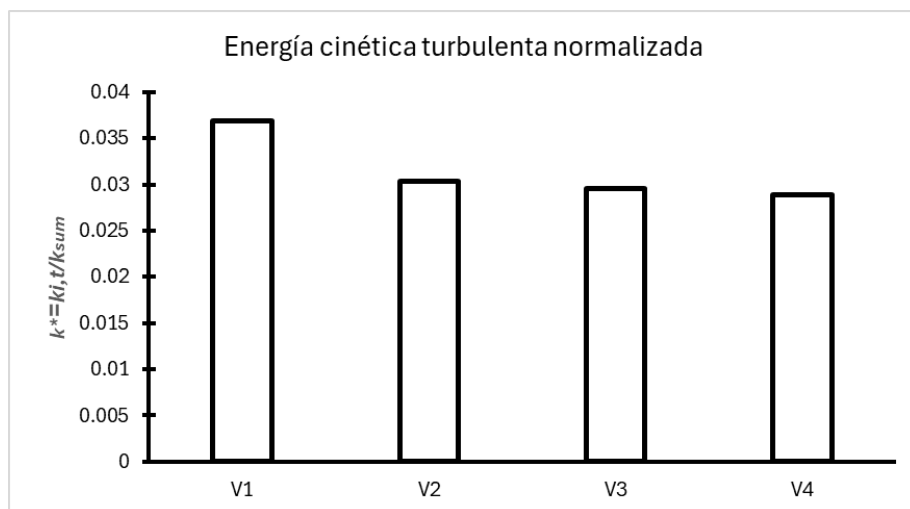


Figura 24 Graficas de k^* en los diferentes volúmenes del reactor

Los resultados obtenidos muestran que el volumen V1 concentra la mayor proporción de energía cinética turbulenta normalizada, con un valor cercano a 0.036. Este resultado indica que en esta región se presenta una mayor intensidad de turbulencia en comparación con las demás. Los volúmenes V2, V3 y V4 exhiben valores similares entre sí, aproximadamente de 0.03, lo cual sugiere una distribución relativamente homogénea de la energía cinética turbulenta en estas zonas, pero inferior a la de V1. Esta diferencia resalta la importancia de V1 como la región de mayor actividad turbulenta dentro del sistema.

4.3 Utilización del modelo E-E con turbina Rushton y pulso de temperatura (glicerol-hexano)

Se realizaron simulaciones CFD para evaluar el comportamiento térmico de una mezcla bifásica de glicerol y hexano bajo agitación mecánica, y se compararon con datos experimentales obtenidos a partir de sensores de temperatura ubicados dentro del reactor agitado. Los resultados se validaron mediante gráficas comparativas de temperatura en función del tiempo, tanto para los datos experimentales como para los obtenidos por simulación.

En la **Figura 25-a** correspondiente a 300 RPM, se observa una buena concordancia entre las simulaciones CFD y los datos experimentales. Ambas curvas presentan una tendencia creciente en el tiempo. Para el Sensor 1, la simulación reproduce adecuadamente el aumento de temperatura, aunque con una leve sobreestimación en algunos puntos. En el caso del Sensor 2, la simulación sobreestima de manera más evidente los valores experimentales, manteniéndose aproximadamente 1 °C por encima en todo el intervalo. A pesar de estas diferencias, la tendencia general de calentamiento se mantiene, indicando un modelado razonablemente preciso del fenómeno térmico.

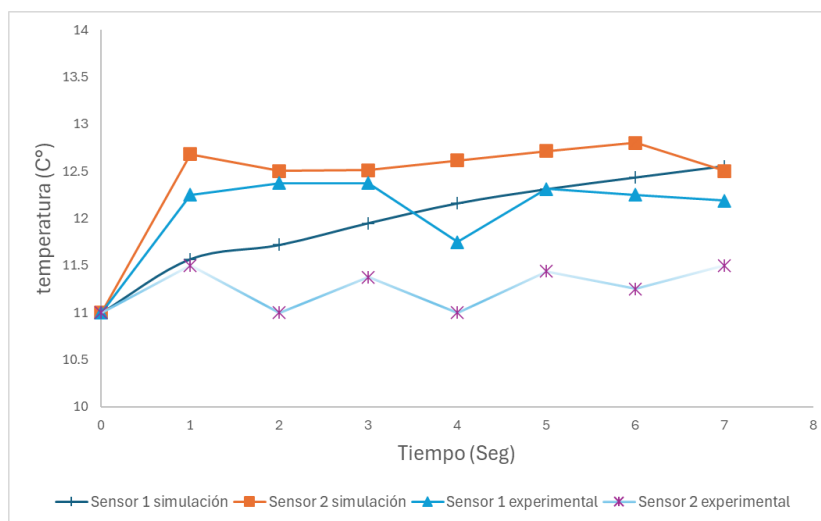
En la **Figura 25-b** correspondiente a 240 RPM, la tendencia de simulación también muestra un comportamiento creciente sostenido en ambos sensores, mientras que los datos experimentales presentan cierta estabilidad y oscilación, especialmente en el

Sensor 2, cuya curva se mantiene prácticamente constante. En este caso, las simulaciones tienden a sobreestimar la temperatura en ambos sensores. A pesar de las discrepancias cuantitativas, se conserva una coherencia cualitativa en la tendencia simulada frente al fenómeno esperado de calentamiento bajo agitación continua.

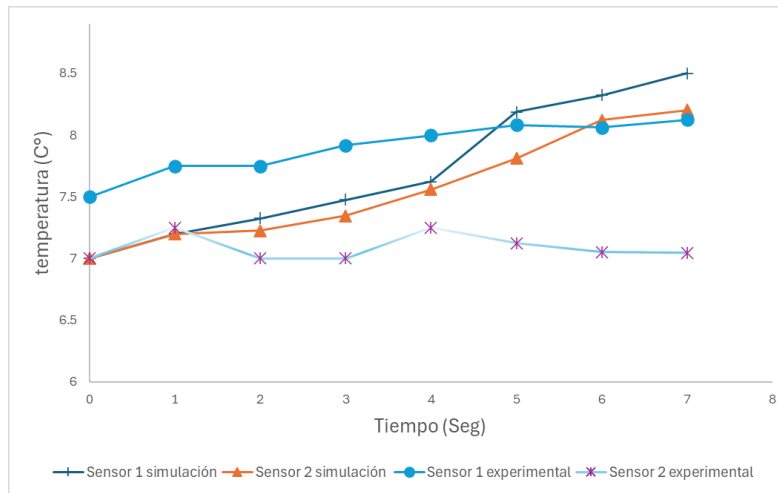
Finalmente, en la **Figura 25-c** a 180 RPM indican una concordancia razonable entre las simulaciones CFD y los datos experimentales, con errores relativos promedio del 7.3% para el Sensor 1 y 9.8% para el Sensor 2.

Las diferencias observadas entre las gráficas simuladas y experimentales en la **Figura 25** ofrecen indicios relevantes sobre la hidrodinámica del sistema. A velocidades de agitación más altas, como 300 RPM, se esperaría una mejora en el mezclado y, por tanto, una distribución térmica más homogénea. Sin embargo, la persistencia de diferencias de temperatura entre sensores, especialmente en el caso del Sensor 2, sugiere la existencia de zonas con mezclado deficiente.

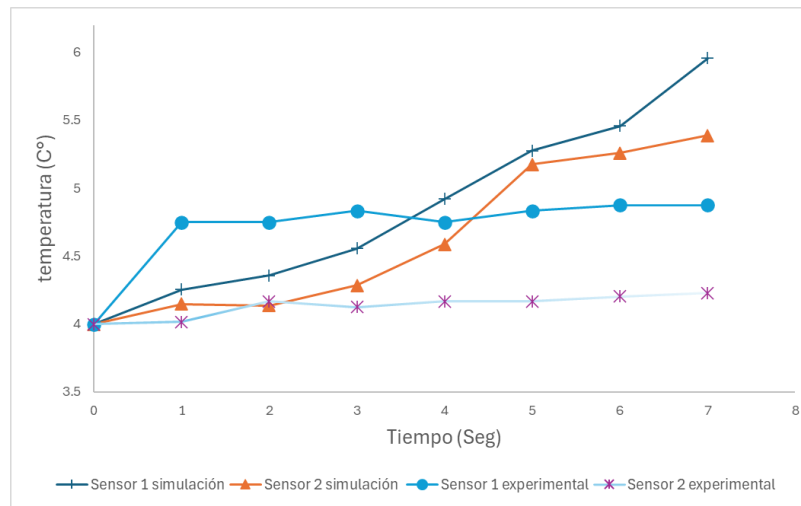
Por otro lado, a 240 RPM, las simulaciones muestran una mayor dispersión térmica que los datos experimentales, lo que podría indicar que el modelo CFD sobreestima la eficiencia de mezcla en condiciones moderadas, probablemente por simplificaciones en la representación de la turbulencia o del campo de velocidad. En conjunto, estos resultados ponen de manifiesto que, aunque el modelo predice adecuadamente la tendencia global, aún existen desafíos para capturar con precisión los detalles hidrodinámicos locales.



a) Variaciones de temperatura de la mezcla glicerol-hexano a 300 rpm



b) Variaciones de temperatura de la mezcla glicerol-hexano a 240 rpm



c) Variaciones de temperatura de la mezcla glicerol-hexano a 180 rpm

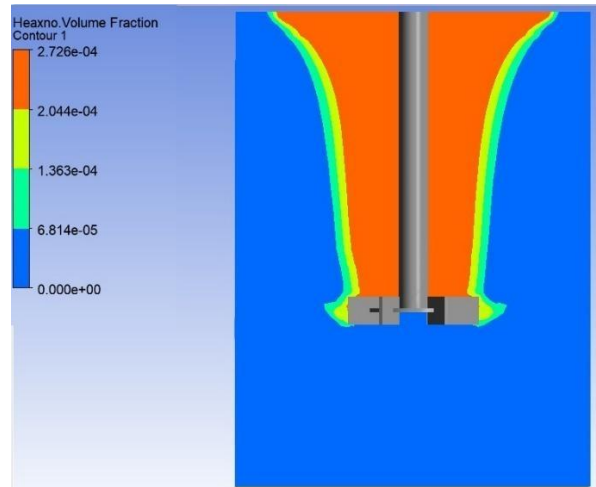
Figura 25 Comparación de experimental vs simulación a diferentes rpm.

4.4 Utilización del modelo E-E con turbina Rushton y pulso de temperatura (agua-hexano)

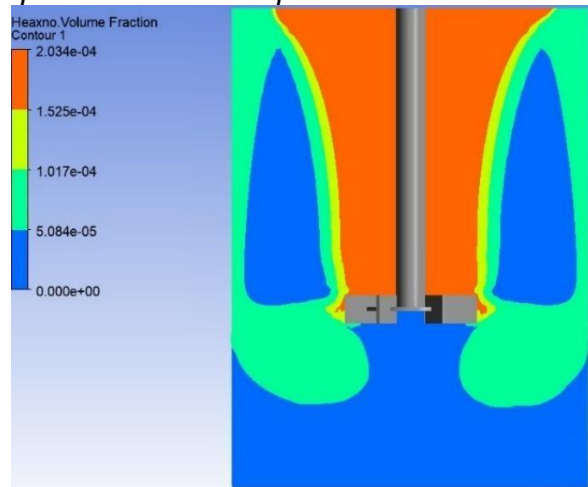
Con el fin de observar los contornos de fases del reactor, se obtuvieron mapas de contornos de fases de la mezcla agua-hexano, el hexano siendo de color rojo y el agua color azul.

En la **Figura 26**, muestran que a 360 rpm se observa una acumulación significativa de hexano en la parte superior, con escasa penetración hacia el fondo, lo que indica una mezcla deficiente. Al incrementar la velocidad a 480 rpm, el hexano comienza a dispersarse formando lazos característicos del impulsor, mejorando parcialmente la

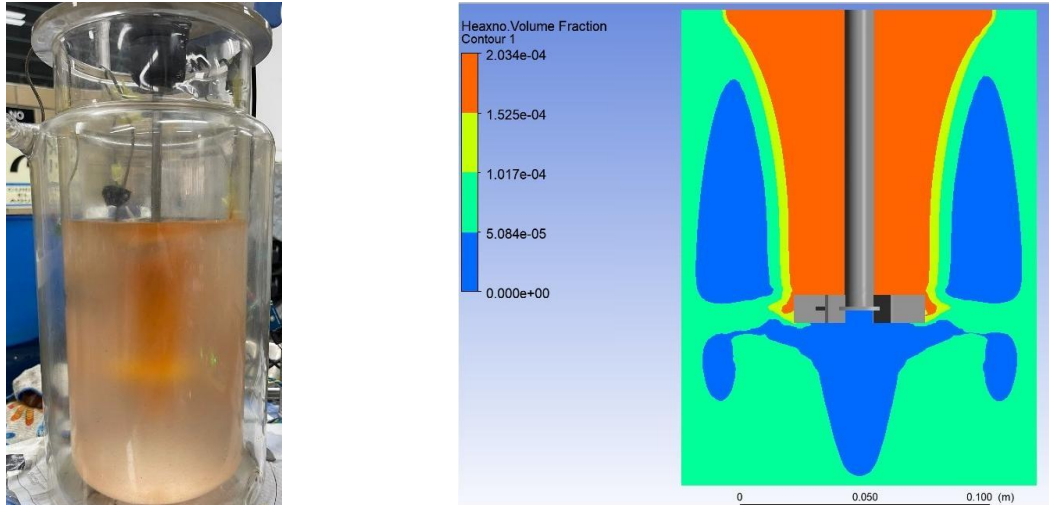
mezcla. Finalmente, a 540 rpm se logra una dispersión más homogénea, evidenciada por una mayor distribución del hexano en todo el volumen del tanque. Estos resultados demuestran que el aumento de la velocidad de agitación mejora la eficiencia del mezclado bifásico, favoreciendo la interacción entre fases y reduciendo la separación de las fases, en concordancia con los patrones de flujo inducidos por el impulsor Rushton.



a) Simulación y experimental a 360 rpm



b) Simulación y experimental a 480 rpm



c) Simulación y experimental a 540 rpm

Figura 26 Comparación de mapa de contornos de fases (experimental vs simulación a diferentes rpm).

Así mismo, se obtuvieron datos de tiempo de mezclado a 420 rpm como se observa en la **Figura 27**. Inicialmente, se observa una disminución rápida de la varianza, seguida por una fase de fluctuaciones alrededor de un valor medio, reflejando la presencia de zonas mal mezcladas o transiciones de flujo. Alrededor de los 700 segundos, la varianza cae de forma más pronunciada y se estabiliza por debajo del mínimo de homogeneidad, indicando que a partir de ese momento el sistema alcanza una mezcla efectiva y constante

Este comportamiento sugiere que, aunque el sistema presenta una mezcla inicial inestable, eventualmente logra una distribución homogénea del hexano en el agua rápidamente, aunque el tiempo prolongado hasta alcanzar la homogeneidad también refleja una eficiencia limitada del sistema a esa velocidad de agitación, también podríamos decir que llega al equilibrio térmico rápidamente y necesitaríamos sensores muy sensibles para poder cuantificar los datos con mayor precisión.

Los resultados de la gráfica de tiempo contra temperatura (experimental vs simulación) a 420 rpm muestran que la **Figura 28** evidencia la capacidad predictiva del modelo CFD al integrar los fenómenos involucrados en el reactor, con errores promedio del 6.2% (Sensor 1) y 7.1% (Sensor 2). Las discrepancias observadas en la fase transitoria reflejan desafíos en el modelado de interfases líquido-líquido, sugiriendo la incorporación de modelos de tensión superficial más precisos. Cabe mencionar que estas mediciones también pueden verse afectadas por ruido eléctrico en los sensores y su sensibilidad térmica.

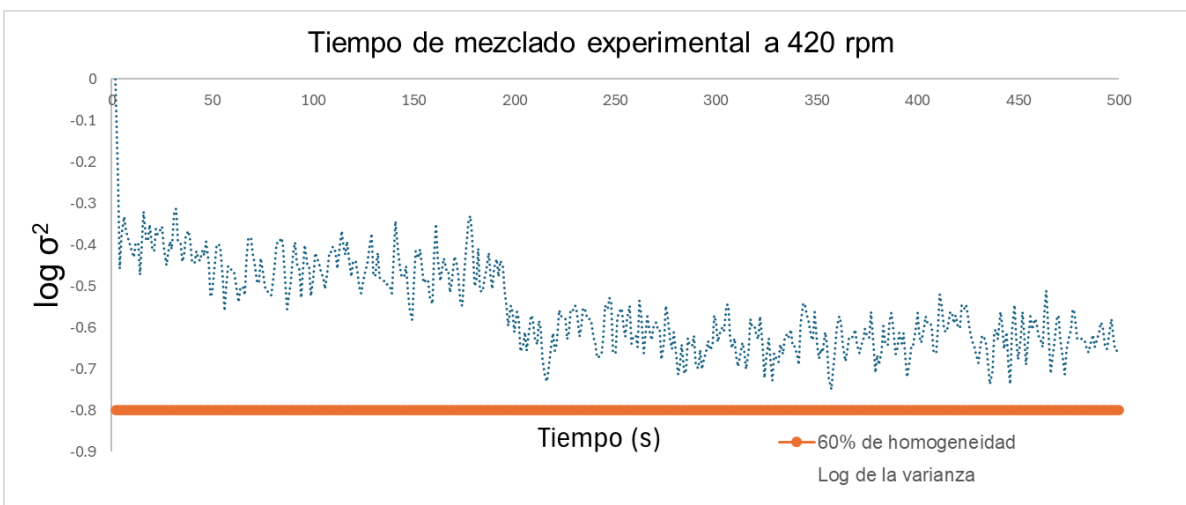


Figura 27 Tiempo de mezclado experimental.

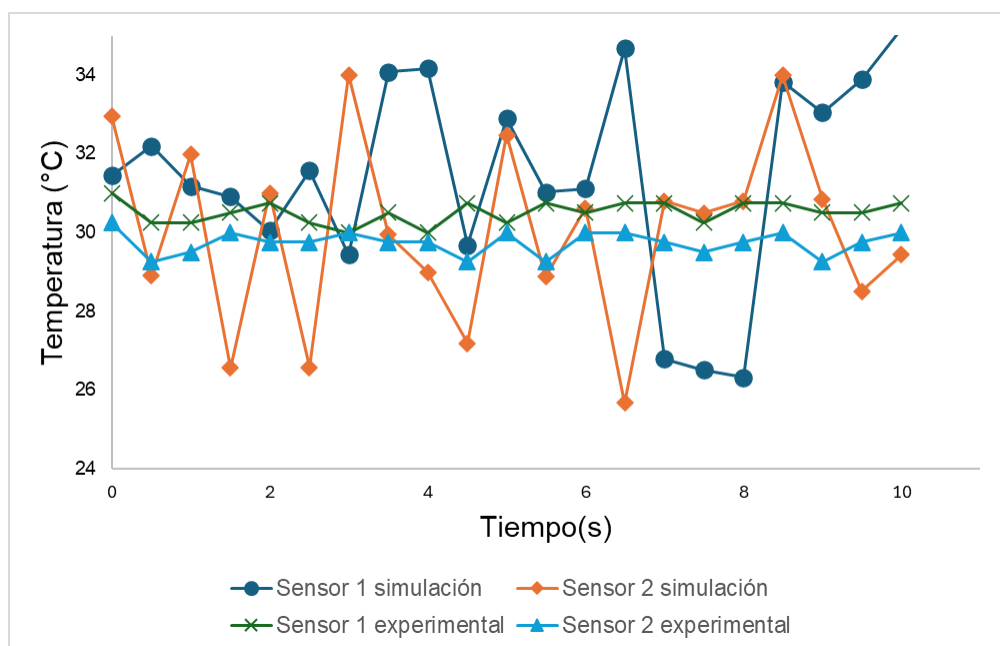


Figura 28 Comparación experimental de agua-hexano a 420 rpm

Conclusiones

El estudio CFD realizado permitió analizar la hidrodinámica de un tanque agitado equipado con impulsores de alto corte y bombeo en sistemas bifásicos líquido-líquido, validando los resultados mediante datos experimentales. Las simulaciones mostraron una concordancia cualitativa y cuantitativa con los experimentos, con errores relativos promedio del 7.3% (Sensor 1) y 9.8% (Sensor 2) a 180 RPM, 8.2% (Sensor 1) y 11.5% (Sensor 2) a 240 RPM, y 5.43% (Sensor 1) y 9.39% (Sensor 2) a 300 RPM. Estas discrepancias se atribuyen a factores no modelados, como ruido experimental, simplificaciones en las condiciones de contorno o efectos térmicos locales.

El modelo multifásico Euler-Euler granular demostró ser eficiente para predecir patrones de flujo, distribución de partículas y energía de disipación, especialmente en sistemas con fluidos no newtonianos. La validación mediante mapas de Poincaré y perfiles de velocidad confirmó que el impulsor PB6 genera flujos estructurados con zonas de recirculación bien definidas, optimizando la mezcla. Sin embargo, se identificaron regiones de estancamiento cerca del fondo del reactor, lo que sugiere la necesidad de ajustes geométricos u operativos.

Los resultados destacan la importancia de seleccionar impulsores adecuados para minimizar el consumo energético y maximizar la homogeneidad en procesos industriales como la polimerización por suspensión. Para futuros trabajos, se recomienda incorporar modelos reológicos más complejos, ajustar las condiciones de frontera dinámicas y realizar estudios a escala piloto para mejorar la precisión cuantitativa.

Bibliografía

- Ameur, H., Kamla, Y., & Sahel, D. (2017). Data on the agitation of a viscous Newtonian fluid by radial impellers in a cylindrical tank. *Data in Brief*, 15, 752–756. <https://doi.org/10.1016/j.dib.2017.10.035>
- Ananda J., & Mostafa B. (2022). Eulerian-Lagrangian Modelling of Turbulent Two-Phase Particle-Liquid Flow in a Stirred Vessel: CFD and Experiments Compared. *International Journal of Multiphase Flow*, 155. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2022.104191>
- Andersson, B. (2012). *Computational fluid dynamics for engineers*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139163961>
- Andrews IV, A. T., Loezos, P. N., & Sundaresan, S. (2005). Coarse-Grid Simulation of Gas-Particle Flows in Vertical Risers. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44(16), 6022–6037. <https://doi.org/10.1021/IE0492193>
- ANSYS Inc. (2011). *ANSYS Fluent UDF manual* (Version 14). ANSYS, Inc.
- ANSYS Inc. (2021). *ANSYS Fluent theory guide*. ANSYS, Inc.
- Ascanio, G., Foucault, S., & Tanguy, P. A. (2004). Time-periodic mixing of shear-thinning fluids. *Chemical Engineering Research and Design*, 82(9 SPEC. ISS.), 1199–1203. <https://doi.org/10.1205/cerd.82.9.1199.44155>
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2006). *Fenómenos de transporte*. Limusa Wiley.
- Chhabra, R. P., & Richardson, J. F. (2008). Non-Newtonian Fluid Behaviour. *Non-Newtonian Flow and Applied Rheology*, 1–55. <https://doi.org/10.1016/B978-0-7506-8532-0.00001-9>
- Derksen, J. J. (2003). Numerical Simulation of Solids Suspension in a Stirred Tank. *Journal of the American Institute of Chemical Engineers*, 49, 2700–2714.
- Doran, P. M. (2013). *Bioprocess engineering principles* (2nd ed.). Academic Press.
- Frijters, S., Günther, F., & Harting, J. (2012). Effects of nanoparticles and surfactant on droplets in shear flow. *Soft Matter*, 8(24), 6542–6556. <https://doi.org/10.1039/C2SM25209K>
- García-Cortés, D., & Jáuregui-Haza, U. (2006). Hidrodinámica en tanques agitados con turbinas de disco con paletas planas. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 38, 97–113.
- Herrera-Mendoza. (2020). *Estudio hidrodinámico de tanques agitados para la producción de recubrimiento blanco base agua* [Universidad Autónoma Metropolitana (México). Unidad Azcapotzalco]. <https://doi.org/10.24275/uama.6746.7555>

- Holland, F. A. (1966). *Liquid mixing and processing in stirred tanks* (F. S. Chapman, Ed.). Reinhold Publishing Corporation.
- Hoseini, S. S., Najafi, G., Ghobadian, B., & Akbarzadeh, A. H. (2021). Impeller shape-optimization of stirred-tank reactor: CFD and fluid structure interaction analyses. *Chemical Engineering Journal*, 413. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127497>
- Jadhav, A. J., & Barigou, M. (2022). Eulerian–Lagrangian modelling of turbulent two-phase particle–liquid flow in a stirred vessel: CFD and experiments compared. *International Journal of Multiphase Flow*, 155, 104191. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2022.104191>
- Jaisinghani, R., & Ray, W. H. (1977). On the dynamic behaviour of a class of homogeneous continuous stirred tank polymerization reactors. In *Chemical Engineering*, (Vol. 32).
- Kelly, W., & Gigas, B. (2003). Using CFD to predict the behavior of power law fluids near axial-flow impellers operating in the transitional flow regime. *Chemical Engineering Science*, 58(10), 2141–2152. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(03\)00060-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(03)00060-5)
- Kramebs, H., Baars, G. M., & Knoll, W. H. (1952). A comparative study on the rate mixing in stirred tanks. *Chemical Engineering Science*, 2, 35–42.
- Lloreda S. (2005). *El proceso de polimerización por suspensión inversa del ácido acrílico y acrilamida*. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=64325109>
- Mao, Z., & Yang, C. (2017). Micro-mixing in chemical reactors: A perspective. In *Chinese Journal of Chemical Engineering* (Vol. 25, Issue 4, pp. 381–390). Chemical Industry Press. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2016.09.012>
- Márquez-Baños Ekbalam Valaur. (2020). *Estudio del mezclado de fluidos newtonianos y pseudoplásticos en un tanque agitado con un impulsor de paletas inclinadas operando en régimen laminar*.
- Márquez-Baños Ekbalam Valaur, Martínez-de-Jesús Gastón, Ramírez-Muñoz Jorge, & Valencia-López. (2019). *Cálculo de la región efectiva de Metzger y Otto para impulsores radiales [Memorias del XL Encuentro Nacional de la AMIDIQ]*
- Martinez R. (1990). *Conceptualización y modelado de la polimerización en suspensión*.
- Martínez-de-Jesús. (2017). *Intensificación de procesos de dispersión en sistemas agitados mecánicamente* [Tesis doctoral, Universidad Autónoma Metropolitana]. <https://hdl.handle.net/11191/6047>.
- Meira, R., & Gugliotta, M. (2022). *Polímeros: Introducción a su caracterización y a la ingeniería de la polimerización*. Universidad Nacional del Litoral. www.unl.edu.ar/editorial

- Mittal, G., & Issao Kikugawa, R. (2021). Computational fluid dynamics simulation of a stirred tank reactor. *Materials Today: Proceedings*, 46, 11015–11019. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.02.102>
- Mixtec-Impellers. (2012). *Agitators and Pumps*. Mixers.
- Montgomery T. Shaw. (2012). *Introduction to Polymer Rheology*.
- Nienow, A. W. (1997). On impeller circulation and mixing effectiveness in the turbulent flow regime. *Chemical Engineering Science*, 52(15), 2455–2465.
- Oldshue Y. (1983). *Fluid Mixing Technology* (Chemical Engineering, Ed.).
- Oshinowo L., & Marshall E. (2001). Virtual Efficiency-Simulating Mixing Impellers Using Computational Fluid Dynamics. *Flow Control*, 7, 28–33. <https://www.researchgate.net/publication/311207869>
- Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., & Kresta, S. M. (Eds.). (2004). *Handbook of industrial mixing: Science and practice*. Wiley. www.copyright.com
- Ramírez-Gómez Rubén. (2015). *Estudio de la hidrodinámica de dos dispersores de alto corte usando dinámica de fluidos computacional (CFD)* [Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana, Azcapotzalco].
- Ramírez-Muñoz, J., Martínez-de-Jesús, G., Soria, A., Alonso, A., & Torres, L. G. (2016). Assessment of the effective viscous dissipation for deagglomeration processes induced by a high shear impeller in a stirred tank. *Advanced Powder Technology*, 27(5), 1885–1897. <https://doi.org/10.1016/j.appt.2016.06.019>
- Stuparu, A., Susan-Resiga, R., & Tanasa, C. (2021). CFD assessment of the hydrodynamic performance of two impellers for a baffled stirred reactor. *Applied Sciences*, 11(11), 4949. <https://doi.org/10.3390/app11114949>
- Tamburini, A., Brucato, A., Ciofalo, M., Gagliano, G., Micale, G., & Scargiali, F. (2021a). CFD simulations of early- to fully-turbulent conditions in unbaffled and baffled vessels stirred by a Rushton turbine. *Chemical Engineering Research and Design*, 171, 36–47. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2021.04.021>
- van Wachem, B. G. M., & Almstedt, A. E. (2003). Methods for multiphase computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, 96(1–3), 81–98. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2003.08.025>
- Vonka, M., Soos, M., & Storti, G. (2016). Viscosity and drop size evolution during suspension polymerization. *AIChE Journal*, 62(12), 4229–4239. <https://doi.org/10.1002/aic.15320>
- Windows-Yule, C. R. K., Hart-Villamil, R., Ridout, T., Kokalova, T., & Nogueira-Filho, J. C. (2020). Positron Emission Particle Tracking for Liquid-Solid Mixing in Stirred

Tanks. *Chemical Engineering and Technology*, 43(10), 1939–1950.
<https://doi.org/10.1002/ceat.202000177>

Yao, Y., Su, J. W., & Luo, Z. H. (2015). CFD-PBM modeling polydisperse polymerization FBRs with simultaneous particle growth and aggregation: The effect of the method of moments. *Powder Technology*, 272, 142–152.
<https://doi.org/10.1016/J.POWTEC.2014.11.037>

Yeoh, G. H., & Tu, J. (2009). *Computational techniques for multiphase flows*. Butterworth-Heinemann.

Zubitur, S. (1998). *Efecto de la agitación en la polimerización en emulsión* [Tesis doctoral, Universidad del País Vasco].

Apéndice y/o anexos

Índice de figuras

FIGURA 1 POLIMERIZACIÓN POR SUSPENSIÓN

FIGURA 2 GEOMETRÍA DEL TANQUE DE AGITACIÓN (DERKSEN, 2003).

FIGURA 3 PATRONES DE FLUJO E IMPULSORES QUE GENERAN ESTOS PATRONES (DORAN, 2013)

FIGURA 4 EJEMPLO DE IMPULSOR DE ALTO CORTE Y BOMBEO (DORAN, 2013).

FIGURA 5 COMPARACIÓN DEL BOMBEO Y ESFUERZO CORTANTE GENERADO POR IMPULSORES (MIXTEC-IMPELLERS, 2012)

FIGURA 6 COMPORTAMIENTOS GENERALES DE FLUJO DE FLUIDO, FLUIDO NEWTONIANO (1), PSEUDOPLÁSTICO (2), PLÁSTICO (3), DILATANTE (4) (MEIRA R. & GUGLIOTTA M., 2022)

FIGURA 8 *CURVA DE POTENCIA (NP vs Re) PARA UN TANQUE CILÍNDRICO CON Y SIN*

FIGURA 9 SUPERFICIES CERCA DE LA PALETA DEL IMPULSOR DONDE SE CALCULA Q Y EL PERFIL DE VELOCIDAD

FIGURA 10 MALLA RECTANGULAR UNIFORME (YEOH & TU, 2009).

FIGURA 11 . A) DOMINIO EN 1D Y (B) DOMINIO 2D.

FIGURA 12 EJEMPLO DE MALLA UNIFORME NO ESTRUCTURADA (MALLA INFERIOR HORIZONTAL), UNIFORME ESTRUCTURADO (MALLA INFERIOR VERTICAL) Y NO ESTRUCTURADA (MALLA SUPERIOR)

FIGURA 13 CALIDAD DE LA MALLA CON BASE A LA OBLICUIDAD

FIGURA 14 REPRESENTACIÓN DEL MODELO DE MÚLTIPLES REFERENCIAS (MARTÍNEZ-DE-JESÚS, 2017)

FIGURA 15 GEOMETRÍA DEL TANQUE E IMPULSOR

FIGURA 16 GEOMETRÍA DEL IMPULSOR

FIGURA 17 MALLADO DEL REACTOR

FIGURA 18 DIAGRAMA DE FLUJO DEL DESARROLLO DEL ESTUDIO CFD.

FIGURA 19. A) GEOMETRÍA DEL REACTOR, B) VOLÚMENES CERCANOS AL IMPULSOR.

FIGURA 20 ALTURA DE LOS 2 SENSORES EN EL REACTOR

FIGURA 20 NÚMERO DE CELDAS EN RRF Y DOMINIO TOTAL DE CADA MALLA.

FIGURA 21 GRAFICA DE NÚMERO DE ELEMENTOS VS POTENCIA

FIGURA 22 CONTORNOS DE VELOCIDAD DE LA FASE LIQUIDA Y LA FASE SOLIDA NORMALIZADOS $u/utip$

FIGURA 23 GEOMETRÍA DEL SISTEMA DE AGITACIÓN CON LÍNEAS DE ESTUDIO A DIFERENTES ALTURAS.

FIGURA 24 DISTRIBUCIÓN DE VELOCIDAD A TRAVÉS DE DIFERENTES ALTURAS.

FIGURA 25 MAPA DE POINCARÉ: LOS PUNTOS ROJOS INDICAN FLUJO ASCENDENTE Y LOS PUNTOS AZULES INDICAN FLUJO DESCENDENTE.

FIGURA 26 COMPARACION POR IMÁGENES DE SIMULACION VS EXPERIMENTAL

FIGURA 27 GRAFICAS DE E^* Y K^* EN LOS DIFERENTES VOLÚMENES DEL REACTOR

FIGURA 28 COMPARACIÓN DE EXPERIMENTAL VS SIMULACIÓN A DIFERENTES RPM.

FIGURA 29 COMPARACIÓN DE MAPA DE CONTORNOS DE FASES (EXPERIMENTAL VS SIMULACIÓN A DIFERENTES RPM).

FIGURA 30 TIEMPO DE MEZCLADO EXPERIMENTAL.

FIGURA 31 COMPARACIÓN EXPERIMENTAL DE AGUA-HEXANO A 420 RPM

Productos de la tesis



Revista Digital

Innovación Científica y Tecnológica en las Ingenierías

<https://sites.google.com/view/revista-icti>



ESTUDIO CFD DEL AGITADOR PB6 EN UN TANQUE CON DEFLECTORES PARA UN SISTEMA BIFÁSICO LÍQUIDO-SÓLIDO.

José Alfredo Parra Reyes, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/TES de Ecatepec

Rebeca Orea León, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/TES de Ecatepec

Gastón Martínez de Jesús, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/TES de Ecatepec

Recibido: 30/06/2024

Aceptado: 06/06/2024

RESUMEN

Los tanques agitados mecánicamente son comunes en muchas industrias químicas y bioquímicas, y se estudian tradicionalmente mediante números adimensionales como Reynolds, bombeo y Froude para una comprensión macroscópica. Sin embargo, para entender mejor los procesos locales o micromezclado, se emplea la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), que puede representar con precisión los fenómenos locales del proceso cuando se resuelven con suficiente resolución del dominio. Aunque CFD es comúnmente utilizado, muchos estudios se centran en flujos newtonianos y no newtonianos, sin considerar la naturaleza multifásica de los procesos. Este trabajo tiene como objetivo desarrollar una estrategia de simulación que represente el mezclado y la interacción en un sistema bifásico agitado por un impulsor de seis paletas inclinadas (PB6). Se emplea el software ANSYS STUDENT 2024-R1. Para estudiar la hidrodinámica generada por el impulsor se analizan los contornos y campos de velocidades y contornos de la distribución de las fases.

ABSTRACT

Mechanically agitated tanks are common in many chemical and biochemical industries and are traditionally studied using dimensionless numbers such as Reynolds, pumping, and Froude for a macroscopic understanding. However, to better understand local processes or micromixing, Computational Fluid Dynamics (CFD) is employed, which can accurately represent local process phenomena when resolved with sufficient domain resolution. Although CFD is commonly used, many studies focus on Newtonian and non-Newtonian fluids, without considering the multiphase nature of the processes. This work aims to develop a simulation strategy that represents mixing and interaction in a biphasic system agitated by a six-blade pitched blade turbine (PB6). The ANSYS STUDENT 2024-R1 software

is employed. To study the hydrodynamics generated by the impeller, velocity fields and phase distribution contours are analyzed.

PALABRAS CLAVE: CFD, Euler-Euler, Fluido multifásico, PB6.

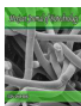
1 INTRODUCCIÓN

Los agitadores mecánicos se utilizan extensamente en procesos químicos y bioquímicos donde pueden encontrarse sistemas líquido-líquido, líquido-gas o líquido-sólidos [1]. La eficacia de estos procesos está estrechamente ligada al sistema de agitación, que incluye el tipo de impulsor, la geometría del tanque y sus accesorios, como deflectores, serpentines, difusores y cualquier otro componente en el interior del tanque. Sin embargo, realizar estudios experimentales que abarquen todas estas variables resulta técnicamente complicado y con costos económicos altos [2]. Una alternativa para estudiar estos sistemas, en los que además pueden estar implicados fenómenos de transferencia calor y masa, son las diversas técnicas de simulación, como CFD. En estas, se utiliza software especializado para predecir el movimiento de los fluidos y los fenómenos y parámetros asociados al movimiento.

Para abordar la solución de estos sistemas multifásicos, se puede emplear el enfoque Euleriano-Euleriano (fluido granular). En este enfoque, se resuelven las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía para cada fase, lo que permite representar el comportamiento simultáneo de las fases presentes en el sistema y sus interacciones [2]. Comparado con el método de Euler-Lagrange, el método de Euleriano-Euleriano (fluido granular) tiene un menor costo computacional para el cálculo número de flujos bifásicos. Para modelar el intercambio de momento en un punto específico, se representan las partículas con una masa determinada, lo

ISSN: 2594-2131 · Año 7 No. 7, septiembre 2024 - febrero 2025 · TecNM- TESCO - México

624



Mexican Journal of Biotechnology 2023, 8(1):xxx

Journal homepage: www.mexjbiotechnol.com

ISSN: 2448-6590

Hydrodynamic evaluation of a PB4 impeller in a liquid-solid system using CFD

Evaluación hidrodinámica de un impulsor PB4 en un sistema líquido-sólido mediante CFD

Jose Alfredo Parra-Reyes¹, Rafael Angel-Cuapio¹, Isabel Neria-González¹, Gastón Martínez-de Jesús^{1*}

¹División de Ingeniería Química y Bioquímica, TecNM/TES de Ecatepec Estado de México, México.

*Corresponding author

E-mail address: gmartinezj@tese.edu.mx

Abstract history

Received: / 15 November 2023 / Received in revised form: / Day Month 2023/

Accepted: / 00 November 2023 / Published online: / 00 January 2024

ABSTRACT

In mixing processes there is great interest in generating an accurate representation of the flow and understanding its effects on the processes. The pitched blade turbine (PB4) is widely used in the design and study of mechanically stirred systems. Traditional analysis with dimensionless numbers, such as power and pumping numbers, does not allow us to know local phenomena that determine dispersion efficiencies or reaction degrees. Many investigations are carried out with Computational Fluid Dynamics (CFD), but are limited to the use of water as a process fluid or use a single-phase system with Newtonian rheology. However, in processes of practical interest, such as polymerization and biotechnological processes, multiphase systems occur with important changes in viscosity, which can be crucial for the efficiency of the process. In this work, by using of CFD, the performance of a stirred tank equipped with a PB4 operating in multiphase system is studied. A model Eulerian-Lagrangian is applied to simulated the multiphase flow and a multiple reference frame is assume to model the impeller. The hydrodynamics performance of the system is evaluate through phase contours, velocity field and energy dissipation.

Keywords: CFD, liquid-solid system, multiphase, Eulerian-Lagrangian, agitation systems, PB4.

RESUMEN

En los procesos de mezclado se tiene mucho interés para generar una representación precisa del flujo y entender sus efectos en los procesos. La turbina de cuatro paletas inclinadas (PB4) es ampliamente utilizada en el diseño y estudio de sistemas mecánicamente agitados. El análisis tradicional con números adimensionales, como números de potencia y bombeo, no permite conocer fenómenos locales que determinan eficiencias de dispersión o grados de reacción. Muchas investigaciones se apoyan con el uso de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), pero la mayoría se limitan al uso de agua como fluido de proceso o emplean un sistema monofásico con reología newtoniana. Sin embargo, en procesos de interés práctico, como la polimerización y procesos biotecnológicos, se presentan sistemas multifásicos con cambios importantes en la viscosidad, que pueden ser cruciales para la eficiencia del proceso. En este trabajo, mediante el uso de CFD, se estudia el desempeño de un tanque agitado con un PB4 operando en un sistema multifásico. Se emplea un modelo Euleriano-Lagrangiano para obtener el flujo multifásico y un enfoque de múltiples marcos de referencia para simular el impulsor. El desempeño hidrodinámico del sistema es evaluado a través de contornos de fase, campos de velocidad y disipación de energía.

Palabras clave: CFD, Sistema líquido-sólido, multifase, Euleriano-Lagrangiana, tanque agitado, PB4.

192



Revista Digital

Innovación Científica y Tecnológica en las Ingenierías

<https://sites.google.com/view/revista-icti>



DESEMPEÑO HIDRODINÁMICO DE UN IMPULSOR PB4 EN UN SISTEMA LÍQUIDO-LÍQUIDO.

José Alfredo Parra Reyes, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/TES de Ecatepec

e-mail: 202311538@tese.edu.mx

Gastón Martínez de Jesús, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México/TES de Ecatepec

e-mail: gmartinezj@tese.edu.mx

Recibido: 26 de abril de 2023

Aceptado: 26 de mayo de 2023

RESUMEN

Los sistemas agitados mecánicamente han sido utilizados en las industrias durante mucho tiempo. La representación adecuada del flujo y su influencia sobre los procesos (perfiles de concentración, intensidad de agitación, de coalescencia, capacidad de bombeo, etc.) sigue siendo de alto interés. El impulsor de paletas inclinadas a 45° (PB4) es uno de los impulsores que más se utilizan en el diseño de sistemas de agitación, pero en la literatura la mayoría de los trabajos sobre este tipo de impulsor se estudian utilizando agua como fluido de trabajo, i.e., en un sistema monofásico con reología newtoniana. Sin embargo, muchos procesos que requieren una agitación, como la polimerización y procesos biotecnológicos, ocurren en sistemas multifásicos con diferentes cambios de su reología. El objetivo de este trabajo es la evaluación hidrodinámica, contornos de fase, campo de velocidad, disipación de energía, de una turbina PB4 en un sistema líquido-líquido.

ABSTRACT

Mechanically agitated systems have been used in industries for a long time. The adequate representation of the flow and its influence on the processes (concentration profiles, agitation intensity, coalescence, pumping capacity, etc.) continues to be of high interest. The 45° inclined vane impeller (PB4) is one of the most widely used impellers in the design of agitation systems, but in the literature most of the works on this type of impeller are studied using water as working fluid, i.e., in a single-phase system with Newtonian rheology. However, many processes that require stirring, such as polymerization and biotechnological processes, occur in multiphase systems with different changes in their rheology. The goal of this work is the hydrodynamic evaluation, phase contours, velocity field, energy dissipation, of a PB4 turbine in a two-phase liquid-liquid system.

PALABRAS CLAVE: CFD, Impulsor paletas inclinadas, disipación de energía, sistema líquido-líquido.

1 INTRODUCCIÓN

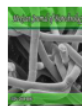
En los procesos de polimerización se utilizan reactores agitados mecánicamente. La eficiencia de la reacción y las propiedades del polímero obtenido dependen entre otras variables del tipo de impulsor, la intensidad de agitación (o la potencia inyectada) y de la reología del fluido de proceso. Realizar estudios experimentales que relacionen todas estas variables es técnicamente complicado o poco factible y puede ser altamente costoso [1]. Una alternativa que puede tomar en cuenta la complejidad de los procesos de agitación es la dinámica de fluidos computacional CFD (Dinámica de Fluidos Computacional, por sus siglas en inglés). Esta técnica permite la solución de las ecuaciones gobernantes del flujo y su acoplamiento con otros fenómenos de transporte. La solución de las ecuaciones de movimiento generan el campo de velocidades y a partir de esto se pueden calcular parámetros de interés. Además, los resultados de CFD resultan de mucha utilidad, ya que por medio de los resultados numéricos se pueden estudiar zonas específicas del reactor, que son muy difíciles de cuantificar experimentalmente [2], [3].

Aunque CFD es una herramienta que se utiliza ampliamente para el estudio de tanques agitados, en la mayoría de estos trabajos reportados en la literatura se utiliza principalmente agua como fluido de proceso, o se usan otros fluidos cuya reología se ajusta a fluidos newtonianos y no newtonianos [4]-[6], sin embargo, raramente se toma en consideración la naturaleza multifásica de los procesos [7], [8].

Por ello, este trabajo tiene como objetivo utilizar herramientas de CFD para estudiar la hidrodinámica generada por un impulsor PB4 y su relación con los procesos de dispersión de un sistema líquido-líquido.

ISSN: 2594-2131 · Año 6 No. 6, septiembre 2023 - agosto 2024 · TecNM- TESCO - México

428



Mexican Journal of Biotechnology 2023, 8(1):xxx

Journal homepage: www.mexjbiotechnol.com

ISSN: 2448-6590

Evaluation of the hydrodynamics of a PB6 impeller in a baffled tank in a solid-liquid system using CFD

Evaluación de la hidrodinámica un impulsor PB6 en un tanque con deflectores en un sistema sólido líquido utilizando CFD

Jose Alfredo Parra-Reyes¹, Rafael Angel-Cuapio¹, Isabel Neria-González¹, Gastón Martínez-de Jesús^{1*}

¹División de Ingeniería Química y Bioquímica, TecNM/TES de Ecatepec Estado de México, México.

*Corresponding author

E-mail address: gmartinezj@tese.edu.mx

Abstract history

Received: / 15 November 2023 / Received in revised form: / Day Month 2023/

Accepted: / 00 November 2023 / Published online: / 00 January 2024

ABSTRACT

Mixing is an operation that occurs in many chemical and biochemical processes. The six pitched blade impeller (PB6) is one of the standard agitators in mixing processes. However, the reported works in the literature for this type of agitator are scarce. Baffles are commonly installed inside the containers to prevent the formation of an upper vortex and promote axial mixing. However, if the process occurs in a laminar or transient regime, the baffles can favor the appearance of dead zones and the processes are not efficient. Furthermore, the presence of more than one phase in the process increases complexity and analysis. Therefore, the investigation of stirred tank is a topic of relevance and practical interest. In this work, Computational Fluid Dynamics (CFD) is used to obtain the hydrodynamics of a PB6 impeller in a baffled vessel in the presence of a liquid-solid system. A multiple reference frame approach and an Eulerian-Lagrangian model are used to obtain system performance as a function of flow patterns, phase contours, and energy dissipation contours.

Keywords: CFD, Liquid-solid system, Multiphase, Eulerian-Lagrangian, Agitation tanks, PB6, Baffles.

RESUMEN

El mezclado es una operación utilizada en muchos procesos químicos y bioquímicos. El impulsor de seis paletas inclinadas (PB6) es uno de los agitadores estándar en campo del mezclado. No obstante, los trabajos reportados en la literatura para este tipo de agitador son escasos. Comúnmente se instalan deflectores en el interior de los recipientes para evitar la formación de un vórtice e incrementar el mezclado axial. Sin embargo, si el proceso ocurre en régimen laminar o transitorio, los deflectores pueden favorecer la aparición de zonas muertas y los procesos no son eficientes. Además, la presencia de más de una fase en el proceso incrementa la complejidad y el análisis. Entonces la investigación de sistemas agitados mecánicamente es un tema de relevancia e interés práctico. En este trabajo se emplea Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) para obtener la hidrodinámica de un impulsor PB6 en un recipiente con deflectores en presencia de un sistema líquido-sólido. Un enfoque de múltiples marcos de referencia y un modelo Euleriano-Lagrangiano se utilizan para obtener el desempeño del sistema en función de los patrones de flujo, los contornos de fase y contornos de disipación de energía.

Palabras clave: CFD, Sistema líquido-sólido, multifase, Euleriano-Lagrangiana, tanques de agitación, PB6, baffles.

193

EVALUACIÓN CFD DE UNA TURBINA PB4 EN UN SISTEMA LÍQUIDO-LÍQUIDO

Gastón Martínez-de Jesús, José A. Parra-Reyes, Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, División de Ingeniería Química y Bioquímica, Ecatepec de Morelos, Estado de México, 50210.

Palabras clave: CFD, Impulsor paletas inclinadas, dispersión de energía.

Introducción. Aunque los sistemas agitados mecánicamente se han estudiado durante mucho tiempo, la representación adecuada del flujo y su repercusión sobre los procesos (perfiles de concentración y temperatura, intensidad de agitación, de coalescencia y rompimiento de gotas, etc.) sigue teniendo un interés práctico. La turbina PB4 es uno de los impulsores que más se utilizan en el diseño de sistemas de agitación [1] pero en la literatura la mayoría de los trabajos sobre PB4 se reportan utilizando agua como fluido de trabajo i.e., un sistema monofásico con reología newtoniana. Sin embargo, muchos procesos, como la polimerización y procesos biotecnológicos, ocurren en sistemas multifásicos con cambios drásticos de viscosidad [2].

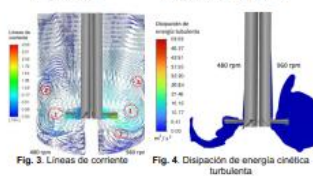
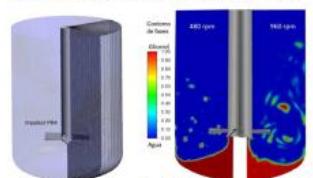
El objetivo de este trabajo es la evaluación de la distribución espacial de parámetros hidrodinámicos, (contornos de fase, campo de velocidad y dispersión de energía) de una turbina PB4 en un sistema bifásico líquido-líquido.

Metodología. Se construyó un modelo para un estudio de Dinámica de fluidos Computacional (CFD), utilizando el software ANSYS-Fluent v17.1. El dominio computacional, el malla se muestran en la Fig. 1. Como fluidos de proceso se utilizó glicerol y agua. Las simulaciones fueron ejecutadas en estado estacionario. Se utilizó el modelo de turbulencia k- ω . Para simular la rotación del impulsor se emplea un enfoque MRF, mientras que el modelo Vof se utilizó para incorporar la mezcla bifásica [3]. Se probaron 2 velocidades de agitación: 480 y 960 rpm.

Resultados. En la Fig. 2 se muestran los contornos de fases. Puede observarse que a 960 rpm se aumenta la distribución del glicerol, sin embargo, a pesar de que la velocidad es el doble, el movimiento del glicerol es deficiente. Se considera que un impulsor PB4 genera un flujo axial [1] sin embargo, en la Fig. 3 se observan zonas de recirculación a ambas velocidades. A 960 rpm se observan claramente 3 zonas de flujo (marcadas del 1 al 3; a 480 rpm se generan dos zonas, la región que se encuentra en el fondo del tanque eventualmente entra a la zona 1. Estos patrones de flujo explican la escasa distribución de glicerol mostrados en la Fig. 2 y muestran que en el fondo del tanque el glicerol se queda estancado y si acaso sale de esta zona, puede entrar a las regiones de circulación que son caracterizadas por tener una pobre transferencia de masa con el resto del tanque.

Finalmente, en la Fig. 4 se muestra la dispersión de energía (ϵ) presente en el tanque. Este parámetro se

asocia con la capacidad de reducir el tamaño de gotas y burbujas. Es común presentar los resultados en términos del cociente $\epsilon_{max}/(N^3D^5)$, para este trabajo este resultó ser de 5.1, para PB4 en la referencia [1] se reporta un valor de 2.44, mientras que para una turbina RDT-4 se reporta 12.14, este último impulsor es reconocido por su capacidad para reducir el tamaño de gotas y burbujas. Entonces, debido a los resultados obtenidos de ϵ para PB4 en este trabajo, este presentaría un pobre desempeño para procesos de dispersión líquido-líquido.



Conclusiones. El modelo CFD desarrollado permitió evaluar la hidrodinámica y el desempeño de impulsor PB4. El sistema de agitación presenta un pobre mezclado y bajos valores de dispersión de energía por lo que su uso en procesos líquido-líquido sería limitado.

Bibliografía.

1. Paul E., Atieno-Ocheng V. and Kresta S, Handbook of industrial mixing, John Wiley & Sons, New Jersey, 2004.
2. Vorka M. Soos M y Storti M, (2016) AIChE Journal, vol. 62, no. 12, pp. 4225-4239.
3. ANSYS Inc. (2016). ANSYS Fluent Theory Guide, Canonsburg, Pennsylvania U.S. 22-27.

XLVI Encuentro Nacional de la AMIDIQ

EVALUACIÓN CFD DE LA HIDRODINAMICA GENERADA POR UN IMPULSOR RUSHTON EN UN SISTEMA LÍQUIDO-SÓLIDO

José Alfredo Parra Reyes*, Gastón Martínez de Jesús*, Adrián López Táriles*, Estefanía Godoy-Collín*, Yoxce Obando-Gutiérrez*

*División de ingeniería Química y Bioquímica, TecNM/Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, C.P.55210, Estado de México, México.

†Departamento de Materiales, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, C.P.02200, Ciudad de México, México. 202311538@tese.edu.mx

Resumen

Los tanques agitados desempeñan un papel clave en las industrias química y farmacéutica, donde la eficiencia del proceso depende en gran medida del diseño del sistema de agitación. En algunos procesos industriales es necesario mezclar o dispersar dos fases, lo que puede modelarse mediante técnicas de CFD. Una de las aproximaciones más utilizadas para estos modelos es el enfoque multifásico Euleriano-Euleriano (E-E). En este estudio, se utilizó un sistema de agitación con un impulsor Rushton en un tanque sin deflectores. La fase continua fue agua a 20°C, mientras que la fase dispersa consistió en partículas de vidrio con un diámetro de 0.001 m. Las simulaciones mostraron una distribución desigual de la fase dispersa, con una acumulación significativa en el fondo del tanque debido a la insuficiente agitación. Los mapas de Poincaré, empleados como alternativa a los mapas de vectores, revelaron una mezcla deficiente en algunas zonas y una buena recirculación en otras. Además, se observó que la dispersión de energía se concentró principalmente en el fondo del tanque y en las paletas del impulsor. A partir de estos resultados, se identificaron oportunidades para optimizar el mezclado, especialmente en la parte superior del tanque.

Palabras clave: CFD, Rushton, Modelos multifásicos; Hidrodinámica; Reactor de agitación.

Introducción

Los tanques de mezclado se emplean de forma habitual en la industria para diversas aplicaciones, como la homogeneización de fluidos a distintas temperaturas o concentraciones de componentes. También se utilizan para modificar el tamaño de burbujas, partículas o gotas de una fase dispersa, aumentando su área de contacto dentro de una fase continua, generalmente líquida. Además, tienen un papel clave en procesos biológicos tanto aerobios como anaerobios, entre otras funciones [1].

En estos sistemas, la interacción entre múltiples fases (líquido-líquido, sólido-líquido o gas-líquido) da lugar a fenómenos complejos como la coalescencia y ruptura de burbujas, la sedimentación de partículas y la dispersión de gotas. La dispersión de la energía cinética turbulenta (ϵ) juega un papel fundamental en estos procesos, ya que influye en la reducción del tamaño de gotas y burbujas.

Sin embargo, realizar estudios experimentales que incluyan todas las variables involucradas puede resultar complejo y costoso debido al equipamiento necesario [2]. En este contexto, las técnicas de CFD (Dinámica de Fluidos Computacionales) ofrecen una alternativa viable para analizar sistemas multifásicos. Estas técnicas permiten simular y predecir el comportamiento de los fluidos y los fenómenos asociados a su movimiento, proporcionando información detallada sobre la distribución de fases, los patrones de flujo y la dispersión de energía en el sistema. Gracias a ello, es posible optimizar el diseño y operación de los tanques de mezclado sin necesidad de realizar pruebas experimentales extensivas.

Para resolver sistemas multifásicos en procesos de mezclado, se emplean modelos que describen la interacción entre fases, como líquido-líquido, líquido-sólido o líquido-gas, abordando así la fenomenología del sistema. Los dos principales enfoques son:

El modelo Euleriano-Lagrangiano (E-L), que permite rastrear la posición y la interacción de cada partícula de la fase secundaria, enfatizando las interacciones fluido-partícula y partícula-partícula. Este modelo