



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

ESTUDIO NUMÉRICO DEL FLUJO CON SUPERFICIE LIBRE EN UN TANQUE
AGITADO MEDIANTE UN IMPULSOR PLANO

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

PRESENTA:
JORGE RAMÍREZ CRUZ

TUTOR PRINCIPAL
MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

MÉXICO, D.F. ENERO 2015

JURADO ASIGNADO:

Presidente: DR. JAIME GONZALO CERVANTES DE GORTARI

Secretario: DR. FRANCISCO JAVIER SOLORIO ORDAZ

Vocal: DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

1 er. Suplente: DR. GABRIEL ASCANIO GASCA

2 do. Suplente: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

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

TUTOR DE TESIS:

DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

FIRMA

Agradecimientos

Quiero agradecer a mis padres, hermanas y a ti Ana, por todo el amor y apoyo incondicional que me brindan día a día. Al Dr. Martín Salinas por su amistad, apoyo y todo el conocimiento que me ha transmitido. Al Dr. William Vicente y al Dr. Eliseo Martínez por su amistad y consejos. Así como a todos mis amigos fuera y dentro del laboratorio de CFD por todas esas horas compartidas.

Por último gracias al CONACyT, así como al proyecto PAPIIT IN106112 por su apoyo económico.

Resumen

En el presente trabajo se desarrolló un código numérico para la simulación de grandes escalas (LES) en un tanque agitado, abierto y sin desviadores. Dado que en estos sistemas, la superficie del líquido se deprime o deforma debido al movimiento rotacional del fluido, sus efectos se incluyeron en la solución; se ocupó el método *Level-Set* para la localización espacial y evolución temporal de la superficie libre, así como, el método *Ghost-Fluid* para las condiciones de frontera inmersas en el dominio computacional. La configuración geométrica analizada fue: un tanque cilíndrico de fondo plano, además, el movimiento del líquido fue promovido mediante un disco rotando y montado en la parte inferior. Debido a que éste tipo de simulaciones tiene un alto costo computacional, con tiempos de cálculo extensos (semanas), sólo se analizó su comportamiento a tres diferentes condiciones de operación basadas en el número de *Froude* ($Fr = 0,440$, $Fr = 0,637$ y $Fr = 0,895$) manteniendo en todas las mismas relaciones geométricas (diámetro del disco, tanque y altura de líquido en reposo), encontrando la siguiente relación lineal para la profundidad de la depresión $\Delta\psi = 0,7048Fr - 0,1557$. Asimismo, los perfiles de velocidad promedio obtenidos fueron comparados con los trabajos de Nagata [1975] y Busciglio et al. [2013], identificando dos zonas comúnmente descritas en la literatura, conocidas como: Región de Vórtice Forzado (RVF) y Región de Vórtice Libre (RVL), donde la primera hace referencia al movimiento de cuerpo rígido en la zona central del tanque, observando, que para la configuración utilizada, el fluido rota a 0,3 veces la velocidad angular del disco. Además, se analizó y describió la hidrodinámica del líquido dentro del tanque, hallando dentro de la RVL la existencia de un flujo secundario y altos niveles de energía cinética turbulenta que influirán de manera positiva en el mezclado, a diferencia de la RVF que carece de éstas dos.

La estructura de la tesis se dividió de la siguiente manera:

- En el primer capítulo se hace una breve introducción a los tanques agitados y sus relaciones geométricas convencionales. También, se presenta el fenómeno físico que ocurre en los tanques agitados sin desviadores abiertos: la depresión formada en la superficie libre del líquido.
- En los capítulos segundo y tercero se presenta la metodología de solución: En el primero de ellos, se muestran las ecuaciones que gobiernan a los fluidos, así como, la forma de modelar el tensor submalla resultante del filtrado de las ecuaciones, esto mediante el modelo de estructura. En el capítulo tercero, se describe el método *Level-Set* utilizado para la solución y evolución de la superficie libre, así como el uso condiciones de frontera simplificadas con el fin de resolver sólo la fase líquida, además de su imposición en el dominio computacional usando el método *Ghost Fluid*.
- El arreglo geométrico utilizado se muestra en el capítulo cuarto, así como las características del dominio computacional (malla, densidad de nodos y la forma de modelar el tanque e impulsor). También, se presenta las tres condiciones de operación, condiciones iniciales y la forma en que se evitaron tiempos excesivos de computo debido al uso la alternativa LES. Lo anterior mediante la paralelización del código numérico, la utilización de una malla gruesa y su refinamiento a lo largo del cálculo numérico.

- Los resultados obtenidos de cada simulación y su análisis son presentados en el quinto y penúltimo capítulo. Para finalizar el presente trabajo, se muestran las conclusiones y recomendaciones hechas para trabajos futuros.

Índice general

Resumen	III
Motivación y objetivos	VII
1. Introducción	1
1.1. Tanque o contenedor	1
1.2. Desviadores	2
1.3. Impulsor	3
1.4. Tanque agitado sin desviadores	4
1.4.1. Teoría de Nagata	6
1.4.2. Modelo de las dos zonas	8
1.4.3. Otros trabajos	10
2. Ecuaciones de Gobierno y Esquema Numérico	11
2.1. Ecuaciones de Flujo	11
2.2. Esquema numérico y modelo de turbulencia	12
2.2.1. Simulación de Grandes Escalas (LES)	12
2.3. Esquema Numérico	15
3. Modelo Bifásico	17
3.1. Método <i>Level-set</i>	17
3.1.1. Reinicialización	19
3.2. Esquemas ENO y WENO	19
3.3. Integración Temporal	21
3.4. Condiciones de frontera en la interfase o superficie libre	21
3.5. Método <i>Ghost Fluid</i>	22
3.5.1. Extrapolación	23
4. Configuración del sistema y condiciones de operación	27
4.1. Modelado del tanque e impulsor	28
4.2. Condiciones iniciales y estado estacionario	30
5. Resultados	33
5.1. Validación	33
5.2. Caracterización de la superficie libre	34
5.3. Análisis de los campos de velocidades promedio	36
5.4. Región de vórtice forzado y libre	39
5.5. Anillos de presión	39
5.6. Mezclado	43
6. Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros	49
6.1. Trabajos futuros	49

Motivación y objetivos

El mezclado es uno de los principales procesos en diferentes tipos de industria, por lo que se invierten grandes cantidades de dinero en mejorar la forma en la que es llevado a cabo. Antes, el diseño de los sistemas de mezclado era considerado un *Arte*, basado en métodos empíricos y sin un fundamento teórico, sin embargo, conforme los sistemas crecieron, el consumo de energía y otros factores tomaron relevancia, entonces, se comenzaron a utilizar ciertas técnicas para su análisis y comprensión. Hoy en día la velocimetría por imágenes de partículas (PIV), la velocimetría láser doppler (LDV), así como la dinámica de fluidos computacional (CFD) se ocupan para incrementar el rendimiento y funcionamiento de los mezcladores, y así, mejorar la calidad del producto, disminuyendo los costos de operación.

El objetivo de este trabajo es formular una herramienta numérica capaz de recrear de forma exacta y adecuada la física involucrada en sistemas de mezclado con superficie libre, con el fin de analizar y describir la hidrodinámica en tanques agitados sin desviadores. Además, de forma particular:

- Validar el código numérico utilizando mediciones experimentales (PIV).
- Analizar la topología de la superficie libre a diferentes condiciones de operación.
- Estudio de la hidrodinámica del flujo en el tanque y su influencia en el mezclado.

Capítulo 1

Introducción

El mezclado puede definirse como la reducción de una inhomogeneidad, ya sea de concentraciones, fases, temperaturas, etc; además de ser acompañado de transferencia de calor o masa. Es uno de los procesos más relevantes en diferentes tipos de industria, dentro de las cuales se encuentra la farmacéutica, de polímeros, biotecnológica y alimentos.

Una forma común de clasificarlo es mediante las fases involucradas en el mezclado, las más encontradas son:

- Mezcla gas-gas.
- Gases con líquidos: Dispersión.
- Gases con sólidos granulares: Fluidización, secado.
- Líquidos dentro de gases: Atomización.
- Líquido con líquido: Disolución, emulsificación, dispersión.
- Líquido con sólidos granulares: Suspensión.
- Sólidos con sólidos: Mezclado de polvos.

Debido a la gran cantidad de operaciones de mezclado, existe una extensa lista de equipos que cubren diferentes necesidades. En mezclas gas-líquido, líquido-sólidos granulares, así como líquido-líquido (mezclas donde la fase líquida se encuentra de forma continua), uno de los principales equipos utilizados son los tanques agitados mecánicamente. La idea básica de este dispositivo es transferir energía cinética (movimiento al fluido) mediante un agitador o impulsor. En la Fig.1.1 se muestra un diseño básico con algunos aditamentos. En la parte superior del tanque, se coloca un motor con una flecha donde es montado el impulsor; además son utilizados desviadores flujo en la sección lateral. Algunos aditamentos suelen ser, por ejemplo, serpentines o chaquetas para operaciones de transferencia de calor; así como dispersores de gas utilizados en aireación o transferencia de masa.

El tipo de impulsor, altura de líquido, características geométricas, así como los aditamentos utilizados serán parámetros a definir dependiendo del tipo de operación. Además, también influirán en la cantidad de energía necesaria para llevar a cabo el proceso, variable fundamental en operaciones de mezclado. Algunos de estos parámetros serán discutidos a fondo más adelante.

1.1. Tanque o contenedor

Comúnmente son tanques cilíndricos de diámetro T que va desde $0,1[m]$ (equipo de laboratorio) hasta $10[m]$ (sofisticadas instalaciones industriales). Cuando el impulsor es colocado a la mitad de la

distancia entre el fondo y la superficie del líquido, la altura de llenado óptima es una vez el diámetro del tanque ($H = T$). Sin embargo, en algunas operaciones gas-líquido con múltiples impulsores, la relación puede llegar a ser hasta tres veces el diámetro ($H = 3T$). El fondo del tanque puede ser plano, cóncavo o cónico.

1.2. Desviadores

Son usados para prevenir el movimiento de rotación o tangencial en el fluido (causante de la formación de una depresión en la superficie), así como, para incrementar el movimiento convectivo dentro del tanque. Típicamente son colocados cuatro desviadores, de forma simétrica y a ras de la pared. Una medida estándar de su ancho suele ser de $d_w = T/12$. Cuando hay presencia de sólidos o transferencia de calor debido a una chaqueta, se suele dejar cierto espacio entre el desviador y la pared (aproximadamente un sexto del ancho del desviador). Para líquidos con altas viscosidades, la depresión en la superficie libre del líquido suele ser despreciable, por lo que no son requeridos.

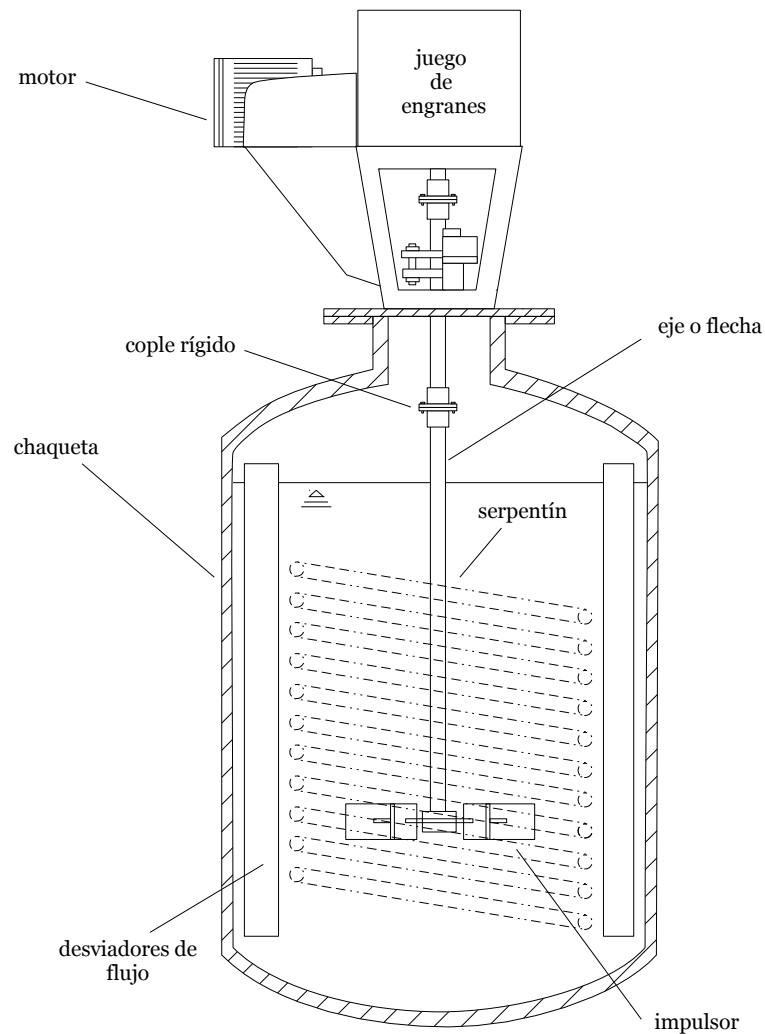


Figura 1.1: Tanque Agitado: Configuración típica.

1.3. Impulsor

Existe una gran cantidad de impulsores a nivel comercial; su elección debe ser basada en el buen entendimiento de la operación a realizar. Cuando se tiene una viscosidad de media a baja, una de las principales clasificaciones es debida a la dirección dominante en el flujo: ya sea del tipo axial o radial. En la fig.1.2 se muestran los patrones de flujo generados por una turbina *Rushton*, así como por una turbina de paletas inclinadas. En la primera, de tipo radial, el flujo es descargado desde el eje del tanque hacia sus paredes; 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 provocan un flujo paralelo al eje del impulsor, formando en general 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, el empuje se puede aumentar o disminuir dependiendo de la geometría del impulsor, por ejemplo, al modificar el ángulo de las paletas en la turbina, por lo que son adecuados en procesos de suspensión o adición de sólidos, ya que previenen su estratificación en el fondo del tanque; también suelen ser utilizados en procesos de transferencia de calor.

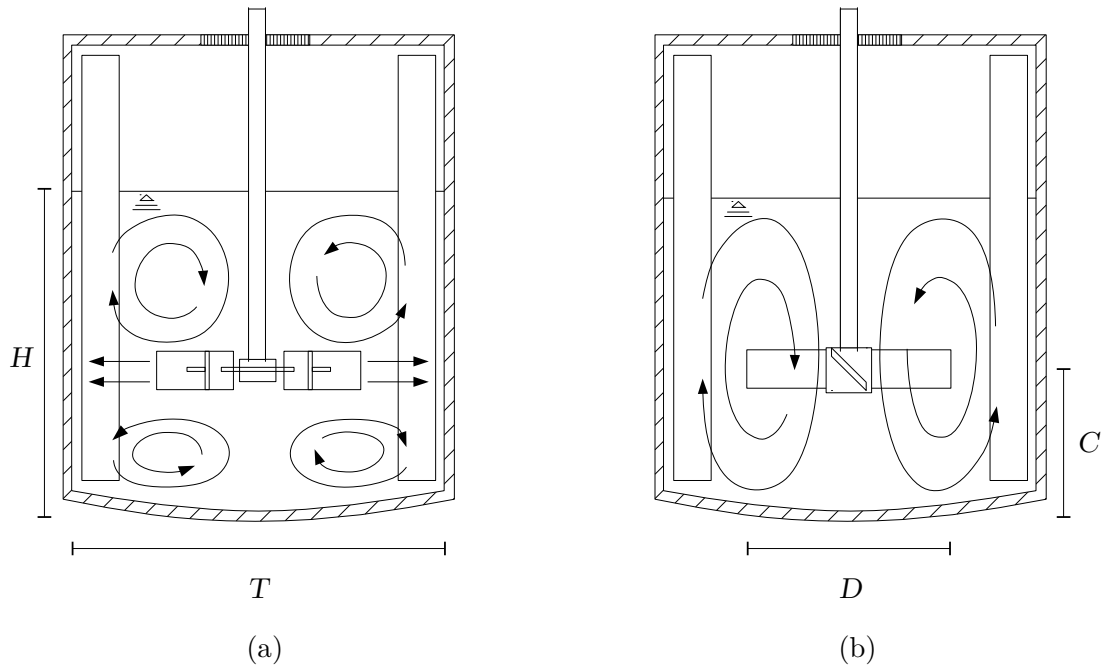


Figura 1.2: Patrones de flujo:(a) impulsor radial; (b) impulsor axial.

El diámetro del impulsor (D) suele ser mucho menor al del tanque, en el caso de la turbina *Rushton* las relaciones se encuentran $D/T = 0,3 - 0,7$. Las más pequeñas son ocupadas a altas velocidades y/o en operaciones de dispersión de gas. Debido a los tipos de motor y los reductores o juegos de engranes disponibles en el mercado, las velocidades estándar suelen ser 37, 45, 56, 68, 84, 100, 125, 155, 190 y 350 [rpm]. Sin embargo, con un juego de engranajes hecho a la medida, se pueden obtener diferentes velocidades de rotación a las estándar.

Para líquidos con altas viscosidades, la dispersión a lo largo del tanque es llevada a cabo mediante impulsores de claro estrecho (su diámetro es muy cercano al del tanque). El mezclado suele llevarse al cortar, comprimir, amasar, doblar; así como dispersar el fluido mediante el impulsor ayudado de las paredes. Trabajan a bajas velocidades, sin embargo, proveen una alta potencia por unidad de volumen. Algunos diseños comunes son las anclas y las cintas helicoidales.

En la tabla 1.1 se muestran clasificados algunos de los impulsores más utilizados en la industria, además, el diseño de cinco de ellos es ilustrado en la Fig.1.3.

Baja y media viscosidad		Alta viscosidad
Flujo radial	Flujo axial	
Turbina <i>Rushton</i> (fig.1.3.a)	Propela marina (fig.1.3.d)	Ancla
Rueda de paletas	Turbina de paletas inclinadas (fig.1.3.c)	Cinta helicoidal (fig.1.3.e)
<i>Scaba SRGT</i> (fig.1.3.b)	<i>Lighnin A310</i>	

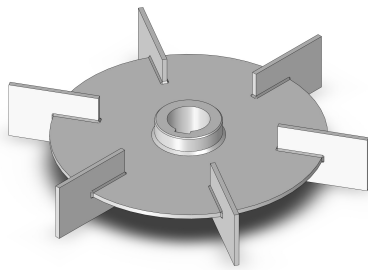
Tabla 1.1: Impulsores comunes y su clasificación.

1.4. Tanque agitado sin desviadores

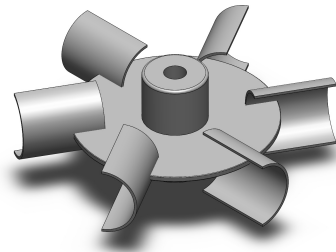
En las secciones anteriores se habló sobre la función de los desviadores: evitar la formación de una depresión bien definida en la superficie del líquido (Fig.1.4). Este fenómeno es resultado del movimiento de carácter rotacional en el fluido, en el cual, la fuerza centrífuga lo empuja hacia las paredes del tanque, y esa energía (ahora en forma de presión) provoca que el fluido ascienda, y se convierta en energía potencial (altura de fluido). Además, no es exclusivo de tanques agitados, se genera en todo recipiente con líquido al que se le es inducido un movimiento circulatorio. Puede ser observado en actividades de la vida diaria, por ejemplo, al agitar el café con una cuchara por la mañana o en agitadores magnéticos en el laboratorio de química.

En tanques agitados sin desviadores, la velocidad principal es angular o tangencial, teniendo baja movimiento axial y radial. La formación de esta depresión trae consigo ciertas características indeseables, por ejemplo, el mezclado suele ser lento y pobre [Busciglio et al., 2013]; existen problemas mecánicos por vibraciones en la flecha debido al arrastre de gas cuando la superficie del líquido se encuentra cerca o llega al nivel del impulsor [Rao and Kumar, 2009]. Esta última característica es conocida como condición crítica.

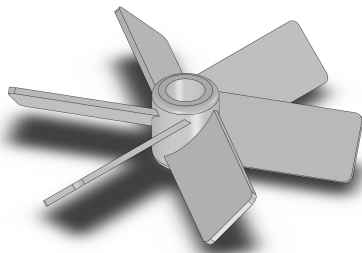
Debido a todo lo anterior, este tipo de configuración no es utilizada en procesos de mezclado en general. Sin embargo, se han encontrado aplicaciones en las que tienen un buen rendimiento comparado con diseños que usan desviadores, por ejemplo, en el hundimiento y disolución de polvos [Cartland and Fitzpatrick, 2007] o en sistemas de aireación [Rao and Kumar, 2009]. Asimismo, los desviadores pueden causar ciertas zonas muertas o de acumulación, lo cual debe ser evitado en ciertos procesos, como en el procesamiento de combustible nuclear [Lamarque et al., 2010, Mahmud et al., 2009], por lo que es necesario utilizar tanques sin desviadores. Entonces, es importante el comprender y describir la hidrodinámica del flujo en este tipo de configuración, así como la forma de la superficie del líquido y su influencia en el mezclado a diferentes condiciones de operación.



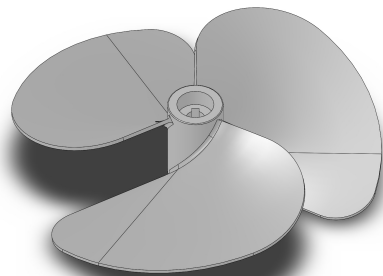
(a) Turbina *Rushton*



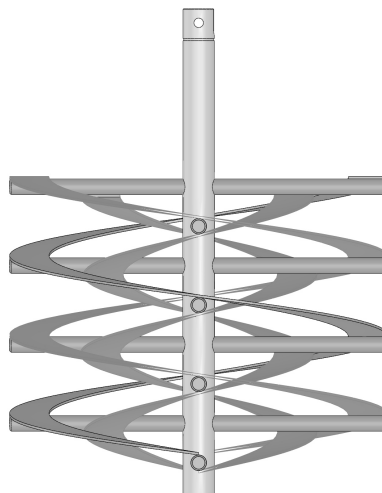
(b) *Scaba SRGT*



(c) Rueda de paletas inclinadas



(d) Propela marina



(e) Cinta helicoidal

Figura 1.3: Diseños de impulsores.

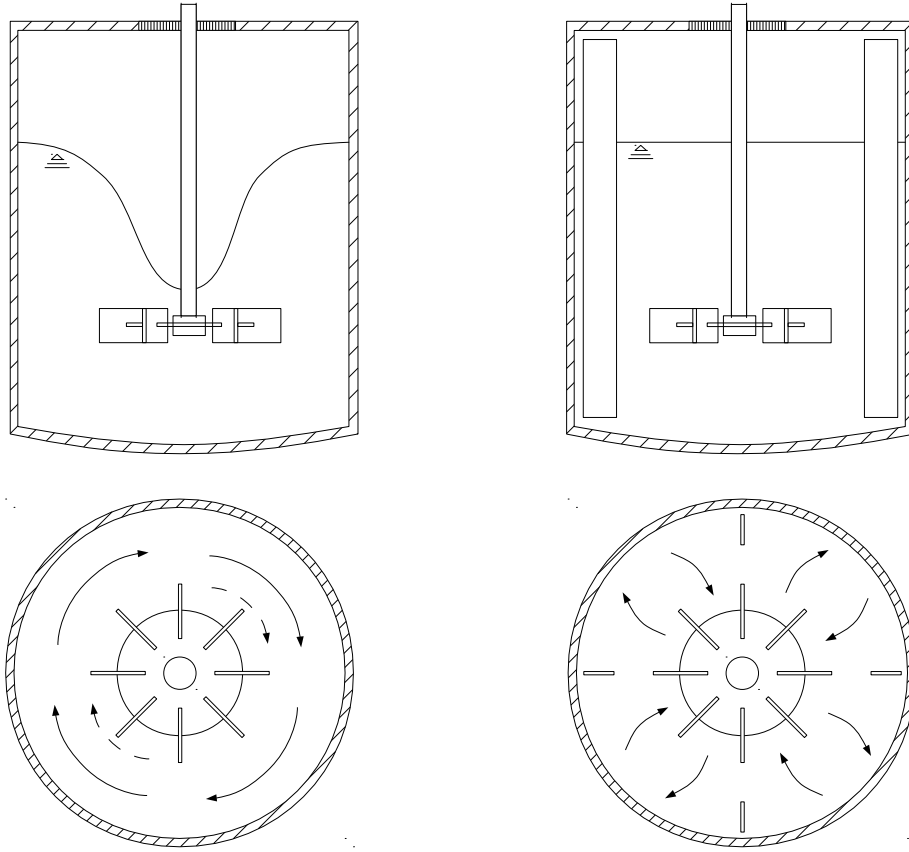


Figura 1.4: Depresión en la superficie del líquido: El movimiento rotacional del flujo provoca una diferencia de alturas en la superficie. Se utilizan desviadores para romper este fenómeno, además de mejorar la dispersión radial y axial dentro del tanque.

1.4.1. Teoría de Nagata

Uno de los primeros intentos por modelar la forma de la superficie del líquido fue realizado por Nagata [1975], quien estudió un tanque agitado sin desviadores con una turbina *Rushton* a distintas relaciones D/T , en un rango de $0,3 - 0,7$. La base de su trabajo fue simplificar las ecuaciones que gobiernan a los fluidos, y obtener entonces una expresión para calcular la forma y profundidad de la superficie libre del líquido.

Dentro de sus observaciones se tiene lo siguiente: la velocidad dentro del tanque es principalmente tangencial; es función de la distancia entre la flecha y las paredes del tanque (con excepción de las zonas cercanas al fondo). Entonces, basándose en un modelo de flujo potencial y suponiendo que la velocidad es puramente tangencial ($u_\theta = u_\theta(r), u_r = u_z = 0$) las ecuaciones de Navier-Stokes para coordenadas cilíndricas se simplifican de la siguiente forma:

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial r} = \rho \frac{u_\theta^2}{r} \\ \frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \end{cases} \quad (1.1)$$

se puede observar que la presión es función del radio y la altura $p = p(r, z)$, entonces realizando su diferencial total

$$dp = \frac{\partial p}{\partial r} dr + \frac{\partial p}{\partial z} dz \quad (1.2)$$

sustituyendo la ec. 1.1 en la ec. 1.2 y debido a que la presión en la superficie es uniforme $p(r, h) = p_0$ se obtiene la siguiente expresión

$$\frac{dh}{dr} = \frac{u_\theta^2}{rg} \quad (1.3)$$

donde $h(r)$ es la altura del fluido como función del radio. La expresión 1.3 dice que es posible obtener la forma de la superficie libre en el líquido si se conoce el perfil de velocidades $u_\theta(r)$.

Utilizando las siguientes relaciones adimensionales:

$$\theta = \frac{u_\theta}{u_{max}} = \frac{u_\theta}{\omega D/2} = \frac{u_\theta}{\pi N D} \quad (1.4)$$

$$\xi = \frac{r}{D/2} \quad (1.5)$$

$$\psi = \frac{h}{D} \quad (1.6)$$

$$Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (1.7)$$

siendo ω la velocidad de rotación en $[s^{-1}]$ y N en $[rps]$, además, Fr el número de Froude (Fuerzas de Inercia/Fuerzas de Gravedad), la ec.1.3 queda de la siguiente manera:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \pi^2 Fr \frac{\theta^2}{\xi} \quad (1.8)$$

Nagata [1975] observó que existen dos regiones de distinta hidrodinámica dentro del tanque, por lo que consideró el perfil de velocidades del tipo *Vórtice de Rankine* (ec. 1.9), desarrollado en 1876 por William John Macquorn Rankine. En particular, este comportamiento es encontrado en ciclones o tornados, además del flujo dentro del inodoro. Entonces, el tanque queda dividido en una zona cilíndrica interna, llamada Región de Vórtice Forzado (RVF) donde se tiene movimiento de cuerpo rígido; una zona una anular, conocida como Región de Vórtice Libre (RVL), donde el momentum angular se mantiene constante ($u_\theta r = cte$). Estas dos regiones son delimitadas por un radio crítico r_c . En este perfil la velocidad u_θ está definida de la siguiente forma

$$u_\theta(r) = \begin{cases} \omega r & \text{si } r \leq r_c \quad \dots \text{RVF} \\ \frac{\omega r_c^2}{r} & \text{si } r > r_c \quad \dots \text{RVL} \end{cases} \quad (1.9)$$

utilizando las relaciones adimensionales anteriores

$$\theta(\xi) = \begin{cases} \xi & \text{si } \xi \leq \xi_c \\ \frac{\xi_c^2}{\xi} & \text{si } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (1.10)$$

sustituyendo en la ec. 1.8 e integrando, el perfil de la superficie libre es definido por las siguientes expresiones:

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \psi_p - \frac{\pi^2 \xi_c^2}{2} Fr \left(2 - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} - \frac{\xi^2}{\xi_c^2} \right) & \text{si } \xi \leq \xi_c \\ \psi_p - \frac{\pi^2 \xi_c^2}{2} Fr \left(\frac{\xi_c^2}{\xi^2} - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} \right) & \text{si } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (1.11)$$

donde ψ_p es la altura del líquido en la pared del tanque (máxima a $\xi_p = T/D$). Imponiendo conservación de masa, es posible obtener el perfil $\psi(\xi)$ como función de la altura del líquido en reposo ($\psi_0 = H/D$) de la siguiente manera:

$$\psi_b = \psi_0 + \frac{\pi^2 \xi_c^2}{2} \frac{\xi_c^2}{\xi_w^2} Fr \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} \right) \quad (1.12)$$

$$\psi_p = \psi_0 + \frac{\pi^2 \xi_c^2}{2} \frac{\xi_c^2}{\xi_w^2} Fr \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} - 2 \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} \right) \quad (1.13)$$

siendo ψ_b la altura de líquido al centro del tanque (mínima). Restando ambas ecuaciones, se obtiene una expresión general para profundidad de la depresión

$$\Delta\psi = \frac{\pi^2 \xi_c^2}{2} \left(2 + \frac{\xi_c^2}{\xi_w^2} \right) Fr \quad (1.14)$$

En 1.14 se observa que la diferencia de alturas debida al movimiento rotacional es directamente proporcional al número de Froude, además, el único parámetro libre o desconocido es el radio crítico ξ_c , entonces, si se conoce la profundidad es posible encontrar la longitud crítica del sistema, o viceversa. Sin embargo, esta última tiene una mayor dificultad, ya que se necesita analizar el flujo con métodos experimentales, por ejemplo, mediante velocimetría por imágenes de partículas o anemometría láser Doppler, así como, por métodos numéricos. Nagata obtuvo la longitud crítica ξ_c con valores en un rango de 0,55 – 0,65, para una turbina *Rushton* a relaciones $D/T = 0,3 - 0,7$.

1.4.2. Modelo de las dos zonas

Recientemente en Busciglio et al. [2013] se empleó análisis digital de imágenes para estudiar la superficie libre. Utilizaron diferentes tipos de impulsor, velocidades y relaciones geométricas (posición

del impulsor y altura del líquido). En su trabajo, mantienen las mismas hipótesis hechas por Nagata [1975] (flujo puramente tangencial, inviscido y $u_\theta = u_\theta(r)$). Sin embargo, introducen una constante (α) que corrige el perfil de velocidades de la siguiente manera:

$$\theta(\xi) = \begin{cases} \alpha\xi & \text{si } \xi \leq \xi_c \\ \alpha\frac{\xi_c^2}{\xi} & \text{si } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (1.15)$$

al sustituir en la ec.1.8 de la misma forma que en el trabajo de Nagata, es posible obtener expresiones para describir la forma de la superficie del líquido

$$\psi(\xi) = \begin{cases} \psi_p - \frac{\alpha^2\pi^2\xi_c^2}{2} Fr \left(2 - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} - \frac{\xi^2}{\xi_c^2} \right) & \text{si } \xi \leq \xi_c \\ \psi_p - \frac{\alpha^2\pi^2\xi_c^2}{2} Fr \left(\frac{\xi_c^2}{\xi^2} - \frac{\xi_c^2}{\xi_p^2} \right) & \text{si } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (1.16)$$

las constantes α y ξ_c fueron obtenidas para diferentes configuraciones al ajustar los perfiles de la ec. 1.16 y las imágenes de los experimentos. Sus resultados son presentados en la Tabla 1.2. Al igual que en trabajo de Nagata, estas constantes son de gran utilidad si se desea conocer la profundidad de la superficie (en determinada configuración geométrica) y así poder evitar la condición crítica (el líquido llegue a nivel del impulsor), sin embargo, no describen en su totalidad la hidrodinámica del líquido y entonces, no analizan como es llevado a cabo el mezclado dentro del tanque.

C/T	H/T	α	ξ_c	$\xi_{c,Nagata}$
<i>Turbina Rusthon</i>				
1/3	1	0,898	0,780	0,680
1/3	3/4	0,870	0,790	0,651
1/3	5/4	0,969	0,738	0,687
1/2	1	0,870	0,780	0,660
1/3	1/6	0,945	0,788	0,705
<i>Impulsor A310</i>				
1/3	1	0,540	0,654	0,350
1/3	3/4	0,531	0,700	0,350
1/3	5/4	0,541	0,607	0,350
1/2	1	0,520	0,650	0,350
1/6	1	0,550	0,650	0,350
<i>Turbina de paletas inclinadas</i>				
1/3	1	0,743	0,739	0,530
1/3	3/4	0,723	0,754	0,532
1/2	1	0,714	0,735	0,517
1/6	1	0,755	0,717	0,527

Tabla 1.2: Coeficientes α y ξ_c para diferentes tipos de impulsor [Busciglio et al., 2013].

1.4.3. Otros trabajos

Entre otros trabajos tanto experimentales como numéricos, Smit and During [1991] analizaron mediante anemometría láser Doppler un tanque agitado por una turbina de 4 paletas inclinadas y $D/T = 0,8$, encontrando un perfil de velocidades diferente al propuesto por Nagata [1975], donde θ queda definido como:

$$\theta(\xi) = \begin{cases} 0,85\xi & \text{si } \xi \leq \xi_c \\ 0,85\xi_c \left(\frac{\xi_c}{\xi}\right)^{0,6} & \text{si } \xi > \xi_c \end{cases} \quad (1.17)$$

además, radio crítico de $\xi_c = 0,675$. En su estudio se encontró que para $Fr < 0,4$ la profundidad de la depresión se define como $\Delta\psi = 3,33Fr$. En Ciofalo et al. [1996] se realizó un análisis numérico a un tanque agitado por una turbina *Rushton*. Las simulaciones fueron llevadas a cabo mediante la alternativa de las ecuaciones promediadas de Reynolds (RANS), utilizando dos modelos de turbulencia: $\kappa - \epsilon$ y una ecuación de transporte para los esfuerzos turbulentos (*RST*). Deformaron la malla con un método iterativo para obtener la topología de la superficie libre, observando que, con el modelo $\kappa - \epsilon$ se tienen resultados erróneos y alejados de su contraparte experimental. En Mahmud et al. [2009] se estudió mediante la técnica de velocimetría laser Doppler el campo de velocidades y sus fluctuaciones en un tanque agitado por una barra cilíndrica magnética. Además, realizaron las simulaciones numéricas mediante el *software* ANSYS CFX-5.7 utilizando la alternativa RANS y el modelo de turbulencia *RST*, $\kappa - \epsilon$ y $\kappa - \omega$, así como el método Euleriano-Euleriano acoplado con el método *Volume-of-fluid* para la solución de la superficie libre, encontrando buenas predicciones utilizando el modelo *RST*, sin embargo, una pobre solución de la superficie libre del líquido.

Lamarque et al. [2010] señalan las deficiencias de la alternativa de simulación RANS en tanques agitados, esto debido al flujo complejo y la fuerte anisotropía de la turbulencia, especialmente como se ha visto, en el caso del modelo $\kappa - \epsilon$, que es incapaz de resolver los flujos secundarios dentro del tanque, dando por consiguiente resultados insatisfactorios. En su trabajo, se llevó a cabo la primer simulación de grandes escalas en tanques agitados, abiertos y sin desviadores. En este tipo de alternativa, las escalas más grandes de la turbulencia son resueltas, mientras que las pequeñas se modelan. Dado lo anterior, la de simulación LES tiene la capacidad de resolver gran cantidad de las anisotropías existentes. A diferencia de la alternativa RANS, donde todas las escalas de la turbulencia son modeladas. Sin embargo, el costo computacional de la primera es alto, por lo que la simulación realizada en su trabajo tomó cerca de 1000 horas de tiempo de cálculo o aproximadamente 42 días. La geometría analizada fue un tanque cilíndrico de fondo plano, con una relación $H/T = 1,65$; agitado mediante una barra cilíndrica magnética a $D/T = 0,47$.

Capítulo 2

Ecuaciones de Gobierno y Esquema Numérico

2.1. Ecuaciones de Flujo

Las ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas cartesianas pueden ser escritas en forma compacta de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{x}_i} = \mathbf{S} \mathbf{o}_i \quad (2.1)$$

donde \mathbf{U} es un vector de 4 componentes, definido por:

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3) \quad (2.2)$$

Las ec. 2.1 y 2.2 representan la evolución de la densidad (ec. continuidad) y la cantidad de movimiento para un flujo compresible. Sin embargo, para el caso de estudio (flujo incompresible) se utilizó el método descrito por Perrin and Hu [2006], donde se añade la siguiente ecuación de estado:

$$p = \rho c_s^2 \quad (2.3)$$

siendo c_s una pseudo-velocidad del sonido, con lo cual la ecuación de continuidad representa la evolución de la presión en el tiempo, y no solo es una restricción cinemática como en el caso incompresible. Un aspecto fundamental del método es que no se pierde la naturaleza hiperbólica-parabólica de las ecuaciones y entonces, pueden ser utilizados los métodos clásicos para la solución de flujos compresibles, además, cabe destacar que con forme c_s aumenta su valor ($c_s \rightarrow \infty$) se llega a las ecuaciones incompresibles.

La densidad está dada por:

$$\rho = \rho_0 + \delta_p$$

donde ρ_0 es una densidad de referencia y $\delta_p \ll \rho_0$, y

$$\hat{u}_1 = \frac{\rho(r)u_1}{\rho_0} = \hat{\rho}u_1$$

de la misma forma para \hat{u}_2, \hat{u}_3 .

$$\mathbf{F}_i : \begin{pmatrix} \hat{u}_1 u_i + \frac{\hat{p}}{\rho_0} \delta_{1i} + 2\nu S_{i1} \\ \hat{u}_2 u_i + \frac{\hat{p}}{\rho_0} \delta_{2i} + 2\nu S_{i2} \\ \hat{u}_3 u_i + \frac{\hat{p}}{\rho_0} \delta_{3i} + 2\nu S_{i3} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

siendo δ_{ij} la delta de Kronecker y \mathbf{S}_{ij} es el componente de la divergencia del tensor de deformación y se escribe:

$$\mathbf{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \right) \quad (2.5)$$

por último, el término fuente \mathbf{S}_0 es la fuerza de cuerpo debida a la gravedad definida como

$$\mathbf{S}_0 : \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \hat{g} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

2.2. Esquema numérico y modelo de turbulencia

2.2.1. Simulación de Grandes Escalas (LES)

La técnica Large-eddy simulation consiste en simular únicamente las grandes escalas del flujo; las pequeñas escalas son filtradas hacia afuera, sin embargo estadísticamente influyen en el movimiento. Las ecuaciones de LES son encontradas por la aplicación de un filtro espacial de bajo transcurso $G_\Delta(x)$ de tamaño vectorial Δ en las ecuaciones de Navier-Stokes. Esto elimina las escalas más pequeñas que el filtro de tamaño Δ llamando escala submalla.

Matemáticamente, la operación de filtrado corresponde a la integral de convolución de alguna cantidad $f(x, t)$ del flujo por la función filtro $G_\Delta(x)$, en la forma:

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{y}, t) G_\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (2.7)$$

La parte submalla es la desviación del flujo actual con respecto del campo filtrado.

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.8)$$

La aplicación del filtro a las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes produce:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \bar{\mathbf{F}}_3}{\partial x_3} = \bar{\mathbf{S}}_0 \quad (2.9)$$

Para flujos multifásicos (varios fluidos con diferente densidad) derivar un formalismo como sea posible al incompresible, es común en modelos de turbulencia estadística, en LES es realizado al introducir el promedio de Favre. Se denota por \tilde{f} el peso-densidad filtrado de f , definido como:

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (2.10)$$

Los flujos resueltos son:

$$\bar{\mathbf{F}}_i : \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 u_i + \frac{\hat{c}_s^2 \rho_0 \tilde{u}_i}{\rho_0} \delta_{1i} + 2\nu S_{i1} \\ \tilde{u}_2 u_i + \frac{\hat{c}_s^2 \rho_0 \tilde{u}_i}{\rho_0} \delta_{2i} + 2\nu S_{i2} \\ \tilde{u}_3 u_i + \frac{\hat{c}_s^2 \rho_0 \tilde{u}_i}{\rho_0} \delta_{3i} + 2\nu S_{i3} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Se puede introducir el tensor de esfuerzo-submalla $\bar{\mathfrak{S}}$ con componentes:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ij} = -\tilde{u}_i u_j + \hat{c}_s^2 \rho_0 \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (2.12)$$

el cual se puede dividir en sus partes isotrópica y desviador, la siguiente ecuación denota:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ij} = \underbrace{\mathfrak{S}_{ij} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \delta_{ij}}_{\tau_{i,j}} + \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \delta_{ij} \quad (2.13)$$

Entonces, las ec. 2.11 pueden ser leídas como:

$$\bar{F}_i : \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_1 \tilde{u}_i} + (\bar{p} - \frac{1}{3} \overline{\mathfrak{S}_{ll}}) \delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_2 \tilde{u}_i} + (\bar{p} - \frac{1}{3} \overline{\mathfrak{S}_{ll}}) \delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_3 \tilde{u}_i} + (\bar{p} - \frac{1}{3} \overline{\mathfrak{S}_{ll}}) \delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$\bar{\mathbf{F}}_i : \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_1 \tilde{u}_i} + \bar{\omega} \delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_2 \tilde{u}_i} + \bar{\omega} \delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_3 \tilde{u}_i} + \bar{\omega} \delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

El sistema descrito arriba se cierra haciendo uso de los modelos de submalla comunes basados en una viscosidad turbulenta,

$$\tau_{ij} \approx \bar{\rho} \nu_t \tilde{S}_{ij} \quad (2.16)$$

Los términos restantes no calculables son términos de viscosidad molecular y difusiva, que se pueden considerar de menor importancia cuando el número de Reynolds es suficientemente grande. Por lo

tanto, simplemente reemplazamos la ec. 2.15 por:

$$\bar{\mathbf{F}}_i : \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}_i \\ \bar{\rho}\tilde{u}_1\tilde{u}_i + \bar{\omega}\delta_{i1} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}\nu_t)\tilde{S}_{i1} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_2\tilde{u}_i + \bar{\omega}\delta_{i2} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}\nu_t)\tilde{S}_{i2} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_3\tilde{u}_i + \bar{\omega}\delta_{i3} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}\nu_t)\tilde{S}_{i3} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Observe que uno de los aspectos notables de esta formulación es que el sistema LES se puede deducir fácilmente de las ecuaciones incompresibles de Navier-Stokes originales con los cambios siguientes:

$$u_i \implies \tilde{u}_i \quad \rho \implies \tilde{\rho} \quad p \implies \bar{\omega} \quad (2.18)$$

$$\mu \implies \bar{\mu} + \bar{\rho}\nu_t \quad (2.19)$$

esto proporciona al código numérico un fácil uso para LES sin modificaciones severas.

Las expresión para ν_t utilizada en las siguientes simulaciones incompresibles corresponden a los modelos descritos por Métais [1992], la única diferencia es que aquí se utiliza un promedio de Favre, antes descrito. El modelo submalla utilizado, es el modelo selectivo de la función estructura propuesto por David [1993], donde la viscosidad turbulenta local, está dada por la siguiente expresión:

$$\nu_t(\mathbf{x}, \Delta, t) = C_{ssf} \Delta \sqrt{\tilde{\Lambda}(\mathbf{x}, \Delta, t)} \quad (2.20)$$

donde C_{ssf} puede ser expresado como función de la constante de Kolmogorov (ec. 2.21), por lo que $C_{ssf} = 0,104$ cuando $C_k = 1,4$, así como Δ se toma como $(\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3)^{\frac{1}{3}}$ donde $\Delta x_1, \Delta x_2$ y Δx_3 son los tamaños de malla locales en las tres direcciones espaciales.

$$C_{ssf} = f \left(C_k^{-\frac{3}{2}} \right) \quad (2.21)$$

$\tilde{\Lambda}(\mathbf{x}, \Delta, t)$ es la función de estructura de segundo orden de la velocidad, construida con el campo \tilde{u} . $\tilde{\Lambda}(\mathbf{x}, \Delta, t)$ es calculado en el punto \mathbf{x} con un promedio estadístico local de las diferencias de velocidad de los seis puntos más cercanos que rodean al punto \mathbf{x} en la malla computacional. La interpolación se basó sobre la ley de $\frac{2}{3}$ de Kolmogorov que se usa para la función estructura de la velocidad.

Según lo propuesto por David [1993], la viscosidad turbulenta se apaga cuando la turbulencia no es lo suficientemente tridimensional. El criterio para las tres dimensiones se define de la siguiente forma: considere en un momento dado que el ángulo entre el vector de vorticidad en un punto dado de la malla y su media aritmética de los seis puntos vecinos más cercanos. La viscosidad turbulenta se cancela en los puntos donde este ángulo es más pequeño que 20° .

El código numérico usa coordenadas generalizadas. La adaptación a estas coordenadas se realiza introduciendo una matriz Jacobiana que transforma una geometría curvilínea en un sistema Cartesiano (x_1, x_2, x_3) , dentro de una geometría ortogonal simple con malla uniforme en el sistema de coordenadas generalizadas (ξ_1, ξ_2, ξ_3) . Cada término de la matriz Jacobiana inversa (\mathbf{J}^{-1}) se expresa como funciones analíticas de las medidas $\frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial \xi_j}$. Las medidas son introducidas y calculadas por el esquema interno de

primer orden, entonces la matriz (\mathbf{J}) es calculada directamente de (\mathbf{J}^{-1}).

Entonces, la ecuación 2.1 se puede escribir como,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_2}{\partial \xi_2} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_3}{\partial \xi_3} = \hat{\mathbf{S}}_0 \quad (2.22)$$

con

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathbf{U}} &= \frac{1}{J} \mathbf{U} \\ \hat{\mathbf{F}}_1 &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \mathbf{F}_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \mathbf{F}_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} \mathbf{F}_3 \right) \right] \\ \hat{\mathbf{F}}_2 &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \mathbf{F}_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \mathbf{F}_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} \mathbf{F}_3 \right) \right] \\ \hat{\mathbf{F}}_3 &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} \mathbf{F}_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} \mathbf{F}_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} \mathbf{F}_3 \right) \right] \\ \hat{\mathbf{S}}_0 &= \frac{1}{J} \mathbf{S}_0 \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

donde J es el determinante de la matriz \mathbf{J} y $\mathbf{U}, \mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3$ son función de las coordenadas cartesianas y del tiempo.

2.3. Esquema Numérico

Una vez obtenido el sistema en coordenadas generalizadas se resuelve por medio de una extensión del esquema explícito McCormack, de segundo en el tiempo y cuarto en espacio [Gottlieb, 1976]. Este es un sistema corrector-predictor, definido en una dimensión

Predictor

$$U_j^{(1)} = U_j^{(n)} + \frac{1}{6} \lambda (-f_{j+2}^{(n)} + 8f_{j+1}^{(n)} - 7f_j^{(n)}) + (\delta t) S_j^{(n)} \quad (2.24)$$

Corrector

$$U_j^{(n+1)} = \frac{1}{2} (U_j^{(n)} + U_j^{(1)}) + \frac{1}{12} \lambda (7f_{j-2}^{(1)} - 8f_{j-1}^{(1)} - f_j^{(1)}) + \frac{1}{2} (\delta t) S_j^{(1)} \quad (2.25)$$

Los índices $(n), (n+1)$ y (1) simbolizan los valores de esa función en el tiempo $t, t + \delta t$ y al subpaso de tiempo respectivamente. Observe que las discretizaciones espaciales intermedias son esquemas no centrados de primer orden con un predictor adelantado (*upwind*) y un corrector hacia atrás (*downwind*). Como se especifica arriba el esquema resultante es de cuarto orden en el espacio.

La formulación generalizada en tres dimensiones se escribe:

Predictor

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} = \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)} - \mathbf{J}_{i,j,k}^P & \left[\frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[\frac{7}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{1i+1,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{1i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{1i+2,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{1i+1,j,k}^{(n)}) \right] \right. \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[\frac{7}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{2i+1,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{2i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{2i+2,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{2i+1,j,k}^{(n)}) \right] \\ & \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[\frac{7}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{3i+1,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{3i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\hat{\mathbf{F}}_{3i+2,j,k}^{(n)} - \hat{\mathbf{F}}_{3i+1,j,k}^{(n)}) \right] \right] \end{aligned} \quad (2.26)$$

Corrector

$$\begin{aligned}
 \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n+1)} = \frac{1}{2}[\mathbf{U}_{i,j,k}^{(1)} + \mathbf{U}_{i,j,k}^{(n)}] - \mathbf{J}_{i,j,k}^P & \left[\frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[\frac{7}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{1i+1,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{1i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{1i+2,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{1i+1,j,k}^{(1)}) \right] \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[\frac{7}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{2i+1,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{2i,j,k}^{(1)}) - \frac{1}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{2i+2,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{2i+1,j,k}^{(1)}) \right] \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[\frac{7}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{3i+1,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{3i,j,k}^{(1)}) - \frac{1}{6}(\hat{\mathbf{F}}_{3i+2,j,k}^{(1)} - \hat{\mathbf{F}}_{3i+1,j,k}^{(1)}) \right] \right] \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

Capítulo 3

Superficie Libre

Los flujos con superficie libre son aquellos en los que se tiene una interfase bien definida entre un gas y un líquido (fluidos con una gran relación de densidades ej. aire-agua) y donde los efectos de la inercia del gas son despreciables. Así como, la única forma en que éste último interactúa con el líquido es debido a la presión que ejerce sobre la interfase. Por todo lo anterior, se dice que el líquido fluye de manera *libre* o independiente.

Este tipo de flujos son básicamente un problema de frontera móvil, lo que trae consigo ciertas complejidades en su solución, ya que el flujo cambia conforme la interfase se mueve, y por otro lado, el movimiento de la interfase depende del flujo, por lo tanto, además de resolver las ecuaciones que gobiernan a los fluidos, es necesario incluir la interfase en el algoritmo de solución. Por lo que, para poder resolver este problema se debe obtener lo siguiente:

1. La forma de la interfase o superficie libre.
2. Su evolución temporal.
3. El acoplamiento de las fases (aplicar las condiciones de frontera en la superficie libre).

En la solución de los primeros dos puntos, existen un gran número de métodos, clasificados básicamente en dos categorías: métodos de superficie (seguimiento de la interfase) y métodos de volumen (captura de la interfase). Los primeros se basan en hacer un seguimiento explícito de la superficie, ya sea mediante una malla deformable o partículas marcadoras. En el caso de los métodos de volumen se utiliza una función indicadora (ej. *Volume of Fluid* y *Level-Set*) o partículas sin masa ni propiedades, a lo largo de todo el volumen de uno de los fluidos (*Marker-and-Cell*). En el presente trabajo, se utilizó el método *Level-Set* (ver sec.3.1), así como, el último punto fue abordado mediante el método *Ghost-Fluid* (ver sec. 3.4 y sec.3.5).

3.1. Método *Level-set*

En lo referente a la descripción espacial-temporal de la interfase, se utilizó el método *Level-Set* desarrollado originalmente por Osher [1988] y aplicado más tarde a la solución de problemas de flujo bifásico por Sussman et al. [1994] y Chang et al. [1996]. En este último, la interfase $\Gamma(t)$ es definida por el valor cero de la función $\phi(\mathbf{x}, t)$ y su signo representa cada una de las fases (ver fig.3.1). Entonces:

$$\Gamma(t) = \{\mathbf{x} \mid \phi(\mathbf{x}, t) = 0\}$$

así como, en el presente trabajo, la fase es:

$$\begin{aligned} \text{líquida} & \quad \text{si } \phi(\mathbf{x}, t) > 0 \\ \text{gaseosa} & \quad \text{si } \phi(\mathbf{x}, t) < 0 \end{aligned}$$

además, la función *Level-Set* en un tiempo t_0 se define como la distancia más cercana con signo, desde algún punto \mathbf{x} a la interfase $\Gamma(t_0)$, por lo que

$$\phi(\mathbf{x}, t_0) = \pm d(\mathbf{x}) \quad (3.1)$$

lo atractivo de la ec.3.1 es, que obtener algunas propiedades geométricas (por ejemplo la curvatura o normal) es relativamente sencillo. Así como, una función distancia siempre satisface que $|\nabla d| = 1$. Lo anterior es una gran ventaja, ya que facilita los cálculos geométricos al momento de acoplar la fase líquida y gaseosa.

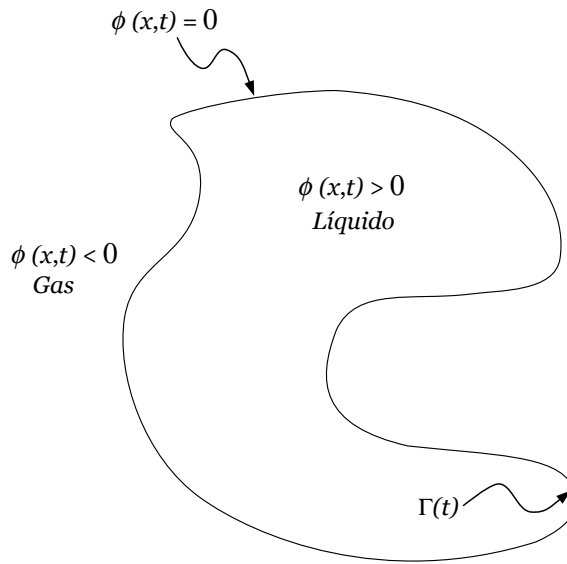


Figura 3.1: La superficie libre o interfase es definida por el valor cero de la función *Level-Set*, la fase líquida por su valor positivo y la gaseosa se define mediante el negativo.

Una vez obtenida la forma de la superficie mediante de la función *Level-Set*, su evolución es descrita mediante la ec. 3.2

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (3.2)$$

siendo \mathbf{u} es el campo de velocidad del flujo.

La solución de dicha ecuación se realizó de forma explícita, ésto mediante el método de Runge-Kutta con un esquema TVD de segundo orden, junto con un esquema WENO [Osher, 2003] de quinto orden en la discretización espacial.

3.1.1. Reinicialización

En general, con el paso el tiempo y advecciones de ϕ , ésta comienza a perder su propiedad como función distancia, por lo que es necesario reinicializarla, no sólo para poder extrapolar algunas propiedades en las cercanías de la interfase (ver sec. 3.5.1), sino también, para evitar un alto grado difusividad numérica. Entonces $\phi(\mathbf{x}, t)$ se reemplaza por $d(\mathbf{x})$, que tiene el mismo nivel cero, sin embargo, satisface la propiedad $|\nabla d(\mathbf{x})| = 1$.

$$\frac{\partial d}{\partial \tau_p} + \mathbb{S}(\phi)(|\nabla d| - 1) = 0 \quad (3.3)$$

donde:

$$\mathbb{S}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + |\nabla \phi|^2 \Delta h^2}} \quad (3.4)$$

así como $\Delta h = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$. La discretización de la ec. 3.3 y 3.4, al igual que la ec. 3.2 se realizó mediante el uso de esquemas WENO. La integración temporal fue resuelta mediante el método de Runge-Kutta TVD donde:

$$\Delta \tau_p = CFL \cdot \Delta h \quad (3.5)$$

siendo τ_p es un pseudo-paso de tiempo y CFL el número de Courant-Friedrich-Levy, con un valor de 0.5 en este trabajo. La reinicialización fue llevada a cabo cada 10 pasos de tiempo, esto con el fin de ahorrar poder de cómputo.

3.2. Esquemas ENO y WENO

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

Los esquemas WENO 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

$$\phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6} \quad (3.6)$$

$$\phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{6} \quad (3.7)$$

$$\phi_x^3 = \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6} \quad (3.8)$$

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 (ϕ_x^-) y positiva (ϕ_x^+). Para calcular ϕ_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 $v_1 = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x}$, $v_2 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$, $v_3 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$, $v_4 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$ y $v_5 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$. Entonces, ϕ_x^- estará dado por

$$\phi_x^- = \omega_1 \phi_x^1 + \omega_2 \phi_x^2 + \omega_3 \phi_x^3 \quad (3.9)$$

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

$$\omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (3.10)$$

$$\omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (3.11)$$

$$\omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (3.12)$$

siendo α_k definida como

$$\alpha_1 = \frac{0,1}{(S_1 + \epsilon)^2} \quad (3.13)$$

$$\alpha_2 = \frac{0,6}{(S_2 + \epsilon)^2} \quad (3.14)$$

$$\alpha_3 = \frac{0,3}{(S_3 + \epsilon)^2} \quad (3.15)$$

donde

$$S_1 = \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2 \quad (3.16)$$

$$S_2 = \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2 \quad (3.17)$$

$$S_3 = \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2 \quad (3.18)$$

$$\epsilon = 10^{-6} \max \{v_1^2, v_2^2, v_3^2, v_4^2, v_5^2\} + 10^{-99} \quad (3.19)$$

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 ϕ_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 $v_1 = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x}$, $v_2 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$, $v_3 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$, $v_4 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$ y $v_5 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$.

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 $\phi \geq 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\max(\phi_x^-, 0)^2, \min(\phi_x^+, 0)^2) \quad (3.20)$$

y, cuando $\phi < 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\min(\phi_x^-, 0)^2, \max(\phi_x^+, 0)^2) \quad (3.21)$$

3.3. Integración Temporal

En la parte temporal, tanto en la evolución de la función *Level-Set* como en la función de reinicialización se utilizaron esquemas *Runge-Kutta* TVD de segundo orden. Para ilustrarlo, si se escribe el término advectivo como $-(u \cdot \nabla)\phi = L(\phi)$, entonces, la ec.3.2 se reescribe de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi) \quad (3.22)$$

entonces, la integral de ec. 3.22 mediante el esquema *Runge-Kutta* TVD de segundo orden se define como

$$\begin{cases} \phi^* = \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \\ \phi^{n+1} = \frac{1}{2}\phi^n + \frac{1}{2}\phi^* + \frac{1}{2}\Delta t (L(\phi^*)) \end{cases} \quad (3.23)$$

3.4. Condiciones de frontera en la interfase o superficie libre

En el tercer paso del método de solución, es necesario definir correctamente las condiciones de frontera en la superficie libre. Debido a que la interfase no contiene masa, entonces no puede almacenar cantidad de movimiento, y además, al ser fluidos viscosos, tanto las velocidades (ec.3.24) como el esfuerzo cortante (ec.3.25) deben ser continuos, por lo tanto, las condiciones de frontera son definidas

de la siguiente forma:

$$u_L(\Gamma(t), t) = u_G(\Gamma(t), t) \quad (3.24)$$

$$\tau_L(\Gamma(t), t) = \tau_G(\Gamma(t), t) \quad (3.25)$$

donde $\Gamma(t)$ representa la posición de la interfase en determinado tiempo t . Así como, los subíndices L y G los valores del líquido y gas, respectivamente. En la fig.3.2 se observa el vector de velocidad y el esfuerzo cortante proyectados en dirección tangente a la interfase, además el vector normal \mathbf{N} . La condición de frontera de la ec.3.25, se puede definir mediante la ley de la viscosidad de Newton para el esfuerzo cortante tangencial de la siguiente manera:

$$\mu_L \frac{\partial u_{TL}}{\partial \mathbf{N}} = \mu_G \frac{\partial u_{TG}}{\partial \mathbf{N}} \quad (3.26)$$

dividiendo ec. 3.26 entre la viscosidad dinámica del líquido, tenemos

$$\frac{\partial u_{TL}}{\partial \mathbf{N}} = \frac{\mu_G}{\mu_L} \frac{\partial u_{TG}}{\partial \mathbf{N}} \quad (3.27)$$

y debido a que la viscosidad dinámica del gas es mucho menor que la del líquido, el término de la derecha se puede despreciar, por lo que

$$\frac{\partial u_{TL}}{\partial \mathbf{N}} \approx 0 \quad (3.28)$$

esta última expresión es una versión simplificada de la ec.3.25 (utilizada en el presente trabajo) y es ocupada comúnmente como condición de frontera en flujos con superficie libre. Por último, debido a que se desprecian los efectos de la Tensión Superficial (número de Weber $O(100)$), la presión en la interfase también es continua, por lo tanto:

$$P_L(\Gamma(t), t) = P_G(\Gamma(t), t) \quad (3.29)$$

3.5. Método *Ghost Fluid*

Una vez definidas las condiciones de frontera en la interfase, para aplicarlas al problema se utilizó un algoritmo de acoplamiento *Ghost Fluid* [Fedwik, 1999], en donde cada fase es resuelta de forma independiente a lo largo de todo el dominio computacional, que es dividido en dos regiones (una zona Real y una *Fantasma*) por el cero de la función *Level-Set*, siendo estas regiones contrarias en cada una de las fases (ver fig.3.3). Por lo tanto, la unión de las regiones Reales de cada fluido, dará como resultado el dominio físico del problema. La idea principal es tener un conjunto de nodos *Fantasma* alrededor de la interfase, y, con ellos, crear condiciones de frontera (inmersas en el dominio computacional) para cada fluido.

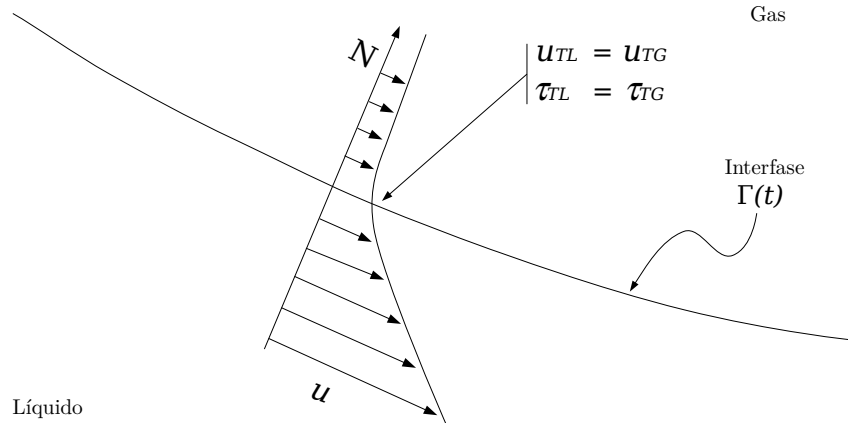


Figura 3.2: Condiciones de frontera en la interfaz Γ : la velocidad y el esfuerzo cortante del líquido son iguales a los del gas ($u_{TL} = u_{TG}$ y $\tau_{TL} = \tau_{TG}$).

Cabe señalar que, aunque se tiene un gran número de nodos *Fantasma*, sólo se ocupa un pequeño grupo (depende de la plantilla utilizada al momento de discretizar las ecuaciones). En la fig.3.4 se muestra que sólo los nodos alrededor de la interfase son utilizados como condiciones de frontera, por ejemplo, al imponerles cierto valor (condición de *Dirichlet*) o al extrapolar el valor de los nodos Reales en dirección normal a la interfase (condición de *Von Neumann*). Aplicando lo anterior a las condiciones de frontera del líquido:

- La condición de frontera ec. 3.28 (gradiente de velocidad nulo en dirección normal) es del tipo de *Von Neumann*, por lo tanto, la velocidad del líquido debe ser extrapolada.
- Para la presión, la condición de frontera ec.3.29 es de tipo *Dirichlet*, entonces los valores Reales de la presión del gas deben ser copiados a los nodos *Fantasma* del líquido. Sin embargo, debido a que se considera que la presión es constante en el gas (p_{ref}), en el presente trabajo sólo es resuelto el líquido, imponiendo la presión de referencia en la frontera *Fantasma*, esto trae consigo un gran ahorro computacional al no tener que resolver una segunda fase, en este caso el aire.

3.5.1. Extrapolación

Como se mencionó anteriormente, la extrapolación es el transporte de alguna variable o propiedad en dirección normal desde la interfase hacia la región *Fantasma*, y es realizada mediante el método propuesto por Nourgaliev et al. [2004] al resolver la ec. 3.30 de Hamilton-Jacobi:

$$\frac{\partial Pr}{\partial \tau_p} + \underbrace{[\mathbb{Q}(\phi) \cdot \mathbf{N}] \cdot \nabla Pr}_{\mathbb{H}\delta(\nabla Pr, \mathbf{x}, t)} = 0 \quad (3.30)$$

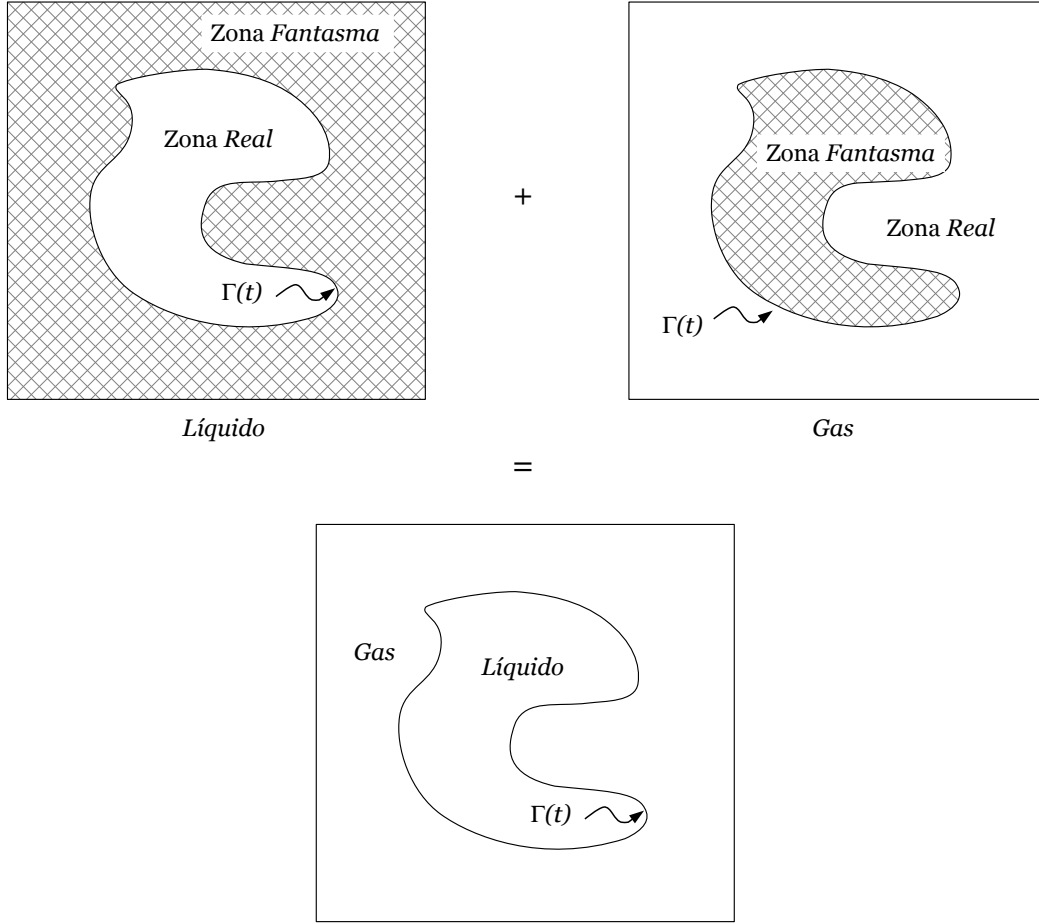


Figura 3.3: Método *Ghost Fluid*: Ambas fases son resueltas de forma independiente, cada una con una zona Real y una *Fantasma*. El dominio físico del problema es la suma de las regiones *Reales* de cada fluido.

donde Pr es la variable que se desea extrapolar y $Q(\phi)$ define si:

$$\begin{aligned} \text{Se extrapola del lado positivo } \phi \geq 0 \quad Q(\phi) &= \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \leq 0 \\ +1 & \text{si } \phi > 0 \end{cases} \\ \text{Se extrapola del lado negativo } \phi < 0 \quad Q(\phi) &= \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \geq 0 \\ -1 & \text{si } \phi < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.31)$$

asimismo, \mathbf{N} es el vector normal a la interfase, y puede ser calculado fácilmente mediante el uso de la función *Level Set* de la siguiente forma:

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (3.32)$$

y, debido a que ϕ es una función distancia, obtenemos:

$$\mathbf{N} = \nabla \phi \quad (3.33)$$

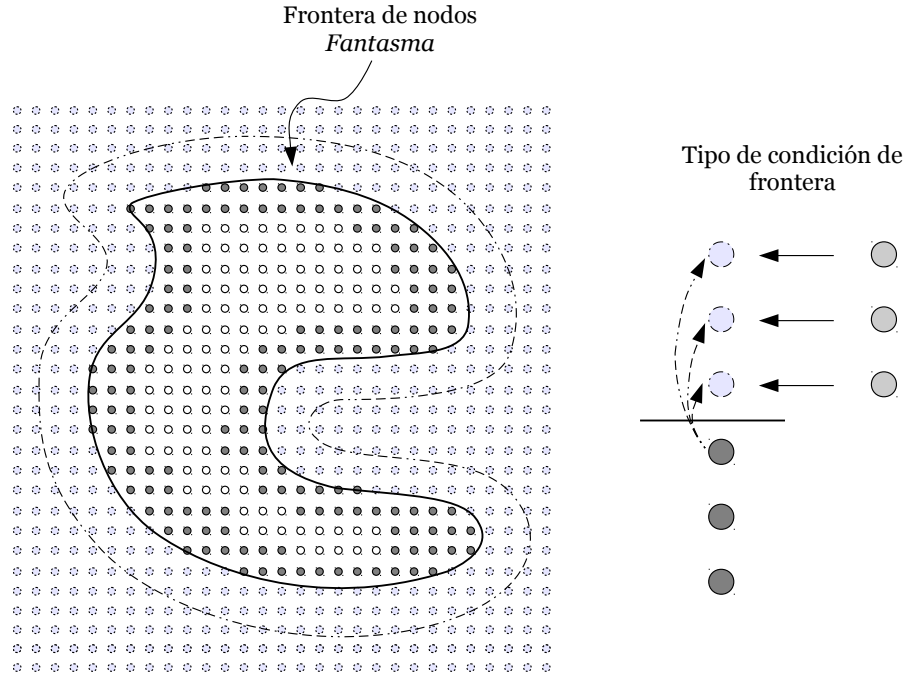


Figura 3.4: Frontera *Fantasma*: Sólo los nodos entre la interfase y la línea punteada son necesarios para crear las condiciones de frontera inmersas. Tipo de condición de frontera: *Dirichlet* (flecha continua); se impone algún valor a los nodos fantasma. *Von Neumann* (flecha punteada); los valores son extrapolados de su región Real.

La ec.3.33 fue discretizada mediante un esquema centrado de segundo orden, así como la ec. 3.30 mediante un esquema *upwind* de primer orden de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}\bar{\delta}_{i,j,k} &= \max(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_1)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{\Delta x_1} \\
&+ \min(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_1)}, 0) \frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_1} \\
&+ \max(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_2)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{\Delta x_2} \\
&+ \min(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_2)}, 0) \frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_2} \\
&+ \max(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_3)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{\Delta x_3} \\
&+ \min(Q_{i,j,k} \mathbf{N}_{i,j,k}^{(x_3)}, 0) \frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x_3}
\end{aligned} \tag{3.34}$$

al igual que en la etapa de reinicialización, el término temporal se resuelve mediante el método Runge Kutta, y el pseudo-paso de tiempo $\Delta\tau_p$ se define como en la ec.3.5.

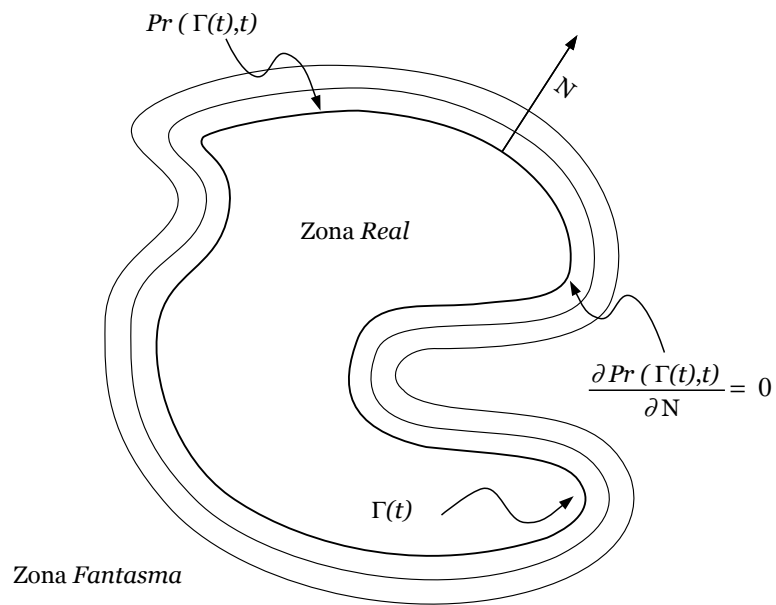


Figura 3.5: Extrapolación de la variable o propiedad $Pr(\Gamma, t)$. Se muestran las iso-lineas de Pr en dirección al vector normal \mathbf{N} .

Capítulo 4

Configuración del sistema y condiciones de operación

El sistema a analizar es mostrado en la fig. 4.1 y consta de un tanque cilíndrico sin desviadores de fondo plano, con una relación de diámetro $D/T = 0,588$. Con el fin de simplificar el problema, el impulsor utilizado es un disco delgado (fig.4.2), de diámetro $D = 0,117[m]$ y espesor de $h/D = 0,1$ montado al fondo del tanque. El nivel de líquido en reposo se colocó a $H/T = 0,588$ o $H/D = 1$.

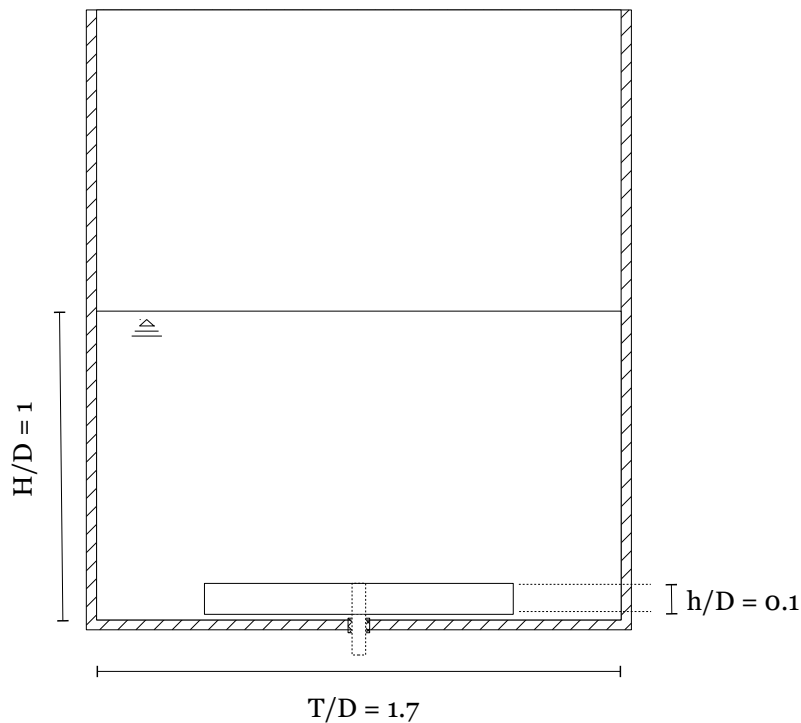


Figura 4.1: Diseño del tanque.

Se realizaron tres simulaciones, manteniendo la misma configuración geométrica y modificando solamente las condiciones de operación. El número de *Froude* es definido como en la ec.1.7 y el *Reynolds* como

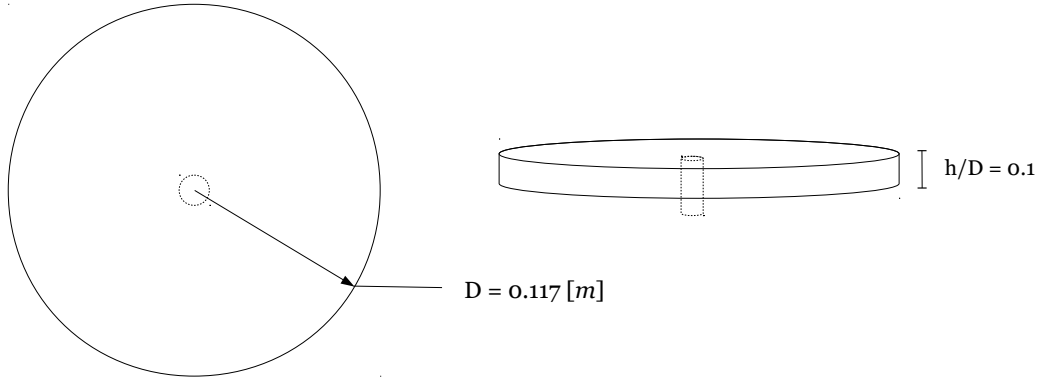


Figura 4.2: Tipo de impulsor: Disco plano.

$$Re = \frac{\rho N D^2}{\mu} \quad (4.1)$$

las tres condiciones de operación analizadas son mostradas en la Tabla 4.1.

	$N[rps]$	Re	Fr
<i>Exp1</i>	6,1	82 800	0,440
<i>Exp2</i>	7,3	112 000	0,637
<i>Exp3</i>	8,6	132 000	0,895

Tabla 4.1: Condiciones de operación.

Como se mencionó anteriormente, las ecuaciones de gobierno fueron resueltas en un marco cartesiano. El dominio computacional se definió de la siguiente forma: $Lx_1/D = Lx_2/D = 1,8$ y $Lx_3/D = 1,5$, donde ésta última es la longitud axial. La malla computacional tiene una resolución de $136 \times 136 \times 144$ para un total de 2 663 424 nodos; en la dirección x_1 y x_2 el espaciamiento entre nodos es constante de valor $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1,508[mm]$. En la dirección axial, la distancia es irregular, refinada en la zona inferior del tanque ($\Delta x_{3,min} = 0,1798[mm]$) aumentando gradualmente hasta la parte superior ($\Delta x_{3,max} = 1,624[mm]$).

4.1. Modelado del tanque e impulsor

Dado que el sistema es cartesiano, tanto el tanque como el impulsor se encuentran inmersos dentro del dominio computacional. Al igual que con la superficie libre, se utilizó el algoritmo de acoplamiento *Ghost Fluid* (ver.sec. 3.5), por lo que, se creó una función distancia con signo (ec. 3.1) que define:

sólido si $d(\mathbf{x}) \geq 0$

fluido si $d(\mathbf{x}) < 0$

el sólido representa una región fantasma en el fluido. Las condiciones de frontera que se le aplicaron a los nodos de esta zona son las siguientes:

$$u(\mathbf{x}, t) = u_{pared} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \mathbf{N}} = 0 \quad (4.3)$$

la primera de es de tipo *Dirichlet* por lo que a los nodos en la frontera fantasma se les impuso la velocidad de la pared (condición de no deslizamiento), en el caso del tanque $u_{pared} = 0$ y para el impulsor, la velocidad de cuerpo rígido $u_{pared} = \omega r$ (el disco gira en sentido antihorario). La ec.4.3 significa que, la presión en la pared del tanque y el impulsor, es la presión en el fluido, entonces, no existe gradiente de presión en dirección normal a las superficies sólidas. Esta última condición es aplicada al resolver la ec. 3.30 para la presión.

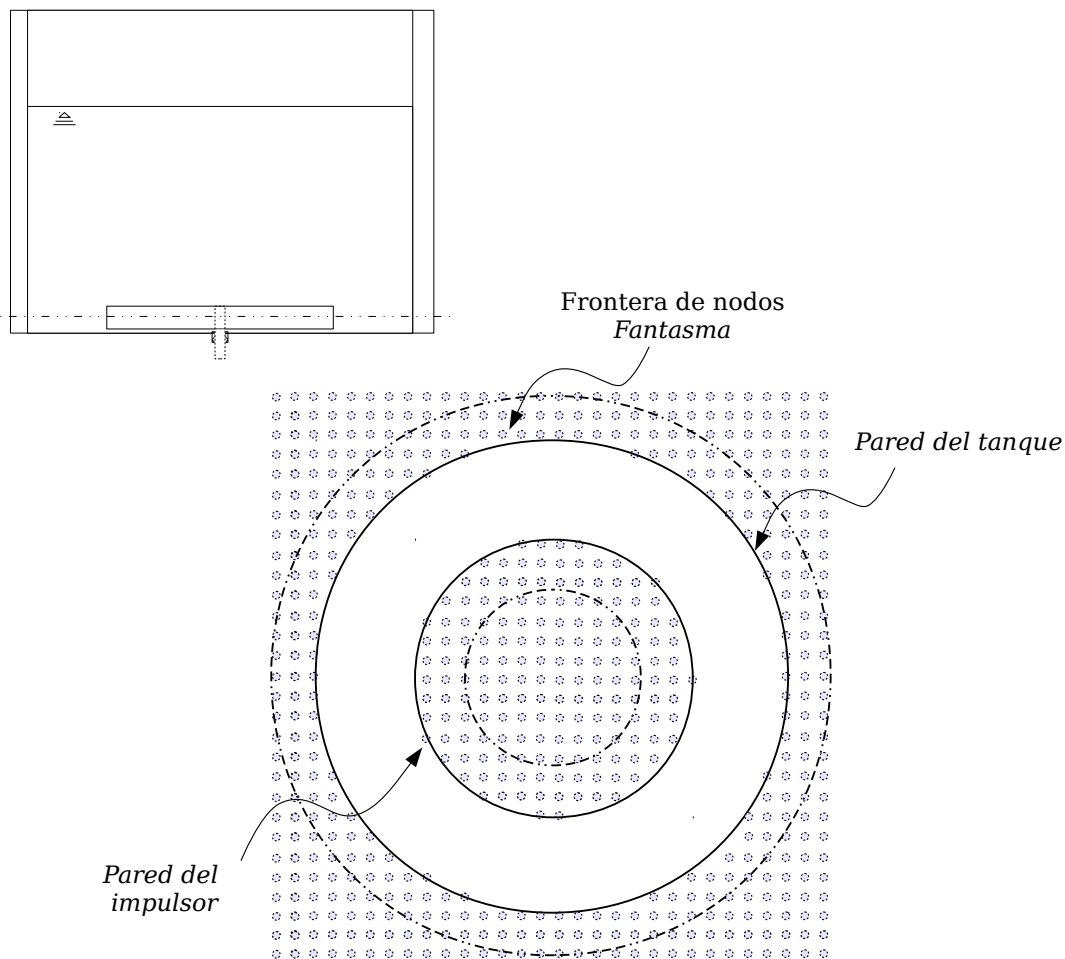


Figura 4.3: Modelado tanque e impulsor: Mediante una función distancia se representan las paredes sólidas. Haciendo uso del método *Ghost-Fluid* se genera una frontera de nodos fantasma, zona donde son aplicadas las condiciones de frontera inmersas en el dominio computacional.

4.2. Condiciones iniciales y estado estacionario

Uno de los aspectos principales que debe ser tomado en cuenta en la simulación de grandes escalas es la gran cantidad de poder de computo utilizado (dada la densidad de nodos) y además, el tiempo de cálculo necesario, esto debido a que son inherentemente transitorias. En la solución de tanques agitados sin desviadores y entonces, en el presente trabajo, se busca analizar el problema cuando el sistema se encuentra en estado estacionario, es decir, una vez la superficie del líquido no modifique su altura. Este aspecto es un reto, ya que el transitorio suele ser largo (se necesitan aproximadamente 240 vueltas del impulsor). Por lo tanto, se implementó la siguiente estrategia con el fin de reducir los tiempos de cálculo:

- Se parte del líquido en reposo como condición inicial, por consiguiente, la superficie libre es irrelevante hasta el momento en el que el fluido se encuentra rotando en su totalidad. Por lo tanto, al inicio de la simulación no se resolvieron las ecuaciones que modelan el movimiento de la superficie (método *Level-Set* y *Ghost-Fluid*). Entonces, sólo se simuló el volumen ocupado por el líquido en reposo, por lo que, la longitud axial del dominio computacional se redujo en 0,5 a $Lx_3/D = 1,0$. Ocupando en la frontera superior una condición de deslizamiento para la velocidad (efecto de la superficie libre sin deformarse).
- Una vez se le había transferido el movimiento rotacional a todo el fluido, los resultados se mapearon al dominio computacional completo (Fig. 4.4), donde se resuelven todas las ecuaciones de gobierno y la interfase. Cabe señalar que, se comenzaron las simulaciones con una malla más gruesa de $96 \times 96 \times 64$ (589 824 nodos). En el mapeo se aumentó el número de nodos a $96 \times 96 \times 96$.
- Finalmente, una vez deprimida la superficie libre, se interpolaron los valores a la malla más fina de $136 \times 136 \times 144$, llegando así al estado estacionario. Lo anterior para la condición de *Froude* menor. En las siguientes dos simulaciones se utilizaron los resultados ya obtenidos como condiciones iniciales.

Además, las ecuaciones que gobiernan los fluidos se resolvieron mediante FORTRAN y el ambiente paralelo OPENMP, utilizando 8 hilos de ejecución en un procesador *AMD Opteron(TM) 6272*. En lo que respecta al método *Level-Set* y *Ghost-Fluid*, se paralelizaron mediante CUDA-C (*Compute Unified Device Architecture*) ocupando una tarjeta gráfica *Tesla M2090*. Este modelo de programación requiere la transferencia de datos desde la RAM a la memoria en el GPU y viceversa, esto en cada subpaso de tiempo o *kernel*, perdiendo así tiempo para cálculo numérico. Sin embargo, se logró una aceleración de hasta 12 veces, por lo que se redujeron en gran medida los tiempos de simulación. El tiempo de cálculo fue de 4 [hora/vuelta], para un total de aproximadamente 5,7 [semanas].

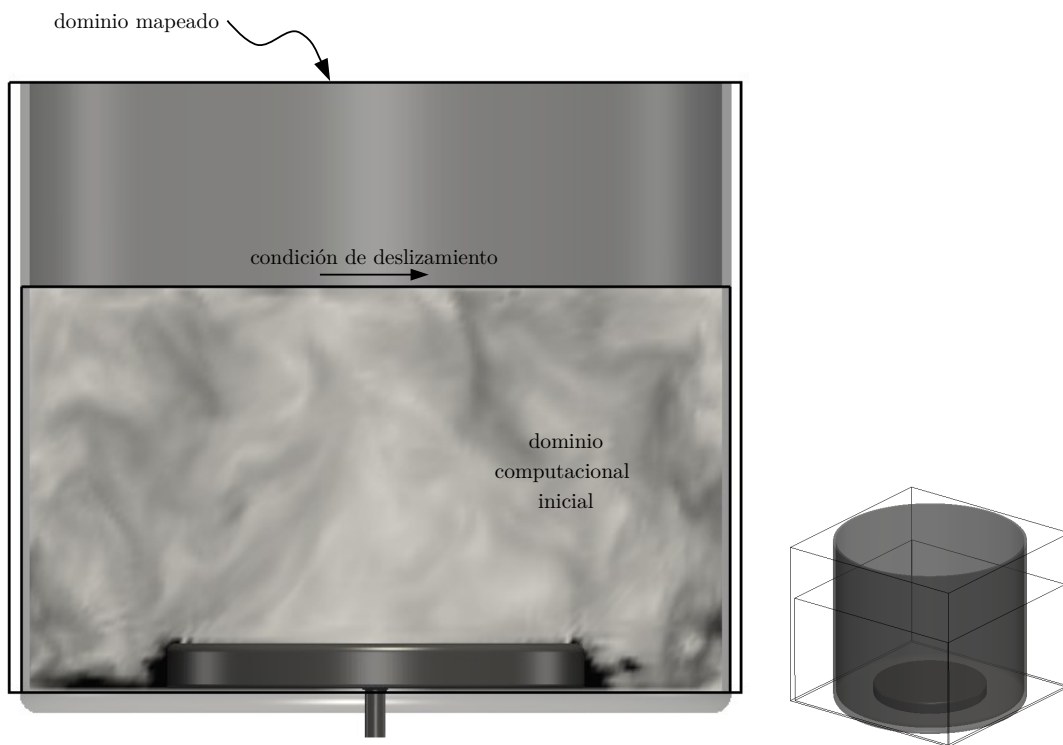


Figura 4.4: Mapeo del dominio computacional (contornos instantáneos de velocidad).

Capítulo 5

Resultados

En este capítulo las variables promedio, fluctuaciones y deformación de la superficie libre son presentadas. Con el fin de validar el código numérico, se utilizaron mediciones experimentales realizadas mediante velocimetría por imágenes de partículas [Ascanio, 2014]. Una vez la superficie libre y el campo de flujo se encontraban estadísticamente estacionarios, los resultados numéricos fueron promediados durante un tiempo equivalente a 10 vueltas del impulsor de la siguiente forma:

$$\langle \Phi(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{T_{total}} \int_0^{T_{total}} \Phi(\mathbf{x}, t) dt \quad (5.1)$$

además, se trasladaron a un marco cilíndrico para una mejor comparación con los trabajos existentes.

5.1. Validación

La validación numérica fue realizada al comparar los datos de la simulación numérica con los obtenidos mediante velocimetría por imágenes de partículas (PIV). Las mediciones experimentales fueron llevadas a cabo en un plano angular, por lo que sólo se obtuvieron las velocidades promedio axial ($\langle u_z \rangle / u_{max}$) y radial ($\langle u_r \rangle / u_{max}$). Los resultados mostrados a continuación corresponden a un $Fr = 0,895$. En la Fig. 5.1 se esquematiza la región de medición; los valores se tomaron a cinco diferentes alturas en el tanque, van desde $z/D = 0,2$ (línea inferior) hasta $z/D = 0,6$ (línea superior). Además, para una mejor lectura, se recorrieron de la siguiente forma: $u = u + 0,0$ ($z/D = 0,2$), $u = u + 0,1$ ($z/D = 0,3$), $u = u + 0,2$ ($z/D = 0,4$), ..., $u = u + 0,4$ ($z/D = 0,6$). Entonces, la distancia entre líneas corresponde a una diferencia de velocidades de 0.1. En los dos gráficos de comparación (Fig.5.1.a y Fig.5.1.b) en el eje de las abscisas se encuentra el radio adimensionalizado.

En Fig.5.1.a la velocidad axial muestra un comportamiento similar al de los datos experimentales, en la región central y superior del tanque concuerdan de buena manera, sin embargo, cerca de las paredes (valores cercanos a $r/(D/2) = 1,7$) y en la zona inferior ($z/D = 0,2 - 0,3$) se sobre estima la velocidad axial, en esta zona (esquina inferior del tanque) los efectos de la expulsión de líquido debido al impulsor son fuertes, por lo que, se tienen importantes gradientes de velocidad cercanos a la pared. El fenómeno de chorro de pared se encuentra en impulsores de tipo radial, donde el fluido es expulsado desde el centro hacia la periferia del tanque, al no poder continuar en esa dirección, asciende generado un chorro helicoidal. Entonces, los resultados en esta región fueron influenciados por la falta de resolución (densidad de nodos o celdas) en una zona de altos gradientes. Sin embargo, no es posible aumentar el número de nodos en la simulación, ya que el tiempo de cálculo sería excesivo. En cuanto a la velocidad radial, tanto en el caso experimental como en el numérico los valores son muy bajos comparados con su magnitud axial, sin embargo, de igual manera, los valores numéricos se aproximan más en la región superior y central del tanque.

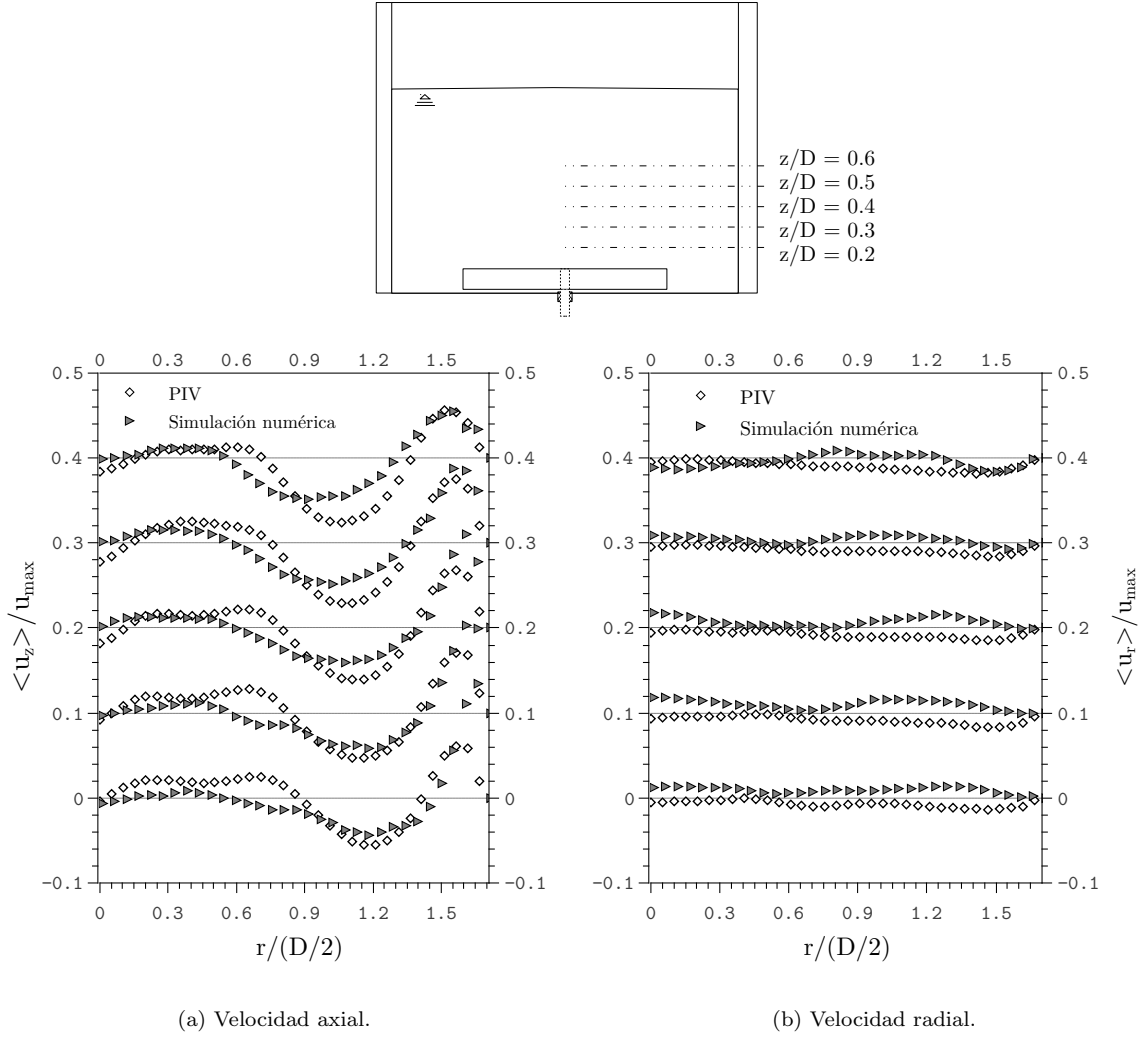


Figura 5.1: Comparación con el PIV ($Fr = 0,895$) de la velocidad (a) axial y (b) radial.

5.2. Caracterización de la superficie libre

La topología promedio de la superficie libre es mostrada en la Fig.5.3 a los diferentes números de *Froude*. Como es esperado, al incrementar las fuerzas de inercia y por consiguiente la energía cinética que el impulsor transfiere líquido (energía que es convertida en altura de fluido) la profundidad de la superficie aumenta. Para cuantificar la relación existente entre el Fr y el descenso de la superficie, en la Fig. 5.2 se muestra el gráfico del número de *Froude* contra la altura de líquido mínima al centro del tanque (ψ_b) y la máxima en las periferias (ψ_p). Como se observa, el comportamiento de ambas alturas es lineal con respecto al Fr , lo anterior ha sido reportado en los trabajos experimentales de Busciglio et al. [2013] y Smit and During [1991]. En el presente, mediante un ajuste lineal de los resultados, se encontraron las siguientes relaciones para ψ_b y ψ_p

$$\psi_p = 0,2288Fr + 0,92745 \quad (5.2)$$

$$\psi_b = -0,4759Fr + 1,0832 \quad (5.3)$$

restando ambas expresiones, es posible obtener la diferencia de alturas del líquido en el tanque

$$\Delta\psi = 0,7048Fr - 0,1557 \quad (5.4)$$

entonces, dada la definición del número de *Froude* ($Fr = N^2D/g$), la profundidad del líquido podrá ser aumentada de dos formas: Linealmente al incrementar el diámetro del impulsor o de forma cuadrática al incrementar su velocidad de rotación. En Smit and During [1991] se presenta una relación para la profundidad de la superficie en una turbina de paletas inclinadas, donde $\Delta\psi = 3,33Fr$. La pendiente para su configuración e impulsor es 4,7 veces mayor, esto da una referencia sobre que tanto el disco plano transfiere su movimiento al líquido, que como se observa, es pobre. Además, si $\Delta\psi = 0$ es posible encontrar un número de *Froude* umbral que da inicio a la deformación en la superficie libre, para el sistema analizado, tiene un valor de $Fr_u = 0,221$.

Un aspecto notable de la ec. 5.3 es que, da la posibilidad de conocer el punto de operación crítica (cuando la superficie toca el impulsor a $\psi_b = 0,1$) con un valor de $Fr_c \approx 2$ para el presente trabajo.

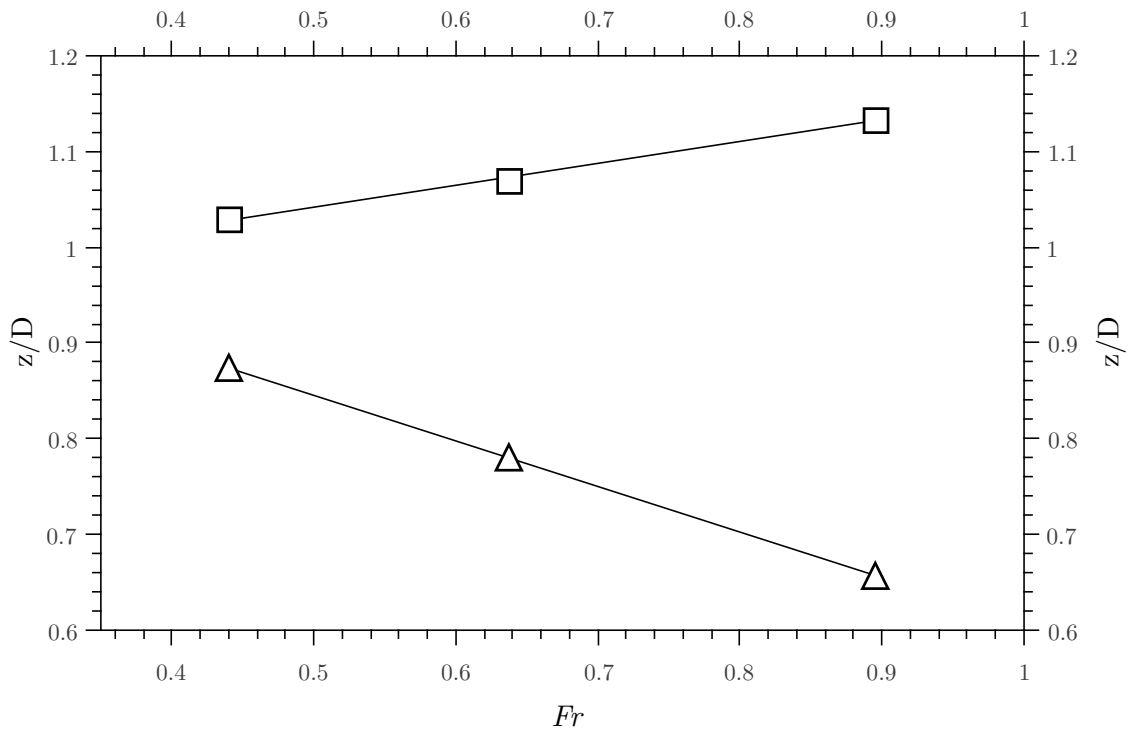


Figura 5.2: Niveles del líquido a diferentes números de *Froude*: (Δ) ψ_b (\square) ψ_p (-) Ajuste lineal.

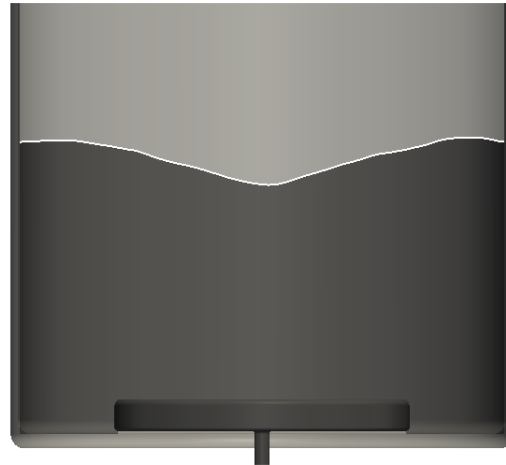
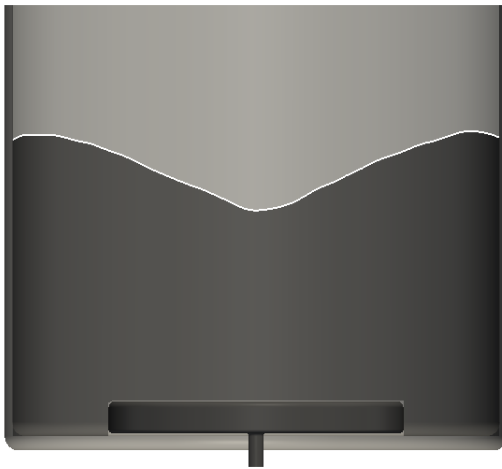
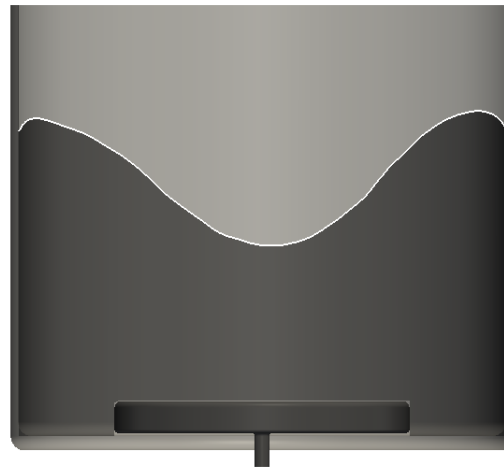
(a) $Fr = 0,440$ (b) $Fr = 0,637$ (c) $Fr = 0,895$

Figura 5.3: Topología promedio de la superficie libre para los tres casos de estudio.

5.3. Análisis de los campos de velocidades promedio

Como ya se ha mencionado, dentro de esta configuración geométrica, la velocidad angular o la rotación del fluido en el tanque es predominante. En la Fig. 5.4 se muestran tres cortes transversales a diferentes alturas ($z/D = 0,05, z/D = 0,04$ y $z/D = 0,9$). En las imágenes se ilustran (para el caso de $Fr = 0,895$) las líneas de trayectoria. Aquí es posible observar como, efectivamente, el flujo está rotando dentro del tanque y también se muestran 3 comportamientos distintos, donde, además de la velocidad principal (angular) es involucrada la componente radial (zona de expulsión, nula dispersión y reingreso).

En el corte más bajo a $z/D = 0,05$ se observa que debido a la fuerza centrífuga, el fluido es expulsado desde el disco hacia las paredes del tanque. Las líneas de trayectoria nacen entre el impulsor (en forma casi tangencial) hasta la pared. Por lo tanto, esto habla de la existencia de velocidad radial positiva en la zona inferior del tanque. Como ya se dijo, esta región suele tener altos gradientes de velocidad y energía turbulenta. Aquí las partículas de fluido sentirán un efecto similar al de soltar una pelota sobre un disco rotando, o sobre una tornamesa.

En $z/D = 0,4$ las líneas de trayectoria son círculos concéntricos. Entonces, a diferencia de la región anterior, no existen los efectos de la expulsión de fluido, por lo tanto, no hay dispersión radial ($\langle u_r \rangle / u_{max} \approx 0$). Ésta zona, de las tres, abarca la región más extensa dentro del tanque. En $z/D = 0,9$, lugar donde el corte transversal ya ha alcanzado la depresión en la superficie, se observa la zona de reingreso. Conocida así ya que, el flujo sale desde las paredes en dirección del eje (se tiene velocidad radial negativa), en una trayectoria mucho más larga que la señalada en la región de expulsión, reingresando entonces al centro del tanque.

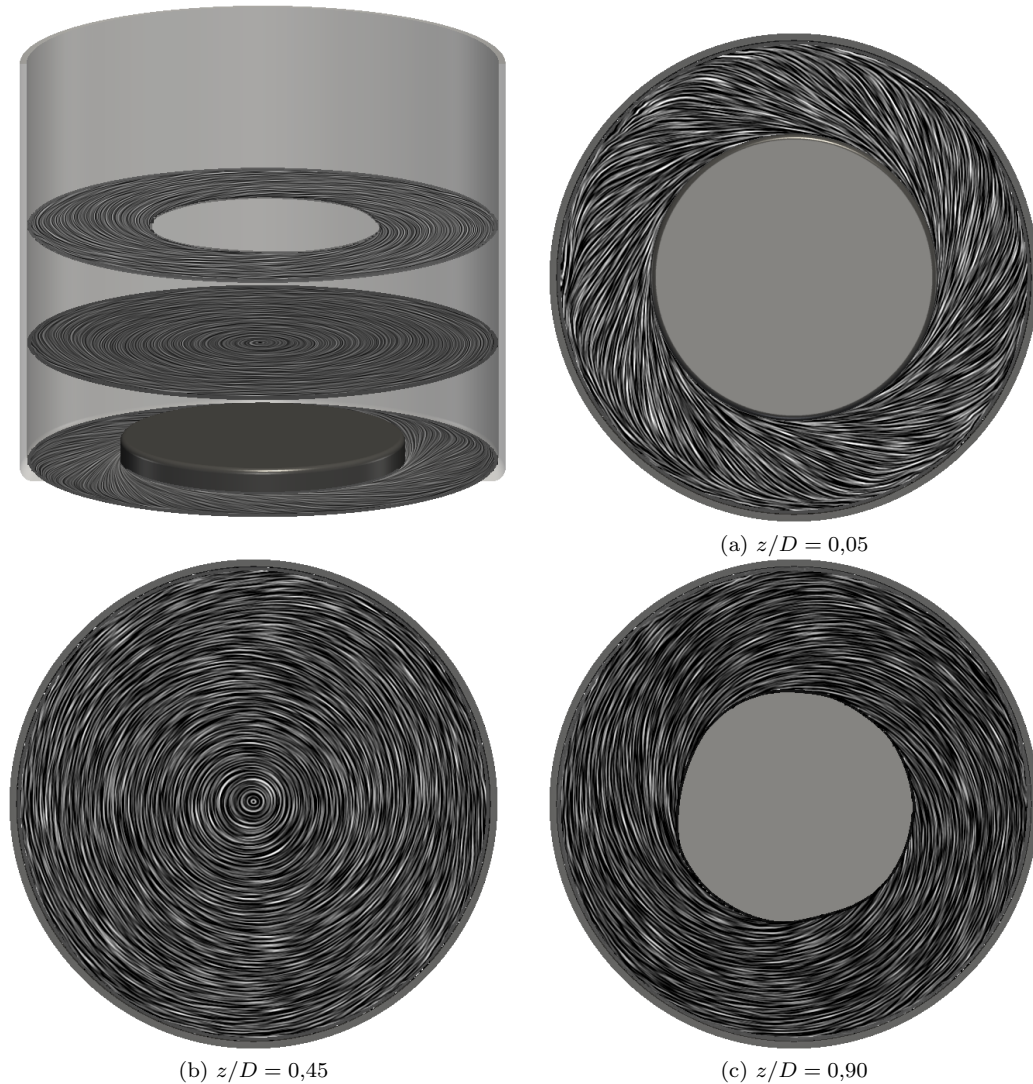


Figura 5.4: Flujo principal (líneas de trayectoria) a diferentes alturas z/D ($Fr = 0,895$).

En la Fig.5.5 se muestra el flujo secundario en un plano angular para los tres casos de estudio. En las esquinas inferiores, es posible notar la salida del flujo desde el impulsor (zona de expulsión), siguiendo su trayectoria hacia las paredes del tanque, lugar donde asciende (zona de nula dispersión radial), una vez ha llegado a una región cercana a la superficie del líquido, se dirige de nuevo hacia el impulsor (reingreso), descendiendo. Entonces, el flujo secundario, provoca una gran recirculación que abarca toda la zona anular del tanque. Este movimiento como se verá más adelante, contribuirá para que el mezclado se lleve a cabo de mejor manera en región de vórtice libre, comparado con la región de vórtice forzado.

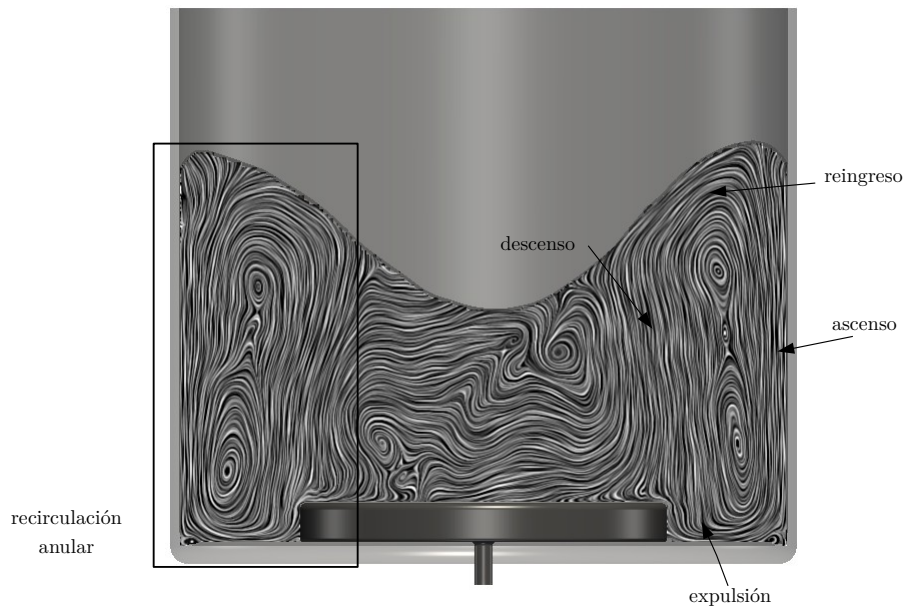
(a) $Fr = 0,440$ (b) $Fr = 0,637$ (c) $Fr = 0,895$

Figura 5.5: Flujo secundario.

5.4. Región de vórtice forzado y libre

Como ya se ha mencionado Nagata [1975] y Busciglio et al. [2013] proponen la división del tanque en dos regiones mediante un radio crítico basados en el comportamiento de la velocidad angular. Además, sus modelos utilizan la hipótesis de velocidad axial y radial nula. En las Fig.5.6, Fig. 5.7 y Fig.5.8 se presentan los perfiles promedio de velocidad angular(a), axial(b) y radial(c) para $Fr = 0,440$, $Fr = 0,637$ y $Fr = 0,895$ respectivamente. De igual manera que en la validación, los datos fueron recabados a cinco diferentes alturas ($z/D = 0,2, z/D = 0,3, z/D = 0,4, z/D = 0,5$ y $z/D = 0,6$), y sus valores recorridos para una mejor lectura. Las gráficas fueron realizadas lejos del impulsor y de la superficie libre, por lo tanto, se encuentran en la región de dispersión radial nula, lo cual es confirmado con las Fig.5.6.c, Fig. 5.7.c y Fig.5.8.c donde la velocidad radial es muy baja en comparación con las otras dos componentes (Fig.5.6.a - Fig.5.8.a y Fig.5.6.b - Fig.5.8.b).

En los tres casos de estudio, se observa en la región central del tanque (Región de Vórtice Forzado) un aumento lineal de la velocidad angular con respecto del radio adimensional, como lo predice la teoría de Nagata [1975], sin embargo, la pendiente es menor a la unidad, concordando con lo dicho por Busciglio et al. [2013] y Smit and During [1991]. El radio crítico es descrito por la región en donde la tendencia lineal termina, en los tres casos se encuentra en el intervalo de $r_c/(D/2) = \xi_c = [0,45 - 0,5]$. Realizando un ajuste lineal en la región $0 \leq r/(D/2) \leq r_c/(D/2)$, es posible encontrar el parámetro de corrección (α) de la velocidad angular de rotación [Smit and During, 1991, Busciglio et al., 2013]. Para $Fr = 0,440$, α toma valores en un intervalo de $[0,24 - 0,36]$, en $Fr = 0,637$ el valor de $\alpha = [0,31 - 0,38]$ y finalmente para $Fr = 0,895$ de $[0,25 - 0,27]$.

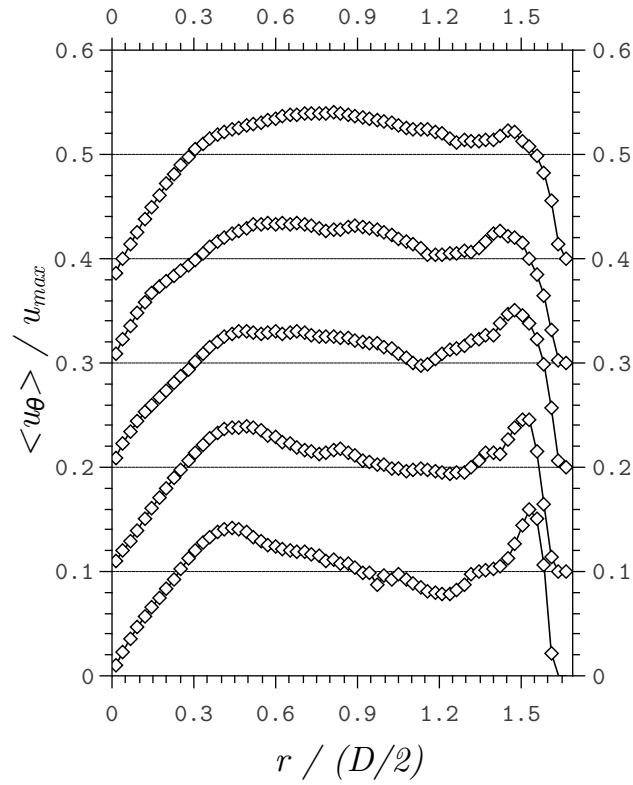
Los resultados promedio son mostrados en la Fig. 5.9 siendo el promedio global de $\alpha = 0,3$. Además, es posible observar que, dentro de la región forzada no existe velocidad axial (Fig.5.6.b, Fig. 5.7.b y Fig.5.8.b), por lo tanto, el líquido sí se encuentra rotando como un cuerpo rígido, sin embargo, su velocidad es 0,3 veces menor a la velocidad de rotación del disco. En la misma figura, también se ilustra los valores de α para una turbina *Rushton* (línea punteada superior) y una turbina de paletas inclinadas (línea punteada inferior), con lo cual, es posible ver como el disco le transmite en una menor cantidad el movimiento de rotación al fluido en comparación con impulsores a nivel industrial, hecho esperado.

Una vez pasado el radio crítico (Región de Vórtice Libre) la velocidad angular comienza a descender, mas no continúa con este comportamiento en las cercanías de la pared del tanque. A partir de aproximadamente $r/(D/2) > 1,1$ es apreciable un gran incremento de ésta velocidad, de mayor valor en el fondo del tanque, reflejo de la expulsión de fluido debido al impulsor. En los trabajos antes mencionados no ha sido reportado este comportamiento, ya que las relaciones utilizadas son de $H/T \geq 1$ (relación altura de líquido en reposo / diámetro del tanque), por lo tanto sus análisis son muy alejados del impulsor. En el presente trabajo, la relación es mucho menor a la estándar ($H/T = 0,588$), por lo que el chorro helicoidal o expulsión de fluido influyó de manera significativa en los valores de velocidad de las regiones cercanas a la pared y la zona inferior del tanque.

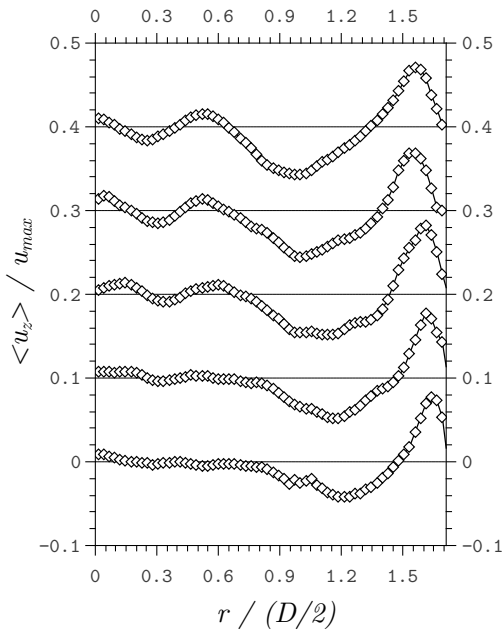
Finalmente, con respecto a la dirección axial (Fig.5.6.b, Fig. 5.7.b y Fig.5.8.b) en la RVL. La hipótesis de velocidad axial despreciable no es válida, ya que se tienen valores de orden similar al de la velocidad angular, que como se había anticipado, provoca un flujo secundario interesante, existiendo un ascenso y descenso de fluido en la región libre.

5.5. Anillos de presión

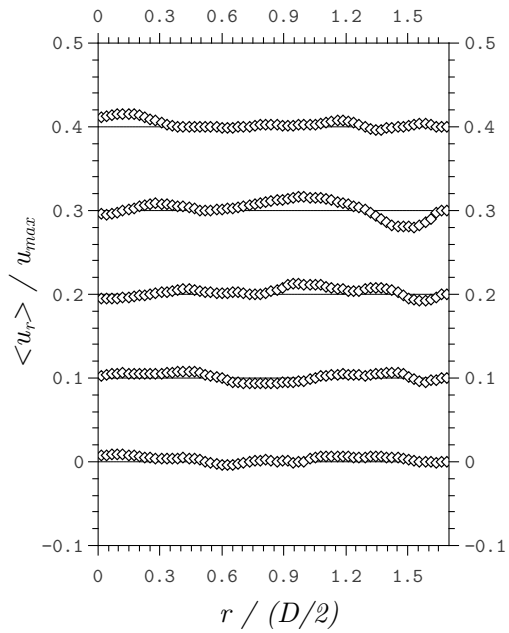
Para que una partícula de fluido cambie su trayectoria de rectilínea a una curva, debe existir un gradiente de presión en dirección al centro de curvatura de su línea de corriente [Friedrich, 2010]. Por lo tanto, debido a que en el tanque, el fluido en general está rotando, se debe de tener un gradiente de presión en dirección radial; además, ya que se confirmó que en la región central existe movimiento de



(a) Velocidad angular.

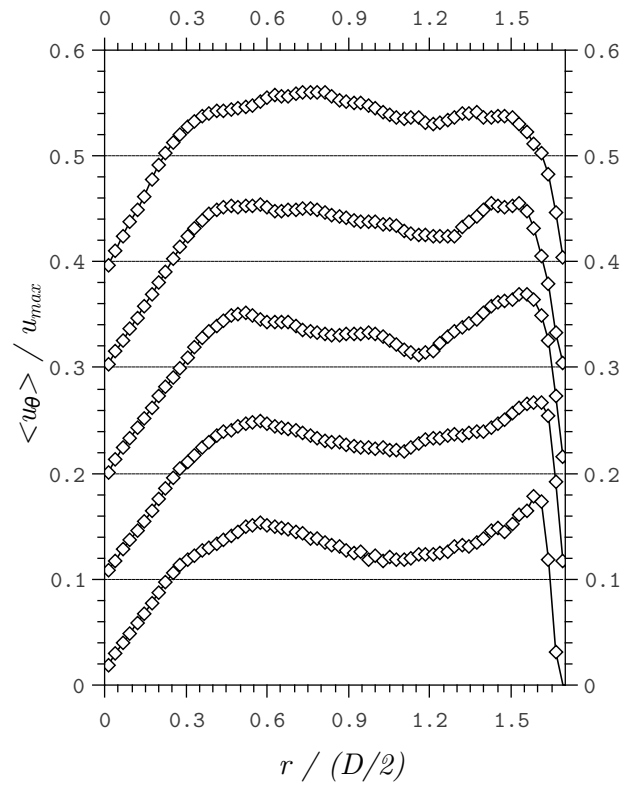


(b) Velocidad axial.

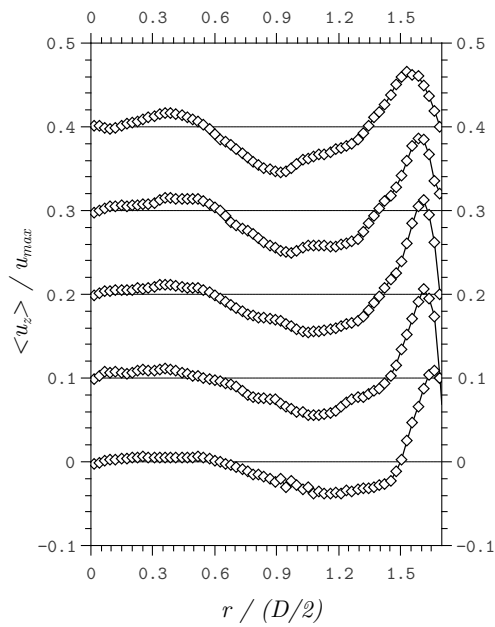


(c) Velocidad radial.

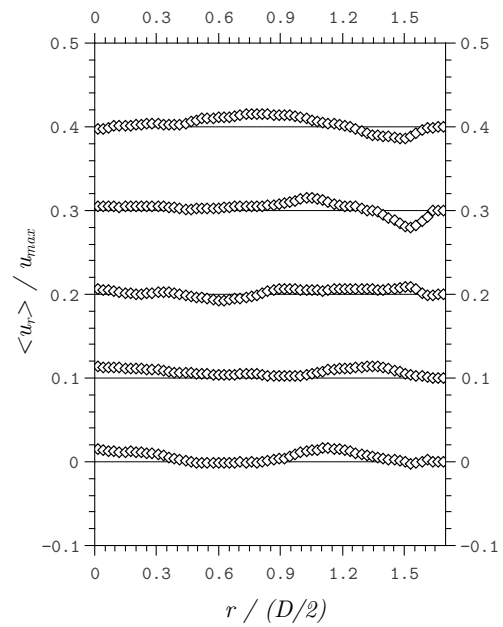
Figura 5.6: Perfil de velocidades para un $Fr = 0,440$: (a) angular; (b) axial; (c) radial a diferentes alturas z/D .



(a) Velocidad angular.

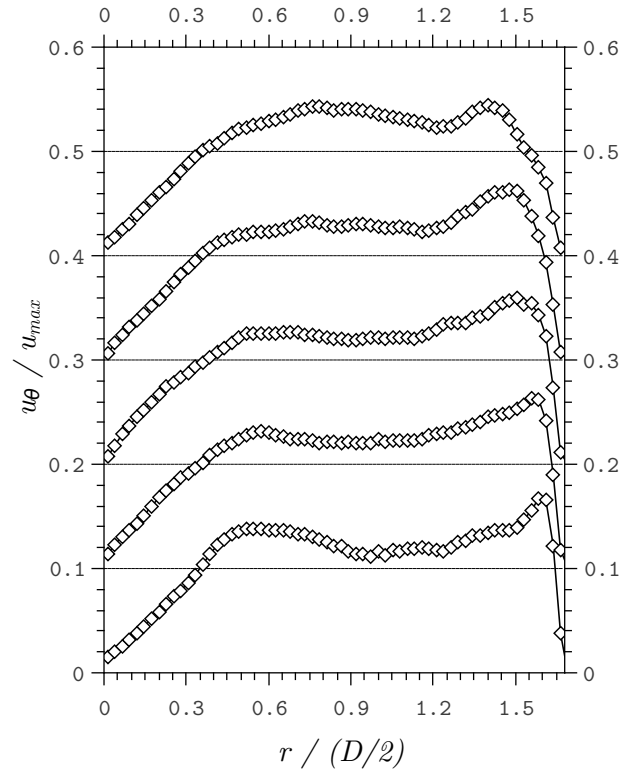


(b) Velocidad axial.

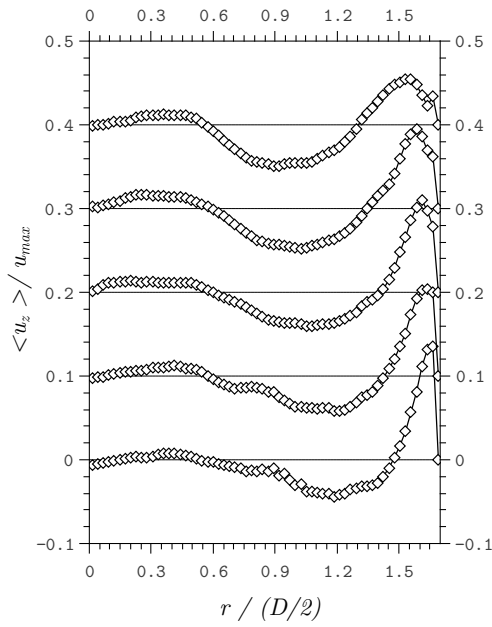


(c) Velocidad radial.

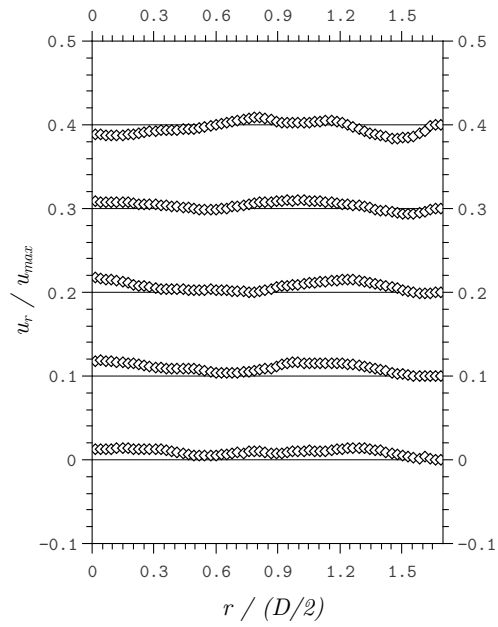
Figura 5.7: Perfil de velocidades para un $Fr = 0,637$: (a) angular; (b) axial; (c) radial a diferentes alturas z/D .



(a) Velocidad angular.



(b) Velocidad axial.



(c) Velocidad radial.

Figura 5.8: Perfil de velocidades para un $Fr = 0,895$: (a) angular; (b) axial; (c) radial a diferentes alturas z/D .

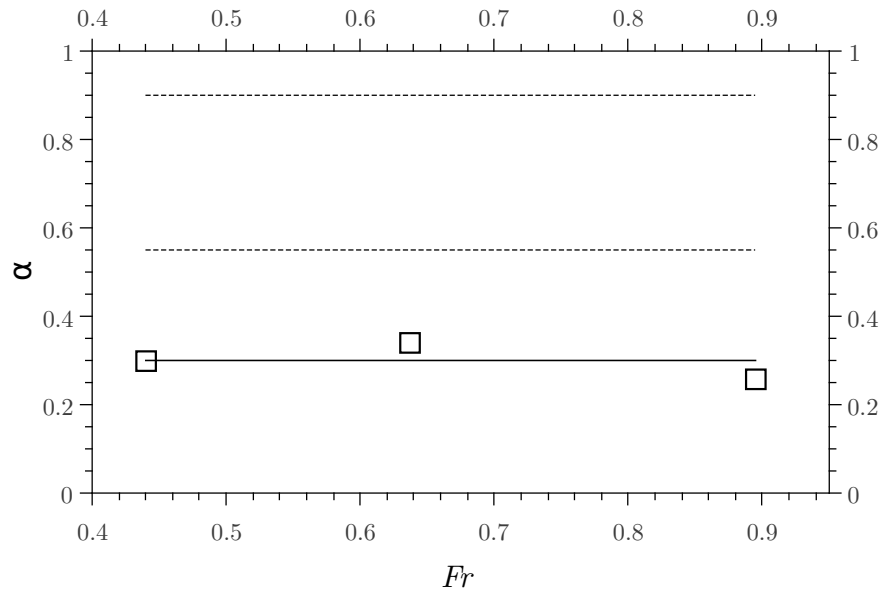


Figura 5.9: Corrección de la velocidad angular (α) en la Región de Vórtice Forzado: (\square) promedio a diferente Fr ; (—) promedio global; (- -) valor para una turbina *Rushton* (superior) y turbina de paletas inclinadas (inferior) [Busciglio et al., 2013].

cuerpo rígido, entonces, en un corte trasversal se deben de observar anillos de presión uniformes.

En la Fig. 5.10 se ilustran los contornos de presión promedio en un corte angular (lado izquierdo), así como transversal a $z/D = 0,4$ (lado derecho) para los tres casos simulados. En donde es posible observar la formación de anillos de presión de mayor valor en la periferia del tanque (colores negros), disminuyendo al centro de este. Por consiguiente, se genera un gradiente de presión en dirección radial, el cual provoca la fuerza que *empuja* las partículas de fluido para que mantengan una trayectoria circular.

La presión y forma de la superficie del líquido están estrechamente relacionadas. En la Fig 5.10 (lado izquierdo) se muestra las isobaras en un corte angular. Es posible observar que, para formar los anillos (gradiente de presión radial) es necesario deformar la presión en el tanque, es decir, cuando el líquido está en reposo, las isobaras serán líneas rectas paralelas (presión hidrostática) y conforme aumentan las fuerzas inerciales ($Fr \uparrow$), se necesita modificar estas líneas para generar el gradiente de presión radial. Entonces, a mayores fuerzas inerciales, es necesario un mayor gradiente y por lo tanto, una mayor deformación de las isobaras. La superficie libre está sometida a una presión uniforme (p_{atm}), por consiguiente, actúa como una isobara, deformándose y produciendo así la diferencia de alturas del líquido.

5.6. Mezclado

El mezclado en tanques agitados es logrado de tres formas: A nivel molecular, debido a fluctuaciones turbulentas y por movimiento convectivo (circulación del fluido)[Buwa et al., 2006], siendo de mayor importancia las últimas dos. Una mala característica asociada a los tanques agitados sin desviadores es que, el mezclado suele llevarse a cabo de manera lenta o pobre. Con el fin de ilustrar esta problemática, en la Fig. 5.11 se muestran las líneas de trayectoria generadas en la RVF y RVL, así como, en la Fig. 5.12 los contornos de energía cinética turbulenta en un plano angular.

Analizando la Fig.5.11 es posible ver como en la RVF el movimiento de cuerpo rígido provoca líneas casi cerradas (baja dispersión axial) y de radio constante (debido a la baja velocidad radial en la zona). Por lo que, es evidente la falta de movimiento convectivo en esta región. En lo que respecta a RVL, la suma del flujo principal y el secundario (recirculación anular), generan un excelente movimiento convectivo, donde es posible ver como la partícula de fluido recorre una amplia sección del tanque. En la Fig. 5.11.c se ha marcado con flechas y una línea de trayectoria el movimiento provocado por ambos flujos. Se observa como en la RVL se le provee de energía al fluido en la sección inferior, esto debido el movimiento del impulsor, subiendo por las paredes de forma helicoidal, reingresando por una sección más cercana a la región central del tanque, donde de nuevo es lanzado por el impulsor.

En lo que respecta a la energía cinética turbulenta (Fig.5.12), es posible observar como los valores mayores se concentran en la zona de expulsión del impulsor, así como en las cercanías de las paredes del tanque, es decir, en la Región de Vórtice Libre, esta turbulencia es generada básicamente por los altos gradientes debidos al chorro helicoidal. Los valores menores se tienen a lo largo de la zona central y cercana a la cara superior del impulsor. En esta figura ,los valores de k/u_{max}^2 fueron acotados hasta 0,1, con el fin de observar y delimitar mejor las diferentes regiones en el tanque, sin embargo, los valores máximos llegan a 0,21 para los tres casos.

En lo que respecta a la superficie libre, se observa de igual manera la existencia de energía cinética turbulenta, teniendo entonces oscilaciones del flujo en esta región. En la Fig.5.13 se muestra de forma instantánea la superficie libre del líquido, aquí se puede ver como estas fluctuaciones provocan corrugaciones y ondulaciones en la superficie, esto es de gran importancia , ya que estas corrugaciones pueden provocar la ingesta de gas. Por lo tanto, se habla de la capacidad y flexibilidad que tiene el método de captar el arrastre o ingestión. Condición crítica que se busca evitar en sistema no aireados, sin embargo, para que estos efectos se puedan analizar en su totalidad, se debe de incluir al gas en la forma solución.

En resumen, la RVF carece de buen movimiento convectivo, además de bajo nivel turbulento, haciéndola una zona donde el mezclado sea llevado a cabo muy lentamente. A diferencia de la RVL, donde se tiene un excelente movimiento circulatorio a lo largo del tanque, además, el flujo secundario provoca que el fluido se dirija en repetidas ocasiones hacia la región de expulsión del impulsor, lugar donde las estructuras turbulentas acelerarán el proceso de mezclado. Por lo tanto, de las dos, en la región central del tanque es donde se tendrán zonas segregadas y los tiempos de mezclado posiblemente sean largos.

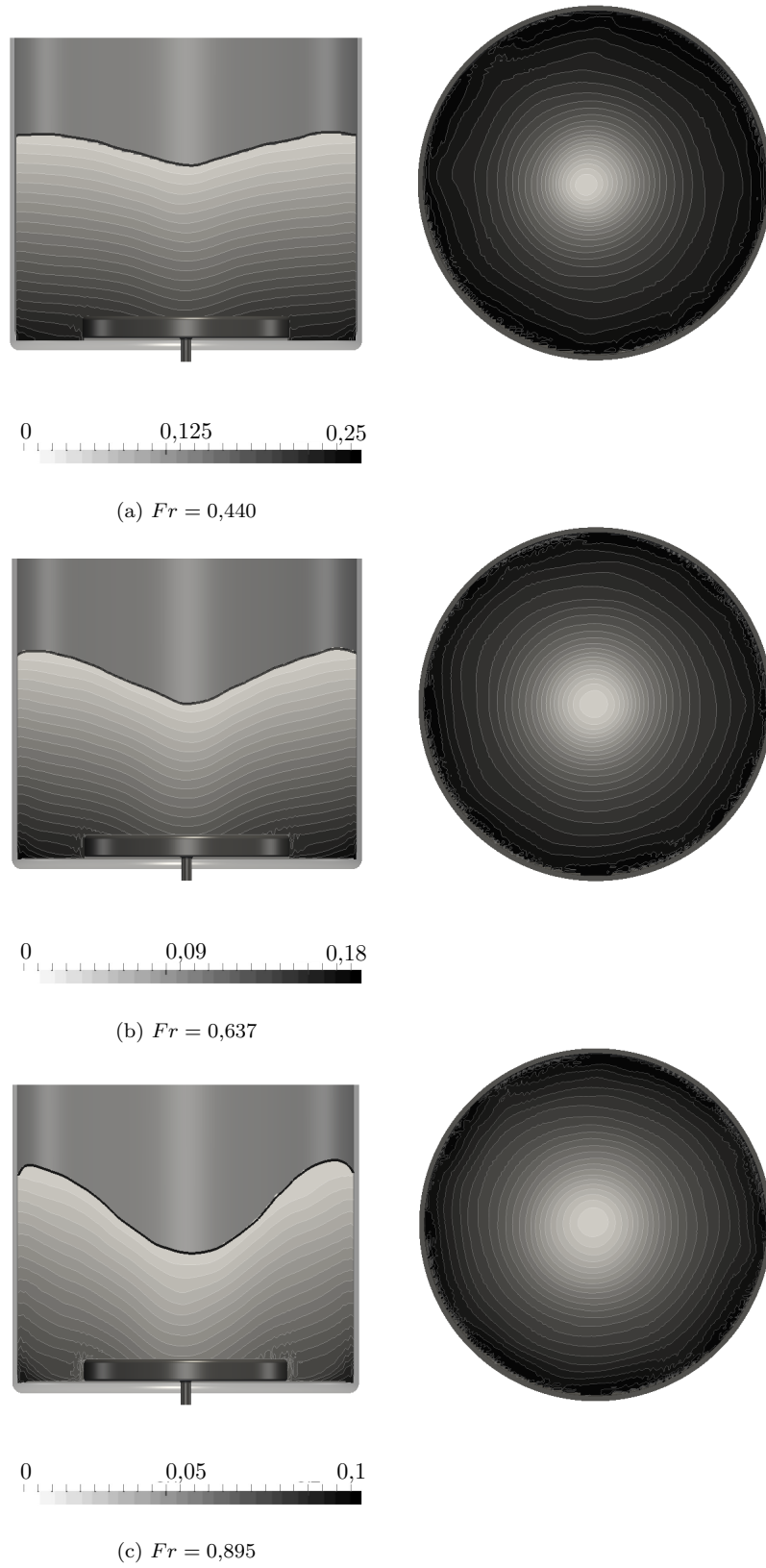


Figura 5.10: Isobaras $\langle p - p_{ref} \rangle / \rho u_{max}^2$ y anillos de presión a $z/D = 0,4$.

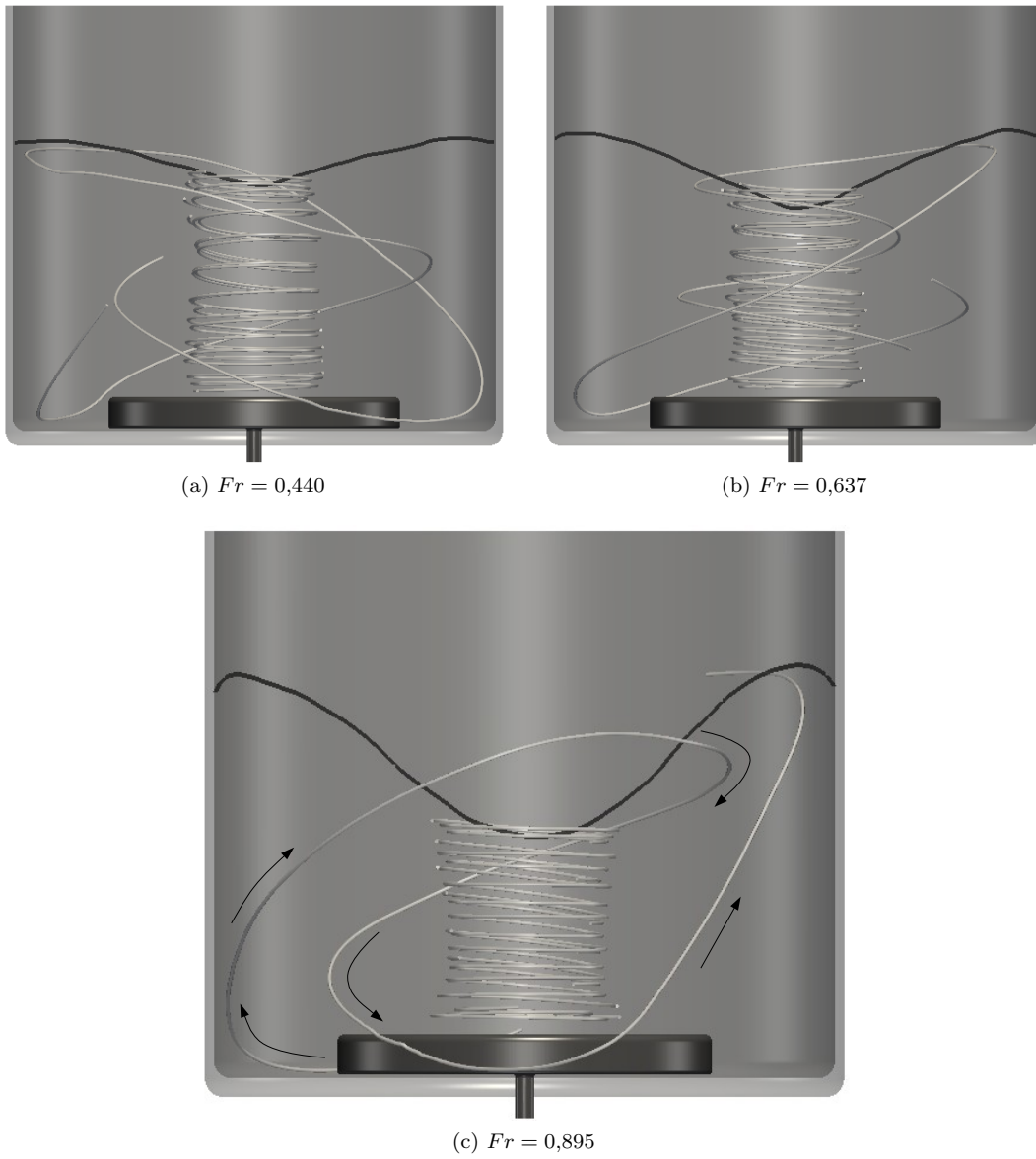
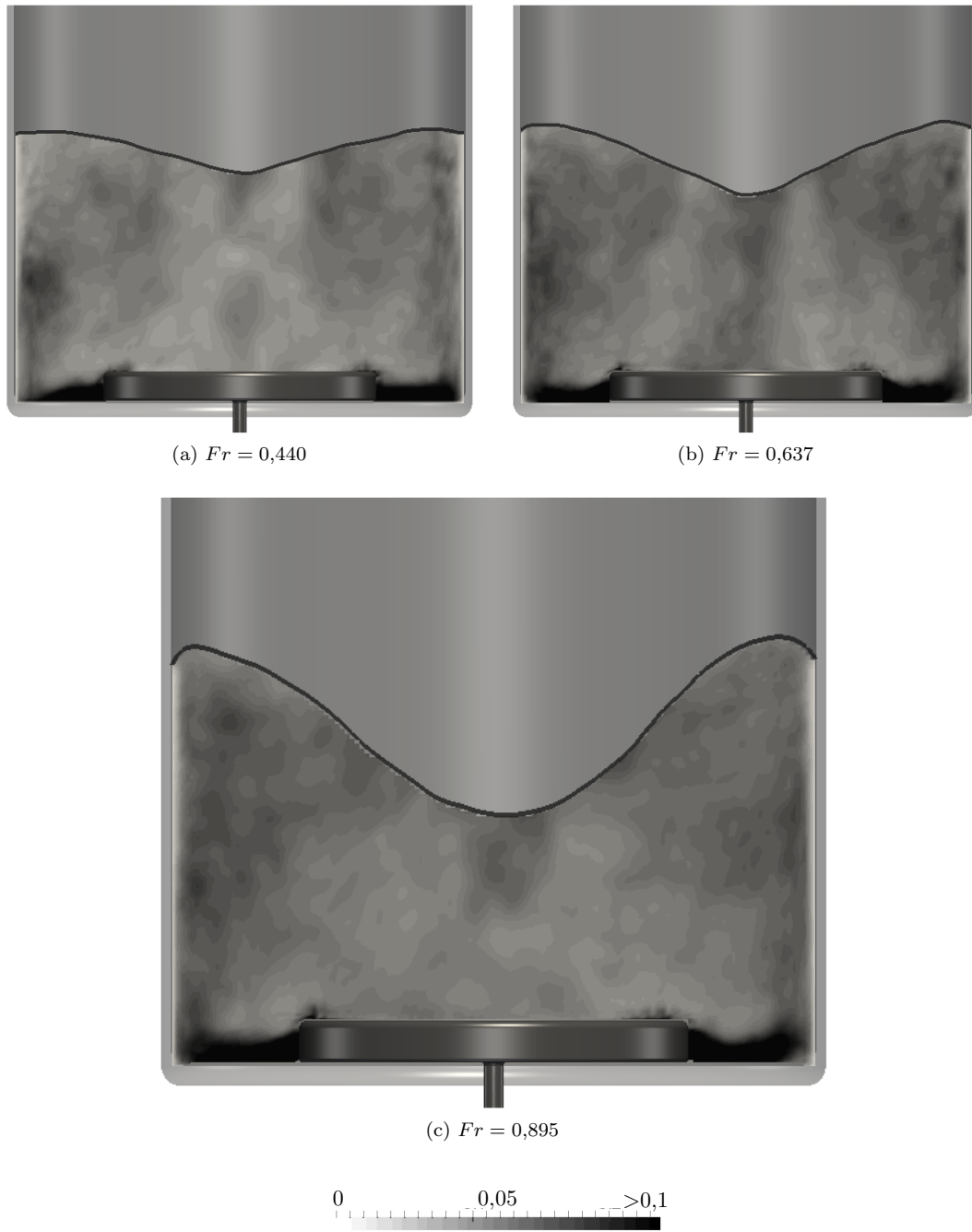


Figura 5.11: Líneas de trayectoria.

Figura 5.12: Energía cinética turbulenta k/u_{max}^2 .

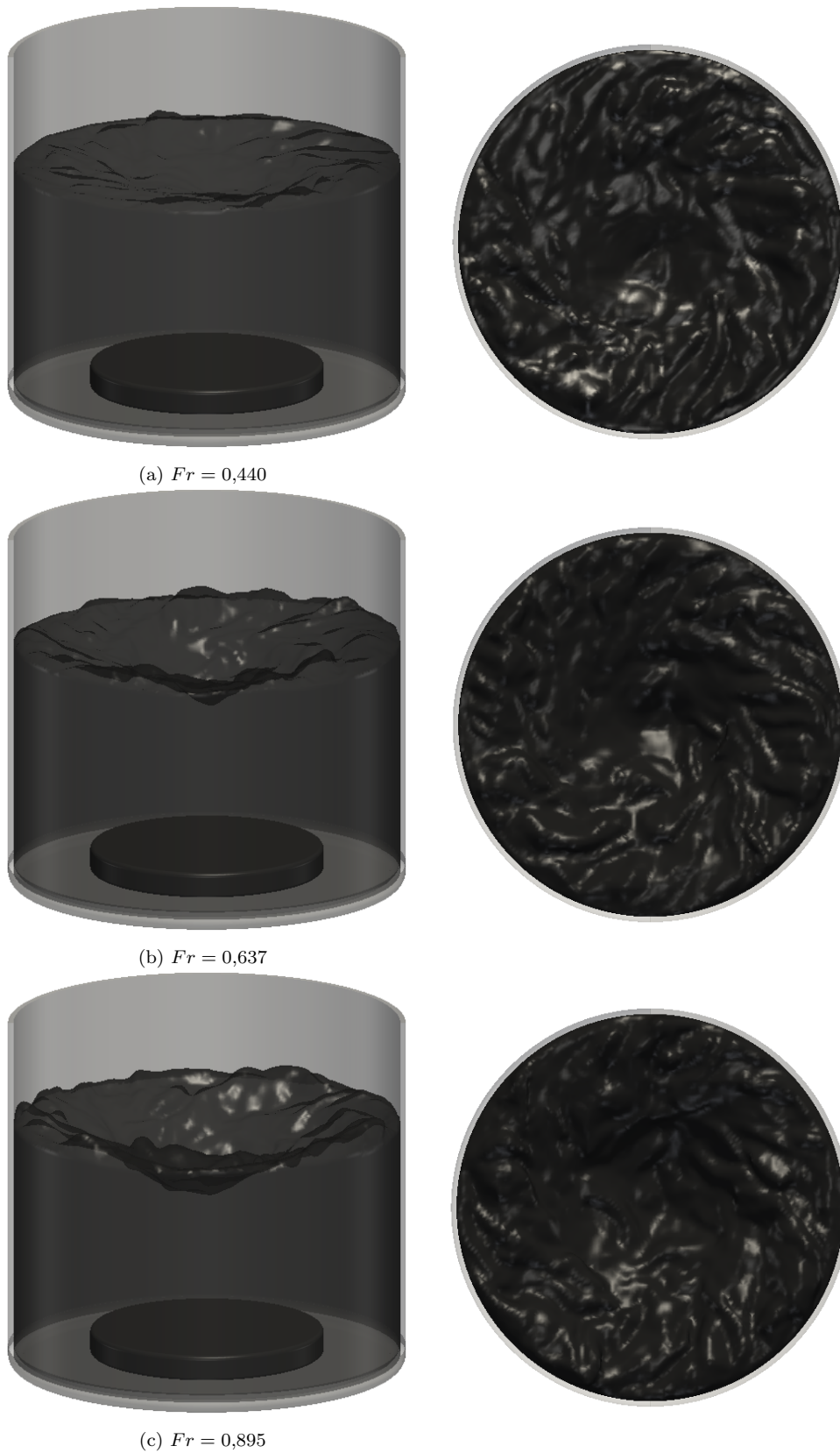


Figura 5.13: Topología instantánea de la superficie libre para los tres casos de estudio.

Capítulo 6

Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros

En el presente trabajo, se desarrolló una herramienta para simulación de grandes escalas en un tanque agitado. El propósito fue estudiar la influencia de la deformación de la superficie libre en su hidrodinámica, además del cambio en su topología a diferentes condiciones de operación. En general, el código numérico y la metodología utilizadas describieron de forma correcta y aproximada la física ya reportada en trabajos anteriores.

El uso de la función *Level-Set* como la entidad para resolver la topología de la superficie libre, fue adecuada. La utilización de condiciones de frontera simplificadas mediante el método *Ghost-Fluid*, evitando la ardua tarea de resolver también la fase gaseosa, así como las técnicas de computo de alto rendimiento con el fin de reducir tiempos de cómputo excesivo, hicieron viable el análisis de flujos industriales complejos mediante la alternativa LES.

La profundidad de la superficie depende linealmente del número de *Froude*. El flujo dentro del tanque no sólo es angular, en la zona del impulsor y la superficie libre, se cuenta con dispersión radial, además, en la Región de Vórtice Libre se tienen importantes efectos del flujo secundario debido a la componente axial. Las dos regiones existentes en el tanque difieren en cuanto a movimiento convectivo y nivel de turbulencia, haciendo la RVL una mejor zona para llevar a cabo el mezclado.

La deformación en la superficie libre y la presión están completamente ligadas, por lo que se debe de tener especial cuidado en su solución. En este trabajo, a diferencia de los numéricos encontrados en la literatura, se utilizó por primera vez una ecuación de estado pseudo-incompresible para la solución de la presión, dando buenos resultados en la descripción de la física que ocurre dentro del tanque.

6.1. Trabajos futuros

- Realizar las simulaciones utilizando impulsores y configuraciones geométricas industriales.
- Añadir la influencia del gas con el fin de: analizar las condiciones críticas de operación (cuando se induce gas al líquido debido al impulsor), así como, el análisis de sistemas de vórtice autoinducido.
- Programar por completo el código numérico en CUDA con el fin de evitar las costosas transferencias de memoria.

Bibliografía

- G. Ascanio. Por comunicado. 2014.
- 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.
- V. Buwa, A. Dewan, A.F. Nassar, and Durst F. Fluid dynamics and mixing of single-phase flow in a stirred vessel with a grid disc impeller: Experimental and numerical investigations. *Chemical Engineering Science*, 61:2815–2822, 2006.
- G.M. Cartland and J.J Fitzpatrick. Large-eddy simulation of the turbulent free-surface flow in an unbaffled stirred tank reactor. *Chemical Engineering Journal*, 127:11–22, 2007.
- Y.C. Chang, T.Y. Hou, 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.
- M. Ciofalo, A. Brucato, F. Grisafi, and N. Torraca. Turbulent flow in closed and free-surface unbaffled tanks stirred by radial impellers. *Chemical Engineering Science*, 14:3557–3573, 1996.
- R.P. Fedwik. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 152:457–492, 1999.
- J. Friedrich. *Centrifugal pumps*. Springer, Nueva York, Estados Unidos de América, 2010.
- S.K. Godunov. A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mathematics Sbornik*, 47:357–393, 1959.
- T. Gottlieb. Dissipative two-four methods for time dependent problems. *Mathematics of Computation*, 30:703–, 1976.
- A. Harten. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory schemes iii. *Journal of Computational Physics*, 71:231–303, 1987.
- A. Lamarque, B. Zoppe, 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*, 65:4307–4322, 2010.
- T. Mahmud, J.N. Haque, K.J. Roberts, D. Rhodes, and D. Wilkinson. Measurements and modelling of free-surface turbulent flows by magnetic stirrer in an unbaffled stirred tank reactor. *Chemical Engineering Science*, 64:4197–4209, 2009.
- O. Métails. Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably-stratified turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 239, 1992.
- S. Nagata. *Mixing : Principles and applications*. Halsted Press, Tokyo, Japón, 1975.
- 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.

- S. Osher. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton– jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79:12–49, 1988.
- S. Osher. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer-Verlag, Nueva York, Estados Unidos de América, 2003.
- A. Perrin and H. Hu. An explicit finite-difference for simulation of moving particles. *Journal of Computational Physics*, 212:166–187, 2006.
- A.R. Rao and B. Kumar. Vortex behaviour of an unbaffled surface aereator. *ScienceAsia*, 35:183–188, 2009.
- E. Rouy. A viscosity solutions approach to shape-from-shading. *SIAM J*, 29:867–884, 1992.
- L. Smit and J. During. Vortex geometry in stirred vessel. *The Seventh European Congress of Mixing*, 2:633–639, 1991.
- 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.