



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

**TRANSFERENCIA DE MOMENTUM Y ENERGÍA EN TANQUES AGITADOS CON  
MEZCLADORES DE CLARO ESTRECHO**

**TESIS**  
**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:**  
**DOCTOR EN INGENIERÍA**

**PRESENTA:**  
**JORGE RAMÍREZ CRUZ**

**TUTORES PRINCIPALES**  
**DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ**  
**INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM**

**DR. GABRIEL ASCANIO GASCA**  
**INSTITUTO DE CIENCIAS APLICADAS Y TECNOLOGÍA, UNAM**

**COMITÉ TUTOR**  
**DR. RUBÉN ÁVILA RODRÍGUEZ**  
**FACULTAD DE INGENIERÍA, UNAM**

**DR. EDUARDO RAMOS MORA**  
**INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES, UNAM**

**CIUDAD DE MÉXICO, MARZO, 2021**



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: Dr. Francisco Javier Solorio Ordaz

Secretario: Dr. Rubén Ávila Rodríguez

1<sup>er.</sup> Vocal: Dr. Martín Salinas Vázquez

2<sup>do.</sup> Vocal: Dr. Gabriel Ascanio Gasca

3<sup>er.</sup> Vocal: Dr. Eduardo Ramos Mora

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM

**TUTOR DE TESIS:** Dr. Martín Salinas Vázquez

NOMBRE

-----  
FIRMA

# Agradecimientos

A mi familia, por amarme, cuidarme y alentarme a cada minuto.

A mis amigos, por todos esos momentos que hemos compartido.

A mis compañeros de laboratorio, por todas esas risas y enojos.

Al Dr. Martín Salinas, por su comprensión, ayuda y amistad.

Al Dr. Gabriel Ascanio, por su apoyo y sus consejos.

Al Dr. William Vicente, por su tiempo y amistad.

Al CONACyT, por el apoyo económico para la realización de este trabajo.

Al Dr. Rubén Avila, por su tiempo y sus comentarios.

A la UNAM, por permitirme ser parte de esta gran comunidad

Con todo mi amor, para ti Leonel...



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>11</b>
1.1. Tanque agitado mecánicamente	11
1.1.1. Tipos de Impulsor	13
1.2. Curva Característica - Consumo de Potencia	15
1.3. Mecanismos de Mezclado	16
1.3.1. Mezclado Turbulento	16
1.3.2. Mezclado Laminar	17
<b>2. Caso 1: Mezclado Turbulento</b>	<b>21</b>
2.1. Introducción	21
2.2. Metodología - Modelo Numérico	24
2.2.1. Ecuaciones de Gobierno	25
2.2.2. Transporte de un escalar pasivo	25
2.2.3. Modelo sub-malla	26
2.2.4. Esquema Numérico	26
2.2.5. Modelado de la Superficie libre	27
2.2.6. Método Ghost Fluid	31
2.2.7. Tratamiento de las fronteras	33
2.3. Pruebas de Validación	34
2.3.1. Tanque cubierto sin desviadores de flujo	35
2.3.2. Tanque abierto sin desviadores de flujo	37
2.4. Resultados	40
2.4.1. Campos y Patrones de Flujo	40
2.4.2. Estructuras turbulentas	42
2.4.3. Energía Cinética Turbulenta	45
2.4.4. Dinámica del Macro-mezclado	46
2.5. Conclusiones	48
<b>3. Caso 2: Mezclado Laminar</b>	<b>51</b>
3.1. Introducción	51
3.2. Cinemática del impulsor	53
3.3. Metodología - Experimental	55
3.3.1. Curva de Potencia - Mediciones de Torque	55
3.3.2. Campos de flujo - Velocimetría por Imágenes de Partículas	56
3.4. Metodología - Modelo numérico	57
3.4.1. Ecuaciones de Gobierno	57
3.4.2. Esquema numérico	58
3.4.3. Detalles numéricos	59
3.5. Resultados - Isotérmicos	59
3.5.1. Curva Característica	59
3.5.2. Campos de Flujo	60
3.5.3. Índice de Mezclado	61
3.5.4. Calentamiento viscoso - Efecto de adelgazamiento viscoso térmico	64
3.6. Conclusiones	64
<b>4. Conclusiones generales</b>	<b>67</b>

Apéndice A. Artículos tesis	69
Apéndice B. Congresos tesis	85
Apéndice C. Otros artículos	93
Bibliografía	97

# Justificación

El mezclado es uno de los principales procesos realizado a nivel industrial. Por tal motivo, se invierte grandes cantidades de recursos para hacerlo de manera más eficiente y así, reducir su costo. Además, también se busca mejorar la calidad de los productos derivados de esta operación. Antes, el diseño de los sistemas de mezclado era considerado un Arte, basado en métodos empíricos y sin un fundamento teórico. Sin embargo, con el tiempo, los materiales utilizados dentro del proceso han incrementado en complejidad y por lo tanto, también el diseño de estos equipos. Dado lo anterior, se necesitan herramientas capaces de modelar de manera adecuada la física dentro de estos sistemas, así como la realización de análisis detallados en los diseños emergentes con el fin de comprender de mejor manera los parámetros físicos que afectan la forma en la que se lleva a cabo. Por tal motivo, un estudio numérico-experimental proveerá información relevante para poder evaluarlos de forma más precisa y veraz.





# Objetivo

El objetivo del presente trabajo es el estudio numérico y experimental de la transferencia de momentum y energía en tanques agitados mecánicamente operando bajo condiciones de régimen laminar y turbulento.

## Objetivos Particulares: Caso Turbulento

- Desarrollar un código numérico para el análisis del mezclado en tanques agitados mecánicamente en los que es relevante la superficie del líquido.
- Validar el código numérico utilizando mediciones experimentales encontradas en la literatura.
- Analizar el flujo de descarga y los vórtices generados detrás de una turbina Rushton operando a diferentes alturas y velocidades de rotación.
- Entender la dinámica del mezclado dentro de un tanque agitado sin desviadores utilizando un trazador o ecuación de escalar pasivo.

## Objetivos Particulares: Caso Laminar

- Desarrollar un código numérico para la solución de la transferencia de momentum y energía en flujos a bajos números de Reynolds.
- Validar el modelo numérico realizando mediciones experimentales mediante Velocimetría por imágenes de partículas.
- Obtener los patrones de flujo y sus características (flujo cortante y/o extensional) en un mezclador planetario.
- Estudiar los cambios en la viscosidad del fluido debido a la a la disipación viscosa, así como su influencia en el flujo dentro del mezclador.
- Caracterización de un sistema planetario usando su curvas de potencia.



# Capítulo 1

## Introducción

El mezclado puede definirse como la acción de reducir la heterogeneidad de un sistema con el fin de lograr algún proceso deseado. Esta heterogeneidad puede ser alguna fase y/o concentración. Lo anterior se lleva a cabo en una gran cantidad de industrias, algunas de las más relevantes son: Farmacéutica, Petroquímica, Alimentaria, Minería, Procesamiento de polímeros, tratamiento de aguas residuales, etc. Los procesos de mezcla son generalmente divididos en seis operaciones básicas o principales:

- Agitación de líquidos miscibles.
- Mezclado solido-líquido.
- Mezclado gas-líquido.
- Mezclado de líquidos inmiscibles.
- Mezclado con reacciones químicas.
- Mezclado sólido-sólido.

La transferencia de calor es otro proceso relevante que se lleva a cabo a nivel industrial y que comúnmente se relaciona con el mezclado. Lo anterior debido a que la agitación del fluido acelera la transferencia de energía por convección. Sin embargo, este objetivo no es considerado estrictamente un proceso de mezcla, ya que no es necesario el intercambio de diferentes fases o especies. A nivel industrial, algunos de los equipos más comunes para realizar el mezclado y/o la agitación son: los tanques agitados mecánicamente, los mezcladores estáticos, así como los mezcladores de chorro. Debido a los distintos procesos y objetivos requeridos para cada una de las industrias mencionadas, se han desarrollado una amplia variedad de diseños de estos equipos. Siendo los tanques agitados mecánicamente los más ampliamente utilizados por su gran flexibilidad y robustez. Por lo que, debido a su gran relevancia e impacto que tienen en todas las operaciones llevadas a cabo a nivel industrial, existe una gran cantidad de trabajos reportados en la literatura abierta en la que se analiza el mezclado realizado dentro dichos tanques. Lo anterior con el fin de mejorar el diseño de los equipos y hacer más eficiente el proceso de mezclado. Por lo que es importante el generar herramientas necesarias para poder obtener parámetros locales y globales que ayuden a poder aumentar la calidad del producto mezclado y reducir los costos de operación.

### 1.1. Tanque agitado mecánicamente

El diseño básico de un tanque agitado es mostrado en la figura 1.1. En estos equipos un agitador o impulsor se monta en una flecha, a la cual se le induce movimiento de rotación mediante un motor. Lo anterior se coloca dentro de un tanque cilíndrico en donde se introducen los componentes para ser mezclados. El movimiento de rotación produce el movimiento o bombeo del fluido a lo largo del tanque, por lo que se busca incrementar su energía mecánica para acelerar los procesos de transferencia de masa, momentum y energía. El tipo y número de impulsores, así como los aditamentos internos utilizados deben

de ser seleccionados de manera adecuada para satisfacer todos los objetivos planteados dentro del proceso de mezclado. Uno de los parámetros más relevantes para realizar la selección del tipo de diseño de tanque es la viscosidad. Lo anterior debido a que el mezclado se tiene que llevar a cabo de distinta manera cuando se tienen fluidos con viscosidades muy altas. Por lo tanto, las técnicas de mezclado suelen dividirse o clasificarse debido al régimen de flujo, ya sea laminar o turbulento. El mezclado laminar se debe realizar cuando se tienen viscosidades dinámicas mayores a los  $10[\text{Pa} \cdot \text{s}]$ . Por lo tanto, el mezclado turbulento será llevado a cabo cuando se tengan valores menores a esa cantidad. Por ejemplo, el diseño mostrado en la figura 1.1 es ocupado para procesos en el que es mezclado es llevado a cabo de manera turbulenta, por lo que comúnmente se utilizan impulsores con un tamaño ( $D$ ) mucho menor al diámetro del tanque ( $T$ ) y además, hacen uso de desviadores de flujo, los cuales son colocados en la periferia y son relevantes para evitar que se deforme la superficie del líquido. El uso de estos desviadores afectará de manera importante el mezclado, fenómeno que se analizará más adelante.

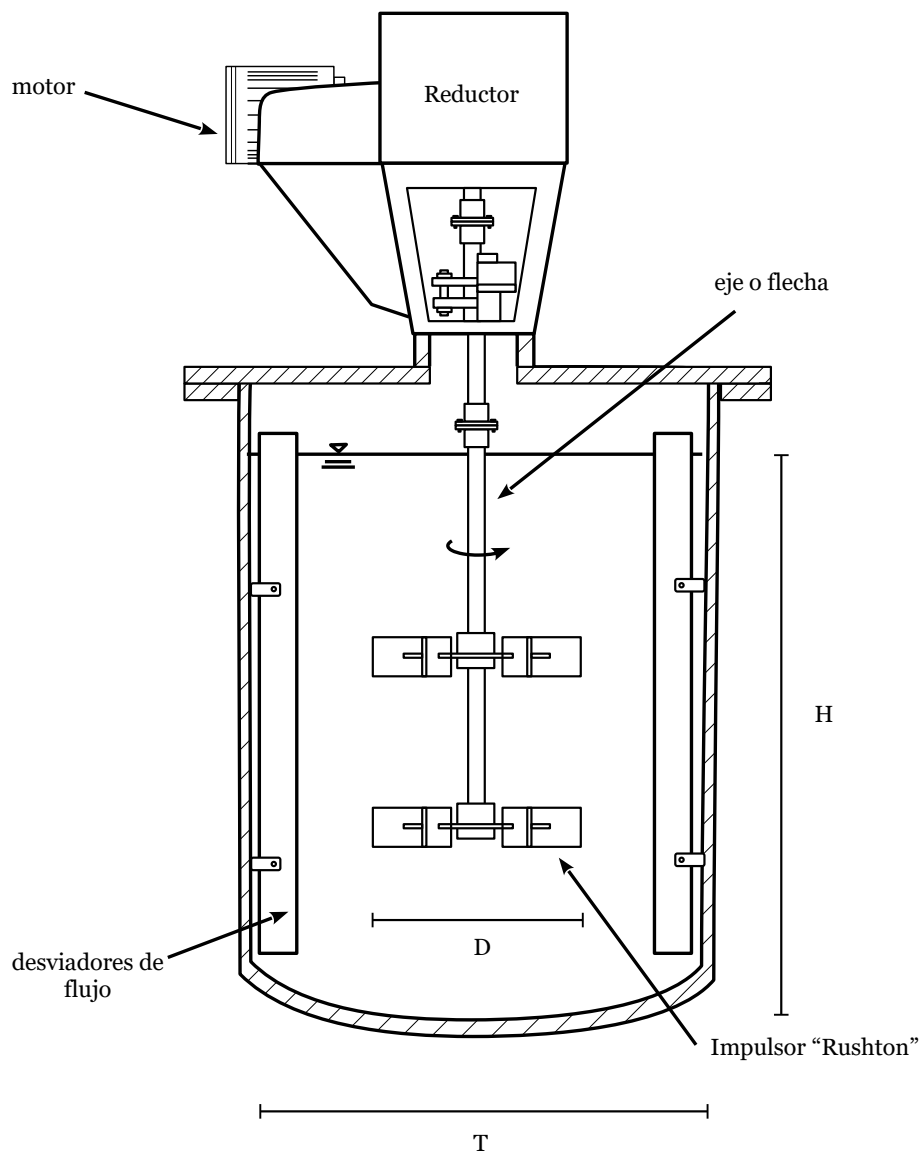


Figura 1.1: Tanque Agitado

### 1.1.1. Tipos de Impulsor

Existe una gran cantidad de diseños de impulsores a nivel industrial o de laboratorio. Como ya se mencionó, su elección debe ser basada en el tipo de operación a realizarse. Cuando el fluido tiene una viscosidad de media a baja, una de las principales clasificaciones de impulsores es debida a la dirección dominante en el flujo: ya sea del tipo axial o radial. En la figura 2.1 se muestran los patrones de flujo generados por una turbina *Rushton*, así como por una turbina de paletas inclinadas. En los impulsores de tipo radial, el flujo es descargado desde el eje hacia las paredes del tanque; este tipo de impulsores es caracterizado por la formación de una recirculación sobre el impulsor y otra de abajo. La mayor parte del mezclado suele llevarse a cabo entre estas dos recirculaciones, debido a que la zona de descarga del impulsor, provee un nivel alto de turbulencia y cortante en el fluido. Lo anterior los hace efectivos en procesos de dispersión gas-líquido y líquido-líquido.

Los impulsores de tipo axial crean un flujo paralelo al eje del impulsor, formando una sola recirculación a lo largo de todo el tanque. Estos impulsores empujan el líquido desde la parte superior hacia el fondo del tanque o viceversa, siendo este efecto conocido como bombeo. El empuje se puede incrementar o disminuir dependiendo de la geometría del impulsor, por ejemplo, al modificar el ángulo de las paletas. Por lo que son adecuados en procesos de suspensión o adición de sólidos, ya que previenen su estratificación en el fondo del tanque; suelen ser utilizados en procesos de transferencia de calor.

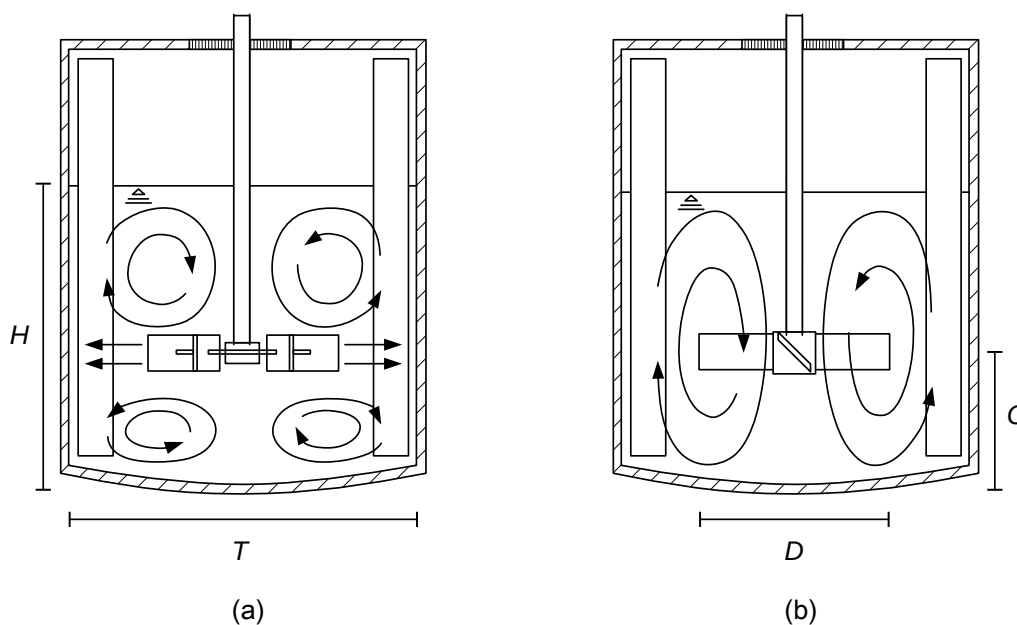
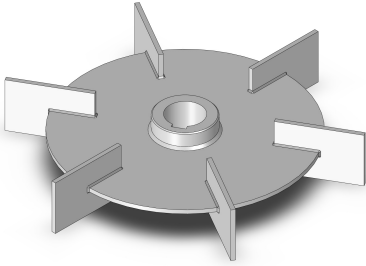
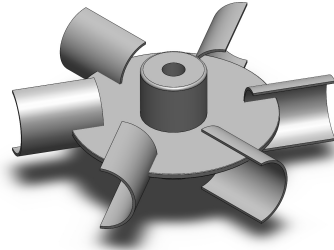
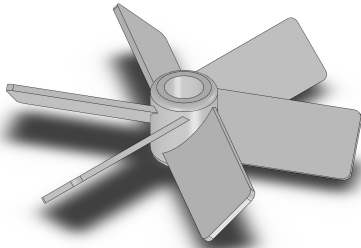
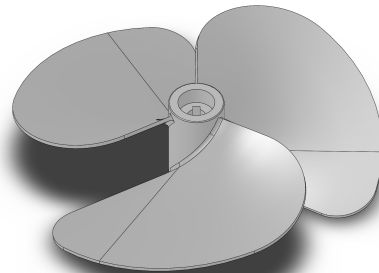


Figura 1.2: Patrones de flujo creados en por un impulsor radial (izquierda) y por un impulsor de tipo axial (derecha).

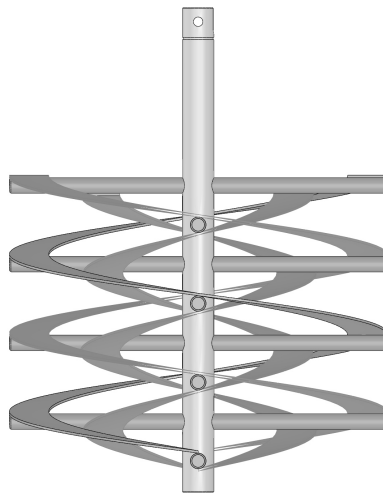
Los impulsores ocupados para llevar a cabo el mezclado bajo régimen turbulento tienen un diámetro mucho menor al del tanque y son conocidos como abiertos o de claro amplio. En el caso de la turbina *Rushton* las relaciones comunes encontradas van de  $D/T = 0,3-0,6$ . Las más pequeñas son ocupadas a altas velocidades de rotación y/o en operaciones de dispersión de gas. Para líquidos con altas viscosidades, el mezclado a lo largo del tanque es llevado a cabo mediante impulsores de gran tamaño (su diámetro suele ser muy cercano al del tanque) y son conocidos como mezcladores de claro estrecho. El mezclado suele realizarse al cortar, comprimir, amasar, doblar; así como dispersar el fluido mediante el impulsor, ayudado de las paredes del tanque. Trabajan a velocidades de rotación relativamente bajas, sin embargo, proveen una alta potencia por unidad de volumen. Algunos diseños comunes son las anclas, las cintas helicoidales y los mezcladores planetarios. En la figura fig:imp se muestran algunos de los diseños más utilizados a nivel industrial, clasificados dependiendo de la viscosidad y del tipo de flujo en la figura 1.3.

(a) Turbina *Rushton* (RT6)(b) *Scaba* (SRGT)

(c) Rueda de paletas inclinadas (PBT)



(d) Propela marina



(e) Cinta helicoidal

Figura 1.3: Tipos de impulsores.

Turbulento ( Baja y media viscosidad )		Laminar (Alta viscosidad )
Flujo Axial	Flujo Radial	
Turbina <i>Rushton</i>	Propela marina (d))	Ancla
Rueda de paletas	Rueda de paletas inclinadas	Cinta helicoidal
<i>Scaba SRGT</i>	<i>Lighnin A310</i>	Planetario

Cuadro 1.1: Impulsores comunes y su clasificación.

## 1.2. Curva Característica - Consumo de Potencia

El consumo de potencia representa la velocidad con la que se disipa la energía dentro del fluido. Los agitadores o impulsores utilizados en los tanques agitados son caracterizados mediante una gráfica clásica que se conoce como la curva de potencia. En ella se grafica en escala logarítmica ( $\log_{10} - \log_{10}$ ) el número de Reynolds ( $Re$ ) contra el consumo de energía adimensional ( $N_p$ ), el cual es conocido como número de potencia. En dicha curva se pueden observar tres comportamientos o regímenes de flujo distintos que son función del número de Reynolds. Cuando un impulsor se encuentra funcionando bajo condiciones de régimen laminar, el número de potencia es inversamente proporcional al número de Reynolds ( $N_p \propto Re^{-1}$ ). Por lo tanto, en la región laminar, el producto del número de Reynolds con el número de potencia es igual a una constante  $N_p Re = K_p$ . El parámetro  $K_p$  es conocido como la constante de ajuste o constante de potencia, y será distinta dependiendo del tipo de impulsor utilizado. En general, el régimen laminar se encuentra en el rango de  $0 < Re \leq 10$ . Sin embargo, para algunos impulsores este comportamiento puede prevalecer hasta  $Re = 100$ . Después de esta región, la transición al régimen turbulento se observa entre los valores de  $10^1 < Re < 10^4$ . Finalmente, en un tanque estándar que usa desviadores, el régimen turbulento será fácilmente observado debido a que en ese momento el  $N_p$  se mantiene constante y deja de ser función del número  $Re$ . Por ejemplo, un valor típico para una turbina Rushton de 6 paletas (RT6) y una relación  $D/T = 1/3$  será  $N_p \approx 5$ . En el caso de los diseños de tanque sin desviadores de flujo, el  $N_p$  continuará descendiendo conforme aumenta el  $Re$  aun estando trabajando bajo un régimen turbulento. Por lo que un impulsor del mismo tipo, en un tanque sin desviadores tendrá siempre un consumo energético menor.

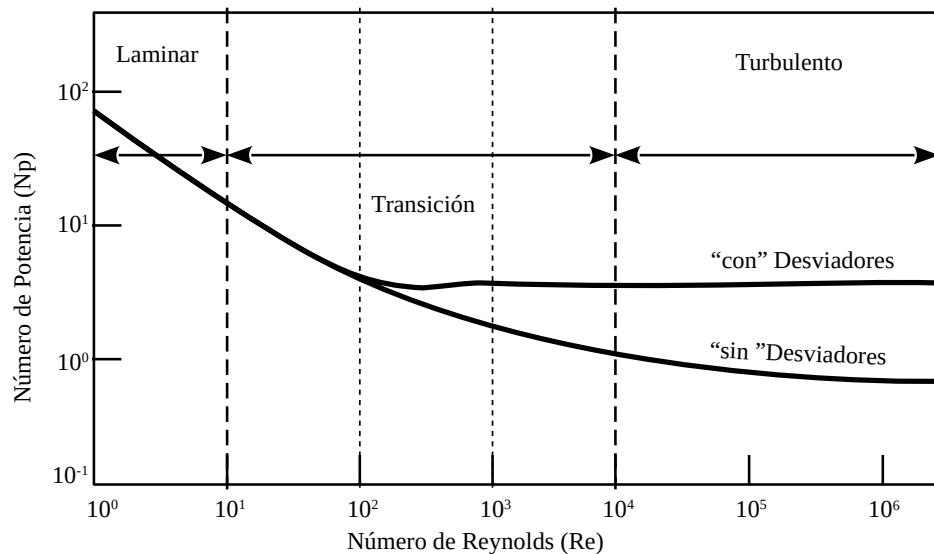


Figura 1.4: Curva de potencia.



### 1.3. Mecanismos de Mezclado

La forma o los mecanismos para realizar el mezclado son función del régimen de flujo. El proceso realizado de forma no es llevado a cabo de la misma manera que en régimen laminar. Por lo que el equipo seleccionado suele ser distinto debido a los diferentes mecanismos utilizados en cada régimen de flujo para poder homogeneizar el sistema. Sin embargo, la finalidad principal en todos los mezcladores será la de incrementar el área interfacial entre los componentes para que finalmente la difusión molecular sea el mecanismo encargado de hacer más homogéneo el sistema.

#### 1.3.1. Mezclado Turbulento

El mezclado turbulento es realizado mediante tres mecanismos: convección o arrastre, dispersión o difusión turbulenta y difusión molecular. En general los múltiples vórtices o escalas turbulentas dentro del tanque serán las encargadas de realizar el mezclado. Comenzando por las mayores que serán quienes se encarguen de realizar el transporte y arrastre de los componentes a mezclarse. Durante su transporte, se encontrarán escalas de menor tamaño las cuales serán las encargadas de deformar y dispersar los elementos de fluido. Si en su trayectoria encuentra con vórtices de tamaño similar rotando en el mismo sentido, el fluido en menor proporción será dividido y disperso como es mostrado en la figura 1.5 (b). Cuando esa porción de fluido encuentra con un par de estructuras rotando en dirección contraria, el fluido recibirá una deformación extensional, aumentando su área interfacial (figura 1.5 (c)). Finalmente, al encontrarse inmerso en una región con múltiples escalas turbulentas el proceso de dispersión será acelerado, aumentando en gran medida el área interfacial disponible.

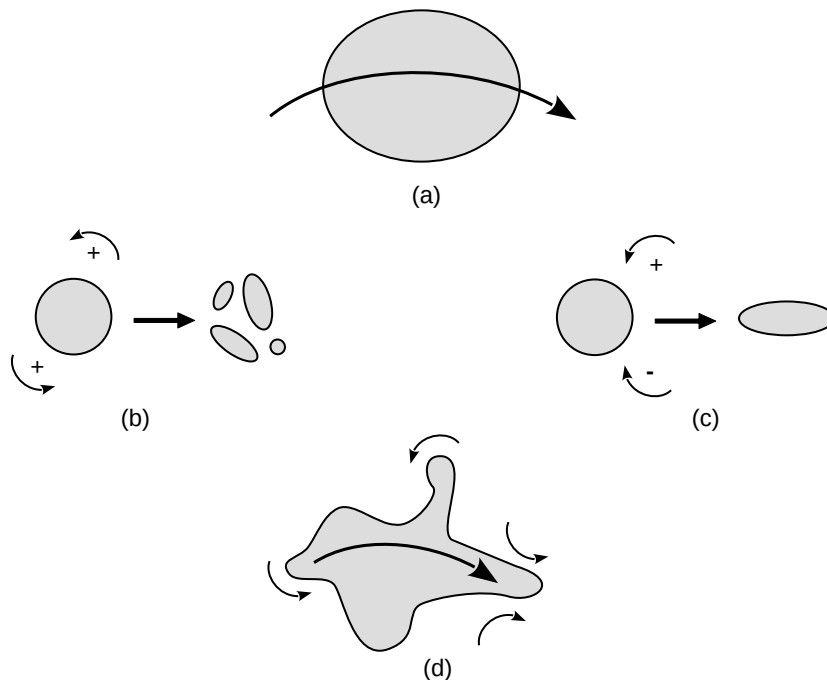


Figura 1.5: Mezclado Turbulento.

En los tanques agitados mecánicamente la zona con mayor actividad de generación y disipación turbulenta es las cercanías con el impulsor. Por lo que es el lugar donde se controla la mayor parte del proceso de mezclado y donde los parámetros locales (energía cinética y disipación turbulenta) son de gran relevancia para optimizar dicho proceso. Por ejemplo,

en una mezcla de líquidos inmiscibles, la generación de filamentos y el rompimiento de gotas dependerá del flujo generado en la vecindad del agitador. Además, el consumo de potencia global, así como las reacciones químicas serán en general función de la disipación turbulenta debido al flujo de descarga en el agitador. Por lo tanto, entender algunos parámetros locales tales como la producción y disipación turbulenta en los alrededores es de gran importancia para mejorar los procesos de mezclado industriales que trabajan bajo régimen turbulento. Una característica relevante de los agitadores de claro abierto es la generación de estructuras turbulentas coherentes en el extremo del agitador. Dichas estructuras se producen en la parte trasera del asa debido a los altos gradientes de presión y velocidad generados por el impulsor. En una turbina Rushton, se crean dos vórtices contrarrotatorios como se muestra en la figura 1.6. Este un par de estructuras coherentes son llamadas Trailing Vortices o vórtices traseros. Dichas estructuras son escalas turbulentas intermedias dentro del tanque y son los encargados de realizar el rompimiento, la dispersión, la coalescencia y por lo tanto la transferencia de masa en mezclas gas-líquido.

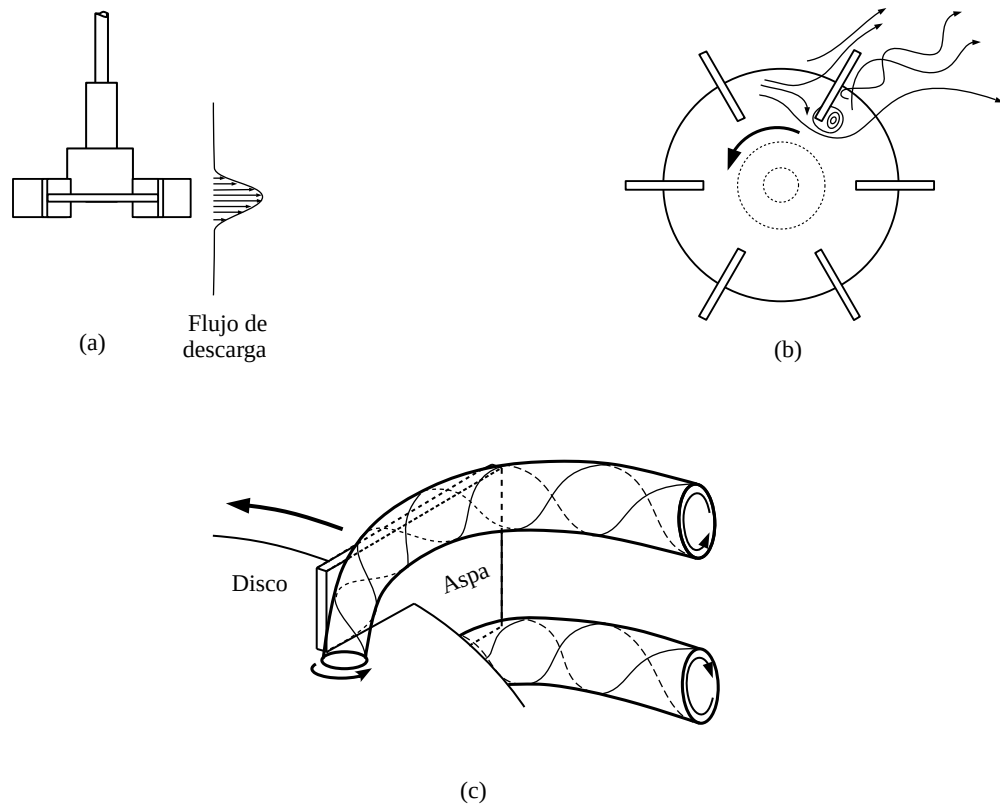


Figura 1.6: Flujo en una turbina Rushton. (a) Chorro creado por la descarga de fluido en dirección radial (b) Vista superior de los vórtices generados en la parte trasera de una de las seis aspas (c) "Trailing vortices" generados y rotando de manera contraria detrás del asa.

### 1.3.2. Mezclado Laminar

El mezclado viscoso o laminar se encuentra en una gran cantidad de procesos donde la viscosidad es alta (mayor a  $10 [Pa \cdot s]$ ) [Paul, 2004]. En general, el principal mecanismo para realizar el mezclado es la turbulencia. Sin embargo, en fluidos altamente viscosos no es posible hacerlo de esta manera, ya que los requerimientos de potencia así como los esfuerzos

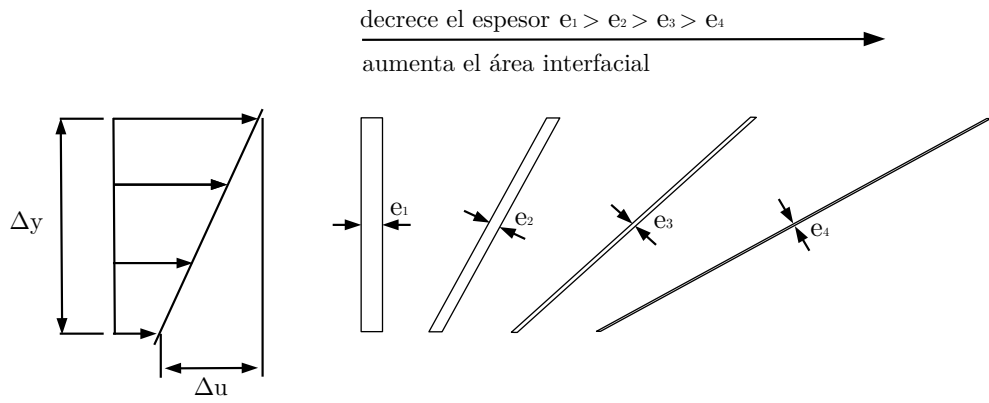
en los elementos mecánicos serían demasiado grandes. Por lo tanto, se deben de explotar ciertas técnicas laminares, donde los mecanismos básicos son los siguientes [Harnby, 1992].

- Flujo Cortante: El movimiento relativo entre las líneas de corriente debido a un gradiente de velocidad deforma los elementos de fluido, con lo que se pretende incrementar el área interfacial entre los componentes a mezclar (*ver figura.1.7(a)*).
- Flujo extensional: Aquí el espesor de los elementos de fluido se reduce debido a cambios geométricos o a la aceleración del flujo, aumentando así el área interfacial o superficial (*ver figura.1.7 (b)*).
- Flujo distributivo: Se trata de cortar, reordenar y recombinar los componentes con el fin de reducir el espaciado entre las fases, y por consiguiente, de la misma forma que en los dos casos anteriores, aumentar el área interfacial (*ver figura 1.7 (c)*).

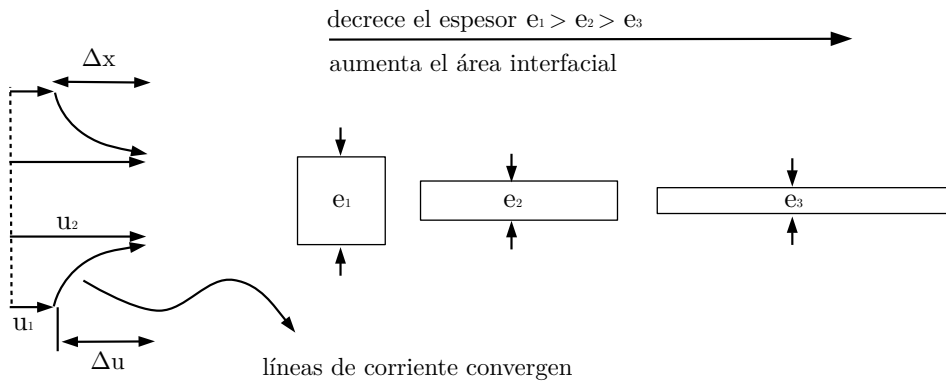
En resumen, el mezclado laminar puede ser visto como la acción de estirar, cortar, comprimir y doblar los elementos de fluido hasta que el área interfacial sea lo suficientemente grande, tan grande como para que la difusión molecular (baja en el caso de fluidos viscosos) termine por homogeneizar los componentes a mezclar. Lo anterior se logra utilizando los denominados mezcladores de claro estrecho (de tamaño cercano al diámetro del tanque), donde los mecanismos antes mencionados son llevados a cabo en el espacio reducido entre el impulsor y las paredes del recipiente, esto debido a que en esa pequeña sección se generarán altos gradientes, los cuales deforman y estiran el fluido.

Algunas de las complicaciones que se tienen al mezclar fluidos altamente viscosos es que la disipación de energía viscosa durante la mezcla puede causar una variación significativa en la temperatura a lo largo del tanque, contribuyendo así a una falta de uniformidad en la viscosidad. Los coeficientes de transferencia de calor en estos sistemas son tan pobres, que las medidas tomadas para enfriar la mezcla, tales como aumentar la velocidad de los impulsores, suelen ser contraproducentes debido al incremento de la energía interna generado por la disipación viscosa. El mezclado puede ser más complicado debido a los cambios de fase que se puedan suscitar durante el proceso. Por ejemplo en la polimerización, donde una pequeña cantidad de catalizador debe de ser distribuida de manera uniforme, para esto podrá ser suficiente con una turbina o una hélice. Sin embargo, a medida que el proceso avanza, la viscosidad llega a ser de 10-50 [Pa · s], por lo cual estos impulsores simples no llegan a ser su-

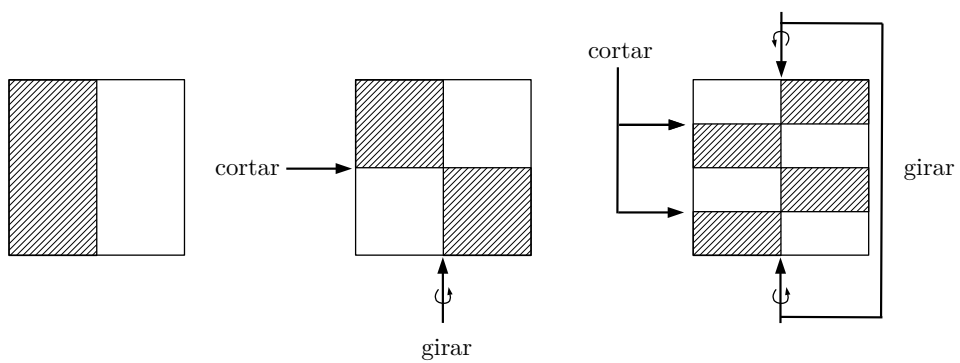
cientos. Además en este proceso, algo importante es que se debe de evitar la acumulación de calor con un rápido mezclado cuando el fluido aún tiene baja viscosidad. Así como, mantenerse en operación una vez que se ha incrementado el torque sobre el impulsor debido al cambio en sus propiedades, por lo cual el diseño del mezclador para este tipo de operaciones suele ser más complejo. Una parte fundamental del presente trabajo, es generar una herramienta numérica capaz de resolver el flujo en un mezclador de claro estrecho, en el que los efectos de disipación viscosa sean tomados en cuenta. Ya que generalmente las soluciones numéricas encontradas en la literatura manejan sólo el caso isotérmico, lo que puede representar un gran error cuando el fluido es altamente viscoso.



(a) Flujo Cortante.



(b) Flujo Extensional.



(c) Flujo Distributivo.

Figura 1.7: Mecanismos de mezclado laminar.



## Capítulo 2

# Caso 1: Mezclado Turbulento

### 2.1. Introducción

En el capítulo anterior se habló sobre la función que realizan los desviadores de flujo; evitar la formación de una depresión bien definida en la superficie del líquido (Fig.2.1). Este fenómeno es resultado del movimiento de carácter rotacional en el fluido, en el cual, la fuerzas centrífugas empujan el fluido hacia las paredes del tanque, y esa energía (ahora en forma de presión) provoca que el fluido ascienda, y se convierta en energía potencial. El estudio de tanques agitados mecánicamente sin pantallas desviadoras (UUST, por sus siglas en inglés) se ha incrementado debido a su buen desempeño en algunos procesos industriales, tales como la disolución de polvos, el tratamiento de aguas residuales, el procesamiento de combustibles nucleares, entre otros. Antes, este tipo de arreglo era raramente empleado debido a que presenta algunas complicaciones. Una de las limitaciones más importantes de estos dispositivos es el movimiento de recirculación creado dentro del fluido, en donde la velocidad tangencial a lo largo del tanque es la predominante. Como resultado, existe una baja velocidad relativa entre el fluido y el impulsor, además de existir un bajo bombeo del fluido (baja velocidad axial), por lo que se tiene un desempeño pobre en comparación con los tanques en los que se colocan pantallas desviadoras (*ver figura.2.1*).

Como ya se mencionó, en los UUST, el movimiento de recirculación en el fluido provoca la formación de una depresión en la superficie libre del líquido. En el trabajo realizado por Ciofalo et al. [1996], se menciona que tanto la forma como la profundidad de la superficie dependerá principalmente de la velocidad de rotación del impulsor. Sin embargo, también son importantes algunos otros parámetros como el tipo de impulsor, su diámetro, la distancia entre el impulsor y el fondo del tanque y la viscosidad del fluido. En el trabajo de Busciglio et al. [2014] se realizó una clasificación del tipo de flujo dentro de un USST en función de la posición de la superficie libre en la parte central del tanque con respecto del impulsor. Se dice que el tanque estará trabajando bajo condiciones sub-críticas cuando la superficie libre se encuentre por arriba del impulsor. El régimen de trabajo será crítico cuando la superficie alcance el impulsor, y será super-crítico cuando el impulsor baje por debajo de este (*ver figura 2.2*). Es importante poder conocer el tipo de régimen debido a que cada uno tendrá diferentes aplicaciones y también se presentarán distintas problemáticas. Por ejemplo, cuando el tanque está trabajando bajo un régimen sub-crítico se tiene un excelente desempeño para poder flotar o hundir partículas. Lo anterior hace este régimen ideal para suspender o disolver polvos [Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007]. Además, este régimen es apropiado para remover burbujas de gas, por lo que reduce la formación de espumas. Sin embargo, en este régimen se presenta un fenómeno de inestabilidad en la superficie libre del líquido al trabajar bajo ciertas condiciones. Lo que causa un movimiento oscilatorio en la superficie, el cual puede tener efectos adversos en los trenes de agitación y en los soportes del tanque [Busciglio et al., 2016].

En el régimen crítico también cuenta con ciertas limitaciones, ya que al estar la superficie del líquido cerca del impulsor, el bombeo o succión creada por el impulsor puede causar que se arrastren burbujas de gas desde la parte externa del líquido. Si se llega a incrementar la más la velocidad de rotación del agitador, entonces el sistema de mezclado, el sistema estará trabajando bajo condiciones super-críticas. Lo anterior hará que una gran cantidad

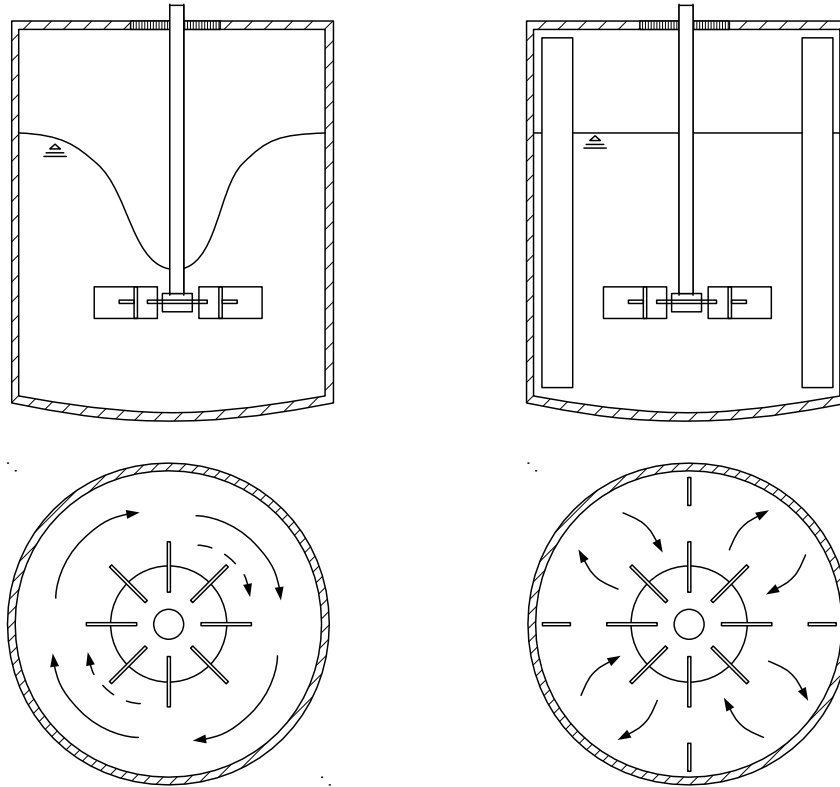


Figura 2.1: Depresión en la superficie del líquido: El movimiento rotacional del flujo provoca una diferencia de alturas en la superficie. Se utilizan desviadores para evitar este fenómeno, los cuales mejoran la dispersión radial y el bombeo axial dentro del tanque.

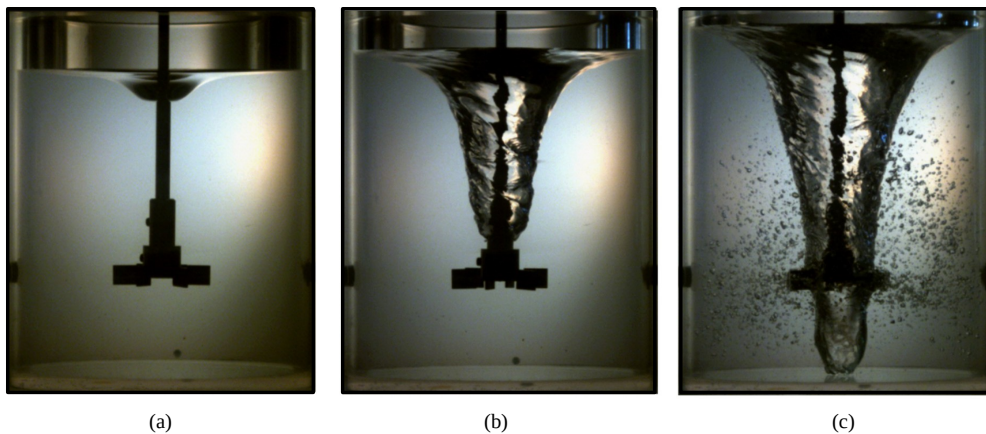


Figura 2.2: Regimen de flujo a diferentes condiciones de operación encontrado en un UUST agitado mediante una turbina Rushton [Busciglio et al., 2014]: (a) Regimen sub-crítico (b) Regimen crítico (c) Regimen super-crítico .

de burbujas serán inyectadas dentro del líquido. Esto generalmente es indeseable en algunos procesos como el de polimerización [Bhattacharya et al., 2007]. Sin embargo, este fenómeno de inyección de burbujas puede ser aprovechado al usar el tanque como un sistema de auto-inducción. En donde se reemplaza el aspersor en procesos de mezcla gas-líquido, por lo que se incrementa la transferencia de masa sin la necesidad de agregar elementos adicionales al sistema de mezclado [Montante et al., 2013]. Si bien el trabajar en régimen crítico y super-crítico tiene algunas ventajas, se evita en la mayoría de las aplicaciones. Lo anterior tiene

una consecuencia importante, ya que se restringe la velocidad del impulsor para que no se alcancen estos regímenes, por lo que la potencia que es aplicada al fluido se ve limitada.

A pesar de las limitantes nombradas con anterioridad, se ha encontrado que este tipo de tanques tiene un mejor desempeño en algunas aplicaciones con respecto a los tanques que sí cuentan con pantallas desviadoras (diseño estándar). Sin embargo, en la literatura existen menos estudios realizados a diseños UUST. Estos estudios pueden ser divididos en tres categorías. La primera se refiere a los estudios en los que se modela la superficie libre. Los segundos se refieren a cómo tomar ventaja de la hidrodinámica del flujo en procesos de aereación, cristalización, entre otros [Bertrand et al., 2012a]. Finalmente la tercera categoría a estudios en los que se trata de examinar el proceso de mezcla y cómo mejorarlo [Assirelli et al., 2008].

El modelado numérico del flujo dentro de los tanques agitados sin desviadores es complejo, lo anterior ha sido señalado en el trabajo realizado por Ciofalo et al. [1996]. Esto debido a que la turbulencia dentro del tanque es altamente anisotrópica y se tiene una alta curvatura en las líneas de corriente del flujo. Esto no sucede en los tanques con desviadores, en ellos la turbulencia sólo es anisotrópica en la corriente de descarga del impulsor y es altamente isotrópica en el volumen de flujo. Por lo tanto, en los UUST's, el modelado numérico usando la alternativa del promediado de Reynolds (RANS) junto con los modelos de turbulencia comunes (familia  $k-\epsilon$ ) no tiene la capacidad de resolver tanto los flujos secundarios como la descarga del impulsor. En la literatura, la mayoría de los estudios utiliza el enfoque RANS [Ciofalo et al., 1996, Haque et al., 2006, Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007, Mahmud et al., 2009]. Por ejemplo, en los trabajos realizados por Haque et al. [2006] y Mahmud et al. [2009] se utilizan los modelos de turbulencia Reynolds Stress Equation (RST) y Shear Stress Transport (SST). En los que es posible observar la capacidad que tienen para resolver el volumen de flujo en general. Sin embargo, es posible observar que fallan de manera significativa en la captura del flujo en la zona de descarga del impulsor. Además, la forma y profundidad de la superficie libre no fue bien resuelta. Dentro de los dos modelos señalados quien muestra una mejor aproximación a los resultados experimentales es el modelo RST. Recientemente, el uso de la aproximación del promediado de Reynolds (URANS, por sus siglas en inglés) para flujos no estacionarios se ha utilizado para resolver este tipo de problemas, debido a que este enfoque tiene la capacidad de resolver parte del comportamiento temporal del flujo que es periódicamente generado por el movimiento del impulsor. Lo que provoca que se obtengan mejores resultados en comparación con los trabajos en que se utilizaron los modelos comunes RANS [Zamiri and Chung, 2017]. Sin embargo, se ha visto que también suelen fallar al predecir estructuras turbulentas de gran tamaño dentro del flujo [Hart, 2016].

Las simulaciones numéricas de grandes escalas (LES, por sus siglas en inglés) ha demostrado una gran capacidad al resolver el flujo en tanques agitados mecánicamente [Derksen and Van den Akker, 1999]. LES puede capturar tanto las macro-inestabilidades como las anisotropías en la turbulencia del flujo. Este enfoque además provee de información a nivel local valiosa para poder optimizar el proceso de mezclado y, además puede obtener los vórtices generados detrás del impulsor, los cuales son escalas turbulentas intermedias generadas en las aspas, las cuales son responsables de llevar a cabo una gran cantidad del mezclado [Yoon et al., 2009]. Las características antes mencionadas hacen del enfoque LES sea la alternativa indicada para resolver el flujo en USST.

A pesar de las ventajas antes mencionadas existen muy pocos estudios utilizando este enfoque. El primer intento para resolver el flujo dentro de un UUST utilizando LES fue realizado por Lamarque et al. [2010]. En su trabajo, se analiza un precipitador, en el que el mezclado es llevado a cabo utilizando un agitador magnético en el fondo del tanque. Las velocidades promedio así como las cantidades turbulentas fueron comparadas contra mediciones experimentales realizadas con la técnica de velocimetría láser Doppler, las cuales muestran una buena aproximación. Además, también obtuvieron las estructuras turbulentas presentes en el flujo, las cuales fueron visualizadas utilizando el criterio-Q.

En el trabajo de Bertrand et al. [2012a] se analizó la misma configuración de tanque que en el caso anterior. Sin embargo, la parte fundamental de su trabajo es identificar las distintas regiones anisotrópicas de la turbulencia utilizando los triangulos de Lumley. Además, de verificar cómo impactan estas zonas en el proceso de precipitación y la generación de cristales. En los últimos dos estudios mencionados, a pesar de obtener valores locales importantes, los sistemas de mezclado que analizan no utilizan algún impulsor estándar



ocupado en la mayoría de las industrias. Además, en ambos casos la malla computacional utilizada es demasiado burda para poder capturar de manera adecuada las fluctuaciones de las velocidades en la parte central del tanque, cerca del impulsor. Recientemente, Deshpande et al. [2017] llevaron a cabo algunas simulaciones LES en un tanque agitado utilizando una turbina Rushton usando el software *OpenFoam*. En su trabajo compararon el consumo de potencia con el obtenido en Scargiali et al. [2014]. Sin embargo, valores locales, tales como la disipación viscosa así como la energía cinética turbulenta no fueron mostrados.

Como se ha mencionado, LES puede efectivamente resolver el flujo en los arreglos de tanque de tipo UUST. Sin embargo, este enfoque tiene un alto costo computacional por dos razones: 1) El tamaño de la malla necesario para poder obtener una solución de buena calidad y 2) el tiempo necesario para desarrollar el flujo y deformar la superficie libre del líquido. Lo anterior debido a que en los tanques estándar con desviadores, el número de revoluciones necesarias para desarrollar el flujo son alrededor de 20 vueltas. No obstante, en el caso de UUST se necesitan más de 100 revoluciones del impulsor para poder obtener un flujo estadísticamente estacionario. Por lo tanto, el tiempo de simulación es un parámetro importante que debe de ser tomado en cuenta al realizar una simulación numérica utilizando el enfoque LES en tanques agitados sin desviadores.

Además de los inconvenientes antes mostrados para poder realizar la aproximación numérica en este tipo de flujos, una parte crítica y fundamental es la solución de la superficie libre, debido a que los patrones de flujo dependerán totalmente de su deformación. Y la deformación será función de flujo generado por el impulsor dentro del tanque. Por lo tanto, como es señalado en el trabajo de Ciofalo et al. [1996], realizar una predicción correcta de la forma y la profundidad de la superficie libre no es trivial y esta puede ser utilizada como una validación del campo de flujo dentro del tanque. En este trabajo, se realizó el primer intento para resolver el flujo dentro de un UUST, en el que se utilizó un método iterativo en el que la malla de iba ajustando conforme la simulación avanzaba en el tiempo hasta que se obtuviera la condición de esfuerzo cortante cero en la dirección normal a la superficie y se llegara al estado estacionario. En los siguientes trabajos: [Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007, Li et al., 2015, Yang and Zhou, 2015, Yang et al., 2017, Zamiri and Chung, 2017] el método de volumen de fluido (VOF, por sus siglas en inglés) ha sido el predilecto para poder resolver la superficie libre. Además, del híbrido entre el método VOF y los métodos Eulerianos-Eulerianos [Haque et al., 2006, Mahmud et al., 2009]. Uno de los principales problemas utilizando este tipo de métodos es que la superficie se representa por una amplia región de valores entre cero y uno, por lo que la validación suele ser engañosa. Por otro lado, en Lamarque et al. [2010], Bertrand et al. [2012a,b] utilizan una técnica lagrangiana llamada Discontinuous Front-Tracking (DFT), la cual tiene una excelente aproximación si la malla es muy fina. Sin embargo, lo anterior provoca que el resultado sea computacionalmente costoso.

El propósito del presente capítulo es servir como guía para resolver numéricamente el flujo complejo con superficie libre dentro de un tanque agitado sin desviadores. Lo anterior con el fin de obtener información precisa acerca de la dinámica del flujo creada por una turbina Rushton bajo diferentes condiciones de operación (números de Reynolds y números de Froude). Además, se realizó el análisis para dos distintas distancias entre el fondo del tanque y el impulsor ( $c/T$ ). Para lograr lo anterior, se realizaron varias simulaciones numéricas LES, mostrando algunos parámetros locales como las estructuras turbulentas alrededor del impulsor, el proceso de macro-mezclado y los patrones de flujo creados por la turbina Rushton.

## 2.2. Metodología - Modelo Numérico

En la presente sección se discutirá brevemente las ecuaciones de gobierno utilizadas para resolver el movimiento del fluido dentro del tanque, además de exponer su esquema de discretización. Así como se discutirá el método de Level-Set (LS) utilizado para capturar la evolución de la superficie libre, junto con el método Ghost Fluid Method (GFM) usado para imponer condiciones de frontera que se encuentran inmersas dentro del dominio computacional.

### 2.2.1. Ecuaciones de Gobierno

Las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento son resueltas usando una variación del método de pseudo-compresibilidad [Cubos-Ramírez et al., 2016]. En este método, las ecuaciones de gobierno son resueltas en su forma conservativa débil, en donde la presión y la densidad son relacionadas utilizando una ecuación de estado isotérmica en lugar de resolver una ecuación de Poisson para el acoplamiento de la velocidad y el campo de presión. Las ecuaciones son resueltas en un marco de referencia cartesiano, en donde la ecuación de continuidad y momentum es escrita como sigue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j] = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \mu S_{ij}] = s_i \quad (2.2)$$

donde, para un problema tridimensional  $i, j \in \{1, 2, 3\}$ . Además, las componentes del vector  $s_i$  son los términos fuente. En donde el único distinto de cero es el término de la gravedad correspondiente al eje axial ( $s_3 = -\rho g$ ). El fluido es considerado Newtoniano y el término  $S_{ij}$  se refiere al tensor de rapidez de deformación (eq.(2.3)) y  $\mu$  la suma de la viscosidad molecular y la turbulenta ( $\mu = \mu_m + \rho \nu_t$ ).

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.3)$$

Como ya fue mencionado, la incompresibilidad del flujo es aproximada relacionando la presión con la densidad utilizando una ecuación de estado para un fluido incompresible artificial  $p = C_s^2 \rho$ , en donde  $C_s$  es una pseudo-velocidad del sonido en el medio. El valor de  $C_s$  tiene que ser lo suficientemente grande con el fin de aproximar la solución a un flujo incompresible. Sin embargo, su valor no debe ser demasiado grande para evitar hacer que el paso de tiempo sea excesivamente pequeño. Este método ha sido probado con éxito en resolviendo distintos tipos de flujo, ya sea para una, dos o múltiples fases. Los valores comúnmente utilizados para realizar esta aproximación van de  $0,1 < Ma < 0,3$ , donde  $Ma$  es un pseudo-número de Mach, definido como:  $Ma = ND/C_s$ , siendo  $N$  la velocidad de rotación del impulsor en revoluciones por segundo y  $D$  el diámetro del tanque.

### 2.2.2. Transporte de un escalar pasivo

En este trabajo, se utilizó una ecuación de escalar pasivo para mostrar parte de la dinámica del mezclado dentro del tanque. Cabe destacar, que esta ecuación no es utilizada para cuantificar el tiempo de mezclado; en su lugar, se resuelve sólo para identificar zonas muertas de mezcla, además de ayudar a mostrar los patrones de flujo dentro del tanque. Hasta el momento, este es el primer intento de resolver numéricamente una ecuación de escalar pasivo en un UUST agitado mediante una turbina Rushton utilizando la aproximación numérica LES. Por lo tanto, con el fin de resolver el escalar pasivo, se añadió la siguiente ecuación a la solución:

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho C u_j - \rho D_c \frac{\partial C}{\partial x_j}] = 0 \quad (2.4)$$

donde  $C$  se refiere al escalar pasivo y  $D_c$  es el coeficiente de difusión. Como fue mostrado en las ecuaciones de gobierno, el coeficiente de difusión es la suma de la difusión molecular y la turbulenta ( $D_c = D_m + D_e$ ). Además, para el presente trabajo, la difusión molecular

no fue tomada en cuenta ( $D_m = 0$ ). Sólo la advección del flujo y la difusión turbulenta son utilizadas para realizar el seguimiento de la dispersión del trazador. En el trabajo de Hartmann et al. [2006] se señala que la aproximación LES es más efectiva que la alternativa RANS al resolver el transporte de un escalar pasivo, ya que esta última no predice de manera adecuada los niveles de turbulencia en la descarga del impulsor, afectando así las predicciones de la dinámica del mezclado. Por lo tanto, la aproximación LES es la mejor opción para modelar la dinámica del macromezclado en un UUST. Finalmente, como es mencionado en Busciglio et al. [2014], la mayor parte de los estudios se enfocan en el micromezclado y no hay mucha información disponible acerca del proceso de macromezclado dentro de tanques agitados mecánicamente sin desviadores.

### 2.2.3. Modelo sub-malla

En la alternativa de solución LES las ecuaciones de gobierno son filtradas, por lo que las grandes escalas de la turbulencia son resueltas, mientras que las pequeñas son modeladas. En la presente tesis, las ecuaciones fueron filtradas implícitamente por la malla computacional. El tensor sub-malla utilizado para el modelado de las pequeñas escalas usa la suposición clásica de la viscosidad turbulenta o Eddy-Viscosity ( $\nu_t$ ), el cual es obtenido utilizando la función de estructura local de segundo orden basada en el trabajo realizado por Métais and Lesieur [1992]. La cual está definida de la siguiente manera:

$$\nu_t(x_i, \Delta, t) = C_{sf} \Delta \sqrt{F(x_i, \Delta, t)} \quad (2.5)$$

donde  $C_{sf}$  es un coeficiente relacionado con la constante de Kolmogorov ( $C_K$ ) de la siguiente manera  $C_{sf} = 0,105 C_K^{-2/3}$ , donde  $C_{sf}$  toma el valor de 0,104.  $F(x_i, \Delta, t)$  es una función de segundo orden derivada de las velocidades instantáneas. Esta función depende del promedio estadístico local de las diferencias de las velocidades elevadas al cuadrado entre  $x_i$  y los seis nodos adyacentes. Finalmente, se mejoró su aplicación al utilizar el modelo de la función selectiva (SSF, por sus siglas en inglés) [Lesieur and Métais, 1996], en la que la viscosidad turbulenta es apagada si el flujo no es lo suficientemente tridimensional. El criterio anterior es aplicado de la siguiente manera: se obtiene el ángulo del vector vorticidad en determinado nodo computacional con respecto del promedio de la vorticidad en los seis nodos contiguos. Si este ángulo excede los  $20^\circ$ , entonces la viscosidad turbulenta es aplicada. De otra manera, sólo la viscosidad molecular actúa en la solución.

### 2.2.4. Esquema Numérico

Las ecuaciones de gobierno son discretizadas utilizando esquemas basados en diferencias finitas de alto orden con el fin de obtener una solución precisa y evitar una malla computacional excesivamente fina; ahorrando así tiempo de cálculo. Las ecuaciones fueron espacialmente discretizadas utilizando esquemas compactos de 6to orden (CS-FD6) [Lele, 1992]. Por lo que para cualquier cantidad discreta escalar, tal como una componente o variable  $\psi$  de flujo, la derivada espacial  $\psi'$  se obtiene mediante la solución del siguiente sistema tridiagonal:

$$\alpha \psi'_{i-1} + \psi'_i + \alpha \psi'_{i+1} = b \frac{\psi_{i+2} - \psi_{i-2}}{4\Delta x} + a \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2\Delta x} \quad (2.6)$$

donde las constantes  $\alpha$ ,  $a$  y  $b$  determinarán el orden del esquema utilizado. Para el presente trabajo corresponden a uno de sexto orden con valores de  $\alpha = 1/3$ ,  $a = 14/9$  y  $b = 1/9$ . Este sistema es centrado, por lo que se dificulta su aplicación en los bordes del dominio computacional. Por lo tanto, para poder ser aplicado, en el segundo y el penúltimo nodo computacional ( $N_x - 1$ ) el esquema se degrada a uno de menor orden (CS-FD4), tomando los valores de  $\alpha = 1/4$ ,  $a = 3/2$  y  $b = 0$ . Además, en los nodos ubicados junto en la frontera se aplica un esquema descentrado de la siguiente manera:

$$\alpha\psi'_1 + \alpha_1\psi'_2 = \frac{1}{\Delta x}(a_1\psi_1 + b_1\psi_2 + c_1\psi_3) \quad (2.7)$$

siendo  $\alpha_1 = 2$ ,  $a_1 = -1/5$ ,  $b_1 = 2$  y  $c_1 = 1/2$ . Los esquemas compactos ya presentados son de carácter dispersivo (no difusivos), por lo que son susceptibles a sufrir de inestabilidades numéricas. Estas dificultades pueden ser originadas debido a las condiciones de frontera y el carácter no lineal del flujo. Con el fin de evitar este fenómeno, se aplicó un filtro espacial de décimo orden a las variables conservativas después del paso de integración numérica [Visbal and Gaitonde, 2002]. El filtro se aplica de la misma manera que el esquema de derivación, de la siguiente manera:

$$\alpha_f\hat{\psi}_{i-1} + \hat{\psi}_i + \alpha_f\hat{\psi}_{i+1} = \sum_{n=0}^{N_{th}} \frac{a_n}{2} (\psi_{i+n} - \psi_{i-n}) \quad (2.8)$$

donde cada coeficiente se define como:

	$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$
F10	$\frac{193+126\alpha_f}{256}$	$\frac{105+302\alpha_f}{256}$	$\frac{15(-1+2\alpha_f)}{64}$	$\frac{45(1+2\alpha_f)}{512}$	$\frac{5(-1+2\alpha_f)}{256}$	$\frac{15(1+2\alpha_f)}{512}$
F8	$\frac{93+70\alpha_f}{128}$	$\frac{7+18\alpha_f}{16}$	$\frac{-7+14\alpha_f}{32}$	$\frac{1}{16} - \frac{\alpha_f}{8}$	$\frac{-1}{128} + \frac{\alpha_f}{64}$	0
F6	$\frac{11}{16} + \frac{5\alpha_f}{8}$	$\frac{15}{32} + \frac{17\alpha_f}{16}$	$\frac{-3}{16} + \frac{3\alpha_f}{8}$	$\frac{1}{32} - \frac{\alpha_f}{16}$	0	0
F4	$\frac{5}{8} + \frac{3\alpha_f}{4}$	$\frac{1}{2} + \alpha_f$	$\frac{-1}{8} + \frac{\alpha_f}{4}$	0	0	0
F2	$\frac{1}{2} + \alpha_1$	$\frac{1}{2} + \alpha_1$	0	0	0	0

Cuadro 2.1: Coeficientes de los esquemas de filtrado.

Al igual que en el esquema de derivación, en las fronteras del dominio computacional el filtrado fue degradado a uno de menor orden. Para los nodos interiores el filtro aplicado es de orden 10 (F10). En el caso de los nodos 5 y  $N_x - 4$  se aplicó un filtro F8, en los nodos 4 y  $N_x - 3$  uno de sexto orden (F6) y así sucesivamente hasta llegar a los nodos frontera 1 y  $N_x$ , en los cuales no se aplicó el filtrado. El parámetro ajustable  $\alpha_f$  se utiliza para calcular los coeficientes  $a_0, a_1, \dots, a_n$ . Los valores de este parámetro van de  $-0,5 \leq \alpha_f \leq 0,5$ , en el que los cercanos a 0.5 pertenecen a un filtro menos disipativo. Se ha visto que los valores más adecuados van de 0.3 a 0.5.

La integración temporal fue realizada utilizando un el método de RungeKutta (TVD-RK3) descrito en en el trabajo de Chi-Wang and Osher [1988].

### 2.2.5. Modelado de la Superficie libre

En el presente trabajo el método Level-Set es utilizado para resolver la dinámica de la superficie libre. Este método fue introducido por Osher and Shethian [1988] y ha sido utilizado exitosamente en la solución de una gran cantidad de problemas en los que se involucran flujos multifásicos [Sussman et al., 1994, Chang et al., 1996, Nourgaliev et al., 2004, Cubos-Ramírez et al., 2016]. La ventaja del método LS es su capacidad de predecir la posición exacta de la interfase, a diferencia del método VOF, en dónde esta se encuentra ubicada en una amplia banda de nodos o celdas en el dominio computacional. Este método utiliza una función distancia con signo llamada Level-Set ( $\phi(x_i, t)$ ), en la que el valor cero de la función

(eq.(2.9)) representa la interfase o superficie libre del líquido.

$$\Gamma(t) = \{x_i \mid \phi(x_i, t) = 0\} \quad (2.9)$$

y su signo representa cada fase. En el presente trabajo se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{líquido} & \quad \text{si} \quad \phi(x_i, t) \geq 0 \\ \text{gas} & \quad \text{si} \quad \phi(x_i, t) < 0 \end{aligned}$$

La superficie es advectada por la velocidad del fluido  $u_i$ . Por lo tanto, la evolución de la función Level-Set es dada por la solución de la siguiente ecuación de transporte:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0 \quad (2.10)$$

La discretización espacial de la ecuación (2.10) es realizada mediante un esquema Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO5) de quinto orden [Jiang and Peng, 2000]. La integración temporal es realizada utilizando el método Runge Kutta descrito con anterioridad. Es importante mencionar que, después de aplicar de forma consecutiva la integración temporal, la función LS va perdiendo su definición de distancia con signo. Lo anterior puede generar una excesiva difusión numérica, lo que provoca que se degrade la solución. Por lo tanto, un paso importante dentro del método LS es reinicializar la función con el fin de mantenerla como una distancia con signo. Este paso es llevado a cabo al remplazar la función actual por otra que tiene el mismo nivel cero (posición de la superficie). Sin embargo, que satisfice que  $|\nabla \phi| = 1$ , la cual es una propiedad de las funciones LS. El proceso de reinicialización se logra al resolver la siguiente ecuación pseudo-transitoria:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau_r} + \mathbb{S}(\phi)(|\nabla \phi| - 1) = 0 \quad (2.11)$$

donde  $\mathbb{S}(\phi)$  se define como:

$$\mathbb{S}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + |\nabla \phi|^2 \Delta h^2}} \quad (2.12)$$

y  $\Delta h = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ . La distetización espacial de la ecuación (2.11) y de la ecuación (2.11) es el mismo esquema WENO5 utilizado en el proceso de advección de LS. El pseudo-tiempo  $\tau_r$  no debe ser confundido con el tiempo físico, es sólo para desarrollar la ecuación (2.11). Por lo que, no tiene un significado físico [Osher and Fedkiw, 2003]. La integración temporal utilizada fue realizada utilizando el esquema TVD-RK3 y la definición del pseudo-paso de tiempo es:

$$\Delta \tau_r = CFL \cdot \Delta h \quad (2.13)$$

donde  $CFL$  es el número de Courant-Friedrich-Levy, el cual tiene un valor de 0.5 para el presente trabajo. Finalmente, el proceso de reinicialización se aplica únicamente cada diez pasos de tiempo con el fin de ahorrar tiempo computacional.

### Esquemas ENO y WENO

WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) son esquemas de alto orden para ecuaciones de conservación de tipo hiperbólicas. Son empleados en problemas que contienen discontinuidades, y a pesar de ello, cuentan con una solución suave a pedazos. Nacen de los esquemas ENO desarrollados por Harten [1987]. Donde la idea principal es calcular los flujos utilizando interpoladores polinomiales lo más suaves posibles; mediante un procedimiento no lineal adaptativo se selecciona la mejor plantilla, evitando así el cruce con discontinuidades.

Una de las cualidades más relevantes de los esquemas WENO, es que son centrados en lugares donde la solución es suave. Sin embargo, actúan como esquemas ENO en regiones discontinuas. Para lograr lo anterior, en lugar de utilizar un sola plantilla candidata, los métodos WENO hacen uso de tres combinaciones convexas ENO de la siguiente manera

$$\phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6} \quad (2.14)$$

$$\phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{6} \quad (2.15)$$

$$\phi_x^3 = \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6} \quad (2.16)$$

si alguna de ellas cruza una región discontinua, se le asigna un menor peso, minimizando así su contribución y por lo tanto el error. Además, cuando se tienen regiones suaves, las tres plantillas contribuyen a la solución, mejorando su exactitud.

Los flujos se dividen en su parte negativa ( $\phi_x^-$ ) y positiva ( $\phi_x^+$ ). Para calcular  $\phi_x^-$ , se utiliza el siguiente subconjunto de puntos nodales  $\{\phi_{i-3}, \phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}, \phi_{i+2}\}$ . Siendo  $a = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x}$ ,  $b = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$ ,  $c = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$ ,  $d = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$  y  $e = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$ . Entonces,  $\phi_x^-$  estará dado por

$$\phi_x^- = \omega_1 \phi_x^1 + \omega_2 \phi_x^2 + \omega_3 \phi_x^3 \quad (2.17)$$

donde las funciones de peso se encuentran en el rango  $0 < \omega_k \leq 1$ , además, cumplen que  $\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$  y son definidas de la siguiente forma

$$\omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (2.18)$$

$$\omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (2.19)$$

$$\omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (2.20)$$

siendo  $\alpha_k$  definida como

$$\alpha_1 = \frac{0,1}{(S_1 + \epsilon)^2} \quad (2.21)$$

$$\alpha_2 = \frac{0,6}{(S_2 + \epsilon)^2} \quad (2.22)$$

$$\alpha_3 = \frac{0,3}{(S_3 + \epsilon)^2} \quad (2.23)$$

donde

$$S_1 = \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2 \quad (2.24)$$

$$S_2 = \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2 \quad (2.25)$$

$$S_3 = \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2 \quad (2.26)$$

$$\epsilon = 10^{-6} \max \{v_1^2, v_2^2, v_3^2, v_4^2, v_5^2\} + 10^{-99} \quad (2.27)$$

en una región suave, los valores de las funciones de peso serán  $\omega_1 = 0,1$ ,  $\omega_2 = 0,6$  y  $\omega_3 = 0,3$  lo que da como resultado un esquema de quinto orden. El flujo  $\phi_x^+$  es calculado de la misma manera, sin embargo, utiliza un subconjunto de puntos nodales  $\{\phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}, \phi_{i+2}, \phi_{i+3}\}$ . Siendo  $a = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x}$ ,  $b = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$ ,  $c = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$ ,  $d = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$  y  $e = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$ .

En la advección de la función *Level-Set*, la elección del flujo (ya sea su parte positiva o su contraparte negativa) dependerá de su componente de velocidad (método de las características). Si  $u_i > 0$  significa que, la información se transporta desde la región negativa hacia la positiva, por lo tanto,  $\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \phi_x^-$ . En el caso de  $u_i < 0$  la información se desplaza de forma contraria, por lo que se utiliza  $\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \phi_x^+$ .

Para la reinicialización, se utilizó la forma propuesta por Godunov [1959], la cual puede ser escrita de forma compacta [Rouy, 1992] de la siguiente manera:

cuando  $\phi \geq 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\max(\phi_x^-, 0)^2, \min(\phi_x^+, 0)^2) \quad (2.28)$$

y, cuando  $\phi < 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\min(\phi_x^-, 0)^2, \max(\phi_x^+, 0)^2) \quad (2.29)$$

### Integración Temporal

En la parte temporal, la integración de las ecuaciones que gobiernan el movimiento de los fluidos, la función *Level-Set* y la función de reinicialización se realizó con esquemas *Runge-Kutta* TVD de tercer orden. Para ilustrar su procedimiento, se escriben las ecuaciones en su forma conservativa, por lo tanto la divergencia de los flujos puede expresarse como  $-(u \cdot \nabla)\phi = L(\phi)$ . Entonces, las ecuaciones las podemos reescribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi) \quad (2.30)$$

entonces, la integral de ecuación 2.30 utilizando el esquema *Runge-Kutta* TVD de tercer orden se define como

$$\begin{cases} \phi^* = \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \\ \phi^{**} = \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^* + \frac{1}{4}\Delta t (L(\phi^*)) \\ \phi^{n+1} = \frac{1}{3}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{**} + \frac{2}{3}\Delta t (L(\phi^{**})) \end{cases} \quad (2.31)$$

### 2.2.6. Método Ghost Fluid

Para el modelado de la interfase entre el líquido y el gas se utilizó el enfoque de superficie libre [Osher and Fedkiw, 2003, p. 217]. De esta manera, la inercia del gas no fue tomada en cuenta, por lo que se simplifica de manera importante el problema, haciendo que sólo dos condiciones de frontera se necesiten aplicar en la superficie del líquido: una condición de esfuerzo cortante igual cero en la dirección normal a la superficie libre y además, aplicar una presión de referencia en la interfase. Estas condiciones son las mismas impuestas en trabajo realizado por Ciofalo et al. [1996], para ser aplicadas se utilizó el método Ghost-Fluid. El cual fue desarrollado por Fedwik et al. [1999] con el fin de tratar directamente con las discontinuidades en los materiales, en particular en interfaces: fluido-fluido, fluido-sólido y sólido-sólido. Este método ha sido aplicado exitosamente en la solución de flujos con superficie libre que cuentan con una gran relación de densidades (1000:1) [Nourgaliev et al., 2004, Cubos-Ramírez et al., 2016]. En el presente trabajo se utilizó una variación de esta metodología, en donde en cada paso de tiempo tanto las ecuaciones de gobierno como la función Level-set avanzan en el tiempo. Siendo esta última utilizada como una frontera móvil inmersa en el dominio computacional. Por lo que al rededor de ella, en la región opuesta al líquido, se genera una banda de nodos llamados fantasma (ver fig.2.3). En dichos nodos se aplican las condiciones de frontera.

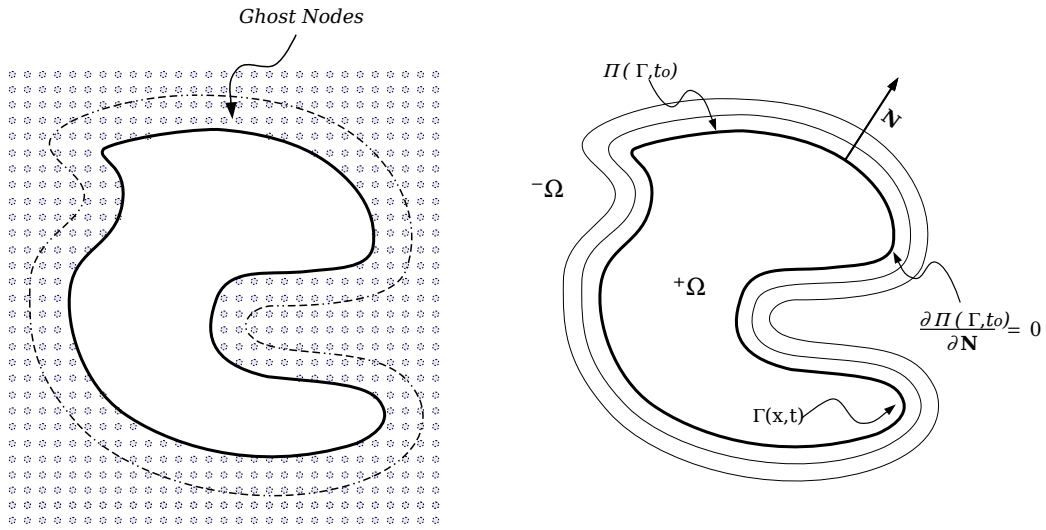


Figura 2.3: Método Ghost Fluid: (a) Las condiciones de frontera de tipo Dirichlet son aplicadas en una banda de nodos creados entre la superficie libre del líquido (línea en negrita) y cierta distancia negativa (línea punteada), (b) Las condiciones de frontera de tipo Neumann son aplicados extrapolando el valor de  $\Pi$  en dirección normal a la superficie ( $\mathbf{N}$ ).

Para aplicar la condición de tipo Dirichlet mencionada con anterioridad, se impone el valor de presión de referencia ( $p_{ref}$ ) en los nodos fantasma. Con el fin de obtener una condición de frontera de tipo Neumann se resuelve la ecuación pseudo-transitoria (2.32). Lo anterior, es llamado el procedimiento de extrapolación, en donde  $\Pi$  es la variable que se necesita extrapolar. Este procedimiento se aplica a cada una de las componentes de la velocidad con el fin de obtener la condición de esfuerzo cortante cero en dirección normal a numérica necesita ser extrapolada es el escalar pasivo, por lo que la ecuación pseudo-transitoria es aplicada de manera iterativa hasta obtener la siguiente condición para el escalar pasivo en los nodos fantasma  $\partial C / \partial \mathbf{N} = 0$ .



El procedimiento de extrapolación necesita que se resuelva la siguiente ecuación pseudo-transitoria:

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \tau_g} + [\mathbb{Q}(\phi) \cdot \mathbf{N}] \cdot \nabla \Pi = 0 \quad (2.32)$$

donde  $\mathbb{Q}(\phi)$  define si:

$$\begin{aligned} \text{Se extrapola del lado positivo } \phi \geq 0 \quad \mathbb{Q}(\phi) &= \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \leq 0 \\ +1 & \text{si } \phi > 0 \end{cases} \\ \text{Se extrapola del lado negativo } \phi < 0 \quad \mathbb{Q}(\phi) &= \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \geq 0 \\ -1 & \text{si } \phi < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Además la variable  $\mathbf{N}$  es el vector normal a la superficie del líquido, el cual puede ser fácilmente obtenido utilizando la función Level-Set de la siguiente manera:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (2.34)$$

La discretización espacial de la ecuación (2.32) es encontrada en el trabajo realizado por Nourgaliev et al. [2004], donde la ecuación 2.34 se discretizó mediante un esquema centrado de segundo orden, así como la ec. 2.32 mediante un esquema *upwind* de primer orden de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}\delta_{i,j,k} &= \max(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_1)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{\Delta x_1} \\ &+ \min(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_1)}, 0) \frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_1} \\ &+ \max(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_2)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{\Delta x_2} \\ &+ \min(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_2)}, 0) \frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_2} \\ &+ \max(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_3)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{\Delta x_3} \\ &+ \min(\mathbb{Q}_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_3)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_3} \end{aligned} \quad (2.35)$$

La integración temporal se realizó con el esquema TVD-RK3 mostrado con anterioridad. Para el presente trabajo, es importante notar que, el pseudo-tiempo utilizado para realizar el procedimiento de extrapolación no es el mismo que el encontrado en la reinicialización.

### 2.2.7. Tratamiento de las fronteras

Como se mencionó anteriormente, la solución numérica se basa en una malla cartesiana. Por lo tanto, se necesita un método para poder representar las fronteras estáticas y móviles dentro del dominio computacional. En el presente trabajo se aplicaron dos métodos distintos con el objetivo de modelar la interacción entre las fronteras sólidas y flujo del fluido. El impulsor se modeló utilizando el método de fronteras inmersas (IBM), y para el eje y el tanque se aplicó el método de Ghost-Fluid (GFM).

Existen distintas formulaciones del IBM, el enfoque utilizado en el presente trabajo se basa en el realizado por Salinas-Vázquez et al. [2010]. La idea básicamente es agregar un término fuente en las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento. Lo anterior se aplica únicamente en la región ocupada por el impulsor. Por tanto, el primer paso del algoritmo consiste en identificar los nodos computacionales donde se encuentra el sólido. El término fuente se aplica en cada sub-paso de integración temporal. Después de eso, en el siguiente paso de tiempo, el impulsor se reposiciona y se etiquetan nuevos nodo, comenzando de nuevo el algoritmo.

En la figura 2.4 (a) se muestra en color gris la región que es cubierta por el impulsor, además de los nodos computacionales utilizados por el método de fronteras inmersas para imitar el movimiento del sólido. En este enfoque, la frontera real rara vez se ajusta a la malla computacional. Por lo tanto, la geometría se representa como una forma escalonada, lo que se podría producir una solución incorrecta del flujo cerca del impulsor (ver fig. 2.4 (b)). Para poder solventar este problema y mejorar la solución, se aplicó un tratamiento especial a los nodos que rodean el impulsor. Este tratamiento se basa en el trabajo realizado por Yang and Balaras [2006], que ha sido probado con éxito en el modelado de la interacción fluido-sólido en diferentes tipos de flujos utilizando LES. En este enfoque, cualquier propiedad  $\Pi$  en los nodos alrededor del impulsor, los cuales se denominan nodos interpolados, se puede calcular como  $Pi = b_1 + b_2x_1 + b_3x_2$ , donde los coeficientes  $b_1$ ,  $b_2$ , y  $b_3$  se encuentran resolviendo el sistema de ecuaciones [3X3] (ecuación 2.36) creado por una plantilla con los valores de  $\Pi$  y la respectiva posición espacial de dos nodos pertenecientes al fluido, además de necesitar un punto ubicado en la frontera real del sólido-fluido (nodo frontera). Este procedimiento se aplica al campo de velocidades para imponer de mejor manera la condición de no-deslizamiento.

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{2,1} \\ 1 & x_{1,2} & x_{2,2} \\ 1 & x_{1,3} & x_{2,3} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Pi_1 \\ \Pi_2 \\ \Pi_3 \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

En las variables turbulentas, el cálculo de  $\nu_t$  en los nodos al rededor del impulsor usando la ecuación 2.5 no es sencillo. Como se menciona en Yang and Balaras [2006], esto se debe a que la evaluación de la viscosidad turbulenta en la vecindad de las fronteras inmersas involucra los nodos en interior del impulsor. Para superar ese problema, el procedimiento de interpolación mostrado anteriormente se aplica apagando  $nu_t$  en la superficie del impulsor. Esto evita modificaciones en el modelo de turbulencia y la aparición de efectos no físicos. Esto último ha sido estudiado en detalle comparando el comportamiento turbulento cerca de la pared este procedimiento de con simulaciones numéricas directas (DNS) [Yang and Balaras, 2006]. La metodología anterior se puede mejorar mediante el uso un esquema de orden superior o incluyendo funciones de pared. Sin embargo, pueden llegar a tener un alto costo computacional y debido a que el tiempo de computo es un problema importante en la resolución de UUST, se prefirió el esquema utilizar descrito anteriormente.

Finalmente, para modelar el tanque y el eje del impulsor, los cuales se encuentran inmersos en el dominio computacional, también se utilizó el GFM, por lo que se creó una función de distancia con signo (otra función LS). Debido a que la pared del tanque no cambia con el tiempo, esta función no tiene que ser advectada como en el caso de superficie

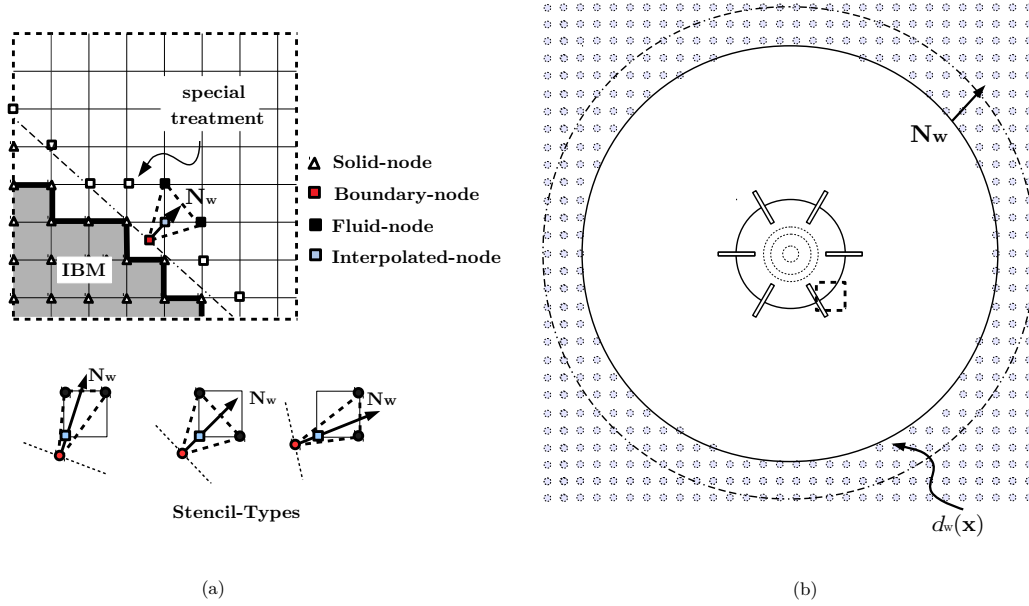


Figura 2.4: Método de fronteras inmersas y de Ghost Fluid aplicado para el modelado de las paredes. (a) Los sólidos inmersos en el dominio computacional son enmarcados en color gris, debido a la malla cartesiana el sólido es representado como una figura escalonada. Se muestran el conjunto de puntos utilizado para realizar la interpolación y así mejorar la representación de las superficies; (b) Método Ghost Fluid aplicado utilizando una función distancia para representar las paredes del tanque.

libre. Por lo que, al comienzo de la simulación, se conocen los nodos fantasmas que rodean las paredes. Por lo tanto, como es mencionado anteriormente, las condiciones de contorno se pueden aplicar en el lado fantasma, en el que la condición de no-deslizamiento se establece para el campo de velocidades ( $u_i = 0$ ) y se aplica un gradiente normal cero para la presión  $\partial p / \partial \mathbf{N}_w = 0$ . Además, se resuelven dos condiciones de frontera de tipo Neumann. Para el escalar pasivo, se establece  $\partial C / \partial \mathbf{N}_w = 0$  y para la ecuación Level-Set que representa la superficie libre  $\partial \phi / \partial \mathbf{N}_w = 0$ , donde  $\mathbf{N}_w$  es el vector normal a la pared; este no debe confundirse con la normal a la superficie libre. Las condiciones de frontera se resuelven utilizando la ecuación pseudo-transitoria (2.32) con ayuda de la función distancia creada para representar las paredes de los sólidos.

### 2.3. Pruebas de Validación

En la presente sección se muestran resultados correspondientes a dos pruebas de validación. La primera se basa en el trabajo realizado experimentalmente por Vella et al. [2003] y realizado también experimental y numéricamente por Alcamo et al. [2005]. En el que se analiza un tanque totalmente lleno y cubierto sin desviadores de flujo, que es agitado mediante una turbina Rusthon. En esta prueba, se compararon la velocidad tangencial promedio y la trayectoria de los vórtices trailing. La segunda prueba corresponde a tanque descubierto sin desviadores (UUST) analizado por Busciglio et al. [2013]. En su trabajo experimental, se muestra la deformación de la superficie libre para varios tipos de impulsores a diferentes velocidades de rotación. Por lo tanto, se utilizó para comparar tanto la forma como la profundidad de la superficie de líquido.

Para obtener las cantidades promedio y turbulentas, y debido a que el flujo tiene un comportamiento periódico relacionado con la frecuencia de paso de las paletas del impulsor, se obtuvieron los datos realizando una estadística en fase. Por lo que los resultados instantáneos de velocidad y presión se almacenaron cuando las paletas del impulsor cruzaban

la misma posición espacial. Por lo tanto, se recopilaron seis valores de flujo en todos los nodos computacionales para cada revolución del impulsor. Luego, los valores medios obtenidos en fase se calcularon de la siguiente manera:

$$\langle \vartheta(x_i) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{n=1}^{N_s} \vartheta(x_i, t_n) \quad (2.37)$$

donde,  $\vartheta(x_i, t_n)$  es la variable que se va a promediar y  $N_s$  es el número de campos almacenados. Para el presente trabajo se obtuvieron los campos correspondientes a 20 vueltas del impulsor, las mismas vueltas ocupadas en el trabajo de Alcamo et al. [2005] con el que realizaremos las comparaciones. Finalmente, dado que el sistema de referencia es cartesiano, todas las velocidades se transformaron a coordenadas cartesianas.

### 2.3.1. Tanque cubierto sin desviadores de flujo

El sistema de mezclado ocupado en Vella et al. [2003] y en Alcamo et al. [2005] es un tanque cilíndrico sin desviadores, el cual es agitado por una turbina Rushton (seis palas  $D = T/2$  y  $c/T = 1/3$ ) con fondo plano (ver fig. 2.5). El tanque está cubierto con una tapa y completamente lleno. Por tanto, la superficie libre no juega ningún papel en este caso. Sin embargo, los patrones de flujo, tanto del flujo primario como el secundario son bastante similares, como en el caso de los UUST. La ventaja de este sistema es que las trayectorias de los vórtices detrás del impulsor están bien documentadas. Por lo que, se realizó esta prueba con el fin de conocer la capacidad del código para resolver este problema monofásico y verificar que se resuelva de manera adecuada el flujo alrededor de las paletas del impulsor. El dominio computacional ocupado tiene una malla regular estructurada con un tamaño de  $2.2 D \times 2.2 D \times D$ . El número de nodos encontrado óptimo después de realizar un análisis de independencia de malla es de  $160 \times 160 \times 160$  a lo largo de los ejes  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente, para un total de 4,096,000 puntos discretos y 2,658,000 de nodos dentro del dominio computacional.

La figura 2.6 (a) y 2.6 (b) muestran la velocidad tangencial promedio ( $\langle u_\theta \rangle$ ) normalizada con la velocidad máxima del impulsor ( $u_{tip}$ ) a lo largo de el eje radial a dos diferentes alturas ( $z/D = 0,422$  y  $z/D = 0,316$ ). En la región conocida como de vórtice forzado ubicada en la parte central del tanque, el incremento de velocidad es lineal y los valores obtenidos por el modelo numérico son idénticos con respecto al caso experimental. Sin embargo, el valor máximo, que ocurre en el llamado radio crítico ( $r_c$ ) está subestimado, teniendo un error alrededor del diez por ciento. Cuando  $r_c > 0,37$ , en la región de vórtice libre, la velocidad está subestimada, sin embargo, tiene el mismo comportamiento que en el estudio experimental. Lejos de la parte central del tanque, cerca de la pared, los valores se ajustan de nuevo. En general, la velocidad muestra una buena concordancia en la parte central y externa del tanque, teniendo el mismo comportamiento y orden de magnitud a lo largo de todo el eje radial.

En los tanques agitados, el flujo alrededor del impulsor controla muchos parámetros relevantes en el proceso de mezclado. Por ejemplo a nivel global uno de los más importantes es el consumo de potencia. A nivel local, una característica de flujo relevante es la formación de vórtices en la parte trasera del impulsor. Esto se debe a que están asociados con altos gradientes de velocidad y, por lo tanto, altos niveles de actividad turbulenta, los cuales juegan un papel importante en el proceso de mezclado. Por estas razones, las trayectorias de estos vórtices se comparan con su contraparte experimental y numérica, con en el trabajo realizado por Alcamo et al. [2005]. La figura 2.6 (c) muestra la trayectoria del vórtice superior. Esta trayectoria se obtiene utilizando el enfoque propuesto por Yianneskis et al. [1987], en donde los puntos corresponden a la componente de velocidad  $z$  igual a cero  $\langle u_z \rangle / u_{tip}$  encontrada en el plano axial, cerca de la parte inferior de la paleta. Las trayectorias obtenidas en este trabajo concuerdan bien con los resultados numéricos y experimentales reportados en el trabajo de [Alcamo et al., 2005].

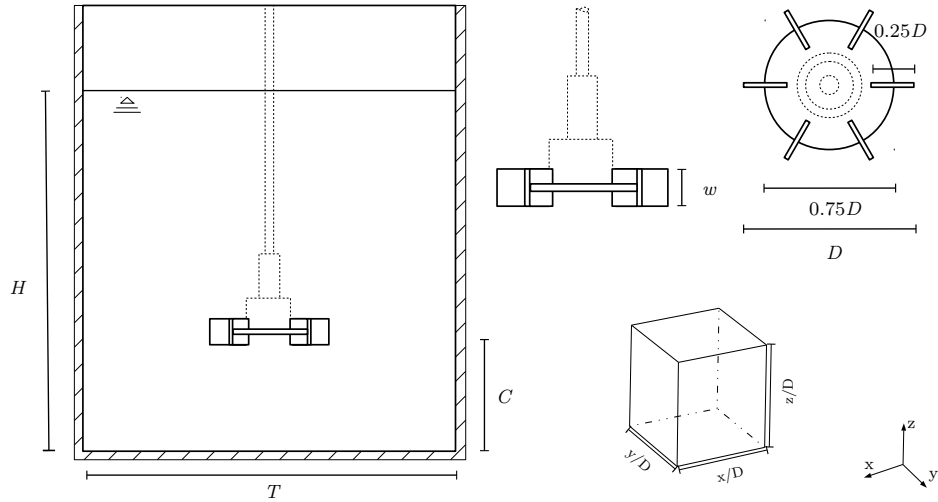


Figura 2.5: Sistema de mezclado: si tiene un tanque de fondo plano (izquierda) agitado por una turbina Rushton de 6 paletas (derecha). Para la prueba de validación con el tanque cubierto, la tapa se colocó a una altura de  $H$ .

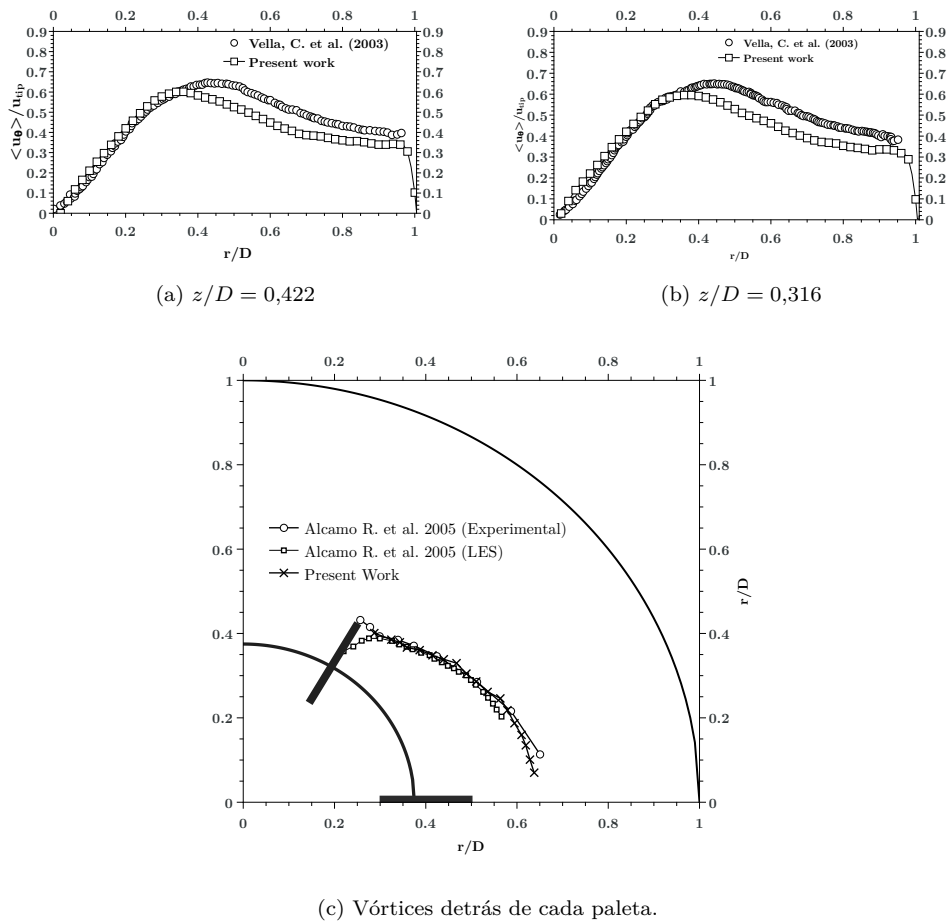


Figura 2.6: Validación: (a) Velocidad Tangencial  $\langle u_{\theta} \rangle / u_{tip}$  at  $z/D = 0,422$  and (b)  $z/D = 0,316$  ; (c) Trayectoria de los vórtices.

### 2.3.2. Tanque abierto sin desviadores de flujo

El sistema utilizado para validar el comportamiento de la superficie libre es el mismo que el del trabajo realizado por Busciglio et al. [2013]. Es un tanque cilíndrico descubierto con fondo plano que tiene diámetro de  $T/D = 3$ . El impulsor es una turbina Rushton de seis paletas y una distancia del fondo del tanque al impulsor de  $c/T = 1/3$ . El dominio computacional tiene un tamaño de  $3.2 D \times 3.2 D \times 4 D$  con un total de 8 millones de nodos ( $200 \times 200 \times 200$ ), de los cuales aproximadamente 5 285 000 puntos se encuentran dentro del dominio computacional. Lo anterior fue obtenido al realizar un análisis de independencia de malla. El fluido comienza desde el reposo y con la superficie del líquido plana ubicada a una distancia de  $H = T$  como se muestra en la fig. 2.5. Las simulaciones se realizaron a tres diferentes condiciones operación con una velocidad de rotación en el impulsor correspondiente a 300, 450 y 540 [rpm]. Las cuales corresponden en forma adimensional a  $Fr = 0,16$ ,  $Fr = 0,36$  y  $Fr = 0,52$ , respectivamente, donde  $Fr$  es el número de Froude definido como  $Fr = N^2 D/g$  y  $Re$  es el número de Reynolds con valores de  $Re = 20,055$ ,  $Re = 30,008$  y  $Re = 35,990$  respectivamente, el cual se define como  $Re = \rho N D^2/\mu$ . Esta última condición coincide experimentalmente con el régimen de operación crítica y las primeras dos simulaciones se realizaron bajo condiciones subcríticas.

La figura 2.7 muestra iso-superficies de valor cero de la función Level-Set, las cuales representan la superficie instantánea del líquido (superior) y junto con su respectivo valor promedio (inferior). Además, se presentan los contornos en tonos de grises de la magnitud de la velocidad. En estas figuras, es evidente cómo la profundidad de la superficie libre aumenta a medida que se incrementa el número de Froude (relación entre las fuerzas inerciales y gravitacionales). Además, cabe destacar la forma realista de la superficie libre y su comportamiento turbulento. A estas condiciones de operación, y con el fin de obtener una comparación cuantitativa, estos resultados se compararon con los datos experimentales obtenidos por Busciglio et al. [2013]. Por lo tanto, la fig. 2.8 muestra los resultados de las alturas adimensionales para los tres diferentes números de Froude ( $Fr = 0,16$ ,  $Fr = 0,36$  y  $Fr = 0,52$ ), donde  $z_b/D$  es la profundidad de la superficie (altura mínima en la parte central del tanque) y  $z_w/D$  el nivel máximo de líquido en la pared del tanque. La profundidad de la interfase es bien capturada por el código, ya que los casos en condiciones sub-críticas concuerdan de buena manera con los datos experimentales. Sin embargo, en el caso con el número de Froude más alto ( $Fr = 0,52$ ) las distancias están subestimadas (ver figura 2.8). Esto puede deberse a que existe una interacción importante entre la superficie del líquido y la geometría del impulsor bajo esta condición. Por lo tanto, la complejidad de la solución aumenta en esta área, lo que resulta en un gran error (máximo 17%) en la parte central. Sin embargo, a pesar de esas diferencias, la profundidad de la superficie en general concuerda de excelente manera con los resultados experimentales.

Dado lo anterior, y para ilustrar mejor el desempeño del modelo numérico, se realizará una comparación de la forma de la superficie libre con el modelo propuesto por Busciglio et al. [2013]. En su trabajo, el nivel de líquido se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \psi_w - \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} Fr \left( 2 - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} - \frac{\xi^2}{\xi_c^2} \right) & \text{if } \xi \leq \xi_c \\ \psi_w - \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} Fr \left( \frac{\xi_c^2}{\xi^2} - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} \right) & \text{if } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (2.38)$$

donde  $\psi = z/D$  y  $\xi = r/(D/2)$ . Además,  $\psi_w$  se define como el nivel de líquido en la pared, el cual se obtiene de la siguiente manera:

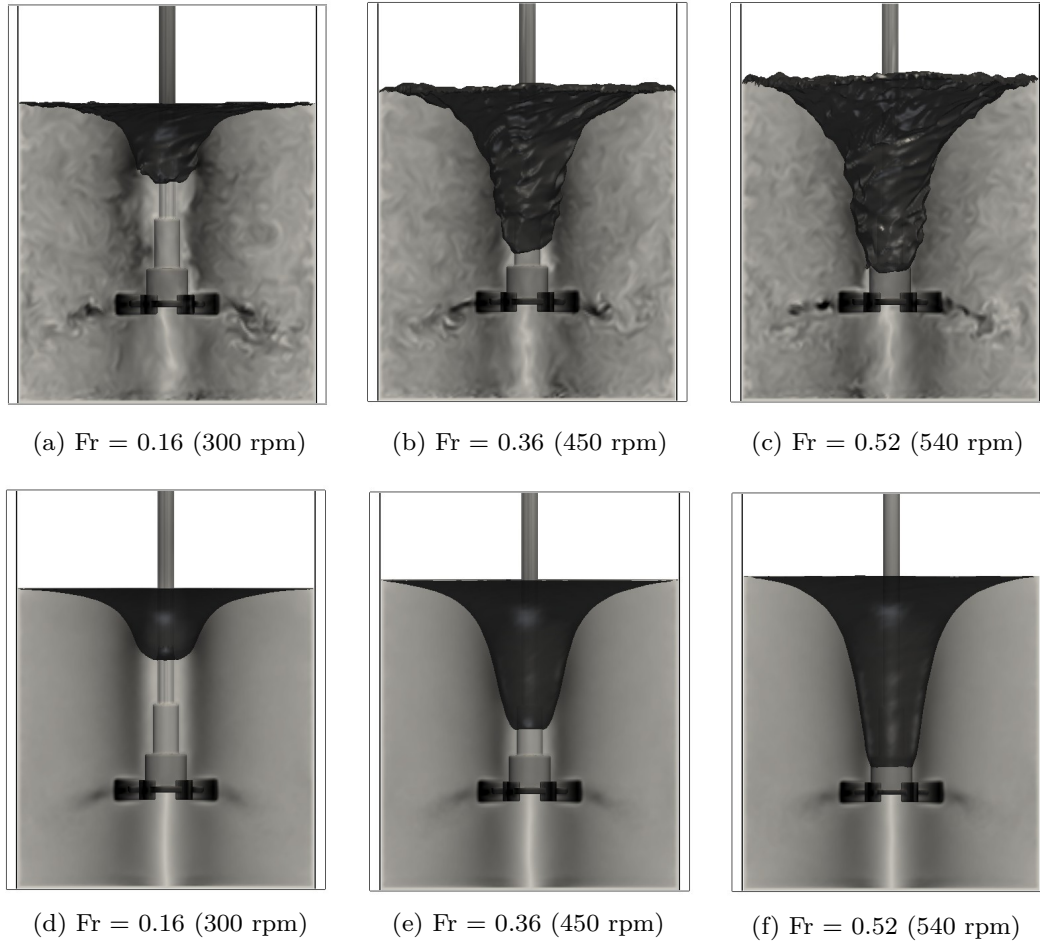


Figura 2.7: Forma de la superficie libre: Perfil instantáneo (superior) y perfil promedio (inferior).

$$\psi_w = \psi_0 + \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} \frac{\xi_c^2}{\xi_w^2} Fr \left( \frac{1}{2} - \ln \frac{\xi_c}{\xi_w} \right) \quad (2.39)$$

siendo  $\psi_0$  la altura del fluido en reposo. Aquí,  $\alpha$  y  $\xi_c$  son parámetros de ajuste obtenidos experimentalmente, con un valor de  $\alpha = 0,898$  y  $\xi_c = 0,780$  para una turbina Rusthon con las relaciones geométricas para el tanque bajo análisis, estos valores también se toman del trabajo de Busciglio et al. [2013]. En la figura 2.9 (a), (b) y (c), se gráfica una comparación de superficies usando la correlación dada por Busciglio et al. [2013]. Estas curvas muestran la capacidad del código numérico para capturar la interfase y resolver con precisión la altura del líquido en la mayor parte del eje radial. En todos los casos hay una pequeña desviación solo en la primera sección del radio. Esta desviación es más visible para el caso de  $Fr = 0,52$ . Sin embargo, en el modelo presentado por Busciglio et al. [2013] es notable que su correlación no es lo suficientemente precisa en la parte central del tanque. Por lo tanto, el modelo numérico presentado aquí muestra una forma mucho más natural cerca del eje del impulsor en comparación con su modelo.

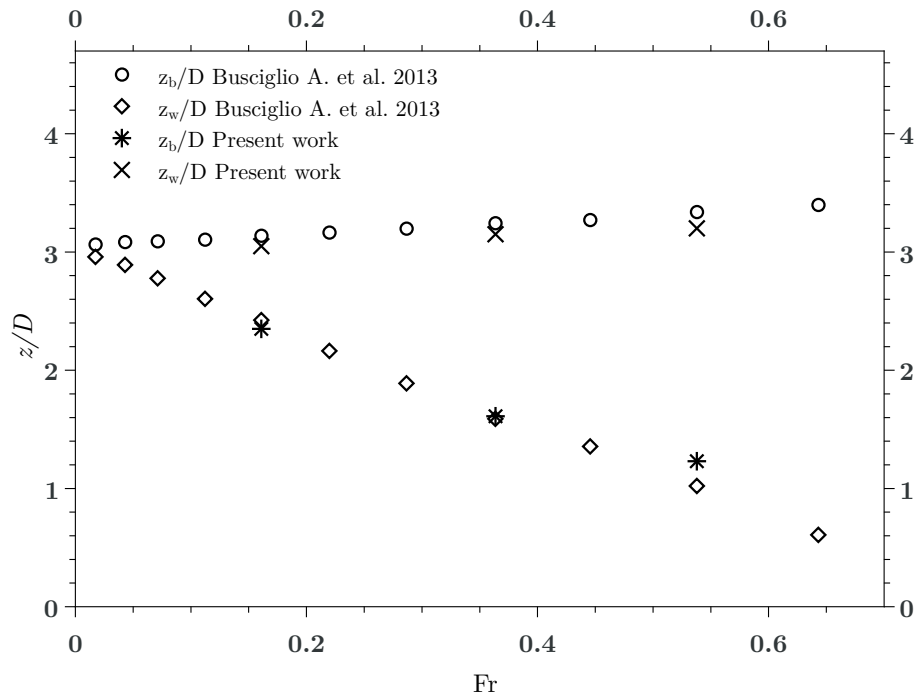


Figura 2.8: Diferencias de alturas en la superficie libre del líquido: Altura del líquido como función del número de Froude ( $c/T = 1/3$ ) a  $Fr = 0,16$ ,  $Fr = 0,36$  y  $Fr = 0,52$ , donde  $z_b/D$  es la profundidad de la superficie (altura mínima de la superficie en la parte central del tanque) y  $z_w/D$  la altura máxima del líquido en la pared.

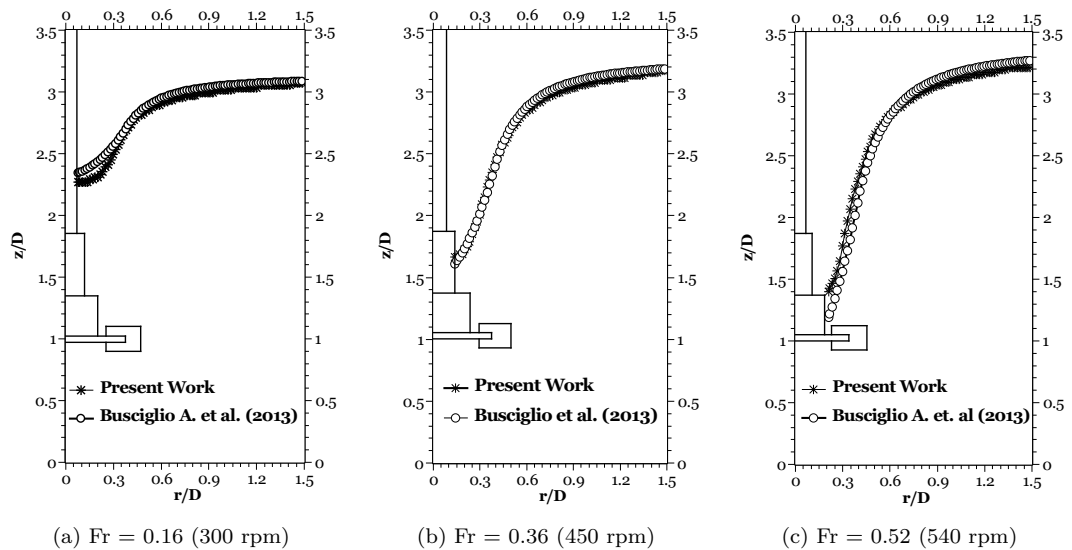


Figura 2.9: Comparación de la forma de la superficie libre promedio: Los resultados numéricos son comparados con la comparación obtenida en el trabajo experimental de Busciglio et al. [2013] para  $c/T = 1/3$  a  $Fr = 0,16$ ,  $Fr = 0,36$  y  $Fr = 0,52$ .



## 2.4. Resultados

En la presente sección, se muestran los resultados de la forma de la superficie, las velocidades radiales promedio, los patrones de flujo, así como los contornos de energía cinética turbulenta. La geometría utilizada, las condiciones de operación y el dominio computacional son los mismos que los utilizados en la prueba de validación. No obstante, se analizaron dos diferentes distancias entre el fondo del tanque y el impulsor;  $c/T = 1/3$  y  $c/T = 1/2$ . En la figura 2.10, se grafican tanto la forma de la superficie como la velocidad radial promedio ( $\langle u_r \rangle / u_{tip}$ ). Primero, vale la pena señalar que, con el mismo número de Froude y diferentes valores de  $c/T$  la profundidad de la superficie no cambia y sólo tiene pequeñas variaciones en su forma. Lo anterior ha sido reportado por Busciglio et al. [2013] de forma experimental, y es bien sabido que, en general, la profundidad del líquido es principalmente una función de la velocidad de rotación y la forma de la superficie depende en gran medida del tipo de impulsor. Por estas razones, las superficies que tienen el mismo tipo de impulsor y operan en las mismas condiciones, pero con diferentes valores de  $c/T$ , son bastante similares. Finalmente, el caso de  $c/T = 1/2$  y  $Fr = 0,52$  no pudo ser resuelto debido a que opera bajo condiciones supercríticas, agregando efectos adicionales en la solución numérica, como lo es la inyección de burbujas, fenómeno que está más allá del alcance del presente trabajo.

### 2.4.1. Campos y Patrones de Flujo

Como ya se mencionó, la figura 2.10 muestra el flujo radial promedio sobre el eje  $z$  a diferentes posiciones radiales. La figura muestra tres regiones características: una zona media, donde el flujo se descarga desde el impulsor a la pared; una zona superior e inferior donde el flujo regresa desde la pared hacia la parte central del tanque; y otra zona bien definida entre esas regiones, donde la velocidad radial es prácticamente nula. En la zona media y en todos los casos (figura 2.10 (a - d)) el chorro no es simétrico y se dirige hacia abajo. En la zona superior, tanto la velocidad radial como el tamaño de esta región son diferentes y cambian según el número de Froude y el valor de  $c/T$ . Además, se puede observar que la región superior es menor cuando el impulsor se encuentra más cerca de la superficie del líquido (figura 2.10 (b) y (d)) y también, la velocidad radial es mayor para el valor  $c/T = 1/2$  en comparación con la otra configuración (figura 2.10 (a) y (c)). Además, los resultados muestran que, si el número de Froude se aumenta, entonces la velocidad radial en la región superior tiende a ser cero. Esto se debe a la gran deformación de la superficie, que produce un flujo hacia la parte interna, que proviene de la parte superior y desciende hasta el impulsor. Por lo tanto, la velocidad axial ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ) será más relevante que la velocidad radial en la parte superior del tanque cuando se deforma la superficie de gran manera.

En la figura 2.11 se muestran los contornos de la velocidad axial ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ), así como los patrones de flujo para diferentes valores de espaciamiento ( $c/T = 1/3$  y  $c/T = 1/2$ ) y número de Froude constante ( $Fr = 0,16$ ). En la imagen se muestra el comportamiento del flujo secundario en el tanque. En general, dicho flujo es menos intenso que en los tanques con desviadores. Sin embargo, para los UUST que utilizan un impulsor Rushton, se encuentran dos zonas de recirculación importantes como en caso de los tanques estándar. Sin embargo, la deformación de la superficie del líquido induce una mayor recirculación en la parte superior, la cual es más evidente cuando la turbina se coloca a una mayor profundidad en el tanque (figura 2.11 (a)). Esto produce un patrón de flujo híbrido, que es una combinación entre el patrón creado por un impulsor axial y uno radial. El flujo que regresa desde la superficie al impulsor es más rápido para una distancia  $c/T = 1/3$  que para una de  $c/T = 1/2$ . Por lo que a recirculación superior provoca una mayor desviación en el área de descarga, donde el flujo de salida es dirigido hacia abajo de una manera considerable, no como en la configuración estándar con desviadores de flujo, donde el chorro es ligeramente inclinado hacia arriba. Esto hace que la mayor parte del flujo descargado se dirija a la parte externa del fondo del tanque, produciendo la zona de recirculación inferior. Para distancia de  $c/T = 1/2$ , el ángulo de descarga (ver figura 2.11 (c)) capturado fue de  $\approx 17^{circ}$  y, cuando el impulsor se coloca más bajo ( $c/T = 1/3$ ) el ángulo se duplica ( $\approx 35^\circ$ ). Entonces, la distancia con respecto del fondo del tanque en la que se coloque el impulsor influye significativamente en el ángulo de descarga del flujo. Esto se debe a que la zona de recirculación superior es más intensa cuando el impulsor se coloca a una mayor profundidad en el tanque y empuja en mayor medida el chorro hacia la parte inferior. El fenómeno anterior afecta los parámetros

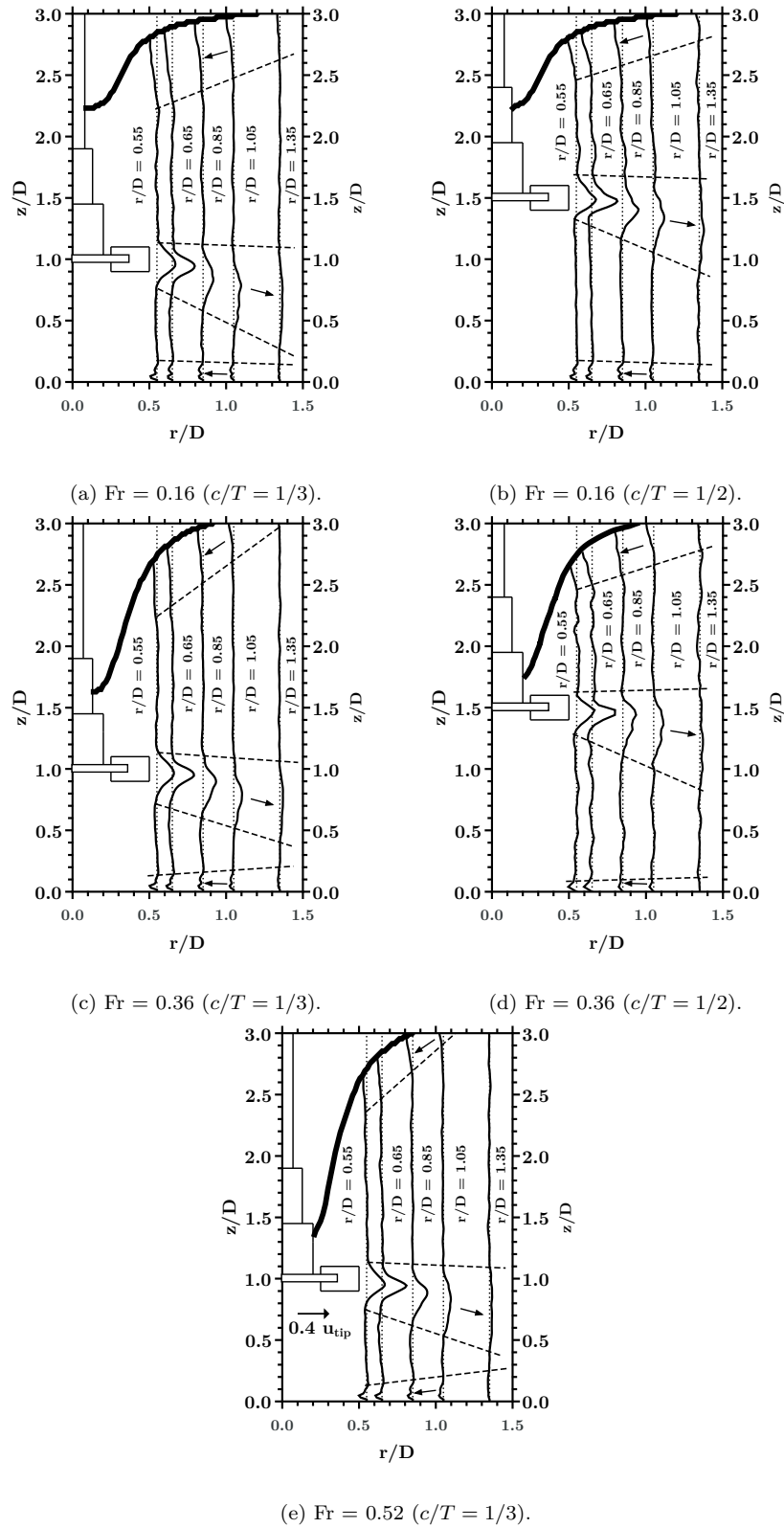


Figura 2.10: Velocidad promedio ( $\langle u_r \rangle / u_{tip}$ ) a diferentes posiciones radiales (línea continua); Superficie libre (líneas gruesas).

de flujo en las cercanías del impulsor, tales como la energía cinética turbulenta y el conjunto de vórtices generados en la parte trasera de las paletas de la turbina.

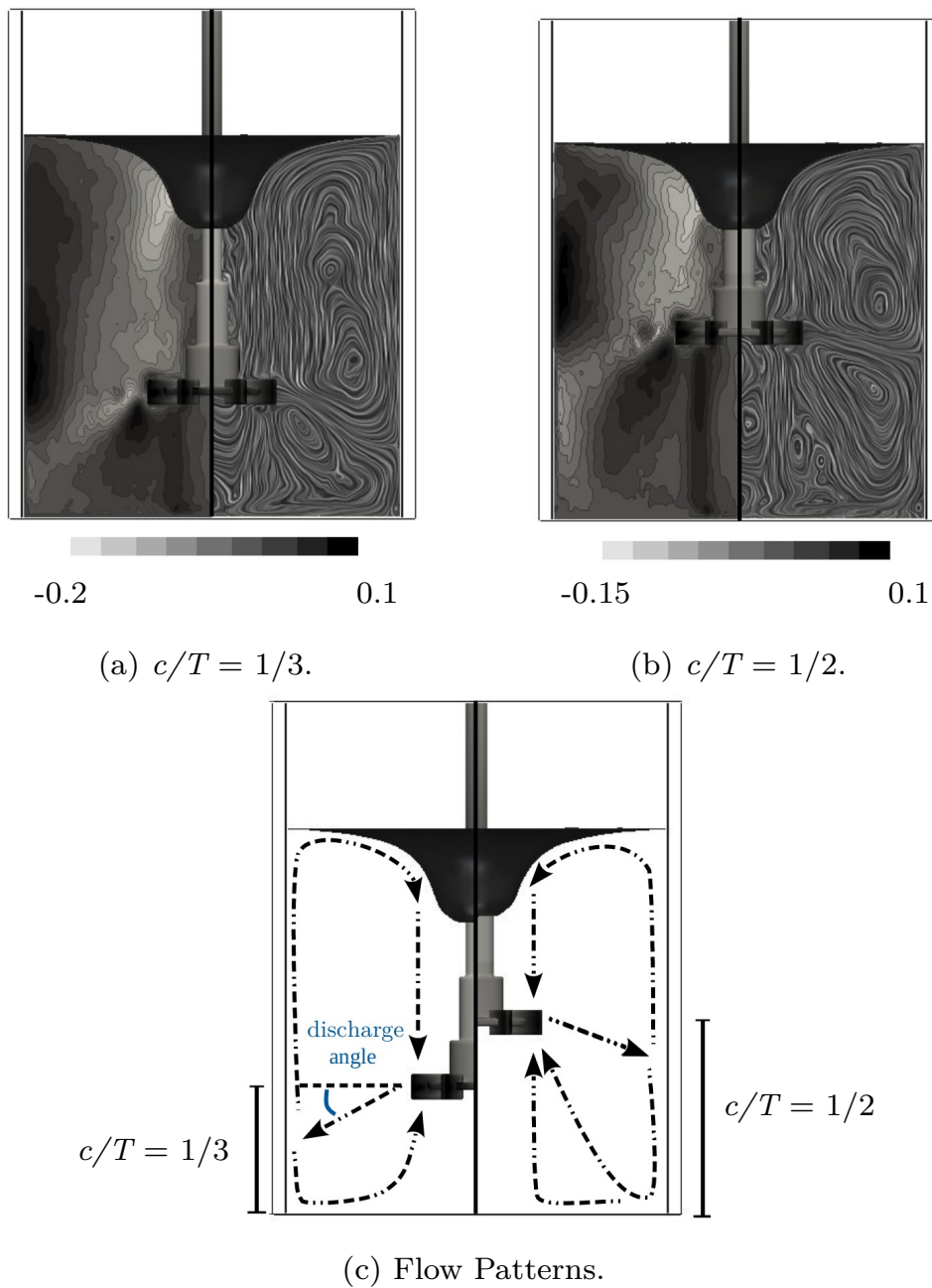


Figura 2.11: Velocidad axial promedio ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ) y patrones de flujo creados en un UUST.

#### 2.4.2. Estructuras turbulentas

Las estructuras turbulentas juegan un papel fundamental en los fenómenos de transporte a gran escala. Por ejemplo, los vórtices detrás de las paletas del impulsor son las estructuras coherentes más relevantes del tanque y son responsables de una gran parte del intercambio de masa, calor y cantidad de movimiento. Por tanto, entender su naturaleza ayuda a entender los mecanismos en los que se lleva a cabo el proceso de mezclado. Por estas razones, en este trabajo las estructuras se visualizaron utilizando el criterio-Q [Jeong and Hussain, 1995]. Este criterio da las regiones del fluido en las que tiene una trayectoria rotacional cerrada y se define como el segundo invariante del gradiente de velocidad. Por lo tanto, matemáticamente se puede escribir de la siguiente manera:

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \geq 0 \quad (2.40)$$

En la fig. 2.12 se presentan las iso-superficies instantáneas de criterio Q-adimensional ( $Q/N^2 = 200$ ) para dos relaciones  $c/T$  diferentes y distintas condiciones de operación ( $Fr = 0,16$ ,  $c/T = 1/2$ ;  $Fr = 0,16$ ,  $c/T = 1/3$ ;  $Fr = 0,52$ ,  $c/T = 1/3$ ). Es importante notar que los vórtices detrás del impulsor no son las únicas estructuras turbulentas que se encuentran en el tanque. Esta figura muestra tres zonas distintas a lo largo del mezclador donde hay una gran cantidad de estructuras turbulentas. Estas se crean debido a la interacción entre el fluido y las diferentes partes dentro del sistema de mezclado, para lograr una mejor compresión se van a enumerar desde las menos relevantes hasta las más importantes para el proceso de mezcla.

En la figura 2.12, la zona 1) se crea mediante la interacción entre el movimiento de rotación del fluido y la pared inferior. En donde estas estructuras se extienden solo en la parte central del fondo del tanque y, debido a su pequeño tamaño, esta zona podría no ser relevante para el proceso de mezcla. Sin embargo, ayuda a romper una zona muerta de mezclado creada debajo del impulsor. Las zonas 2) y 3) ocupan espacios importantes dentro del tanque. En la zona 2), las estructuras son casi verticales y giran alrededor del eje axial cerca del radio crítico. Estas estructuras al aparecer son creadas debido a la transición del área de Vórtice Forzado al Vórtice Libre. Sin embargo, es importante señalar que debajo del impulsor, a pesar de tener la misma transición entre estos dos perfiles de velocidad, no hay estructuras turbulentas. Por lo tanto, podrían ser creadas principalmente por el flujo de entrada que se da hacia el impulsor (efecto de bombeo) y el movimiento de oscilación de la superficie. Lo anterior convierte a esta zona en el segundo lugar más turbulento del tanque y donde se logra un importante intercambio de fluido entre la región de Vórtice Forzado y de Vórtice Libre. En el trabajo de Busciglio et al. [2014] ya se ha señalado que este intercambio se realiza debido a la difusión turbulenta. Aquí, utilizando el criterio-Q, se demuestra que, de hecho, este intercambio es realizado por esas múltiples estructuras turbulentas que interactúan en el nivel superior del impulsor. Además, si esta zona se compara para la misma condición de operación pero diferente valor de  $c/T$  (ver figura 2.12 (a) y figura 2.12 (b)), entonces es posible ver que cuanto más bajo se encuentra ubicado el impulsor, mayor es el área cubierta por las estructuras turbulentas coherentes en la zona 2). Esto produce un efecto importante en la mezcla porque a un valor bajo de  $c/T$  se reduce el área debajo del impulsor donde faltan esas estructuras turbulentas y donde el fluido tiene un movimiento de recirculación pobre. Por lo tanto, colocar el impulsor en el punto más bajo posible del tanque podría mejorar el proceso de macro-mezclado. Finalmente, con respecto a la zona 2), vale la pena señalar que cuando se aumenta el número de Froude (ver figura 2.12 (c) y la superficie del líquido descendiendo, la zona 2) se suprime y aparecen estructuras más grandes que giran alrededor de la Superficie libre. La ventaja en esta situación es que el flujo de entrada se dirige totalmente hacia el impulsor, por lo que no importa si la zona 2) es suprimida.

La zona 3) es el área de descarga del impulsor y es conocida como la región más turbulenta en los tanques agitados mediante una turbina Rushton. Debido a su relevancia, se con un mayor detalle en la figura 2.12 (d). En esta imagen se observan dos grandes estructuras que se mueven en un modo de contrarrotatorio detrás de cada paleta del impulsor; estos son los clásicos vórtices trailing. Sin embargo, para los UUST existe una importante diferencia con respecto de un tanque con desviadores de flujo. En los UUST, los vórtices también se dirigen hacia afuera en dirección radial, como en los tanques estándar con desviadores. Sin embargo, son curvados y redirigidos hacia la parte inferior del tanque. La trayectoria de estos vórtices es importante porque esta zona es de gran relevancia cuando se intenta mejorar el proceso de mezclado. En el trabajo de Assirelli et al. [2008] se propuso inyectar los compuestos directamente en el área de los vórtices utilizando una versión modificada de la turbina de Rushton en un UUST, lo anterior con el fin de mejorar el rendimiento del tanque agitado. En sus experimentos se obtuvieron buenos resultados. Sin embargo, se utilizó la trayectoria de descarga de un tanque convencional con desviadores, en el que el flujo es dirigido ligeramente hacia arriba. Para tener información más precisa y así realizar este tipo de mejoras, en la figura 2.13 se muestra las trayectorias promedio de los vórtices para dos configuraciones diferentes ( $c/T = 1/2$  y  $c/T = 1/3$ ), lo anterior a las mismas condiciones

de operación ( $Fr = 0,16$  y  $Re = 20,055$ ). En los UUST existen algunas dificultades para tratar de obtener la trayectoria de estas estructuras utilizando el enfoque mencionado en la prueba de validación. Esto se debe a que los vórtices posteriores no se mantienen sobre algún plano axial. Por lo tanto, para obtener su trayectoria, se obtuvo el valor máximo local del criterio-Q para diferentes ángulos detrás de la paleta. En este valor máximo local también debe tener una velocidad axial cero para ser considerado como parte de la trayectoria de la de los vórtices.

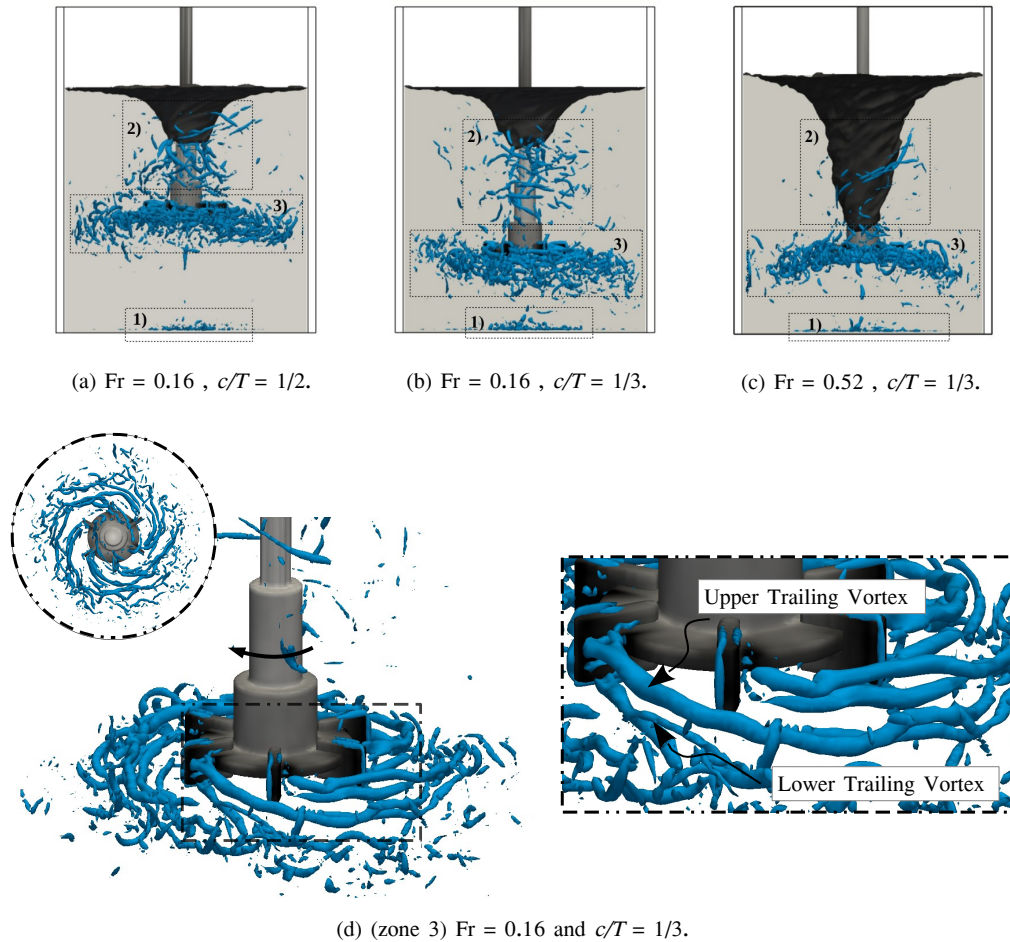


Figura 2.12: Estructuras turbulentas visualizadas: (a - c) criterio-Q ( $Q/N^2 = 200$ ); d) Detalle de la zona 3 ( $Q/N^2 = 400$ )

En la figura 2.13 (a) y la figura 2.13 (b) se muestran las trayectorias de los vórtices detrás una paleta del impulsor. En ambos casos ( $c/T = 1/2$  y  $c/T = 1/3$ ) el par de vórtices tienen una dispersión radial y una trayectoria similar. Sin embargo, los vórtices superiores e inferiores tienen comportamientos distintos. El superior cuenta con una dispersión radial más intensa. Esto significa que este vórtice se descarga con mayor inercia. Podría estar relacionado con el flujo secundario presentado anteriormente, en el que la zona de recirculación superior es más intensa que la que se encuentra en la parte inferior. En tanques agitados con desviadores es bien conocido que la dispersión radial es función del número de Reynolds. Por lo tanto, si las fuerzas de inercia son mayores, entonces el vórtice debe alcanzar una mayor posición radial. Esto también se encuentra en la fig. 2.13 (c) y la fig. 2.13 (d), donde se traza la trayectoria axial de los vórtices. Las figuras muestran una desviación de los vórtices hacia abajo. Además, es importante notar que en ambos casos el vórtice superior se acerca de la línea central del impulsor. Esta deflexión es más evidente para un valor de  $c/T = 1/3$ . Parece ser, de nuevo, debido a que la gran recirculación creada sobre el impulsor empuja el vórtice superior en dirección hacia abajo; este efecto es más intenso para el caso de  $c/T = 1/3$  que

para el valor de  $c/T = 1/3$ .

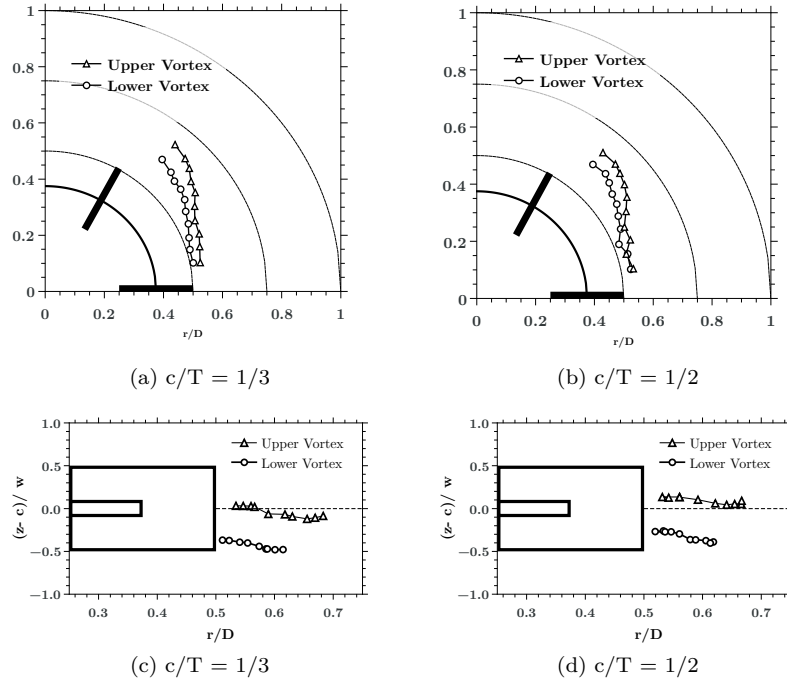


Figura 2.13: Trayectoria de los vórtices detrás de las paletas del impulsor a  $Fr = 0,16$  y  $Re = 20,055$ : (a - b) Vista angular; (c - d) Vista frontal

### 2.4.3. Energía Cinética Turbulenta

La Energía Cinética Turbulenta ( $k$ ) se presenta para comprender de mejor manera la turbulencia dentro del tanque. Como se mencionó anteriormente las estructuras turbulentas son relevantes en muchas operaciones de mezclado y en general, la energía cinética turbulenta está relacionada con ellas. Por lo tanto, para visualizar  $k$ , se obtuvieron los valores periódicos del tensor de esfuerzos de Reynolds, lo anterior significa que solo se registraron los valores cuando el impulsor pasaba por la misma posición. Por lo tanto, cada componente se calculó de la siguiente manera

$$\langle \vartheta' \vartheta'(\mathbf{x}) \rangle = \langle \vartheta^2(\mathbf{x}) \rangle - \langle \vartheta(\mathbf{x}) \rangle^2 \quad (2.41)$$

donde  $\langle \rangle$  es el promediado en fase cuando el impulsor cruza una posición angular particular (ecuación (2.37)). Por lo tanto, dando la definición de la energía cinética turbulenta

$$\langle k \rangle = \frac{1}{2} (\langle u'_\theta u'_\theta(\mathbf{x}) \rangle + \langle u'_r u'_r(\mathbf{x}) \rangle + \langle u'_z u'_z(\mathbf{x}) \rangle) \quad (2.42)$$

En la figura 2.14 se muestra la energía cinética turbulenta periódica adimensional ( $\langle k \rangle / u_{tip}^2$ ) para  $Fr = 0,16$  y  $c/T = 1/3$  en tres diferentes planos angulares: sobre la paleta del impulsor ( $0^\circ$ ) y detrás ( $20^\circ$ ;  $45^\circ$ ). Como era de esperar, la región de descarga (encerrada por líneas punteadas) tiene los niveles de turbulencia más altos en todo el tanque y su forma tiende a dirigirse hacia abajo (ver figura 2.14 (a) (b) (c)). Además, en la figura 2.14 (a), los contornos de  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  muestran las mismas tres áreas importantes relacionadas con las estructuras turbulentas antes presentadas (área de descarga, cerca del fondo de la pared y sobre el impulsor). Además, esta figura expone el área debajo de la Turbina Rusthon donde hay ausencia de estructuras turbulentas y que por lo tanto tiene un nivel bajo de  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$ .

Sin embargo, sobre el impulsor (encerrado por una línea gruesa) se tienen altos niveles de energía cinética turbulenta a lo largo del eje axial. Estos niveles aumentan alcanzando su valor máximo cerca del radio crítico y después de ese punto comienzan a bajar. La figura muestra cómo la parte superior del vórtice forzado tiene un comportamiento más turbulento en comparación con la inferior. Además, en la figura 2.14 (a), cerca de la superficie libre, los valores de  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  también son altos y relevantes, esto se debe a que la interacción entre el flujo de reingreso y la baja velocidad axial encontrada en la Región de Vórtice Forzado. En esta zona, la turbulencia deformará la superficie libre y la deformación atraparé burbujas. Por lo que, estas burbujas serán arrastradas por la corriente de entrada. Este último efecto se puede utilizar para disolver o hundir polvos, la cual ha sido una característica analizada en el trabajo realizado por [Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007].

Finalmente, los vórtices detrás del impulsor se pueden observar en detalle en el plano ubicado  $20^\circ$  detrás del impulsor (ver figura 2.14 (b)), donde dos pequeñas regiones con valores altos de  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  aparecen, siendo estas regiones el núcleo de cada vórtice. Aquí, es importante señalar que el vórtice inferior tiene los valores más altos de energía cinética turbulenta. Nuevamente, ocurre de manera opuesta que en un tanque agitado con desviadores, donde el vórtice superior es el más enérgico. Por esta razón se sugiere que la zona de alimentación para un tanque con desviadores se ubique en la zona de descarga por arriba del impulsor. Sin embargo, en un UUST, la inyección debe estar colocada en la descarga del impulsor que dirigida hacia abajo.

#### 2.4.4. Dinámica del Macro-mesclazclado

Los UUST son tradicionalmente conocidos por su bajo rendimiento, ya que tienen un tiempo de mezclado mucho más largo en comparación con la configuración estándar con desviadores. Esto ha sido señalado en detalle por Busciglio et al. [2014]; en su trabajo, obtuvieron los tiempos de mezclado y la distribución de un trazador en una arreglo UUST para distintos impulsores utilizando fluorescencia inducida por láser (PLIF, por sus siglas en inglés). Varios trabajos experimentales y numéricos han mostrado parte del proceso de mezcla en precipitadores [Rousseaux et al., 2001, Bertrand et al., 2012a,b]. En estos trabajos se presenta la dinámica del mezclado dentro del sistema, donde la zona de Vórtice Forzado se muestra como una región de mezcla confinada. Por lo que se puede utilizar como reactor cerrado. En el presente trabajo, se muestra la dinámica del escalar  $C/C_{infy}$  a diferentes tiempos adimensionales  $N_t$  (ver figura 2.15). Es importante decir que no se calculó el tiempo de mezcla, principalmente debido al costoso tiempo computacional necesario para alcanzar una distribución homogénea. Sin embargo, como se muestra en la figura 2.15 una parte interesante del macro-mezclado se realiza en los primeros tiempos del proceso. Además, para Busciglio et al. [2014] era imposible ver esas primeras etapas debido al proceso de enmascaramiento necesario en la técnica PLIF. El trazador y la inyección de volumen se ubicaron en la parte superior en la región del vórtice forzado cerca de la superficie libre y del radio crítico (ver figura 2.15 (a)). Los resultados se normalizaron utilizando el valor de la concentración cuando el fluido alcance el estado homogéneo  $C_{infy}$ .

La figura 2.15 (b - c) muestra en el tiempo  $N_t = 1$  y  $N_t = 2$  las primeras interacciones del fluido en la parte superior del tanque, donde es posible ver el comportamiento de las estructuras turbulentas sobre el impulsor mostradas con anterioridad utilizando el criterio-Q; estas estructuras transportan fluido con una alta concentración desde el área confinada dentro de la región del Vórtice Forzado a la zona superior que se encuentra en el área del Vórtice Libre. Desde  $N_t = 7$  a  $N_t = 16$  (ver figura 2.15 (d - f)), arriba del impulsor, en la región de vórtice forzado se encuentra bien definida una área de alta concentración confinada en la parte central del tanque sobre el impulsor y se mantiene así durante muchas revoluciones del impulsor, en los tiempos adimensionales  $N_t = 7$  a  $N_t = 11$ , la descarga del impulsor dirigida hacia abajo puede ser observada y está bien definida usando el escalar pasivo. Esta descarga hace que una parte importante del escalar pasivo fluya desde el área confinada hacia la pequeña recirculación inferior en el tanque; este efecto es más evidente en el momento  $N_t = 16$  y  $N_t = 21$  (ver figuras 2.15 (f - g)), en donde la corriente de descarga hace que la pequeña zona de recirculación inferior obtenga una mayor concentración respecto a la parte superior del tanque cerca de la superficie libre. Finalmente, después de 31 vueltas del impulsor, la región del Vórtice Libre compuesta por las recirculaciones superior e inferior alcanza

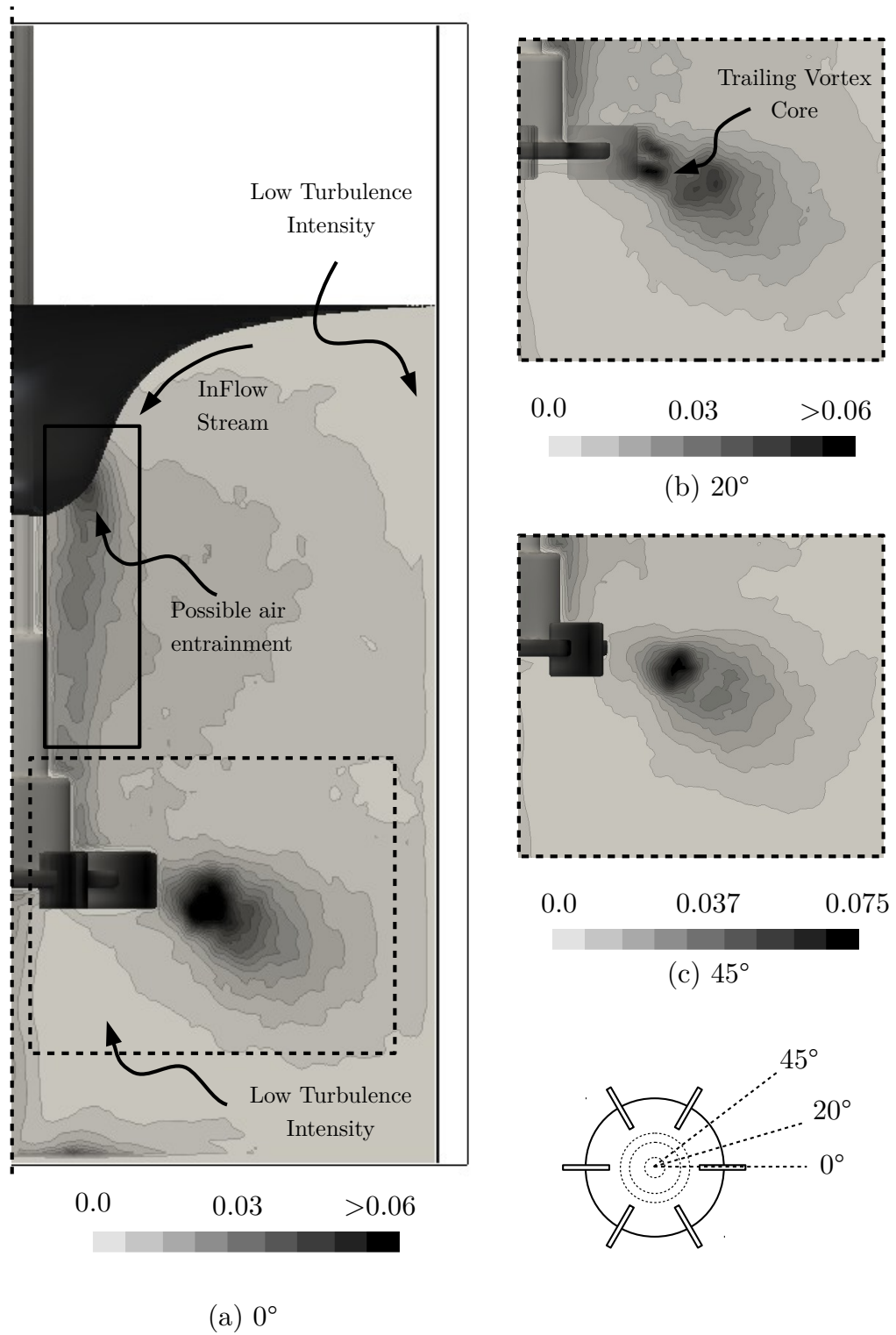


Figura 2.14: Energía Cinética Turbulenta ( $\langle k \rangle / u_{tip}^2$ ) a  $Fr=0.16$  y  $c/T = 1/3$ :  $0^\circ$  (a);  $20^\circ$  (b);  $45^\circ$  (c).

una distribución homogénea. En este momento, el área confinada en la región del Vórtice Forzado que se encuentra sobre el impulsor ha reducido significativamente su concentración. Sin embargo, después de esos tiempos, aparece una zona muerta o de segregación en la parte inferior del tanque. En  $N_t = 16$  (ver figura 2.15 (f - i)), aparece esta zona inferior segregada



que en la región de Vórtice Forzado, la cual también se visualiza en el trabajo realizado por Busciglio et al. [2014], en su trabajo el estado homogéneo se alcanza más rápidamente en esta región que en el área superior que se encuentra confinada en el tanque. Sin embargo, analizando las características del flujo mostradas con anterioridad, debe ser más fácil mezclar la región superior de vórtice forzado que la inferior. Es importante también notar que esta zona inferior se comienza a mezclar cerca de la pared inferior, donde las estructuras turbulentas creadas en el fondo del tanque ayudan a romper el movimiento de fluido sólido. En general, esta zona muerta es difícil de eliminar. Como se comentó anteriormente, esta zona inferior tiene el peor rendimiento dentro del tanque. Sin embargo, podría eliminarse colocando el impulsor en el punto más bajo posible.

## 2.5. Conclusiones

En el presente capítulo se llevaron a cabo múltiples simulaciones de grandes escalas para analizar el flujo dentro de un tanque agitado sin desviadores de flujo. El código numérico basado en un método de pseudo-compresibilidad es capaz de resolver el complejo comportamiento de flujo en este tipo de tanques. El uso de métodos de alto orden en el proceso de discretización hizo posible la solución del fenómeno físico sin el uso de una malla excesivamente fina. El método Level-Set es capaz de capturar con una excelente precisión la forma de la superficie libre con respecto a los resultados experimentales cuando el proceso se lleva a cabo en condiciones sub-críticas. Las geometrías y su interacción con el fluido se modelaron de manera adecuada utilizando el método de fronteras inmersas y método Ghost-Fluid. Esta metodología permite cambiar fácilmente la geometría del tanque y agregar componentes internos del tanque sin modificar el código numérico o la malla computacional (eje, impulsor, etc).

Los resultados muestran que si bien la descarga del flujo es dirigida en dirección radial, también muestra una importante desviación hacia la parte inferior del tanque, es decir, opuesta al flujo observado en un tanque con diseño estándar. El ángulo de este chorro es función del espacio  $c/T$ . Lo anterior se debe a que la posición del impulsor cambia el tamaño y la intensidad de los flujos secundarios. Esto último hace que los vórtices detrás del impulsor tengan un comportamiento diferente. El vórtice superior alcanza una posición radial más alejada. Sin embargo, el más bajo tiene un valor mayor de energía cinética turbulenta. Por lo tanto, para propósitos de diseño, es conveniente colocar la alimentación de los componentes a mezclarse en la zona de descarga del impulsor pero por debajo del nivel de  $c/T$  con el fin de mejorar el proceso de mezclado.

Las estructuras turbulentas muestran que sobre el impulsor, existe un importante intercambio de momentum entre la Región de Vórtice Forzado y de Vórtice Libre. Sin embargo, debajo del impulsor, no existen esas estructuras. Lo anterior ayuda a comprender la zona muerta creada en la zona inferior del tanque entre el fondo y el impulsor. Esta zona muerta se podría suprimir colocando el impulsor en el punto más bajo posible cerca del fondo del tanque.





## Capítulo 3

# Caso 2: Mezclado Laminar

### 3.1. Introducción

La mezcla de fluidos altamente viscosos en tanques agitados se lleva a cabo mediante el uso de impulsores denominados de claro estrecho. Algunos de los más comunes es de tipo ancla y de cinta helicoidal, los cuales operan a baja velocidad proporcionando una mezcla laminar, además de un bajo cortante. Sin embargo, para fluidos extremadamente viscosos, los mezcladores planetarios presentan un mejor funcionamiento con respecto los agitadores antes mencionados. Un mezclador planetario doble consta de dos paletas montadas en un carrusel las cuales giran alrededor de su propio eje mientras orbitan alrededor de un eje común (ver figura 3.1). Operan a una velocidad de rotación relativamente baja impartiendo esfuerzos cortantes al fluido mediante los dos impulsores que se mueven a través del tanque mientras empujan el fluido de trabajo contra las paredes.

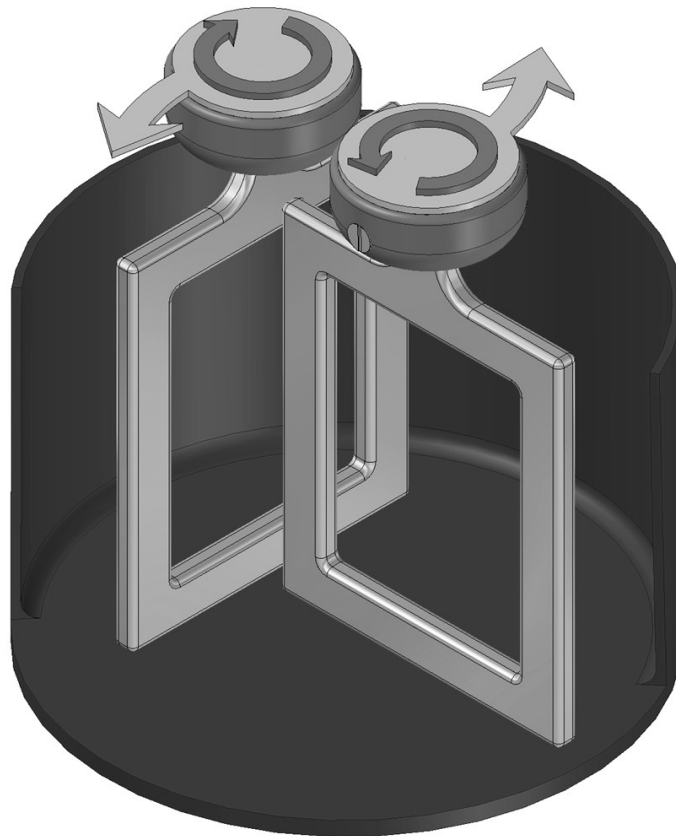


Figura 3.1: Mezclador planetario doble contrarrotativo.

Las configuraciones de los mezcladores planetarios llegan a ser muy variadas, desde el tipo de impulsor, el cual puede ser rectangular, helicoidal, tipo cuña, además de contar con uno, dos, o hasta un gran número de ellos, sin ser necesario el mismo tipo. Una configuración típica es de dos impulsores cuadrados tipo ancla con movimiento contrarrotatorio, esta configuración es usada de las predilectas en la industria.

En los procesos de mezclado laminar el calentamiento viscoso o la disipación viscosa es un factor importante que se tiene que tomar en cuenta. Como se menciona en Eckert and Shadid [1989], es el fenómeno en el que el trabajo realizado por el fluido se transforma en energía interna, y actúa como una fuente de calor. Por lo tanto, el fluido experimenta un aumento de temperatura. Por lo que, se debe tener cuidado para evitar incrementos excesivos de temperatura, ya que los materiales pueden ser sensibles a este aumento y pueden llegar a sufrir degradación térmica. Además, la viscosidad en fluidos altamente viscosos depende de la temperatura, por tanto, los patrones de flujo se pueden ver afectados durante el proceso debido a los gradientes de viscosidad generados. Para evitar este problema, el mezclado se lleva a cabo a bajas rapidezces de deformación con el fin de minimizar el efecto de acumulación de calor.

En la literatura la información relacionada con la dinámica de los fluidos en mezcladores planetarios es escasa y en todos los casos el flujo se considera isotérmico (no se consideran efectos de disipación viscosa). Por ejemplo, en Tanguy et al. [1999] realizaron un estudio numérico y experimental de un mezclador planetario, los cuales analizaron la dinámica del flujo en un mezclador que consta de dos anclas idénticas y con fluidos no newtonianos. Descubrieron que tal arreglo geométrico proporciona una buena dispersión radial pero un pobre bombeo axial, lo cual fue confirmado más tarde por Connelly and Valenti-Jordan [2008], quienes utilizaron el seguimiento de partículas para evaluar la zonas de segregación en un mezclador planetario de pines, además de analizar su eficiencia. En el trabajo de Clifford et al. [2004] se investigó de manera experimental y numérica un mezclador planetario de un solo impulsor bajo el régimen de flujo de Stokes ( $Re \rightarrow 0$ ). Demostraron que las regiones de mezcla pobre, conocidas como islas, reducen de tamaño no solo a medida que aumenta el número de Reynolds sino también cuando aumenta el número de impulsores, lo que es más cercano al diseño de los mezcladores planetarios que se encuentran en aplicaciones industriales.

En el estudio realizado por Zhou et al. [2000] se analizó la potencia consumida de un mezclador planetario con dos impulsores tipo ancla que trabajaban con fluidos viscoelásticos y no newtonianos. Se obtuvo una curva de potencia característica en función del número de Reynolds generalizado, utilizando un concepto desarrollado por Metzner y Otto. A partir de dicha curva, se obtuvo una constante de potencia ( $K_p$ ) de 450 cuando se opera con un tanque medio lleno.

En Delaplace et al. [2007] realizaron experimentos para obtener los tiempos de mezclado en un sistema planetario tipo TRIAXE con un fluido newtoniano muy viscoso (jarabe de maíz). Una parte relevante de este trabajo es que hallaron un número de Reynolds modificado que permitió obtener una curva única e independiente de las relaciones de velocidad existentes entre la rotación y la traslación de los impulsores. Estos resultados se utilizaron para investigar posteriormente el proceso de aireación de la superficie de una solución espumosa que se obtuvo mediante el sistema planetario. En André et al. [2012] se realizó un análisis adimensional del tiempo de mezclado y la potencia consumida en un sistema planetario utilizado para la producción de masa. Algunos de sus resultados obtenidos son la generación de números adimensionales tales como el de Froude, el de potencia y los tiempos de mezcla utilizados para materiales granulares. Tras estos hallazgos, en Auger et al. [2013] se generó una curva de potencia newtoniana, verificando tanto el número de Reynolds ( $Re$ ) como el número de potencia ( $N_p$ ), los cuales se definieron de la siguiente manera:

$$Re = \frac{\rho u_{ch} d_G}{\mu} \quad (3.1)$$

$$N_p = \frac{P}{\rho u_{ch}^3 d_G^2} \quad (3.2)$$

donde  $\rho$  y  $\mu$  son la densidad del fluido y la viscosidad dinámica respectivamente;  $d_R$  es el diámetro del carrusel y  $u_{ch}$  es la velocidad característica que es definida por

$$u_{ch} = N_G d_G + (N_R - N_G) d_R \quad (3.3)$$

siendo  $N_G$  y  $N_R$  la velocidad de rotación del carrusel y la velocidad de rotación del impulsor respectivamente, además  $d_R$  es el diámetro del impulsor. En su trabajo definieron la velocidad característica utilizando la velocidad máxima alcanzada por la punta del impulsor dividida por  $\pi$ , y su longitud característica es el diámetro del impulsor. En general, la mayoría de los trabajos se han centrado en obtener la velocidad y la longitud característica. Esto se debe al hecho de que los movimientos de rotación y traslación del impulsor hacen que la longitud y la velocidad de la máxima cambien con el tiempo, lo que dificulta la definición adecuada de los números de Reynolds y de potencia.

Recientemente, el consumo de potencia característico dentro de un mezclador planetario en función de relaciones geométricas fueron analizadas por Liang et al. [2016, 2017]. En donde se investigó el espacio libre entre los impulsores y su ángulo de inclinación. Por otro lado, en el trabajo de Liang et al. [2017] se investigó la forma de los impulsores, su posición así como la excentricidad entre ellos).

El objetivo del presente capítulo es analizar y caracterizar el desempeño de un mezclador planetario doble mediante el uso de técnicas experimentales y numéricas. Para lograr esto, se utilizó la velocimetría por imágenes de partículas (PIV, por sus siglas en inglés) para comprender el comportamiento del flujo dentro del dispositivo de mezclado y se utilizaron mediciones de torque con el fin de obtener la curva característica de potencia para el arreglo de mezclador utilizado. Además, una parte importante es demostrar la capacidad del método de compresibilidad artificial amortiguada entrópicamente (EDAC, por sus siglas en inglés) resolviendo numéricamente flujos a bajos números de Reynolds en los que el calentamiento tiene relevancia.

## 3.2. Cinemática del impulsor

Los mezcladores planetarios tienen un movimiento cinemático especial en comparación con los tanques agitados presentados en el capítulo anterior. El movimiento de rotación junto con el de traslación crean un efecto importante para llevar a cabo la mezcla de sustancias altamente viscosas. Este movimiento está diseñado para aplicar los mecanismos de mezcla laminar. Sin embargo, una de las características más importantes de estos dispositivos es su capacidad para redistribuir las sustancias, llevándolas desde la periferia hacia la parte interna del tanque y viceversa. En la figura 3.2 se muestra el esquema básico de un mezclador planetario. Donde el extremo del impulsor está señalado por el vector  $\mathbf{R}$  y se define como la suma del vector de traslación  $\mathbf{R}_G$  y el vector de rotación  $\mathbf{R}_R$ .

La posición de los vectores es definida usando las velocidades angulares  $\dot{\Theta}_G$  y  $\dot{\Theta}_R$  en  $[rad/s]$  como sigue:

$$\mathbf{R}_T = \|R_T\| \cos(\dot{\Theta}_G t) \hat{i} + \|R_T\| \sin(\dot{\Theta}_G t) \hat{j} \quad (3.4)$$

$$\mathbf{R}_R = \|R_R\| \cos(\dot{\Theta}_R t) \hat{i} + \|R_R\| \sin(\dot{\Theta}_R t) \hat{j} \quad (3.5)$$

Por lo tanto, la ecuación obtenida para realizar el seguimiento de la posición de uno de los extremos del impulsor es la siguiente:

$$\mathbf{R}(t) = \{ \|R_G\| \cos(\dot{\Theta}_G t) + \|R_R\| \cos(\dot{\Theta}_R t) \} \hat{i} + \{ \|R_G\| \sin(\dot{\Theta}_G t) + \|R_R\| \sin(\dot{\Theta}_R t) \} \hat{j} \quad (3.6)$$

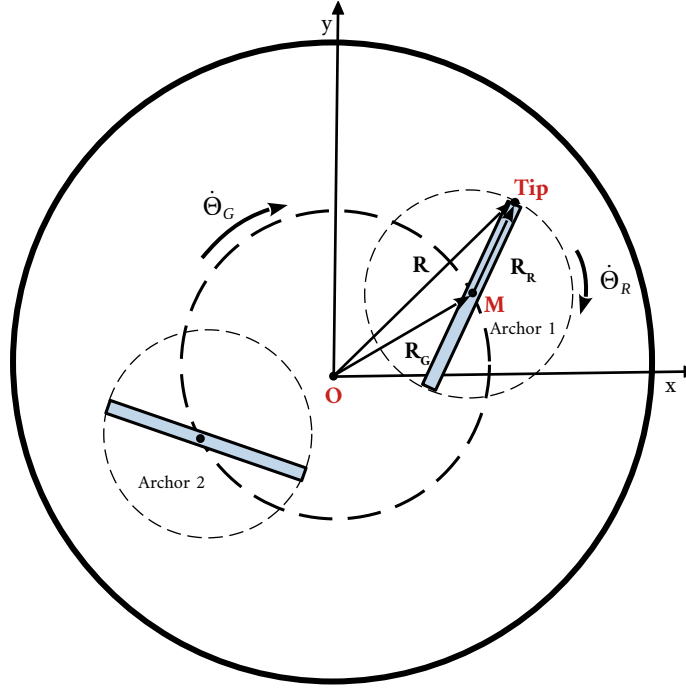


Figura 3.2: Cinemática del movimiento de los impulsores en un mezclador planetario corrotatorio.

El comportamiento de esta ecuación se muestra en la figura 3.3 (a) (b) (c), en la que la posición de ambos lados de uno de los impulsores se traza a lo largo del tiempo. En la figura 3.3 (a) es posible notar el comportamiento de cada extremo del impulsor en un color diferente, aquí se puede ver claramente como debido al movimiento planetario el lado de color rojo pasa de una posición radial mayor a una menor. Este movimiento alternativo ayuda a transportar el fluido desde la periferia hacia el interior del tanque. En el caso del lado color negro, ocurre el efecto contrario. Por lo tanto, se alternan con el tiempo logrando un patrón de barrido como se muestra en la figura 3.3 (b). Este movimiento de reordenamiento hace adecuada la mezcla de fluidos muy viscosos en este tipo de dispositivos. Además, si se añade otro impulsor como es el caso de la presente disposición, se mejorará el barrido dentro del tanque.

Finalmente, con el fin de obtener una función para la velocidad, la ecuación de posición 3.6 se deriva con respecto del tiempo:

$$\mathbf{u}_x(\mathbf{t}) = - \{ \|R_G\| \dot{\theta}_G \text{sen}(\dot{\theta}_G t) + \|R_R\| \dot{\theta}_R \text{cos}(\dot{\theta}_R t) \} \hat{i} \quad (3.7)$$

$$\mathbf{u}_y(\mathbf{t}) = \{ \|R_G\| \dot{\theta}_G \text{sen}(\dot{\theta}_G t) + \|R_R\| \dot{\theta}_R \text{cos}(\dot{\theta}_R t) \} \hat{j} \quad (3.8)$$

Lo anterior con el fin de obtener una velocidad característica  $u_{ch}$ . Para el presente estudio esta velocidad característica se basa en el trabajo de Auger et al. [2013], en donde se define como  $u_{ch} = \max(\mathbf{u}(\mathbf{t}))/\pi$ . Por lo tanto, de la ecuación anterior y sabiendo que  $R_G = d_G/2$  y  $R_R = d_R/2$ , y que las velocidades angulares son  $\dot{\theta}_R = 2\pi N_R$  y  $\dot{\theta}_G = 2\pi N_G$ . La velocidad característica de este mezclador se define como:

$$u_{ch} = d_G N_G + d_R N_R \quad (3.9)$$

En el trabajo realizado por Auger et al. [2013], la velocidad característica anterior junto con el diámetro del carrusel  $d_G$  mostraron un buen comportamiento cuando se utilizaron como velocidad y longitud características en el número de Reynolds (Re) y de potencia (Np). Dado lo anterior, estas también serán las cantidades utilizadas como las variables de referencia para el presente estudio.

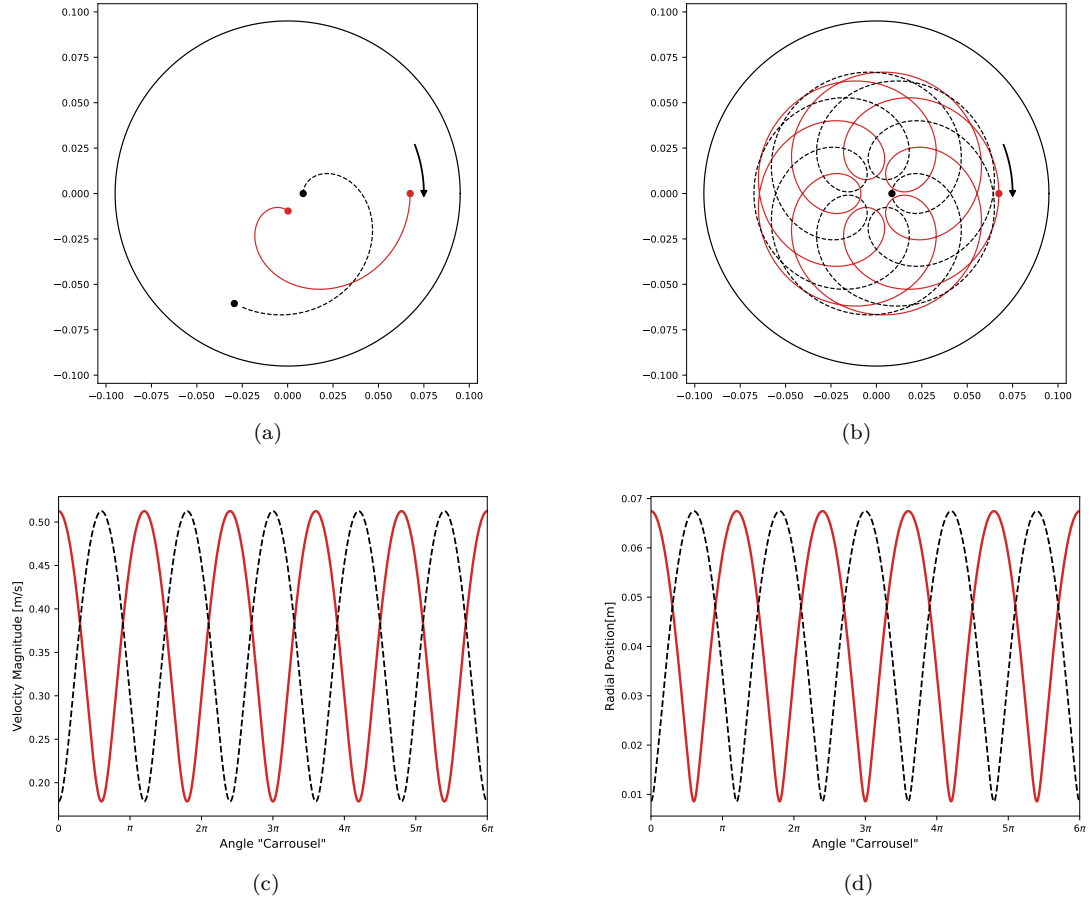


Figura 3.3: Trayectoria de los dos extremos del impulsor.

### 3.3. Metodología - Experimental

La figura 3.4 muestra la configuración experimental utilizada para el presente análisis, se trata de recipiente de fondo plano hecho de vidrio y con un diámetro  $T = 190 [mm]$ , el cual es colocado dentro de una camisa cuadrada hecha de acrílico y de tamaño de  $320 \times 320 \times 320 [mm^3]$ . Para realizar el proceso de mezclados se montaron dos impulsores rectangulares en un carrusel (caja de engranajes planetarios). Los impulsores giran sobre sus propios ejes a la misma velocidad angular. La relación de velocidades entre el movimiento del impulsor y el carrusel es  $N_G/N_R = 3/8$  y la velocidad máxima alcanzada tiene un valor de  $N_G = 42 [rpm]$ . Los impulsores tienen un tamaño de  $D = 55,8 [mm]$  y una altura igual a  $H_i = 177,8 [mm]$ . El movimiento traslacional es impulsado por un motor de 90 VCC y de  $1/4 [hp]$ . Finalmente, todos los experimentos se llevaron con el tanque lleno hasta un nivel de  $H_0 = 190 [mm]$ .

#### 3.3.1. Curva de Potencia - Mediciones de Torque

Para caracterizar el sistema planetario se realizaron mediciones del consumo de potencia usando una de las técnicas descrita en el trabajo de Ascanio et al. [2004]. Esto se logra



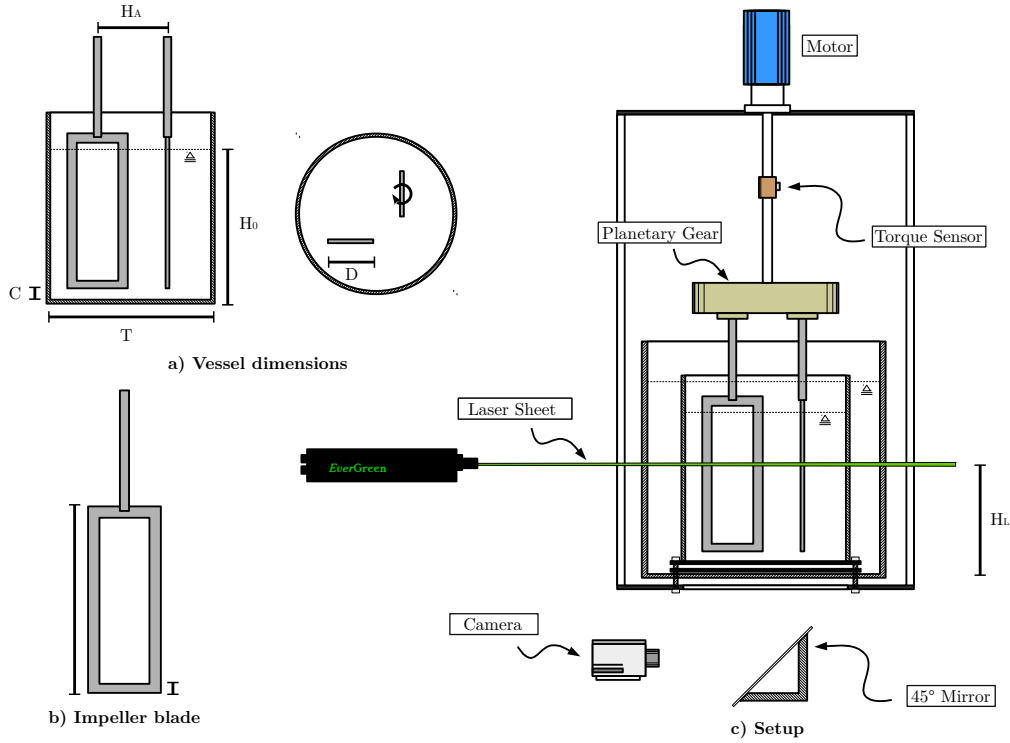


Figura 3.4: Arreglo experimental PIV/Consumo de potencia : a) Dimension del tanque; b) Tamaño de los impulsores; c) Ensamble.

colocando un sensor de torque (modelo Futek TRS300 tipo FRH01987) acoplado al eje entre el motor y al carrusel, el cual utilizado para obtener el par  $\Gamma [N \cdot m]$ , junto con un tacómetro con el fin de obtener velocidad angular del carrusel  $\dot{\Theta}_G [rad/s]$ . Por lo tanto, el consumo total será:

$$P_{tot}(t) = \dot{\Theta}_G \Gamma(t) \quad (3.10)$$

siendo  $\Gamma(t)$  la señal correspondiente al par. La velocidad del carrusel varía de  $N_G = 5$  hasta las  $N_G = 42$  [rpm]. Los valores de  $P_{tot}(t)$  incluyen las pérdidas por fricción en el sistema mecánico del impulsor. Por lo tanto, para poder obtener la potencia real consumida por el fluido medimos la potencia haciendo funcionar el equipo sin carga (sin fluido en el tanque) para obtener todas las pérdidas mecánicas ( $P_{los}(t)$ ). Por lo tanto, el consumo de energía se calculó como la resta de ambos valores  $P(t) = P_{tot}(t) - P_{los}(t)$ . Finalmente, se aplicó un promedio de tiempo para obtener  $P$ . Los experimentos se realizaron utilizando dos fluidos distintos: glicerol y jarabe de maíz.

### 3.3.2. Campos de flujo - Velocimetría por Imágenes de Partículas

La técnica de Velocimetría por Imágenes de Partículas (PIV, por sus siglas en inglés) se usó para obtener los campos de flujo bidimensionales en el tanque. Para ello, se utilizó un láser de doble pulso Nd: YAG (EverGreen de Quantel 70-200 [mJ] @ 532 [nm]) y una cámara HiSense (1344 x 1024 píxeles). En esta técnica, el fluido se siembra con partículas trazadoras y su movimiento se utiliza básicamente para calcular la velocidad del fluido. La cámara está sincronizada con una fuente de luz que obtiene dos imágenes separadas, las cuales se dividen en pequeñas áreas de interrogación. Estas áreas están correlacionadas entre sí identificando el desplazamiento de partículas. Conociendo el desplazamiento y el tiempo entre dos cuadros consecutivos, se obtiene la velocidad. Los trazadores que se utilizaron son esferas de vidrio recubiertas de plata con un diámetro medio de 10  $\mu m$ . Los experimentos se llevaron a cabo

en dos posiciones diferentes: (a) un plano vertical ubicado en el medio del tanque y (b) un plano horizontal colocado al nivel de  $H_L = 95[mm]$ . Para el caso horizontal, se tuvo que ubicar un puerto de visualización en la parte inferior del tanque y la cámara se colocó debajo del sistema de mezclado junto con un espejo a  $45^\circ$  como se muestra en la figura 3.4 (C). El láser se activó cuando los impulsores se ubicaron en las posiciones que se muestran en la figura 3.4 (a). Esta posición evita tener regiones grandes cubiertas por sombras, por lo que es posible obtener todo el campo de flujo 2D sobre el plano.

## 3.4. Metodología - Modelo numérico

### 3.4.1. Ecuaciones de Gobierno

La solución numérica se basa en el método de compresibilidad artificial entrópicamente amortiguada (EDAC, por sus siglas en inglés) desarrollado por Clausen [2013]. Se deriva de las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles (CNS) y utiliza relaciones termodinámicas para obtener una ecuación que resuelva explícitamente el campo de presión (ecuación 3.11). Por lo tanto, se evita el problema clásico de Poisson que se encuentra en los códigos comunes que resuelven las ecuaciones incompresibles de Navier Stokes (INS) y que además necesitan del uso de mallas escalonadas. Por lo tanto, su implementación a nivel de código es sencilla y fácil de paralelizar. Por otro lado, este método muestra una buena capacidad para resolver flujos temporales y altamente viscosos a números de Reynolds bajos ( $Re \rightarrow 0$ ), características importantes para el presente caso de estudio. Al igual que en el capítulo anterior, el sistema de ecuaciones se resuelve en un marco cartesiano y en forma adimensional de la siguiente manera:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{Ma^2} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 p}{\partial x_j \partial x_j} = 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ u_i u_j + p \delta_{ij} - \frac{1}{Re} 2\mu D_{ji} \right] = S_i \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ u_j T - \frac{1}{Pe} \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] = \frac{Na}{Pe} [2\mu D_{ij} D_{ij}] \quad (3.13)$$

donde (para un flujo tridimensional)  $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$ . Siendo 3.12 la ecuación de cantidad de movimiento y 3.13 la ecuación de la energía. El fluido es considerado Newtoniano, en el que  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $D_{ij}$  el tensor de rapidez de deformación. Finalmente, la dependencia de la viscosidad con la temperatura se modela usando la famosa ecuación de Andrade-Guzman (3.14), la cual se define de la siguiente manera:

$$\mu(T) = A \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (3.14)$$

Es importante decir que la ecuación 3.14 acopla la ecuación de cantidad de movimiento y la ecuación de la energía, en las que los parámetros  $Re$ ,  $Pe$ , y  $Na$  son el número de Reynolds, el número de Peclet y el número de Nahme respectivamente. Donde  $Na$  representa la relación entre el aumento de temperatura debido al calentamiento viscoso con respecto del aumento en la temperatura necesario para que la viscosidad cambie. Además, este número mide el grado de acoplamiento entre las ecuaciones de movimiento y la de energía. Por lo que, si  $Na \ll 1$ , entonces el lado derecho de la ecuación de la energía (disipación viscosa) tiende a cero, por lo que se tiene un flujo isotérmico y entonces las ecuaciones son desacopladas.

En el caso del parámetro  $Ma$ , se trata de un número de Mach artificial. Siendo en realidad un factor de compresibilidad que se define como  $Ma = cs/u_{ch}$ , donde  $c_s$  representa una pseudo-velocidad del sonido. En el método EDAC este factor es puramente numérico y para todas las simulaciones numéricas tiene un valor de 0,2. Es importante notar que debe ser más grande que el Mach físico para evitar un paso de tiempo extremadamente bajo y lo suficientemente pequeño como para garantizar mínimos errores debido a la compresibilidad.

### 3.4.2. Esquema numérico

Las ecuaciones de gobierno 3.11, 3.12, 3.13 pueden ser escritas de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial x_3} = \mathbf{S} \quad (3.15)$$

siendo  $\mathbf{U}$  un vector de solución de cinco componentes. Además de  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{G}$ ,  $\mathbf{H}$  los flujos y  $\mathbf{S}$  un vector de términos fuente. Este sistema de ecuaciones se discretizó utilizando el esquema de predicción-corrección TVD-McCormack [Gottlieb, 1976], que es de segundo orden en el tiempo y cuarto orden en el espacio. Este esquema ha demostrado su eficacia al resolver distintos tipos de flujos [Salinas-Vázquez et al., 2010] Cubos-Ramírez et al. [2016]. Los pasos del esquema corrector-predictor son los siguientes:

Predictor

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{ijk}^* &= \mathbf{U}_{ijk}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{F}_{i+1,j,k}^n - \mathbf{F}_{i,j,k}^n) + \frac{1}{6}(\mathbf{F}_{i+2,j,k}^n - \mathbf{F}_{i+1,j,k}^n) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_2} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{G}_{i,j+1,k}^n - \mathbf{G}_{i,j,k}^n) + \frac{1}{6}(\mathbf{G}_{i,j+2,k}^n - \mathbf{G}_{i,j+1,k}^n) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_3} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{H}_{i,j,k+1}^n - \mathbf{H}_{i,j,k}^n) + \frac{1}{6}(\mathbf{H}_{i,j,k+2}^n - \mathbf{H}_{i,j,k+1}^n) \right] \end{aligned} \quad (3.16)$$

Corrector

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{ijk}^{n+1} &= \mathbf{U}_{ijk}^* + \frac{\Delta t}{\Delta x_1} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{F}_{i+1,j,k}^* - \mathbf{F}_{i,j,k}^*) + \frac{1}{6}(\mathbf{F}_{i+2,j,k}^* - \mathbf{F}_{i+1,j,k}^*) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_2} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{G}_{i,j+1,k}^* - \mathbf{G}_{i,j,k}^*) + \frac{1}{6}(\mathbf{G}_{i,j+2,k}^* - \mathbf{G}_{i,j+1,k}^*) \right] \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_3} \left[ \frac{7}{6}(\mathbf{H}_{i,j,k+1}^* - \mathbf{H}_{i,j,k}^*) + \frac{1}{6}(\mathbf{H}_{i,j,k+2}^* - \mathbf{H}_{i,j,k+1}^*) \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

Finalmente, debido al carácter explícito del esquema de McCormack, y para evitar inestabilidades, el paso de tiempo convectivo  $\Delta t_{\text{CFL}}$  y el difusivo  $\Delta t_{\text{diff}}$  se calcularon de la siguiente manera:

$$\Delta t_{\text{CFL}} = \sigma \left( \frac{1}{\Delta x_1} + \frac{1}{\Delta x_2} + \frac{1}{\Delta x_3} + \frac{1}{Ma} \sqrt{\frac{1}{\Delta x_1^2} + \frac{1}{\Delta x_2^2} + \frac{1}{\Delta x_3^2}} \right)^{-1} \quad (3.18)$$

$$\Delta t_{\text{diff}} = \sigma \frac{\text{Re}}{2} \left( \frac{1}{\Delta x_1^2} + \frac{1}{\Delta x_2^2} + \frac{1}{\Delta x_3^2} \right)^{-1} \quad (3.19)$$

para el presente caso, el valor del parámetro  $\sigma$  se estableció de 0.5. El paso de tiempo empleado es el mínimo valor entre el convectivo y difusivo. Es importante decir que debido

a que el bajo Reynolds utilizados en estas simulaciones, en general el paso de tiempo crítico fue el difusivo.

$$\Delta t = \min(\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_{\text{diff}}) \quad (3.20)$$

### 3.4.3. Detalles numéricos

El dominio computacional se muestra en la figura 3.5. Está compuesto por una malla estructurada, colocada y regular. La distribución de los nodos es de  $165 \times 165 \times 65$  para un total de 4 492 125 puntos discretos. El número real de nodos ocupados por el fluido dentro del tanque es de 3,023,325. Esta densidad de nodos al igual que en los dos casos anteriores, fue basada en un análisis de independencia de malla. El tamaño del dominio computacional es igual a  $1.1T \times 1.1T \times 1.0T$  en los ejes  $x$ ,  $y$  y  $z$ , respectivamente. El espacio entre nodos es uniforme e igual a  $\Delta x = 1,27 [mm]$ ,  $\Delta y = 1,27 [mm]$  y  $\Delta z = 1,15 [mm]$ . Las simulaciones se llevaron a cabo en diferentes condiciones de operación y controladas por el número de Reynolds y el número de Nahme. El sistema parte del reposo, por lo que todos los componentes de velocidad son igual a cero, la presión y la temperatura igual a un valor de referencia. Para representar los impulsores y el tanque se ocuparon los métodos de fronteras inmersas y el método Ghost Fluid descritos en el capítulo anterior. En los cuales, la temperatura se mantuvo como una temperatura de referencia (superficies isotérmicas).

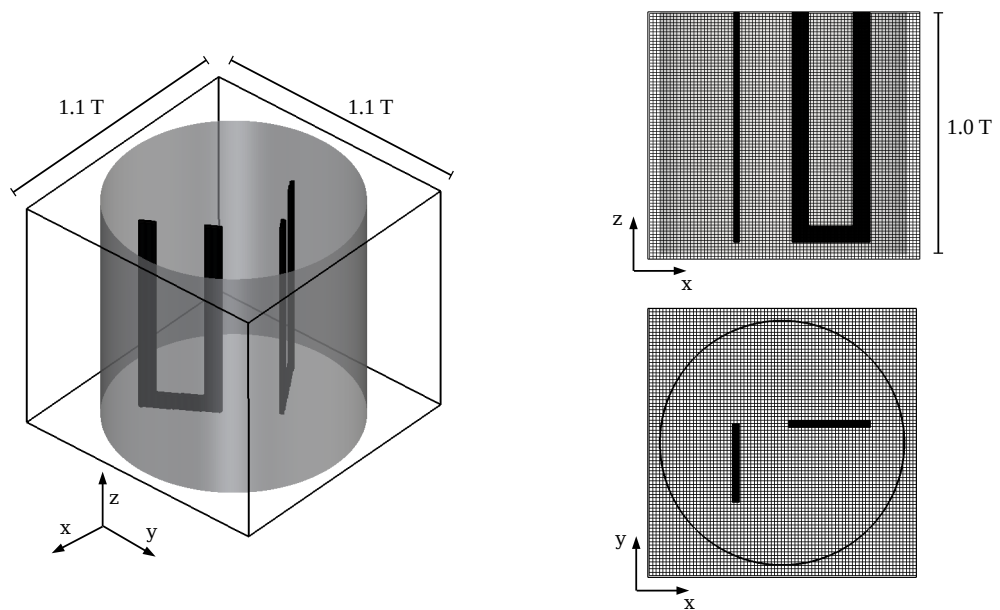


Figura 3.5: Dominio computacional.

## 3.5. Resultados - Isotérmicos

### 3.5.1. Curva Característica

La figura 3.6 muestra la curva de potencia característica trazando los valores de Reynolds y de potencia obtenidos usando los datos experimentales en un gráfico del tipo  $\log_{10} - \log_{10}$ . Se utilizaron dos fluidos con diferentes viscosidades para abarcar una amplia región de la zona laminar. Para estos fluidos utilizados, los efectos de disipación viscosa son muy bajos, por lo que el caso experimental es considerado isotérmico. Como es posible observar, el número

$N_p$  se reduce a medida que aumenta el número de Reynolds. Los datos experimentales se utilizaron para obtener la constante de proporcionalidad llamada constante de potencia  $K_p$ , que se define como  $K_p = \text{Re}N_p$ . Para el sistema de mezclado utilizado tiene un valor aproximado de  $K_p \approx 803$ . En esta gráfica, la línea continua representa la curva generada por la función  $N_p = K_p/\text{Re}$ . Como puede observarse, los datos experimentales se comportan efectivamente como en la teoría de mezcla para la región del régimen laminar. Usando este valor, se puede obtener una expresión dimensional para predecir la potencia consumida por esta disposición:

$$P = 803\mu d_R(d_G N_G + d_R N_R)^2 \quad (3.21)$$

Además, esta curva se utilizó para validar el modelo numérico desarrollado. La potencia consumida se calculó utilizando un balance de energía macroscópico junto con la definición de disipación viscosa. Por lo que la potencia en el modelo numérico se obtuvo de la siguiente manera:

$$P = \iiint_V 2\mu D_{ij} D_{ij} dV \quad (3.22)$$

Como se observa, existe una buena concordancia entre las predicciones experimentales y numéricas. El modelo funciona de mejor manera a medida que se incrementa el número de Reynolds. La constante de potencia numérica media obtenida tiene un valor de  $K_{p,n} \approx 757$ , teniendo una desviación media de 5,68% con respecto al experimental. Lo anterior es de gran relevancia, como se muestra en la ecuación 3.22, la potencia consumida es una representación a nivel global de la energía disipada a nivel local. Por lo tanto, el código numérico que utiliza el método EDAC está resolviendo adecuadamente la hidrodinámica local impuesta al fluido por los movimientos complejos de los impulsores dentro del tanque.

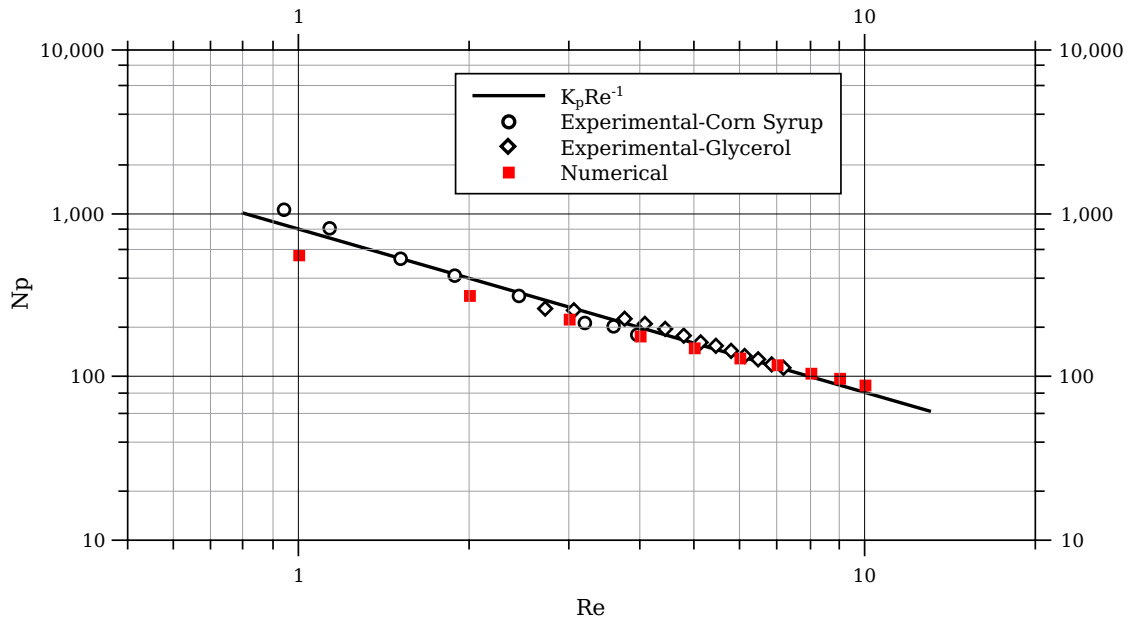


Figura 3.6: Curva de Potencia. Comparación numérica y experimental.

### 3.5.2. Campos de Flujo

La figura 3.7 y figura 3.8 muestran los campos de flujo en el plano horizontal a una distancia ( $z/T = 1/2$ ) obtenidos mediante la técnica PIV y el modelo umérico respectivamente.

Lo anterior para tres números de Reynolds distintos ( $Re = 1.6$ ,  $Re = 4.0$  y  $Re = 6.8$ ). Estas imágenes muestran la magnitud de la velocidad normalizada utilizando la velocidad máxima del impulsor, el componente  $z$  de la vorticidad, así como los patrones de flujo creados para la posición mostrada de los impulsores. Para el caso experimental, hay áreas cubiertas por una máscara roja debido a la presencia de sombras. Esas sombras hacen imposible obtener los campos de flujo en todas las regiones. Sin embargo, aun teniendo estas sombras, es posible capturar la mayor parte del campo de velocidades. Los resultados muestran el flujo creado por los impulsores. Es importante notar que el movimiento de traslación crea una gran recirculación en todo el tanque. Esto hace girar el fluido en el sentido de las agujas del reloj, de la misma manera que el movimiento del carrusel. Esta recirculación está ligeramente inclinada debido a la interacción del fluido con ambos impulsores, los cuales generan además una o dos recirculaciones más pequeñas en la parte interior del tanque, la cantidad de estas recirculaciones menores dependerá del número de Reynolds. Por ejemplo, en el caso experimental y el número de Reynolds más bajo ( $Re = 1.6$ ), solo hay una recirculación menor la cual es ubicada alrededor del impulsor que se encuentra en la parte izquierda inferior. Esto se debe a que en ese momento este impulsor tiene una velocidad más alta que el ubicado de la esquina superior derecha. Por lo tanto, debido a los efectos viscosos significativos en este número de Reynolds, no es posible formar la recirculación para el impulsor que se encuentra en la parte superior debido a su baja velocidad. Lo anterior también es observable en los resultados numéricos. Sin embargo, en ellos todavía es posible notar la existencia de una pequeña recirculación superior. Sin embargo, es evidente que tiene un menor tamaño. Sin embargo, cuando se aumenta el número de Reynolds ( $Re = 6,8$ ) y se reducen los efectos de la viscosidad, estas dos recirculaciones internas se forman prácticamente del mismo tamaño.

Los contornos de la componente  $z$  de la vorticidad muestran el mismo comportamiento para todo el rango de números de Reynolds. En dichos contornos se presentan valores de vorticidad negativa en la parte central de cada impulsor, estas son las únicas áreas donde se encuentran valores negativos en el plano. Además de ser la zona con mayores valores de magnitud de vorticidad. Por otro lado, la mayor parte de la región externa del tanque tiene valores de vorticidad positivos. Esto se debe a la interacción entre la recirculación del flujo principal alrededor del tanque con la pared. Los valores positivos más altos son encontrados en ambos extremos de los impulsores. La presencia de estas zonas con diferentes direcciones (signos) en el componente axial de la vorticidad y la interacción entre ellas beneficia el proceso de mezcla laminar debido a la creación de una región de mezcla extensional, de ahí la importancia de poder identificarla.

Si se comparan los resultados numéricos con los experimentales, al igual que en el consumo de potencia, el método EDAC tiene una mejor aproximación a medida que aumenta el número de Reynolds. Existen algunas diferencias en el  $Re$  más bajo, la más evidente es la existencia de recirculación en la parte superior de la imagen. Sin embargo, esta recirculación también tiende a suprimirse a medida que se reducen los efectos inerciales.

### 3.5.3. Índice de Mezclado

La dispersión de gotas y sólidos es una tarea habitual para los mezcladores de sustancias altamente viscosas. En estos equipos, se utilizan altos esfuerzos para romper las fuerzas interfaciales que mantienen unidas las partículas. Se ha demostrado que los flujos de carácter extensional son más efectivos que los de tipo cortante simple para realizar esta tarea. Por lo tanto, una forma para poder cuantificar el rendimiento de un sistema de mezcla viscosa utilizado en un proceso de dispersión es necesario conocer la distribución del flujo de extensional, así como la magnitud de las esfuerzos aplicadas dentro del mezclador.

El índice de mezclado  $\lambda_{MZ}$  fue desarrollado por Cheng and Manas-Zloczower [1990] para dar un panorama general de la distribución volumétrica de los esfuerzos cortantes y el flujo extensional en una mezcla muy viscosa, por lo tanto este índice da el rendimiento de la mezcla dispersiva. Por tanto, sus resultados se pueden utilizar como parámetro para mejorar el diseño de equipos y establecer nuevas condiciones para llevar a cabo el proceso.

Matemáticamente,  $\lambda_{MZ}$  se define como sigue:

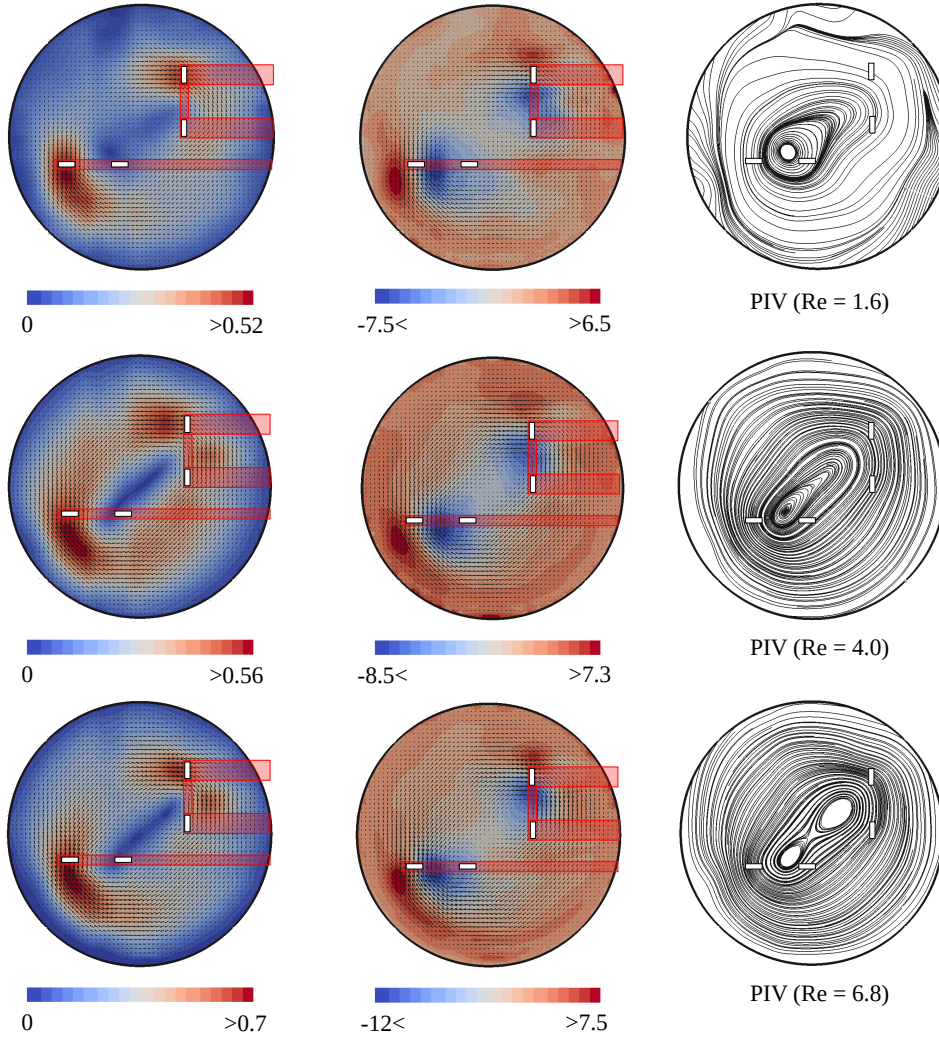


Figura 3.7: Campos de flujo experimentales para glicerina a tres diferentes números de Reynolds ( $Re = 1.6$ ,  $Re = 4.0$  and  $Re = 6.8$ ). Magnitud de la velocidad  $u_{Mag}/u_{tip}$  (izquierda), componente  $z$  del vector vorticidad (medio) and líneas de trayectoria (derecha).

$$\lambda_{MZ} = \frac{\|\mathbf{D}\|}{\|\mathbf{D}\| + \|\mathbf{\Omega}\|} \quad (3.23)$$

donde

- si  $\lambda_{MZ} \rightarrow 0$  Rotación Pura
- si  $\lambda_{MZ} \rightarrow 0,5$  Cortante simple
- si  $\lambda_{MZ} \rightarrow 1$  Flujo extensional

en el que  $\mathbf{D}$  es el tensor de rapidez de deformación y  $\mathbf{\Omega}$  el tensor de rapidez de rotación.

La figura 3.9 muestra los contornos de la componente  $z$  de la vorticidad (lado izquierdo), el índice de mezclado  $\lambda_{MZ}$  (medio), así como los gráficos correspondientes a los porcentaje del índice de mezclado con respecto al volumen total de la mezcla dentro del tanque (lado derecho). Lo anterior se hace a tres posiciones diferentes de los impulsores y con un número de Reynolds constante ( $Re = 9$ ).

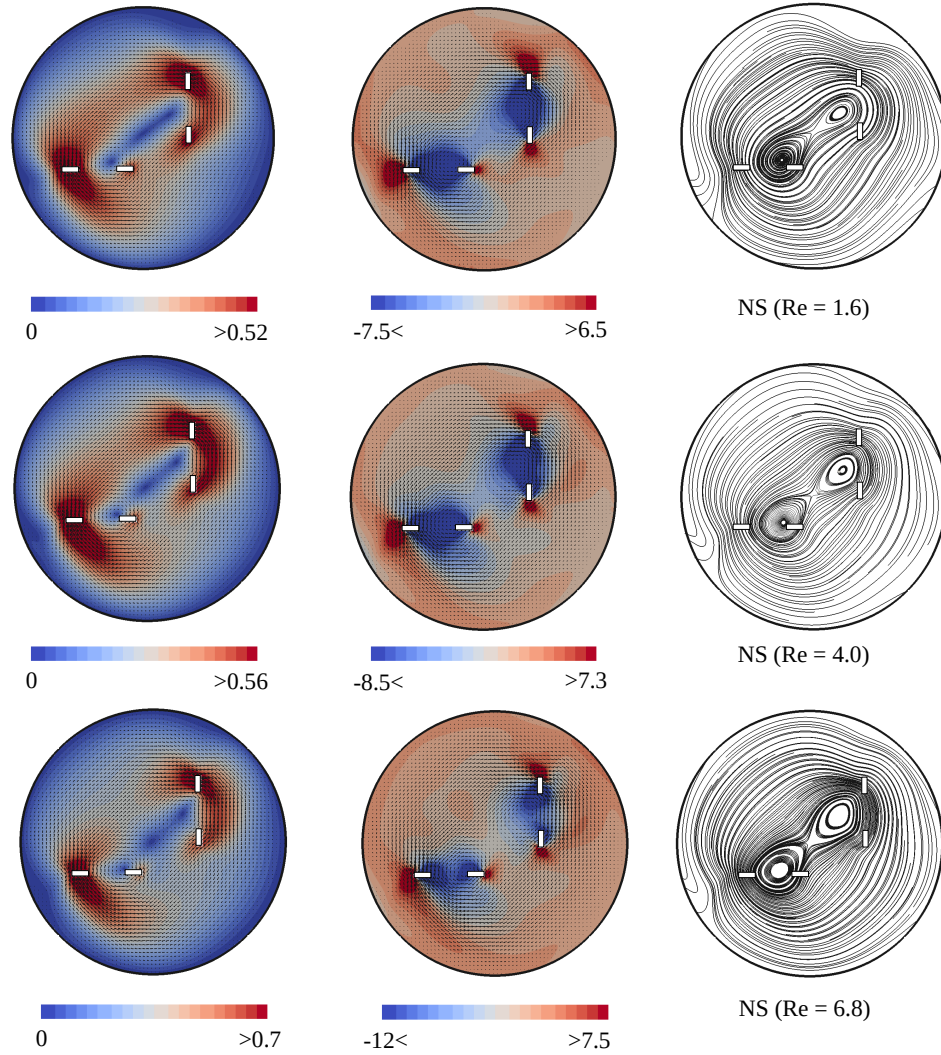


Figura 3.8: Numerical flow fields for glycerol at three different Reynolds numbers ( $Re = 1.6$ ,  $Re = 4.0$  and  $Re = 6.8$ ). Velocity magnitude  $u_{Mag}/u_{tip}$  (left),  $z$ -vorticity (middle) and path-lines (right).

En las figuras 3.9 (a) (d) (g), se puede observar como en los extremos de los impulsores siempre hay una vorticidad positiva. Por lo que el flujo girará en sentido antihorario. Por otro lado, en la parte interna del impulsor, la vorticidad del fluido es negativa, por lo que habrá fluido girando en sentido contrario. Esto hace que coexistan dos movimientos de contrarrotación en cada uno de los extremos del impulsor, lo que provocará la existencia de flujo extensional. Además, otro aspecto observable es que a medida que el impulsor se acerca a la pared, se puede ver una disminución significativa de la vorticidad debido a los efectos viscosos. En general, se generan los mismos efectos en todas las posiciones de los impulsores dentro del tanque.

Los contornos numéricos del índice de mezclado se representan en las figuras 3.9 (b) (e) (h), donde se muestran los diferentes tipos de flujo dentro del mezclador planetario debido al movimiento de los impulsores. En estas figuras, en la parte externa del tanque, cerca de la pared, el valor de  $\lambda_{MZ}$  *to* 0,5, por lo que en esta región, el flujo tiende a cortante simple. Esto último se debe al movimiento masivo del fluido impartido por los impulsores. Por lo tanto, en esta región, existe un flujo similar al creado por dos cilindros concéntricos. El único lugar cerca de la pared donde no tiene características de flujo corte simple es la zona donde el impulsor se acerca a la pared. Esto último se debe a la interacción del movimiento de rotación impartido por el impulsor al fluido y los efectos viscosos impuestos por la pared. Así, en este pequeño espacio, el fluido se acelera provocando la aparición de un flujo. Lo



anterior hará que este sitio sea ideal para lograr la dispersión, debido a la existencia de flujo de flujo extensional y los altos esfuerzos creados en esta zona. En general, el flujo predominante cerca del impulsor es el de rotación pura. Sin embargo, en la zona central de cada impulsor, se genera una especie de filamento de flujo extensinal. Esto está relacionado con el movimiento de rotación opuesto creado en los extremos de los impulsores y discutido anteriormente. Aunque el flujo de rotación puro no sirve para reducir el tamaño de los aglomerados, es necesario para poder crear el flujo de extensional dentro del mezclador y así poder mejorar la dispersión en el proceso.

Para cuantificar la cantidad del volumen que ocupan los flujos en rotación pura, esfuerzo cortante simple y extensional, se obtiene el porcentaje del volumen ocupado por el índice de mezclado dividido en cuatro rangos diferentes, que van desde  $[0, 0,25)$ ,  $[0,25, 0,5)$ ,  $[0,5, 0,75)$  y  $[0,75, 1]$  (ver figura 3.9 (c) (e) (i)). En general, se puede ver que el flujo en rotación pura ocupa la menor cantidad de volumen dentro del tanque y el flujo predominante es el cortante simple  $[0,25-0,75]$ . Sin embargo, este tiene a ser flujo extensional. Como se puede observar, en general los porcentajes se encuentran en el mismo rango independientemente de las posición de los impulsores en el tanque. Finalmente, el porcentaje de flujo extensional para el número de Reynolds con un valor de  $Re = 9$  es aproximadamente el 40 %.

### 3.5.4. Calentamiento viscoso - Efecto de adelgazamiento viscoso térmico

Como se mencionó anteriormente, el calentamiento viscoso es la transformación de energía mecánica en energía interna, provocando, que la temperatura del fluido aumente dentro del tanque, lo que hará que la viscosidad se reduzca significativamente. Por lo tanto, el calentamiento viscoso puede verse como un efecto de adelgazamiento térmico. Lo anterior puede causar ciertos problemas indeseables, ya que el Reynolds y el número de potencia se modificarían debido a esta reducción en viscosidad. La figura 3.10 muestra la viscosidad promediada a lo largo de todo el volumen ( $\mu_{\text{Bulk}}/\mu_{\text{Ref}}$ ) contra el tiempo adimensional (  $bf N_R$ ) para diferentes Números Nahme y a un número de Reynolds constante. En la figura es posible observar como la viscosidad comienza a reducirse significativamente en las vueltas del impulsor. La reducción es mayor a medida que aumenta el número de Nahme. Esto es físicamente correcto ya que cuanto mayor sea el número de Nahme, el calentamiento viscoso debe ser más relevante. También es posible observar que después de algunas vueltas del carrusel la viscosidad global comienza a permanecer constante. Esto se debe a que las paredes del tanque tienen una condición de temperatura constante, por lo que en ese momento la transferencia de calor a través de las paredes se iguala a la generación de energía por calentamiento viscoso, haciendo que la temperatura dentro del tanque se mantenga constante. Por lo que la viscosidad deja de reducirse.

## 3.6. Conclusiones

En el presente capítulo se estudiaron los campos de flujo, el consumo de potencia y la mezcla dispersiva en un Mezclador Planetario Doble. Los resultados muestran la capacidad del método EDAC para resolver adecuadamente los flujos con números de Reynolds bajos. El método numérico predice adecuadamente el consumo de energía y la constante de ajuste  $K_p$ . El índice de mezcla ayuda a comprender el comportamiento del flujo en mezcladores altamente viscosos.

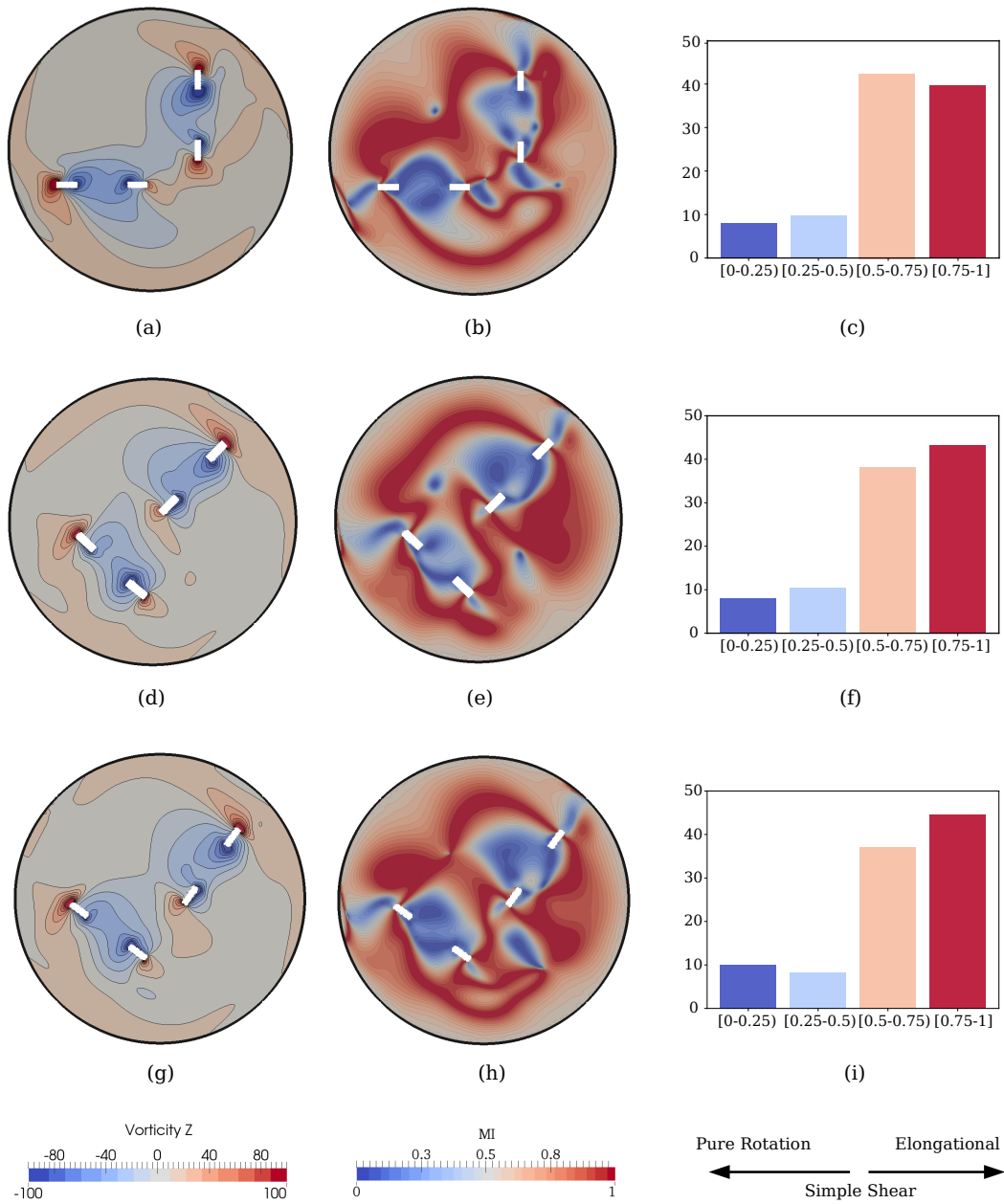


Figura 3.9: Comportamiento del flujo a diferentes posiciones del impulsor ( $Re = 9$ ):  
 Componente de axial de la vorticidad (izquierda); Índice de mezclado  $\lambda_{MZ}$  (medio);  
 Porcentaje del índice de mezclado  $\lambda_{MZ}$ .

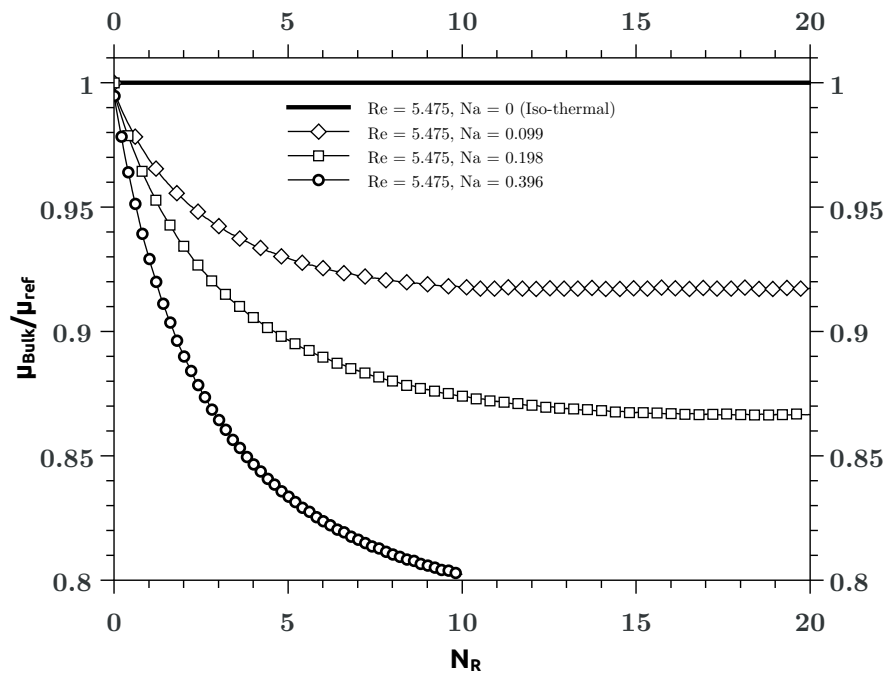


Figura 3.10: Reducción de la viscosidad global a diferentes números de Nname.

## Capítulo 4

# Conclusiones generales

En el presente trabajo se desarrollaron dos herramientas numéricas capaces de modelar el flujo dentro de tanques agitados mecánicamente trabajando en régimen laminar y turbulento. Se ocuparon técnicas experimentales para la visualización de los campos de flujo en un mezclador planetario doble. Además, se obtuvo su curva característica utilizando mediciones de consumo de potencia.

Con respecto a las herramientas numéricas desarrolladas fue posible demostrar que los métodos de compresibilidad artificial en conjunto con los esquemas compactos de alto orden tienen la capacidad de modelar de buena manera flujos incompresibles a altos números de Reynolds dentro de tanques agitados mecánicamente en los que se deforma la superficie libre el líquido. Durante la realización de este trabajo, estos esquemas también se ocuparon para la solución de chorros trabajando a condiciones supercríticas dando buenos resultados (ver apéndices).

Para la solución del flujo laminar dentro de los mezcladores planetarios se encontró que el método EDAC es más estable y se aproxima de mejor manera en comparación con el método de compresibilidad artificial utilizado para modelar el flujo turbulento. Además, se observó que no es necesario ocupar un esquema computacional de alto orden para la solución de este tipo de flujos. Por lo que sólo fue necesario un esquema predictor-corrector McCormack, con lo cual se reduce de forma importante el costo computacional. Cabe destacar que tanto el método de compresibilidad artificial como el EDAC se implementan de una manera mucho más sencilla que los métodos de solución tradicionales para flujos incompresibles.

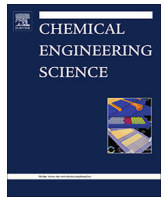
El método Level-Set, Ghost-Fluid y los esquemas WENO5 hicieron posible la representación de superficies fijas y móviles inmersas en el dominio computacional de una manera sencilla, sin que se tenga que hacer una modificación importante a la malla. Por cual, en los códigos numéricos generados en el presente trabajo, se pueden colocar un mayor número de impulsores, distintas geometrías de contenedor, así como una gran cantidad de aditamentos internos sin tener que modificar la malla computacional. Además, se pudo observar que la representación de la superficie libre utilizando estos métodos es adecuada.

Es importante destacar que la información obtenida en el presente trabajo es de relevancia para entender el comportamiento de dos distintos problemas industriales dentro de los equipos de mezclado que no habían sido abordados en la literatura. Para realizar el presente trabajo gran parte del tiempo se utilizó en el desarrollo de toda la infraestructura numérica para poder representar distintos fenómenos físicos de forma computacional. Sin embargo, como trabajo futuro se tienen que hacer un mayor número de estudios a nivel local para comprender cómo la disipación de energía afecta a algunos parámetros físicos del fluido, haciendo que el comportamiento del mezclado dentro del tanque se vea modificado.



Apéndice A

Artículos tesis



# Mixing dynamics in an uncovered unbaffled stirred tank using Large-Eddy Simulations and a passive scalar transport equation



J. Ramírez-Cruz<sup>a</sup>, M. Salinas-Vázquez<sup>a,\*</sup>, G. Ascanio<sup>b</sup>, W. Vicente-Rodríguez<sup>a</sup>, C. Lagarza-Córtés<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ingeniería S/N, C.U., 04510 Ciudad de México, Mexico

<sup>b</sup> Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, S/N, C.U., 04510 Ciudad de México, Mexico

## HIGHLIGHTS

- The pseudo-compressibility method shows good performance in solving the flow field.
- The Level-Set method allows for easily changing the tank geometry.
- The Level-Set method is quite accurate capturing the free surface.
- Coherent turbulent structures show an important zone of fluid exchange.
- Passive Scalar transport shows a segregated zone under the impeller.

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 5 November 2019

Received in revised form 19 March 2020

Accepted 23 March 2020

Available online 4 April 2020

### Keywords:

Mixing  
Unbaffled stirred tank  
Large-Eddy Simulation  
Level-set method  
Free-surface flow  
Passive scalar

## ABSTRACT

In this study, several large eddy simulations were performed to solve the free-surface flow in an uncovered unbaffled stirred tank driven by a Rushton turbine using different Froude numbers and impeller clearance settings. The numerical code developed is based on the pseudo-compressibility method. To solve the flow equations and track the free surface, compact finite difference schemes and the level set method were used. For the treatment of the boundary conditions at the interface and for the tank internals representation, the ghost fluid method was used. The liquid surface was studied and showed excellent agreement when compared with previous experimental studies. The trailing vortices behind the impeller blades were visualized. Additionally, other important turbulent structures were captured moving over the impeller and around the critical radius. Finally, a passive scalar equation was added to show part of the mixing dynamics, in which an important segregated zone appeared under the impeller.

© 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

The study of Uncovered Unbaffled Stirred Tanks (UUST) has increased because of their good performance in some processes, such as the dissolution of powders, wastewater treatment, nuclear fuel processing, among others. Before, these mixers were rarely employed in the industry because of several drawbacks. The most important limitation of an UUST is the strong swirling motion in the fluid, in which the tangential velocity is the main flow. As a result, there are low-velocity gradients between the impeller and the fluid flow, as well as an insignificant axial flow, resulting in a poor mixing performance compared with standard baffled tanks.

In UUST's, this swirling motion creates a depression in the surface of the liquid. As is pointed out by Ciofalo et al. (1996), the shape and depth of the free surface mainly depend on the impeller

rotational speed. However, other parameters such as the impeller type and diameter, clearance, and fluid viscosity are also important. Busciglio et al. (2014) classify the flow as types of operating conditions depending on the position of the central part of the surface relative to the impeller. They called sub-critical regime to the operating conditions when the surface is over the impeller; the critical regime when it reaches the impeller; and the super-critical condition when the free surface goes down the impeller level. It is important to know the flow regime because there are different drawbacks depending on the surface position and also, it has different applications. For instance, the sub-critical condition is well-known due to its ability to float or sink particles, making these tanks suited to suspend or dissolve powders (Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007). Also, they are good removers of gas bubbles, reducing foam formation. However, it is important to say that in this regime, a surface instability phenomenon appears under certain conditions. That phenomenon causes an oscillation on the free surface, and it may have an adverse mechan-

\* Corresponding author.

E-mail address: [msalinasv@iingen.unam.mx](mailto:msalinasv@iingen.unam.mx) (M. Salinas-Vázquez).

ical effect on the agitation train and in the vessel supports (Busciglio et al., 2016).

Like the sub-critical regime, the critical regime has limitations. For instance, the critical regime can cause air entrainment, which is when the surface starts to drag gas from the outside of the liquid. Thus, if the impeller speed is incremented, it will be working under super-critical regime and then, an important amount of gas bubbles will be injected into the tank. This is undesirable in some processes such as polymerization, in which bubbles can adhere to droplets and produce poor polymer beads (Bhattacharya et al., 2007). Nevertheless, this bubble injection phenomenon can be used as a vortex-ingesting (self-induced) system by replacing the sparger and thus increasing mass transfer in bio-hydrogen production problems (Montante et al., 2013) or as a surface aerator in wastewater treatment processes (Ramakrishna Rao et al., 2009). Bubble injection can be an important problem, and in many applications it is avoided. The latter restricts the impeller speed and limits the power input applied to the liquid.

Despite their drawbacks, UUST's tanks may be desirable for some processes, and, in several cases, they perform better than baffled tanks. However, there are less studies about the hydrodynamics of UUST's than standard baffled systems. These studies can be divided into three categories. The first refers to studies that concern either the study or the modeling of the free surface as well as the comparison between the mean tangential velocity profile with the classical Rankine vortex reported by Nagata (1975). The second includes studies that examine how to take advantage of the hydrodynamics of UUST's in some processes, such as aeration, crystallization, among others (Bertrand et al., 2012a), and the third category refers to studies that examine how the mixing process is carried out and how to improve it (Assirelli et al., 2008).

The numerical modeling of the flow in UUST's is complex, as is pointed out by Ciofalo et al. (1996) this is mainly due to the strong turbulence anisotropy, streamline curvature and flow rotation along the whole tank. This is not like for baffled tanks, in which the turbulence is anisotropic only in the impeller stream and largely isotropic in the bulk fluid flow. Furthermore, in the UUST's, the Reynolds-Averaged Navier–Stokes (RANS) approach using the common turbulence models is unable to solve the secondary flows and the impeller discharge area. In the literature, most of the numerical studies use the RANS approach (Ciofalo et al., 1996; Haque et al., 2006; Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007; Mahmud et al., 2009). For instance, Haque et al. (2006) and Mahmud et al. (2009) use the Reynolds Stress Equation (RST) and the Shear Stress Transport (SST) models showing their ability to solve the bulk fluid motion. However, the discharge zone is significantly under-predicted and the free surface was not well captured (between the two models, the RST showed better agreement with respect to experimental results). Recently, the Unsteady Reynolds-Averaged Navier–Stokes (URANS) method has been used to solve this kind of problems. This is because URANS is able to solve part of the unsteady behavior which are periodically caused by the impeller motion, thus providing better results in comparison with the common RANS approach (Zamiri and Chung, 2017). However, it has been shown that the URANS approach fails in predicting large-scale turbulent flow structures (Hart, 2016).

Large-Eddy Simulation (LES) has shown an excellent ability to solve the flow inside stirred tanks (Derksen and Van den Akker, 1999). LES can capture macro instabilities and the flow anisotropy. It also provides valuable local information to optimize the mixing process and can solve the trailing vortex structures, which are the intermediate flow scales near the impeller blades, in which an important amount of the mixing process is carried out (Yoon et al., 2009). These characteristics make LES an effective approach to solve the flow inside UUST's.

Despite its advantages, there are a few studies that use LES. The first attempt to solve the flow in an UUST using LES was made by

Lamarque et al. (2010). They analyzed a flow precipitator that was mixed using a rod placed in the bottom of the tank. Mean and fluctuating velocities were compared with experimental Laser-Doppler velocimetry measurements showed a good agreement. Also, coherent turbulent structures which can have a strong effect on mixing were visualized using the Q-criterion.

Bertrand et al. (2012a) analyzed the same configuration as in Lamarque et al. (2010). They highlighted the different anisotropic regions inside the tank using the Lumley's Triangle and how they affected the precipitation process. In the last two studies mentioned, although offering important local values, the analyzed system does not use the most common impellers used in the industry. Moreover, the computational mesh used is too coarse to well capture the mean and the fluctuating velocities in the central part of the tank near the impeller. Recently, Deshpande et al. (2017) conducted several LES's in a tank stirred by a Rushton turbine using the *OpenFoam* software and compared the power consumption with the work done by Scargiali et al. (2014). However, the local parameters, such as turbulent kinetic energy or local mean viscous dissipation were not shown. LES can effectively solve the flow in UUST's. Nevertheless, it is computationally expensive for two reasons: 1) The size of the mesh needed to obtain a good quality solution and 2) the time spent to develop the flow and deform the free surface. LES studies commonly need around twenty impeller revolutions to develop the flow for standard baffled tanks. However, in the case of UUST's, more than 100 impeller revolutions may be required, making the simulation time an important issue to consider.

Another important part of the solution in an UUST is the free surface modeling, which is due to the change in the flow patterns because of the surface deformation, which depends on the whole flow driven by the impeller. Hence, as is pointed out by Ciofalo et al. (1996), a correct prediction of the surface shape is not trivial and can be used as a validation of the overall flow field simulation. They conducted the first attempt to solve an UUST in which a body-fit method was used to model the deformation of the liquid surface. In this method, an iterative process was needed, in which a zero stress condition in the normal direction was applied in order to obtain a steady state solution. In the next works: (Cartland Glover and Fitzpatrick, 2007; Li et al., 2015; Yang and Zhou, 2015; Yang et al., 2017; Zamiri and Chung, 2017) Volume of Fluid (VOF) has been the preferred method for solving the flow inside UUST's. Also, a hybrid VOF-Eulerian-Eulerian model has been used in Haque et al. (2006) and Mahmud et al. (2009). The main issue using this methods is that the liquid surface is represented for a wide band of values between zero and one. Then, the validation test can be a bit misleading. On the other hand, Lamarque et al. (2010), Bertrand et al. (2012a,b) used a Lagrangian method called Discontinuous Front-Tracking (DFT), which can be very accurate if a sufficiently fine mesh is used. However, this may make the solution computationally expensive.

The aim of the present work is to serve as a guideline concerning a novel methodology to numerically solve the complex free-surface flow inside UUST's along with a passive scalar equation. The latter in order to provide accurate information about the flow dynamics created by a Rushton turbine at different Froude number and close clearance values ( $c/T$ ). To these ends, several simulations using Large-Eddy Simulations approach were performed. These simulations showed local parameters such as the turbulent structures around the impeller blades, the macro-mixing process, and the flow patterns created by this radial impeller.

## 2. Numerical modeling

This section briefly discusses the governing equations used to solve the physics of the fluid flow and their discretization schemes.



Also, the method used to model the movement of the impeller is presented. The Level-Set Method (LS) to capture the free surface evolution and the Ghost Fluid Method (GFM) used to deal with the immersed boundaries are also presented.

### 2.1. Flow equations

The continuity equation and the momentum equations are solved using a variant of the pseudo-compressibility method (see (Cubos-Ramírez et al., 2016) for details). In this method, the governing equations are solved in their weak conservative form, where the pressure and the density are related using an isothermal equation of state rather than solving a Poisson equation for the pressure. The equations are figured out in a Cartesian reference frame, being the continuity equation and the momentum equation written as follows:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \mu S_{ij}] = s_i \quad (2)$$

where, for a tri-dimensional problem  $i, j \in \{1, 2, 3\}$ . Here,  $s_i$  are the source terms, in which gravity is the only non-zero term on the axial axis ( $s_3 = -\rho g$ ). The fluid is Newtonian, with  $S_{ij}$  being the strain rate tensor (Eq. (3)) and  $\mu$  the sum of the dynamic molecular viscosity and the eddy viscosity ( $\mu = \mu_m + \rho \nu_t$ ).

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

As is mentioned above, the incompressibility is approximated by relating the pressure and density in the flow equations using the equation of state for an artificial incompressible fluid  $p = C_s^2 \rho$ , where  $C_s$  is a pseudo speed of sound in the medium. The value of  $C_s$  must be large enough in order to approximate the solution to an incompressible flow. However, its value must not be too large to make the time step excessively small. This method has been successfully used to solve single phase flows and multiphase flows. Values of  $0.1 < Ma < 0.3$  are commonly used, where  $Ma$  is a pseudo-Mach number defined as:  $Ma = ND/C_s$ , with  $N$  being the impeller's rotational speed in revolutions per second and  $D$  the tank diameter.

### 2.2. Passive scalar transport

In this work, a passive scalar equation is used to show the initial part of the mixing dynamics. The equation is not used to calculate mixing time; rather, it is only solved to predict dead zones and show the flow patterns inside the tank. To the authors' knowledge, this study is the first attempt to solve numerically a passive scalar equation in a USST stirred by a Rushton Turbine using the LES approach. Then, in order to solve the scalar transport, the following equation was added to the solution

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho C u_j - \rho D_c \frac{\partial C}{\partial x_j}] = 0 \quad (4)$$

with  $C$  being the passive scalar and  $D_c$  the diffusion coefficient. As in the momentum equations, the diffusion coefficient is the sum of the molecular and the eddy diffusion ( $D_c = D_m + D_e$ ). Nevertheless, for this work, the molecular diffusion was not taken into account ( $D_m = 0$ ). Only the flow advection and the turbulent diffusion were used to track the dispersion of this tracer. As is indicated by Hartmann et al. (2006), the LES approach is more effective at solving the passive scalar transport than RANS simulations, in which the

under-predicted turbulent levels at the discharge stream affect the predictions of the mixing dynamics. Therefore, the LES approach is the best option for modeling the macromixing dynamics in UUST's. Finally, as is mentioned in Busciglio et al. (2014), the main focus of the most studies is micromixing issues; thus, there is a little information available about the macromixing process in vortexing unbaffled vessels or USST's.

### 2.3. Sub-grid scale model

As is well-known, in a Large Eddy Simulation the equations are filtered, as the large scales of the fluid flow are solved and the small scales modeled. In the present work, the governing equations were filtered implicitly by the mesh. The Sub-Grid Tensor uses the classical Eddy-Viscosity assumption ( $\nu_t$ ), and in this study, it was modeled using the local second-order velocity structure function based on the work done by Métais and Lesieur (1992). It is given by

$$\nu_t(x_i, \Delta, t) = C_{sf} \Delta \sqrt{F(x_i, \Delta, t)} \quad (5)$$

with  $C_{sf}$  being a coefficient related to Kolmogorov's constant ( $C_K$ ) by  $C_{sf} = 0.105 C_K^{-2/3}$ , where  $C_{sf}$  takes the value of 0.104.  $F(x_i, \Delta, t)$  is a second-order function derived from the filtered instantaneous velocity. It depends on the local statistical average of the square velocity differences between  $x_i$  and the six surrounding cells/nodes. Finally, this function was improved using the Selective Structure-Function Model (SSF) (Lesieur and Métais, 1996), in which the eddy viscosity is switched off if the flow is not three-dimensional enough. The three-dimensionalization condition or criterion is the following: The angle between the vorticity at a given grid point and the average vorticity at the six closest neighboring points is measured. If this angle exceeds  $20^\circ$ , then the eddy viscosity is turned on. Otherwise, only the molecular viscosity acts.

### 2.4. Numerical scheme

The governing equations were discretized using high-order methods in order to obtain an accurate solution and avoid a prohibitively fine mesh, thus saving computational time. The equations were spatially discretized using a 6th-order Compact Finite Difference Scheme (CS-FD6) (Lele, 1992). Temporal integration was performed by a 3rd-order Total Variation Diminishing Runge-Kutta (TVD-RK3) method (Chi-Wang and Osher, 1988). Higher-Order Compact Schemes are dispersive and then, the solution suffer from numerical instabilities. In order to overcome these instabilities, a 10th-order implicit filter was applied to the conservative variables after the final stage in the numerical integration step (Visbal and Gaitonde, 2002).

### 2.5. Free surface modeling

In the present work, the Level-Set Method was used to solve the free surface dynamics. It was introduced by Osher and Shethian (1988) and has been successfully used solving many multiphase flow problems (Sussman et al., 1994; Chang et al., 1996; Nourgaliev et al., 2004; Cubos-Ramírez et al., 2016). The advantage of this method over the Volume of Fluid is its ability to predict the exact position of the interface and not a wide region in which the surface could be. This method uses a signed distance function called Level-Set ( $\phi(x_i, t)$ ), in which the zero value (Eq. (6)) represents the interface or the free surface.

$$\Gamma(t) = \{x_i \mid \phi(x_i, t) = 0\} \quad (6)$$

and the sign represents each phase. In the present work they are defined as:

$$\begin{aligned} \text{liquid} & \text{ if } \phi(x_i, t) \geq 0 \\ \text{gas} & \text{ if } \phi(x_i, t) < 0 \end{aligned} \quad (7)$$

The surface is advected by the flow velocity  $u_i$ . Therefore, the evolution of the Level-Set function is given by the solution of the following transport equation:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0 \quad (8)$$

The spatial discretization of Eq. (8) was made using a 5th-order Weighted Essentially Non-Oscillatory (WENO5) scheme (Jiang and Peng, 2000) and the temporal integration was conducted using the TVD-RK3 method commented before. After several of this advections steps, the Level-Set method essentially loses its definition of a signed distance function. This could lead in numerical diffusion which can cause the solution to degrade. For this reason, it is important to reinitialize  $\phi$  in order to be maintained as a distance function. This step is carried out by replacing the current function to another one that has the same zero level (surface position). Nevertheless, it satisfies  $|\nabla \phi| = 1$ , which is a signed distance function property. The reinitialization is achieved by solving the next pseudo-transient equation:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau_r} + \mathbb{S}(\phi)(|\nabla \phi| - 1) = 0 \quad (9)$$

where  $\mathbb{S}(\phi)$  is a sign function defined as:

$$\mathbb{S}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + |\nabla \phi|^2 \Delta h^2}} \quad (10)$$

and  $\Delta h = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ . The spatial discretization of Eq. (9) and Eq. (10) is the same WENO5 scheme used in the advection step. The pseudo-time  $\tau_r$  must not be confused with the physical time, it is only used to evolve the Eq. (9). Then, it has no physical meaning (Osher and Fedkiw, 2003). The temporal integration used in this equation was solved using the TVD-RK3 scheme, and the pseudo-time step was defined as follows

$$\Delta \tau_r = CFL \cdot \Delta h \quad (11)$$

where  $CFL$  is the Courant-Friedrich-Levy number, taking a value of 0.5 in this work. This reinitialization procedure is applied only in every tenth time steps in order to save computational time.

## 2.6. Ghost fluid method

The Free-surface approach was adopted in this study (Osher and Fedkiw, 2003, p. 217). Thus, the inertia of the gas was not taken into account. This simplifies the problem by making only two conditions needed at the surface boundary: a *zero normal stress* condition and a reference pressure over the surface. They are the same boundary conditions imposed in the work done by Ciofalo et al. (1996). Those conditions were applied using the Ghost Fluid Method. This method was developed by Fedwik et al. (1999) in order to deal directly with discontinuities in materials, such as fluid–fluid, fluid–solid or solid–solid interfaces. It has been applied successfully by solving free surface flows with high-density ratios (1000:1) in Nourgaliev et al. (2004) and Cubos-Ramírez et al. (2016). In the present work, a variant of this method has been used. Here, at each time step, the flow field and the Level-Set equations are advanced in time. Hence, the Level-Set method is used as a mobile boundary, where a group of ghost nodes are defined in the opposite region of the liquid fluid (see Fig. 1). In this ghost-band, Dirichlet boundary conditions are applied by setting a reference value; in this case, a constant pressure ( $p_{ref}$ ) was set. The Neumann *zero stress condition* was applied by solving the pseudo-transient Eq. (12). This is called the extrapolation procedure, in

which  $\Pi$  is the variable to extrapolate, it is applied for the velocity flow field in order to obtain the *zero stress condition* at the surface. Another variable which needs to be extrapolated is the passive scalar. Then, the extrapolation procedure is applied to  $C$  to obtain  $\partial C / \partial \mathbf{N} = 0$  at the interface.

The extrapolation is done solving the next pseudo-transient equation defined as:

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \tau_g} + [\mathbb{Q}(\phi) \cdot \mathbf{N}] \cdot \nabla \Pi = 0 \quad (12)$$

where  $\mathbf{N}$  is the interface normal vector, which can be easily obtained using the LS function as follows:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (13)$$

The spatial discretization of the Eq. (12) can be found in Nourgaliev et al. (2004). The temporal integration is also performed by a TVD-RK3. Here, it is important to notice that, in this step another pseudo-time is used and it must not be confused with the pseudo-time found in the reinitialization process.

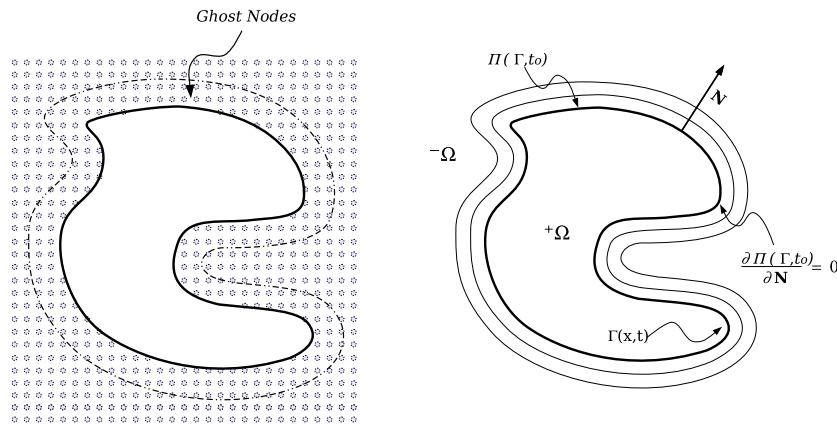
## 2.7. Boundaries treatment

As mentioned above, the numerical solution is based on a Cartesian mesh. Therefore, a method to represent the static/moving boundaries inside the computational domain is needed. In the present work, two methods were applied with the aim of modeling the interaction between the solid boundaries and the fluid flow. The impeller was modeled using the Immersed Boundary Method (IBM), and for the shaft and the tank the Ghost Fluid Method (GFM) was applied.

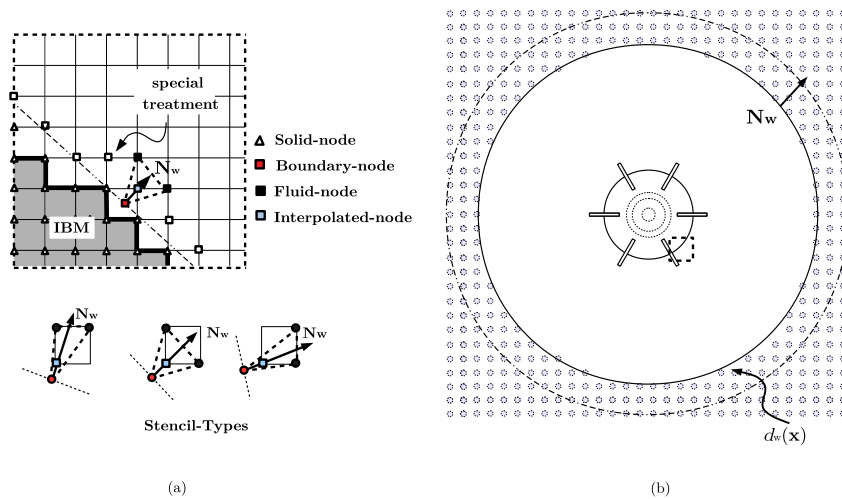
There are many IBM formulations, the approach used here is based on the work done by Salinas-Vázquez et al. (2010). The basic idea is to add a source term to some of the momentum variables, allowing the rest of them to act freely. The above is solely applied in the region occupied by the impeller. Therefore, the first step in the algorithm consists of identifying the computational nodes where the solid is placed. The source term is applied in each Runge–Kutta integration sub-step. After that, in the next time step, the impeller is repositioned and new nodes are tagged and step one begins again. Fig. 2(a) shows in gray colour the region covered by the impeller and the computational nodes used by de IBM to mimic the impeller movement. In this approach, the real boundary rarely fits with the computational mesh. Therefore, the geometry is represented as a stepping stair shape and could lead to a wrong solution of the flow near the impeller (see Fig. 2(b)). To overcome that problem and improve the solution, special treatment was applied to the nodes surrounding the impeller. This treatment is based on the work done by Yang and Balaras (2006), which has been successfully tested in the solution of fluid–wall interaction in different types of flows using LES. In this approach, any property  $\Pi$  in the first nodes around the impeller which are called interpolated-nodes can be computed as  $\Pi = b_1 + b_2 x_1 + b_3 x_2$ , where the coefficients  $b_1, b_2$ , and  $b_3$  are found by solving a [3X3] matrix (Eq. 14) using a stencil created with the  $\Pi$  values and the spatial position of two fluid nodes and one point located at the real solid–fluid boundary (Boundary-node). This procedure is applied to the velocity field in order to impose the non-slip boundary condition.

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & x_{2,1} \\ 1 & x_{1,2} & x_{2,2} \\ 1 & x_{1,3} & x_{2,3} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Pi_1 \\ \Pi_2 \\ \Pi_3 \end{bmatrix} \quad (14)$$

For the turbulent variables, the computation of  $v_t$  using Eq. 5 in the nodes around the impeller is not straightforward. As it is mentioned in Yang and Balaras (2006), this is due to the evaluation of



**Fig. 1.** Ghost Fluid Method: (a) Dirichlet boundary conditions are set in the narrowband created between the free surface (thick line) and negative distance iso-lines (dot line), (b) Neumann boundary conditions are applied extrapolating the  $\Pi$  value in the normal direction ( $\mathbf{N}$ ).



**Fig. 2.** Immersed Boundary Method and Ghost Fluid Method applied to model the wall boundaries. (a) Solid inside the computational domain in gray color and its stepping stair shape created by the IBM and the interpolation stencil: The blue point is interpolated using two fluid points (black points) and the nearest point over the solid boundary (red point); (b) GFM method applied using a signed distance function to solve the tank boundaries. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

the turbulent viscosity in the vicinity of the immersed boundary involves points from the interior of the solid impeller. To overcome that problem, the interpolation procedure showed before is applied by switching off  $\nu_t$  at the impeller surface. This avoids modifications to the turbulence model and the appearance of unphysical effects. The latter has been studied in detail by comparing the turbulent behavior near the wall using this interpolation procedure with direct numerical simulations (DNS) (Yang and Balaras, 2006). The above interpolation can be improved using a higher-order scheme or by including wall functions. However, they can have a high computational cost and because computing time is a major problem in solving UUST's, the scheme described above was preferred.

Finally, in order to model the tank and the shaft immersed in the computational domain, the GFM was also used. Here, a signed distance function (another LS function) was created. Because the tank wall does not change in time, this function does not have to be advected as in the free-surface case. Hence, at the beginning of the simulation, the ghost nodes surrounded the walls are known. Thus, as in the method mentioned above, boundary conditions can be applied in the ghost side, in which the non-slip condition is set to the velocity field ( $u_i = 0$ ) and a zero normal gradient is applied for the pressure  $\partial p / \partial \mathbf{N}_w = 0$ . Moreover, two Neumann

boundary conditions are solved. For the passive scalar,  $\partial C / \partial \mathbf{N}_w = 0$  is set and for the level-set  $\partial \phi / \partial \mathbf{N}_w = 0$ , where  $\mathbf{N}_w$  is the normal vector to the wall; this must not be confused with the normal to the free surface. Those boundary conditions are solved with the pseudo-transient Eq. (12) using the distance function created to represent the walls.

### 3. Validation tests

In the present section, two validation tests are shown. The first one is based on the work experimentally done by Vella et al. (2003) and experimentally/numerically done by Alcamo et al. (2005), which is a Covered Unbaffled Tank stirred by a Rushton turbine. In this test, the mean tangential velocity and the trailing vortex path were compared. The second test is an Uncovered Unbaffled Tank analyzed by Busciglio et al. (2013). In such an experimental work, the surface deformation for several impeller types under different rotational speeds is shown. Hence, we compared the shape and the depth of the surface.

In order to obtain the mean and turbulent quantities, and, because of the periodic behavior of the flow which is related to the blade passage frequency, a phase-resolved statistic was made. The velocity and pressure data were stored when the impeller

blades crossed the same spatial position. Therefore, six flow values in all the computational nodes were collected for each impeller revolution. Then, the mean phase-resolved values were computed as follow:

$$\langle \vartheta(x_i) \rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{n=1}^{N_s} \vartheta(x_i, t_n) \quad (15)$$

where,  $\vartheta(x_i, t_n)$  is the variable to average and  $N_s$  the number of frames stored. Here, the values corresponding to 20 impeller revolutions were used. Twenty impeller revolutions were also used in the work done by [Alcamo et al. \(2005\)](#). Finally, because the reference frame was Cartesian, all the velocities were transformed into cylindrical coordinates.

### 3.1. Covered unbaffled tank

The mixing system in [Vella et al. \(2003\)](#) and [Alcamo et al. \(2005\)](#) is an unbaffled cylindrical tank stirred by a Rushton Turbine (six blades  $D = T/2$  and  $c/T = 1/3$ ) with a flat bottom (see [Fig. 3](#)). The tank is covered with a lid and completely filled. Therefore, the free surface does not play any role in this case. However, the flow patterns such as the primary and the secondary flows are quite similar, as in the uncovered case. The advantage of this system is that the trailing vortex trajectories are well documented. Then, the covered tank test was made in order to know the capacity of the code to solve the single phase problem and the flow around the impeller blades. The computational domain was a structured regular mesh with size equal to  $2.2D \times 2.2D \times D$  and the number of nodes used were  $160 \times 160 \times 160$  along  $x$ ,  $y$  and  $z$  axis, respectively, for a total of 4,096,000 discrete points and 2,658,000 of grid points inside the computational domain.

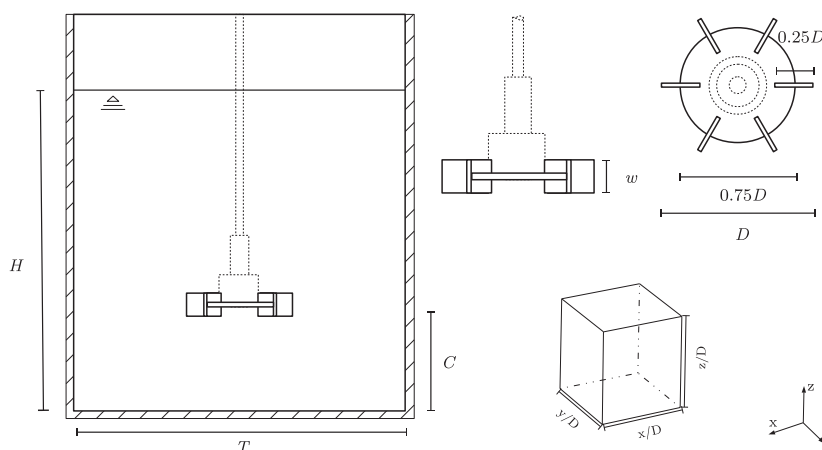
[Fig. 4\(a\)](#) and [\(b\)](#) show the mean tangential velocity ( $\langle u_\theta \rangle$ ) normalized with the tip impeller velocity ( $u_{tip}$ ) along the radial axis at two different heights ( $z/D = 0.422$  and  $z/D = 0.316$ ). In the forced vortex region of the central part of the tank, the velocity increment is linear and the values are the same as in the experimental case. Nevertheless, the maximum value, which occurs in the called critical radius ( $r_c$ ) is under-predicted, having an error around of 10 percent with respect to the experimental case. When  $r_c > 0.37$ , in the free vortex region, the velocity is under-predicted, however, it has the same behavior as in the experimental study. Far away from the central part of the tank, near the tank wall, the values are adjusted again. In general, the velocity demonstrates good agreement in the central and external part of the tank, having the same behavior and magnitude order along the entire radial axis.

In stirred mixing tanks, the flow around the impeller controls important parameters, with the most important being the power consumption. Moreover, another important flow characteristic behind the impeller blades is the formation of trailing vortices. This is because they are associated with high velocity gradients and hence, high levels of turbulent activity, playing an important role in the mixing process. For these reasons, the paths of these trailing vortices are compared with their experimental and numerical counterpart, as in [Alcamo et al. \(2005\)](#). [Fig. 4\(c\)](#) shows the trajectory of the upper vortex. This path-line is located using the approach proposed by [Yianneskis et al. \(1987\)](#), where the points correspond to the zero velocity  $\langle u_z \rangle / u_{tip}$  found in the axial plane, near to the lower part of the blade. The trajectories obtained in this work are in good agreement with numerical and experimental findings reported elsewhere ([Alcamo et al., 2005](#)).

### 3.2. Uncovered unbaffled stirred tank

The system used to validate the free surface behavior in this study is the same as that used by [Busciglio et al. \(2013\)](#). It is an uncovered cylindrical tank with flat bottom that has a diameter size of  $T/D = 3$ . The impeller is a six blade Rushton turbine and the impeller clearance  $c/T = 1/3$ . The computational domain is  $3.2D \times 3.2D \times 4D$  and the total computational nodes is 8 million ( $200 \times 200 \times 200$ ) and approximately 5,285,000 of fluid points inside the domain. The fluid started at rest and the flat liquid surface was placed at  $H = T$ , as is shown in [Fig. 3](#). Simulations were performed at three different operating conditions, namely: 300, 450 and 540 [rpm]. They correspond in dimensionless form to  $Fr = 0.16$ ,  $Fr = 0.36$  and  $Fr = 0.52$ , respectively, where  $Fr$  is the Froude number defined as  $Fr = N^2 D/g$  and  $Re$  is the Reynolds number with values of  $Re = 20,055$ ,  $Re = 30,008$  and  $Re = 35,990$  respectively, which is defined as  $Re = \rho N D^2 / \mu$ . The latter condition experimentally coincides with the critical regime and the other two simulations were carried out under sub-critical conditions.

[Fig. 5](#) shows iso-surfaces of the zero contour of the level-set function, where they represent the instantaneous (upper) and mean (lower) liquid surface. Moreover, the contours of the magnitude of velocity are presented. In these figures, it is evident how the depth of the surface increases as the Froude number increases (ratio between inertial and gravitational forces). Moreover, it is worth noting the realistic surface shape and the turbulent behavior. In these operating conditions, and in order to get a quantitative comparison, these results were compared with the experimental data produced by [Busciglio et al. \(2013\)](#). Hence, [Fig. 6](#) shows the



**Fig. 3.** Mixing system: It is a flat bottom tank (left) stirred by a six-blade Rushton turbine (right). For the covered test, the lid is placed at the height  $H$ . In the Uncovered test, the liquid level at rest is placed at level  $H$ .

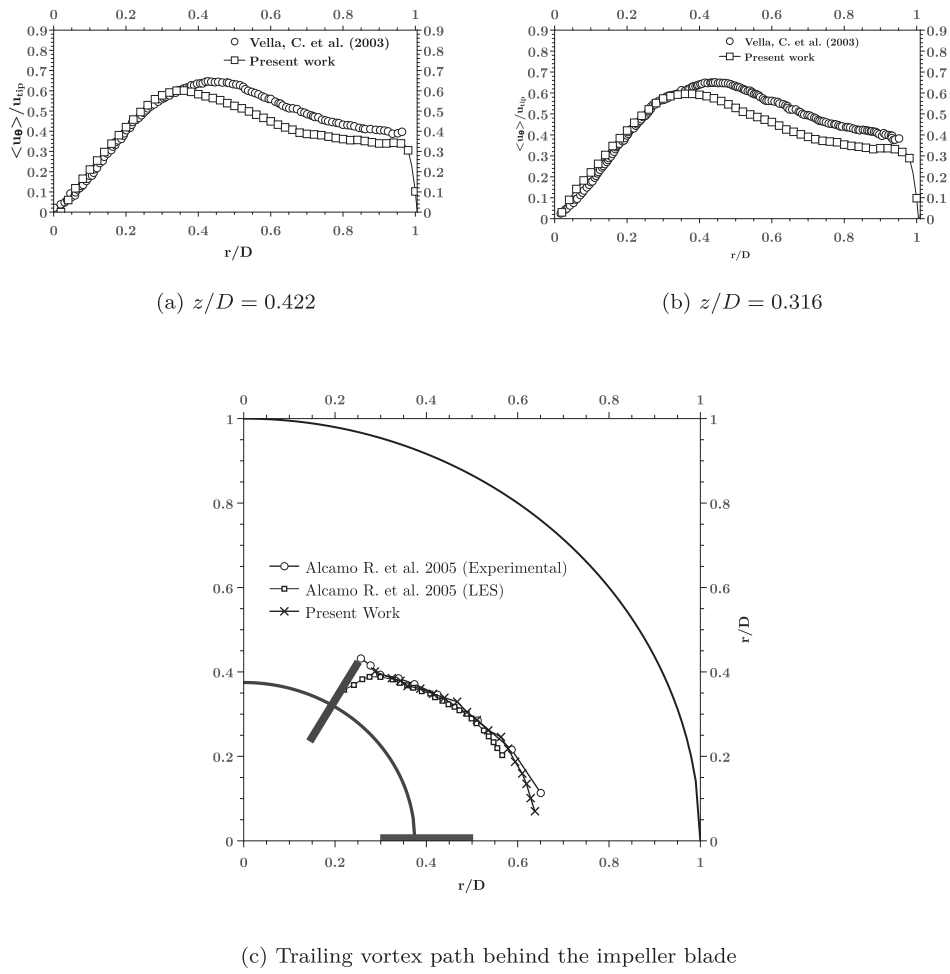


Fig. 4. Validation test: (a) Tangential velocity  $\langle u_\theta \rangle / u_{tip}$  at  $z/D = 0.422$  and (b)  $z/D = 0.316$ ; (c) Trailing vortex path.

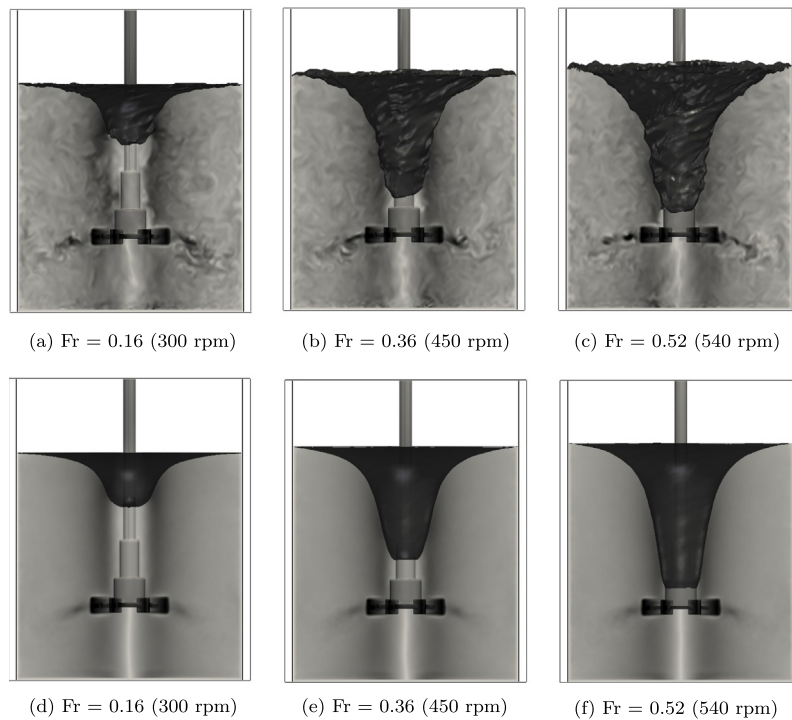


Fig. 5. Vortex shape: Instantaneous liquid height (upper) and Mean liquid height (lower).

results of the non-dimensional heights at the three different Froude numbers ( $Fr = 0.16, Fr = 0.36$  and  $Fr = 0.52$ ), where  $z_b/D$  is the surface depth (minimum height in the central part of the tank) and  $z_w/D$  the maximum liquid level on the tank wall. The depth is well captured by the code, as the cases under sub-critical conditions are in excellent agreement with the experiment. However, in the case with highest Froude number ( $Fr = 0.52$ ) those distances are under-predicted (see Fig. 6). This may be because there is an important interaction between the liquid surface and the impeller geometry under this condition. Thus, the solution complexity is increased in this area, resulting in a large error (maximum 17%) in the central part. Nevertheless, despite those differences, the surface depth in general is well captured.

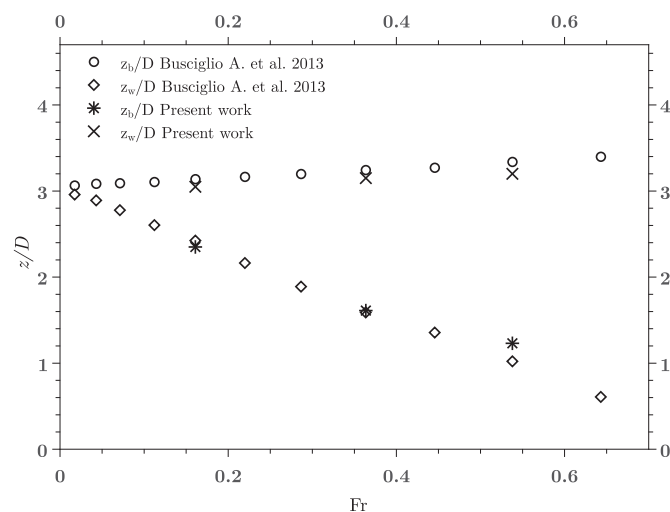
Given the above, and in order to better illustrate the numerical solution, the surface shape is compared with the model proposed in Busciglio et al. (2013). In their model, the liquid level is obtained using the following equation:

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \psi_w - \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} Fr \left( 2 - \frac{\xi^2}{\xi_p^2} - \frac{\xi^2}{\xi_c^2} \right) & \text{if } \xi \leq \xi_c \\ \psi_w - \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} Fr \left( \frac{\xi^2}{\xi_c^2} - \frac{\xi^2}{\xi_w^2} \right) & \text{if } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (16)$$

where  $\psi = z/D$ ,  $\xi = r/(D/2)$ , and  $\psi_w$  is the liquid level on the wall, which is defined as

$$\psi_w = \psi_0 + \frac{(\alpha\pi\xi_c)^2}{2} \frac{\xi_c^2}{\xi_w^2} Fr \left( \frac{1}{2} - \ln \frac{\xi_c}{\xi_w} \right) \quad (17)$$

with  $\psi_0$  being the fluid height at rest. Here,  $\alpha$  and  $\xi_c$  are fitted parameters, having a value of  $\alpha = 0.898$  and  $\xi_c = 0.780$  for a Rushton turbine with the present geometrical relationships, these values are also taken from Busciglio et al. (2013). In Fig. 7(a), (b), and (c), a surface comparison using the correlation given by Busciglio et al. (2013) is plotted. These curves show the ability of the code to capture the interface and accurately solve the liquid height in most part of the radial axis. In all cases there is a small deviation only in the first part of the radius. This deviation is more visible for the case of  $Fr = 0.52$ . However, Busciglio et al. (2013)'s model exhibits a lack of precision in the central part of the tank. Thus, the numerical model presented here shows a more natural shape near the impeller shaft in comparison with their model.



**Fig. 6.** Predicted heights: Liquid levels as a function of the impeller Froude number ( $c/T = 1/3$ ) at  $Fr = 0.16, Fr = 0.36$  and  $Fr = 0.52$ , where  $z_b/D$  is surface depth (minimum height in the central part of the tank) and  $z_w/D$  the maximum liquid level on the tank wall.

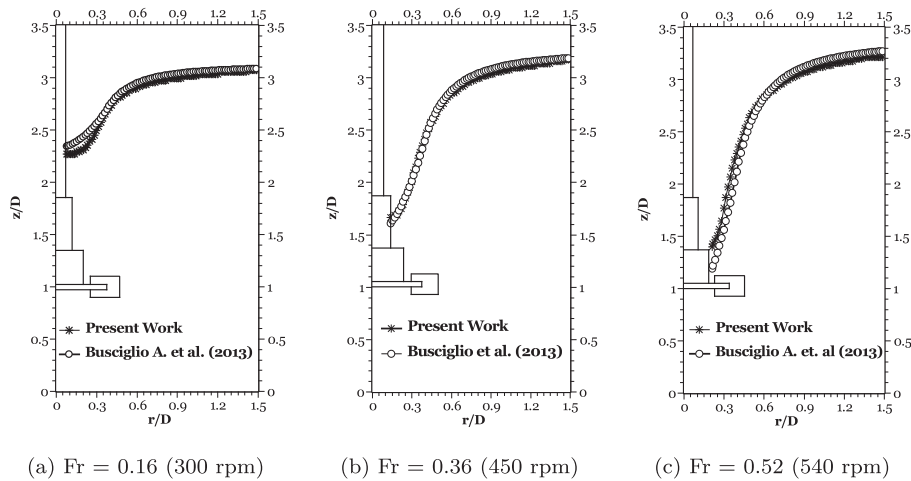
## 4. Results and discussion

In this section, the results of the surface shape, mean radial velocities, flow patterns and contours of turbulent kinetic energy will be presented. The tank size, operating conditions and the computational domain were the same as in the validation test. Nevertheless, two different impeller clearances were analyzed, namely:  $c/T = 1/3$  and  $c/T = 1/2$ . In Fig. 8, the surface shape and the mean radial velocity ( $\langle u_r \rangle / u_{tip}$ ) are plotted. First, it is worth noting that, at the same Froude number and different impeller clearance values, the surface depth does not change, and has only small variations in its shape. This has been previously reported experimentally by Busciglio et al. (2013), and it is well-known that in general, the liquid depth is mainly a function of the rotational speed and the surface shape is highly dependent on the impeller type. For these reasons, surfaces that have the same impeller type and work at the same operating conditions, but with different impeller clearance values, look quite similar. Finally, the case of  $c/T = 1/2$  and  $Fr = 0.52$  was not solved, because in this operating condition the fluid flows under super-critical conditions, adding other effects to the solution, such as the bubble injection, which is beyond the scope of the present work.

### 4.1. Flow field and flow patterns

As mentioned above, Fig. 8 shows the mean radial flow over the  $z$ -axis at different positions. The figure displays three characteristic regions: a middle zone, where the flow is discharged from the impeller to the wall; an upper and a lower zone, where the flow goes back from the wall to the central part of the tank; and another well-defined area between those regions, where the radial velocity is practically zero. In the middle zone and in all the cases (Fig. 8(a-d)) the jet is not symmetric and is directed downward. In the upper zone, the radial velocity and the size of this region are different depending on the Froude number and the impeller clearance value. It can be observed that the upper region is smaller when the impeller is near the liquid surface (Fig. 8(b) and (d)) and also, the radial velocity is bigger for the impeller clearance value  $c/T = 1/2$  in comparison to the other configuration (Fig. 8(a) and (c)). Moreover, the results show that, if the Froude number is increased, then the radial velocity in the upper region tends to be zero. This is because of the high surface deformation, which produces an inward flow that comes from the upside of the tank and goes downside till the impeller. Thus, the axial velocity ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ) must be more relevant than the radial velocity in the upper part of the tank when the surface is highly deformed.

In Fig. 9 the contours of axial velocity ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ) and the flow patterns for different impeller clearance values ( $c/T = 1/3$  and  $c/T = 1/2$ ) at the same Froude number ( $Fr = 0.16$ ) are shown. The figure shows the behavior of the secondary flow in the tank. In general, such a flow is less intense than in a baffled case. Nevertheless, for uncovered unbaffled tanks using a Rushton impeller, there are found two important recirculation zones like in the baffled ones. However, the liquid surface deformation always induces a bigger recirculation over the tank and is more evident when the turbine is placed lower in the tank (Fig. 9(a)). This produces a hybrid flow pattern, which is a combination between the pattern created by an axial and a radial impeller. The flow returning from the surface to the impeller is faster for an impeller clearance  $c/T = 1/3$  than for an impeller clearance of  $c/T = 1/2$ . The upper recirculation causes a higher deflection in the discharge area, where the outflow is considerably downward, not like in the standard baffled configuration, where the jet is slightly upward. This makes it so that most parts of the discharged flow are directed to the external part of the bottom, producing the downside recirculation.



**Fig. 7.** Vortex Shape comparison: The numerical results were compared using the correlation given in Busciglio et al. (2013) for  $c/T = 1/3$  at  $Fr = 0.16$ ,  $Fr = 0.36$  and  $Fr = 0.52$ .

tion zone. For an impeller clearance of  $c/T = 1/2$  the discharge angle (see 9(c)) captured was  $\approx 17^\circ$  and, when the impeller is placed lower ( $c/T = 1/3$ ) the angle is increased twofold ( $\approx 35^\circ$ ). Then, the impeller clearance significantly influences the flow discharge angle. This is because the upper recirculation zone is more intense when the impeller is placed lower in the tank, and then it pushes the jet downward. This affects the flow parameters near the impeller, such as the turbulent kinetic energy and the trailing vortex system.

#### 4.2. Coherent turbulent structures

Coherent turbulent structures play an important role in the large-scale transport phenomenon. For instance, the trailing vortices behind the impeller blades are the most important coherent structures in the tank and are responsible for a large portion of mass, heat and momentum exchange. Therefore, understand their nature indicates the mechanism in which the mixing process is carried out. For these reasons, in this work, the structures are shown using the Q-criterion (Jeong and Hussain, 1995). This criterion gives the portions in which the fluid has a closed rotational path and it is defined as the second invariant of the velocity gradient. Thus, mathematically it can be written as follows:

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \geq 0 \quad (18)$$

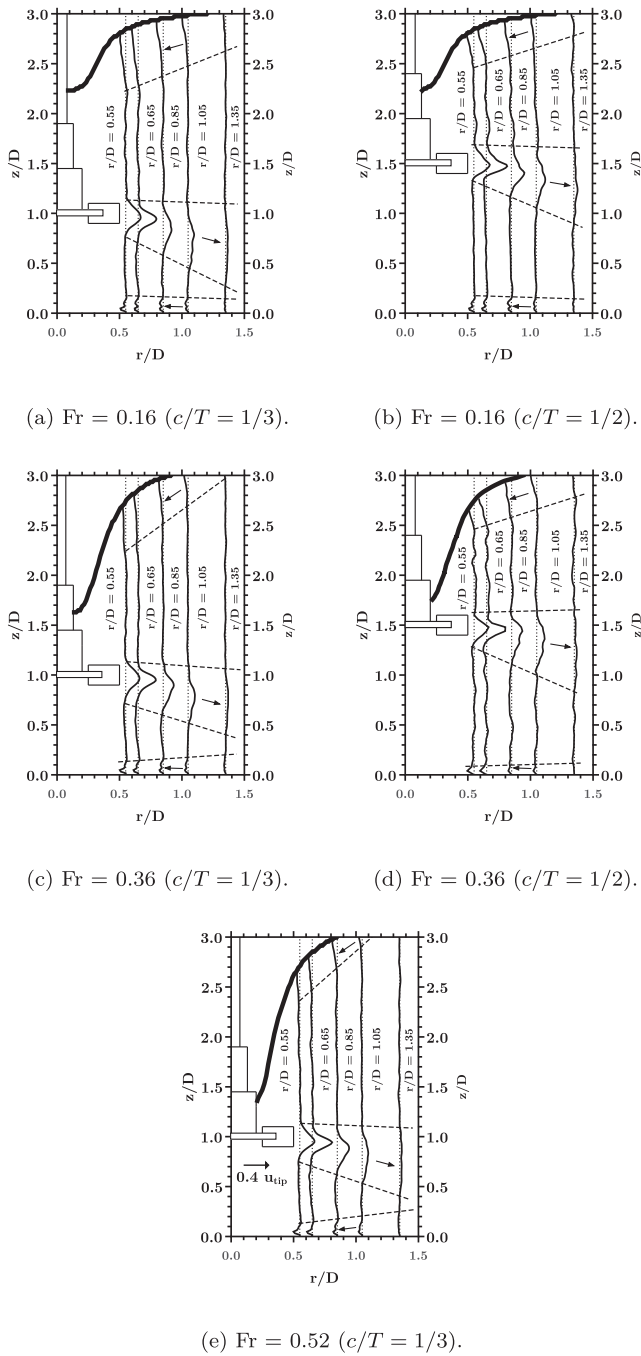
Instantaneous iso-surfaces of the non-dimensional Q-criterion ( $Q/N^2 = 200$ ) for two different  $c/T$  ratios and different operating conditions are plotted in Fig. 10 ( $Fr = 0.16, c/T = 1/2; Fr = 0.16, c/T = 1/3; Fr = 0.52, c/T = 1/3$ ).

First, it is important to notice that the trailing vortices are not the unique structures found in the tank. This figure shows three different zones along the vessel where there is a large number of turbulent structures. They are created by the interaction between the fluid flow and different parts within the mixing system and are enumerated from the less relevant to the most important for the mixing process.

In Fig. 10, the zone 1) is created by the interaction between the rotational fluid motion and the bottom wall. Here, these structures are extended only in the central part of the tank bottom, and, because of its small size, this zone could not be relevant for the mixing process. However, it helps to break the dead zone created under the impeller. The zones 2) and 3) occupy important spaces within the vessel. In zone 2), the structures are almost vertical

and turn around the shaft in the vicinity of the critical radius. They seem to be created due to the transition from the Forced Vortex to the Free Vortex area. However, it is important to note that under the impeller, despite having the same interaction between these two velocity profiles, there are no turbulent structures. Thus, they may be created mostly by the downward inflow (pumping effect) and the wobble motion of the surface. The above makes this zone the second more turbulent place in the tank and where an important fluid exchange between the Forced Vortex and the Free Vortex region is achieved. In Busciglio et al. (2014) already pointed out that this exchange is conducted because of turbulent diffusion. Here, using the Q-criterion, it is shown that in fact this exchange is carried out by those multiples turbulent structures interacting in this area. Moreover, if this zone is compared for the same operating condition but different impeller clearance value ( $c/T$ ) (see Fig. 10(a) and (b)), then it is possible to see that the lower the impeller, the greater the area covered by the coherent turbulent structures in zone 2). This produces an important effect in mixing because a low value of  $c/T$  reduces the area under the impeller where there is a lack of those turbulent structures and where the fluid has a poor recirculation movement. Thus, placing the impeller at the lowest possible point in the tank could improve the macro-mixing process. Finally, regarding zone 2), it is worth noting that when the Froude number is increased (see Fig. 10(c)) and the liquid surface goes down, this zone is reduced, and larger structures appear and rotate around the free surface. The advantage in this situation is that the inward flow is totally directed towards the impeller; thus, it does not matter if the zone 2) is suppressed.

Zone 3) is the impeller discharge area and it is well-known as the most turbulent region in the tank. Because of its relevance, it is shown in more detail in Fig. 10(d). In this image, two large structures moving in a counter-rotating mode behind each impeller blade are shown; these are the classical trailing vortices. However, there is an important difference in comparison with a baffled tank. In the UUST's, the trailing vortices are directed outward in a radial direction, as in the baffled case. Nevertheless, they are curved and redirected downward. The path of this vortices is quite important because this zone is relevant when the mixing process is trying to be improved. Assirelli et al. (2008) proposed to feed the mixing compounds directly into the trailing vortex area using a modified version of the Rushton Turbine in an UUST in order to improve the mixing performance. In their experiments, they obtained good results. However, the discharge information of a baffled tank was used, in which the jet flow is slightly upward. In order to have



**Fig. 8.** Mean radial velocity ( $\langle u_r \rangle / u_{tip}$ ) at five different radial positions (continuous line); Free surface (thick lines).

more accurate information to do this kind of improvement, Fig. 11 shows the trailing vortices paths for two different configurations ( $c/T = 1/2$  and  $c/T = 1/3$ ) at the same  $Fr = 0.16$  and  $Re = 20,055$  numbers. There are some difficulties trying to obtain the path of these structures using the approach mentioned in the validation test. This is because the trailing vortex in UUST's is not only found over an axial plane. Then, in order to obtain its path, the local maximum value of the phase-resolved Q-criterion was acquired for different angles behind the blade. This local maximum value also must have a zero axial velocity to be considered as part of the path trajectory.

In Fig. 11(a) and (b), the trailing vortices paths behind the impeller blade are shown. In both cases ( $c/T = 1/2$  and

$c/T = 1/3$ ), the vortices have a similar radial dispersion, and their trajectories are similar. However, the upper and the lower vortices have different behaviors. The upper one provides a more intense radial dispersion. This means that this vortex is discharged with higher inertia. It could be related to the secondary flow presented before, in which the recirculation zone over the impeller is more intense than the one under it. It is similar to the case in which the Reynolds number is increased in a baffled tank. Then, if there is a stronger inertia force, the vortex must reach a larger radial position. This also is found in Fig. 11(c) and (d), where the axial path of the vortices is plotted. The figures show a downward deflection of the vortices. Moreover, it is important to notice that in both cases the upper trailing vortex is created near the center-line of the impeller. This deflection is more evident for the impeller clearance value of  $c/T = 1/3$ . It seems to be, again, due to the big recirculation created over the impeller pushes the upper trailing vortex in the downward direction; this effect is more intense for the  $c/T = 1/3$  case than for the impeller clearance value of  $c/T = 1/2$ .

#### 4.3. Turbulent kinetic energy

The Turbulent Kinetic Energy ( $k$ ) will be presented in order to give another view about the turbulent behavior in the tank. As mentioned before, those turbulent structures are relevant in many mixing operations and in general, the turbulent kinetic energy is related to them. Hence, to get  $k$ , only the periodic values of the Reynolds stress tensor were obtained, hence, the random turbulent kinetic energy was discarded. Each component was computed as follows

$$\langle \partial_i \partial_j \mathbf{x} \rangle = \langle \partial^2 \mathbf{x} \rangle - \langle \partial \mathbf{x} \rangle^2 \quad (19)$$

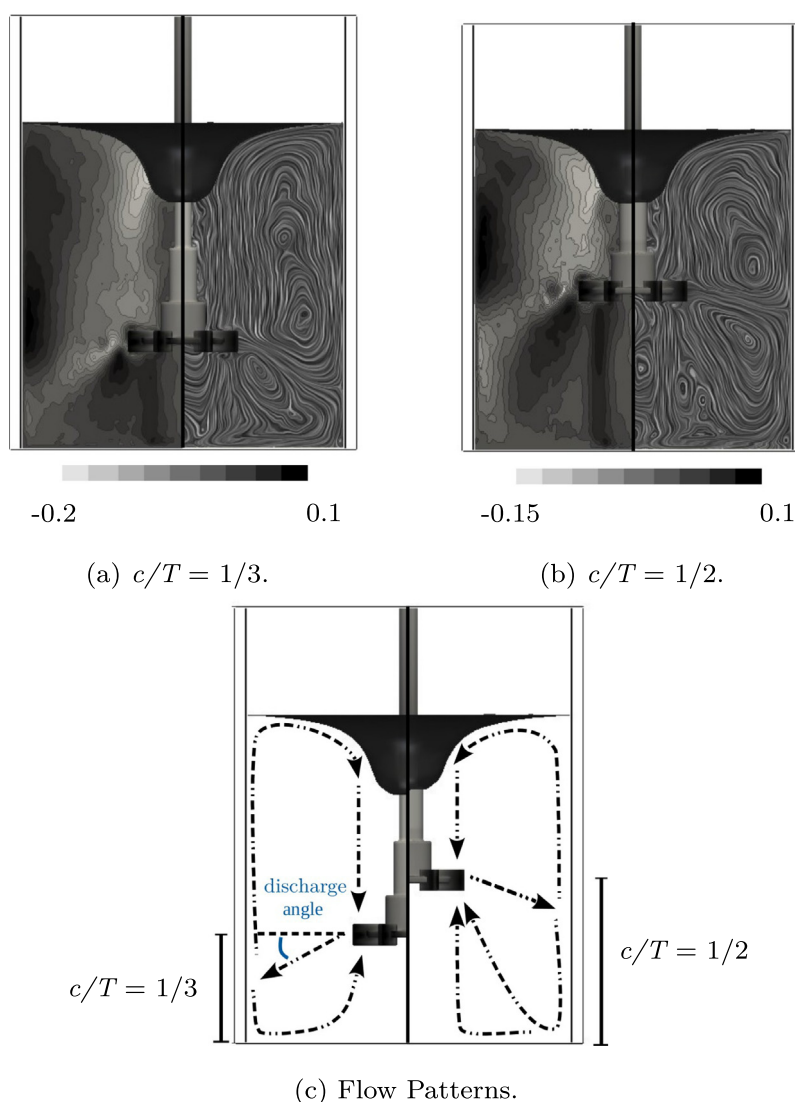
where  $\langle \rangle$  is the phase-averaged when the impeller crosses a particular angular position  $\theta$  (Eq. (15)). Thus, giving the definition of the Turbulent Kinetic Energy

$$\langle k \rangle = \frac{1}{2} (\langle u_\theta / u_{\theta'} \mathbf{x} \rangle + \langle u_r / u_{r'} \mathbf{x} \rangle + \langle u_z / u_{z'} \mathbf{x} \rangle) \quad (20)$$

In Fig. 12 the non-dimensional periodic turbulent kinetic energy ( $\langle k \rangle / u_{tip}^2$ ) is shown for  $Fr = 0.16$  and  $c/T = 1/3$  at three different angle-planes: over the impeller blade ( $0^\circ$ ) and behind it ( $20^\circ$ ;  $45^\circ$ ). As was expected, the discharge region (enclosed by dot lines) has the highest turbulence levels over the whole tank and its shape tends to be downward (see Fig. 12(a)(b)(c)). Moreover, in Fig. 12(a), the contours of  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  shows the same three important areas related to those structures presented before (discharge area, near the wall bottom and over the impeller). Also, this figure exposes the area below the Rushton Turbine where there is a lack of turbulent structures and has a low level of  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$ . However, over the impeller (enclosed by a thick line) high levels of turbulence along the shaft are found. These levels increase radially reaching their maximum value near the critical radius and after that point, they start to come down. The figure shows how the upper part of Forced Vortex Region has a more turbulent behavior in comparison with the lower one. Moreover, in Fig. 12(a), close to the free surface, the values of  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  are also high and relevant, it is because the interaction between the inflow stream and the low axial velocity found in the Forced Vortex Region. In this area, the eddies will deform the surface and this deformation will form bubbles. Thus, these bubbles will be dragged by the inflow stream. The latter effect can be used in order to dissolve powders, this characteristic has been proved in the work done by Cartland Glover and Fitzpatrick (2007).

Finally, the trailing vortices can be observed in detail in the plane located  $20^\circ$  behind the impeller (see Fig. 12(b)), where two





**Fig. 9.** Mean axial velocity ( $\langle u_z \rangle / u_{tip}$ ) and flow patterns created in an UUST for different impeller clearance.

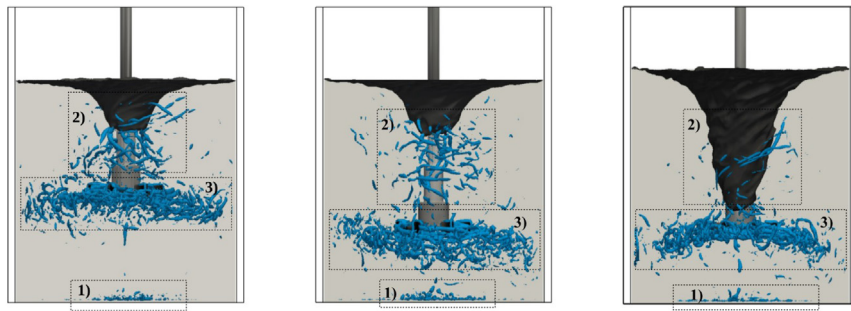
regions with high values of  $\langle k \rangle / u_{tip}^2$  appear, with these regions being the core of each vortex. Here, it is important to point out that the lower vortex has the highest values of turbulent kinetic energy. Again, it occurs in an opposite way than in a baffled tank, where the upper vortex is the most energetic. This is why in these tanks is suggested that the feed pipe should be located in upward position. Then in an UUST, the injection should be in the discharge area but below the impeller clearance value.

#### 4.4. Passive scalar dynamics

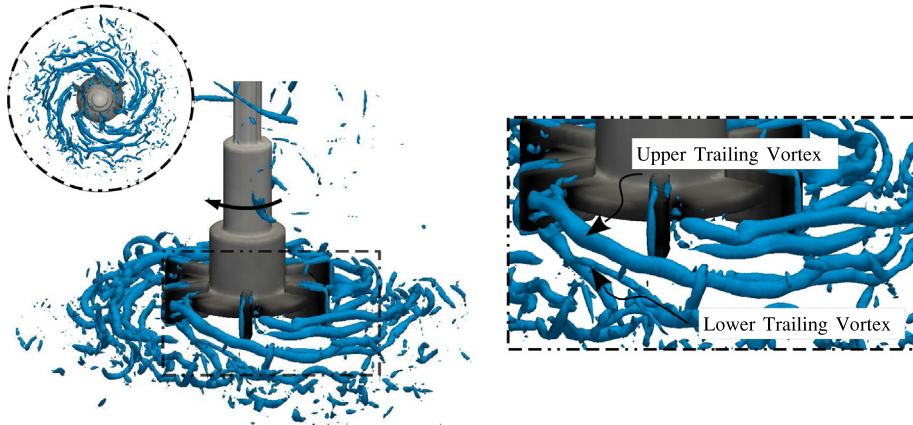
As was mentioned before, UUST's have been known for their poor mixing performance, as they have a much longer mixing time in comparison with the standard baffled configuration. This has been pointed out in detail by Busciglio et al. (2014); in their work, they obtained the mixing times and tracer distribution in an UUST for different impellers using planar laser induced fluorescence (PLIF). Several experimental and numerical works have shown part of the mixing process in precipitators (Rousseaux et al., 2001; Bertrand et al., 2012a,b). In these works, the mixing dynamics inside the system are presented, where the Forced Vortex zone is shown as a confined fluid region. Therefore, it can be used as a closed reactor. In the present work, the dynamics of the scalar

$C/C_\infty$  at different dimensionless time  $N_t$  are shown (see Fig. 13). Here, the mixing time was not calculated, mainly due to the expensive computational time needed to reach a homogeneous distribution. However, as is shown in Fig. 13, an interesting part of the macromixing is carried out at the first stages of the process. Moreover, for Busciglio et al. (2014) it was impossible to see those first times due to the masking process needed in the PLIF technique. The tracer and the volume injection were located upside in the forced vortex region near the free surface and the critical radius (see Fig. 13(a)). The results were normalized using the value of the concentration if the fluid reached the homogeneous state  $C_\infty$ .

Fig. 13(b–c) show at the time  $N_t = 1$  and  $N_t = 2$  the first interactions of the fluid in the upper part of the tank, where it is possible to see the behavior of the turbulent structures over the impeller showed before using the Q-criterion; these structures carry highly concentrated fluid from the confined area inside the Forced Vortex region to the large upper recirculation found in the Free Vortex area. From  $N_t = 7$  to  $N_t = 16$  (see Fig. 13(d–f)), the upper side of Forced Vortex is well defined as a high-concentrated area enclosed in the central part of the tank over the impeller and is maintained for many impeller revolutions, at the dimensionless times  $N_t = 7$  to  $N_t = 11$ , the downward impeller discharge is well defined. It causes an important part of the passive scalar to flow from the con-

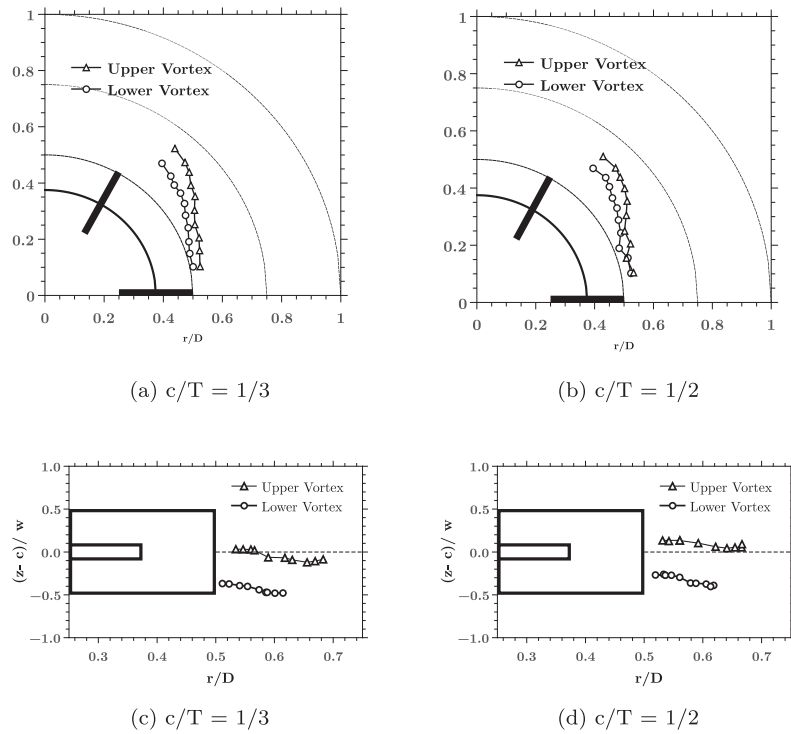


(a)  $Fr = 0.16$  ,  $c/T = 1/2$ . (b)  $Fr = 0.16$  ,  $c/T = 1/3$ . (c)  $Fr = 0.52$  ,  $c/T = 1/3$ .



(d) zone 3  $Fr = 0.16$  and  $c/T = 1/3$ .

**Fig. 10.** Multiple vortex structures visualized: (a–c) Q-criterion ( $Q/N^2 = 200$ ); (d) Zone 3 zoom-in ( $Q/N^2 = 400$ ).



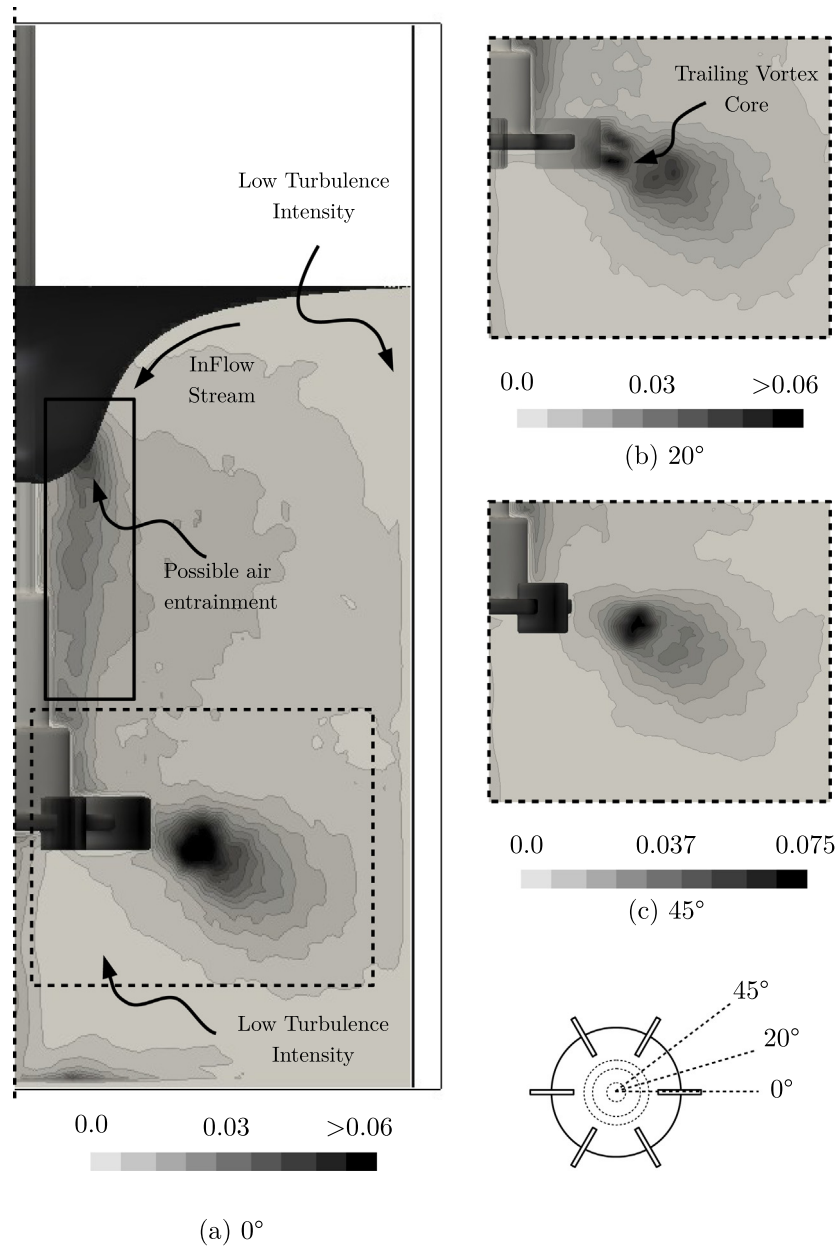
(a)  $c/T = 1/3$

(b)  $c/T = 1/2$

(c)  $c/T = 1/3$

(d)  $c/T = 1/2$

**Fig. 11.** Trailing vortex path for  $Fr = 0.16$  and  $Re = 20,055$ : (a–b) Angular view; (c–d) Front view.



**Fig. 12.** Turbulent Kinetic Energy ( $\langle k \rangle / u_{tp}^2$ ) at  $Fr = 0.16$  and  $c/T = 1/3$ : 0° (a); 20° (b); 45° (c).

fined area to the small lower recirculation; this effect is more evident at the time  $N_t = 16$  and  $N_t = 21$  (see Fig. 13(f-g)), where the discharge stream makes it so that the small lower recirculation zone obtains a higher concentration than the upper side of the tank near the free surface. Finally, after 31 impeller turns, the Free Vortex region composed by the upper and lower recirculations reach a homogeneous distribution. At this time, the confined area in the Forced Vortex region placed over the impeller has significantly reduced its concentration. However, after those times, another region that has a segregated state appears. Next to  $N_t = 16$  (see Fig. 13(f-i)), a lower zone is established under the impeller. This area completely belongs to the Forced Vortex and also appears in the work done by Busciglio et al. (2014), in which the homogeneous state is reached quicker in this region than in the confined area over the impeller. Nevertheless, based on the flow characteristics showed before, it should be easier to mix the upper Forced region than the lower one. This lower zone is broken starting from the bottom wall, where the turbulent structures located at the bot-

tom help to broke the solid motion of the fluid. In general, this dead zone is hard to suppress. As was commented before, this lower zone has the worst mixing performance and could be eliminated placing the impeller at the lowest possible point of the tank.

### 5. Conclusions

In the present work, multiple Large Eddy Simulations were conducted in order to analyze the flow inside an uncovered unbaffled stirred tank. The numerical code based on a pseudo-compressibility method is able to solve the complex flow behavior in these kind of tanks. The use of high order methods in the discretization process made possible the solution of the flow without the use of a prohibitive fine mesh. The LS method can capture with excellent agreement the shape of the free surface with respect to experimental results when the process is carried out in sub-critical conditions. The geometries and their interaction with the

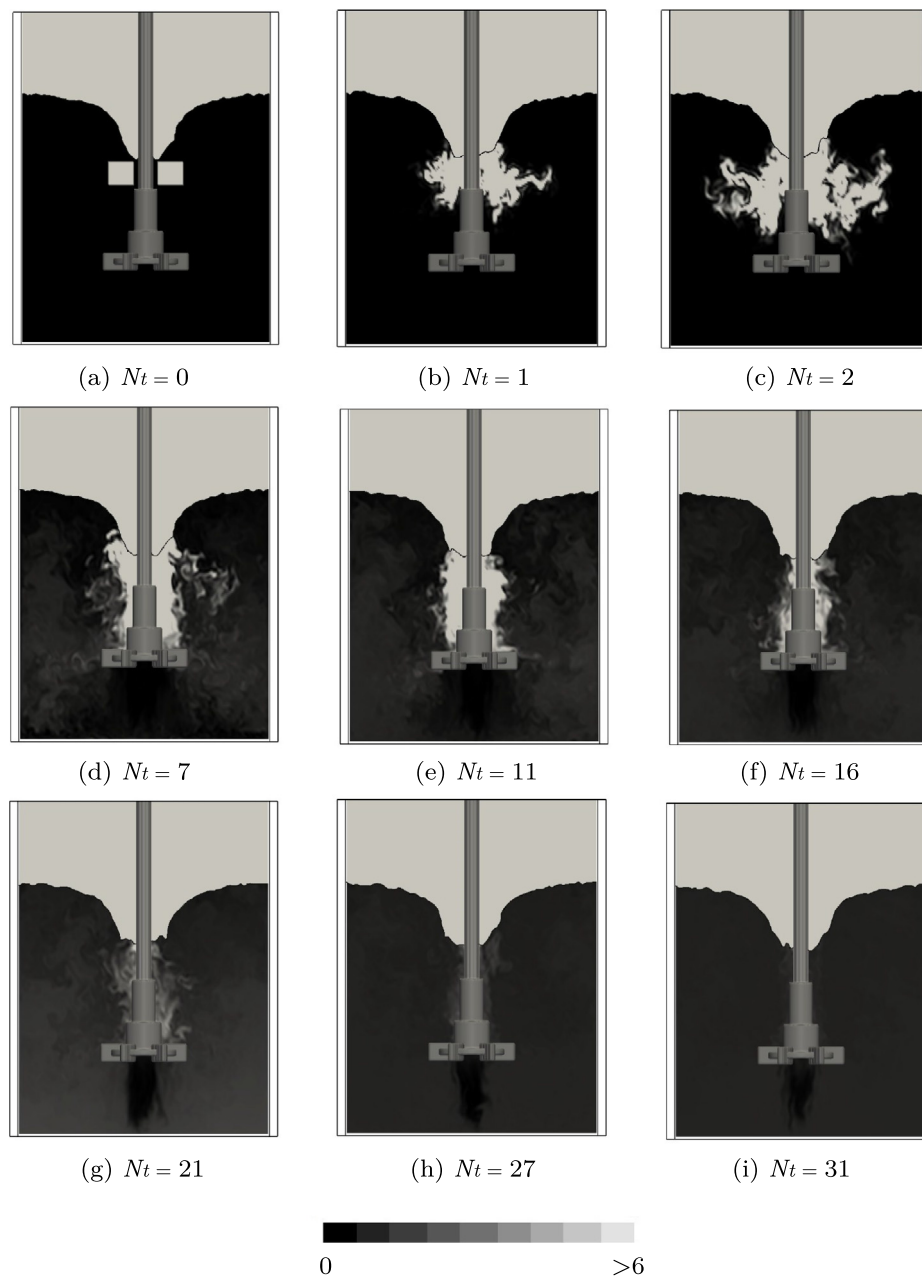


Fig. 13. Passive Scalar Transport  $C/C_\infty$  at different Dimensionless Times ( $N_t$ ) for  $Fr = 0.16$  and  $c/T = 1/3$ .

fluid were well modeled using the IBM and the GFM. This methodology allows to easily change the tank geometry and adding many tank internals without modifying the numerical code or the computational mesh.

The results show that the discharge outflow is downward, that is opposite to the flow observed in a baffled tank. The angle of this jet is function of the close clearance and is due to the impeller position changes the size of the upper recirculation. The latter causes that the trailing vortices to perform different behavior. The upper vortex reaches a larger radial position. However, the lower one has a higher value of turbulent kinetic energy. Hence, for design purposes, it is suitable to put the feed pipes lower the  $c/T$  level in order to enhance the mixing process.

The turbulent structures show that over the impeller there is an important momentum exchange between the Forced and de Free Vortex Region. However, under the impeller, there is a lack of those structures. This helps to understand the dead zone created

between the bottom and the impeller. This dead zone could be suppressed by placing the impeller at the lowest possible point near the bottom of the tank.

#### CRediT authorship contribution statement

**J. Ramírez-Cruz:** Conceptualization, Methodology, Software, Formal analysis. **M. Salinas-Vázquez:** Supervision, Writing - review & editing, Software. **G. Ascanio:** Resources, Project administration, Writing - original draft. **W. Vicente-Rodríguez:** Supervision, Investigation. **C. Lagarza-Córtés:** Validation, Software.

#### Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

## Acknowledgments

We appreciate the support given by the Instituto de Ingeniería de UNAM. Computation was carried out at the Tonatiuh HPC-Cluster (Instituto de Ingeniería, UNAM). The authors thank to Fernando Maldonado, the system administrator, and his team (ASUL). Finally, J. Ramírez-Cruz is thankful for the CONACYT scholarship.

## References

- Alcamo, R., Micale, G., Grisafi, F., Brucato, A., Ciofalo, M., 2005. Large-eddy simulation of turbulent flow in an unbaffled stirred tank driven by a Rushton turbine. *Chem. Eng. Sci.* 60, 2303–2316. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.11.017>.
- Assirelli, M., Bujalski, W., Eaglesham, A., Nienow, A.W., 2008. Macro-and micromixing studies in an unbaffled vessel agitated by a Rushton turbine. *Chem. Eng. Sci.* 63, 35–46. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.07.074>.
- Bertrand, M., Parmentier, D., Lebaigue, O., Plasari, E., Ducros, F., 2012a. Mixing study in an unbaffled stirred precipitator using LES modelling. *Int. J. Chem. Eng.* 2012. <https://doi.org/10.1155/2012/450491>.
- Bertrand, M., Plasari, E., Lebaigue, O., Baron, P., Lamarque, N., Ducros, F., 2012b. Hybrid LES-multizonal modelling of the uranium oxalate precipitation. *Chem. Eng. Sci.* 77, 95–104. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2012.03.019>.
- Bhattacharya, S., Hebert, D., Kresta, S.M., 2007. Air entrainment in baffled stirred tanks. *Chem. Eng. Res. Des.* 85, 654–664. <https://doi.org/10.1205/cherd06184>.
- Busciglio, A., Caputo, G., Scargiali, F., 2013. Free-surface shape in unbaffled stirred vessel: experimental study via digital image analysis. *Chem. Eng. Sci.* 104, 868–880. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.10.019>.
- Busciglio, A., Grisafi, F., Scargiali, F., Brucato, A., 2014. Mixing dynamics in uncovered unbaffled stirred tanks. *Chem. Eng. J.* 254, 210–219. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.05.084>.
- Busciglio, A., Scargiali, F., Grisafi, F., Brucato, A., 2016. Oscillation dynamics of free vortex surface in uncovered unbaffled stirred vessels. *Chem. Eng. J.* 285, 477–486. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.10.015>.
- Cartland Glover, G.M., Fitzpatrick, J.J., 2007. Modelling vortex formation in an unbaffled stirred tank reactors. *Chem. Eng. J.* 127, 11–22. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2006.09.019>.
- Chang, Y.C., How, T.Y., Merriman, B., Osher, S., 1996. A level-set formulation of eulerian interface capturing method for incompressible fluid flow. *J. Comput. Phys.* 124, 449–464. <https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0072>.
- Chi-Wang, S., Osher, S., 1988. Implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes. *J. Comput. Phys.* 77, 439–471. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90177-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90177-5).
- Ciofalo, M., Brucato, A., Grisafi, F., Torra, N., 1996. Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers. *Chem. Eng. Sci.* 51, 3557–3573. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(96\)00004-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(96)00004-8).
- Cubos-Ramírez, J.M., Ramírez-Cruz, J., Salinas-Vázquez, M., Vicente-Rodríguez, W., Martínez-Espinosa, E., Lagarza-Cortés, C., 2016. Efficient two-phase mass-conserving level set method for simulation of incompressible turbulent free surface flows with large density ratio. *Comput. Fluids* 136, 212–227. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.05.032>.
- Derksen, J., Van den Akker, H.E.A., 1999. Large eddy simulations on the flow driven by a Rushton turbine. *AIChE J.* 45, 209–221. <https://doi.org/10.1002/aic.690450202>.
- Deshpande, S.S., Kar, K.K., Walker, J., Pressler, J., Su, W., 2017. An experimental and computational investigation of vortex formation in an unbaffled stirred tank. *Chem. Eng. Sci.* 168, 495–506. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.04.002>.
- Fedwick, R.P., Aslam, T., Merriman, B., Osher, S., 1999. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.* 152, 457–492. <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>.
- Haque, J.N., Mahmud, T., Roberts, K.J., Rhodes, D., 2006. Modeling turbulent flows with free-surface in unbaffled agitated vessels. *Ind. Eng. Chem. Res.* 45, 2881–2891. <https://doi.org/10.1021/ie051021a>.
- Hart, J., 2016. Comparison of turbulence modeling approaches to the simulation of a dimpled sphere. *Procedia Eng.* 147, 68–73. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.191>.
- Hartmann, H., Derksen, J.J., Van den Akker, H.E.A., 2006. Mixing times in a turbulent stirred tank by means of LES. *AIChE J.* 52, 3696–3706. <https://doi.org/10.1002/aic.10997>.
- Jeong, J., Hussain, F., 1995. On the identification of a vortex. *J. Fluid Mech.* 285, 69–94. <https://doi.org/10.1017/S0022112095000462>.
- Jiang, G.S., Peng, D., 2000. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.* 21, 2126–2143. <https://doi.org/10.1137/S106482759732455X>.
- Lamarque, N., Zoppé, B., Lebaigue, O., Dolias, Y., Bertrand, M., Ducros, F., 2010. Large-eddy simulation of the turbulent free-surface flow in an unbaffled stirred tank reactor. *Chem. Eng. Sci.* 65, 4307–4322. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.03.014>.
- Lele, S.K., 1992. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.* 103, 16–42. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-R](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-R).
- Lesieur, M., Méttais, O., 1996. New trends in Large-Eddy simulations of turbulence. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 28, 45–82. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.28.1.45>.
- Li, J., Deng, B., Zhang, B., Shen, X., Kim, C.N., 2015. CFD simulation of an unbaffled stirred tank reactor driven by a magnetic rod: assessment of turbulence models. *Water Sci. Technol.* 72, 1308–1318. <https://doi.org/10.2166/wst.2015.314>.
- Mahmud, T., Haque, J.N., Roberts, K.J., Rhodes, D., Wilkinson, D., 2009. Measurements and modelling of free-surface turbulent flows induced by a magnetic stirrer in an unbaffled stirred tank reactor. *Chem. Eng. Sci.* 64, 4197–4209. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.06.059>.
- Métais, O., Lesieur, M., 1992. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably-stratified turbulence. *J. Fluid Mech.* 239, 157–194. <https://doi.org/10.1017/S0022112092004361>.
- Montante, G., Magelli, F., Paglianti, A., 2013. Fluid-dynamics characteristics of a vortex-ingesting stirred tank for biohydrogen production. *Chem. Eng. Res. Des.* 91, 2198–2208. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.04.008>.
- Nagata, S., 1975. *Mixing: Principles and Applications*. Halsted Press, Tokyo, Japan.
- Nourgaliev, R.R., Dinh, T.N., Theofanous, T.G., 2004. A pseudocompressibility method for the numerical simulation of incompressible multifluid flows. *Int. J. Multiph. Flow* 30, 901–937. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2004.03.010>.
- Osher, S., Fedkiw, R., 2003. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer-Verlag, New York, United States of America.
- Osher, S., Shethian, J.A., 1988. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.* 79, 12–49. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2).
- Ramakrishna Rao, A., Kumar, B., Kumar Patel, A., 2009. Vortex behaviour of an unbaffled surface aerator. *ScienceAsia* 35, 183. <https://doi.org/10.2306/scienceasia1513-1874.2009.35.183>.
- Rousseaux, J., Muhr, H., Plasari, E., 2001. Mixing and micromixing times in the forced vortex region of unbaffled mixing devices. *Can. J. Chem. Eng.* 79, 697–707. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450790501>.
- Salinas-Vázquez, M., Vicente, W., González-Rodríguez, C., Barrios-Bonilla, E., Espinosa-Gayosso, A., 2010. Large Eddy Simulation of a jet flow with a suction/ejection system using immersed boundary conditions. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 98, 618–627. <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2010.06.003>.
- Scargiali, F., Busciglio, A., Grisafi, F., Brucato, A., 2014. Mass transfer and hydrodynamic characteristics of unbaffled stirred bio-reactors: Influence of impeller design. *Biochem. Eng. J.* 82, 41–47. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2013.11.009>.
- Sussman, M., Smereka, P., Osher, S., 1994. A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.* 114, 146–159. <https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1155>.
- Vella, C., Grisafi, F., Micale, G., Rizzuti, L., Brucato, A., 2003. Near impeller flow field in an unbaffled stirred tank. In: *Proceedings of the 11th European Conference on Mixing*, pp. 629–636.
- Visbal, M.R., Gaitonde, D.V., 2002. On the use of higher-order finite-difference schemes on curvilinear and deforming meshes. *J. Comput. Phys.* 181, 155–185. <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7117>.
- Yang, F., Zhou, S., Zhang, C., 2017. Free-surface turbulent flow in an eccentric stirred tank. *Chem. Eng. Technol.* 40, 561–570. <https://doi.org/10.1002/ceat.201600354>.
- Yang, F.L., Zhou, S.J., 2015. Free surface turbulent flow in an unbaffled stirred tank: detached Eddy simulation and VOF study. *Chem. Biochem. Eng. Q.* 29, 395–403. <https://doi.org/10.15255/CABEQ.2014.2056>.
- Yang, J., Balaras, E., 2006. An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. *J. Comput. Phys.* 215, 12–40. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.10.035>.
- Yianneskis, M., Popiolek, Z., Whitelaw, J.H., 1987. An experimental study of the steady and unsteady flow characteristics of stirred reactors. *J. Fluid Mech.* 175, 537–555. <https://doi.org/10.1017/S002211208700051X>.
- Yoon, H.S., Balachandrar, S., Ha, M.Y., 2009. Large eddy simulation of flow in an unbaffled stirred tank for different Reynolds numbers. *Phys. Fluids* 21. <https://doi.org/10.1063/1.3210776>.
- Zamiri, A., Chung, J.T., 2017. Ability of urans approach in prediction of unsteady turbulent flows in an unbaffled stirred tank. *Int. J. Mech. Sci.* 133, 178–187. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.08.008>.

Apéndice B

Congresos tesis



March 22, 2016

Jorge Ramírez Cruz  
Universidad Nacional Autónoma de México

jramirezcr@ingen.unam.mx

Dear Jorge,

We thank you for submitting an abstract for Mixing XXV, the NAMF conference to be held from June 26<sup>th</sup> to July 1<sup>st</sup> 2016 in Quebec City, Canada.

The Program Committee reviewed more than 100 abstracts and was impressed by the high quality of the submissions. Owing to the limited number of slots in the conference program, the selection process was most challenging.

We are pleased to inform you that your abstract, *Mixing Hydrodynamics in an Unbaffled Stirred Tank Using GPU-Based Large-Eddy Simulations.*, has been selected for a poster.

As the conference is just three months away, the next step for you is to register at your earliest convenience, keeping in mind that the end of June is the beginning of the peak season in Quebec City. Why not take advantage of the early bird registration fee offered until April 3<sup>rd</sup>?

Do not hesitate to contact us or Frédéric Dallaire (fdallaire@inscriptevent.com) should you have any comments or questions.

Once again, thanks for your contribution and we look forward to seeing you in Quebec City.

Sincerely,

François Bertrand, ing., Ph.D.  
Conference Chair  
francois.bertrand@polymtl.ca

Louis Fradette, ing. Ph.D.  
Conference Co-Chair  
louis.fradette@polymtl.ca

# Numerical Analysis of Viscous Heating in a Double Planetary Mixer

**J. Ramirez-Cruz<sup>1</sup>, M. Salinas-Vazquez<sup>2</sup>, G. Ascanio<sup>3</sup>, C. Palacios-Morales<sup>4</sup>, D. Posadas-Navarro<sup>5</sup>.**

<sup>1</sup> Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México, México, jramirezcr@iingen.unam.mx

<sup>2</sup> Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México, México, msalinasv@iingen.unam.mx

<sup>3</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México, México, gabriel.ascanio@ccadet.unam.mx

<sup>4</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México, México, cpalacios@unam.mx

<sup>5</sup> Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México, México, dposadasn@iingen.unam.mx

---

**Abstract:** In the present work, a numerical study of the viscous heating affecting the fluid viscosity in a double planetary mixer is described. The purpose of the present study is to predict the temperature rise in the fluid flow due to the mechanical work provided by the impellers. Viscosity temperature-dependency was modeled using the well-known Guzman-Andrade equation. To solve the governing equations, High Order Compact Schemes and Runge-Kutta methods were used. The boundary conditions in the impellers and the tank were applied using the Immersed Boundary Method and the Ghost Fluid Method respectively. The results show the temperature changing because of the viscous heating and how it affects the viscosity during the mixing process. This model is able to predict “hot-spots” inside the fluid and how the double planetary mixer handles and distributes these hot zones throughout the mixing process.

**Keywords:** Viscous Heating, Viscous Dissipation, Planetary Mixer, Temperature-dependent Viscosity.

## Introduction

Viscous heating or viscous dissipation is the process in which the work done by the fluid is transformed into internal energy. As is mentioned in [1] it acts like a heat source, therefore, the fluid experiments a temperature increment. This phenomenon takes on special relevance in high-speed flows and in processes using highly viscous liquids. The latter is found in many industrial applications where the mixing of highly viscous fluids is a common task. In this industrial process, it must be careful to avoid an excessive temperature increment, this is due to materials may be sensitive to a temperature increase and they may suffer thermal degradation. Moreover, the viscosity in very viscous fluids is highly dependent on the temperature, hence, the flow patterns may change during the process because of the viscosity gradients [2]. To overcome those problems, the mixing task is carried out in stirred tanks using close clearance impellers at low rotational speed (laminar regime), avoiding large high-shear zones in order to minimize the heat buildup effect.

Close clearance impellers like planetary mixers are known to have an excellent performance carrying out mixing of very viscous fluids. However, the literature about this kind of equipment is scarce in comparison to stirred tanks with open impellers in turbulent regimen. Further, there are few studies about planetary mixers and their hydrodynamics. To mention the most relevant studies, in [3] the power consumption in a double planetary mixer was experimentally analyzed. They measured the torque and the speed in order to establish the power curve and characterize the system. In [2], the hydrodynamics of a double planetary mixer is analyzed by means of a numerical and experimental study. In this work, the distribution flow patterns throughout the tank were founded using particle tracers. Moreover, using the velocity fields they showed the contours of instantaneous density of energy dissipation, where it is observed that most of the energy is dissipated in the clearance areas



between the impellers and the walls. However, they did not take into account the change in viscosity because of the viscous energy dissipation.

To the authors' knowledge, there is a lack of information about viscous heating, its local effect, and the operating conditions when it starts to become relevant to the global mixing process. The present work attempts to provide information about these issues using numerical simulations.

### Governing Equations.

In the present work, the continuity (1), momentum (2) and energy (3) equations were solved in a cartesian frame using a variant of the pseudo-compressibility method (see [4] for details). 6th Order Compact Schemes [5] were used to discretize the spatial terms and a 3rd order Runge-Kutta scheme was used for the temporal integration [8].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j] = 0 \dots (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \frac{2}{Re} \mu S_{ij}] = 0, i = 1, 2, 3 \dots (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho u_j T - \frac{1}{Re Pr} \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j}] = \frac{Na}{Re Pr} [2 \mu S_{ij} S_{ij}] \dots (3)$$

$$\mu = A e^{b/T} \dots (4)$$

The non-dimensional parameters  $Re$ ,  $Pr$ , and  $Na$  are the Reynolds, Prandtl and the Nahme numbers, respectively.  $Na$  represents the ratio of the temperature rise because of viscous heating to the temperature rise needed to change the viscosity [6]. The Nahme number is also the parameter which links the momentum equations to the energy equation. Therefore, if  $Na \ll 1$ , the right hand side of equation (3) (viscous dissipation term) tends to zero and then, the flow becomes isothermal. The rheological model used is Newtonian, being  $S_{ij}$  the symmetrical part of the velocity gradient tensor. The Guzman-Andrade equation (4) was selected as thermo-rheological model [7].

### Impeller Modelling

The boundary conditions in the impellers and the tank were applied using the Immersed Boundary Method [8] and the Ghost Fluid Method [9] respectively. In order to improve the impeller modelling an interpolation scheme were applied at the nodes surrounded by the mobile geometries [10].

### Mixing System and Computational Details

The mixer configuration is shown in Figure 1.a. It consists of a double planetary gear system working in co-rotating mode and a flat bottom vessel. The ratio between the carousel and the impellers rotation is 2:1. Figure 1.b shows the computational mesh. It is structured, collocated and regular. The nodes distribution is 150 X 150 X 75 in each direction for a total of 1,687,500 discrete points. The size of the computational domain is 1.1T X 1.1T X 0.93T in the axis  $x, y$  and  $z$ , respectively. Simulations were carried out at three different operational conditions controlled by the non-dimensional numbers ( $Re$ ,  $Pr$  and  $Na$ ). Parameters  $A$  and  $b$  in the Guzman-Andrade equation correspond to Squill Honey, being  $A = 2.15E-16$  [Pa · s] and  $b = 11474.62111$  [K].

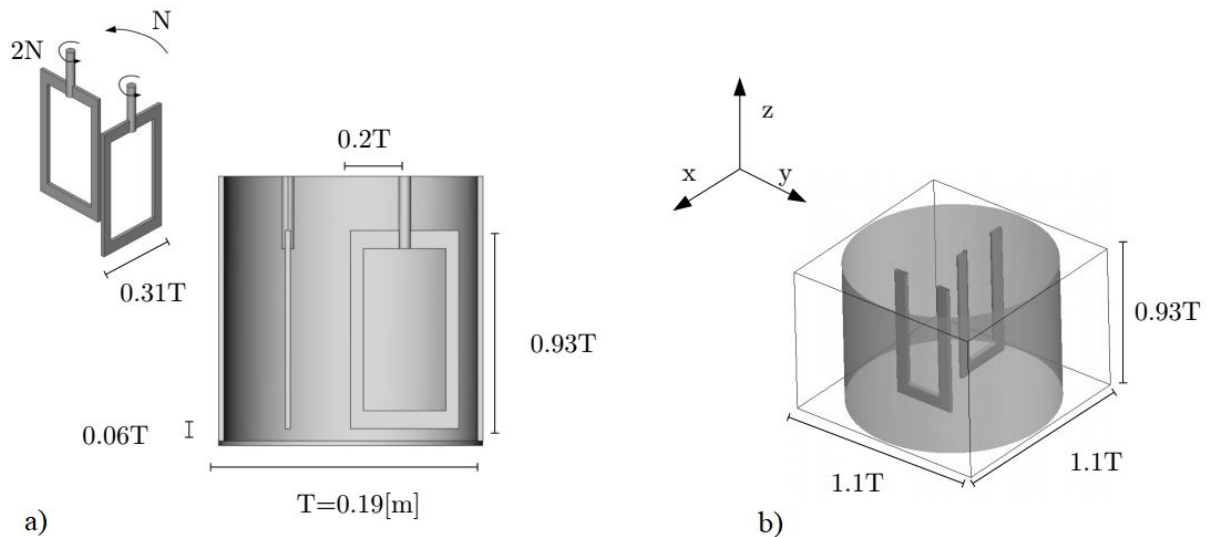


Figure 1: a) Double Planetary System; b) Computational Domain.

## Results

The viscosity contour  $\mu/\mu_{ref}$  is shown in Figure 2. Those results were obtained on the axial plane  $z/T = 0.535$  and they correspond to the  $Re = 9.891$ ,  $Pr = 4954$  and  $Na = 1.419$  condition. Figure 2.a shows the initial stage when the viscosity is uniform along the vessel and the mixing process starts. In Figure 2.b, the carousel has moved in 1/5 part of the translational movement. In this stage, the velocity gradient because of the relative velocity between the impellers tip and the static flow starts to create high-shear zones (dotted line boxes), therefore the temperature increase in those areas and the viscosity then is reduced. In Figure 2.c and 2.d the viscous heating begins to create a halo of lower viscosity (dotted arrows) in the external part of the vessel. Moreover, in 2.d the planetary movement starts to carry compounds from the outside to inside part of the vessel, thereby, this movement also transports lower viscosity fluid to the central part of the tank. In Figures 2.e and 2.f, the halo is complete and it can be noticed in a better manner the redistribution feature of the planetary mixer. Moreover, the inside part of the impellers also creates new high-shear zones and then, lower viscosity sections in the central region of the vessel. Also, in Figure 2.f it can be seen that the viscosity values has been reduced in 6% in the points surrounded by the impeller.

Regarding to the halo formation, this area may produce “hot spots”. This is due to the thinning effect caused by the viscous heating, which will increase the shear-strain. Thus causing a further increase in temperature at these points. The redistribution feature of the planetary mixer is the only mechanism to avoid those “hot-spots”, this is due to in general, highly viscous fluids have a poor capacity of heat transfer by diffusion.

## Conclusions

In the present work, a numerical local study of the viscous heating dissipation in a double planetary mixer and its influence on the viscosity throughout the mixing process was presented. The results show how this mixer gives rise to viscous heating and how this zone is redistributed along the vessel. The numerical method showed a proper representation of the physical phenomena and their capabilities for solving non-isothermal complex flows with mobile boundaries.

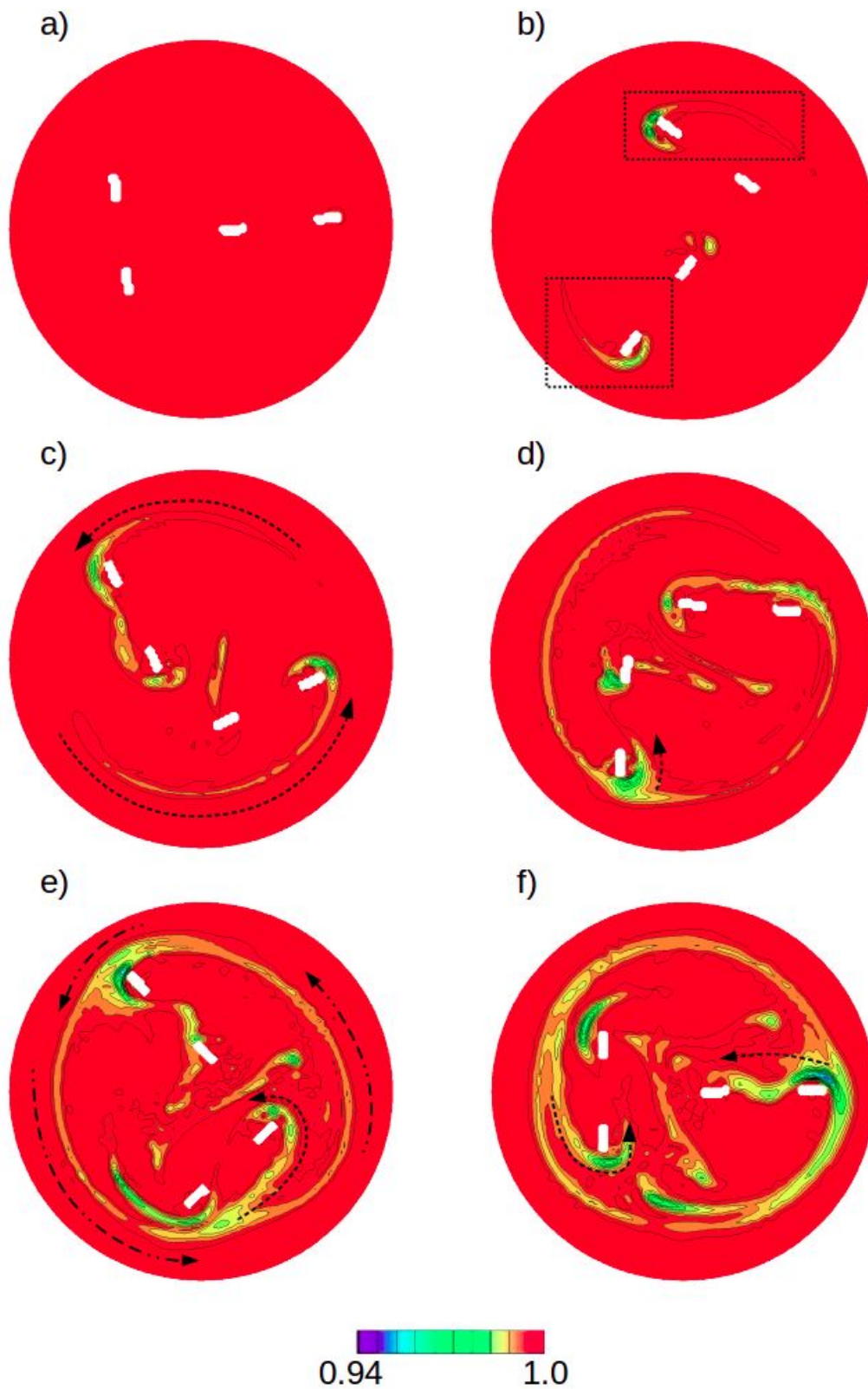


Figure 2: Viscosity profiles at different rotational stages.

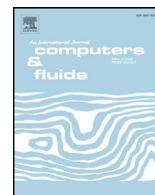
## References

- [1] Eckert, E. R. G., & Shadid, J. N. (1989). Viscous heating of a cylinder with finite length by a high viscosity fluid in steady longitudinal flow-1. Newtonian fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(2), 321–334.
- [2] Tanguy, P. A., Thibault, F., Dubois, C., & Ait-Kadi, A. (1999). Mixing hydrodynamics in a double planetary mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, 77(A4), 318–324.
- [3] Zhou, G., Tanguy, P. A., & Dubois, C. (2000). Power Consumption in a Double Planetary Mixer with Non-Newtonian and Viscoelastic Materials. *Chemical Engineering Research and Design*, 78(3), 445–453.
- [4] Cubos-Ramírez, J. M., Ramírez-Cruz, J., Salinas-Vázquez, M., Vicente-Rodríguez, W., Martínez-Espinosa, E., & Lagarza-Cortés, C. (2016). Efficient two-phase mass-conserving level set method for simulation of incompressible turbulent free surface flows with large density ratio. *Computers and Fluids*, 136, 212–227.
- [5] Lele, S. K. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1).
- [6] Arcos, J. C., Méndez, F., & Bautista, O. (2011). Effect of temperature-dependent consistency index on the exiting sheet thickness in the calendering of power-law fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(17–18), 3979–3986.
- [7] J. de Guzman, “Relation between fluidity and heat of fusion,” *Anales de la Sociedad Espanola de Física y Química*, vol. 11, pp.353–362, 1913.
- [8] Fedkiw, R. P., Aslam, T., Merriman, B., & Osher, S. (1999). A Non-oscillatory Eulerian Approach to Interfaces in Multimaterial Flows (the Ghost Fluid Method). *Journal of Computational Physics*, 152(2), 457–492.
- [9] Peskin, C. S. (2002). The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11, 479–517.
- [10] Yang, J., & Balaras, E. (2006). An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 215(1), 12–40.
- [11] Liang, J., Zhan, X., Yang, Y., Li, X., & Shi, T. (2016). A numerical investigation of the effects of blade 's geometric parameters on the power consumption of the twin-blade planetary mixer, 8(10), 1–12.
- [12] Blais, B., Lassaigne, M., Goniva, C., Fradette, L., & Bertrand, F. (2016). A semi-implicit immersed boundary method and its application to viscous mixing. *Computers and Chemical Engineering*, 85, 136–146.



Apéndice C

Otros artículos



# Efficient two-phase mass-conserving level set method for simulation of incompressible turbulent free surface flows with large density ratio



J.M. Cubos-Ramírez, J. Ramírez-Cruz, M. Salinas-Vázquez\*, W. Vicente-Rodríguez, E. Martínez-Espinosa, C. Lagarza-Cortes

*Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Escolar, Ciudad Universitaria, 04510 México, D.F., México*

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 24 June 2015

Revised 20 April 2016

Accepted 28 May 2016

Available online 7 June 2016

### Keywords:

Two-phase flow

Free surface flow

Large eddy simulation

Level set method

Volume of fluid method

## ABSTRACT

An efficient three-dimensional two-phase flow model for simulation of free surface flows is developed. The method is based in the solution of Navier-Stokes equation for quasi-incompressible flows. The equations in generalized coordinates are solved by extension of the fully explicit MacCormack scheme, second order in time and fourth order in space. The free surface is implicitly captured by the zero Level Set of a smooth function and by the Ghost Fluid Method to capture accurately shape discontinuities for properties in the vicinity of the interface. Finally, the Volume of Fluid method is used to ensure mass conservation. Turbulence is described by large eddy simulation, where only the large-scale eddies are solved, while the small scales are modeled by using the selective structure function subgrid-scale model. Boundary shapes are represented through the immersed boundary method on the Cartesian grid. The numerical model is validated by some free surface problems. Numerical predictions by all cases are in good agreement with experimental data.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

## 1. Introduction

Turbulent flows problems involving free surfaces are presented in many environmental and engineering applications. However, accurate description of physical processes on free surface problems represents still a challenge, in view of the complexities of moving and deforming surfaces, nonlinear effects, large range of length scales and time scales, high turbulence, among other causes. Free surface represents a dynamic boundary, whose position and shape change in response to the interaction between the phases present; therefore, use of special techniques is needed to define the location and movement of the interface. Owing to the complexity of free surface flows, a large number of modeling methods for interface simulations have been developed. These approaches can be divided into two great classes: moving-grid methods (Lagrangian approach) and fixed-grid methods (Eulerian approach). In addition to these methods, there are special cases, such as particle methods, in which grids are not needed.

In Lagrangian description, coordinate system follows the movement of the fluid particles. The interface is a boundary between two subdomains of the grid, so the free surface is sharply defined. Although it seems the most natural way to simulate free

surface flows, this method is restricted to well-defined simple surface topologies, because the grid has to be re-meshed or refined when the interface undergoes large deformations and topology changes. Meanwhile, in Eulerian, the mesh is fixed in the space. This method introduces a new variable in the model to track the presence or not of one of the two phases in the whole domain. Eulerian methods are the most used ones, since they permit to take into account large topology changes and discontinuities. Methods that fall into this category include the Volume-of-Fluid (VOF) method introduced by [1] and the Level-Set (LS) method introduced by [2]. In the former, a steep function, transported by the fluid flow, is defined in the whole computational domain. This function, which represents the fraction of the volume, is set to unity everywhere in one phase and zero in the other phase. In those regions where both phases are presented, free surface is captured through a interface reconstruction procedure. The mayor advantage of this method is the mass conserving properties. Nonetheless, the interface reconstruction is a laborious computational task. In addition, modeling errors stem from the difficulties to control the interface thickness, due to numerical diffusion. In the LS approach, the interface is simulated by the evolution of the zero level of a time-dependent smooth function transported by the fluid flow. This approach allows the simulation of complex surface evolution including topological merging and breaking; moreover, the computation of geometrical quantities like the normal and

\* Corresponding author.

E-mail address: [msalinasv@ii.unam.mx](mailto:msalinasv@ii.unam.mx) (M. Salinas-Vázquez).



## **LARGE EDDY SIMULATION OF CONFINED PORT-ARRAY IN A MIXING PROCESS**

**Christian Lagarza-Cortes, Jorge Ramírez-Cruz,  
Martín Salinas-Vázquez, Eliseo Martínez-Espinosa and  
William Vicente y Rodríguez**

Instituto de Ingeniería  
Universidad Nacional Autonoma de Mexico  
Av. Universidad 3000  
Circuito Exterior S/N Delegación Coyoacán  
C.P. 04510, C.U. México City  
México

### **Abstract**

A confined turbulent round jet immersed in an arrangement of annular jets, called port-array, is studied numerically. The objective is to evaluate numerically the effect of annular jets in the structure of the turbulence in the central jet. Three-dimensional large eddy simulation technique is used for turbulence modelling. In order to analyze the state of the turbulence, anisotropy invariant map and novel 3D-anisotropy invariant map are used. Results show earlier transition to turbulence in the central jet by the effect of annular jets. At the same time, the annular jets modify the structure of the turbulence of the central jet, thereby the mean spanwise fluctuations begin to be more important and intense. The transport of the properties due to the intensification in these fluctuations improves the mixing process.

---

Received: October 18, 2016; Accepted: November 1, 2016

2010 Mathematics Subject Classification: 76G25.

Keywords and phrases: port-array, confinement, mixing, LES, invariant analysis.



# Large-eddy simulation of transcritical and supercritical jets immersed in a quiescent environment

Cite as: Phys. Fluids 31, 025104 (2019); doi: 10.1063/1.5054797  
Submitted: 3 September 2018 • Accepted: 26 December 2018 •  
Published Online: 4 February 2019



Christian Lagarza-Cortés,<sup>1</sup> Jorge Ramírez-Cruz,<sup>1</sup> Martín Salinas-Vázquez,<sup>1</sup> William Vicente-Rodríguez,<sup>1</sup> and José M. Cubos-Ramírez<sup>2</sup>

## AFFILIATIONS

<sup>1</sup>Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Interior de Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 04510, Mexico

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos, 62209, Mexico

## ABSTRACT

The study and understanding of transcritical and supercritical jet flow are critical in liquid rockets, gas turbines, and diesel engines, as high-pressure atmospheres in these devices' mixing chambers drastically modify the morphology of their jets. In the transcritical jet, new elongated entities called finger-like structures appear and characterize the fluid flow phenomenon. This study examines these entities by simulating two classical cases based on Mayer's experiments. The turbulence is described by the Large-eddy simulation technique with a sub-grid scale model known as the selective structures-function model. Real-gas behavior is evaluated by the Soave-Redlich-Kwong equation, and the transport properties are estimated by Chung's methods. From the results, a longitudinal modulation which triggers an azimuthal modulation is observed. Then, bulges are formed on the jet surface. Cross-sectional views reveal pairs of streamwise vortices with inverted rotational directions, which are located on either side of the bulges (on the outer edge of the dense core). These transversal, turbulent movements seem to be engaged with the elongation of the bulges and the subsequent formation of finger-like structures. The existence of the counter-rotating vortices is related with the baroclinic vorticity. Then, since one may refer to the Rayleigh-Taylor instability when it is baroclinically generated, this instability could give an explanation of the origin of the finger-like structures. Transcritical parcels emitted at the end of the dense core are bounded by a thermal-shield. Finger-like structures are not observed in the supercritical case. The thermal-shield is absent from the supercritical parcels.

Published under license by AIP Publishing. <https://doi.org/10.1063/1.5054797>

## I. INTRODUCTION

In the physics of fluids, a single jet is a stream of fluid that is immersed into a quiescent environment. The injectant is commonly analyzed in either its liquid or gas phase. A liquid jet is characterized by the surface instability on the interface (i.e., breakup mechanism), which represents an axisymmetric discontinuity between the jet and the surrounding environment. A gas jet is characterized by axisymmetric instability on the shear layer, which has low- or moderate-density gradients (here, a discontinuity no longer exists). These two types of jets are characterized by different phenomena; however, there is an intermediate state of matter in which a jet

exhibits thermo-physical properties and characteristics similar to those observed in liquid and gas jets.<sup>1</sup> This is the supercritical state and is reached when the pressure ( $p$ ) and temperature ( $T$ ) of the injected fluid exceed its thermodynamic critical values ( $p_{cr}$  and  $T_{cr}$ ), as shown in Fig. 1(a). The distinction between the liquid and gas phases disappears, and the substance becomes a supercritical fluid (ScF). This fluid presents some singularities. Near the critical point (CP), the fluid's thermal and transport properties present high levels of nonlinear behavior.<sup>2</sup> Its isobaric heat capacity quickly grows, improving its energy storage capacity, as shown in Fig. 1(b). In addition, certain properties such as surface tension and

# Bibliografía

- R. Alcamo, G. Micale, F. Grisafi, A. Brucato, and M. Ciofalo. Large-eddy simulation of turbulent flow in an unbaffled stirred tank driven by a Rushton turbine. *Chemical Engineering Science*, 60(8-9):2303–2316, 2005. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.11.017>.
- C. André, J. F. Demeyre, C. Gatumel, H. Berthiaux, and G. Delaplace. Dimensional analysis of a planetary mixer for homogenizing of free flowing powders: Mixing time and power consumption. *Chemical Engineering Journal*, 198-199:371–378, 2012. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2012.05.069>.
- G. Ascanio, B. Castro, and E. Galindo. Measurement of power consumption in stirred vessels—a review. *Chemical Engineering Research and Design*, 82:1282–1290, 2004. URL <http://dx.doi.org/10.1205/cerd.82.9.1282.44164>.
- M. Assirelli, W. Bujalski, A. Eaglesham, and A. W. Nienow. Macro-and micromixing studies in an unbaffled vessel agitated by a Rushton turbine. *Chemical Engineering Science*, 63(1):35–46, 2008. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.07.074>.
- F. Auger, G. Delaplace, L. Bouvier, A. Redl, Christophe André, and M. Morel. Hydrodynamics of a planetary mixer used for dough process: Influence of impeller speeds ratio on the power dissipated for Newtonian fluids. *Journal of Food Engineering*, 118(4):350–357, 2013. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.04.012>.
- M. Bertrand, D. Parmentier, O. Lebaigue, E. Plasari, and F. Ducros. Mixing study in an unbaffled stirred precipitator using LES modelling. *International Journal of Chemical Engineering*, 2012, 2012a. URL <http://dx.doi.org/10.1155/2012/450491>.
- M. Bertrand, E. Plasari, O. Lebaigue, P. Baron, N. Lamarque, and F. Ducros. Hybrid LES-multizonal modelling of the uranium oxalate precipitation. *Chemical Engineering Science*, 77:95–104, 2012b. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2012.03.019>.
- S. Bhattacharya, D. Hebert, and Suzanne M. Kresta. Air entrainment in baffled stirred tanks. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(5 A):654–664, 2007. URL <https://doi.org/10.1205/cherd06184>.
- A. Busciglio, G. Caputo, and F. Scargiali. Free-surface shape in unbaffled stirred vessel: Experimental study via digital image analysis. *Chemical Engineering Science*, 104:868–880, 2013. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.10.019>.
- A. Busciglio, F. Grisafi, F. Scargiali, and A. Brucato. Mixing dynamics in uncovered unbaffled stirred tanks. *Chemical Engineering Journal*, 254:210–219, 2014. URL <https://doi.org/10.1016/j.cej.2014.05.084>.
- A. Busciglio, F. Scargiali, F. Grisafi, and A. Brucato. Oscillation dynamics of free vortex surface in uncovered unbaffled stirred vessels. *Chemical Engineering Journal*, 285:477–486, 2016. URL <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.10.015>.
- G. M. Cartland Glover and J. J. Fitzpatrick. Modelling vortex formation in an unbaffled stirred tank reactors. *Chemical Engineering Journal*, 127(1-3):11–22, 2007. URL <https://doi.org/10.1016/j.cej.2006.09.019>.

- Y. C. Chang, T. Y. How, B. Merriman, and S. Osher. A level-set formulation of eulerian interface capturing method for incompressible fluid flow. *Journal of Computational Physics*, 124:449–464, 1996. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.1996.0072>.
- J. J. Cheng and I. Manas-Zloczower. Flow Field Characterization in a Banbury Mixer. *Intern. Polymer Processing*, 3, 1990.
- S. Chi-Wang and S. Osher. Implementation of Essentially Non-Oscillatory Shock Capturing Schemes. *Journal of Computational Physics*, 77:439–471, 1988. URL [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90177-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90177-5).
- M. Ciofalo, A. Brucato, F. Grisafi, and N. Torracca. Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers. *Chemical Engineering Science*, 51(14):3557–3573, 1996. URL [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(96\)00004-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(96)00004-8).
- J. R. Clausen. Entropically damped form of artificial compressibility for explicit simulation of incompressible flow. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 87(1):1–12, 2013. URL <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.87.013309>.
- M. J. Clifford, S. M. Cox, and M. D. Finn. Reynolds number effects in a simple planetary mixer. *Chemical Engineering Science*, 59(16):3371–3379, 2004. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2004.03.043>.
- R. K. Connelly and J. Valenti-Jordan. Mixing analysis of a Newtonian fluid in a 3D planetary pin mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, 86(12):1434–1440, 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2008.08.023>.
- J. M. Cubos-Ramírez, J. Ramírez-Cruz, M. Salinas-Vázquez, W. Vicente-Rodríguez, E. Martínez-Espinosa, and C. Lagarza-Cortés. Efficient two-phase mass-conserving level set method for simulation of incompressible turbulent free surface flows with large density ratio. *Computers and Fluids*, 136:212–227, 2016. URL <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.05.032>.
- G. Delaplace, Rajeev K. Thakur, L. Bouvier, C. André, and C. Torrez. Dimensional analysis for planetary mixer: Mixing time and Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science*, 62(5):1442–1447, 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2006.11.039>.
- J. Derksen and H. E. A. Van den Akker. Large eddy simulations on the flow driven by a Rushton turbine. *AIChE Journal*, 45(2):209–221, 1999. URL <https://doi.org/10.1002/aic.690450202>.
- S. S. Deshpande, K. K. Kar, J. Walker, J. Pressler, and W. Su. An experimental and computational investigation of vortex formation in an unbaffled stirred tank. *Chemical Engineering Science*, 168:495–506, 2017. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.04.002>.
- E. R. G. Eckert and J. N. Shadid. Viscous heating of a cylinder with finite length by a high viscosity fluid in steady longitudinal flow-1. Newtonian fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(2):321–334, 1989. URL [http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90179-8](http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310(89)90179-8).
- R. P. Fedwik, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152:457–492, 1999. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.1999.6236>.
- S. K. Godunov. A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mat. Sb.*, 47:357–393, 1959.
- T. Gottlieb. Dissipative two-four methods for time dependent problems. *Mathematics of Computation*, 30:703—, 1976.
- J. N. Haque, T. Mahmud, K. J. Roberts, and D. Rhodes. Modeling turbulent flows with free-surface in unbaffled agitated vessels. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45(8):2881–2891, 2006. URL <https://doi.org/10.1021/ie051021a>.

- N. Harnby. *Mixing Process Industries*. Butterworth Heinemann, Londres, Inglaterra, 1992.
- J. Hart. Comparison of Turbulence Modeling Approaches to the Simulation of a Dimpled Sphere. *Procedia Engineering*, 147:68–73, 2016. URL <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.06.191>.
- A. Harten. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes iii. *Journal of Computational Physics*, 71:231–303, 1987.
- H. Hartmann, J. J. Derksen, and H. E. A. Van den Akker. Mixing Times in a Turbulent Stirred Tank by Means of LES. *AIChE Journal*, 52(11):3696–3706, 2006. URL <https://doi.org/10.1002/aic.10997>.
- J. Jeong and F. Hussain. On the identification of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 285:69–94, 1995. URL <https://doi.org/10.1017/S0022112095000462>.
- G. Shan Jiang and D. Peng. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21(6):2126–2143, 2000. URL <https://doi.org/10.1137/S106482759732455X>.
- N. Lamarque, B. Zoppé, O. Lebaigue, Y. Dolias, M. Bertrand, and F. Ducros. Large-eddy simulation of the turbulent free-surface flow in an unbaffled stirred tank reactor. *Chemical Engineering Science*, 65(15):4307–4322, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.03.014>.
- S. K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1):16–42, 1992. URL [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90324-R](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90324-R).
- M. Lesieur and O. Métais. New Trends in Large-Eddy Simulations of Turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28(1):45–82, 1996. URL <http://doi.org/10.1146/annurev.fluid.28.1.45>.
- J. Li, B. Deng, B. Zhang, X. Shen, and C. N. Kim. CFD simulation of an unbaffled stirred tank reactor driven by a magnetic rod: Assessment of turbulence models. *Water Science and Technology*, 72(8):1308–1318, 2015. URL <https://doi.org/10.2166/wst.2015.314>.
- J. Liang, X. Zhan, Y. Yang, X. Li, and T. Shi. A numerical investigation of the effects of blade’s geometric parameters on the power consumption of the twin-blade planetary mixer. *Advances in Mechanical Engineering*, 8(10):1–12, 2016. URL <http://dx.doi.org/10.1177/1687814016672121>.
- J. Liang, R. He, X. Zhan, and T. Li, X. and Shi. Numerical analysis in the effects of blade’s arrangement on the torque load characteristics of the three-blade planetary mixer. *AIP Conference Proceedings*, 1864, 2017. URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.4992905>.
- T. Mahmud, J. N. Haque, K. J. Roberts, D. Rhodes, and D. Wilkinson. Measurements and modelling of free-surface turbulent flows induced by a magnetic stirrer in an unbaffled stirred tank reactor. *Chemical Engineering Science*, 64(20):4197–4209, 2009. URL <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.06.059>.
- O. Métais and M. Lesieur. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably-stratified turbulence. *J. Fluid Mech*, 239:157–194, 1992. URL <https://doi.org/10.1017/S0022112092004361>.
- G. Montante, F. Magelli, and A. Paglianti. Fluid-dynamics characteristics of a vortex-ingesting stirred tank for biohydrogen production. *Chemical Engineering Research and Design*, 91(11):2198–2208, 2013. URL <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.04.008>.
- R. R. Nourgaliev, T. N. Dinh, and T. G. Theofanous. A pseudocompressibility method for the numerical simulation of incompressible multifluid flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 30:901–937, 2004. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2004.03.010>.

- S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer-Verlag, New York, United States of America, 2003.
- S. Osher and J. A. Shethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79:12–49, 1988. URL [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90002-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90002-2).
- E. Paul. *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*. John Wiley & Sons, New Jersey, Estados Unidos de América, 2004.
- J. Rousseaux, H. Muhr, and E. Plasari. Mixing and micromixing times in the forced vortex region of unbaffled mixing devices. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 79: 697–707, 2001. URL <https://doi.org/10.1002/cjce.5450790501>.
- E. Rouy. A viscosity solutions approach to shape-from-shading. *SIAM J*, 29:867–884, 1992.
- M. Salinas-Vázquez, W. Vicente, C. González-Rodríguez, E. Barrios-Bonilla, and A. Espinosa-Gayosso. Large Eddy Simulation of a jet flow with a suction/ejection system using immersed boundary conditions. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 98(10-11):618–627, 2010. URL <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2010.06.003>.
- F. Scargiali, A. Busciglio, F. Grisafi, and A. Brucato. Mass transfer and hydrodynamic characteristics of unbaffled stirred bio-reactors: Influence of impeller design. *Biochemical Engineering Journal*, 82:41–47, 2014. URL <http://doi.org/10.1016/j.bej.2013.11.009>.
- M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114:146–159, 1994. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1155>.
- P. A. Tanguy, F. Thibault, C. Dubois, and A. Ait-Kadi. Mixing hydrodynamics in a double planetary mixer. *Chemical Engineering Research and Design*, 77:318–324, 1999. URL <http://dx.doi.org/10.1205/026387699526241>.
- C. Vella, F. Grisafi, G. Micale, L. Rizzuti, and A. Brucato. Near impeller flow field in an unbaffled stirred tank. *Proceedings of the 11th European Conference on Mixing*, pages 629–636, 2003.
- M. R. Visbal and D. V. Gaitonde. On the use of higher-order finite-difference schemes on curvilinear and deforming meshes. *Journal of Computational Physics*, 181(1):155–185, 2002. URL <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7117>.
- F. Yang, S. Zhou, and C. Zhang. Free-Surface Turbulent Flow in an Eccentric Stirred Tank. *Chemical Engineering and Technology*, 40(3):561–570, 2017. URL <https://doi.org/10.1002/ceat.201600354>.
- F. L. Yang and S. J. Zhou. Free Surface Turbulent Flow in an Unbaffled Stirred Tank: Detached Eddy Simulation and VOF Study. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 29(3):395–403, 2015. URL <https://doi.org/10.15255/CABEQ.2014.2056>.
- J. Yang and E. Balaras. An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 215(1):12–40, 2006. URL <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.10.035>.
- M. Yianneskis, Z. Popielek, and J. H. Whitelaw. An experimental study of the steady and unsteady flow characteristics of stirred reactors. *Journal of Fluid Mechanics*, 175:537–555, 1987. URL <https://doi.org/10.1017/S002211208700051X>.
- H. S. Yoon, S. Balachandar, and M. Y. Ha. Large eddy simulation of flow in an unbaffled stirred tank for different Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, 21, 2009. URL <https://doi.org/10.1063/1.3210776>.
- A. Zamiri and J. T. Chung. Ability of urans approach in prediction of unsteady turbulent flows in an unbaffled stirred tank. *International Journal of Mechanical Sciences*, 133 (August):178–187, 2017. URL <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.08.008>.

- G. Zhou, P.A. Tanguy, and C. Dubois. Power Consumption in a Double Planetary Mixer with Non-Newtonian and Viscoelastic Materials. *Chemical Engineering Research and Design*, 78(3):445–453, 2000. URL <http://dx.doi.org/10.1205/026387600527347>.