



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

MODELADO DE LA DISTRIBUCIÓN DE PARTÍCULAS EN UN AEROSOL
ATOMIZADO POR ULTRASONIDO

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
RUBEN CARLOS ESQUIVEL HERNANDEZ

TUTOR PRINCIPAL
WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

CD. MX. DICIEMBRE 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: ROGELIO GONZÁLEZ OROPEZA
Secretario: ALEJANDRO RODRÍGUEZ VALDÉS
1 er. Vocal: WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ
2 do. Vocal: MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ
3 er. Vocal: CARLOS ALBERTO PALACIOS MORALES

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Instituto de Ingeniería, Ciudad Universitaria

TUTOR DE TESIS:

WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ



FIRMA

Abstract

The development of ultrasonic atomizers requires models that determine the spray characteristics from the properties of the atomized liquid and the physical parameters of the atomization process. This dissertation proposes a model for thin-film ultrasonic atomization, which is based on capillary waves enhanced by cavitation. Six significant variables are identified for the model, and the most representative dimensionless numbers are derived from them. Correlations for the number mean diameter, surface mean diameter, volume mean diameter, and Sauter mean diameter are derived from the dimensionless numbers. The numeric and volumetric distributions are calculated for four experimental sprays by solving the maximum entropy formalism coupled with the mean diameter correlations. The distributions obtained using the surface mean diameter and the volume mean diameter alone show the best fit with the experimental distributions.

Agradecimientos

Por la oportunidad de colaboración y desarrollo quiero agradecer al Instituto de Ingeniería y a todos aquellos miembros cuya labor permitió la consumación del presente proyecto: a mi tutor el Dr. William Vicente de CIPIA por su tutoría, apoyo y disposición, a Héctor Iván Centeno de Proyectos PAPIME por su continuo apoyo y asesoría en los procesos de compras, a Josefina Elizabeth Plata García de Unidad de Servicios de Información por su ayuda en la adquisición de bibliografía.

Un agradecimiento a la UNAM, al proyecto PAPIME PE108418 por el apoyo recibido que permitió la compra de equipo para el satisfactorio desarrollo del presente proyecto y al proyecto PAPIIT AG101018 por la ayuda proporcionada para la compra de material. Un especial agradecimiento a la Unidad de Investigación y Control de Emisiones por la oportunidad de colaboración y el apoyo de sus integrantes.

Se agradece al CONACYT por la beca número 721437, la cual permitió el desarrollo del presente proyecto.

*I and Pangur Bán, my cat,
'Tis a like task we are at;
Hunting mice is his delight,
Hunting words I sit all night.*

Robin Flower.

Fragmento del poema “The student and his cat” del libro de dominio público *The Poem-Book of the Gael*.

Contenido

Figuras	xiii
Tablas	xv
Introducción	1
1 Atomización ultrasónica	11
1.1 Atomización	11
1.2 Atomización acústica	16
1.3 Generador ultrasónico	19
2 Modelo del aerosol	25
2.1 Distribución de un aerosol	25
2.2 Metodologías para el modelado de la distribución de un aerosol	31
2.3 Análisis de la atomización ultrasónica	33
2.4 Ecuaciones constitutivas	37
3 Diámetros medios	43
3.1 Modelos de los diámetros medios	43
3.2 Longitud de onda	45
3.3 Coeficientes de proporcionalidad	49
3.4 Conclusiones	58

4 Distribución de tamaño de gotas	63
4.1 Formalismo de máxima entropía	63
4.2 Cálculo de la distribución de tamaño de gotas	67
4.3 Conclusiones	77
A Correlaciones simplificadas	81
A.1 Modelos	81
A.2 Diámetro medio numérico	82
A.3 Diámetro medio superficial	84
A.4 Diámetro medio volumétrico	87
A.5 Diámetro medio de Sauter	89
A.6 Conclusiones	92

Figuras

I	Consumo energético mundial	1
II	Consumo energético nacional	2
III	Carburador	3
IV	Inyectores	4
1.1	Tensión superficial	12
1.2	Inestabilidad de una gota	13
1.3	Modos de fractura de un chorro	15
1.4	Inestabilidad de Faraday	16
1.5	Ondas superficiales de Faraday de alta frecuencia	17
1.6	Difusión rectificada	18
1.7	Flujo acústico	19
1.8	Sonotrodos para atomización	22
2.1	Funciones discretas de distribución de probabilidad	26
2.2	Distribuciones de un aerosol base numérica y volumétrica	27
2.3	Distribuciones empíricas	29
2.4	Distribución conjunta de un aerosol	31
2.5	Esquema de la atomización ultrasónica directa de capa fina	34
2.6	Volumen de control	39
3.1	Longitud de onda y frecuencia adimensionales	47
3.2	Gráfica de paridad para la longitud de onda	48

3.3	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{10}	51
3.4	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{10}	52
3.5	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{30}	54
3.6	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{30}	54
3.7	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{32}	56
3.8	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{32}	58
4.1	Distribuciones para el primer caso del primer ensayo	68
4.2	Distribuciones para el segundo caso del primer ensayo	69
4.3	Distribuciones para el primer caso del segundo ensayo	71
4.4	Distribuciones para el segundo caso del segundo ensayo	72
4.5	Distribuciones para el primer caso del tercer ensayo	73
4.6	Distribuciones para el segundo caso del tercer ensayo	74
4.7	Distribuciones para el primer caso del cuarto ensayo	76
4.8	Distribuciones para el segundo caso del cuarto ensayo	77
A.1	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{10}	83
A.2	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{10}	84
A.3	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{20}	86
A.4	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{20}	86
A.5	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{30}	88
A.6	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{30}	88
A.7	Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{32}	91
A.8	Gráfica de paridad para el diámetro medio D_{32}	91

Tablas

1.1	Tipos de atomizadores	15
1.2	Parámetros de un cristal atomizador piezoeléctrico	21
2.1	Precisión de la distribución empírica de un aerosol	28
2.2	Diámetros medios en el análisis de aerosoles	30
2.3	Longitud capilar para distintos líquidos	35
2.4	Análisis de estabilidad para la atomización secundaria	37
3.1	Correlaciones para diámetros medios, medianos y modas	44
3.2	Datos experimentales para la longitud de onda	46
3.3	Datos experimentales para los diámetros medios D_{10} y D_{30}	51
3.4	Datos experimentales para el diámetro medio D_{32}	55
4.1	Diámetros medios experimentales y estimados del primer ensayo	68
4.2	Diámetros medios experimentales y estimados del segundo ensayo	70
4.3	Diámetros medios experimentales y estimados del tercer ensayo	73
4.4	Diámetros medios experimentales y estimados del cuarto ensayo	75
A.1	Datos experimentales para el diámetro medio D_{10}	83
A.2	Datos experimentales para el diámetro medio D_{20}	85
A.3	Datos experimentales para el diámetro medio D_{30}	87
A.4	Datos experimentales para el diámetro medio D_{32}	90

Introducción

El 85% de la energía consumida a nivel mundial durante el año 2018 provino de combustibles fósiles y la tercera parte del consumo mundial provino del petróleo, como se muestra en la *Figura 1a* (BP 2020). Del consumo total energético mundial, más de la tercera parte se destinó al sector del transporte, como se muestra en la *Figura 1b*. A su vez, el sector transporte operó en un 92% con combustibles derivados del petróleo (International Energy Agency 2020).

De acuerdo con los pronósticos de BP el consumo de hidrocarburos en el sector transporte tendrá una demanda máxima a finales de la década del 2020. Si la modernización de regulaciones medioambientales continúa a una velocidad similar a la actual, en el 2050 se duplicará la demanda de transporte y el 80% del sector demandará hidrocarburos. En un pronóstico alternativo, donde las políticas implementadas y los cambios en el comportamiento social permiten reducir las emisiones de carbono a la atmósfera en 95% para el año 2050, se estima que el 85% de los vehículos serán eléctricos. Como consecuencia, la demanda de hidrocarburos en el sector disminuirá de 92% en el 2018, hasta un 20% en el 2050. Para ambos

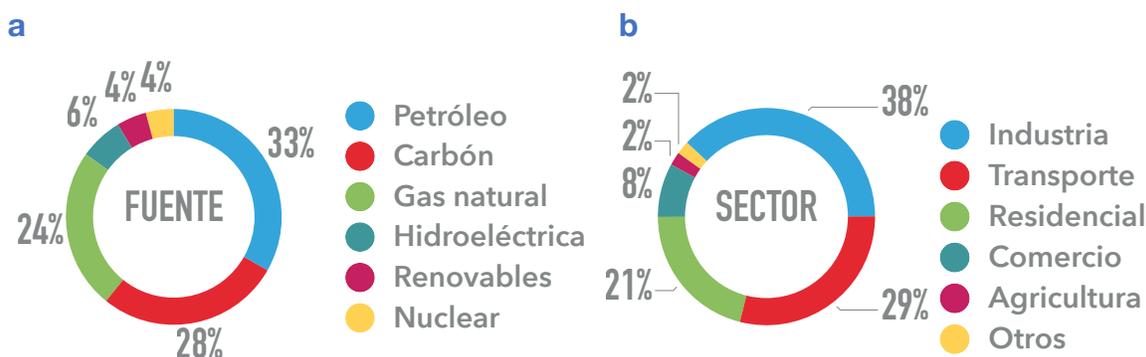


Figura 1: Consumo energético mundial (a) por fuente de energía y (b) por sector en el año 2018.

Fuente: (a) BP. 2020. *Statistical Review of World Energy*. BP p.l.c.

(b) International Energy Agency. 2020. *World Energy Balances*. IEA Publications.

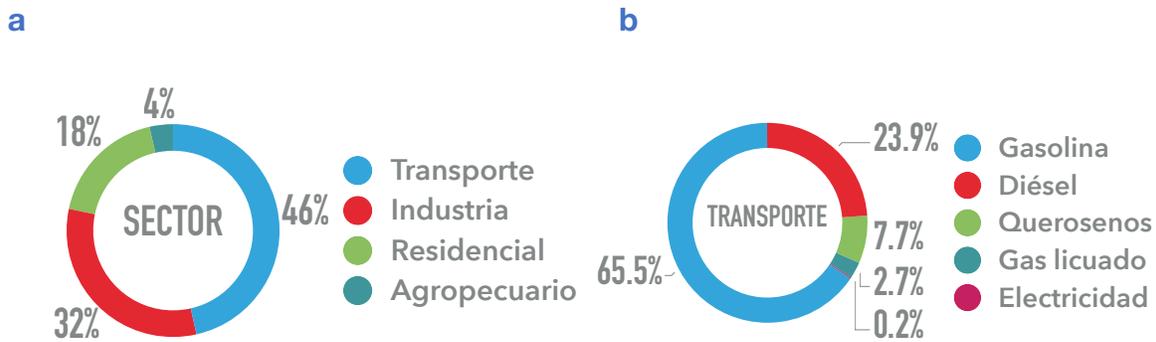


Figura II: Consumo energético en México (a) por sector y (b) por fuente para el sector transporte en el año 2018.

Fuente: SENER. 2019. Balance Nacional de Energía.

pronósticos BP espera un incremento del 50% en la eficiencia de los vehículos de combustión interna respecto a los vehículos del año 2018 (Energy Outlook 2020).

Durante el año 2018 en México el 86% de la producción energética se generó con combustibles fósiles, como ilustra la *Figura IIa*. El sector transporte consumió el 46% de la energía demandada a nivel nacional, del cuál el 97% provino de hidrocarburos y emitió el 93% de las emisiones de CO₂ del sector, como ilustra la *Figura IIb* (SENER 2019). En el año 2012, México se comprometió a reducir las emisiones de CO₂ en un 30% para el 2020 y en un 50% para el 2050 respecto a las del año 2000; adicionalmente, se comprometió a reducir las emisiones de carbono negro en un 51% para el año 2030 (INECC 2017). Para México es apremiante cumplir los objetivos propuestos pues es un país vulnerable a los efectos del cambio climático.

retos del sector transporte

Es indispensable optimizar la operación de los motores de combustión interna tomando en cuenta su permanencia a largo plazo en el sector transporte. Las mejoras en los motores deben aumentar su eficiencia, reducir las emisiones contaminantes y flexibilizarlos para el uso eficiente de biocombustibles.

Atomización de combustibles

influencia del aerosol en la combustión

Para favorecer la quema de un combustible líquido, este debe dispersarse en el aire que se utilizará como comburente, formando un aerosol líquido. El proceso de desintegración del combustible se llama atomización y su finalidad es maximizar la superficie de contacto entre el combustible y el comburente, pues en la superficie líquida ocurre la reacción de combustión. Las propiedades del aerosol de combustible influyen la velocidad del frente de flama en la combustión, el porcentaje de combustible quemado, la temperatura de combustión, la autoignición de la mezcla aire-combustible y las emisiones contaminantes. Los factores mencionados repercuten en el desempeño del vehículo al afectar la eficiencia y potencia del motor, el consumo específico de combustible, el tiempo que tarda el motor en alcanzar la

temperatura de operación, la eficiencia de conversión del catalizador automotriz y las emisiones vehiculares (Reif 2015).

Un efecto secundario de la atomización del combustible es favorecer su evaporación previa a la combustión. La evaporación del combustible es deseable pues la combustión más rápida y completa ocurre cuando el combustible se encuentra en fase gaseosa (Ballal y Lefebvre 1981). Lefebvre analizó la velocidad de combustión en mezclas aire-combustible al variar la proporción de combustible en fase líquida y fase gaseosa. Observó que la velocidad de combustión tiende a la máxima posible conforme la proporción de combustible evaporado en la mezcla aumenta, al igual que cuando el tamaño de las gotas del aerosol disminuye (Richards y Lefebvre 1989).

Los dispositivos encargados de atomizar el combustible para producir la mezcla aire-combustible reciben el nombre de pulverizadores. Históricamente, el pulverizador de mayor uso ha sido el carburador, no obstante, la implementación de regulaciones ambientales en materia de emisiones a nivel mundial ha acelerado la adopción de la inyección electrónica como estándar de atomización en motores de combustión interna.

Tanto los carburadores como los inyectores atomizan el combustible al desestabilizarlo mediante fuerzas de arrastre inducidas por un medio gaseoso en un chorro de combustible a alta velocidad. El carburador produce el chorro a partir del efecto Venturi: el aire que atraviesa el múltiple de admisión hacia el motor succiona el combustible desde una cuba a través de un orificio calibrado. La dosificación de combustible depende de la velocidad del flujo de aire y del orificio calibrado, por ende, no es posible modificarla durante la operación del motor. El aerosol atomizado por un carburador se conforma de gotas de tamaños considerablemente grandes y variados, como se observa en la *Figura III*. Este aerosol de baja calidad promueve una combustión incompleta con baja eficiencia y elevadas emisiones de hidrocarburos, material particulado y monóxido de carbono.

Los inyectores funcionan al presurizar el combustible para eyectarlo por un orificio a alta velocidad. La *Figura IV* ilustra las dos formas en que un inyector suministra el combustible a

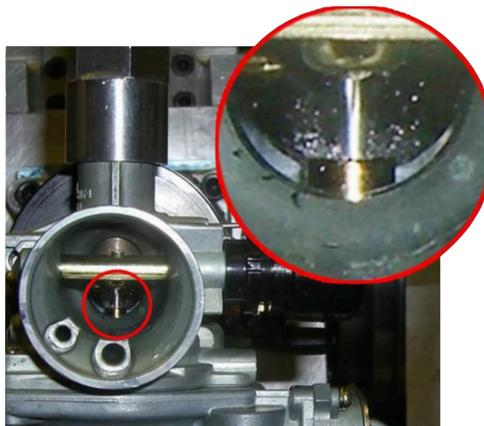


Figura III: Vista del funcionamiento de un carburador y del aerosol atomizado.

Fuente: Jónsson, et al. 2015. Ultrasonic Gasoline Evaporation Transducer. Elsevier.

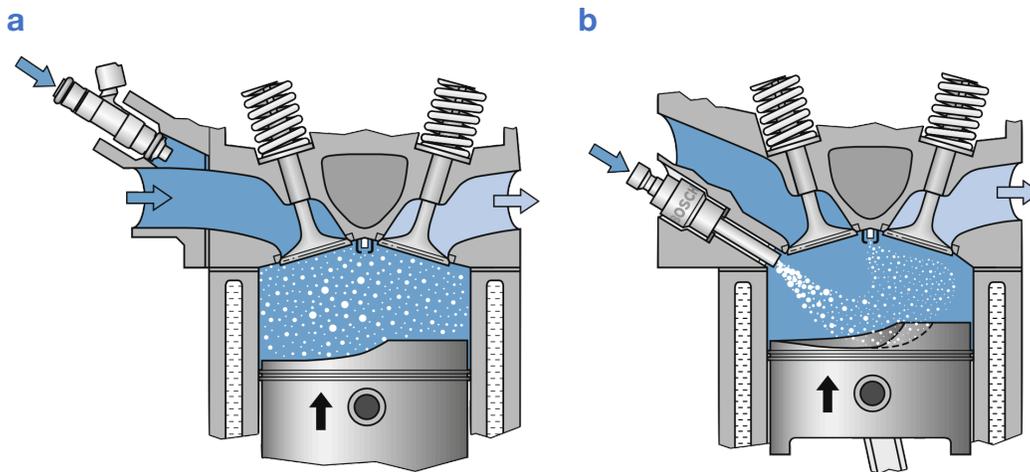


Figura IV: Inyector (a) indirecto y (b) directo de gasolina.

Fuente: Reif, Konrad. 2015. Gasoline Engine Management. Springer Vieweg.

la cámara de combustión: al eyectar el combustible en el múltiple de admisión y al eyectarlo directamente en la cámara de combustión. El control electrónico de la apertura del inyector permite regular la cantidad de combustible suministrado y el instante de inyección durante la operación del motor. Los inyectores permiten aumentar la eficiencia de los motores y obtener proporciones constantes de emisiones contaminantes, lo que simplifica la integración de catalizadores y reduce significativamente las emisiones de los vehículos. El aerosol atomizado por un inyector se conforma de gotas de tamaños pequeños y variados debido a la alta velocidad que emplea (Reif 2015). Una oportunidad de innovación en los motores de combustión interna es investigar las ventajas de un proceso distinto de atomización para producir aerosoles de propiedades óptimas para la combustión.

Atomización ultrasónica

La atomización ultrasónica produce aerosoles de propiedades convenientes para aplicaciones industriales y médicas dónde se requieren gotas pequeñas y uniformes a baja velocidad (Gallego Juárez y Graff 2015). En la combustión, un aerosol con estas características acelera la velocidad del frente de flama, disminuye la autoignición y aumenta la temperatura del proceso, respecto de los pulverizadores comerciales actuales. La atomización ultrasónica representa una oportunidad de mejora para los motores de combustión interna.

El proceso de la atomización ultrasónica comienza cuando se dirigen ondas acústicas de alta frecuencia y de alta intensidad a una superficie líquida: en la interfaz se forman ondas estacionarias que crecen hasta alcanzar una amplitud crítica en la cual desprenden gotas de sus crestas. Las gotas eyectadas se caracterizan por su baja velocidad y tamaños uniformes. La ruptura de la capa líquida es favorecida por ondas de choque causadas por la presencia de cavitación ultrasónica cercana a la superficie. La cavitación produce gotas de tamaños dispares, por lo que es el principal causante de la diversidad de tamaños de gotas en el aerosol. La tasa

de producción del aerosol es proporcional a la intensidad acústica aplicada, mientras que el tamaño de las gotas depende de la frecuencia de la onda y las propiedades del fluido excitado (Ashokkumar, et al. 2016).

Para desarrollar pulverizadores que aprovechen el ultrasonido como principio de funcionamiento, es esencial contar con un modelo del fenómeno físico que permita conocer las características del aerosol en función de las propiedades del fluido a atomizar y los parámetros de diseño del atomizador.

problemática

Revisión bibliográfica

Söllner en 1936 realizó uno de los primeros análisis de la atomización ultrasónica, experimentalmente determinó que la cavitación acústica es el mecanismo causante de la desintegración del líquido. No obstante, Lang determinó en 1962 que el principio de atomización son las ondas capilares en la superficie líquida. Lang propuso una correlación para la mediana de la distribución de tamaños gotas del aerosol asumiendo que la mediana es proporcional a la longitud de onda capilar, la cual calculó con la ecuación de velocidad de ondas superficiales formulada por Kelvin para un líquido ideal (Rayleigh 1877). Lang determinó la constante de proporcionalidad con un análisis de regresión de datos experimentales. Peskin y Raco en 1963 realizaron un análisis de estabilidad lineal en la superficie líquida y determinaron que la tasa de atomización es proporcional a la profundidad de la capa líquida y a la intensidad acústica aplicada.

El modelo propuesto por Lang ha sido la base para el desarrollo de correlaciones más sofisticadas que consideran una mayor cantidad de parámetros para estimar diferentes diámetros medios, medianos y modas. Sindayihebura et al. (1997) desarrollaron una expresión para la longitud de onda capilar a partir de un análisis de estabilidad; usando esta expresión obtuvieron las correlaciones de cuatro diámetros medios. Rajan y Pandit (2001) identificaron tres números adimensionales relevantes en el proceso de atomización y propusieron una función exponencial de los números como coeficiente de proporcionalidad para estimar la moda de la distribución de gotas. Avvaru et al. (2006) propusieron una correlación basada en los mismos grupos adimensionales de Rajan y Pandit, utilizaron datos experimentales de fluidos newtonianos y no newtonianos para obtener una correlación de la media de la distribución que engloba fluidos de comportamiento pseudoplástico. Barba et al. (2009) desarrollaron una correlación basada en los grupos adimensionales de Rajan y Pandit para estimar la media de la distribución del aerosol de un alguinato. Barba et al. optimizaron la correlación aplicando pruebas estadísticas para minimizar la incertidumbre asociada al modelo. Ramisetty et al. (2013) continuaron la investigación de Avvaru et al. y propusieron una correlación para el diámetro medio de Sauter empleando datos experimentales de mezclas glicerina-agua y metanol-agua. Muñoz et al. (2018) realizaron un análisis dimensional para modificar los grupos adimensionales de Rajan y desarrollaron una correlación para la media de la distribución de un aerosol de una mezcla metanol-agua, así como de etanol y agua puros.

Los primeros modelos de la distribución de tamaños de gotas de un aerosol atomizado por ultrasonido consistieron en ajustar datos experimentales a diferentes funciones de probabilidad: Yasuda et al. (2005) ajustaron la distribución de gotas con una distribución normal; Sarkovic y Babovic (2005), Hedrih et al. (2006) y Kooji et al. (2019) obtuvieron ajustes precisos con la función Gamma generalizada incompleta. El modelado de la distribución basado en el

formalismo de máxima entropía ha sido estudiado por Sindayihebura et al. (1997), Dobre y Bolle (1998, 2001 y 2003), Dobre (2003) y Dumouchel et al. (2003), quienes utilizaron las entropías de Shannon y de Tsallis junto con diámetros medios experimentales para obtener las distribuciones de tamaños de gotas del aerosol.

Diversos estudios analíticos han buscado unificar las teorías de la cavitación y las ondas capilares. Boguslavskii y Éknadiosyants (1969) propusieron que la atomización se debe a ondas capilares excitadas por las ondas de choque consecuencia de la cavitación, y se basaron en la teoría de explosiones subacuáticas de Kirkwood y Bethe para proponer una expresión del perfil de las ondas capilares (Sachdev 2019). Khmelev et al. (2012, 2017) desarrollaron un método de optimización de la producción de aerosol fundamentado en la hipótesis de Boguslavskii y Éknadiosyants. Simon et al. (2015) comprobaron experimentalmente la hipótesis de ondas capilares excitadas por cavitación al observar que, cuando se inhibe la cavitación al desgasificar el líquido o aumentar la presión estática, se minimiza la producción de aerosol.

Los modelos estocásticos y analíticos desarrollados hasta ahora representan un avance en la comprensión del fenómeno de la atomización ultrasónica y permiten predecir los parámetros estadísticos de la distribución de tamaños de gotas con base en las variables físicas del proceso. No obstante, hasta ahora ningún modelo permite calcular la distribución que se obtendrá para un aerosol a partir de las propiedades del fluido a atomizar y los parámetros físicos del atomizador.

Contenido del trabajo

El presente trabajo plantea el desarrollo y validación un modelo de la distribución de tamaños de gotas de un aerosol atomizado por ultrasonido a partir de los parámetros físicos que modelan el proceso de atomización. Para ello, se analiza la influencia de las ondas capilares y de la cavitación en la atomización con la finalidad de identificar los parámetros y números adimensionales que rigen el proceso. Posteriormente, se desarrolla un modelo estocástico que permite estimar la distribución de tamaños de gotas resultantes a partir de los parámetros identificados. Finalmente, el modelo se emplea para estimar las distribuciones de cuatro ensayos experimentales y se comparan con las observadas experimentalmente. A través de un análisis estadístico se asocia un valor de confiabilidad a las estimaciones.

Primer capítulo

En el primer capítulo se estudia el proceso físico de la atomización ultrasónica. Se presenta una revisión del estudio de la atomización y los atomizadores existentes incluyendo los análisis de inestabilidad, números adimensionales y balances energéticos. Posteriormente, se presenta una revisión del estudio de la atomización ultrasónica: los procesos físicos involucrados, el análisis de inestabilidad y los números adimensionales derivados. Finalmente, se revisan las tecnologías y dispositivos comerciales y experimentales empleados para atomizar ultrasónicamente.

Segundo capítulo

En el segundo capítulo se estudian las metodologías desarrolladas para modelar un aerosol y se plantea un modelo para un aerosol atomizado ultrasónicamente. El capítulo empieza determinando las propiedades de un aerosol y estableciendo su descripción matemática. A

continuación, se presentan las metodologías para obtener la distribución representativa del aerosol, de las opciones desarrolladas se elige el modelado mediante el formalismo de máxima entropía. Se plantea un modelo del proceso físico y se derivan los números adimensionales. Posteriormente, se presenta la forma estocástica de las ecuaciones constitutivas con la finalidad de determinar los parámetros de mayor significancia física.

Tercer capítulo

El tercer capítulo presenta un análisis de regresión para desarrollar correlaciones de los diámetros medios que modelan al aerosol. A partir del modelo propuesto se desarrollan correlaciones para la longitud de onda de las ondas capilares. Tomando como base la correlación de la longitud de onda, se proponen dos modelos alternativos para estimar los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter del aerosol. Finalmente, los modelos se validan con datos experimentales y se realiza un análisis estadístico para determinar su confiabilidad.

Cuarto capítulo

En el cuarto capítulo se resuelve el formalismo de máxima entropía acoplado con las correlaciones desarrolladas para estimar la distribución de tamaño de gotas del aerosol. Dos alternativas para estimar el aerosol son presentadas y se validan resolviendo cuatro casos experimentales. Los resultados calculados se comparan con las distribuciones experimentales y se recurre a una prueba de bondad de ajuste para validar la confiabilidad de los modelos propuestos.

El presente estudio plantea un modelo para la estimación de la distribución de un aerosol atomizado mediante ultrasonido a partir de las propiedades del fluido a atomizar y los parámetros físicos del proceso de atomización. El resultado es una herramienta de utilidad para el diseño y optimización de atomizadores ultrasónicos.

Bibliografía

- Ashokkumar, Muthupandian, Francesca Cavaliere, Farid Chemat, Okitsu Kenji, Anandan Sambandam, Kyuichi Yasui, y Bogdan Zisu. 2016. *Handbook of Ultrasonics and Sonochemistry*. Springer Reference.
- Avvaru, Balasubrahmanyam, Mohan Narayan Patil, Parag R. Gogate, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2006. «Ultrasonic atomization: Effect of liquid phase properties.» *Ultrasonics* 44 (2): 146-158.
- Ballal, Dilip R., y Arthur Henry Lefebvre. 1981. «Flame Propagation in Heterogeneous Mixtures of Fuel Droplets, Fuel Vapor and Air.» *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*. Waterloo: The Combustion Institute. 321-328.
- Barba, Anna Angela, Matteo d'Amore, Sara Cascone, Gaetano Lamberti, y Giuseppe Titomanlio. 2009. «Intensification of biopolymeric microparticles production by ultrasonic assisted atomization.» *Chemical Engineering and Processing* 48 (10): 1477-1483.
- Boguslavskii, Yu. Ya., y O. K. Éknadiosyants. 1969. «Physical Mechanism of the Acoustic Atomization of a Liquid.» *Soviet Physics - Acoustics* 15 (1): 17-24.
- BP. 2020. *Energy Outlook*. Londres: BP p.l.c.
- BP. 2020. *Statistical Review of World Energy*. Londres: BP p.l.c.
- Dobre, Miruna. 2003. *Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques le formalisme de l'entropie maximale*. PhD Thesis, Département de mécanique, Faculté des sciences appliquées, Louvain-la-Neuve: Université catholique de Louvain.
- Dobre, Miruna, y Léon Bolle. 2002. «Practical design of ultrasonic spray devices experimental testing of several atomizer geometries.» *Experimental Thermal and Fluid Science* 26 (2-4): 205-211.
- . 1998. «Theoretical Prediction of Ultrasonic Spray Characteristics Using the Maximum Entropy Formalism.» *14th ILASS-Europe*. Manchester: ILASS.
- . 2001. «Tsallis Generalized Entropy and Maximum Entropy Formalism for Spray Drops Size Distribution Function Prediction.» *17th ILASS-Europe*. Zürich: Institute for Liquid Atomization and Spray Systems. 915-940.
- Dumouchel, Christophe, Daniel Sindayihebura, y Léon Bolle. 2003. «Application of the Maximum Entropy Formalism on Sprays Produced by Ultrasonic Atomizers.» *Particle and Particle Systems Characterization* 20 (2): 150-161.
- Gallego Juárez, Juan A., y Karl F. Graff. 2015. *Power Ultrasonics*. Cambridge: Elsevier.
- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. 2017. *México reafirma su apoyo y compromiso con el Acuerdo de París para detener los efectos del cambio climático global*. 3 de Junio. Último acceso: 4 de Abril de 2019. <https://www.gob.mx/inecc/articulos/mexico-reafirma-su-apoyo-y-compromiso-con-el-acuerdo-de-paris-para-detener-los-efectos-del-cambio-climatico-global-110277?idiom=es>.
- International Energy Agency. 2020. *World Energy Balances*. Paris: IEA Publications.
- Jónsson, Bergþór Lár, Garðar Örn Garðarsson, Óskar Pétursson, Sigurður Bjarki Hlynsson, y Joseph Timothy Foley. 2015. «Ultrasonic Gasoline Evaporation Transducer - Reduction of Internal Combustion Engine Fuel Consumption using Axiomatic Design.» *International Conference on Axiomatic Design*. Florence: Elsevier. 168-173.

- Khmelev, Vladimir N., Andrey V. Shalunov, Roman N. Golyh, Viktor A. Nesterov, Roman S. Dorovskikh, y Anna V. Shalunova. 2017. «Providing the Efficiency and Dispersion Characteristics of Aerosols in Ultrasonic Atomization.» *Journal of Engineering Physics and Thermophysics* 90 (4): 831–844.
- Khmelev, Vladimir N., Roman N. Golyh, Andrey V. Shalunov, Anna V. Shalunova, y Dmitry V. Genne. 2012. «Revelation of optimum modes of ultrasonic influence for atomization of viscous liquids by mathematical modelling.» *International Conference and Seminar of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices*. Altai: IEEE. 114-123.
- Kooij, Stefan, Alina Astefanei, Garry L. Corthals, y Daniel Bonn. 2019. «Size distributions of droplets produced by ultrasonic nebulizers.» *Scientific Reports* 9: 6128.
- Lang, Robert J. 1962. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *The Journal of the Acoustical Society of America* 34 (1): 6-8.
- Muñoz, Mariana Isabel, Simon Goutier, Sylvie Foucaud, Gilles Mariaux, y Thierry Poirier. 2018. «Droplet size prediction in ultrasonic nebulization for non-oxide ceramic powder synthesis.» *Ultrasonics* 84: 25-33.
- Peskin, Richard L., y Roland J. Raco. 1963. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *The Journal of the Acoustical Society of America* 35 (9): 1378-1381.
- Rajan, Raghavachari, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2001. «Correlations to Predict Droplet Size in Ultrasonic Atomisation.» *Ultrasonics* 39 (4): 235-255.
- Ramisetty, Kiran A., Aniruddha Bhalchandra Pandit, y Parag R. Gogate. 2013. «Investigations into ultrasound induced atomization.» *Ultrasonics Sonochemistry* 20 (1): 254-264.
- Rayleigh, John William Strutt. 1877. *The Theory of Sound*. New York: Dover Publications.
- Reif, Konrad. 2015. *Gasoline Engine Management: Systems and Components*. Springer Vieweg.
- Richards, George A., y Arthur Henry Lefebvre. 1989. «Turbulent Flame Speeds of Hydrocarbon Fuel Droplets in Air.» *Combustion and Flame* 78 (3-4): 299-307.
- Söllner, Karl. 1936. «The Mechanism of the Formation of Fogs by Ultrasonic Waves.» *Transactions of the Faraday Society* 32: 1532-1536.
- Sachdev, P. L. 2019. *Shock Waves & Explosions*. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC.
- Sarkovic, Dragan, y Vukota M. Babovic. 2005. «On the Statistics of Ultrasonically Produced Water Droplets.» *Zeitschrift für Naturforschung A* 60 (7): 489-493.
- Secretaría de Energía. 2019. *Balance Nacional de Energía*. Ciudad de México: Dirección General de Planeación e Información Energéticas.
- Simon, Julianna C., Oleg A. Sapozhnikov, Vera A. Khokhlova, Lawrence A. Crum, y Michael R. Bailey. 2015. «Ultrasonic atomization of liquids in drop-chain acoustic fountains.» *Journal of fluid mechanics* 766: 129-146.
- Sindayihebura, Daniel, Jean Cousin, y Christophe Dumouchel. 1997. «Experimental and Theoretical Study of Sprays Produced by Ultrasonic Atomisers.» *Particle and Particle Systems Characterization* 14 (2): 93-101.
- Yasuda, Keiji, Yoshiyuki Bando, Soyoko Yamaguchi, Masaaki Nakamura, Akiyoshi Oda, y Yasuhito Kawase. 2005. «Analysis of concentration characteristics in ultrasonic atomization by droplet diameter distribution.» *Ultrasonics Sonochemistry* 12 (1-2): 37-41.

1 Atomización ultrasónica

La atomización ultrasónica produce aerosoles conformados por gotas pequeñas y de tamaños homogéneos, con un bajo consumo energético y empleando dispositivos de bajo costo. La naturaleza del proceso físico y las tecnologías disponibles permiten controlar las características del aerosol, el tamaño de las gotas es función de la frecuencia y la tasa de producción de aerosol depende de la intensidad acústica. La atomización ultrasónica surge de la inestabilidad de Faraday y las ondas de choque producto de la cavitación ultrasónica. Para poder conocer la distribución de tamaño de gotas del aerosol se requiere un modelo representativo del fenómeno físico que involucre ambos procesos.

1.1 Atomización

La atomización es la fractura de un cuerpo líquido inmerso en un medio gaseoso en gotas de menor tamaño que el cuerpo original, y es causada por fuerzas de excitación externas que inducen inestabilidades en el cuerpo líquido. Esta fragmentación recibe el nombre de atomización primaria. Las gotas fragmentadas pueden continuar segmentándose hasta alcanzar un tamaño estable, esta fragmentación recibe el nombre de atomización secundaria.

atomización
primaria y
secundaria

Tensión superficial

Las moléculas que conforman a una sustancia sienten atracción mutua. La fuerza causante de la atracción intermolecular recibe el nombre de cohesión. En la frontera de un cuerpo líquido las moléculas limitan con moléculas de otro medio que las atraen con una fuerza menor, produciendo un desbalance que se ilustra en la *Figura 1.1a*. El cuerpo líquido busca reducir su superficie para minimizar el desbalance. El trabajo que realizan las moléculas líquidas para crear una unidad de superficie se llama densidad de energía superficial. El desbalance produce una fuerza resultante que actúa normal a la superficie líquida comprimiéndola, como se representa en la *Figura 1.1b*. El valor de la compresión depende de la curvatura de la geometría, por ende, la compresión se expresa en términos de una fuerza por unidad de longitud. La densidad de energía superficial y la fuerza por unidad de longitud son la misma propiedad y se

Atomización

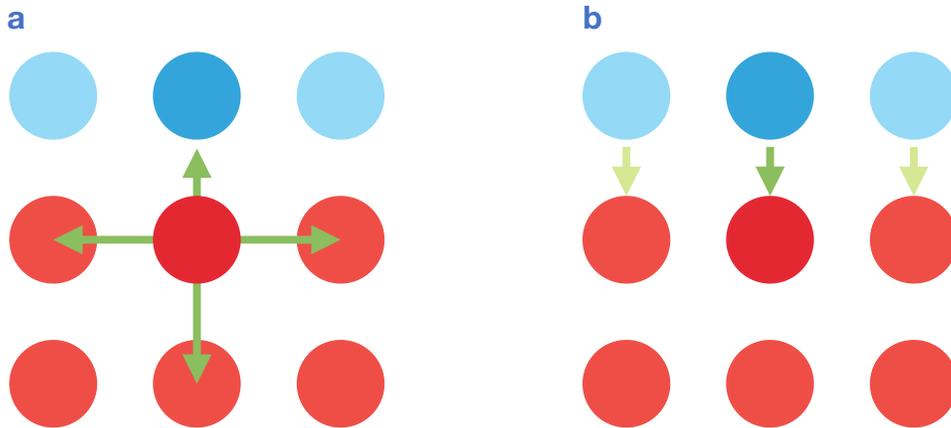


Figura 1.1: En la interfase entre una sustancia líquida y una gaseosa (a) las moléculas líquidas, representadas en color rojo, sienten una mayor atracción por otras moléculas líquidas que por las gaseosas, representadas en azul. (b) La fuerza resultante del desbalance actúa normal a la superficie, comprimiéndola.

denominan *tensión superficial* σ . La compresión causada por la tensión superficial provoca que la presión justo debajo de la superficie sea mayor a la presión externa (Lautrup 2011).

modelado de la
tensión
superficial

La tensión superficial se modela como una condición de frontera, pues únicamente actúa en la interfaz. Los esfuerzos normales y tangenciales en la superficie se equiparan con la tensión superficial, la cuál depende localmente de la curvatura de la superficie. La *Ecuación 1.1* es la condición de frontera para los esfuerzos normales y la *Ecuación 1.2* para los tangenciales, en ellas \vec{T} es el *tensor de esfuerzos*, \hat{n} es el *vector unitario normal a la superficie* y \hat{t} el *vector unitario tangencial a la superficie* (Bush 2011):

$$\hat{n} \cdot \vec{T} \cdot \hat{n} = \sigma \nabla \cdot \hat{n} \quad 1.1$$

$$\hat{n} \cdot \vec{T} \cdot \hat{t} = \nabla \sigma \cdot \hat{t} \quad 1.2$$

Análisis dimensional

Para comprender el efecto de la tensión superficial en la atomización, se estudia el caso de una gota inmersa en un flujo gaseoso, representado en la *Figura 1.2*. Las variables son las propiedades de la gota: *tensión superficial* σ , *viscosidad* μ , *densidad* ρ y su *diámetro* l ; así como la *velocidad del flujo* v y la *aceleración de gravedad* g . El teorema de Buckingham nos indica que existen tres números adimensionales.

El *número de Reynolds* Re compara las fuerzas externas con la viscosidad de la gota:

$$Re = \frac{\rho v l}{\mu} \quad 1.3$$

El *número de Froude* Fr compara el efecto de las fuerzas externas con la gravedad:

$$Fr = \frac{v^2}{g l} \quad 1.4$$

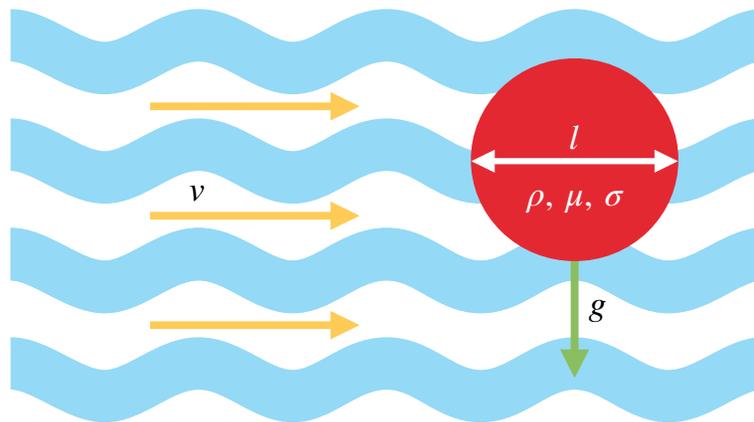


Figura 1.2: Representación de una gota de diámetro l , densidad ρ , viscosidad μ y tensión superficial σ inmersa en un flujo gaseoso con una velocidad característica v , sujeta a una aceleración de gravedad g .

El *número de Bond* Bo compara el efecto de la gravedad con la tensión superficial:

$$Bo = \frac{\rho g l^2}{\sigma} \quad 1.5$$

Cuando el número de Bond vale uno, el efecto de la tensión superficial y de la gravedad es equivalente. La distancia característica que permite que el número de Bond valga uno recibe el nombre *longitud capilar* l_c y representa la distancia crítica bajo la cual el efecto de la gravedad comienza a ser despreciable:

$$\frac{\rho g l_c^2}{\sigma} = 1 \Leftrightarrow l_c = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho g}} \quad 1.6$$

Cuando la escala geométrica del fenómeno es mucho menor a la longitud capilar las fuerzas externas y la tensión superficial dominan su dinámica, por tal motivo resultan de mayor utilidad números adimensionales que ponderan el efecto de la tensión superficial con las fuerzas externas y con la viscosidad. Estos números pueden obtenerse a partir de los grupos anteriormente mencionados (Lambert 2013).

El *número de Weber* We compara el efecto de las fuerzas externas con la tensión superficial, se obtiene a partir de los números de Froude y Bond:

$$We = Fr Bo = \frac{\rho v^2 l}{\sigma} \quad 1.7$$

El *número de capilaridad* Ca compara los efectos de la viscosidad con la tensión superficial, se obtiene a partir de los números de Weber y Reynolds:

$$Ca = \frac{We}{Re} = \frac{\mu v}{\sigma} \quad 1.8$$

Atomización

Fractura de un cuerpo líquido

El proceso de fractura es consecuencia de un desbalance entre las fuerzas externas que deforman el cuerpo líquido, la fuerza de viscosidad que se opone la deformación y la fuerza de tensión superficial que busca minimizar la superficie del cuerpo (Lefebvre y McDonell 2017).

Gota

En el caso de una gota inmersa en un flujo gaseoso, la fractura comienza cuando el arrastre aerodinámico se equipara con las fuerzas de tensión superficial:

$$c_D \frac{\pi l^2}{4} \frac{\rho v^2}{2} = \pi l \sigma \quad 1.9$$

donde c_D es el *coeficiente de arrastre*. El *número de Weber crítico* We_c indica el punto de equilibrio entre la tensión superficial y el arrastre, una mayor velocidad o un mayor diámetro causan inestabilidad en la gota y esta se fractura.

$$\Leftrightarrow \frac{\rho v^2 l}{\sigma} = \frac{8}{c_D} = We_c \quad 1.10$$

Chorro

En el caso de un chorro líquido inmerso en un medio gaseoso, la tensión superficial *incrementa la presión interna del chorro* en Δp , donde l representa el *diámetro del chorro*:

$$\Delta p = \frac{\sigma}{l} \quad 1.11$$

El exceso de presión produce un estrechamiento del diámetro del chorro en ciertas secciones a lo largo de su longitud y un ensanchamiento en otras, creando una perturbación en forma de onda superficial. Cuando la longitud de onda de la perturbación es menor a la circunferencia del chorro, la presión es mayor en las secciones ensanchadas que en las estrechadas, regresando al chorro a su posición de equilibrio. Si la longitud de onda es mayor a la circunferencia del chorro, la presión es mayor en las secciones estrechadas que en las ensanchadas, lo cual separa las secciones entre sí y el chorro se fragmenta. Este fenómeno se conoce como la inestabilidad de Rayleigh-Plateau.

Las perturbaciones causadas por el arrastre de un medio gaseoso en la superficie del chorro producen distintos modos de fractura. Ohnesorge desarrolló un criterio para clasificar los modos de atomización basado en los números adimensionales de *Reynolds* Re y de *Ohnesorge* Oh , también conocido como el número de estabilidad o de viscosidad (Lefebvre y McDonell 2017):

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \sigma l}} \quad 1.12$$

Reitz identificó cuatro modos de fractura sustentados en el trabajo de Ohnesorge, *Figura 1.3*:

1. Inestabilidad de Rayleigh-Plateau: el chorro se fractura en gotas de un diámetro similar al del chorro.
2. Primer modo de arrastre: el arrastre acelera la fractura del chorro, las gotas resultantes son de un diámetro similar al chorro.
3. Segundo modo de arrastre: el arrastre produce que el chorro oscile induciendo ondas en la superficie, se obtienen gotas de menor tamaño que el diámetro del chorro.

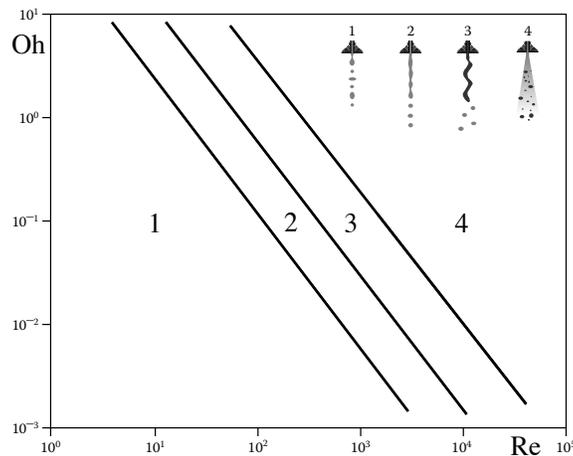


Figura 1.3: Modos de fractura de un chorro en función de los números de Reynolds y Ohnesorge: (1) inestabilidad de Rayleigh-Plateau, (2) primer modo de arrastre, (3) segundo modo de arrastre y (4) atomización.

Fuente: Lefebvre y McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. CRC Press.

4. Atomización: el arrastre fragmenta al chorro en gotas pequeñas.

Atomizadores

La mayoría de los atomizadores eyectan un cuerpo líquido a alta velocidad en un medio gaseoso para que el arrastre lo desestabilice, como se analizó en los ejemplos anteriores. No obstante,

Tabla 1.1: Tipos de atomizadores.

Principio físico	Aerosol	Aplicaciones
Arrastre por alta velocidad	Gotas de tamaños heterogéneos eyectadas a alta velocidad	Combustión
Impacto de un líquido y un gas	Gotas de tamaños heterogéneos eyectadas a alta velocidad	Refrigeración, combustión
Presión electrostática	Gotas pequeñas eyectadas a baja velocidad	Impresoras, recubrimientos superficiales
Vibraciones ultrasónicas	Gotas pequeñas y homogéneas eyectadas a baja velocidad	Humidificación, suministro de medicamentos

Fuente: Lefebvre y McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. CRC Press.

Atomización

existen diferentes principios físicos que inducen inestabilidades en el cuerpo líquido para fragmentarlo. La *Tabla 1.1* describe los principales mecanismos de atomización comerciales.

1.2 Atomización acústica

La atomización ultrasónica es el proceso de eyección de gotas desde una interfaz líquido-gaseosa por la acción de ondas acústicas de alta frecuencia e intensidad. Una parte de las gotas eyectadas se desprenden de los ápices de ondas capilares que se forman en la superficie del líquido, las gotas restantes son consecuencia de ondas de choque causadas por burbujas de gas que implosionan debajo de la superficie. La formación de ondas capilares se conoce como inestabilidad de Faraday, mientras que la formación e implosión de burbujas de gas por la onda acústica se llama cavitación ultrasónica.

Inestabilidad de Faraday

Un cuerpo líquido depositado sobre una superficie que oscila produce ondas superficiales en la superficie del fluido. Las ondas superficiales forman diferentes estructuras dependiendo de la

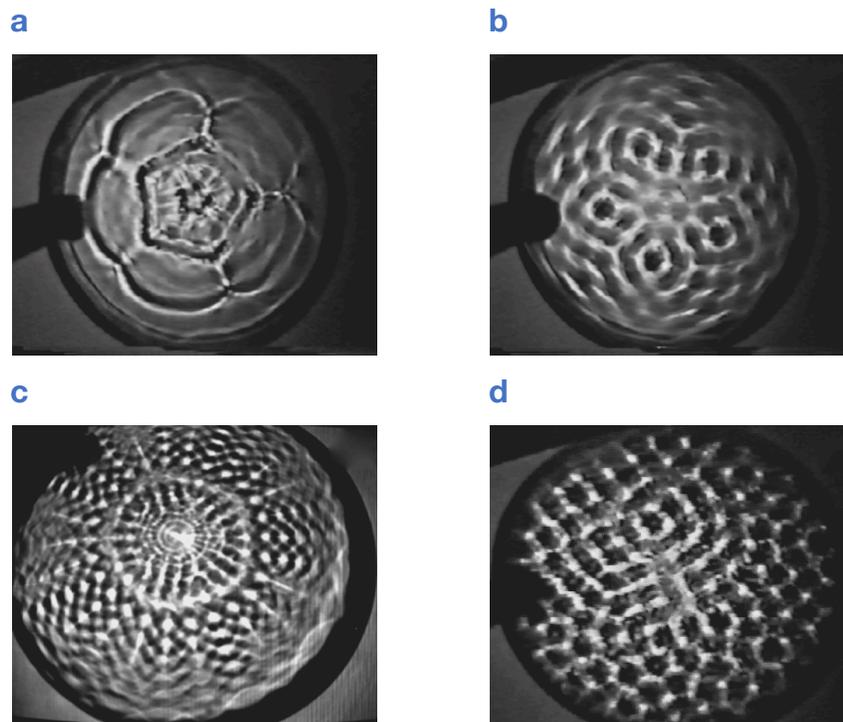


Figura 1.4: Ondas superficiales de Faraday usando FC-75 como líquido de trabajo: (a) frecuencia de 8.7 Hz y amplitud de 40 μm (b) frecuencia de 35 Hz y amplitud de 55 μm (c) frecuencia de 35 Hz y amplitud de 65 μm (d) frecuencia de 35 Hz y amplitud mayor a 65 μm .

Fuente: Barrio et al. Robust symmetric patterns in the Faraday experiment. Physical Review.

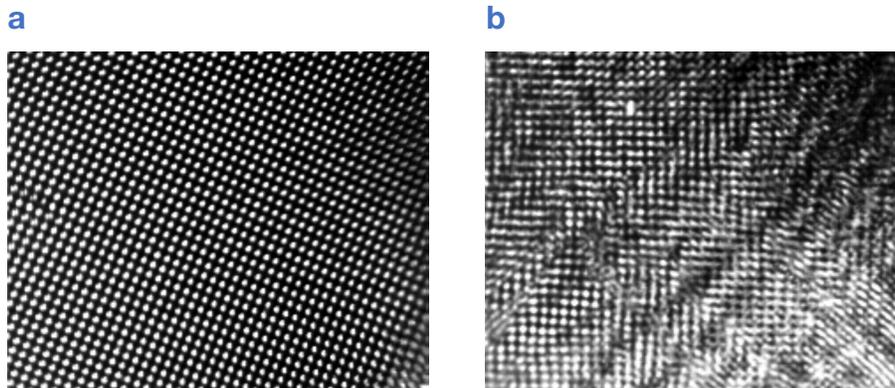


Figura 1.5: Ondas superficiales de Faraday en agua para frecuencias superiores a los 100 Hz: (a) estructura cuadrada estable (b) estructura caótica previa a la atomización.

Fuente: Dobre, Miruna. 2003. Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques: le formalisme de l'entropie maximale. Université catholique de Louvain.

frecuencia y la amplitud de oscilación de la superficie, en la *Figura 1.4* se muestran cuatro ejemplos. Para frecuencias bajas se forman ondas con longitudes de onda mayores a la longitud capilar, por lo que el fenómeno es dominado por la gravedad y las ondas superficiales son ondas de gravedad. Para frecuencias grandes la longitud de onda es menor a la longitud capilar y el fenómeno es dominado por la tensión superficial, como consecuencia las ondas superficiales son de tipo capilar. Faraday fue el primero en documentar este fenómeno de resonancia, por lo que ha recibido el nombre de inestabilidad de Faraday (Kumar 1996).

Los análisis de la inestabilidad de Faraday han demostrado que, para frecuencias mayores a 100 Hz y líquidos de viscosidades similares o menores a la del agua, las estructuras que se forman siempre son ondas capilares estacionarias cuadradas, como ilustra la *Figura 1.5a* (Müller, et al. 1998). Si la amplitud de oscilación incrementa más allá de un valor crítico, el patrón cuadrado de las ondas se pierde y tiende al caos, como se observa en la *Figura 1.5b*. En ese momento las ondas comienzan la expulsión de gotas (Dobre 2003). Por la frecuencia con que se opera durante la atomización ultrasónica, la cual es mayor a 20 kHz, las ondas capilares forman estructuras cuadradas a menos que se utilicen líquidos de gran viscosidad.

estructura de las ondas capilares para la atomización ultrasónica

Ultrasonido de potencia

Originalmente la acústica estudiaba las ondas percibidas por el oído humano, con el tiempo el campo se extendió a frecuencias mayores (ultrasonido $f > 20$ kHz) y menores (infrasonido $f < 20$ Hz). El ultrasonido de potencia es la rama de la acústica que estudia las ondas ultrasónicas de alta intensidad, es decir, ondas que modifican las propiedades del medio donde se propagan. Los efectos del ultrasonido de potencia actualmente tienen aplicaciones en sólidos (manufactura), en gases (levitación ultrasónica) y en líquidos (sonoquímica). Los principales mecanismos de activación del ultrasonido de potencia en líquidos son la cavitación ultrasónica y el viento de cuarzo (Gallego Juárez y Graff 2015).

Atomización acústica

Cavitación ultrasónica

La aplicación de ondas ultrasónicas de alta intensidad en líquidos produce los efectos fisicoquímicos que estudia la sonoquímica. La cavitación es el mecanismo encargado de generar dichos efectos.

En el estudio de la cavitación ultrasónica, la presión vacuométrica requerida para evaporar un líquido se conoce como umbral de cavitación estático, para un líquido puro depende únicamente de las fuerzas de unión molecular, razón por la que los valores son de cientos de megapascales. Un líquido real tiene núcleos de cavitación, es decir, impurezas o heterogeneidades. Estas impurezas disminuyen el valor del umbral a decenas de megapascales. El umbral de cavitación acústico es la amplitud de la onda de presión acústica requerida para que se formen las burbujas de cavitación y es común expresarlo en términos de la intensidad acústica equivalente. El valor del umbral de cavitación incrementa con la frecuencia de la onda partiendo del umbral estático. El valor del umbral se mantiene constante hasta alcanzar una frecuencia de corte a partir de la cuál el valor se eleva exponencialmente con la frecuencia. Esto ocurre porque la reducción en la duración del período limita al proceso de difusión rectificada.

umbral de
cavitación

difusión
rectificada

Cuando los núcleos de cavitación se exponen a ondas acústicas de suficiente intensidad, se concentran y forman burbujas. Las burbujas se expanden durante el periodo de rarefacción y se contraen durante el de compresión. Cuando una burbuja se expande más gas puede ingresar en ella debido a su mayor superficie que el que puede escapar cuando se contrae, este proceso se llama difusión rectificada. Eventualmente, la burbuja alcanza un tamaño resonante y puede explotar violentamente o desintegrarse en pequeñas burbujas. El primer caso se conoce como cavitación transitoria y se caracteriza por una repentina contracción, generando presiones locales de hasta 2 000 atm, temperaturas de más de 5 000 °C y sonoluminiscencia. Si no existen perturbaciones en la vecindad de la burbuja, esta colapsa de forma simétrica y genera una onda de choque. Si existe alguna frontera en la vecindad de la burbuja, ésta colapsa asimétricamente y genera un microflujo de hasta 100 m/s cuya fuerza puede erosionar la

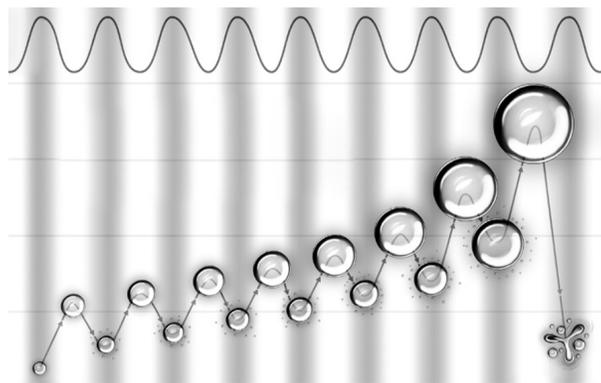


Figura 1.6: Proceso de difusión rectificada, las zonas claras representan el periodo de rarefacción mientras las oscuras representan el de compresión. Al alcanzar el tamaño resonante la burbuja colapsa.

Fuente: Gallego y Graff. 2015. Power Ultrasonics. Elsevier.

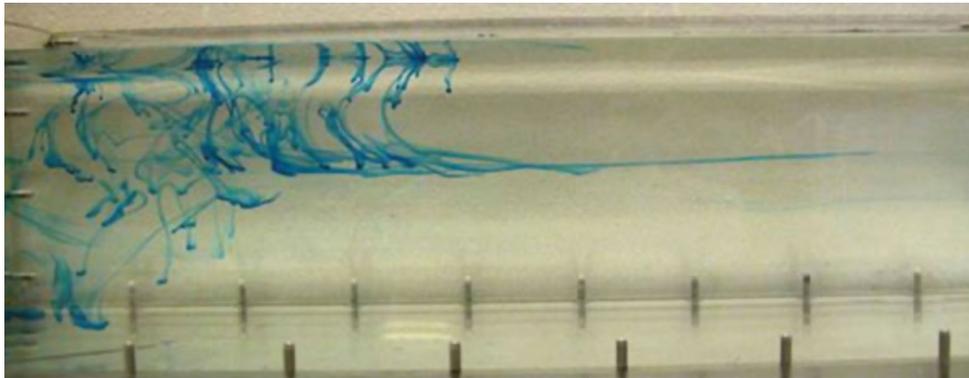


Figura 1.7: Viento de cuarzo en un tanque de agua con gotas de tinta azul, la velocidad del flujo es de 20 mm/s y es generada por un transductor de 2.25 MHz ubicado a la izquierda del tanque. Los tornillos en la parte inferior del tanque se encuentran a 55 mm de separación.

Fuente: Ashokkumar, et al. 2016. Handbook of Ultrasonics and Sonochemistry. Springer.

superficie de la frontera. Dichos colapsos generan los cambios en el medio que caracterizan a una burbuja activa. Si la burbuja se desintegra antes de colapsar, el fenómeno se llama cavitación estable y se dice que la burbuja es inactiva, es decir, no produce actividad sonoquímica al no generar ondas de choque. Los restos de la burbuja comienzan el proceso de difusión rectificada de nuevo (Gallego Juárez y Graff 2015). La *Figura 1.6* muestra el proceso de difusión rectificada y colapso de la burbuja.

Flujo acústico

Un fluido no solo se comprime en respuesta a las ondas acústicas, también fluye ante su propagación. Las ondas acústicas son ondas viajeras que transportan materia al propagarse y disiparse en un medio. El transporte de materia ocurre por diferencias de presión en distintos puntos del fluido. Los gradientes de presión son consecuencia de la disipación de la onda acústica en el medio, pues las oscilaciones son de mayor intensidad en zonas adyacentes al emisor del campo acústico que en zonas distantes. El gradiente de la intensidad acústica produce una fuerza de radiación acústica sobre el medio que desplaza gotas del fluido junto con la onda al propagarse. El flujo inducido recibe el nombre de viento de cuarzo y es inherente a la propagación del sonido, no obstante, solo se observa de forma apreciable en campos acústicos de alta intensidad y frecuencia, *Figura 1.7* (Ashokkumar, et al. 2016)

Si bien el viento de cuarzo, a diferencia de la cavitación, no participa activamente en la generación de aerosol, su efecto perturba el proceso de atomización.

1.3 Generador ultrasónico

Cuando las ondas ultrasónicas de alta intensidad producen algún efecto irreversible en el medio en el que se propagan, se dice que ocurre una reacción ultrasónica. El dispositivo que produce una reacción ultrasónica es un generador ultrasónico. Un generador ultrasónico consta de dos

Generador ultrasónico

componentes fundamentales: el generador acústico que produce las oscilaciones mecánicas y el sonotrodo que se encarga de irradiar el campo acústico.

Generador acústico

Se llama generador acústico al actuador que produce las vibraciones mecánicas que posteriormente el sonotrodo irradia. Los generadores acústicos se conforman por una fuente de energía y un transductor que la transforma en vibraciones.

Transductor

Es el componente que genera las oscilaciones mecánicas al transformar la energía suministrada en energía acústica. Existen transductores electromecánicos (piezoeléctricos y magnetostrictivos), neumáticos e hidráulicos (silbato y sirenas), ópticos (láseres y microondas) y mecánicos.

Para las aplicaciones con frecuencias en el rango de cientos de kilohertz y superiores, los transductores electromecánicos son los que pueden producir las vibraciones requeridas. Los transductores electromecánicos se clasifican en dos tipos de acuerdo con el material del cual están fabricados. Los transductores magnetostrictivos se caracterizan por una larga vida útil, eficiencias menores al 50% y operan hasta frecuencias del orden de los kilohertz. Los transductores piezoeléctricos presentan eficiencias de hasta 95% y operan desde frecuencias infrasónicas hasta las centenas de megahertz, suelen sobrecalentarse y su eficiencia disminuye con el tiempo de uso (Gallego Juárez y Graff 2015).

En la atomización ultrasónica, dadas las altas frecuencias y la baja potencia relativas a otras aplicaciones del ultrasonido de potencia, los transductores utilizados son los cristales piezoeléctricos de titanato zirconato de plomo (PZT). La *Tabla 1.2* expresa los parámetros que describen un transductor piezoeléctrico atomizador comercial.

Fuente de potencia

Para el caso de actuadores electromecánicos, el componente que produce las ondas eléctricas que otorgan potencia al transductor se denomina generador electrónico. El generador electrónico puede ser un sistema de lazo abierto o de lazo cerrado. Para el primer caso el generador produce un voltaje de corriente alterna fijo. Para el segundo caso, el generador sintoniza la frecuencia del oscilador con la frecuencia de resonancia del sistema. Los sistemas más avanzados incorporan un control de amplitud para poder controlar la intensidad ultrasónica deseada. El generador se compone de un oscilador electrónico que produce la señal con la forma y frecuencia deseada para el transductor, de un amplificador que eleva la señal al voltaje requerido y suministra la corriente que el transductor demanda, y de un acoplador de impedancias que maximiza la potencia real suministrada al transductor.

Sonotrodo

Análogo a un electrodo, el sonotrodo es el componente que recibe las vibraciones producidas por el generador para irradiar el campo acústico al medio, definiendo las características del

Tabla 1.2: Parámetros de un cristal atomizador piezoeléctrico.

Parámetro	Unidades	Aplicaciones
Frecuencia de operación	Hz	Frecuencia de resonancia.
Potencia	W	Potencia nominal a la que el cristal opera.
Voltaje	V	Voltaje pico a pico máximo al que el cristal opera.
Impedancia en resonancia	Ω	Resistencia eléctrica del cristal operando en resonancia.
Capacitancia estática	nF	Capacitancia del cristal en corriente continua.
Superficie de radiación	mm ²	Área del piezoeléctrico que activamente vibra.
Coefficiente de acoplamiento electromecánico	%	Relación entre la energía eléctrica suministrada y la energía elástica resultante por la deformación.
Tiempo de vida	hrs	Tiempo de operación del cristal antes de fallar.

Fuente: PI Ceramic. 2016. PI Solutions.

campo de la manera que el proceso requiera. Para la atomización ultrasónica se clasifican cinco tipos de sonotrodos, cada uno con un proceso de atomización específico:

- a. La opción más simple de producir la atomización es poner en *contacto directo* el generador acústico y el líquido. Cuando el líquido se suministrar sobre el cristal piezoeléctrico a la misma tasa a la que se atomiza, el proceso es de tipo capa fina. Cuando el cristal es sumergido en el líquido, el proceso es de tipo capa profunda, *Figura 1.8a*. En el caso de la atomización de capa profunda el viento de cuarzo es apreciable produciendo una fuente en la superficie líquida.
- b. Las *puntas amplificadoras* son cuerpos de aluminio o titanio acoplados al generador acústico que amplifican la amplitud de las vibraciones al reducir el área de radiación, *Figura 1.8b*. Las puntas amplificadoras se diseñan para ser resonantes con la frecuencia del transductor. La longitud de la punta amplificadora debe ser la mitad de la longitud de onda de la onda mecánica. Debido a las limitaciones de las propiedades mecánicas de los materiales comerciales, las puntas amplificadoras sólo operan hasta decenas de kilohertz. El caudal se suministra directamente a la punta por lo que es una atomización de capa fina.
- c. Los *osciladores de ondas acústicas superficiales* son finas láminas de cristales piezoeléctricos depositados sobre un papel capilar que irradian las ondas acústicas a través de ondas superficiales de Rayleigh, *Figura 1.8c*. El fluido se atomiza al ser depositado sobre el papel capilar. Este tipo de sonotrodos aún son experimentales; sus ventajas son un bajo consumo energético y capacidad de operar frecuencias en el rango de decenas de megahertz. Por su método de atomización se trata de un proceso de capa fina (Darmawan, et al. 2015).

Generador ultrasónico

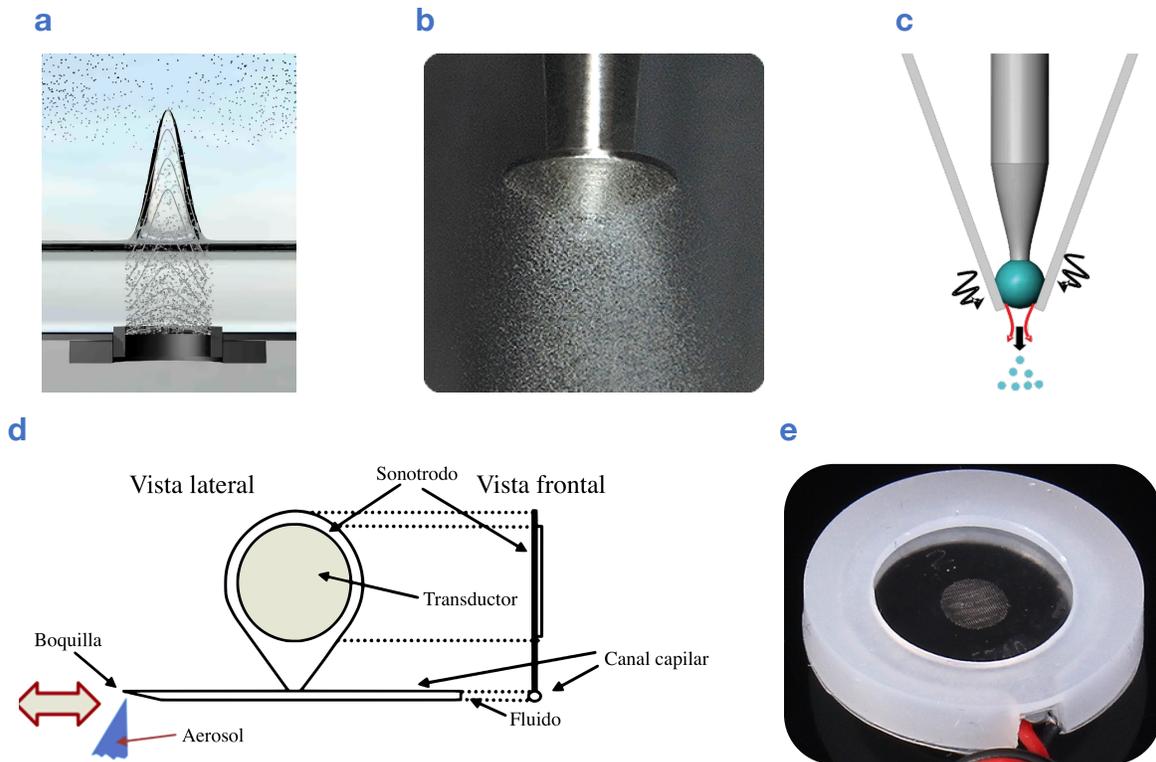


Figura 1.8: Tipos de sonotrodos para atomización: (a) generador acústico directo (b) punta amplificadora (c) oscilador de onda superficial (d) capilar (e) microtoberas.

Fuente: (a) Derrick, Jason. 2015. *How Ultrasonic Humidifiers Work*: blog.stulz-usa.com.

(b) Sono-Tek. 2018. *Operating Considerations*: sono-tek.com.

(c) Darmawan, et al. 2015. *Rapid and Sustainable Surface Acoustic Wave Atomizer*. *Aerosol Science and Technology*.

(d) Tembely, et al. 2011. *Prediction and evolution of drop-size distribution for a new ultrasonic atomizer*. *Applied Thermal Engineering*.

(e) ICStation. 2018. *Micropores Ultrasonic Atomizing Transducer*: icstation.com.

- d. El atomizador tipo *capilar* consiste en un conducto capilar que transporta al líquido. Un disco piezoeléctrico acoplado al conducto lo hace vibrar atomizando el líquido que expulsa, *Figura 2.3d*. Este tipo de sonotrodo es experimental y ha sido exitosamente probado a una frecuencia de 192 kHz (Tembely, et al. 2011).
- e. Las *microtoberas* son microporos cónicos en una hoja metálica acoplada a un transductor, *Figura 2.3e*. La hoja con los microporos se hace vibrar y se coloca en contacto con el líquido a atomizar. El fluido ingresa a la tobera y es expulsado como una gota. A pesar de ser atomizadores que utilizan la vibración ultrasónica como mecanismo de atomización, trabajan con un principio físico distinto a los demás atomizadores ultrasónicos, pues no involucra cavitación ni inestabilidad de Faraday. Sus ventajas son su bajo consumo

energético y su capacidad de determinar el tamaño de las gotas mediante el tamaño de las toberas en lugar de la frecuencia (Meacham 2006).

Para el análisis de la atomización ultrasónica se modela la atomización directa de capa fina, debido a la posibilidad de atomizar con frecuencias desde kilohertz hasta megahertz, por la posibilidad de controlar el gasto volumétrico atomizado, y debido a que es la forma de atomización ultrasónica más estudiada.

planteamiento
del proceso de
atomización

Bibliografía

- Ashokkumar, Muthupandian, Francesca Cavalieri, Farid Chemat, Okitsu Kenji, Anandan Sambandam, Kyuichi Yasui, y Bogdan Zisu. 2016. *Handbook of Ultrasonics and Sonochemistry*. Springer Reference.
- Barrio, Roberto A., José Luis Aragón, Carlos A. B. Varea, Marta E. Torres, Irene Jiménez, y Francisco Montero de Espinosa. 1997. «Robust symmetric patterns in the Faraday experiment.» *Physical Review E* 56 (4): 4222-4230.
- Bush, John W. M. 2011. «Surface Tension.» En *New Trends in the Physics and Mechanics of Biological Systems*. Oxford: Oxford University Press.
- Darmawan, Marten, Jaehyun Lee, Jihoon Kim, y Doyoung Byun. 2015. «Rapid and Sustainable Surface Acoustic Wave Atomizer.» *Aerosol Science and Technology* 49 (12): 1271-1280.
- Dobre, Miruna. 2003. *Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques le formalisme de l'entropie maximale*. PhD Thesis, Département de mécanique, Faculté des sciences appliquées, Louvain-la-Neuve: Université catholique de Louvain.
- Gallego Juárez, Juan A., y Karl F. Graff. 2015. *Power Ultrasonics*. Cambridge: Elsevier.
- Kumar, Krishna. 1996. «Linear theory of Faraday instability in viscous liquids.» *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 452 (1948): 1113-1126.
- Lambert, Pierre. 2013. *Surface Tension in Microsystems*. Brussels: Springer.
- Lautrup, Benny. 2011. *Physics of Continuous Matter*. Boca Raton, Florida: CRC Press.
- Lefebvre, Arthur H., y Vincent G. McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. 2°. Boca Raton, Florida: CRC Press.
- Müller, H. W., R. Friedrich, y D. Papathanassiou. 1998. «Theoretical and Experimental Investigations of the Faraday Instability.» En *Evolution of Spontaneous Structures in Dissipative Continuous Systems*, de Friedrich H. Busse y Stefan C. Müller, 230-265. Berlin: Springer.
- Meacham, John Marcus. 2006. *A Micromachined Ultrasonic Droplet Generator Design, Fabrication, Visualization, and Modeling*. PhD Thesis, School of Mechanical Engineering, Atlanta: Georgia Institute of Technology.
- PI Ceramic. 2016. *Piezoelectric Solutions*. Lederhose: Physik Instrumente GmbH.
- Tembely, Moussa, Christian Lecot, y Arthur Soucemarianadin. 2011. «Prediction and evolution of drop-size distribution for a new ultrasonic atomizer.» *Applied Thermal Engineering* 31 (5): 656-667.

2 Modelo del aerosol

Un aerosol es un conjunto de partículas sólidas o líquidas inmersas en un medio gaseoso. La sustancia que conforma las partículas recibe el nombre de fase dispersa, mientras que el medio que las contiene se llama fase continua. Diversos procesos industriales y médicos requieren del suministro de líquidos en forma de un aerosol con tamaños y velocidades específicos, por lo que su modelado se vuelve una tarea vital para el desarrollo de atomizadores.

fases de un aerosol

Debido a la naturaleza heterogénea de las gotas que conforman al aerosol, la forma de modelarlo es estadística. Bajo el supuesto de que las propiedades que describen a las gotas se encuentran aleatoriamente distribuidas en la fase continua, se usa una función de distribución de probabilidad para describirlas.

El objetivo de este capítulo es determinar un modelo para describir el aerosol proveniente de un atomizador ultrasónico y establecer una metodología para relacionarlo con las propiedades del proceso de atomización.

2.1 Distribución de un aerosol

Cuando se tiene un sistema conformado por un gran número de elementos discretos es complejo modelar el estado del sistema aplicando leyes físicas a cada elemento de forma individual. Para aplicaciones prácticas un aerosol se describe de forma global como un sistema de gotas caracterizado por distribuciones de probabilidad de sus propiedades. Las variables que son de interés en un aerosol líquido son los tamaños de las gotas y sus velocidades.

Funciones de distribución de probabilidad

Una distribución de probabilidad puede ser continua o discreta, comúnmente la distribución teórica de un aerosol se representa con una función continua y la distribución experimental se representa con una función discreta. Una distribución continua puede expresarse mediante una función densidad o una función acumulativa de probabilidad. Una distribución discreta puede expresarse con una función masa, densidad o acumulativa de probabilidad (NIST 2013).

Distribución de un aerosol

Función masa de probabilidad

La función masa modela una distribución de probabilidad discreta y asigna una *probabilidad* P a cada *valor* x de la *variable aleatoria* X dividida en n *clases* i , *Figura 2.1a*. La suma de todos los valores de la función vale uno:

$$\sum_{i=1}^n (P_i) = 1 \quad 2.1$$

Función densidad de probabilidad

La *función densidad* p modela una distribución de probabilidad discreta o continua y normaliza la probabilidad con el intervalo de clase que le corresponde Δx :

$$p_i = \frac{P_i}{\Delta x_i} \quad 2.2$$

La función densidad no es una probabilidad adimensional sino un ponderado cuyas unidades son el recíproco de las unidades del dominio, *Figura 2.1b*. Para la función densidad es la integral de la función en x la que vale uno (Dobre 2003):

$$\sum_{i=1}^n (p_i \Delta x_i) = 1 \quad 2.3$$

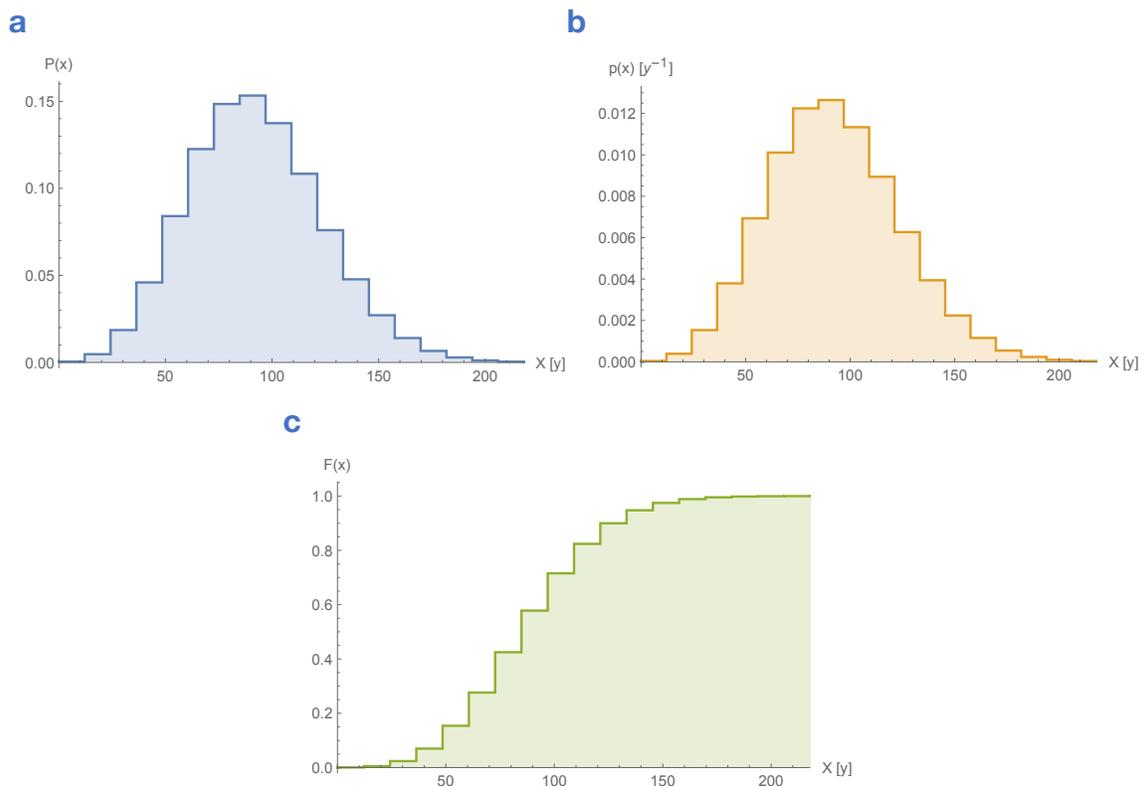


Figura 2.1: Tres funciones que modelan la distribución de probabilidad de una variable aleatoria discreta X con un dominio de unidades y : (a) función masa (b) función densidad (c) función acumulativa.

Función acumulativa de probabilidad

La *función acumulativa* F modela una distribución de probabilidad discreta o continua e indica la probabilidad de que un ensayo de la variable aleatoria X tome un valor igual o menor a x , *Figura 2.1c*. Por consiguiente, la función acumulativa es la suma de la función masa y la integral de la función densidad (Knuth 1998):

$$F_j = \sum_{i=1}^j (P_i) = \sum_{i=1}^j (p_i \Delta x_i) \tag{2.4}$$

La función masa simplifica los cálculos que involucran a la distribución de probabilidad. No obstante, la función masa no es de utilidad cuando se busca comparar dos distribuciones que poseen una cantidad distinta de clases, pues los valores de la función dependen de la cantidad de clases en que se divide el dominio. Esto no ocurre con la función densidad ya que el valor de la función se encuentra ponderado con los intervalos de clases en el dominio.

Distribución de tamaño de partículas

Para modelar los tamaños de las gotas del aerosol primero se define un parámetro que caracteriza su tamaño. La normatividad vigente del muestreo de aerosoles indica que el diámetro correspondiente a una esfera con el mismo volumen de la gota muestreada es el parámetro representativo de su tamaño (ASTM 2015). En este trabajo el *diámetro de una gota* se expresa como D .

diámetro de una gota

Base de la distribución

La distribución de tamaño de gotas puede expresar la fracción de gotas del aerosol que se encuentra en un intervalo de clase, la fracción de la superficie del aerosol que se encuentra en un intervalo de clase o la fracción del volumen del aerosol que se encuentra en un intervalo de clase. Para el primer caso se indica que la distribución se expresa en base numérica y las funciones que la modelan se distinguen con un subíndice N o sin subíndice. Para el segundo caso la distribución se expresa en base superficial y las funciones que la modelan se distinguen con un subíndice A . Para el tercer caso la distribución se expresa en base volumétrica y las funciones que la modelan se distinguen con un subíndice V . La *Figura 2.2* muestra la *función*

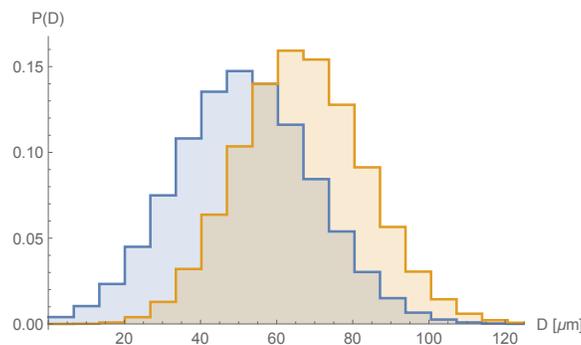


Figura 2.2: Función densidad base numérica (azul) y base volumétrica (naranja) de la distribución de tamaño de gotas de un aerosol.

Distribución de un aerosol

masa base numérica P y su equivalente función base volumétrica P_V para un aerosol. La función volumétrica siempre se encuentra sesgada hacia las gotas de mayor tamaño respecto a la numérica. La Ecuación 2.5 muestra la transformación de la función masa numérica a la volumétrica, la Ecuación 2.6 muestra la transformación inversa (Tarr, et al. 1991).

$$P_{Vi} = \frac{D_i^3 P_i}{\sum_{j=1}^n (D_j^3 P_j)} \quad 2.5$$

$$P_i = \frac{P_{Vi}}{D_i^3 \sum_{j=1}^n \left(\frac{P_{Vj}}{D_j^3} \right)} \quad 2.6$$

La distribución numérica es la que se calcula de forma directa experimentalmente, no obstante, es la información expresada por la distribución volumétrica la que resulta de utilidad para aplicaciones prácticas (Gallego Juárez y Graff 2015).

Distribuciones experimentales

Cuando se obtienen datos experimentales de la distribución de tamaño de gotas a partir de una muestra del aerosol, estos son una estimación de la distribución real del aerosol. Bowen y Davies (1951) calcularon la incertidumbre de la distribución asociada con la cantidad de gotas muestreadas, la cual se resume en la *Tabla 2.1*. Los datos experimentales de la distribución pueden representarse de dos formas distintas.

El *histograma de frecuencias* es un estimador de la función masa de probabilidad base numérica y asigna la frecuencia de aparición de gotas de un cierto tamaño en un intervalo de clase, la *Figura 2.3a* muestra un ejemplo de un histograma de frecuencias. Es el método más común para representar los resultados pues representa gráficamente los modos y la dispersión de la función.

La *función de distribución acumulativa empírica* es un estimador de la función acumulativa de probabilidad base numérica, superficial o volumétrica. La función se obtiene a partir de los datos experimentales asignando el mismo valor de probabilidad a cada elemento de la muestra, posteriormente, los datos se ordenan de menor a mayor según el diámetro medido y se suma la

Tabla 2.1: Precisión de la distribución empírica estimada a partir de una muestra.

Número de gotas en la muestra	Precisión
500	± 17 %
1 500	± 10 %
5 500	± 5 %
35 000	± 2 %

Fuente: Lefebvre y McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. CRC Press.

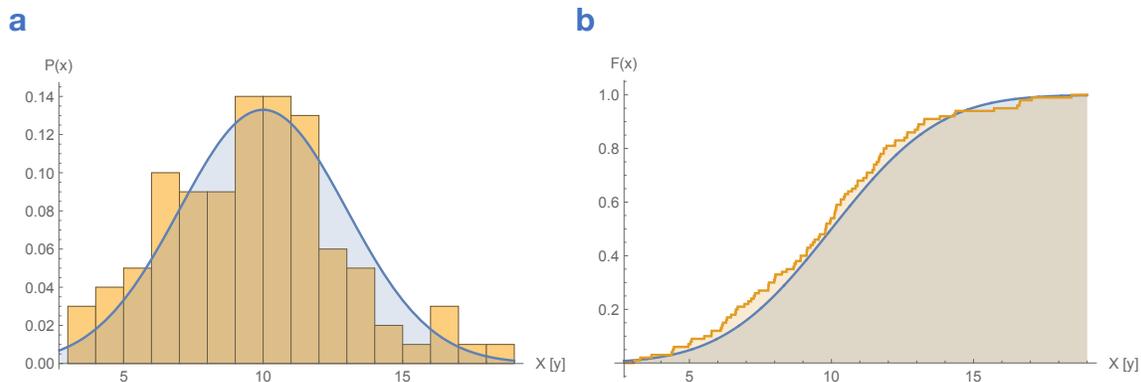


Figura 2.3: Representaciones de una muestra (naranja) proveniente de una población con una distribución normal (azul): (a) histograma de frecuencias y (b) función cumulativa empírica.

probabilidad acumulada para cada diámetro. La *Figura 2.3b* muestra un ejemplo de una función acumulativa empírica.

Cuando se muestrea un aerosol se mide el tamaño de cada gota y se genera una lista de los valores medidos. Al reportar los resultados, el histograma requiere dividir el dominio en intervalos de clase para repartir los elementos de la muestra. La elección de los intervalos de clase afecta la distribución empírica, pues es una elección arbitraria que agrega incertidumbre a la estimación de la distribución. La función acumulativa empírica no divide los diámetros medidos en intervalos de clase, por lo que es un estimador de la distribución de tamaño de gotas con menos incertidumbre.

incertidumbre de la representación de la distribución empírica

Parámetros de la distribución de tamaño de partículas

Una distribución de probabilidad tiene diferentes parámetros estadísticos que la caracterizan, los cuales pueden ser momentos de la distribución, medidas de localización o las modas en la distribución. Para muchas aplicaciones prácticas no es necesario conocer la distribución completa del aerosol, basta con conocer algún parámetro representativo (Lefebvre y McDonell 2017).

Modas

La moda de una distribución es el valor con la probabilidad más elevada. En una distribución base numérica, la moda corresponde al diámetro observado con mayor frecuencia. Una distribución puede tener más de una moda, en ese caso las funciones masa o densidad tendrán diferentes máximos locales; cuando esto ocurre se dice que la distribución es multimodal. La nomenclatura para referirse a la moda numérica de un aerosol es D_{NP} , y se indica con el subíndice N , A o V si se habla de la distribución en base numérica, superficial o volumétrica, respectivamente.

Distribución de un aerosol

Diámetros medios

Los momentos de la distribución de tamaño de gotas son medidas del promedio de distintas propiedades geométricas del aerosol, estas medidas y sus relaciones son de gran importancia en aplicaciones prácticas de la atomización. Los diámetros medios son parámetros estadísticos que se calculan a partir de la distribución base numérica del aerosol y permiten expresar, de forma estandarizada, las relaciones entre los momentos del aerosol:

$$D_{ab} = {}^{a-b} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (D_i^a P_i)}{\sum_{i=1}^n (D_i^b P_i)}} \quad 2.7$$

La *Tabla 2.2* presenta los diámetros medios más comunes y las aplicaciones en las que se emplean.

Medidas de localización

Los cuantiles de una distribución de tamaño de gotas son los diámetros donde la probabilidad acumulada vale una fracción determinada. Cuando la probabilidad acumulada se divide en diez partes iguales el diámetro que corresponde a cada una de estas fracciones recibe el nombre de decil. La normatividad vigente establece $D_{N0.Z}$ como la nomenclatura estándar para identificar

Tabla 2.2: Diámetros medios en el análisis de aerosoles.

Símbolo	Expresión	Nombre	Descripción	Aplicaciones
D_{10}	$\sum_{i=1}^n (D_i P_i)$	Numérico o lineal	Promedio del diámetro	Comparaciones
D_{20}	$\sqrt{\sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i)}$	Superficial	Promedio de la superficie	Control del área superficial
D_{30}	$\sqrt[3]{\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i)}$	Volumétrico	Promedio del volumen	Control del volumen, hidrología
D_{21}	$\frac{\sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i)}{\sum_{i=1}^n (D_i P_i)}$	Superficial-lineal	Promedio de la superficie ponderado con el diámetro	Absorción
D_{31}	$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i)}{\sum_{i=1}^n (D_i P_i)}}$	Volumétrico-lineal	Promedio del volumen ponderado con el diámetro	Evaporación, difusión molecular
D_{32}	$\frac{\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i)}{\sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i)}$	Sauter (SMD)	Promedio del volumen ponderado con la superficie	Reacciones químicas, transferencia de masa
D_{43}	$\frac{\sum_{i=1}^n (D_i^4 P_i)}{\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i)}$	Herdan o Brouckere	Promedio del diámetro ponderado con el volumen	Combustión

Fuente: Lefebvre y McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. CRC Press.

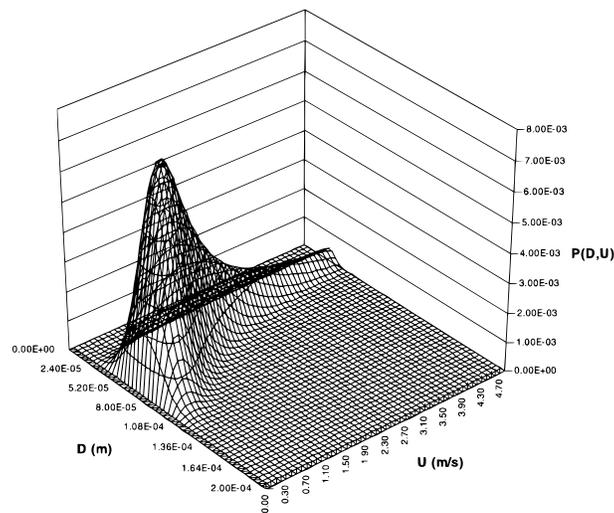


Figura 2.4: Distribución de probabilidad conjunta del tamaño y la velocidad de las gotas del aerosol de un atomizador de doble fluido.

Fuente: Ayres, et al. 2001. Prediction of the droplet size and velocity joint distribution for sprays. Fuel.

un decil de la distribución de tamaño de gotas (ASTM 2015). Debe indicarse con el subíndice N , A o V la base de la distribución. El punto decimal establece que hablamos de una medida de localización y no de un diámetro medio. El subíndice Z indica el decil referido, cuando vale 5 el decil recibe el nombre de diámetro mediano.

Distribución de velocidad de partículas

La descripción completa del aerosol involucra los tamaños y las velocidades de las gotas. Dependiendo de las propiedades del aerosol, es común modelar la velocidad de las gotas mediante un campo de velocidades, no obstante, la descripción más completa se da mediante la distribución de probabilidad conjunta. La distribución conjunta expresa la probabilidad de que una gota de un diámetro dado tenga una cierta velocidad, gráficamente se representa con un contorno de probabilidad, como ejemplifica la *Figura 2.4*.

2.2 Metodologías para el modelado de la distribución de un aerosol

La distribución que modela un aerosol puede formularse a partir de datos experimentales o de un análisis del proceso físico de atomización. En la literatura se ha estudiado tanto el ajuste de datos experimentales a funciones de distribución probabilidad conocidas, como se han desarrollado dos procedimientos analíticos para el cálculo de la distribución (Babinsky y Sojka 2002).

Metodologías para el modelado de la distribución de un aerosol

Modelo empírico

La metodología empírica para inferir la distribución de probabilidad del aerosol consiste en ajustar los parámetros de una distribución analítica conocida con la distribución empírica muestreada de un experimento. Las distribuciones comúnmente empleadas en el modelado de aerosoles son la distribución normal, normal-logarítmica e hiperbólica. Adicionalmente, distribuciones como la Rosin-Rammler y la Nukiyama-Tanasawa han sido desarrolladas específicamente para el modelado de aerosoles atomizados por inyectores (Lefebvre y McDonell 2017). Para el modelado de aerosoles atomizados por ultrasonido, la distribución Gamma generalizada ha demostrado ajustes precisos (Sarkovic y Babovic 2005, Hedrih, et al. 2006, Kooij, et al. 2019).

El modelado empírico del aerosol no es una metodología predictiva, pues requiere de muestrear previamente una distribución empírica para realizar el ajuste con una distribución conocida. Como consecuencia, los resultados no pueden ser extrapolados a regímenes distintos a los experimentales.

Modelos analíticos

Los modelos analíticos calculan la distribución de probabilidad del aerosol a partir del estudio del proceso de atomización mediante principios físicos. La metodología de la función de probabilidad discreta parte de un análisis de inestabilidad del proceso de atomización, mientras que la metodología del formalismo de máxima entropía se fundamenta en el principio de máxima entropía de la física estadística.

Función de probabilidad discreta

La metodología de la función de probabilidad discreta propone dividir la atomización en dos procesos: uno determinista y uno estocástico. La formación de una gota se considera un proceso determinista y se modela mediante un análisis físico, comúnmente un análisis de inestabilidad de la atomización. La distribución se obtiene al plantear que el proceso de formación de la gota depende de las condiciones iniciales y estas no tienen un valor definido, sino que fluctúan estocásticamente en un rango de valores. Para cada posible estado inicial se obtiene una gota de un tamaño distinto. La distribución del aerosol se calcula al acoplar el modelo determinista, que describe la formación de una gota, con el modelo estocástico, el cual describe la fluctuación de las condiciones iniciales.

El cálculo de la distribución parte de las distribuciones de probabilidad que describen las condiciones iniciales, las cuales son distribuciones discretas. El análisis de inestabilidad transforma cada clase del estado inicial en un diámetro al que se asigna la misma probabilidad de su estado inicial correspondiente. La metodología es una transformación de la distribución de probabilidad del estado inicial en la distribución del aerosol. La capacidad predictiva del método depende de poder conocer las distribuciones de probabilidad que describen las condiciones iniciales del proceso y de disponer de un modelo del proceso de fractura de una gota adecuado.

Formalismo de máxima entropía

La metodología del formalismo de máxima entropía propone modelar la atomización como un proceso no determinista y calcular la distribución del aerosol aplicando el principio de máxima entropía, el cuál establece que el estado más probable de un sistema sujeto a restricciones globales conocidas es aquel que maximiza su entropía.

principio de máxima entropía

Este método requiere seleccionar una entropía y plantear un conjunto de restricciones. Estas restricciones son parámetros globales del aerosol que pueden obtenerse de datos experimentales o de un análisis del proceso de atomización. Obtener los parámetros globales a partir de un análisis permite que el método sea predictivo. Para la atomización ultrasónica las restricciones pueden plantearse a partir de una formulación estadística de las ecuaciones constitutivas de la mecánica de fluidos.

2.3 Análisis de la atomización ultrasónica

Para el análisis de la atomización ultrasónica se modela la atomización directa de capa fina. Se propone que el principal mecanismo de atomización es la inestabilidad de Faraday, como consecuencia, las ondas capilares son responsables de un valor promedio de la distribución de tamaño de gotas. Se propone también que la cavitación ultrasónica perturba las ondas capilares causando la eyección de gotas de distinto tamaños, la cavitación ultrasónica es responsable de la dispersión de la distribución de tamaño de gotas.

Modelo de la atomización

El sistema propuesto consiste en una capa líquida depositada sobre una superficie que se desplaza verticalmente de forma sinusoidal. El desplazamiento de la superficie se modela por la *amplitud de oscilación* r y la *frecuencia* f del movimiento vertical. La superficie cuenta con un área de radiación A sobre la que se deposita una *capa líquida de altura* h . Las propiedades que definen al fluido son la *densidad* ρ , la *viscosidad* μ y la *tensión superficial* σ . La Ecuación 2.8 muestra la relación existente entre la *intensidad* I , la *potencia* \dot{E} y el *gradiente de presión* Δp de la onda acústica con respecto de la *velocidad media de oscilación* v_{rms} de la superficie y la *velocidad del sonido* c en el líquido (Rajan y Pandit 2001).

$$I = \frac{\dot{E}}{A} = \Delta p v_{rms} = c \rho v_{rms}^2 = \frac{1}{2} c \rho (2 \pi f r)^2 = \frac{\Delta p^2}{2 c \rho} \quad 2.8$$

Sobre la interfaz líquida la inestabilidad de Faraday causa que crezcan ondas capilares estacionarias con un patrón cuadrado. Las ondas capilares se modelan por la *longitud de onda* λ y la *amplitud crítica* r_c , la cual representa la amplitud máxima que alcanza una onda en el instante previo al desprendimiento de una gota. Las ondas capilares oscilan a una frecuencia de $f/2$ (Rayleigh 1877). A lo largo de la capa líquida, las gotas son eyectadas con un *gasto volumétrico* \dot{V} , el cual es el mismo gasto que la tasa de suministro de líquido, por lo que la altura de la capa líquida se mantiene constante. La *Figura 2.5* ilustra el esquema del sistema.

Análisis de la atomización ultrasónica

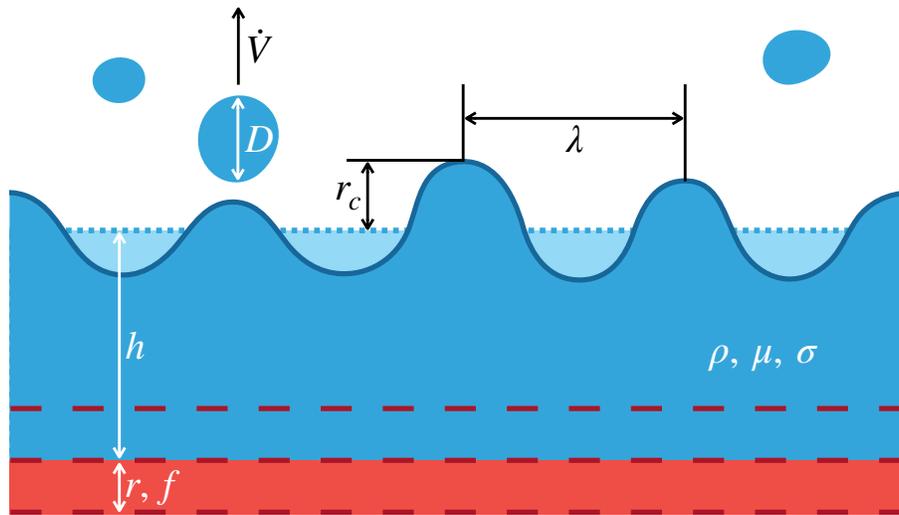


Figura 2.5: Esquema de la atomización ultrasónica directa de capa fina. La superficie se representa en rojo claro. Las líneas rojo oscuro representan las posiciones extremas a las que la superficie se desplaza durante un ciclo. La capa líquida no perturbada se representa en azul claro y la capa líquida excitada se representa en azul oscuro. Las gotas se desprenden de las ondas capilares formadas en la superficie de la capa líquida.

Análisis dimensional

La atomización de un cuerpo líquido ocurre por el desbalance entre la tensión superficial, la viscosidad y la gravedad por la acción de una fuerza externa. El efecto relativo de cada una de las fuerzas mencionadas depende de la escala geométrica del proceso particular de atomización.

Gravedad

El efecto de la fuerza de gravedad se desprecia cuando la escala geométrica del proceso es mucho menor a la longitud capilar. Para el análisis del efecto de la gravedad en la atomización ultrasónica se selecciona la longitud de onda de las ondas capilares como longitud característica del proceso. La *Tabla 2.3* muestra la longitud capilar para distintos líquidos a condiciones estándar, mientras la longitud de onda sea considerablemente menor a la longitud capilar el efecto de la gravedad se desprecia.

Números adimensionales

El proceso de eyección de gotas es regido por las propiedades de la onda acústica y la capa líquida. Por ende, las variables más significativas son la *frecuencia* f y la *amplitud de vibración* r de la superficie, la *profundidad de la capa líquida* h , las *propiedades del líquido* ρ , μ y σ , y la *longitud de onda* λ y *amplitud crítica* r_c de las ondas capilares. Observaciones experimentales ha demostrado que la profundidad de la capa líquida es proporcional al *gasto volumétrico* \dot{V} para la atomización de capa fina, por lo que en el presente análisis se emplea el gasto (Sindayihebura, et al. 1997). Por consiguiente, el modelo se describe mediante ocho variables

variables de la
atomización
ultrasónica de
capa fina

Tabla 2.3: Longitud capilar para distintos líquidos.

Líquido	Densidad kg/m^3	Tensión superficial mN/m	Longitud capilar mm
Agua	998.2	72.86	2.73
Glicerina	1 261.3	64.00	2.27
Etanol	789.2	22.39	1.70
Metanol	792.0	22.50	1.70
Iso-Octano	691.9	21.61	1.78

Valores calculados con una temperatura de 20 °C, presión absoluta de 1 atm, aceleración de gravedad de 9.807 m/s² y tensión superficial para una interfaz líquido-aire.

que producen cinco números adimensionales, se proponen la *frecuencia* f^* , la *longitud de onda* λ^* , el *gasto volumétrico* \dot{V}^* , y las *amplitudes* r^* y r_c^* :

$$f^* = \frac{\mu^3 f}{\rho \sigma^2} \quad 2.9$$

$$\lambda^* = \frac{\rho \sigma \lambda}{\mu^2} \quad 2.10$$

$$\dot{V}^* = \frac{\rho^2 \sigma \dot{V}}{\mu^3} \quad 2.11$$

$$r^* = \frac{\rho \sigma r}{\mu^2} \quad 2.12$$

$$r_c^* = \frac{\rho \sigma r_c}{\mu^2} \quad 2.13$$

En el estudio de la atomización los números adimensionales de mayor relevancia son el Reynolds, Weber, el número de capilaridad y el Ohnesorge, desarrollados en las *Ecuaciones 1.3, 1.7, 1.8 y 1.12*, respectivamente. En ellos l representa una *longitud* y v una *velocidad característica* del proceso de atomización. Rajan y Pandit (2001) propusieron un quinto número adimensional basado en el *número de potencia* Pn el cual se emplea para el análisis de turbo-maquinaria. Este número se interpreta como la relación entre una *potencia característica* \dot{E} del proceso de atomización y las propiedades de la onda acústica:

$$Pn = \frac{\dot{E}}{\rho l^5 f^3} \quad 2.14$$

Para adaptar los números adimensionales a la atomización ultrasónica de capa fina, la amplitud de vibración de la superficie r se emplea como longitud característica l . La potencia característica \dot{E} se calcula a partir del gasto volumétrico y las propiedades de la onda acústica:

Análisis de la atomización ultrasónica

$$\dot{E} = \rho r^2 f^2 \dot{V} \quad 2.15$$

Para el cálculo de la velocidad característica se plantean tres alternativas, la primera basada en la frecuencia y amplitud de vibración:

$$v = f r \quad 2.16$$

la segunda en el gasto volumétrico y la amplitud de vibración:

$$v = \frac{\dot{V}}{r^2} \quad 2.17$$

y la tercera en el gasto volumétrico y la frecuencia:

$$v = \sqrt[3]{f^2 \dot{V}} \quad 2.18$$

Las tres alternativas se analizan con datos experimentales en el *Capítulo 3* para identificar la velocidad característica del proceso de atomización.

Atomización secundaria

La fuerza de arrastre que actúa sobre las gotas eyectadas puede continuar el proceso de fractura, esta fuerza depende de la velocidad de las gotas y su tamaño. La condición de inestabilidad que causa atomización secundaria en el aerosol ocurre cuando el Weber de las gotas excede el Weber crítico derivado en la *Ecuación 1.10*:

$$We_C = \frac{8}{c_D} = \frac{\rho v_C^2 l}{\sigma} \quad 1.10$$

Experimentalmente, se ha determinado que la velocidad de eyección de gotas es cercana a 1 m/s en la atomización ultrasónica. No obstante, para el análisis de atomización secundaria se propone emplear la velocidad máxima que alcanza la oscilación de la superficie como *velocidad característica* v , pues es la velocidad teórica máxima a la que puede ser expulsada una gota:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(r \sin(2\pi f t)) &= 2\pi f r \cos(2\pi f t) \\ \Rightarrow v &= 2\pi f r \end{aligned} \quad 2.19$$

Asumiendo que el diámetro de la gota es del mismo orden de magnitud de la longitud de onda capilar, el efecto de la gravedad es despreciable y la forma de la gota se considera esférica. Por consiguiente, el *coeficiente arrastre* c_D es función del Reynolds de la gota. Calculando el Weber para la gota y comparándolo con el Weber crítico se deduce la expresión de la *velocidad crítica* v_C de la gota requerida para que ocurra atomización secundaria:

$$v_C = \sqrt{\frac{8\sigma}{\rho l c_D(Re)}} \quad 2.20$$

condición de atomización secundaria Considerando que la velocidad característica de la gota debe ser menor a la velocidad crítica, se plantea la condición de estabilidad para que no ocurra atomización secundaria:

$$v < v_C \quad 2.21$$

Tabla 2.4: Análisis de estabilidad para la atomización secundaria de cuatro casos experimentales.

ρ	μ	σ	f	r	D_{10}	v	v_c
kg/m ³	μPa s	mN/m	kHz	μm	μm	m/s	m/s
1 000	1 000	72	40	4.5	53.8	1.13	2.76
1 000	1 000	72	40	7	51.4	1.76	3.14
1 000	1 000	72	60	4.7	41.6	1.77	3.30
1 000	1 000	72	70	3.9	43.5	1.72	3.23

Fuente: Mizutani, et al. 1972. An investigation on ultrasonic atomization. JSME.

La Tabla 2.4 muestra el cálculo de la velocidad crítica para atomización secundaria y de la velocidad característica de las gotas para cuatro casos experimentales obtenidos de la literatura, se emplea el diámetro medio numérico como el diámetro característico de las gotas del aerosol. En ninguno de los casos analizados ocurre atomización secundaria.

Para los casos donde el Reynolds es cercano a la unidad, es posible aproximar el valor del coeficiente de arrastre mediante la Ley de Stokes, simplificando el cálculo de la condición de estabilidad:

$$\Rightarrow v < \frac{\sigma}{3\mu} \tag{2.22}$$

Si bien no se espera atomización secundaria en el aerosol, no se descarta la posibilidad de evaporación y de coalescencia de las gotas, los cuales producen una evolución temporal del aerosol. Esta evolución es consecuencia de las condiciones de transporte y no de la atomización, por lo que no se analizan en el presente estudio.

evolución temporal del aerosol

2.4 Ecuaciones constitutivas

Un aerosol se modela mediante la distribución de probabilidad del tamaño y la velocidad de las gotas que lo componen. Por consiguiente, las ecuaciones constitutivas de la mecánica de fluidos que modelan el proceso de atomización se expresan de forma estadística a partir de un análisis integral del aerosol en un volumen de control.

Ecuaciones para la distribución conjunta

Sellens (1985) formuló las ecuaciones de constitutivas estadísticas a partir de la *distribución conjunta de tamaño y velocidad de gotas* P_{ij} . La distribución se divide en n clases de tamaño y n_v clases de velocidad de las gotas. La ecuación de conservación de masa asume un fluido incompresible y modela el volumen de líquido contenido en el aerosol. La ecuación considera

Ecuaciones constitutivas

un término fuente F_m que modela el intercambio de gotas entre el volumen de control y el exterior:

$$\sum_{j=1}^{n_v} \left(\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_{ij}) \right) = D_{30}^3 + F_m \quad 2.23$$

La ecuación de cantidad de movimiento equipara el movimiento del aerosol con la *velocidad del cuerpo líquido previo a la atomización* v_l , considerando el *intercambio de gotas* F_p del volumen de control con el exterior:

$$\sum_{j=1}^{n_v} \left(\sum_{i=1}^n (D_i^3 v_j P_{ij}) \right) = D_{30}^3 v_l + F_p \quad 2.24$$

La ecuación de conservación de energía se divide en conservación de energía cinética y superficial. La ecuación de conservación de energía cinética modela la energía cinética transmitida al aerosol durante el proceso de atomización, considerando el *intercambio de gotas* F_{KE} del volumen de control con el exterior:

$$\sum_{j=1}^{n_v} \left(\sum_{i=1}^n (D_i^3 v_j^2 P_{ij}) \right) = D_{30}^3 v_l^2 + F_{KE} \quad 2.25$$

La ecuación de conservación de energía superficial modela la energía contenida en el aerosol en forma de tensión superficial, por lo que depende del diámetro medio superficial D_{20} . La ecuación considera el *intercambio de gotas* F_{SE} del volumen de control con el exterior:

$$\sum_{j=1}^{n_v} \left(\sum_{i=1}^n (D_i^2 P_{ij}) \right) = D_{20}^2 + F_{SE} \quad 2.26$$

La solución de las ecuaciones constitutivas estadísticas para la atomización ultrasónica requiere de conocer los diámetros medios superficial y volumétrico, la velocidad de las ondas capilares y los términos fuente de intercambio de gotas.

Ecuaciones simplificadas

Las ecuaciones constitutivas simplificadas emplean la distribución de tamaño de gotas en lugar de la distribución conjunta del aerosol. Como consecuencia, las ecuaciones simplificadas se reducen a la ecuación de conservación de masa y la ecuación de conservación de energía.

El volumen de control para el modelado de la atomización ultrasónica de capa fina se define como el espacio que contiene la porción de ondas capilares que se fragmentan en las gotas del aerosol. La *Figura 2.6* ilustra en volumen de control en un instante previo y en un instante posterior a la fractura de las ondas capilares.

Conservación de masa

La *masa del aerosol* m es la suma de la masa de cada gota, el volumen de control contiene N gotas:

$$m = \sum_{i=1}^N (m_i) = \rho \sum_{i=1}^N (V_i) = \rho \frac{\pi}{6} \sum_{i=1}^N (D_i^3) \quad 2.27$$

La definición del *diámetro medio volumétrico* D_{30} permite transformar la ecuación de conservación de masa en términos de las N gotas a una ecuación en términos de las n *clases* de la *distribución de tamaño de gotas* P_i :

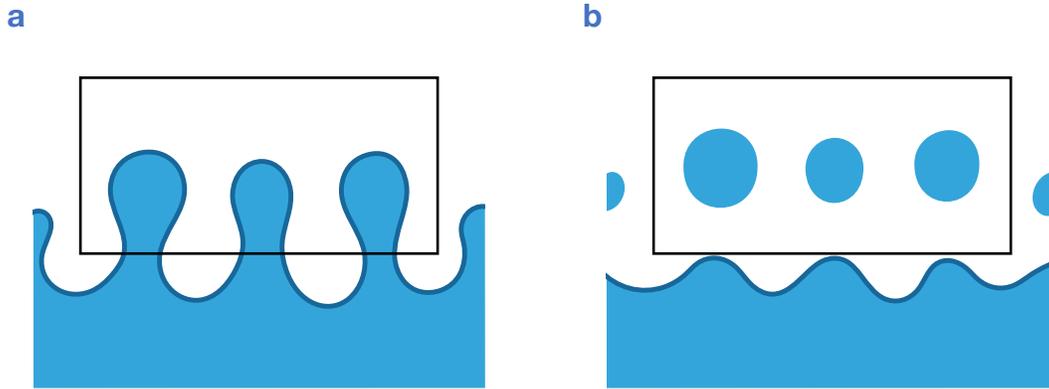


Figura 2.6: Volumen de control para el análisis de la atomización ultrasónica: (a) ondas capilares previo a la eyección de gotas (b) gotas atomizadas posterior a la fractura de las crestas.

$$\Rightarrow m = \rho \frac{\pi}{6} N D_{30}^3 = \rho \frac{\pi}{6} N \sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i) \quad 2.28$$

Reduciendo la Ecuación 2.28, se deriva la ecuación simplificada de conservación de masa:

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i) = D_{30}^3 \quad 2.29$$

ecuación de conservación de masa

Conservación de energía

La energía que contienen las crestas de las ondas capilares se conserva en las gotas del aerosol si se desprecia el efecto de la disipación viscosa cuando ocurre la fractura. La energía contenida en las crestas es la *energía cinética* E_{Kw} y la *energía superficial* E_{Sw} , la energía contenida en las gotas es la *energía cinética* E_{Kd} y la *energía superficial* E_{Sd} :

$$E_{Kw} + E_{Sw} = E_{Kd} + E_{Sd} \quad 2.30$$

Para desarrollar cada término se requiere conocer la *velocidad promedio de las ondas capilares* v_w , la *velocidad promedio de eyección de las gotas* v_d , la *superficie de las crestas* A_w y la *superficie de las gotas* A_d :

$$\Rightarrow \frac{m}{2} v_w^2 + \sigma A_w = \frac{m}{2} v_d^2 + \sigma A_d \quad 2.31$$

La superficie de las crestas se puede calcular a partir de la masa de las gotas y una *longitud de normalización* l . La superficie de las gotas se puede calcular a partir de la definición del *diámetro medio superficial* D_{20} :

$$\Rightarrow \frac{m}{2} v_w^2 + \sigma \frac{m}{\rho l} = \frac{m}{2} v_d^2 + \sigma \pi N D_{20}^2 \quad 2.32$$

Recurriendo a la definición del diámetro medio volumétrico, se deriva la forma estadística de la ecuación simplificada de conservación de energía:

$$\Rightarrow \frac{\rho \frac{\pi}{6} N D_{30}^3}{2} v_w^2 + \sigma \frac{\rho \frac{\pi}{6} N D_{30}^3}{\rho l} = \frac{\rho \frac{\pi}{6} N D_{30}^3}{2} v_d^2 + \sigma \pi N \sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i)$$

Ecuaciones constitutivas

ecuación de
conservación de
energía

$$\Leftrightarrow \frac{D_{30}^3 \rho}{6 \sigma} \left(\frac{v_w^2 - v_d^2}{2} + \frac{\sigma}{\rho l} \right) = \sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i) = D_{20}^2 \quad 2.33$$

Durante el proceso de atomización, la energía superficial de las crestas incrementa al crearse una mayor cantidad de superficie en las gotas durante la fractura. La diferencia de los cuadrados de las velocidades en la *Ecuación 2.33* indica la cantidad de energía cinética que se transforma en energía superficial, el segundo término dentro del primer paréntesis indica la energía superficial originalmente contenida en las crestas. El diámetro medio superficial es una medida de la energía superficial contenida en el aerosol.

Eficiencia de la atomización

La energía superficial contenida en el aerosol representa el trabajo mínimo requerido para atomizarlo. Por consiguiente, la razón entre la energía superficial del aerosol y la *energía empleada en el proceso de atomización* E es la *eficiencia de la atomización* η :

$$\eta = \frac{\sigma N \pi D_{20}^2}{E} = \frac{\sigma \frac{6V}{\pi D_{30}^3} \pi D_{20}^2}{E} = \frac{6 \sigma V}{D_{32} E} \quad 2.34$$

Para aplicaciones prácticas, es de mayor utilidad calcular la eficiencia en términos de la *potencia que requiere el proceso* \dot{E} y el *gasto volumétrico atomizado* \dot{V} :

$$\eta = \frac{6 \sigma \dot{V}}{D_{32} \dot{E}} \quad 2.35$$

La eficiencia es un parámetro de comparación de la energía empleada para atomizar un aerosol de un cierto tamaño a un gasto determinado entre distintos procesos de atomización.

Bibliografía

- ASTM. 2015. «Standard Practice for Determining Data Criteria and Processing for Liquid Drop Size Analysis.» *E799-03*. West Conshohocken: ASTM International.
- Ayres, D., M. Caldas, V. Semião, y Maria da Graça Carvalho. 2001. «Prediction of the droplet size and velocity joint distribution for sprays.» *Fuel* 80 (3): 383-394.
- Babinsky, E., y Paul E. Sojka. 2002. «Modeling drop size distributions.» *Progress in Energy and Combustion Science* 28 (4): 303-329.
- Bowen, I. G., y G. P. Davies. 1951. *Report ICT 28*. Technical Report, London: Shell Research Ltd.
- Dobre, Miruna. 2003. *Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques le formalisme de l'entropie maximale*. PhD Thesis, Département de mécanique, Faculté des sciences appliquées, Louvain-la-Neuve: Université catholique de Louvain.
- Gallego Juárez, Juan A., y Karl F. Graff. 2015. *Power Ultrasonics*. Cambridge: Elsevier.
- Hedrih, Katica Stevanovic, Vukota Babovic, y Dragan Sarkovic. 2006. «An auxiliary size distribution model for the ultrasonically produced water droplets.» *Experimental Thermal and Fluid Science* 30 (6): 559-564.
- Knuth, Donald E. 1998. *The Art of Computer Programming*. 3° Edición. Vol. II. Boston: Addison-Wesley.
- Kooij, Stefan, Alina Astefanei, Garry L. Corthals, y Daniel Bonn. 2019. «Size distributions of droplets produced by ultrasonic nebulizers.» *Scientific Reports* 9: 6128.
- Lefebvre, Arthur H., y Vincent G. McDonell. 2017. *Atomization and Sprays*. 2°. Boca Raton, Florida: CRC Press.
- Mizutani, Yukio, Yasutake Uga, y Takeo Nishimoto. 1972. «An investigation on ultrasonic atomization.» *Bulletin of JSME* 15 (83): 620-627.
- NIST. 2013. *Engineering Statistics Handbook*. SEMATECH.
- Rajan, Raghavachari, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2001. «Correlations to Predict Droplet Size in Ultrasonic Atomisation.» *Ultrasonics* 39 (4): 235-255.
- Rayleigh, John William Strutt. 1877. *The Theory of Sound*. New York: Dover Publications.
- Sarkovic, Dragan, y Vukota M. Babovic. 2005. «On the Statistics of Ultrasonically Produced Water Droplets.» *Zeitschrift für Naturforschung A* 60 (7): 489-493.
- Sellens, Richard William. 1985. *A Prediction of the Drop Size Distribution in a Spray from First Principles*. MSc Thesis, Waterloo: University of Waterloo.
- Sindayihebura, Daniel, Jean Cousin, y Christophe Dumouchel. 1997. «Experimental and Theoretical Study of Sprays Produced by Ultrasonic Atomisers.» *Particle and Particle Systems Characterization* 14 (2): 93-101.
- Tarr, Matthew A., Guangxuan Zhu, y Richard F. Browner. 1991. «Fundamental Aerosol Studies with an Ultrasonic Nebulizer.» *Applied Spectroscopy* 45 (9): 1424-1432.

3 Diámetros medios

El cálculo de la distribución de tamaño de partículas empleando el formalismo de máxima entropía requiere de conocer los diámetros medios superficial y volumétrico del aerosol. El objetivo del presente capítulo es desarrollar correlaciones para la estimación de los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter. Las correlaciones desarrolladas permiten calcular un estimado de la distribución de tamaño de gotas a partir de las variables físicas que describen el proceso de atomización.

3.1 Modelos de los diámetros medios

En la literatura se han publicado modelos analíticos y empíricos para la predicción de los diámetros medios de un aerosol atomizado por ultrasonido, estos modelos se sustentan en el análisis de la inestabilidad de Faraday y la cavitación ultrasónica. Los modelos analíticos calculan el perfil de las ondas capilares y aplican un análisis de inestabilidad de Rayleigh para determinar el diámetro medio numérico (Kim, et al. 2016, Khmelev, et al. 2017). Los modelos empíricos realizan un análisis exploratorio de datos experimentales para identificar correlaciones que estimen los diámetros medios, medianos y modas de la distribución de tamaño de gotas.

Lang (1962) propuso que la mediana numérica de la distribución de tamaño de gotas es proporcional a la longitud de onda de las ondas superficiales. Lang calculó la longitud de onda de las ondas capilares empleando la ecuación de velocidad de ondas superficiales desarrollada por Kelvin para un líquido ideal (Thomson 1871). A partir de datos experimentales, Lang calculó una constante de proporcionalidad para estimar el diámetro mediano. Rajan y Pandit (2001) retomaron el análisis de Lang y propusieron una correlación para estimar la moda de la distribución de tamaño de gotas. Rajan y Pandit asumieron que la moda es proporcional a la longitud de onda capilar y propusieron una expresión algebraica para estimar el coeficiente de proporcionalidad como una función de tres números adimensionales. Los modelos de Lang y de Rajan y Pandit han sido modificados en múltiples investigaciones para ajustar correlaciones de diámetros medios en aplicaciones específicas. La *Tabla 3.1* resume las correlaciones publicadas y los diámetros que calculan.

Tabla 3.1: Correlaciones para el cálculo de diámetros medios, medianos y modas.

Autor	Diámetro	Correlación
Lang (1962)	$D_{N0.5}$	$0.34 \sqrt[3]{\frac{8 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Mizutani, et al. (1972)	D_{32}	$4.16 \left(\frac{\rho}{\sigma}\right)^{\frac{1}{3}} \mu^{\frac{1}{4}} \left(540 f^{-\frac{2}{3}} + \frac{7000}{f r} \left(\frac{\dot{\gamma}}{5}\right)^{\frac{120}{f r}}\right)$
Mochida (1978)	D_{32}	$31.7 \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{0.354} \mu^{0.303} \dot{\gamma}^{0.139}$
Sindayihebura, et al. (1997)	D_{32}	$0.34 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Sindayihebura, et al. (1997)	D_{42}	$0.37 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Sindayihebura, et al. (1997)	D_{51}	$0.33 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Sindayihebura, et al. (1997)	D_{61}	$0.35 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Dobre y Bolle (1998)	D_{30}	$0.36 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}}$
Rajan y Pandit (2001)	D_{NP}	$\sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} (1 + 0.1 We^{0.22} Oh^{0.166} In^{-0.0277})$
Avvaru, et al. (2006)	D_{10}	$\sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} + 0.0013 We^{0.008} Oh^{\frac{0.14}{n_f}} In^{0.28}$
Barba, et al. (2009)	D_{10}	$0.058 \sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} We^{0.151} Oh^{0.192} In^{-0.020}$
Ramisetty, et al. (2013)	D_{32}	$0.00154 \sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} \left(1 + \sqrt[5]{\frac{\rho f^2}{\pi \sigma}} We^{0.154} Oh^{-0.111} In^{-0.033}\right)$
Muñoz, et al. (2018)	D_{10}	$1.2765 \left(\sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} + 9.48 e^{-7} We^{0.347} Oh^{0.435} In^{-1.65}\right)$

La correlación de Avvaru fue desarrollada para líquidos newtonianos y no newtonianos, n_f es el índice de comportamiento de flujo. Los números adimensionales usados por Avvaru et al., Barba et al. y Ramisetty et al. son los desarrollados por Rajan y Pandit. Los números adimensionales empleados por Muñoz et al. son modificaciones de los números de Rajan y Pandit.

Para estimar los diámetros medios de la distribución de tamaño de gotas del aerosol, se desarrollan correlaciones a partir de los números adimensionales derivados en el *Capítulo 2*. Mediante un análisis de regresión de datos experimentales, se deriva una correlación para estimar la *longitud de onda de las ondas capilares* λ . Con la correlación de la longitud de onda, se derivan las correlaciones para estimar los *coeficientes de proporcionalidad* k_{xy} que calculan a los *diámetros medios* D_{xy} :

$$D_{xy} = k_{xy} \lambda \tag{3.1}$$

modelo para
estimar los
diámetros
medios

3.2 Longitud de onda

Se propone un modelo matemático basado en números adimensionales para derivar una correlación que estime la longitud de onda. Los coeficientes del modelo se determinan mediante un análisis de regresión con datos experimentales. La correlación obtenida se valida mediante un análisis estadístico y se compara con las expresiones publicadas en la literatura.

Modelo

Dobre (2003) propuso que, en el estudio de la inestabilidad de Faraday, la *longitud de onda adimensional* λ^* es función de la *frecuencia adimensional* f^* :

$$\lambda^* = A f^{*B} \tag{3.2}$$

A partir de datos experimentales, se realiza un análisis de regresión para determinar los coeficientes A y B . Posteriormente, la *Ecuación 3.2* se resuelve para la *longitud de onda* λ , la cual queda en término de la *densidad* ρ , la *viscosidad* μ , la *tensión superficial* σ y la *frecuencia* f .

Análisis de regresión

Los datos experimentales para el análisis de regresión de la longitud de onda se obtienen de artículos publicados. La *Tabla 3.2* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos, en total se analizan 33 ensayos experimentales. El rango de las frecuencias empleadas en los ensayos corresponde con las frecuencias empleadas en la atomización ultrasónica.

La *Figura 3.1* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 99.47 %:

$$\lambda^* = 4.017627 f^{*-0.628608} \tag{3.3}$$

La *Ecuación 3.3* se resuelve para la longitud de onda:

$$\Rightarrow \lambda = 4.017627 \frac{\sigma}{f \mu} \left(\frac{\mu^3 f}{\rho \sigma^2} \right)^{0.371392} \tag{3.4}$$

El valor del coeficiente se aproxima a 4 y el valor del exponente a 3/8:

Longitud de onda

Tabla 3.2: Datos experimentales para el análisis de regresión de la longitud de onda.

Autor	λ	ρ	μ	σ	f
	μm	kg/m^3	$\mu\text{Pa s}$	mN/m	kHz
Eisenmenger (1959)	6 – 162	997	890	75 – 83	20 – 3 000
Lang (1962)	12 – 190	843 – 1 000	1 000 – 1 800	73	33 – 50
Dobre (2003)	68 – 105	1 000	1 002	27 – 73	12 – 780
Ramisetty, et al. (2013)	85 – 155	997	890	73	20 – 40

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

correlación para
la longitud de
onda capilar

$$\Rightarrow \lambda = 4 \sqrt[8]{\frac{\mu \sigma^2}{\rho^3 f^5}} \quad 3.5$$

Análisis estadístico

Para validar la *Ecuación 3.5* como un estimador de la longitud de onda de las ondas capilares, se determina su ajuste con los datos experimentales mediante tres análisis.

Error estándar relativo

El primer análisis consiste en calcular el *error estándar relativo RSE* de la correlación. El error estándar relativo es un parámetro estadístico que calcula la media cuadrática del error relativo de una correlación determinada mediante un análisis de regresión (40 CFR § 136.6). El error estándar relativo se calcula a partir del *valor experimental* λ_e y del *valor calculado* λ_c para cada uno de los N ensayos, tomando en cuenta el *número de coeficientes* N_p que se ajustan mediante el análisis de regresión:

$$RSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\lambda_{e_i} - \lambda_{c_i}}{\lambda_{e_i}} \right)^2}{N - N_p}} \quad 3.6$$

La *Ecuación 3.5* tiene un error estándar relativo de 7.96 %.

Prueba t de Student

El segundo análisis es la prueba de hipótesis t de Student para dos muestras (NIST 2013). La prueba compara las medias de dos muestras y determina si provienen de la misma población, los valores experimentales conforman la *muestra e* que se compara con la *muestra c* conformada por los valores calculados por la correlación. La *hipótesis nula* H_0 es el caso donde

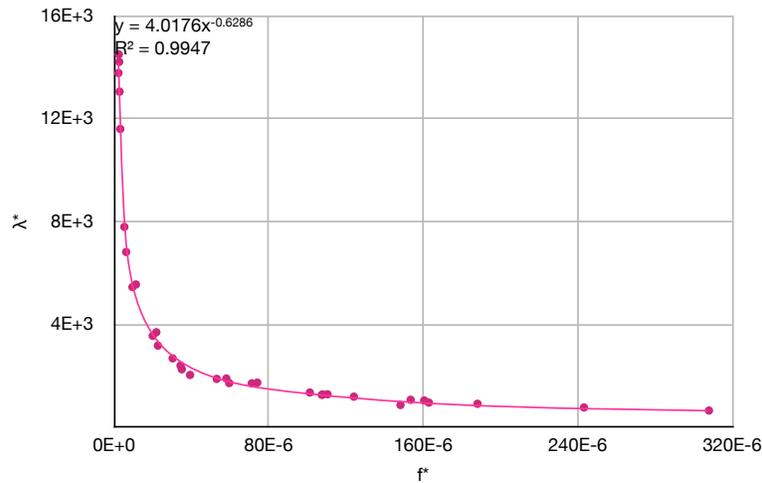


Figura 3.1: Gráfica de la longitud de onda adimensional λ^* como función de la frecuencia adimensional f^* para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

las muestras provienen de una población distinta. La *hipótesis alternativa* H_a es el caso donde las muestras provienen de la misma población:

$$\begin{aligned}
 H_o: & \quad \bar{\lambda}_e \neq \bar{\lambda}_c \\
 H_a: & \quad \bar{\lambda}_e = \bar{\lambda}_c
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

El *estadístico de prueba t* se calcula a partir de las *medias de las muestras* $\bar{\lambda}_e$ y $\bar{\lambda}_c$, de las *varianzas muestrales* s_e^2 y s_c^2 y de los N ensayos:

$$t = (\bar{\lambda}_e - \bar{\lambda}_c) \sqrt{\frac{N}{s_e^2 - s_c^2}}
 \tag{3.8}$$

El número de *grados de libertad* ν para la prueba se calcula como:

$$\nu = \frac{(s_e^2 + s_c^2)^2}{s_e^2 + s_c^2} (N - 1)
 \tag{3.9}$$

Para determina si los valores calculados mediante las correlaciones correspondan con los experimentales, se calcula la confiabilidad crítica con que se acepta la hipótesis alternativa. La *Ecuación 3.5* tiene una confiabilidad para la prueba t de Student de 73.05 %.

Prueba F de Fisher

El segundo análisis es la prueba de hipótesis F de Fisher para dos muestras (NIST 2013). La prueba compara las varianzas de las muestras s_e^2 y s_c^2 para determinar si provienen de la misma población. La *hipótesis nula* H_o es el caso donde las muestras provienen de una población distinta. La *hipótesis alternativa* H_a es el caso donde las muestras provienen de la misma población:

Longitud de onda

$$\begin{aligned}
 H_o: & \quad s_e^2 \neq s_c^2 \\
 H_a: & \quad s_e^2 = s_c^2
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

El estadístico de prueba F se calcula a partir de las varianzas muestrales s_e^2 y s_c^2 :

$$F = \frac{s_c^2}{s_e^2}
 \tag{3.11}$$

Los grados de libertad ν_e y ν_c para la prueba se calculan como:

$$\nu_e = \nu_c = N - 1
 \tag{3.12}$$

Para determinar si los valores calculados mediante las correlaciones correspondan con los experimentales, se calcula la confiabilidad crítica con que se acepta la hipótesis alternativa. La Ecuación 3.5 tiene una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 63.34 %.

Correlaciones en la literatura

Las correlaciones basadas en la propuesta de Lang calculan la longitud de onda a partir de la expresión deducida por Kelvin (Thomson 1871). La expresión de Kelvin fue calculada idealizando un líquido no viscoso:

$$\lambda = \sqrt[3]{\frac{8 \pi \sigma}{\rho f^2}}
 \tag{3.13}$$

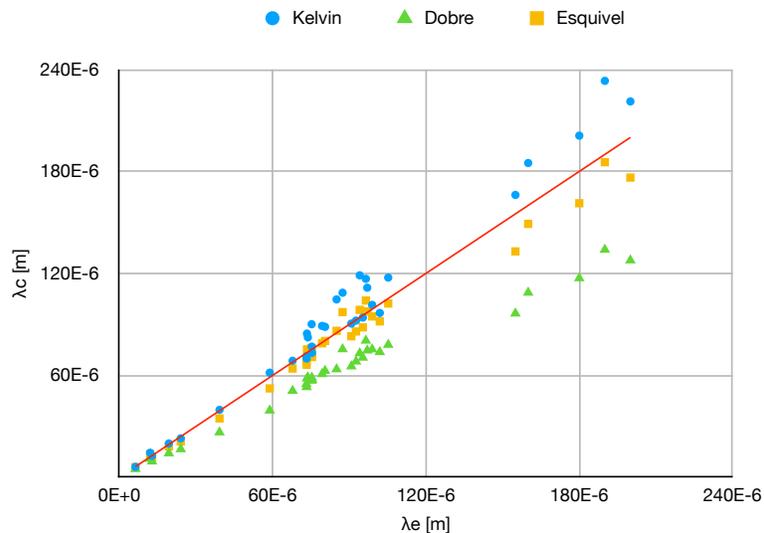


Figura 3.2: Gráfica de paridad de las expresiones para la longitud de onda. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados λ_c mientras que el de las abscisas a los experimentales λ_e .

Empleando los datos experimentales utilizados en el análisis de regresión, la *Ecuación 3.13* tiene un error estándar relativo de 12.61 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 50.85 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 38.46 %.

Dobre (2003) mediante un análisis de regresión propuso una correlación para la estimación de la longitud de onda:

$$\lambda = 5 \sqrt{\frac{\mu \sigma}{\rho^2 f^3}} \quad 3.14$$

Empleando los datos experimentales utilizados en el análisis de regresión, la *Ecuación 3.14* tiene un error estándar relativo de 27.05 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 2.34 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 2.28 %.

La *Figura 3.2* ilustra la gráfica de paridad de las longitudes de onda calculadas contra las experimentales para las tres expresiones analizadas. La expresión desarrollada en el presente trabajo muestra el ajuste más exacto, no obstante, se observa que para longitudes de onda mayores a 130 μm la correlación subestima los valores experimentales.

3.3 Coeficientes de proporcionalidad

Para calcular los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter, se derivan correlaciones para los coeficientes de proporcionalidad. Para estimar los coeficientes de proporcionalidad, se proponen dos modelos basados en números adimensionales. Los coeficientes de los modelos propuestos se determinan mediante un análisis de regresión con datos experimentales. Las correlaciones obtenidas para los dos modelos propuestos se comparan mediante los análisis estadísticos empleados en la derivación de la correlación para la longitud de onda. El modelo de mayor exactitud se escoge como el estimador del diámetro medio y se compara con las expresiones publicadas en la literatura.

Modelo

Para estimar los *coeficientes de proporcionalidad* k_{xy} de los *diámetros medios* D_{xy} se proponen dos modelos distintos basados en números adimensionales. El primer modelo se sustenta en el proceso físico de la atomización ultrasónica. El segundo retoma la correlación propuesta por Rajan y Pandit.

Primer modelo

El primer modelo asume que la dispersión de los tamaños de las gotas alrededor de un valor promedio es causado por la cavitación. El diámetro promedio es determinado por la longitud de onda de las ondas capilares, mientras que la desviación del valor promedio se debe al efecto disruptivo de la cavitación. La acción de la cavitación en la atomización de capa fina depende de la intensidad de la onda acústica y de la profundidad de la capa líquida (Antonevich 1959). La profundidad de la capa líquida es proporcional al gasto volumétrico atomizado y la intensidad acústica es proporcional al cuadrado de la amplitud de vibración (Rajan y Pandit 2001). Se propone la siguiente expresión sustentada en la *amplitud de vibración* r^* y el *gasto*

Coeficientes de proporcionalidad

volumétrico \dot{V}^* adimensionales para estimar el coeficiente de proporcionalidad de los diámetros medios:

$$k_{xy} = A r^{*B} \dot{V}^{*C} \quad 3.15$$

Los coeficientes A , B y C se determinan mediante un análisis de regresión de datos experimentales de los coeficientes de proporcionalidad. Los coeficientes de proporcionalidad experimentales para los análisis de regresión se calculan a partir de datos experimentales de los diámetros medios y de la *Ecuación 3.5* para estimar la longitud de onda.

Segundo modelo

El segundo modelo se basa en la propuesta de Rajan y Pandit pues emplea los números adimensionales de Reynolds, Weber, Ohnesorge, capilaridad y potencia. La expresión toma la forma:

$$k_{xy} = A \Pi^B \quad 3.16$$

Los coeficientes A y B se determinan mediante un análisis de regresión de datos experimentales de los coeficientes de proporcionalidad, Π es uno de los números adimensionales previamente mencionados. El análisis se repite para los cinco números adimensionales y se selecciona la correlación con mayor exactitud. En el *Capítulo 2.3* se establecieron tres posibles velocidades características para los números de Reynolds, Weber y capilaridad:

$$v = f r \quad 2.16$$

análisis de la
velocidad
característica

$$v = \frac{\dot{V}}{r^2} \quad 2.17$$

$$v = \sqrt[3]{f^2 \dot{V}} \quad 2.18$$

Las tres versiones de los números adimensionales serán analizadas para seleccionar la correlación de mayor exactitud y determinar la velocidad característica representativa del proceso de atomización.

Diámetro medio numérico

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla 3.3* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio numérico y el diámetro medio volumétrico, en total se analizan 10 ensayos experimentales.

Primer modelo

El análisis de regresión para el primer modelo produce una correlación que estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio numérico con un coeficiente de determinación de 85.49 %:

$$k_{10} = 178.32 \cdot 10^{-3} r^{*-0.2199} \dot{V}^{*0.1501} \quad 3.17$$

Tabla 3.3: Datos experimentales para el análisis de regresión de los diámetros medios numérico y volumétrico.

Autor	D_{10}	D_{30}	ρ	μ	σ	f	\dot{V}	r
	μm	μm	kg/m^3	$\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$	mN/m	kHz	mm^3/s	μm
Mizutani, et al. (1972)	34 – 49	60 – 72	1 000	1 002	73	54	22 – 288	2 – 4
Tsai, et al. (1996)	42 – 54	48 – 73	1 000	1 002	72	40 – 70	167 – 500	4 – 7

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

El diámetro medio numérico estimado con la *Ecuación 3.17* tiene un error estándar relativo de 5.06 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 99.24 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 94.98 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura 3.3* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 87.24 %:

$$k_{10} = 177.14 \cdot 10^{-3} We^{-0.0773} \tag{3.18}$$

La velocidad característica que muestra el mayor coeficiente de determinación para el análisis de regresión del segundo modelo es la que se basa en el gasto volumétrico y la amplitud de vibración, expresada en la *Ecuación 2.17*.

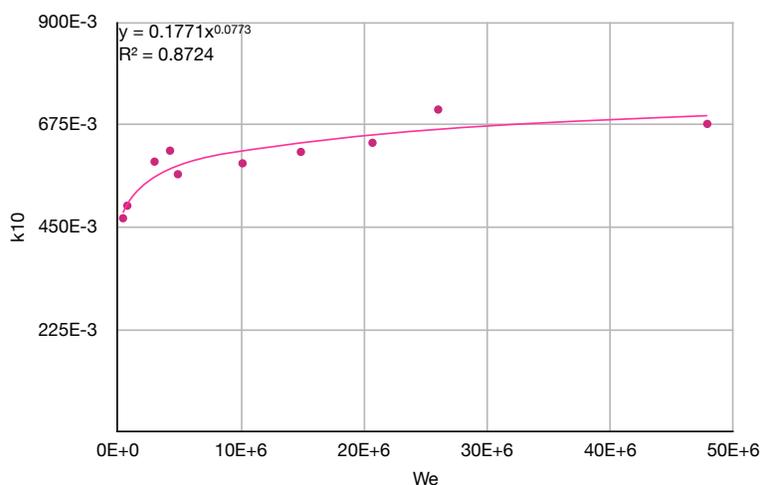


Figura 3.3: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{10} como función del número adimensional de Weber We para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

Coeficientes de proporcionalidad

El diámetro medio numérico estimado con la *Ecuación 3.18* tiene un error estándar relativo de 4.72 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 99.66 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 95.86 %. La correlación formada con el segundo modelo se determina como el estimador del diámetro medio numérico:

$$D_{10} = 177.14 \cdot 10^{-3} We^{-0.0773} \lambda \quad 3.19$$

Correlaciones en la literatura

Avvaru et al. (2006) propusieron una correlación para estimar el diámetro medio numérico basada en los grupos adimensionales de Rajan y Pandit, utilizaron datos experimentales de fluidos newtonianos y no newtonianos para obtener una correlación que engloba fluidos de comportamiento pseudoplástico:

$$D_{10} = \sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} + 0.0013 We^{0.008} Oh^{\frac{0.14}{n_f}} In^{0.28} \quad 3.20$$

Para estimar el diámetro medio numérico de un líquido newtoniano, el *índice de comportamiento de flujo* n_f toma un valor de 1.

Barba et al. (2009) desarrollaron una correlación basada en los grupos adimensionales de Rajan y Pandit. La correlación fue optimizada para estimar el diámetro medio numérico para la atomización de un alginato. Los alginatos son fluidos no newtonianos, por lo que no se compara con la correlación desarrollada en el presente trabajo.

Empleando los datos experimentales para el diámetro medio numérico utilizados en el análisis de regresión, la *Ecuación 3.20* tiene un error estándar relativo de 23.21 %, una confiabilidad

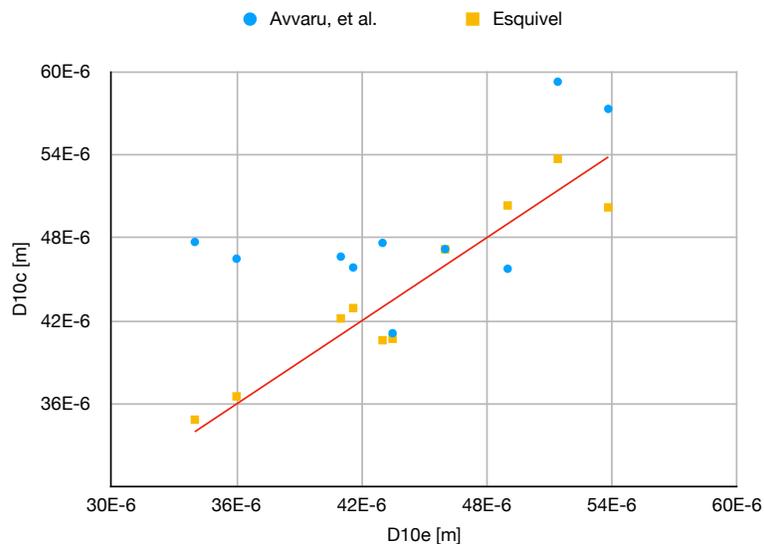


Figura 3.4: Gráfica de paridad de las expresiones para el diámetro medio numérico. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{10c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{10e} .

para la prueba t de Student de 10.30 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 68.50 %.

La *Figura 3.4* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios numéricos calculados contra los experimentales para las dos expresiones analizadas. La expresión desarrollada en el presente trabajo muestra el ajuste más exacto.

Diámetro medio volumétrico

La *Tabla 3.3* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio volumétrico y el diámetro medio numérico, en total se analizan 10 ensayos experimentales.

Primer modelo

La correlación obtenida mediante el análisis de regresión para el primer modelo estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio volumétrico con un coeficiente de determinación de 91.56 %:

$$k_{30} = 264.91 \cdot 10^{-3} r^{*-0.3370} \dot{V}^{*0.1882} \quad 3.21$$

El diámetro medio volumétrico estimado con la *Ecuación 3.21* tiene un error estándar relativo de 4.63 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 98.38 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 94.00 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura 3.5* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 91.40 %:

$$k_{30} = 309.11 \cdot 10^{-3} C\alpha^{0.2007} \quad 3.22$$

La velocidad característica que muestra el mayor coeficiente de determinación para el análisis de regresión del segundo modelo es la que se basa en el gasto volumétrico y la amplitud de vibración, expresada en la *Ecuación 2.17*.

El diámetro medio volumétrico estimado con la *Ecuación 3.22* tiene un error estándar relativo de 4.51 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 99.74 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 98.04 %. La correlación formada con el segundo modelo se determina como el estimador del diámetro medio volumétrico:

$$D_{30} = 309.11 \cdot 10^{-3} C\alpha^{0.2007} \lambda \quad 3.23$$

correlación para
el diámetro
medio
volumétrico

Correlaciones en la literatura

Dobre y Bolle (1998) propusieron una correlación para estimar el diámetro medio volumétrico basada en el modelo de Lang:

$$D_{30} = 0.36 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}} \quad 3.24$$

Coeficientes de proporcionalidad

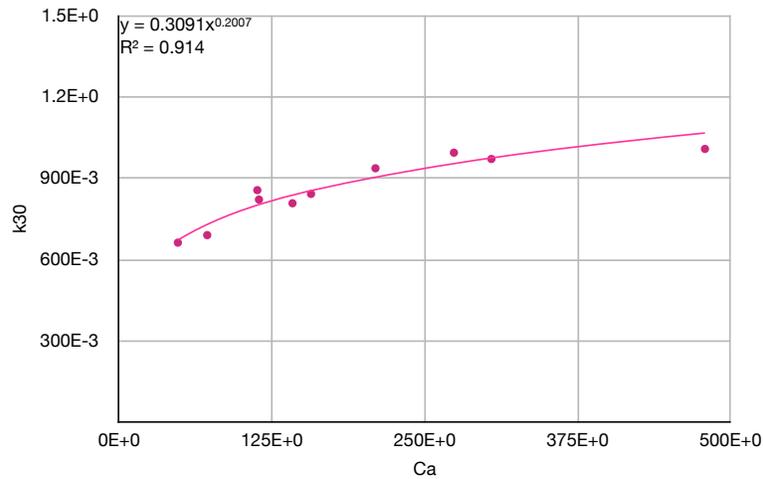


Figura 3.5: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{30} como función del número adimensional de capilaridad Ca para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

Empleando los datos experimentales para el diámetro medio numérico utilizados en el análisis de regresión, la *Ecuación 3.24* tiene un error estándar relativo de 39.51 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 0.00 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 5.41 %.

La *Figura 3.6* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios volumétricos calculados contra los experimentales para las dos expresiones analizadas. La expresión de Dobre y Bolle

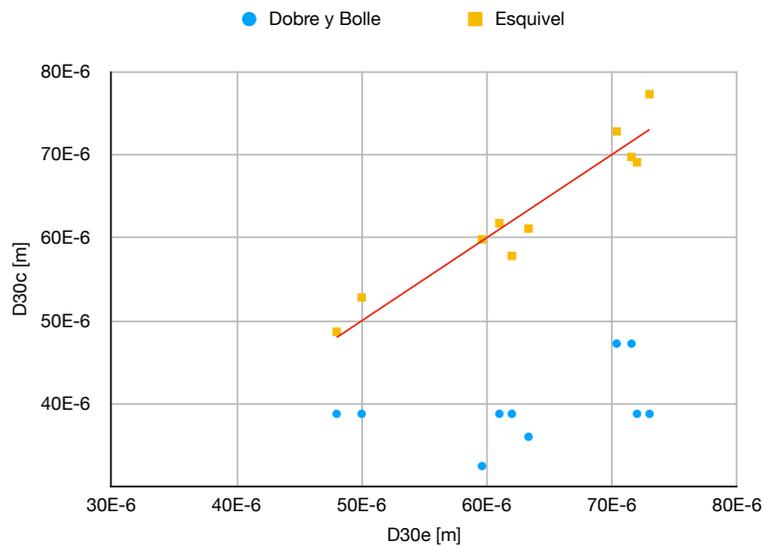


Figura 3.6: Gráfica de paridad de las expresiones para el diámetro medio volumétrico. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{30c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{30e} .

subestima significativamente al diámetro medio, razón de que muestre una confiabilidad nula en la prueba t de Student. La expresión desarrollada en el presente trabajo muestra el ajuste más exacto.

Diámetro medio de Sauter

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla 3.4* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio de Sauter, en total se analizan 160 ensayos experimentales.

Primer modelo

La correlación obtenida mediante el análisis de regresión para el primer modelo estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio de Sauter con un coeficiente de determinación de 64.37 %:

$$k_{32} = 80.47 \cdot 10^{-3} r^{*-0.4058} \dot{V}^{*0.2874} \tag{3.25}$$

El diámetro medio de Sauter estimado con la *Ecuación 3.25* tiene un error estándar relativo de 23.65 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 33.81 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 1.86 %.

Tabla 3.4: Datos experimentales para el análisis de regresión del diámetro medio de Sauter.

Autor	D_{32} μm	ρ kg/m^3	μ $\mu\text{Pa s}$	σ mN/m	f kHz	\dot{V} mm^3/s	r μm
Mizutani, et al. (1972)	78 – 97	1 000	1 002	72	40 – 70	167 – 500	4 – 7
Mochida (1978)	98 – 189	998	1 000	73	26	1 667 – 13 333	12 – 20
Sindayihebura, et al. (1997)	21 – 38	791 – 1 000	597 – 1 796	23 – 73	33 – 58	110 – 556	1 – 5
Ramisetty, et al. (2013)	70 – 212	912 – 1 151	890 – 8 800	29 – 73	20 – 130	54 – 453	1 – 2
Lozano, et al. (2014)	5	1 000	1 002	73	1 650	34	2

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

Coeficientes de proporcionalidad

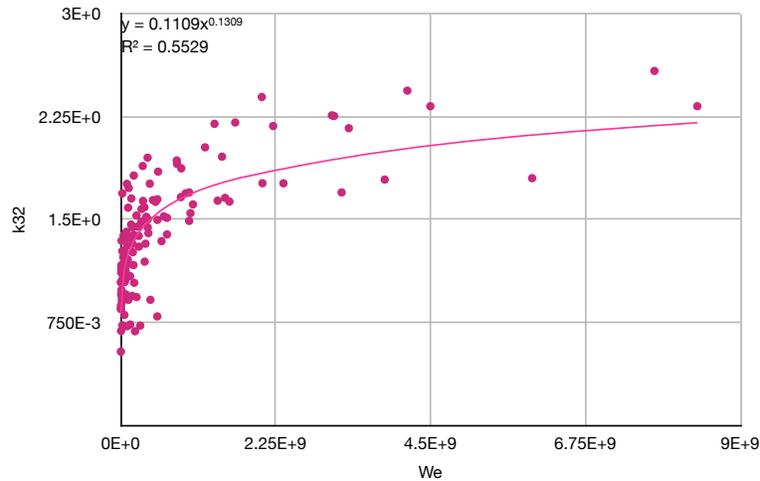


Figura 3.7: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{32} como función del número adimensional de Weber We para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura 3.7* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 55.29 %:

$$k_{32} = 110.93 \cdot 10^{-3} We^{0.1309} \quad 3.26$$

La velocidad característica que muestra el mayor coeficiente de determinación para el análisis de regresión del segundo modelo es la que se basa en el gasto volumétrico y la amplitud de vibración, expresada en la *Ecuación 2.17*.

El diámetro medio de Sauter estimado con la *Ecuación 3.26* tiene un error estándar relativo de 24.93 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 66.34 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 2.67 %. La correlación formada con el primer modelo se determina como el estimador del diámetro medio de Sauter debido a que presenta un error estándar relativo menor:

$$D_{32} = 80.47 \cdot 10^{-3} r^{*-0.4058} \dot{V}^{*0.2874} \lambda \quad 3.27$$

Correlaciones en la literatura

Mizutani et al. (1972) propusieron una correlación para estimar el diámetro medio de Sauter basada en observaciones experimentales de mezclas agua-glicerina y agua-etanol para variar la viscosidad y la tensión superficial del líquido, respectivamente:

$$D_{32} = 4.16 \left(\frac{\rho}{\sigma} \right)^{\frac{1}{3}} \mu^{\frac{1}{4}} \left(540 f^{-\frac{2}{3}} + \frac{7000}{f r} \left(\frac{\dot{V}}{5} \right)^{\frac{120}{f r}} \right) \quad 3.28$$

correlación para
el diámetro
medio de Sauter

La Ecuación 3.28 requiere que la densidad se ingrese en g/cm^3 , la viscosidad en cP , la tensión superficial en dyn/cm , la frecuencia en kHz , la amplitud de vibración en μm y el gasto volumétrico en cc/min , el diámetro medio de Sauter se calcula en μm .

Mochida (1978) propuso una correlación basada en observaciones experimentales de mezclas agua-glicerina y agua-etanol para variar la viscosidad y la tensión superficial del líquido, respectivamente:

$$D_{32} = 31.7 \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{0.354} \mu^{0.303} \dot{V}^{0.139} \quad 3.29$$

La Ecuación 2.39 no considera el efecto de la frecuencia ni de la amplitud de vibración, por lo que no se incluye en el análisis.

Sindayihebura et al. (1997) propusieron una correlación para estimar el diámetro medio de Sauter basada en el modelo de Lang:

$$D_{32} = 0.34 \sqrt[3]{\frac{16 \pi \sigma}{\rho f^2}} \quad 3.30$$

Ramisetty et al. (2013) ajustaron una correlación para estimar el diámetro medio de Sauter basada en los grupos adimensionales de Rajan y Pandit, utilizaron datos experimentales de mezclas agua-glicerina y agua-metanol para variar la viscosidad y la tensión superficial del líquido, respectivamente:

$$D_{32} = 0.00154 \sqrt[3]{\frac{\pi \sigma}{\rho f^2}} \left(1 + \sqrt[5]{\frac{\rho f^2}{\pi \sigma}} We^{0.154} Oh^{-0.111} In^{-0.033}\right) \quad 3.31$$

Empleando los datos experimentales para el diámetro medio de Sauter utilizados en el análisis de regresión, las Ecuaciones 3.28, 3.30 y 3.31 tienen un error estándar relativo de 18 159 %, 65 % y 131 %, respectivamente. Las tres ecuaciones tienen una confiabilidad para la prueba t de Student de 0 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 0 %.

La Figura 3.8 ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios de Sauter calculados contra los experimentales para las cuatro expresiones analizadas. La expresión de Mizutani et al. presenta errores considerablemente elevados, la mayoría de los valores que estima la correlación se encuentran fuera de los límites graficados. La expresión de Sindayihebura et al. subestima significativamente al diámetro medio. La expresión desarrollada en el presente trabajo muestra el ajuste más exacto.

Diámetro medio superficial

La definición del diámetro medio de Sauter permite calcular al diámetro medio superficial a partir del volumétrico y el de Sauter:

$$D_{20} = \sqrt{\frac{D_{30}^3}{D_{32}}} \quad 3.32$$

correlación para el diámetro medio superficial

No se desarrolla una correlación propia para la estimación del diámetro medio superficial por falta de datos experimentales para realizar un análisis de regresión. Entre las correlaciones

Coeficientes de proporcionalidad

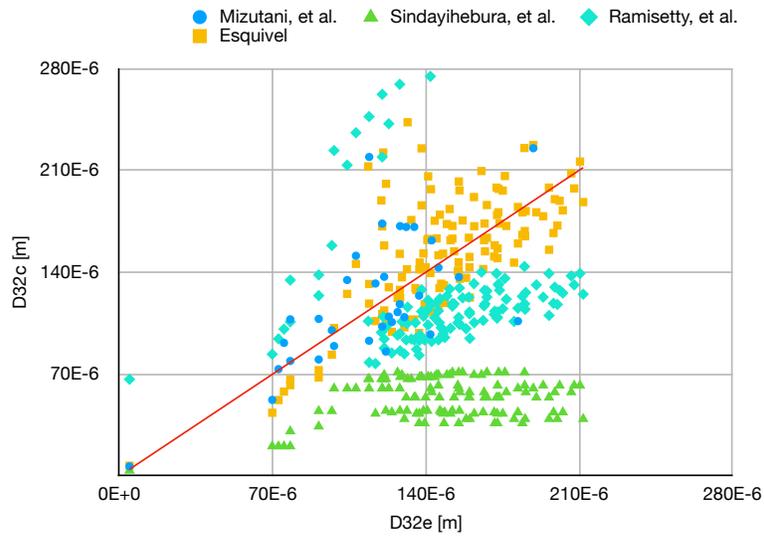


Figura 3.8: Gráfica de paridad de las expresiones para el diámetro medio de Sauter. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{32c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{32e} .

publicadas no se ha propuesto ninguna correlación para la estimación del diámetro medio superficial.

3.4 Conclusiones

Los números de Reynolds, Weber, capilaridad y potencia con la velocidad característica expresada en la *Ecuación 2.17*, son los números de mayor representatividad para el análisis de la atomización ultrasónica directa de capa fina:

$$Re = \frac{\rho \dot{V}}{\mu r} \quad 3.33$$

$$We = \frac{\rho \dot{V}^2}{\sigma r^3} \quad 3.34$$

$$Ca = \frac{\mu \dot{V}}{\sigma r^2} \quad 3.35$$

$$Pn = \frac{\dot{V}}{f r^3} \quad 3.36$$

El número de Ohnesorge no mostró correlaciones significativas en el análisis de regresión de los diámetros medios. El Ohnesorge es un número de relevancia para el análisis de la atomización de un chorro, pero no es representativo de la atomización ultrasónica de capa fina de acuerdo con los análisis realizados.

Longitud de onda

La longitud de onda de las ondas capilares es una función de la frecuencia de la onda acústica y de las propiedades del líquido. La longitud de onda incrementa cuando disminuye la frecuencia, cuando disminuye la densidad, cuando incrementa la viscosidad o cuando incrementa la tensión superficial del líquido.

La correlación propuesta muestra un error menor que las expresiones publicadas. La correlación de Dobre subestima la longitud de onda. La expresión de Kelvin sobreestimar el valor de la longitud de onda cuando es mayor a $70 \mu\text{m}$. Este hecho sugiere que el efecto de la viscosidad es dominante para longitudes de onda grandes.

Diámetros medios

Para el diámetro medio numérico, el número adimensional de Weber tiene mayor correlación con los diámetros experimentales. El número de Weber compara el efecto de la fuerza de excitación con la tensión superficial.

El número de capilaridad tiene el mayor coeficiente de determinación en el análisis del diámetro medio volumétrico. El número de capilaridad compara los efectos de la viscosidad con la tensión superficial, es decir, pondera la energía disipada en el proceso de atomización con la energía superficial contenida en las ondas capilares.

Para el diámetro medio de Sauter, el número de Weber tiene el mayor coeficiente de determinación. No obstante, el modelo basado en la amplitud y el gasto adimensional se escoge como estimador debido a que tiene un error estándar relativo menor. En el análisis de regresión del diámetro medio de Sauter las correlaciones tienen un menor ajuste que para los otros diámetros. Esto puede deberse a que se tienen datos para distintos fluidos, mientras que las otras correlaciones fueron calculadas únicamente para agua. Una explicación alterna del bajo ajuste es que los datos experimentales provienen de una mayor cantidad de artículos, en los cuales cada investigador emplea una metodología de muestreo distinta.

En el presente trabajo se desarrolló la primera correlación publicada en la literatura abierta para estimar el diámetro medio superficial. Para poder desarrollar correlaciones de mayor precisión es indispensable obtener datos experimentales con un método de muestreo estandarizado. Es deseable realizar los muestreos para distintos líquidos, variando la frecuencia, la intensidad y el gasto de la atomización.

Las correlaciones desarrolladas permiten estimar los diámetros medios de la distribución del aerosol. Con las estimaciones de los diámetros medios, se pueden resolver las ecuaciones constitutivas estadísticas para calcular la distribución de tamaño de gotas del aerosol.

Bibliografía

- 40 CFR § 136.6. «Method modifications and analytical requirements.» OFR. 2020. NARA.
- Antonevich, John N. 1959. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *IRE Transactions on Ultrasonic Engineering* PGUE-7: 6-15.
- Avvaru, Balasubrahmanyam, Mohan Narayan Patil, Parag R. Gogate, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2006. «Ultrasonic atomization: Effect of liquid phase properties.» *Ultrasonics* 44 (2): 146-158.
- Barba, Anna Angela, Matteo d'Amore, Sara Cascone, Gaetano Lamberti, y Giuseppe Titomanlio. 2009. «Intensification of biopolymeric microparticles production by ultrasonic assisted atomization.» *Chemical Engineering and Processing* 48 (10): 1477-1483.
- Dobre, Miruna. 2003. *Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques le formalisme de l'entropie maximale*. PhD Thesis, Département de mécanique, Faculté des sciences appliquées, Louvain-la-Neuve: Université catholique de Louvain.
- Dobre, Miruna, y Léon Bolle. 1998. «Theoretical Prediction of Ultrasonic Spray Characteristics Using the Maximum Entropy Formalism.» *14th ILASS-Europe*. Manchester: ILASS.
- Eisenmenger, W. 1959. «Dynamic properties of the surface tension of water and aqueous solutions of surface active agents with standing capillary waves in the frequency range from 10 kcs to 1.5 Mcs.» *Acustica* 9 (4): 327-340.
- Khmelev, Vladimir N., Andrey V. Shalunov, Roman N. Golyh, Viktor A. Nesterov, Roman S. Dorovskikh, y Anna V. Shalunova. 2017. «Providing the Efficiency and Dispersion Characteristics of Aerosols in Ultrasonic Atomization.» *Journal of Engineering Physics and Thermophysics* 90 (4): 831-844.
- Kim, Jungsoon, Jihyang Kim, Kanglyeol Ha, y Moojoon Kim. 2016. «Numerical analysis for the optimum condition of ultrasonic nebulizing.» *Japanese Journal of Applied Physics* 55 (7S1): KE03.
- Lang, Robert J. 1962. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *The Journal of the Acoustical Society of America* 34 (1): 6-8.
- Lozano, Antonio, Ana González-Espinosa, Juan Antonio García, Esteban Calvo, Jorge Barroso, y Felix Barreras. 2014. «High flow-rate ultrasonic seeder.» *Flow Measurement and Instrumentation* 38: 62-66.
- Mizutani, Yukio, Yasutake Uga, y Takeo Nishimoto. 1972. «An investigation on ultrasonic atomization.» *Bulletin of JSME* 15 (83): 620-627.
- Mochida, T. 1978. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *ICLAS '78*. Tokyo: Institute for Liquid Atomization and Spray Systems. 193-199.
- Muñoz, Mariana Isabel, Simon Goutier, Sylvie Foucaud, Gilles Mariaux, y Thierry Poirier. 2018. «Droplet size prediction in ultrasonic nebulization for non-oxide ceramic powder synthesis.» *Ultrasonics* 84: 25-33.
- NIST. 2013. *Engineering Statistics Handbook*. SEMATECH.
- Rajan, Raghavachari, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2001. «Correlations to Predict Droplet Size in Ultrasonic Atomisation.» *Ultrasonics* 39 (4): 235-255.

- Ramisetty, Kiran A., Aniruddha Bhalchandra Pandit, y Parag R. Gogate. 2013. «Investigations into ultrasound induced atomization.» *Ultrasonics Sonochemistry* 20 (1): 254-264.
- Sindayihebura, Daniel, Jean Cousin, y Christophe Dumouchel. 1997. «Experimental and Theoretical Study of Sprays Produced by Ultrasonic Atomisers.» *Particle and Particle Systems Characterization* 14 (2): 93-101.
- Thomson, Baron Kelvin, William. 1871. «Hydrokinetic Solutions and Observations.» *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 42 (281): 362-377.
- Tsai, Shirley C., Paul Childs, y Patrick Luu. 1996. «Ultrasound-Modulated two-Fluid Atomization of a Water Jet.» *AIChE Journal* 42 (12): 3340-3350.

4 Distribución de tamaño de gotas

La distribución de tamaño de gotas se estima para un aerosol atomizado ultrasónicamente con un atomizador de capa fina. La distribución se calcula con el formalismo de máxima entropía a partir de los diámetros medios estimados. En objetivo del presente capítulo es formular analíticamente el formalismo de máxima entropía y calcular la distribución de tamaño de gotas de cuatro ensayos experimentales. El ajuste de las distribuciones calculadas con las experimentales se determina mediante un análisis estadístico. Para cada ensayo se analiza si incluir el diámetro medio numérico adicional a los diámetros medios superficial y volumétrico mejora la exactitud de la predicción.

4.1 Formalismo de máxima entropía

Determinar el estado de un sistema conformado por un número grande de elementos que interactúan entre sí es una tarea compleja. El principio de máxima entropía establece que, si se conocen parámetros globales que describen al sistema, el estado más probable del sistema es aquel que maximiza su entropía y cumple con las restricciones establecidas por los parámetros globales conocidos. En otras palabras, el mejor estimado del estado del sistema es aquel que no asume información desconocida. Esto se garantiza calculando el estado que maximiza la incertidumbre del sistema y que satisface las condiciones globales conocidas (Jaynes 1957).

principio de
máxima entropía

Para calcular la distribución de tamaño de gotas menos sesgada, se requiere seleccionar una entropía y formular las restricciones representadas por los diámetros medios de una forma adecuada para la maximización. La distribución del aerosol es aquella que maximizar la entropía seleccionada y cumple con los diámetros medios establecidos.

Selección de la entropía

Los posibles resultados de un proceso estocástico se representan mediante una distribución de probabilidad. Diferentes procesos estocásticos se modelan con diferentes distribuciones de probabilidad y conllevan distintas cantidades de incertidumbre. El funcional que toma como argumento a la *distribución de probabilidad* P y calcula una métrica de su incertidumbre recibe

Formalismo de máxima entropía

el nombre de *entropía* S . La entropía empleada en la mecánica estadística clásica es la entropía de Boltzmann-Gibbs (Chapman y Cowling 1995):

$$S(P) = -k_B \sum_{i=1}^n (P_i \ln(P_i)) \quad 4.1$$

La entropía de Boltzmann-Gibbs se escoge como entropía para maximizar, no obstante, la *constante de Boltzmann* k_B se sustituye por un uno para simplificar el cálculo de la distribución:

entropía por maximizar

$$S(P) = \sum_{i=1}^n (-P_i \ln(P_i)) \quad 4.2$$

Tanto la entropía de Boltzmann-Gibbs, como la versión simplificada propuesta pertenecen a la familia de entropías de Shannon (Shannon 1948).

Formulación de las restricciones

La distribución que maximiza a la entropía simplificada de Boltzmann-Gibbs debe cumplir con los momentos que constituyen los diámetros medios. Las restricciones planteadas por los diámetros medios se formulan de una manera apropiada para la maximización (Babinsky y Sojka 2002).

Normalización

La primera restricción es la condición de normalización:

$$\sum_{i=1}^n (P_i) = 1 \quad 4.3$$

La condición de normalización establece que la función P es una distribución masa de probabilidad.

Conservación de masa

La segunda restricción es la forma estadística de la ecuación simplificada de conservación de masa:

$$\sum_{i=1}^n (D_i^3 P_i) = D_{30}^3 \quad 4.4$$

El diámetro medio volumétrico se estima mediante la *Ecuación 3.23*:

$$D_{30} = 309.11 \cdot 10^{-3} C \alpha^{0.2007} \lambda \quad 3.23$$

Conservación de energía

La tercera restricción es la forma estadística de la ecuación simplificada de conservación de energía:

$$\sum_{i=1}^n (D_i^2 P_i) = D_{20}^2 \quad 4.5$$

El diámetro medio superficial se estima mediante la *Ecuación 3.32* a partir de los diámetros medios volumétrico y de Sauter:

$$D_{20} = \sqrt{\frac{D_{30}^3}{D_{32}}} \quad 3.32$$

Media de la distribución

La cuarta restricción es el diámetro medio numérico del aerosol:

$$\sum_{i=1}^n (D_i P_i) = D_{10} \quad 4.6$$

El diámetro medio numérico se estima mediante la Ecuación 3.19:

$$D_{10} = 177.14 \cdot 10^{-3} We^{-0.0773} \lambda \quad 3.19$$

Solución de la maximización

La distribución de tamaño de gotas del aerosol es la distribución que maximiza la Ecuación 4.2 y cumple con las Ecuaciones 4.3, 4.4, 4.5 y 4.6. La distribución que se calcula cuando se emplean los diámetros medios como restricciones es una distribución base numérica. Para determinar si incluir el diámetro medio numérico adicional a los diámetros medios superficial y volumétrico mejora la exactitud de la estimación, se propone analizar dos casos. En el primer caso, la distribución se calcula únicamente con las restricciones de normalización, conservación de masa y de energía. En el segundo caso, la distribución se calcula considerando las cuatro restricciones.

casos conforme los diámetros medios

La maximización de la entropía se resuelve mediante los multiplicadores de Lagrange (Malham 2015). El método convierte el problema de maximización en un sistema de ecuaciones. El lagrangiano L se calcula a partir de la entropía y las restricciones:

$$L = -P_i \ln(P_i) + \lambda_0 P_i + \lambda_2 D_i^2 P_i + \lambda_3 D_i^3 P_i \quad 4.7$$

El lagrangiano se sustituye en la ecuación de Euler-Lagrange, la cual se resuelve para la distribución de probabilidad:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial P_i} (-P_i \ln(P_i) + \lambda_0 P_i + \lambda_2 D_i^2 P_i + \lambda_3 D_i^3 P_i) &= 0 \\ \Leftrightarrow P_i &= e^{-1+\lambda_0+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3} \end{aligned} \quad 4.8$$

La Ecuación 4.8 se sustituye en las restricciones y se obtiene un sistema de ecuaciones donde los multiplicadores de Lagrange λ_x son incógnitas:

$$\sum_{i=1}^n (e^{-1+\lambda_0+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = 1 \quad 4.9$$

$$\sum_{i=1}^n (D_i^2 e^{-1+\lambda_0+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = D_{20}^2 \quad 4.10$$

$$\sum_{i=1}^n (D_i^3 e^{-1+\lambda_0+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = D_{30}^3 \quad 4.11$$

Para el segundo caso, donde se considera la restricción del diámetro medio, la distribución de probabilidad toma la forma:

$$P_i = e^{-1+\lambda_0+\lambda_1 D_i+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3} \quad 4.12$$

y el sistema es de cuatro ecuaciones:

$$\sum_{i=1}^n (e^{-1+\lambda_0+\lambda_1 D_i+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = 1 \quad 4.13$$

Formalismo de máxima entropía

$$\sum_{i=1}^n (D_i e^{-1+\lambda_0+\lambda_1 D_i+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = D_{10} \quad 4.14$$

$$\sum_{i=1}^n (D_i^2 e^{-1+\lambda_0+\lambda_1 D_i+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = D_{20}^2 \quad 4.15$$

$$\sum_{i=1}^n (D_i^3 e^{-1+\lambda_0+\lambda_1 D_i+\lambda_2 D_i^2+\lambda_3 D_i^3}) = D_{30}^3 \quad 4.16$$

Para resolver los sistemas de ecuaciones se utiliza el algoritmo desarrollado por Agmon et al. (1979). El algoritmo propone cambiar el problema de resolver el sistema de k ecuaciones por el de minimizar una *función potencial* Θ con $k - 1$ argumentos. Para el primer caso se debe minimizar la siguiente función potencial:

$$\Theta(\lambda_2, \lambda_3) = \sum_{i=1}^n (e^{\lambda_2 (D_i^2 - D_{20}^2) + \lambda_3 (D_i^3 - D_{30}^3)}) \quad 4.17$$

El multiplicador λ_0 se calcula a partir de los multiplicadores λ_2 y λ_3 :

$$\lambda_0 = 1 - \ln\left(\sum_{i=1}^n (e^{\lambda_2 D_i^2 + \lambda_3 D_i^3})\right) \quad 4.18$$

Para el segundo caso se debe minimizar la siguiente función potencial:

$$\Theta(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \sum_{i=1}^n (e^{\lambda_1 (D_i - D_{10}) + \lambda_2 (D_i^2 - D_{20}^2) + \lambda_3 (D_i^3 - D_{30}^3)}) \quad 4.19$$

El multiplicador λ_0 se calcula a partir de los multiplicadores λ_1 , λ_2 y λ_3 :

$$\lambda_0 = 1 - \ln\left(\sum_{i=1}^n (e^{\lambda_1 D_i + \lambda_2 D_i^2 + \lambda_3 D_i^3})\right) \quad 4.20$$

Para determinar la distribución base numérica de tamaño de gotas, los valores de los multiplicadores de Lagrange se sustituyen en la *Ecuaciones 4.8* y *4.12* para el primer y segundo caso, respectivamente.

Análisis estadístico

Las distribuciones calculadas se comparan con las distribuciones experimentales para determinar su exactitud como estimadores de la distribución del aerosol. La comparación se realiza con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov (García Portugués 2020).

La prueba de Kolmogorov-Smirnov determina si una muestra proviene de una población caracterizada por una distribución teórica. Para ello, en la prueba se compara la *distribución acumulativa empírica* F_e de la muestra con la *distribución acumulativa teórica* F . La *hipótesis nula* H_o de la prueba de bondad de ajuste es el caso dónde la distribución de la muestra experimental no proviene de una población caracterizada por la distribución teórica. La *hipótesis alternativa* H_a es el caso dónde la muestra proviene de una población caracterizada por la distribución teórica:

$$\begin{aligned} H_o: & \quad F_e \neq F \\ H_a: & \quad F_e = F \end{aligned} \quad 4.20$$

El *estadístico de prueba* K es el supremo de la diferencia de las distribuciones normalizado con la raíz del *número de elementos de la muestra* m :

$$K = \sqrt{m} \sup_{1 \leq j \leq m} |F_{e_j} - F_j| \quad 4.21$$

Para determinar si la distribución estimada corresponde con la distribución empírica, se calcula la confiabilidad crítica con que se acepta la hipótesis alternativa a partir de la *función acumulativa de la distribución de Kolmogorov-Smirnov H*, la cual es válida para muestras grandes (Panchenko 2016):

$$H(K) = 1 - 2 \sum_{i=1}^{\infty} ((-1)^{i-1} e^{-2 K^2 i^2}) \quad 4.22$$

4.2 Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

Para validar la metodología desarrollada, se calculan las distribuciones de cuatro ensayos experimentales. Los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter se calculan a partir de los seis parámetros que modelan la atomización de capa fina reportados para cada ensayo experimental. La *distribución base numérica de tamaño de gotas P* se calcula de los diámetros medios y la *distribución base volumétrica P_v* se calcula de la distribución base numérica con la *Ecuación 2.5*:

$$P_{V_i} = \frac{D_i^3 P_i}{\sum_{j=1}^n (D_j^3 P_j)} \quad 2.5$$

El proceso se repite para los dos casos planteados. En el primer caso, las distribuciones se calculan con los diámetros medios superficial y volumétrico. En el segundo caso, las distribuciones se calculan con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico. Los resultados de ambos casos se comparan con las distribuciones experimentales mediante la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov.

Los datos de los ensayos experimentales se obtienen del artículo de Mizutani et al. (1972). Los ensayos se llevan a cabo con diferentes frecuencias, gastos e intensidades. No obstante, todos los ensayos se realizan con agua como líquido de trabajo.

Primer ensayo

En el primer ensayo la densidad del líquido es de 1 000 kg/m³, la viscosidad de 1 000 μPa s y la tensión superficial de 72 mN/m. El ensayo se realiza con una frecuencia de 40 kHz, un gasto volumétrico de 166.7 mm³/s y una amplitud de vibración de 4.5 μm. La distribución experimental se estima con una muestra de 259 gotas. La *Tabla 4.1* muestra los diámetros medios experimentales y calculados.

Primer caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a 600 μm dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.1a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios superficial y volumétrico. La *Figura 4.1b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica.

Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

Para determinar la confiabilidad mediante la prueba de Kolmogorov-Smirnov, se calculan las distribuciones acumulativas. La *Figura 4.1c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.1d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Tabla 4.1: Diámetros medios experimentales y estimados para el primer ensayo.

Diámetro	D_{10}	D_{20}	D_{30}	D_{32}
	μm	μm	μm	μm
Experimental	53.82	63.19	71.56	91.00
Calculado	50.18	68.27	69.70	72.67

Fuente: Mizutani, et al. 1972. An investigation on ultrasonic atomization. JSME.

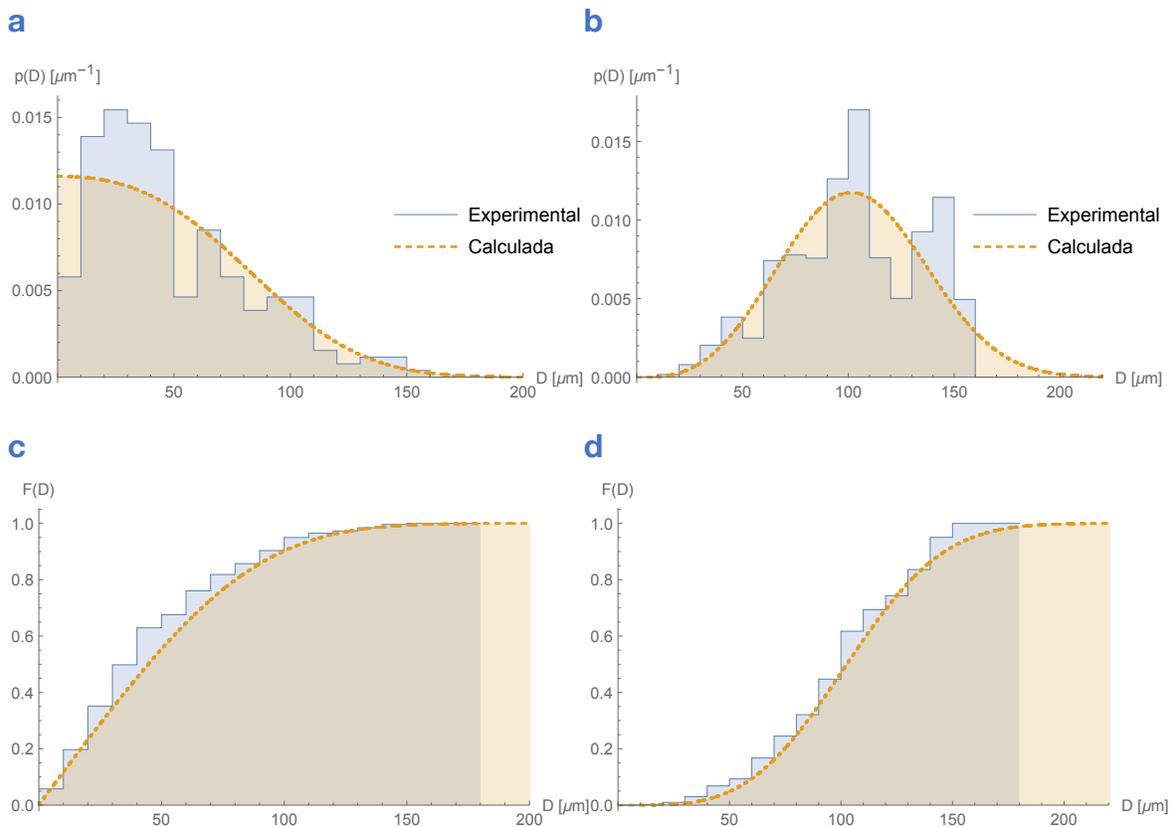


Figura 4.1: Distribuciones de tamaño de gotas para el primer caso del primer ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

Segundo caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a 600 μm dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.2a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico. La *Figura 4.2b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.2c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.2d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Discusión

La distribución estimada con los diámetros medios superficial y volumétrico tiene un diámetro medio numérico de 50.14 μm . El diámetro medio numérico estimado mediante la correlación desarrollada tiene un valor de 50.18 μm . La diferencia entre los diámetros medios numéricos de ambas distribuciones es menor a 0.08 %.

Las distribuciones de tamaño de gotas base numérica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 69.58 % para el primer caso y de 68.94 % para el segundo caso de

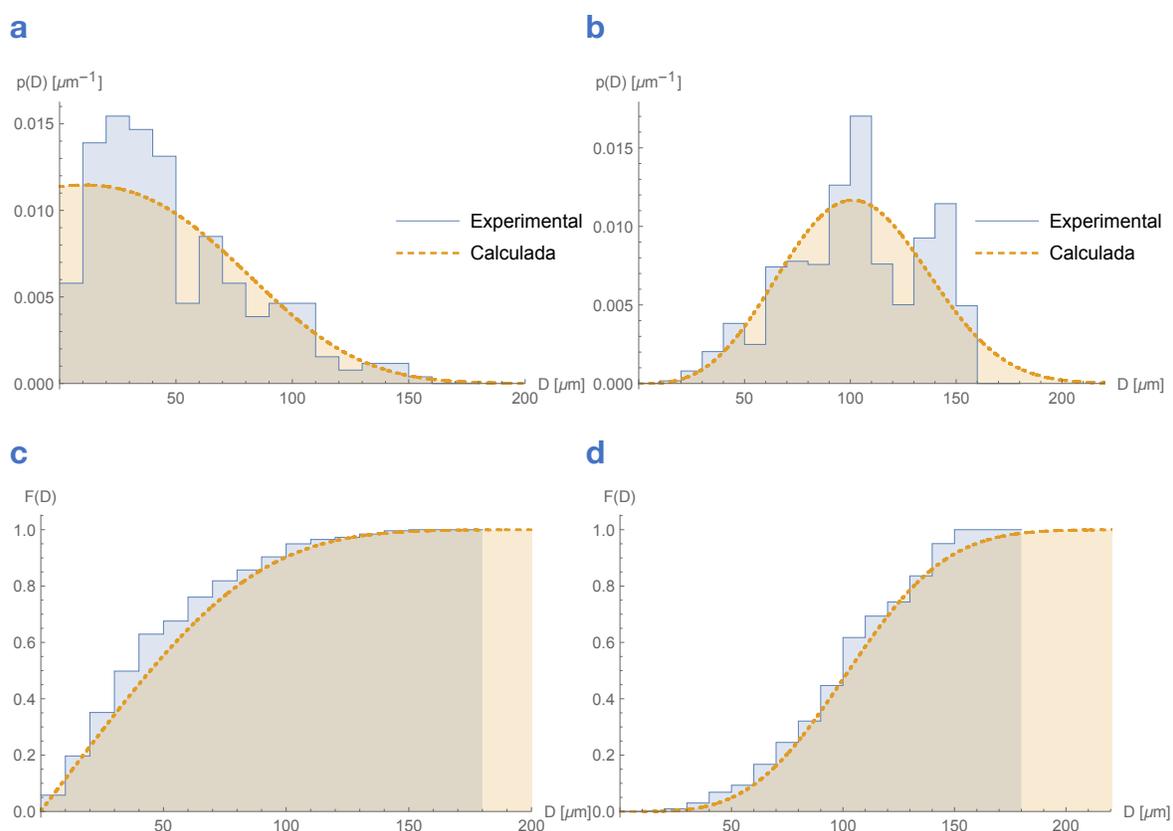


Figura 4.2: Distribuciones de tamaño de gotas para el segundo caso del primer ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

acuerdo con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov. Las distribuciones base volumétrica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 87.39 % para el primer caso y de 87.46 % para el segundo caso. Por consiguiente, las distribuciones del primer y segundo caso no tienen diferencias significativas y ambas son estimados aceptables de la distribución experimental. Para ambas pruebas se observa que el estimado de la distribución base volumétrica es más exacto que el estimado de la distribución base numérica.

confiabilidad de
la prueba de
Kolmogorov-
Smirnov

El estadístico de prueba para la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov se calcula a partir de un histograma de la muestra experimental y no de la distribución acumulativa empírica. Por ende, los valores reportados se emplean como parámetros de comparación para determinar la distribución de mejor ajuste, pero no representan los valores reales de la confiabilidad de la distribución.

Segundo ensayo

En el segundo ensayo la densidad del líquido es de $1\,000\text{ kg/m}^3$, la viscosidad de $1\,000\text{ }\mu\text{Pa s}$ y la tensión superficial de 72 mN/m . El ensayo se realiza con una frecuencia de 40 kHz , un gasto volumétrico de $500\text{ mm}^3/\text{s}$ y una amplitud de vibración de $7\text{ }\mu\text{m}$. La distribución experimental se estima con una muestra de 207 gotas. La *Tabla 4.2* muestra los diámetros medios experimentales y calculados.

Primer caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a $600\text{ }\mu\text{m}$ dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.3a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios superficial y volumétrico. La *Figura 4.3b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.3c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.3d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Segundo caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a $180\text{ }\mu\text{m}$ dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.4a* grafica la distribución base numérica de

Tabla 4.2: Diámetros medios experimentales y estimados para el segundo ensayo.

Diámetro	D_{10}	D_{20}	D_{30}	D_{32}
	μm	μm	μm	μm
Experimental	51.40	60.78	70.37	97.00
Calculado	53.68	68.03	72.78	83.29

Fuente: Mizutani, et al. 1972. An investigation on ultrasonic atomization. JSME.

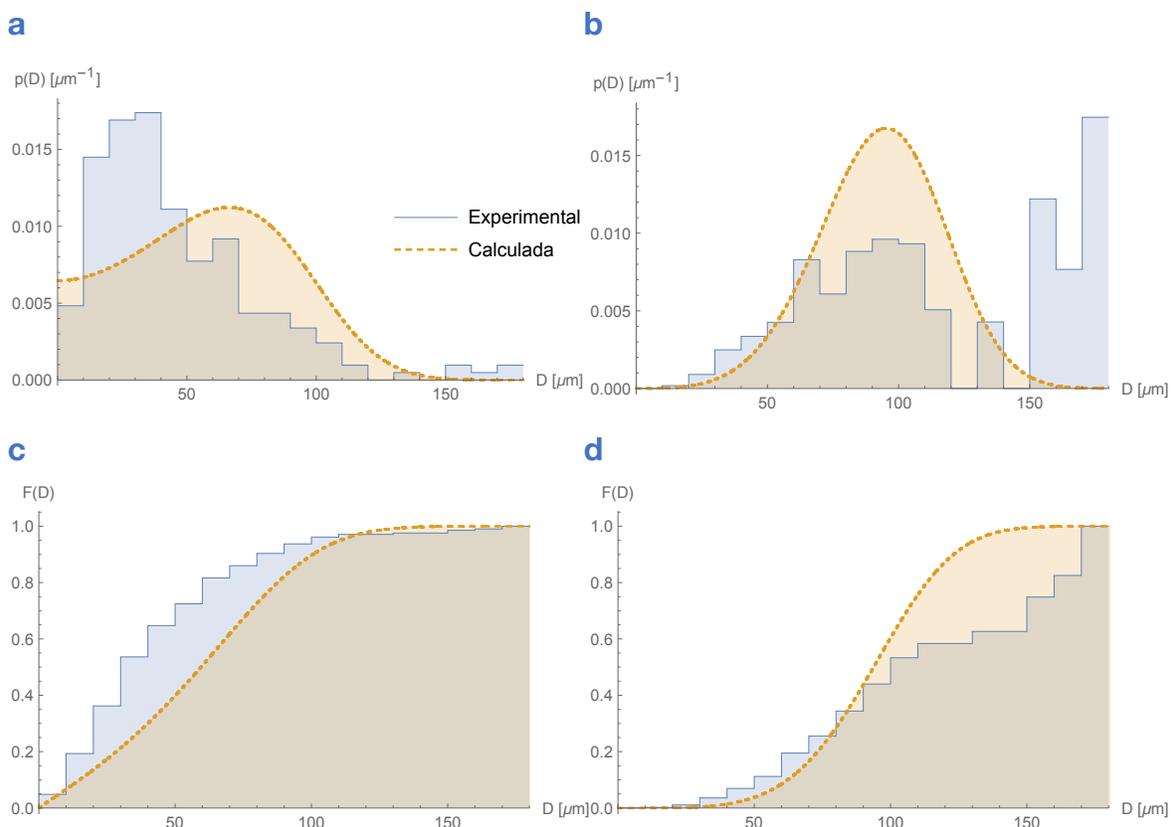


Figura 4.3: Distribuciones de tamaño de gotas para el primer caso del segundo ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

tamaño de gotas calculada con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico. La *Figura 4.4b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.4c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.4d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Discusión

La distribución estimada con los diámetros medios superficial y volumétrico tiene un diámetro medio numérico de $59.08 \mu\text{m}$. El diámetro medio numérico estimado mediante la correlación desarrollada tiene un valor de $53.68 \mu\text{m}$. La diferencia entre el diámetro medio numérico de la distribución calculada en el primer caso y el diámetro estimado es de 9.13% . La diferencia es significativa y, por consiguiente, las distribuciones estimadas en el primer y segundo caso son distintas.

Las distribuciones de tamaño de gotas base numérica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 4.20% para el primer caso y de 2.63% para el segundo caso de acuerdo con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov. Las distribuciones base

Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

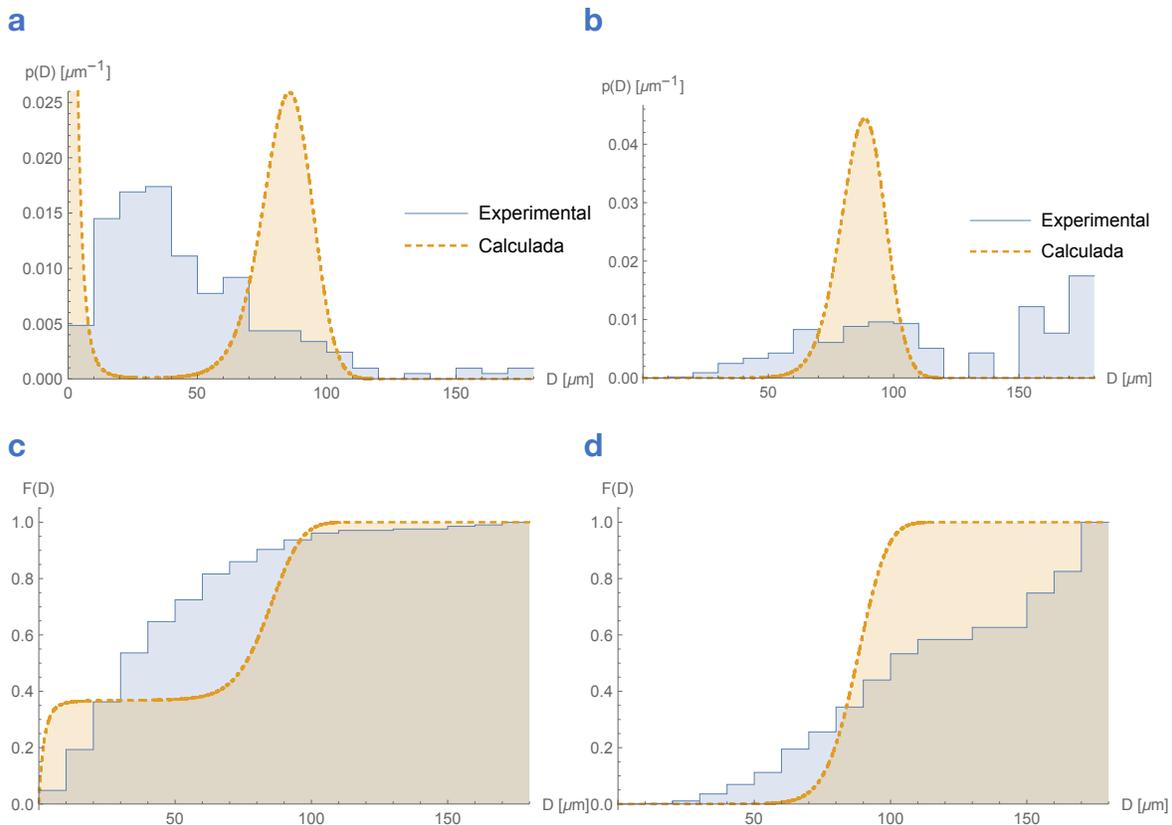


Figura 4.4: Distribuciones de tamaño de gotas para el segundo caso del segundo ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

volumétrica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 0.48 % para el primer caso y de 0.10 % para el segundo caso. En ambos casos, las distribuciones calculadas no estiman a la distribución experimental de acuerdo con la prueba de Kolmogorov-Smirnov. Para ambas pruebas se observa que el estimado de la distribución base numérica es más exacto que el estimado de la distribución base volumétrica.

Tercer ensayo

En el tercer ensayo la densidad del líquido es de $1\,000\text{ kg/m}^3$, la viscosidad de $1\,000\text{ }\mu\text{Pa s}$ y la tensión superficial de 72 mN/m . El ensayo se realiza con una frecuencia de 60 kHz , un gasto volumétrico de $333\text{ mm}^3/\text{s}$ y una amplitud de vibración de $4.7\text{ }\mu\text{m}$. La distribución experimental se estima con una muestra de 179 gotas. La *Tabla 4.3* muestra los diámetros medios experimentales y calculados.

Primer caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a 300 μm dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.5a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios superficial y volumétrico. La *Figura 4.5b*

Tabla 4.3: Diámetros medios experimentales y estimados para el tercer ensayo.

Diámetro	D_{10}	D_{20}	D_{30}	D_{32}
	μm	μm	μm	μm
Experimental	41.59	52.76	63.34	91.00
Calculado	42.92	58.08	61.10	67.63

Fuente: Mizutani, et al. 1972. An investigation on ultrasonic atomization. JSME.

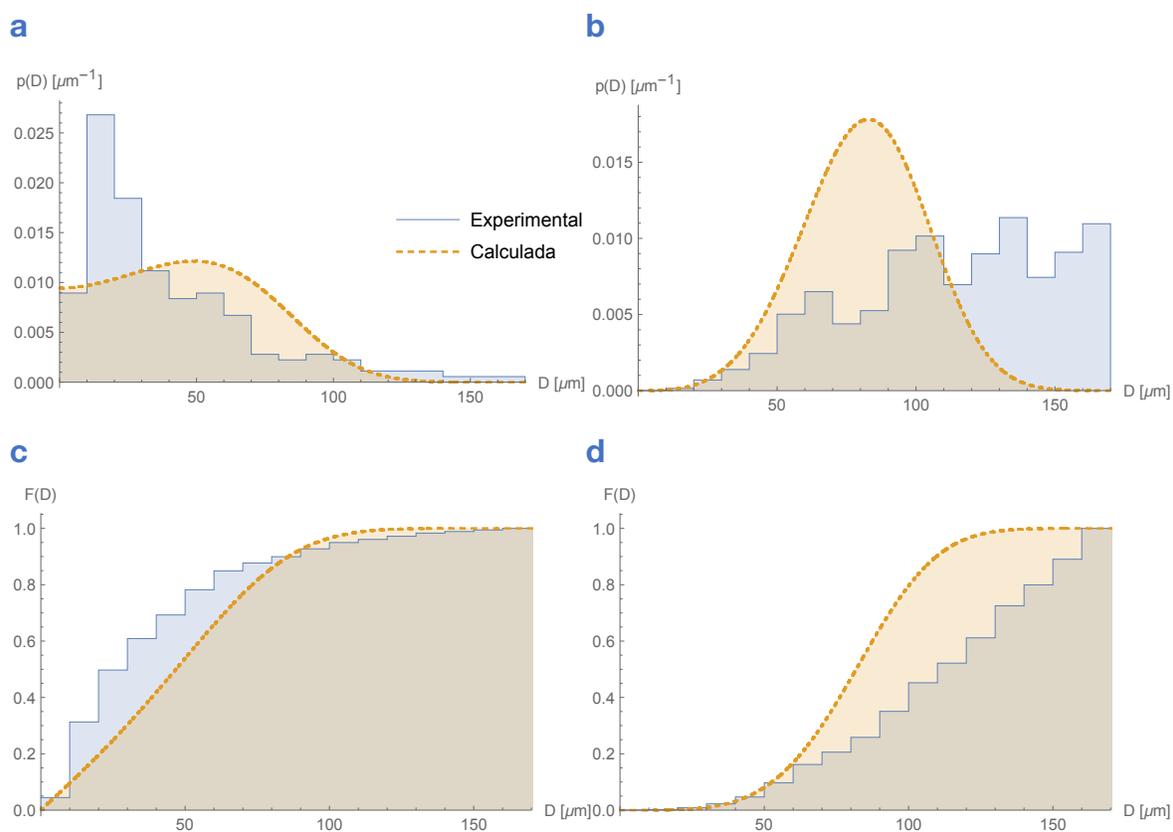


Figura 4.5: Distribuciones de tamaño de gotas para el primer caso del tercer ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.5c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.5d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Segundo caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a 180 μm dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.6a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico. La *Figura 4.6b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.6c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.6d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Discusión

La distribución estimada con los diámetros medios superficial y volumétrico tiene un diámetro medio numérico de 47.87 μm . El diámetro medio numérico estimado mediante la correlación desarrollada tiene un valor de 42.92 μm . La diferencia entre el diámetro medio numérico de la

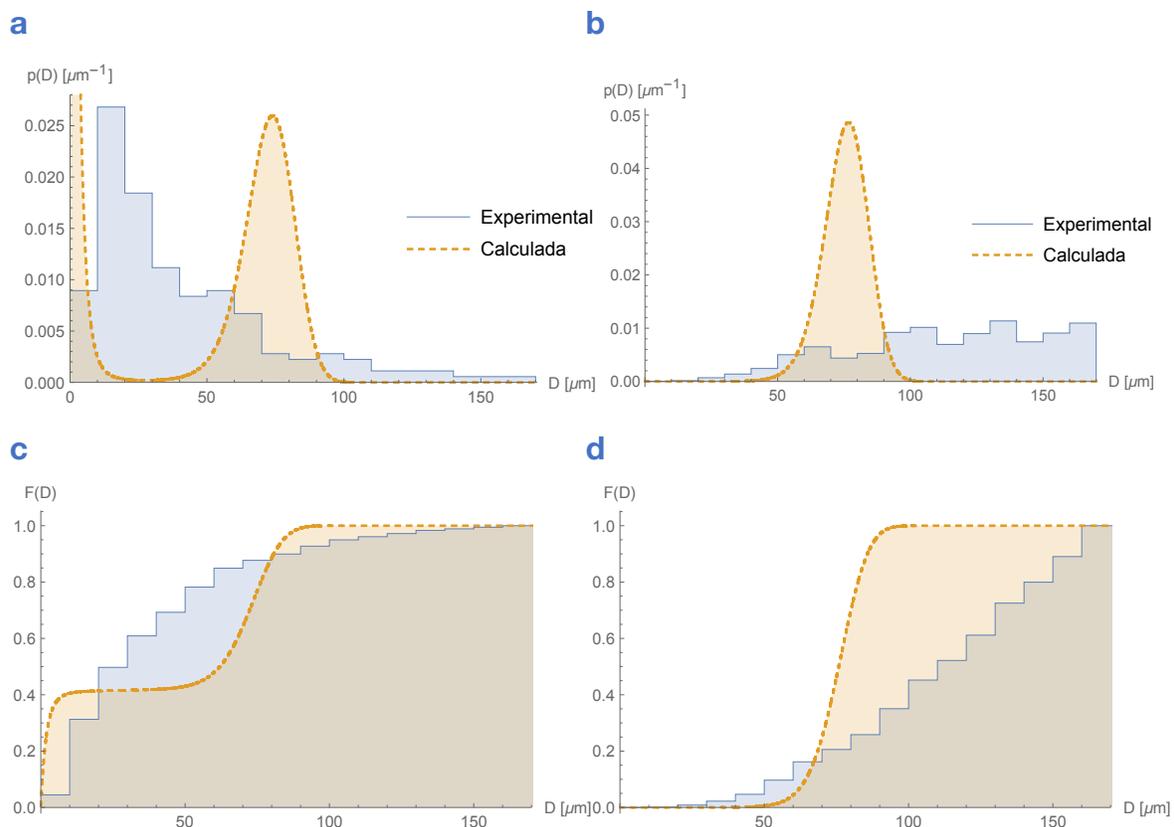


Figura 4.6: Distribuciones de tamaño de gotas para el segundo caso del tercer ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

distribución calculada en el primer caso y el diámetro estimado es de 10.33 %. La diferencia es significativa y, por consiguiente, las distribuciones estimadas en el primer y segundo caso son distintas.

Las distribuciones de tamaño de gotas base numérica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 2.41 % para el primer caso y de 0.80 % para el segundo caso de acuerdo con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov. Las distribuciones base volumétrica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 0.55 % para el primer caso y de 0.00 % para el segundo caso. En ambos casos, las distribuciones calculadas no estiman a la distribución experimental de acuerdo con la prueba de Kolmogorov-Smirnov. Para ambas pruebas se observa que el estimado de la distribución base numérica es más exacto que el estimado de la distribución base volumétrica.

Cuarto ensayo

En el cuarto ensayo la densidad del líquido es de $1\,000\text{ kg/m}^3$, la viscosidad de $1\,000\text{ }\mu\text{Pa s}$ y la tensión superficial de 72 mN/m . El ensayo se realiza con una frecuencia de 70 kHz , un gasto volumétrico de $333\text{ mm}^3/\text{s}$ y una amplitud de vibración de $3.9\text{ }\mu\text{m}$. La distribución experimental se estima con una muestra de 158 gotas. La *Tabla 4.4* muestra los diámetros medios experimentales y calculados.

Primer caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a $180\text{ }\mu\text{m}$ dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.7a* grafica la distribución base numérica de tamaño de gotas calculada con los diámetros medios superficial y volumétrico. La *Figura 4.7b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.7c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.7d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Segundo caso

La distribución base numérica de tamaño de gotas se calcula en un dominio de 0 a $600\text{ }\mu\text{m}$ dividido en 6 000 clases equidistantes. La *Figura 4.8a* grafica la distribución base numérica de

Tabla 4.4: Diámetros medios experimentales y estimados para el cuarto ensayo.

Diámetro	D_{10}	D_{20}	D_{30}	D_{32}
	μm	μm	μm	μm
Experimental	43.48	51.97	59.62	78.00
Calculado	40.70	56.82	59.80	66.25

Fuente: Mizutani, et al. 1972. An investigation on ultrasonic atomization. JSME.

Cálculo de la distribución de tamaño de gotas

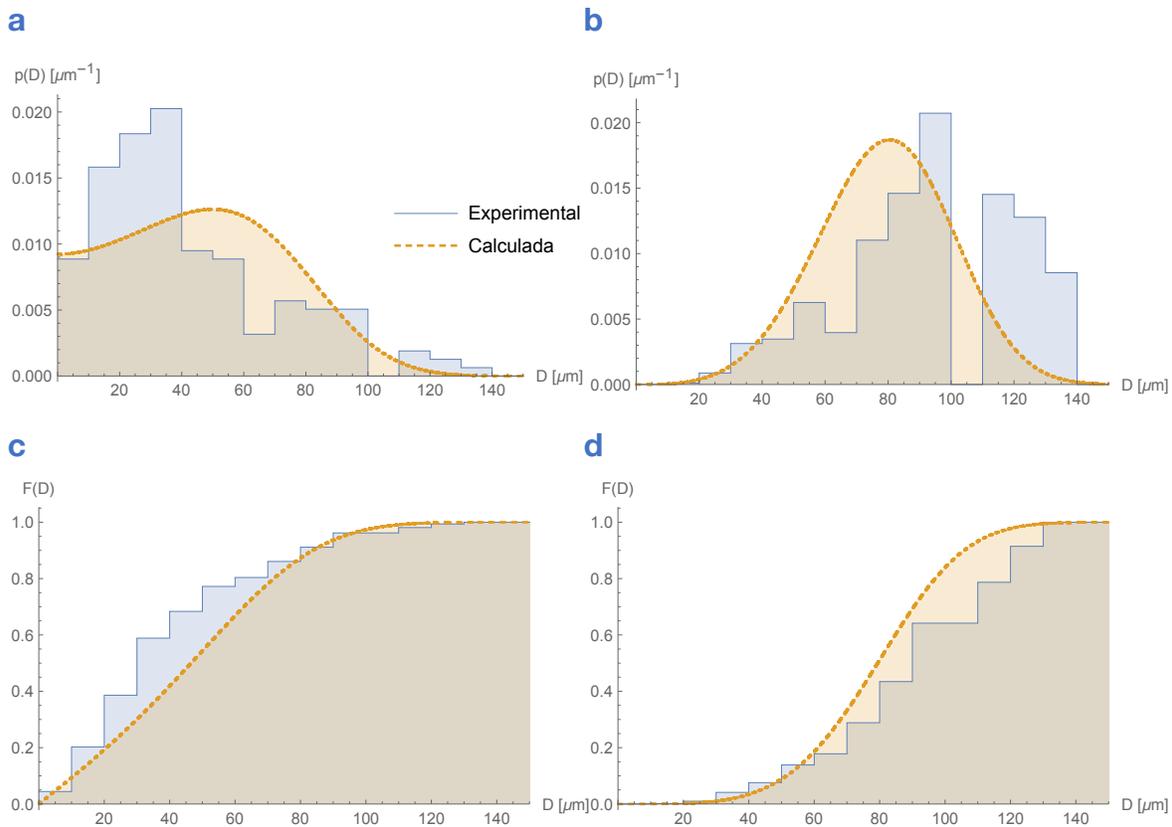


Figura 4.7: Distribuciones de tamaño de gotas para el primer caso del cuarto ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

tamaño de gotas calculada con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico. La *Figura 4.8b* grafica la distribución de tamaño de gotas base volumétrica calculada a partir de la distribución base numérica. La *Figura 4.8c* grafica las distribuciones acumulativas base numérica y la *Figura 4.8d* grafica las distribuciones acumulativas base volumétrica.

Discusión

La distribución estimada con los diámetros medios superficial y volumétrico tiene un diámetro medio numérico de $47.24 \mu\text{m}$. El diámetro medio numérico estimado mediante la correlación desarrollada tiene un valor de $40.70 \mu\text{m}$. La diferencia entre el diámetro medio numérico de la distribución calculada en el primer caso y el diámetro estimado es de 13.85% . La diferencia es significativa y, por consiguiente, las distribuciones estimadas en el primer y segundo caso son distintas.

Las distribuciones de tamaño de gotas base numérica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 9.38% para el primer caso y de 0.00% para el segundo caso de acuerdo con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov. Las distribuciones base volumétrica estiman a la distribución experimental con una confiabilidad de 38.77% para el

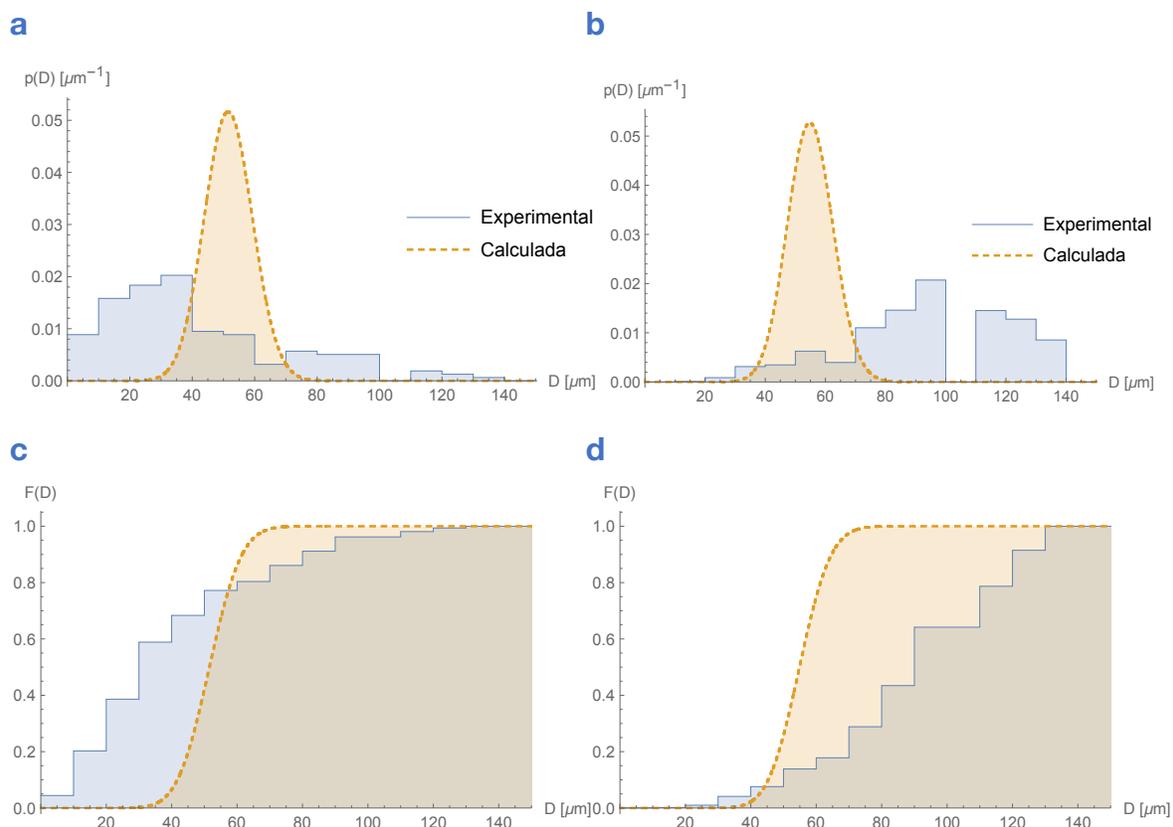


Figura 4.8: Distribuciones de tamaño de gotas para el segundo caso del cuarto ensayo experimental: (a) función densidad base numérica (b) función densidad base volumétrica (c) función acumulativa base numérica (d) función acumulativa base volumétrica.

primer caso y de 0.00 % para el segundo caso. La distribución base volumétrica calculada con los diámetros medios superficial y volumétrico es un estimado de la distribución experimental de acuerdo con la prueba de Kolmogorov-Smirnov. Las distribuciones calculadas con los diámetros medios numérico, superficial y volumétrico no estiman a la distribución experimental. Para ambas pruebas se observa que el estimado de la distribución base volumétrica es más exacto que el estimado de la distribución base numérica.

4.3 Conclusiones

En el presente trabajo, se desarrolló un modelo para estimar las distribuciones de tamaño de gotas base numérica y volumétrica de un aerosol atomizado por ultrasonido a partir de los parámetros del proceso: la densidad, la viscosidad y la tensión superficial del líquido, así como la frecuencia, la intensidad y el gasto de la atomización. Se propuso un modelo para la atomización de capa fina a partir del cual se identificaron los números adimensionales de mayor representatividad: la frecuencia y longitud de onda adimensionales para el análisis de las ondas capilares, y los números de Reynolds, Weber y capilaridad, así como el gasto y amplitud

Conclusiones

adimensionales para el análisis de la atomización. Los números adimensionales se emplearon en un análisis de regresión para estimar los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter del aerosol mediante correlaciones. Los diámetros medios estimados se aplicaron en el formalismo de máxima entropía para calcular la distribución base numérica del aerosol y, a partir de ella, la distribución base volumétrica. El modelo se validó resolviendo cuatro casos experimentales.

Distribución de tamaño de gotas

El modelo propuesto se utilizó para calcular las distribuciones de cuatro aerosoles atomizados experimentalmente. Los datos experimentales se obtuvieron de un artículo de la literatura abierta (Mizutani, et al. 1972). Para el primer y el cuarto ensayo, las distribuciones calculadas estiman la distribución del aerosol de acuerdo con la prueba de bondad de ajuste de Kolmogorov-Smirnov. Para el segundo y tercer ensayo, las distribuciones calculadas no estiman la distribución del aerosol.

En el *Capítulo 2* se estipuló que la distribución de una muestra de aerosol es un estimado de la distribución real del aerosol y su precisión depende del número de gotas muestreadas. Las distribuciones experimentales empleadas en el presente análisis se obtienen de muestras de menos de 260 gotas. Por consiguiente, las distribuciones conllevan una incertidumbre mayor al 17 %, de acuerdo con la *Tabla 2.1*. La elevada incertidumbre puede producir distribuciones empíricas multimodales no representativas de la distribución real que no se ajustan con precisión a las distribuciones estimadas. Esto explica el valor bajo de confiabilidad en las pruebas de Kolmogorov-Smirnov para el segundo y tercer ensayo.

El cálculo de las distribuciones de tamaño de gotas con el formalismo de máxima entropía se realizó con una entropía simplificada de Boltzmann-Gibbs. Es deseable explorar el uso de entropías distintas como alternativa para mejorar la predicción del modelo planteado.

Diámetro medio numérico

Las ecuaciones constitutivas que modelan a la atomización de capa fina son las de conservación de masa y de energía. No obstante, se consideró al diámetro medio numérico como una restricción adicional con la finalidad de analizar si ayuda a una predicción más exacta de las distribuciones. Para el primer ensayo, no se observó una diferencia significativa entre las distribuciones calculadas. No obstante, para los demás ensayos la confiabilidad se redujo significativamente al incluir al diámetro medio numérico, al punto de calcular distribuciones no representativas de las experimentales.

Si bien se espera que incorporar más información del aerosol permita realizar un cálculo más exacto de la distribución, al tratarse de diámetros estimados por correlaciones empíricas, agregar una restricción adicional también agrega incertidumbre al modelo. Como resultado, para la mayoría de los casos las distribuciones calculadas no son representativas de las experimentales. Se descarta el uso del diámetro medio numérico en el formalismo de máxima entropía como alternativa para mejorar la exactitud del modelo.

El formalismo de máxima entropía es una herramienta adecuada para determinar las distribuciones base numérica y volumétrica del aerosol a partir de los diámetros medios. Las restricciones de conservación de energía y de masa son la cantidad ideal de restricciones para calcular distribuciones representativas.

El modelo desarrollado es la primera metodología publicada en la literatura abierta que permite calcular la distribución de tamaño de gotas de forma predictiva a partir de los parámetros físicos que modelan al proceso de atomización ultrasónica. El modelo planteado permite obtener de forma eficaz un estimado de la distribución del aerosol, es una herramienta que facilita el diseño de atomizadores ultrasónicos para aplicaciones prácticas en la medicina, la industria y la combustión.

Bibliografía

- Agmon, Noam, Y. Alhassid, y Raphael Levine. 1979. «An algorithm for finding the distribution of maximal entropy.» *Journal of Computational Physics* 30 (2): 250-258.
- Babinsky, E., y Paul E. Sojka. 2002. «Modeling drop size distributions.» *Progress in Energy and Combustion Science* 28 (4): 303-329.
- Chapman, Sydney, y T. G. Cowling. 1995. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Dobre, Miruna. 2003. *Caractérisation stochastique des sprays ultrasoniques le formalisme de l'entropie maximale*. PhD Thesis, Département de mécanique, Faculté des sciences appliquées, Louvain-la-Neuve: Université catholique de Louvain.
- García Portugués, Eduardo. 2020. «Notes for Nonparametric Statistics.» En *Statistics for Data Science Lecture Notes*. Madrid: Carlos III University of Madrid.
- Jaynes, E. T. 1957. «Information Theory and Statistical Mechanics.» *Physical Review* 106 (4): 620-630.
- Malham, Simon J. A. 2015. «An introduction to Lagrangian and Hamiltonian mechanics.» En *Introduction to Lagrangian and Hamiltonian Mechanics Lecture Notes*. Edinburgh: Maxwell Institute for Mathematical Sciences and School of Mathematical and Computer Sciences.
- Mizutani, Yukio, Yasutake Uga, y Takeo Nishimoto. 1972. «An investigation on ultrasonic atomization.» *Bulletin of JSME* 15 (83): 620-627.
- Panchenko, Dmitry. 2016. «Kolmogorov-Smirnov test.» En *Statistics for Applications Lecture Notes*. MIT.
- Shannon, Claude Elwood. 1948. «A Mathematical Theory of Communication.» *The Bell System Technical Journal* 27 (3): 379-423.

A Correlaciones simplificadas

La amplitud de vibración o la intensidad acústica que el transductor irradia son parámetros difíciles de medir. En este anexo, se presenta el desarrollo de correlaciones para estimar los diámetros medios que no requieren la amplitud de vibración como variable.

A.1 Modelos

Para estimar los diámetros medios del aerosol, se retoma el modelo propuesto en el *Capítulo 3*. Mediante un análisis de regresión de datos experimentales, se derivan correlaciones para calcular los *coeficientes de proporcionalidad* k_{xy} que estiman a los *diámetros medios* D_{xy} :

$$D_{xy} = k_{xy} \lambda \quad 3.1$$

La *longitud de onda capilar* λ se estima con la *Ecuación 3.5*:

$$\lambda = 4 \sqrt[8]{\frac{\mu \sigma^2}{\rho^3 f^5}} \quad 3.5$$

Para calcular los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter, se derivan correlaciones para estimar los coeficientes de proporcionalidad. Para estimar los coeficientes de proporcionalidad, se proponen dos modelos basados en números adimensionales. Los coeficientes de los modelos propuestos se determinan mediante un análisis de regresión con datos experimentales. Las correlaciones obtenidas para los dos modelos propuestos se comparan mediante el error estándar relativo, la prueba t de Student y la prueba F de Fisher. El modelo de mayor exactitud se escoge como el estimador del diámetro medio.

Primer modelo

El primer modelo asume que la dispersión de los tamaños de las gotas alrededor de un valor promedio es causado por la cavitación. El diámetro promedio es determinado por la longitud de onda de las ondas capilares, mientras que la desviación del valor promedio se debe al efecto de la cavitación. La acción de la cavitación depende de la frecuencia de la onda acústica y de

Modelo

la profundidad de la capa líquida, la profundidad de la capa líquida es proporcional al gasto volumétrico atomizado (Sindayihbura, et al. 1997). Se propone la siguiente expresión para estimar el coeficiente de proporcionalidad de los diámetros medios basado en la *frecuencia adimensional* f^* y el *gasto volumétrico adimensional* \dot{V}^* :

$$k_{xy} = A f^{*B} \dot{V}^{*C} \quad A.1$$

Los coeficientes A , B y C se determinan mediante un análisis de regresión de datos experimentales de los coeficientes de proporcionalidad.

Segundo modelo

El segundo modelo se basa en la propuesta de Rajan y Pandit pues emplea los números adimensionales de Reynolds, Weber y capilaridad. La expresión toma la forma:

$$k_{xy} = A \Pi^B \quad A.2$$

donde Π es uno de los números adimensionales mencionados y los coeficientes A y B se determinan mediante un análisis de regresión de datos experimentales. Para que los números adimensionales no requieran la amplitud de vibración, se emplea el *número de Weber* We propuesto por Rajan y Pandit:

$$We = \frac{\rho f \dot{V}}{\sigma} \quad A.3$$

números
adimensionales

Los *números de Reynolds* Re y de *capilaridad* Ca se adaptan a la atomización de capa fina con la velocidad característica desarrollada en la *Ecuación 2.18*:

$$Re = \frac{\rho f^{\frac{1}{3}} \dot{V}^{\frac{2}{3}}}{\mu} \quad A.4$$

$$Ca = \frac{\mu f^{\frac{2}{3}} \dot{V}^{\frac{1}{3}}}{\sigma} \quad A.5$$

El análisis se repite para los tres números adimensionales y se selecciona la correlación con mayor exactitud.

A.2 Diámetro medio numérico

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla A.1* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio numérico, en total se analizan 25 ensayos experimentales.

Primer modelo

El análisis de regresión para el primer modelo produce una correlación que estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio numérico con un coeficiente de determinación de 3.03 %:

Tabla A.1: Datos experimentales para el análisis de regresión del diámetro medio numérico.

Autor	D_{10} μm	ρ kg/m^3	μ $\mu\text{Pa s}$	σ mN/m	f kHz	\dot{V} mm^3/s
Mizutani, et al. (1972)	34 – 49	1 000	1 002	73	54	22 – 288
Lacas, et al. (1994)	22 – 28	683 – 1 000	279 – 1 200	21 – 73	53	21 – 139
Tsai, et al. (1996)	42 – 54	1 000	1 002	72	40 – 70	167 – 500

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

$$k_{10} = 361.91 \cdot 10^{-3} f^{*-0.0273} \dot{V}^{*0.0400} \tag{A.6}$$

El diámetro medio numérico estimado con la *Ecuación A.6* tiene un error estándar relativo de 19.21 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 81.64 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 0.41 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura A.1* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 2.27 %:

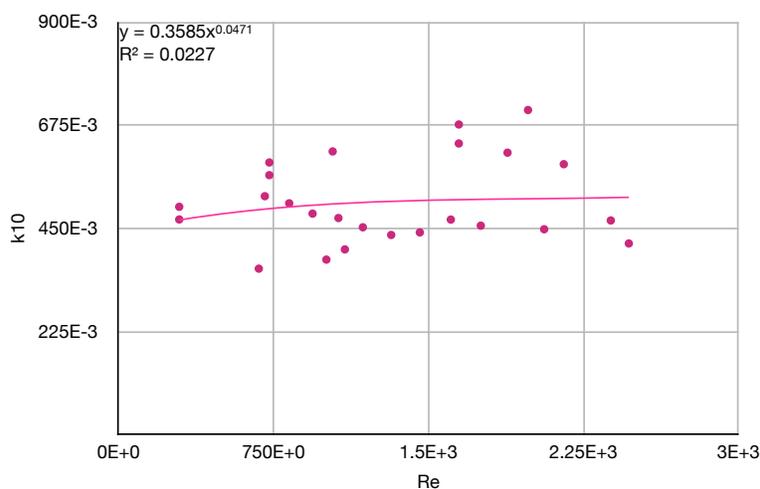


Figura A.1: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{10} como función del número adimensional de Reynolds Re para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

Diámetro medio numérico

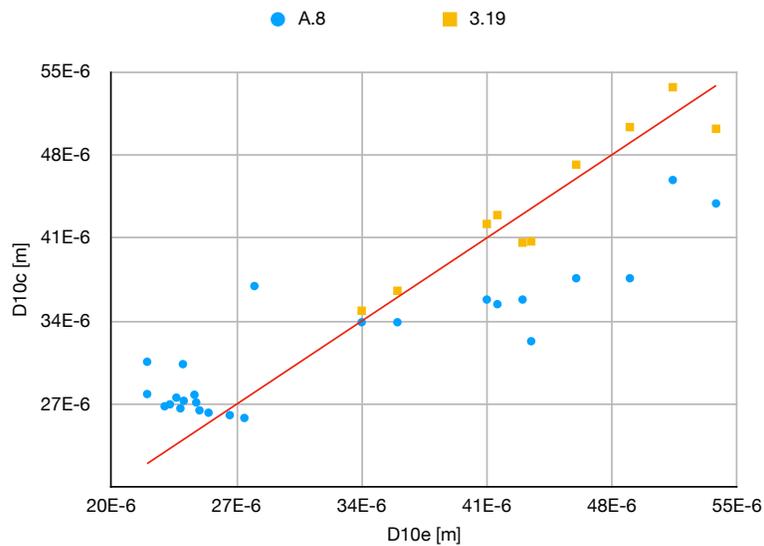


Figura A.2: Gráfica de paridad de las correlaciones para el diámetro medio numérico. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{10c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{10e} .

$$k_{10} = 358.5 \cdot 10^{-3} Re^{0.0471} \quad A.7$$

El diámetro medio numérico estimado con la *Ecuación A.7* tiene un error estándar relativo de 18.10 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 66.71 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 0.28 %.

Discusión

La correlación formada con el primer modelo se determina como el estimador del diámetro medio numérico:

$$D_{10} = 361.91 \cdot 10^{-3} f^{*-0.0273} \dot{V}^{*0.0400} \lambda \quad A.8$$

La *Figura A.2* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios numéricos calculados contra los experimentales para la correlación desarrollada y la *Ecuación 3.19* que considera el efecto de la amplitud de vibración. La expresión desarrollada en el presente anexo muestra el ajuste menos exacto, lo cual indica la importancia de la intensidad acústica para determinar el diámetro medio numérico.

A.3 Diámetro medio superficial

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla A.2* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio superficial, en total se analizan 12 ensayos experimentales.

Tabla A.2: Datos experimentales para el análisis de regresión del diámetro medio superficial.

Autor	D_{20}	ρ	μ	σ	f	\dot{V}
	μm	kg/m^3	$\mu\text{Pa s}$	mN/m	kHz	mm^3/s
Mizutani, et al. (1972)	52 – 63	1 000	1 002	73	54	22 – 288
Lacas, et al. (1994)	23 – 29	683 – 1 000	279 – 1 200	21 – 73	53	21 – 139
Dobre y Bolle (2002)	27 – 48	1 000	1 002	73	50 – 60	940 – 2 330

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

Primer modelo

El análisis de regresión para el primer modelo produce una correlación que estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio superficial con un coeficiente de determinación de 10.63 %:

$$k_{20} = 195.56 \cdot 10^{-3} f^{*-0.0786} \dot{V}^{*0.0111} \quad A.9$$

El diámetro medio superficial estimado con la *Ecuación A.9* tiene un error estándar relativo de 31.20 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 94.08 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 6.17 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura A.3* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 8.73 %:

$$k_{20} = 224.9 \cdot 10^{-3} Re^{0.1176} \quad A.10$$

El diámetro medio superficial estimado con la *Ecuación A.10* tiene un error estándar relativo de 27.61 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 71.06 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 3.78 %.

Discusión

La correlación formada con el primer modelo se determina como el estimador del diámetro medio superficial:

$$D_{20} = 195.56 \cdot 10^{-3} f^{*-0.0786} \dot{V}^{*0.0111} \lambda \quad A.11$$

Diámetro medio superficial

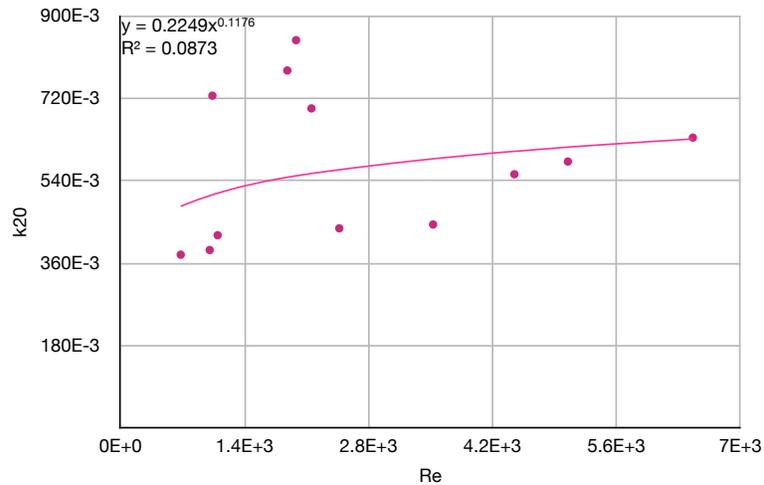


Figura A.3: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{20} como función del número adimensional de Reynolds Re para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

La *Figura A.4* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios superficiales calculados contra los experimentales para la correlación desarrollada y la *Ecuación 3.32* que considera el efecto de la amplitud de vibración. La expresión desarrollada en el presente anexo muestra el ajuste menos exacto, lo cual indica la importancia de la intensidad acústica para determinar el diámetro medio superficial.

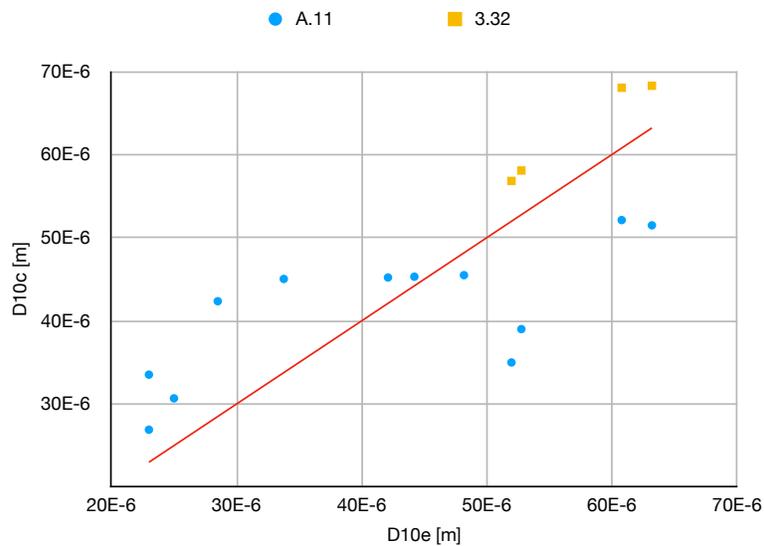


Figura A.4: Gráfica de paridad de las correlaciones para el diámetro medio superficial. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{20c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{20e} .

A.4 Diámetro medio volumétrico

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla A.3* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio volumétrico, en total se analizan 20 ensayos experimentales.

Primer modelo

El análisis de regresión para el primer modelo produce una correlación que estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio volumétrico con un coeficiente de determinación de 14.77 %:

$$k_{30} = 2.51 f^{*0.1094} \dot{V}^{*0.0030} \quad A.12$$

El diámetro medio volumétrico estimado con la *Ecuación A.12* tiene un error estándar relativo de 56.80 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 80.67 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 7.43 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura A.5* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 3.62 %:

Tabla A.3: Datos experimentales para el análisis de regresión del diámetro medio volumétrico.

Autor	D_{30} μm	ρ kg/m^3	μ $\mu\text{Pa s}$	σ mN/m	f kHz	\dot{V} mm^3/s
Mizutani, et al. (1972)	60 – 72	1 000	1 002	73	54	22 – 288
Lacas, et al. (1994)	24 – 29	683 – 1 000	279 – 1 200	21 – 73	53	21 – 139
Tsai, et al. (1996)	48 – 73	1 000	1 002	73	54	22 – 288
Dobre y Bolle (2002)	32 – 53	1 000	1 002	73	50 – 60	940 – 2 330
Tsai, et al. (2004)	9 – 68	1 068	979	34	120 – 1 650	5 – 83

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

Diámetro medio volumétrico

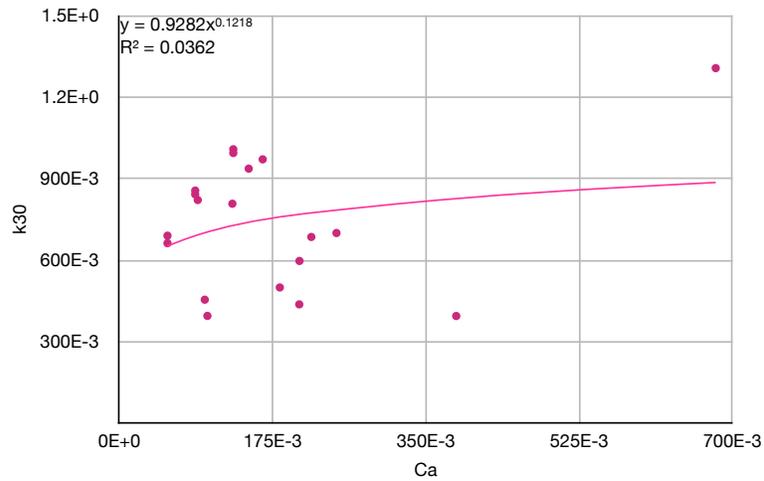


Figura A.5: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{30} como función del número adimensional de capilaridad Ca para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

$$k_{30} = 928.2 \cdot 10^{-3} Ca^{0.1218} \quad A.13$$

El diámetro medio volumétrico estimado con la *Ecuación A.13* tiene un error estándar relativo de 46.01 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 77.58 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 9.04 %.

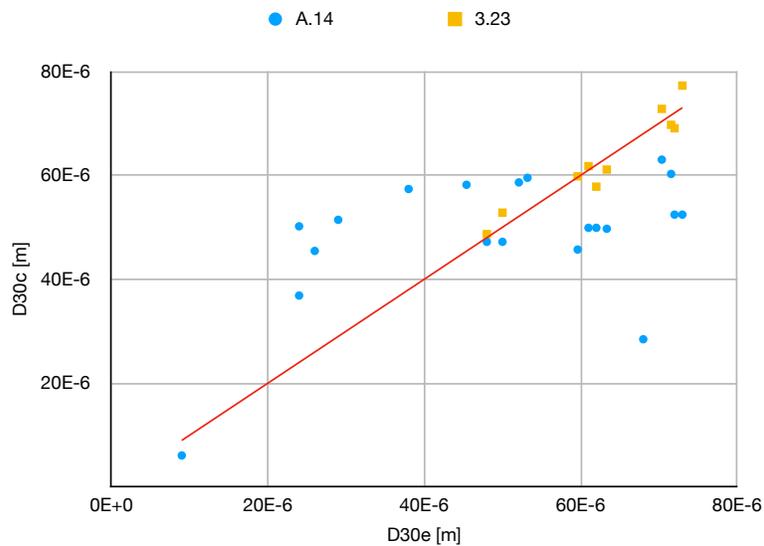


Figura A.6: Gráfica de paridad de las correlaciones para el diámetro medio volumétrico. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{30c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{30e} .

Discusión

La correlación formada con el segundo modelo se determina como el estimador del diámetro medio volumétrico:

$$D_{30} = 928.2 \cdot 10^{-3} Ca^{0.1218} \lambda \quad A.14$$

La *Figura A.6* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios volumétricos calculados contra los experimentales para la correlación desarrollada y la *Ecuación 3.23* que considera el efecto de la amplitud de vibración. La expresión desarrollada en el presente anexo muestra el ajuste menos exacto, lo cual indica la importancia de la intensidad acústica para determinar el diámetro medio volumétrico.

A.5 Diámetro medio de Sauter

Los datos experimentales para el análisis de regresión se obtienen de artículos publicados. La *Tabla A.4* resume los rangos de las variables reportadas en los ensayos para los análisis del diámetro medio de Sauter, en total se analizan 157 ensayos experimentales.

Primer modelo

El análisis de regresión para el primer modelo produce una correlación que estima el coeficiente de proporcionalidad del diámetro medio de Sauter con un coeficiente de determinación de 6.49 %:

$$k_{32} = 783.63 \cdot 10^{-3} f^{*-0.0738} \dot{V}^{*-0.0180} \quad A.15$$

El diámetro medio de Sauter estimado con la *Ecuación A.15* tiene un error estándar relativo de 61.80 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 64.29 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 32.14 %.

Segundo modelo

Para el segundo modelo, la *Figura A.7* grafica los datos experimentales y la curva de tendencia del análisis de regresión, la cual tiene un coeficiente de determinación de 12.43 %:

$$k_{32} = 759.9 \cdot 10^{-3} Ca^{-0.2487} \quad A.16$$

El diámetro medio de Sauter estimado con la *Ecuación A.18* tiene un error estándar relativo de 51.33 %, una confiabilidad para la prueba t de Student de 11.60 % y una confiabilidad para la prueba F de Fisher de 32.32 %.

Discusión

La correlación formada con el segundo modelo se determina como el estimador del diámetro medio de Sauter:

$$D_{32} = 759.9 \cdot 10^{-3} Ca^{-0.2487} \lambda \quad A.17$$

Diámetro medio de Sauter

Tabla A.4: Datos experimentales para el análisis de regresión del diámetro medio de Sauter.

Autor	D_{32}	ρ	μ	σ	f	\dot{V}
	μm	kg/m^3	$\mu\text{Pa s}$	mN/m	kHz	mm^3/s
Mizutani, et al. (1972)	78 – 97	1 000	1 002	72	40 – 70	167 – 500
Chiba (1975)	15 – 24	997	890	73	199 – 405	60 – 70
Mochida (1978)	98 – 189	998	1 000	73	26	1 667 – 13 333
Tarr, et al. (1991)	4 – 6	1 000	1 002	73	1 350	8 – 33
Lacas, et al. (1994)	26 – 30	683 – 1 000	279 – 1 200	21 – 73	53	139
Sindayihebura, et al. (1997)	21 – 38	791 – 1 000	597 – 1 796	23 – 73	33 – 58	110 – 556
Dobre y Bolle (2002)	43 – 72	1 000	1 002	73	50 – 60	940 – 2 330
Tsai, et al. (2004)	7 – 40	1 068	979	34	120 – 1 650	5 – 83
Ramisetty, et al. (2013)	70 – 212	912 – 1 151	890 – 8 800	29 – 73	20 – 130	54 – 453
Lozano, et al. (2014)	5	1 000	1 002	73	1 650	34

Se presentan los rangos de las variables estudiadas en los ensayos experimentales por cada autor.

La *Figura A.8* ilustra la gráfica de paridad de los diámetros medios numéricos calculados contra los experimentales para la correlación desarrollada y la *Ecuación 3.27* que considera el efecto de la amplitud de vibración. La expresión desarrollada en el presente anexo muestra el ajuste menos exacto, lo cual indica la importancia de la intensidad acústica para determinar el diámetro medio de Sauter.

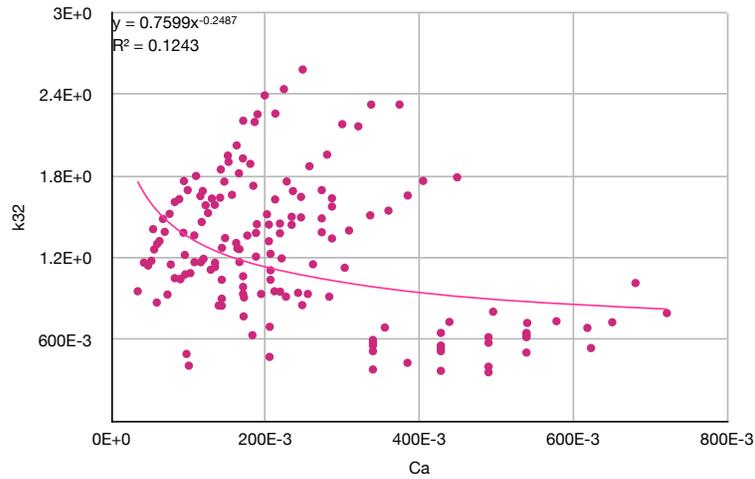


Figura A.7: Gráfica del coeficiente de proporcionalidad k_{32} como función del número adimensional de capilaridad Ca para cada ensayo experimental y de la curva de tendencia del análisis de regresión.

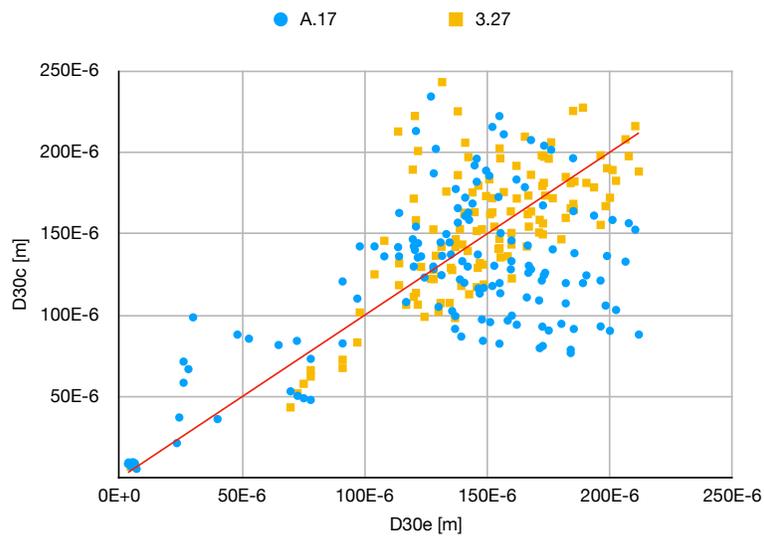


Figura A.8: Gráfica de paridad de las correlaciones para el diámetro medio de Sauter. El eje de las ordenadas corresponde a los valores calculados D_{32c} mientras que el de las abscisas a los experimentales D_{32e} .

Conclusiones

A.6 Conclusiones

La amplitud de vibración es un parámetro complicado de medir por su magnitud. Para transductores que oscilan con frecuencias en el rango de los kilohertz, la amplitud de vibración varía entre 1 a 10 μm . Para transductores que oscilan a frecuencias en el rango de los megahertz, la amplitud de vibración es menor a 1 μm (Lozano, et al. 2014).

En el presente anexo, se desarrollaron correlaciones para estimar los diámetros medios numérico, superficial, volumétrico y de Sauter empleando las propiedades del líquido, la frecuencia y el gasto volumétrico. Para el desarrollo de las correlaciones, los números adimensionales de Reynolds, Weber y Capilaridad fueron modificados para no depender de la amplitud de vibración. Los números adimensionales sin la amplitud son poco representativos del proceso de atomización ultrasónica de capa fina.

Las correlaciones desarrolladas tienen errores estándar relativos significativamente mayores a los de las correlaciones desarrolladas en el *Capítulo 3*. Las confiabilidades para las pruebas t de Student y F de Fisher son significativamente menores a las de las correlaciones desarrolladas en el *Capítulo 3*. El uso de las correlaciones independientes de la amplitud de vibración debe realizarse considerando que los errores de las predicciones pueden ser mayores al 50 %.

La reducción considerable de la confiabilidad de las predicciones de los diámetros medios indica que la intensidad acústica es un parámetro necesario para modelar la atomización ultrasónica de capa fina.

importancia de la
amplitud de
vibración

Bibliografía

- Chiba, Chikashi. 1975. «Atomization of liquid by immersed and convergent ultrasonic vibrators: Case of distilled water.» *Bulletin of JSME* 18 (118): 376-382.
- Dobre, Miruna, y Léon Bolle. 2002. «Practical design of ultrasonic spray devices experimental testing of several atomizer geometries.» *Experimental Thermal and Fluid Science* 26 (2-4): 205-211.
- Lacas, François, Philippe Versaevel, Philippe Scouflaire, y Gérard Coeur-Joly. 1994. «Design and Performance of an Ultrasonic Atomization System for Experimental Combustion Applications.» *Particle & Particle Systems Characterization* 11 (2): 166-171.
- Lozano, Antonio, Ana González-Espinosa, Juan Antonio García, Esteban Calvo, Jorge Barroso, y Felix Barreras. 2014. «High flow-rate ultrasonic seeder.» *Flow Measurement and Instrumentation* 38: 62-66.
- Mizutani, Yukio, Yasutake Uga, y Takeo Nishimoto. 1972. «An investigation on ultrasonic atomization.» *Bulletin of JSME* 15 (83): 620-627.
- Mochida, T. 1978. «Ultrasonic Atomization of Liquids.» *ICLAS '78*. Tokyo: Institute for Liquid Atomization and Spray Systems. 193-199.
- Rajan, Raghavachari, y Aniruddha Bhalchandra Pandit. 2001. «Correlations to Predict Droplet Size in Ultrasonic Atomisation.» *Ultrasonics* 39 (4): 235-255.
- Ramisetty, Kiran A., Aniruddha Bhalchandra Pandit, y Parag R. Gogate. 2013. «Investigations into ultrasound induced atomization.» *Ultrasonics Sonochemistry* 20 (1): 254-264.
- Sindayihebura, Daniel, Jean Cousin, y Christophe Dumouchel. 1997. «Experimental and Theoretical Study of Sprays Produced by Ultrasonic Atomisers.» *Particle and Particle Systems Characterization* 14 (2): 93-101.
- Tarr, Matthew A., Guangxuan Zhu, y Richard F. Browner. 1991. «Fundamental Aerosol Studies with an Ultrasonic Nebulizer.» *Applied Spectroscopy* 45 (9): 1424-1432.
- Tsai, S. C., Y. L. Song, C. S. Tsai, C. C. Yang, W. Y. Chiu, y H. M. Lin. 2004. «Ultrasonic spray pyrolysis for nanoparticles synthesis.» *Journal of Materials Science* 39 (11): 3647-3657.
- Tsai, Shirley C., Paul Childs, y Patrick Luu. 1996. «Ultrasound-Modulated two-Fluid Atomization of a Water Jet.» *AIChE Journal* 42 (12): 3340-3350.

