

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA  
METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

Departamento de Ingeniería en Procesos e Hidráulica



Casa abierta al tiempo

**"ANÁLISIS NUMÉRICO  
DEL PROCESO DE MEZCLADO  
EN TANQUES AGITADOS  
CON FLUIDOS VISCOSOS"**

**T E S I S**

**Que presenta el Ingeniero Químico:  
Eslí Vázquez Nava**

**Para obtener el grado de :  
Maestría en Ingeniería Química**

**Dirigida por el :  
Dr. H. Felipe López Isunza**

México, D.F.

Julio, 1995

**ANÁLISIS NUMÉRICO DEL  
PROCESO DE MEZCLADO  
EN TANQUES AGITADOS  
CON FLUIDOS VISCOSOS**



*A*

*mis Padres*

*con un profundo respeto*



# Agrazdecimientos

Dr. H. Felipe López Isunza

Por el apoyo ofrecido durante la realización del presente estudio, su interés en la investigación me hizo apreciar de manera distinta la Ingeniería Química...

Al profesorado de la Universidad  
Autónoma Metropolitana  
Unidad Iztapalapa

Por la formación académica que se me brindó, la cual forma parte de una lucha personal por alcanzar el desarrollo integral...

Ing. Nimrod Vázquez Nava

Por su confianza y auxilio brindado en los momentos que necesitaba apoyo durante mis estudios...

M. en C. Rafael Maya

Por sus ideas sugeridas, que delinearon algunas bases del presente estudio...

M. en C. Hugo Jiménez Islas

Por sus aportaciones, las cuales, cambiaron el enfoque de solución al modelo resuelto...

Dr. Alberto Soria

Por su crítica constructiva acerca del planteamiento e interpretación del modelo resuelto...

Consejo Nacional de Ciencia y  
Tecnología

Por el apoyo financiero otorgado para la realización del posgrado...

Industrias Negromex.

Por su interés y apoyo financiero en la presente investigación...

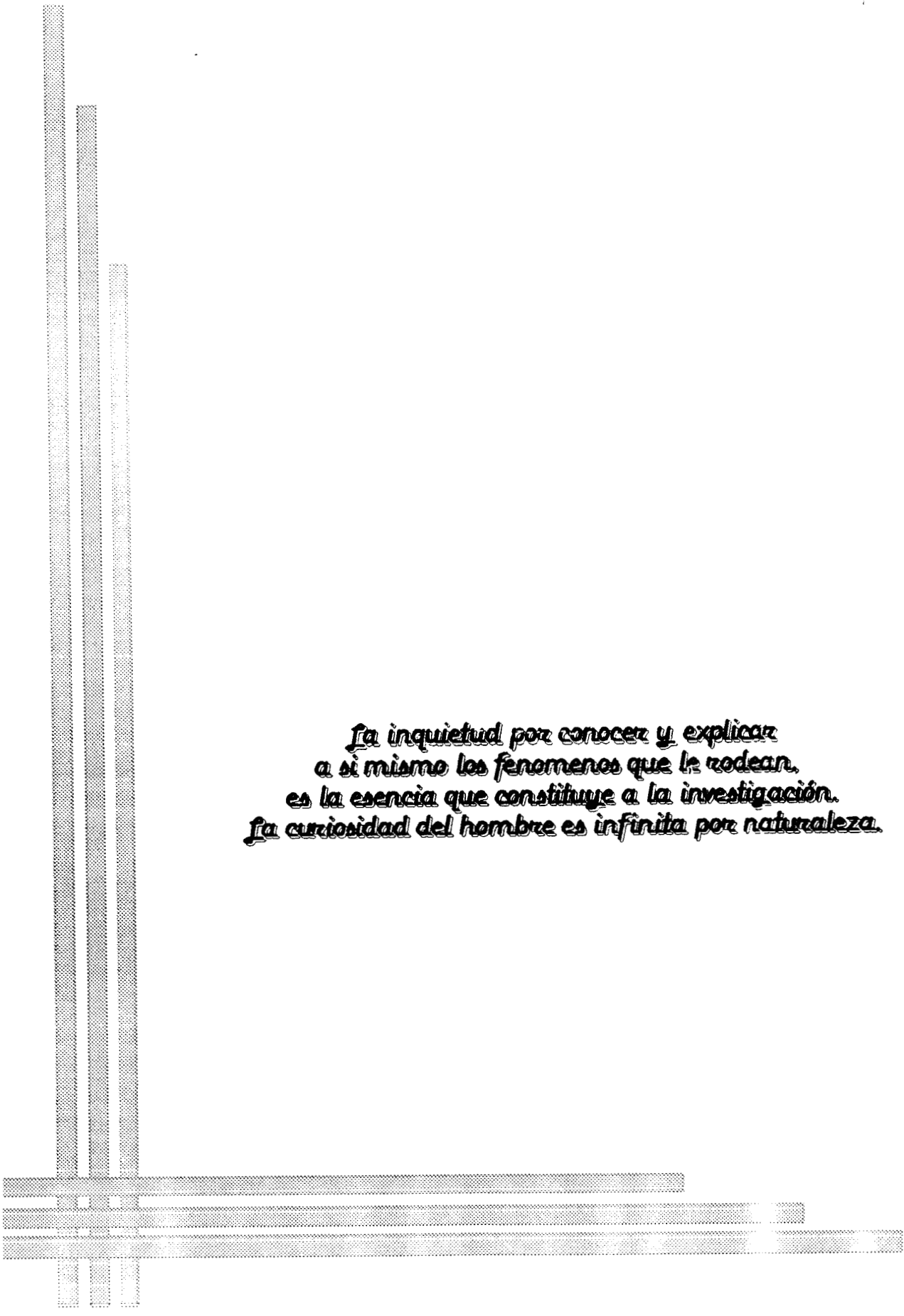
Sistema de Computo Red de la  
Universidad Autónoma Metropolitana  
Unidad Iztapalapa

Por haber ofrecido un excelente servicio y en especial por dejar las computadoras encendidas día y noche...

Horacio, Hector, Mary, Paty, Alma, Elizabeth, Ángel, Nacho, Judith, Arturo, Chilucas, Polo, Esteban, Tere, Lety, Juanito, Pelos, y todos aquellos, que igual de importantes, por ahorrar papel y espacio no escribo.

Por haberme brindado una amistad inolvidable...

... *Gracias.*



*La inquietud por conocer y explicar  
a sí mismo los fenómenos que le rodean,  
es la esencia que constituye a la investigación.  
La curiosidad del hombre es infinita por naturaleza.*

# INDICE

Pags.

Simbología

Lista de Figuras

Lista de Tablas

Resumen

Introducción

Objetivo General

Objetivos Particulares

i

ii

iii

## CAPITULO I : REVISIÓN DE LA LITERATURA

1.1 Antecedentes 1

1.2 Modelos de Procesos de Mezclado 2

## CAPITULO II : MÉTODOS DE SOLUCIÓN NUMÉRICA

2.1 El Método de Elemento Finito 8

2.2 Soluciones Clásicas 9

2.3 Una Expresión "Débil" 11

2.4 Funciones Geométricas de Interpolación 19

2.4.1 Funciones geométricas lineales de interpolación 20

2.4.2 Funciones geométricas cuadráticas de  
interpolación 22

## **CAPITULO III : DESARROLLO DEL MODELO DE TRANSPORTE DE MOMENTO**

3.1 Definición del Problema	25
3.1.1 Ecuaciones de cambio	27
3.1.2 Condiciones frontera	29
3.2 La Malla	31
3.3 Discretización del Modelo	35

## **CAPITULO IV : RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

4.1 Metodología	39
4.2 Análisis de Simulaciones para el Impulsor de Paleta	41
4.3 Análisis de Simulaciones para el Impulsor de Ancla	50

## **CAPITULO V : CONCLUSIONES**

## **BIBLIOGRAFIA**

# SÍMBOLOGÍA

$a_j$	Parametros del polinomio de aproximación para el elemento finito.
A	Area del triangulo del elemento dimensionalizado
g	Fuerza de gravedad, cm/seg.
J	Jacobiano de la transformación
K	Conductividad térmica,
L	Longitud del alambre, cm.
n	Vector normal unitario
p	presión
q	Flujo constante de calor,
Q	Fuente de Calor Interno,
r	Coordenada de dirección radial
$R(x)$	Función residuo, asociada con el error en la aproximación.
S1	Contorno que representa el impulsor y el eje
S2	Contorno que representa a la pared del tanque
T	Temperatura, °C
$T_L$	Temperatura constante en la pared,
$T(x)$	Perfil apximación de temperatura.
$T^*(x)$	Perfil de temperatura de solución verdadera
$v_r$	Componente de velocidad angular, cm/seg

---



$v_\theta$	Componente de velocidad radial, cm/seg.
$v_i$	Valor numerico de velocidad en el nodo i.
$v(r, \theta)$	Perfil de aproximación de velocidad
$v^*(r, \theta)$	Perfil de velocidad de solución verdadera, cm/seg.
$W(x)$	Función peso del metodo de los residuos ponderados

### Simbolos griegos

$\alpha_i$	Parametros del polinomio de aproximación para el elemento finito.
$\phi_i$	Función geometrica de interpolación en el nodo i.
$\Gamma$	Contorno del dominio.
$\eta$	Coordenada de dirección angular dimensionalizado.
$\mu$	Viscosidad, gr./cm.seg.
$\pi$	Tensor de esfuerzo
$\theta$	Coordenada de dirección angular, radianes.
$\rho$	Densidad, $\frac{gr}{cm^3}$
$\Omega$	Superficie del dominio.
$\xi$	Coordenada de dirección radial dimensionalizado.
$\tau$	Tensor de esfuerzo, el cual incluye los terminos por disipación viscosa.
$\psi$	Función de aproximación polinomial del elemento finito.

# LISTA DE TABLAS

	Pags.
Tabla 1.1., Primeros articulos publicados de carácter teórico en procesos de mezclado.	3
Tabla 1.2., Publicaciones recientes en procesos de mezclado.	6

# LISTA DE FIGURAS

	Pags.
Figura <i>i.</i> , Tanque de agitación con impulsor de paleta.	i
Figura <i>ii.</i> , Tanque de agitación con impulsor de ancla.	ii
Figura 2.1., Conducción de calor en un alambre de longitud L.	10
Figura 2.2., Partición del dominio en nodos aplicando la técnica del elemento finito.	11
Figura 2.3., Aproximación lineal segmentada a un perfil de temperatura.	14
Figura 2.4., Segmento discretizado.	16
Figura 2.5., Elemento triangular cuadrático.	22
Figura 3.1., Tanque de agitación con impulsor de tipo paleta.	25
Figura 3.2., Tanque de agitación con impulsor de tipo ancla.	28
Figura 3.3., Vista superior del tanque con un impulsor de paleta.	29
Figura 3.4., Vista superior del tanque con un impulsor de ancla.	30
Figura 3.5., Elemento triangular de segundo orden.	31
Figura 3.6., Malla bidimensional para un impulsor de tipo paleta.	32
Figura 3.7., Malla bidimensional para un impulsor de tipo ancla.	33
Figura 3.8., Perfiles de velocidad @ 25°C, 30 r.p.m., con diferentes tamaños de malla.	34
Figura 4.1., Diagrama de flujo computacional.	40

---

Figura 4.2., Perfiles de velocidad en el plano @ 25° C, con un impulsor de paleta.	42
Figura 4.3., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 25° C con impulsor de paleta	43
Figura 4.4., Patrones de flujo para un impulsor de paleta.	44
Figura 4.5., Perfiles de velocidad en el plano @ 80° C, con un impulsor de paleta.	46
Figura 4.6., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 80° C con impulsor de paleta .	47
Figura 4.7., Componentes de velocidad radial para impulsor de paleta	49
Figura 4.8., Perfiles de velocidad en el plano @ 25° C, con un impulsor de ancla.	51
Figura 4.9., Componentes de velocidad angular y radial del tanque agitado @ 25° C con impulsor de ancla	52
Figura 4.10., Perfiles de velocidad en el plano @ 80° C, con un impulsor de ancla.	54
Figura 4.11., Componentes de velocidad angular y radial del tanque agitado @ 80° C con impulsor de ancla	56
Figura 4.12., Patrones de flujo para un impulsor de tipo ancla bajo regimen laminar.	57
Figura 4.13., Componentes de velocidad radial para un impulsor de ancla	58
Figura 4.14., Perfiles del componente de velocidad radial en el plano para impulsores de paleta y ancla @ 25° C, 70 r.p.m.	59

---

## RESUMEN

Se efectuó un análisis numérico empleando el método de elemento finito para la solución del modelo que describe los patrones de flujo primario que existen en un tanque cilíndrico durante el proceso de mezclado. Se analizó este fenómeno para un impulsor de paleta y uno de ancla. Se resuelve un modelo en dos dimensiones para un fluido viscoso newtoniano bajo condiciones de flujo laminar. Para simplificar las condiciones frontera del problema se considera que las hojas del agitador permanecen inmóviles y la pared del agitador gira a una velocidad angular constante. A partir de las consideraciones respectivas se obtiene una descripción de los perfiles de velocidad que se manifiestan en el tanque durante el proceso de mezclado, identificándose con ello el grado de homogeneización para ambos impulsores.

# INTRODUCCIÓN

Los tanques agitados son ampliamente utilizados en la industria de los procesos químicos y en la biotecnología, para el mezclado de líquidos de diferente grado de viscosidad. Una gran variedad de agitadores pueden ser empleados en el proceso de mezclado (ver figuras *i* y *ii*), por lo que para la adecuada selección del mismo intervienen condiciones de operación, tales como la velocidad de agitación, temperatura de operación y el comportamiento reológico del fluido, entre otras.

La calidad del producto terminado es una norma dentro de una empresa competitiva, por tal motivo, la necesidad de alcanzar mejores niveles de homogeneidad en las características del producto terminado, ha aumentado considerablemente.

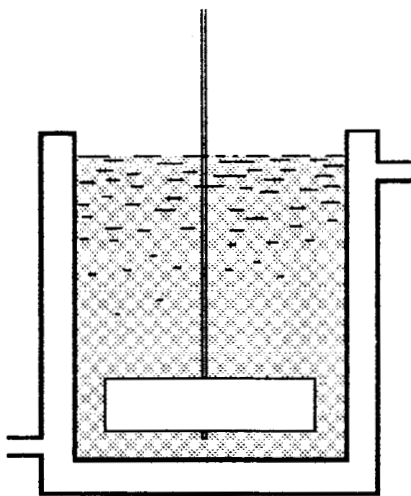


Figura *i*., Tanque de agitación con impulsor de paleta.

El diseño de sistemas de mezclado se basa en la determinación experimental de cantidades macroscópicas, las cuales describen de una manera cualitativa el grado de mezclado. Tiempo de circulación, tiempo de mezclado y potencia consumida dentro del tanque son las más ampliamente usadas para este propósito. Este enfoque es bastante largo, costoso y no provee una ruta eficiente para el escalamiento.

Se ha realizado estudios de carácter experimental por Medina (1994), que ha demostrado de manera cualitativa que los agitadores de proximidad son más eficientes que los agitadores tradicionales, para el mezclado de fluidos viscosos no Newtonianos, polímeros, fermentación con hongos, etc. En contraparte a estos estudios, existe una gran cantidad de empresas que emplean impulsores tradicionales. Esto ha tenido como consecuencia la necesidad de realizar estudios del proceso de mezclado con un carácter teórico, que incluyan la geometría de diversos impulsores que se usan en el proceso, a fin de obtener conclusiones confiables acerca de su desempeño.

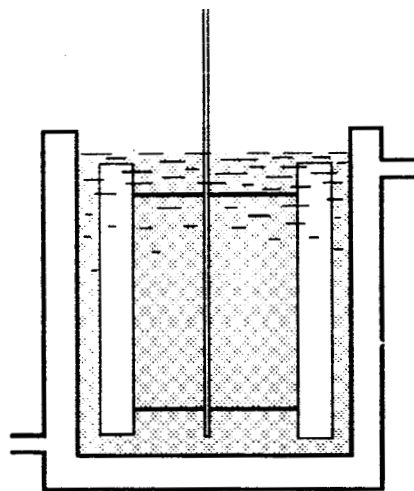


Figura *ii.*, Tanque de agitación con impulsor de ancla

## **OBJETIVO GENERAL**

En la presente investigación, se definió como meta demostrar que algunos parámetros de diseño pueden ser procesados computacionalmente con una precisión razonable, y así por vía numérica se provea de herramientas para el análisis del desempeño de diversos tipos de agitadores empleados en la práctica.

## **OBJETIVOS PARTICULARES**

- Demostrar teóricamente cual impulsor resulta ser más eficiente al comparar uno de proximidad de tipo ancla con uno de paleta, en terminos de alcanzar el mezclado del fluido de manera más eficiente durante el proceso de agitación.
- A partir de la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes mediante la técnica del elemento finito, obtener predicciones comparativas con resultados experimentales obtenidos por Medina (1994).
- Emplear el modelo para predecir, a diferentes condiciones de operación, los perfiles de velocidad que existen dentro de las diferentes zonas del tanque en agitación y así, poder identificar cuales de ellas se encuentran pobremente mezcladas. Se sabe que los transportes de calor y masa dependen enteramente de los perfiles de velocidad que se manifiestan durante el proceso de mezclado, por lo cual se efectua un estudio de trasporte de momento.





# REVISIÓN DE LA LITERATURA

## 1.1 ANTECEDENTES

El proceso de mezclado es una parte principal dentro de la industria química, a fin de obtener productos terminados con calidad homogénea. Por esta razón se han realizado estudios tanto experimentales como teóricos de las variables involucradas en el proceso de agitación.

El mezclado se entiende como una deformación a la que se encuentra sujeto el fluido por la acción mecánica de un agitador. Los impulsores empleados durante el proceso, son objeto de estudio con el fin de determinar su efectividad, hablando en términos de lograr una mejor calidad en el producto final.

El estudio teórico de sistemas de mezclado se sustentan sobre la base de la determinación experimental de cantidades macroscópicas, las cuales describen únicamente de manera cualitativa el grado de mezclado. Tiempo de circulación, tiempo de mezclado y potencia consumida son las más ampliamente usadas para este propósito. Este enfoque es bastante caro y no provee una ruta eficiente para el escalamiento.

El estudio teórico del problema se basa en la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes, en el caso de un fluido Newtoniano, en las cuales intervienen términos de fuerzas de disipación viscosa, fuerzas inerciales y fuerzas de convección. El problema de mezclado conceptualmente es simple, es necesario un agitador montado en un motor y un tanque en el cual se encuentra el líquido a homogeneizar. Sin embargo, el gran número de impulsores que pueden ser empleados, dependiendo del tipo

de fluido a procesar, con una geometría única y definida, hace que los modelos resultantes puedan ser bastante complejos en cuanto a su solución numérica.

La solución de modelos de mezclado por métodos numéricos es reciente, y las primeras contribuciones significativas a este campo fueron publicadas a principios de los 80s. Los progresos que se han obtenido han sido pequeños particularmente para fluidos viscosos no Newtonianos, debido a la dificultad para desarrollar una simulación de carácter general, debido a la amplia variedad de instrumentos de mezclado, de diferente geometría y comportamiento, además de su amplio rango de aplicaciones.

## **1.2 MODELOS DE PROCESOS DE MEZCLADO**

Una de las estimaciones numéricas pioneras (Hiraoka et al., 1979) fue llevada a cabo analizando un modelo bidimensional con un agitador de paleta para un fluido no Newtoniano, las ecuaciones de gobierno son resueltas por el método de diferencias finitas, aplicando únicamente cinco nodos por cada dirección, además de emplear el concepto de viscosidad aparente de Metzner y Otto (1957), que considera a la viscosidad directamente proporcional a la velocidad de deformación.

El principal problema con el método de solución empleado, es que en las fronteras de la región del dominio irregular, debido a que la malla no cubre exactamente el cuerpo, se pierde precisión en los resultados. Simular el comportamiento de mezclado, en el cual el fluido presenta adelgazamiento al corte no es tan simple de caracterizar con el concepto de una tasa de velocidad de deformación promedio, como lo aseguran Metzner y Otto (1957), debido a que la constante de proporcionalidad entre la tasa y la velocidad de rotación de agitador, es una función del comportamiento del flujo, y su aplicabilidad es útil solamente dentro de ciertos rangos de operación (Brito de la Fuente et al., 1992).

Uno de los aspectos que se empezó a considerar fue el patrón de flujo secundario que se da dentro del tanque agitado durante el proceso de mezclado, ver tabla 1.1. En este sentido existe un trabajo que toma en cuenta dichos patrones (Ohta et al., 1985), con un impulsor de tipo ancla

para un fluido Newtoniano. Los resultados computacionales indican la existencia de un vórtice en las regiones inferiores y superiores del tanque agitado. El análisis de los patrones de flujo secundario bajo un esquema en el que no se incluyen los patrones de flujo primario resulta inadecuado para describir el proceso de mezclado dentro de un enfoque global.

<b>Investigador</b>	<b>Publicación</b>	<b>Comentarios</b>
Hiraoka, et al., (1979)	Two dimensional model analysis of flow behaviour of highly viscous non-Newtonian fluid in agitated vessel with paddle impeller	Se emplea el concepto de Metzner & Otto para predicción de la viscosidad, además del empleo de un factor de corrección adicional para su simulación.
Ohta, et al., (1985)	A two dimensional model for the secondary flow in an agitated vessel with anchor impeller	Realiza un análisis bidimensional en el plano r-z, obteniendo el consumo de potencia.
Hiraoka, et al., (1988)	Numerical analysis of three dimensional velocity profile of highly viscous Newtonian fluid in an agitated vessel with paddle impeller	Se resuelve el problema empleando funciones de corriente y vorticidad, y se usa el método de diferencias finitas.

Tabla 1.1., Primeros artículos publicados de carácter teórico en procesos de mezclado.

La tendencia que se sigue es considerar el espacio geométrico a modelar, por lo que se plantean modelos en tres dimensiones (Hiraoka, et al., 1988). En especial, este último trabajo presenta una simulación numérica para flujo laminar en un tanque agitado en tres dimensiones con un agitador de tipo paleta, valiéndose del método de diferencias finitas para resolver el modelo que proponen, con una malla que consta de solo 18x20 divisiones en el plano radial-angular, las cuales distan mucho de ser suficientes para

caracterizar de manera clara los patrones de flujo que se presentan por la presencia del agitador tomado en consideración.

Con el objeto de incluir todo el espacio dentro del tanque se han efectuado simulaciones tridimensionales para el proceso de agitación con impulsores de tipo ancla y paleta (Kaminoyama, et al., 1990), valiéndose para ello del método de diferencias finitas, el cual no es el más apropiado para simular geometrías irregulares. Además de que dadas las geometrías de los impulsores como es el ancla, resulta innecesario simular el patrón de flujo tridimensional cuando dicho agitador presenta de manera dominante patrones de flujo primario, que bien se definen en un plano radial-angular.

Una de las investigaciones recientes dentro del campo de procesos de mezclado es el de Tanguy, et al., (1992), en el cual se presenta un análisis con elemento finito tridimensional, fue llevado a cabo para la agitación de un fluido Newtoniano con un agitador helicoidal. La velocidad de rotación fue seleccionada de tal modo que las condiciones de operación se encuentran en la región de mezclado laminar. Uno de los problemas al modelar un tanque agitado es poder definir las condiciones frontera; para facilitar el establecimiento de las mismas se considera que las hojas del agitador se encuentran fijas y la pared del tanque se encuentra en rotación. Este problema fue resuelto con la ayuda del programa PATRAN PLUS, el cual fue empleado para generar la malla que cubriera la geometría del agitador y del tanque. Despreciando el espesor de la hoja del agitador se obtuvieron los patrones de flujo que siguen las partículas dentro del tanque. Una de las desventajas de la solución es que debido a la complejidad de la misma, el conjunto de ecuaciones que resuelve el modelo es cerca de noventa mil variables nodo, la que resulta difícil de implementar en cualquier sistema de computo.

Los fluidos se clasifican de acuerdo a su comportamiento reológico como Newtonianos y no Newtonianos: los fluidos Newtonianos son aquellos en los que el esfuerzo varía en forma lineal con la rapidez de deformación, es decir, presenta una viscosidad constante. Por otro lado, los fluidos no

Newtonianos son aquellos en los cuales el esfuerzo varia en forma no lineal con respecto a la rapidez de deformación. Resolver el problema para un fluido Newtoniano, provee la estructura necesaria para resolver el problema de agitación para un fluido no Newtoniano. Dependiendo de la naturaleza reológica del fluido la complejidad del modelo es mayor, en terminos de realizar una simulación más completa que incluya todos los fenomenos que se presentan durante el proceso de agitación.

Uno de los comportamientos que actualmente se han estudiado es precisamente la disminución que presenta el fluido en la magnitud de su viscosidad al someterse al corte originado por la velocidad de rotación del agitador, esto es que ofrece una menor resistencia al movimiento, (Brito de la Fuente, et al., 1992), la manera en que este fenomeno afecta sobre el consumo de la potencia durante el proceso de mezclado es importante y para su descripción se establecen modelos semi-empíricos.

Recientemente se efectuó un estudio numérico en una geometría tridimensional para un agitador helicoidal analizando el mezclado de un fluido viscoso no Newtoniano (Tanguy, et al., 1992). En este se predicen tiempos de circulación y se simula los patrones de flujo, confirmando la efectividad del agitador para el mezclado de líquidos altamente viscosos. El modelo incluye el balance de momento, y se hace un estimado de la potencia suministrada para el proceso de agitación, empleando ley de la potencia para describir el efecto de adelgazamiento al corte. Para bajas velocidades de deformación, el cálculo de los vectores que corresponden a los perfiles de viscosidad presentados en el tanque, resultan sobrestimados por medio de la ley de la potencia. Evidentemente que el costo computacional es enorme debido a que se requiere de una buena velocidad de procesamiento además de una capacidad de memoria que pueda soportar el sistema de variables que implica la solución del modelo.

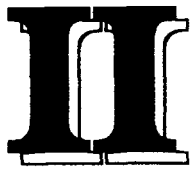
<b>Investigador</b>	<b>Publicación</b>	<b>Comentarios</b>
Kaminoyama, et al., (1990)	Numerical analysis of three-dimensional flow of a pseudoplastic liquid in a stirred vessel with a turbine impeller.	Se resuelve el problema por medio de la técnica de diferencias finitas, empleando el modelo de Ellis para describir los perfiles de viscosidad dentro del tanque.
Tanguy, et al., (1992)	Finite element analysis of viscous mixing with a helical ribbon-screw impeller	Presenta un estudio teórico en tres dimensiones por medio del método de elemento finito, para un fluido Newtoniano
Tanguy, et al., (1992)	Mixing of non-Newtonian viscous fluids with helical impellers : experimental and three-dimensional numerical studies	Se desarrolla el problema por medio de la técnica de elemento finito y empleando ley de la potencia para describir los perfiles de viscosidad, resolviendo un sistema de noventa mil ecuaciones.
Kaminoyama, et al., (1994)	Numerical analysis of flow of a Bingham fluid in an anchor impeller	Se presenta el estudio en tres dimensiones con el método de diferencias finitas.
Kaminoyama, et al., (1994)	Numerical analysis of power consumption and mixing time for a pseudoplastic liquid in geometrically similar stirred vessels with several kinds of plate-type impellers	Para un agitador de varias paletas se efectuó un análisis teórico en forma tridimensional empleando el método de diferencias finitas para la solución del modelo.

Tabla 1.2., Publicaciones recientes en procesos de mezclado.

Los últimos trabajos que se han realizado por Kaminoyama et al., (1994), son modelos para impulsores de ancla y paleta, dentro de un espacio tridimensional, los cuales emplean ecuaciones reológicas complejas con el objetivo de obtener una simulación más fiel en cuanto a las características del comportamiento del fluido al ser sometido al proceso de agitación. El emplear el método de diferencias finitas restringe a estudiar geometrías de impulsores de ancla y paleta, este problema con un esquema de solución por el método del elemento finito ofrece una mejor caracterización del espacio geométrico del tanque agitado.

Las publicaciones que se han realizado actualmente, muestran una tendencia a efectuar análisis de geometrías irregulares en cuanto a los impulsores empleados, ver tabla 1.2, razón por la cual el método de elemento finito ha resultado idóneo para este tipo de problemas. Debido a la complejidad numérica del problema de mezclado las investigaciones muestran estudios únicamente de transporte de momento, sumando a ello una ecuación reológica.

Como se mencionó, los avances dentro del campo han sido hechos de manera muy lenta, debido a que resulta muy complicado resolver un modelo numérico que sea de carácter universal para cualquier sistema de agitación. La enorme variedad de agitadores empleados, además de los diversos comportamientos reológicos, dificultan el establecimiento de una solución con esta característica de universalidad ya que en cada caso se requiere de un estudio particular al cual se suman las condiciones de operación a las que se lleva a cabo el mezclado. El espacio geométrico y las condiciones de operación para el cual se resuelve el modelo resulta ser un caso particular de una experimentación previamente realizada por Medina (1994).



# MÉTODOS DE SOLUCIÓN NUMÉRICA

Existen diversas técnicas numéricas para la solución de problemas de ecuaciones diferenciales parciales, las más comúnmente empleadas dentro del modelamiento de procesos de flujo de fluidos han sido los métodos de diferencias finitas y de elemento finito. El propósito de estos métodos es reducir las ecuaciones en derivadas parciales de las variables consideradas a un conjunto de ecuaciones algebraicas simultáneas, generalmente definiendo variables nodo en los puntos fijos del elemento.

Empleando estas aproximaciones, el conjunto completo de ecuaciones en derivadas parciales puede ser reducido a un conjunto de ecuaciones algebraicas con las variables evaluadas en los nodos. Una de las dificultades con el método de diferencias finitas estriba en que en las orillas de la región de un dominio irregular, la malla no cubrirá exactamente el espacio a modelar, por lo que habrá una pérdida de precisión en la simulación, debido a que el problema que se modela contiene en su espacio una geometría irregular, el haber empleado este método, se habría traducido en una falta de confiabilidad en cuanto a la precisión de los resultados. Por otro lado, el método de elemento finito permite tener esa mejor definición en cuanto al dominio del problema, y la geometría del agitador por irregular que sea puede ser cubierta en su totalidad.

## 2.1 EL MÉTODO DE ELEMENTO FINITO

El método de elemento finito es una técnica numérica que provee soluciones aproximadas a ecuaciones diferenciales derivadas de modelos



que provienen de situaciones físicas. Del mismo modo que en el esquema simple de diferencias finitas, el método de elemento finito requiere de un problema definido en un espacio geométrico (o dominio), que se subdivide en un número finito de regiones (una malla). En diferencias finitas, la malla consiste de renglones y columnas de líneas ortogonales; en elemento finito, cada subdivisión es única y no tiene que ser necesariamente ortogonal ya que se pueden emplear triángulos o cuadriláteros en dos dimensiones, y tetraedros o hexaedros en tres dimensiones.

Sobre cada elemento finito, las variables desconocidas (temperatura, velocidad, etc.) son aproximadas empleando funciones conocidas. Estas funciones pueden ser polinomios lineales o de orden mayor, que dependen de las localizaciones geométricas de los nodos empleados para definir la geometría del elemento finito. Las ecuaciones de gobierno en el método de elemento finito son integradas en cada elemento finito y la solución es sumada (ensamblada) sobre el dominio completo del problema. Como una consecuencia de estas operaciones, se obtiene un conjunto de ecuaciones en términos de un conjunto de parámetros desconocidos para cada elemento.

## 2.2 SOLUCIONES CLÁSICAS

Con el objeto de ilustrar los fundamentos del método de elemento finito, como problema tipo se toma el modelamiento de la determinación de la conducción de calor sobre un alambre delgado y homogéneo, de longitud  $L$ . Se considera que el extremo izquierdo está expuesto a un flujo constante de calor  $q$ , el extremo derecho se mantiene a una temperatura constante  $T = T_L$ . Todo el alambre se encuentra rodeado por un material aislante, como se muestra en la figura 2.1. También se considera que una corriente eléctrica se mueve a través del alambre, la cual actuará como una fuente de calor interno de magnitud  $Q$ .

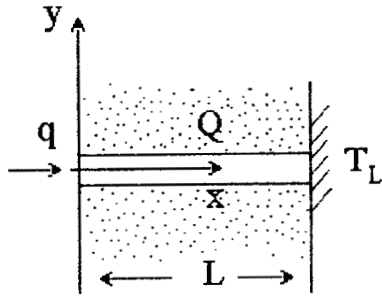


Figura 2.1, Conducción de calor en un alambre de longitud \$L\$.

Empleando la ley de Fourier, se puede fácilmente describir la ecuación diferencial que gobierna la distribución de temperatura a lo largo del alambre :

$$-K \frac{d^2 T}{dx^2} = Q \quad 0 \leq x \leq L \quad \dots(2.1)$$

donde \$x\$ es la variable espacial de la coordenada, \$K\$ es la conductividad térmica del material (una constante), y \$Q\$ es la generación de calor interno por unidad de volumen. Las condiciones frontera asociadas con el problema son:

$$\begin{aligned} -K \frac{dT}{dx} &= q && \text{para } x = 0 \\ T &= T_L && \text{para } x = L \end{aligned} \quad \dots(2.2)$$

La solución exacta a la expresión 2.1, con sus condiciones a la frontera dadas, puede ser encontrada fácilmente por integración directa, si se supone que \$Q\$ es una función integrable :

$$T(x) = T_L + \frac{q}{K}(L-x) + \frac{1}{K} \int_x^L \left( \int_0^y Q(z) dz \right) dy \quad \dots(2.3)$$

Si \$Q\$ es constante, esta última ecuación se reduce a :

$$T(x) = T_L + \frac{q}{K}(L-x) + \frac{Q}{2K}(L^2 - x^2) \quad \dots(2.4)$$

Este ejemplo es sencillo, y la respuesta buscada se puede hallar de manera exacta. Problemas más difíciles no se prestan por sí mismos a soluciones analíticas sencillas, en la situación eventual de que estas pudiesen ser obtenidas del todo, de aquí que llega a ser decisivo entender completamente el comportamiento de los algoritmos numéricos en

problemas simples, con el objetivo de interpretar aproximaciones numéricas de problemas más complejos.

## 2.3 UNA EXPRESIÓN "DÉBIL"

Existen básicamente dos procedimientos que son normalmente empleados para formular y resolver expresiones de la forma de la ecuación 2.1, empleando elemento finito. Estos son conocidos como los métodos de Rayleigh-Ritz y de Galerkin. Otros métodos alternativos están basados en técnicas de colocación, peso constante y mínimos cuadrados. Todos estos procedimientos pertenecen a la familia de métodos de residuos ponderados.

El primer paso es definir una partición o definición de nodos en el intervalo  $0 \leq x \leq L$ , consistiendo en un número finito de subintervalos que cubren el dominio completamente como se ilustra en la figura 2.2, donde cada subintervalo es denominado elemento, y los puntos finales de  $x_k$  de cada elemento es llamado nodo. Sobre cada uno de estos elementos los perfiles de velocidad serán aproximados empleando funciones conocidas y predeterminadas de la variable independiente  $x$ , denotadas por  $\phi_j(x)$ , y los correspondientes parámetros desconocidos  $a_j$ . De acuerdo con esto, se define un elemento como un subintervalo, junto con un número de funciones y un mismo número de parámetros, tales que si los parámetros son conocidos, una aproximación de  $T(x)$  es conocida dentro del subintervalo.

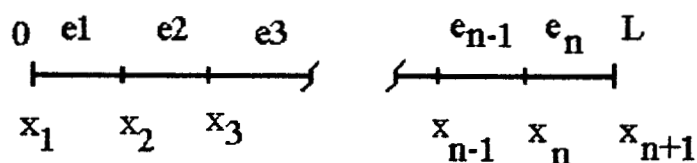


Figura 2.2, Partición del dominio en nodos aplicando la técnica del elemento finito.

Sobre el dominio completo  $0 \leq x \leq L$ , se tiene :

$$T(x) \cong a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + \dots + a_{n+1}\phi_{n+1}(x) \quad \dots(2.5)$$

Las funciones  $\phi_i(x)$  son conocidas como funciones geométricas de interpolación (serán explicadas posteriormente). Esta última expresión se generaliza también de la siguiente forma :

$$T(x) = \sum_{i=1}^{n+1} a_i \phi_i(x) \quad \dots(2.6)$$

La función  $T(x)$  es seleccionada de tal modo que las condiciones a la frontera sean siempre satisfechas, aunque esto todavía no sea evidente.

Como se mencionó anteriormente, se empleó la técnica de Galerkin, para formular el método de elemento finito. El procedimiento de Rayleigh-Ritz es más deseable desde el punto de vista matemático porque este permite desarrollar una teoría matemática de aproximación y convergencia. Sin embargo, este tiene la desventaja de que llega a ser muy difícil, y algunas veces imposible de aplicar en problemas complejos de flujo de fluidos y de transferencia de calor (Pepper, et al., 1992) . El método de Galerkin, dicho de otro modo, es fácil de implementar y garantiza generar un procedimiento para integrar las ecuaciones de gobierno aun cuando el método de Rayleigh-Ritz no pueda ser aplicado.

Cuando la solución se aproxima empleando una expresión de la forma 2.6, en general no se puede obtener la solución verdadera a la ecuación diferencial. Como consecuencia, si se reemplaza la solución aproximada en el lado izquierdo de la expresión 2.1, no se obtendrá una identidad, pero sí alguna función "residuo" asociada con el error en la aproximación. Se puede definir este error como :

$$R(T,x) \equiv -K \frac{d^2 T(x)}{dx^2} - Q \quad \dots(2.7)$$

Aquí  $T$  es la aproximación a la solución verdadera  $T^*$ . Por lo tanto es claro que :

$$R(T^*, x) \equiv 0 \quad \dots(2.8)$$

Sin embargo, para cualquier  $T \neq T^*$ , no se puede forzar al residuo a desaparecer en cada punto de  $x$ , no importa que tan pequeño se haga el nodo o que tan grande sea la expansión de la serie. La idea del método de los residuos ponderados es que se puede multiplicar el residuo por una función peso y forzar la integral de la expresión ponderada a desaparecer :

$$\int_0^1 W(x) R(T, x) dx \quad \dots(2.9)$$

donde  $W(x)$  es la función peso. Seleccionando diversas funciones peso y reemplazando cada una de ellas en esta expresión, se puede generar un sistema de ecuaciones en el que los parámetros desconocidos  $a_i$ , determinarán una aproximación de la forma de la serie dada por la ecuación 2.6. El tipo de función peso seleccionada depende del tipo de técnica de residuos ponderados seleccionada. En el procedimiento de Galerkin, los pesos son un conjunto igual a las funciones geométricas de interpolación  $\phi(x)$ , es decir :

$$W_i(x) = \phi_i(x) \quad \dots(2.10)$$

y puesto que el número de parámetros desconocidos  $a_i$ , es igual al número de funciones geométricas de interpolación  $\phi_i$ , se generará un sistema de ecuaciones algebraicas con el mismo número de ecuaciones como incógnitas. La existencia de la solución a tal sistema de ecuaciones está garantizada si las condiciones frontera asociadas con la ecuación diferencial son correctamente impuestas (Pepper, et al., 1992).

Ahora se desea evaluar el lado izquierdo de la integral en la ecuación 2.12, empleando la proposición de las funciones geométricas de interpolación  $\phi(x)$  como pesos  $W(x)$ . Así el procedimiento de Galerkin da :

$$\int_0^L \phi(x) \left( -K \frac{d^2 T}{dx^2} - Q \right) dx = 0 \quad \dots(2.11)$$

Se debe encontrar una forma apropiada para las funciones  $\phi_i(x)$  en la ecuación 2.6. Puesto que la distribución de la temperatura debe ser una función continua de  $x$ , el modo más simple de aproximar sería emplear una interpolación polinomial segmentada sobre cada elemento. En particular, una aproximación lineal segmentada parece muy atractiva, ver figura 2.3.

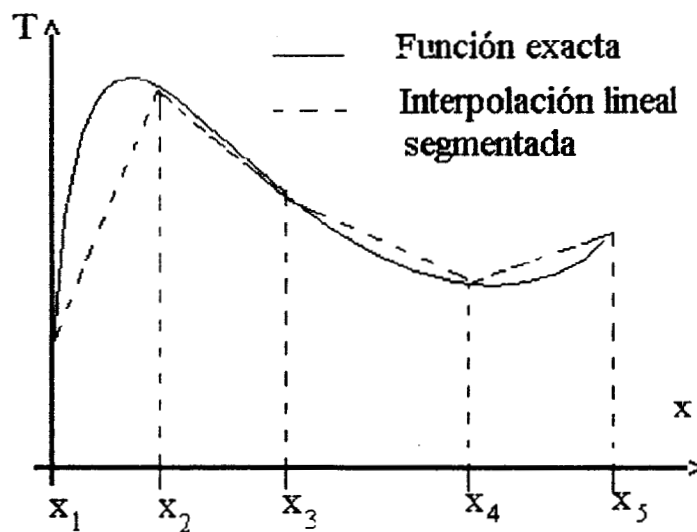


Figura 2.3, Aproximación lineal segmentada a un perfil de temperatura

Desafortunadamente, las primeras derivadas de tales funciones no son continuas en los puntos finales de los elementos y, de aquí, que las segundas derivadas no existan, además de que la segunda derivada de  $T$  desaparecería dentro de cada elemento.

Afortunadamente, esta dificultad puede ser fácilmente resuelta por una aplicación del principio de integración por partes al término de la segunda derivada en la expresión 2.11, es decir,

$$\int_0^L \phi(x) \left[ -K \frac{d^2 T}{dx^2} \right] dx = \int_0^L K \frac{d\phi}{dx} \frac{dT}{dx} dx - K \phi \left. \frac{dT}{dx} \right|_0^L \quad \dots(2.12)$$

y la expresión 2.11 puede ser escrita como :

$$\int_0^L K \frac{d\phi}{dx} \frac{dT}{dx} dx - \int_0^L \phi Q dx - K \phi \left. \frac{dT}{dx} \right|_0^L = 0 \quad \dots(2.13)$$

la cual es una expresión "débil" del problema puesto que solo contiene a las primeras derivadas de la solución, mientras que la expresión 2.11 contiene términos en segunda derivadas. Se debe notar que las aproximaciones aun no han sido efectuadas todavía, además de que nada se ha perdido en la formulación. Dicho de otro modo, se puede tomar ahora en consideración las aproximaciones de interpolación lineal segmentada.

Empleando la ecuación 2.6 por cada función peso  $\phi_i(x)$ , se puede escribir la expresión 2.13 en la forma :

$$\sum_{j=1}^{n+1} K \left[ \int_0^L \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right] a_j - \int_0^L \phi_i Q dx + \phi_i \left[ -K \frac{dT}{dx} \right]_0^L = 0 \quad \dots(2.14)$$

$i = 1, 2, \dots, n+1$

Se puede observar que el flux  $-K \frac{dT}{dx}$  en  $x = 0$  es automáticamente incorporado dentro de la forma de la integral. Además, de que las integrales de la expresión 2.14 pueden ser fácilmente calculadas una vez que la funciones geométricas de interpolación  $\phi_i$  han sido seleccionadas.

La ventaja de la forma de Galerkin en la expresión 2.14 en la forma débil, es que solo un numero finito de parámetros  $a_i, i = 1, \dots, n + 1$ , necesita ser determinado, contrario a esto, el valor de  $T(x)$  en *cada punto de*  $x$  a lo largo de  $0 \leq x \leq L$ , se requiere por la expresión 2.4 . En este punto entonces, se opta por abandonar la solución exacta en favor de una buena aproximación compatible.

Para ilustrar el procedimiento, se divide el intervalo en dos segmentos de igual longitud, con un nodo colocado en ambos extremos de cada segmento. Así, se definen tres nodos para el perfil de temperatura, sobre la longitud del alambre, el nodo 1 es colocado en  $x = x_1 = 0$ , el nodo 2 en

$x = x_2 = \frac{L}{2}$ , y el nodo 3 en  $x = x_3 = L$ , como se muestra en la figura 2.4.

Si se considera que la variación de las funciones geométricas de interpolación  $\phi(x)$  entre los nodos es lineal sobre cada elemento,  $e_i$ , se puede convenientemente expresar la variable dependiente  $T$  en la forma :

$$T(x) = \phi_i(x) a_i + \phi_{i+1}(x) a_{i+1} \quad \dots(2.15)$$

$$x_i \leq x \leq x_{i+1}$$

donde las funciones  $\phi_i$  están dadas por :

$$\left. \begin{aligned} \phi_i(x) &= \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} \\ \phi_{i+1}(x) &= \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \end{aligned} \right\} \dots(2.16)$$

Las derivadas de las funciones geométricas son :

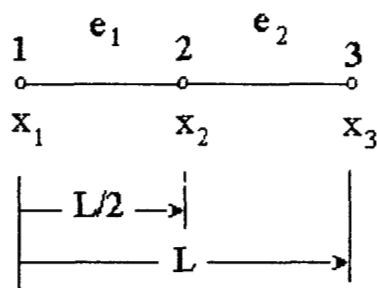


Figura 2.4, Segmento Discretizado



$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi_i}{dx} &= -\frac{1}{x_{i+1} - x_i} \\ \frac{d\phi_{i+1}}{dx} &= \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \end{aligned} \right\} \dots(2.17)$$

Las ecuaciones 2.15-2.17, pueden ser escritas en forma matricial como :

$$\mathbf{T}(x) = \boldsymbol{\phi} \mathbf{a} \dots(2.18)$$

donde :

$$\boldsymbol{\phi} = [\phi_i \quad \phi_{i+1}] \dots(2.19)$$

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_i \\ a_{i+1} \end{bmatrix} \dots(2.20)$$

de aquí que :

$$\frac{d\mathbf{T}}{dx} = \frac{d}{dx} \boldsymbol{\phi} \mathbf{a} = \begin{bmatrix} \frac{d\phi_i}{dx} & \frac{d\phi_{i+1}}{dx} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ a_{i+1} \end{bmatrix} \dots(2.21)$$

donde :

$$\frac{d}{dx} \boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{x_{i+1} - x_i} & \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \end{bmatrix} \dots(2.22)$$

Ahora se puede aplicar estas ultimas expresiones al primer elemento en la ecuación 2.14,

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^2 K \left[ \int_0^{L/2} \frac{d\phi_1}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right] a_j - \int_0^{L/2} \phi_1(x) Q dx - K \phi_1(x) \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0}^{x=L/2} = 0 \\ \sum_{j=1}^2 K \left[ \int_0^{L/2} \frac{d\phi_2}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right] a_j - \int_0^{L/2} \phi_2(x) Q dx - K \phi_2(x) \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0}^{x=L/2} = 0 \end{aligned} \right\} \dots(2.23)$$

Reemplazando

$$\phi = \begin{bmatrix} 1 - \frac{2x}{L} & \frac{2x}{L} \end{bmatrix}$$

y

$$\frac{d}{dx} \phi = \begin{bmatrix} -\frac{2}{L} & \frac{2}{L} \end{bmatrix}$$

e integrando, la ecuación 2.23 se convierte en

$$\frac{2K}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} - \frac{QL}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} q \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \dots(2.24)$$

Efectuando un desarrollo similar para el elemento 2, se obtiene

$$\frac{2K}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} - \frac{QL}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \dots(2.25)$$

Las expresiones 2.24 y 2.25 son entonces combinadas haciendo uso de un proceso de "ensamblamiento", el cual, en este caso, consiste de sumar la segunda ecuación de la expresión 2.24 y la primera de la expresión 2.25, puesto que ambas corresponden a la misma función peso  $\phi_2(x)$ , se genera el sistema :

$$\frac{2K}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{QL}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \dots(2.26)$$

Puesto que se conoce por condiciones a la frontera que  $a_3 = T_L$ , el sistema se reduce a dos ecuaciones con dos incógnitas  $a_1$  y  $a_2$ , es decir,

$$\left. \begin{aligned} a_1 - a_2 &= \frac{qL}{2K} + \frac{QL^2}{8K} \\ -a_1 + 2a_2 &= \frac{QL^2}{4K} + T_L \end{aligned} \right\} \quad \dots(2.27)$$

y la solución es :

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= \frac{qL}{K} + \frac{QL^2}{2K} + T_L \\ a_2 &= \frac{qL}{2K} + \frac{3QL^2}{8K} + T_L \\ a_3 &= T_L \end{aligned} \right\} \quad \dots(2.28)$$

## 2.4 FUNCIONES GEOMÉTRICAS DE INTERPOLACIÓN

Los elementos finitos pueden ser normalmente clasificados dentro de tres grupos de acuerdo a su orden polinomial: simples, complejos y múltiples. En un elemento simple, el número de coeficientes en el polinomio es igual a la dimensión en espacio del problema más uno. El polinomio consiste de un término constante, más términos lineales. El elemento simple triangular en dos dimensiones es representado por el polinomio:

$$\psi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \quad \dots(2.29)$$

El polinomio es lineal en 'x' e 'y', incluyendo tres coeficientes puesto que el triángulo posee tres nodos.

Los elementos complejos emplean un polinomio que contiene términos constantes y lineales, mas términos de un orden más elevado. Mientras que la geometría puede ser idéntica a un elemento simple, el elemento complejo tiene nodos adicionales en las fronteras y puede tener nodos internos. El polinomio de interpolación para un elemento complejo de segundo orden o cuadrático es :

$$\psi = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 x^2 + \alpha_5 x y + \alpha_6 y^2 \quad \dots(2.30)$$

Los seis coeficientes indican que el elemento debe contener seis nodos.

Los elementos múltiples también emplean términos de mayor orden, sin embargo, las fronteras de los elementos deben ser paralelas a los ejes coordenados, como lo puede ser un cuadrilátero.

### 2.4.1 Funciones geométricas lineales de interpolación

El polinomio de interpolación completo como un elemento triangular lineal se define por la relación 2.26, donde  $\psi$ , es empleado para representar cualquier variable desconocida. En cada vértice existe un nodo,

$$\left. \begin{array}{l} \psi = \psi_1 \quad \text{en } x = x_1, \quad y = y_1 \\ \psi = \psi_2 \quad \text{en } x = x_2, \quad y = y_2 \\ \psi = \psi_3 \quad \text{en } x = x_3, \quad y = y_3 \end{array} \right\} \quad \dots(2.31)$$

Es facil encontrar los valores para  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ , y  $\alpha_3$ , con esta ultima expresión y la ecuación 2.29; estos son:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{2A} [(x_2 y_3 - x_3 y_2) \phi_1 + (x_3 y_1 - x_1 y_3) \phi_2 + (x_1 y_2 - x_2 y_1) \phi_3] \\ \alpha_2 &= \frac{1}{2A} [(y_2 - y_3) \phi_1 + (y_3 - y_1) \phi_2 + (y_1 - y_2) \phi_3] \\ \alpha_3 &= \frac{1}{2A} [(x_3 - x_2) \phi_1 + (x_1 - x_3) \phi_2 + (x_2 - x_1) \phi_3] \end{aligned} \right\} \dots(2.32)$$

donde el area, A, está definida por :

$$2A = (x_1 y_2 - x_2 y_1) + (x_3 y_1 - x_1 y_3) + (x_2 y_3 - x_3 y_2) \quad \dots(2.33)$$

Se debe notar que el area del elemento está definida en términos de las coordenadas de los nodos. Para obtener las funciones geométricas de interpolación, se aproxima  $\psi$  como una función de los tres valores en los nodos, tal que :

$$\psi = \phi_1 \psi_1 + \phi_2 \psi_2 + \phi_3 \psi_3 \quad \dots(2.34)$$

Así las funciones geométricas de interpolación quedan formalmente definidas como :

$$\left. \begin{aligned} \phi_1(x, y) &= \frac{1}{2A} [(x_2 y_3 - x_3 y_2) + (y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y] \\ \phi_2(x, y) &= \frac{1}{2A} [(x_3 y_1 - x_1 y_3) + (y_3 - y_1)x + (x_1 - x_2)y] \\ \phi_3(x, y) &= \frac{1}{2A} [(x_1 y_2 - x_2 y_1) + (y_1 - y_2)x + (x_2 - x_1)y] \end{aligned} \right\} \dots(2.35)$$

las cuales conforman la relación general expresada en la ecuación 2.29.

## 2.4.2 Funciones geométricas cuadráticas de interpolación

Del mismo modo que para elementos unidimensionales, se pueden construir aproximaciones cuadráticas sobre elementos triangulares. Los elementos triangulares cuadráticos tienen seis nodos, como se muestra en la figura 2.5.

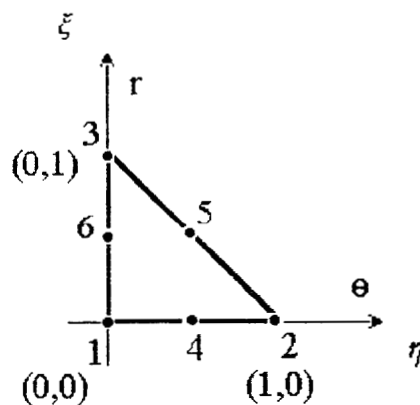


Figura 2.5. Elemento triangular cuadrático

El polinomio de interpolación se escribe empleando una serie expandida en seis términos tal como en la ecuación 2.30.

$$\psi = \alpha_1 + \alpha_2 \eta + \alpha_3 \xi + \alpha_4 \eta^2 + \alpha_5 \eta \xi + \alpha_6 \xi^2 \quad \dots(2.36)$$

Las  $\alpha_i$ 's son determinadas de la misma manera que para el elemento lineal. Definiendo  $\psi$  en cada localización de nodo, se genera un conjunto de ecuaciones de  $6 \times 6$ , la cual puede ser resuelta fácilmente.

Las funciones geométricas de interpolación se obtienen a partir de la expresión :

$$\psi = \sum_{i=1}^6 \phi_i \psi_i \quad \dots(2.37)$$

Una vez resuelto el sistema de ecuaciones y haciendo una serie de arreglos algebraicos se obtienen dichas funciones :

$$\left. \begin{aligned} \phi_1 &= 1 + 2(\eta^2 + \xi^2) - 3(\eta + \xi) + 4\eta\xi \\ \phi_2 &= \eta(2\eta - 1) \\ \phi_3 &= \xi(2\xi - 1) \\ \phi_4 &= 4\eta(1 - \eta - \xi) \\ \phi_5 &= 4\eta\xi \\ \phi_6 &= 4\xi(1 - \eta - \xi) \end{aligned} \right\} \dots(2.38)$$

Resulta imprescindible la derivación de los gradientes en la discretización de algún modelo en particular :

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \phi_1}{\partial \eta} &= 4(\eta + \xi) - 3 & \frac{\partial \phi_1}{\partial \xi} &= 4(\eta + \xi) - 3 \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial \eta} &= 4\eta - 1 & \frac{\partial \phi_2}{\partial \xi} &= 0 \\ \frac{\partial \phi_3}{\partial \eta} &= 0 & \frac{\partial \phi_3}{\partial \xi} &= 4\xi - 1 \\ \frac{\partial \phi_4}{\partial \eta} &= 4(1 - 2\eta - \xi) & \frac{\partial \phi_4}{\partial \xi} &= -4\eta \\ \frac{\partial \phi_5}{\partial \eta} &= 4\xi & \frac{\partial \phi_5}{\partial \xi} &= 4\eta \\ \frac{\partial \phi_6}{\partial \eta} &= -4\xi & \frac{\partial \phi_6}{\partial \xi} &= 4(1 - \eta - 2\xi) \end{aligned} \right\} \dots(2.39)$$

Las expresiones 2.38 y 2.39, son empleadas para la solución del modelo que se propone; su forma geométrica ofrece una fácil adecuación a la geometría considerada en cuestión y la cantidad de nodos empleadas por ser mínima, es atractiva, debido a que nos genera un sistema de ecuaciones

no muy grande, a comparación de otros elementos que pudiesen haber sido tomados en cuenta en la discretización del problema.

Las ecuaciones del modelo son integradas por medio de una cuadratura Gaussiana para un elemento con las dimensiones mostradas en la figura 2.5. Los cálculos sirven como base para la generación de los demás elementos que componen la malla del dominio del problema. Resulta fácil así obtener el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales a resolver, auxiliándose del jacobiano de la transformación con el objeto de situar los cálculos de acuerdo a la posición geométrica del elemento que se este integrando:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial \xi} & \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \\ \frac{\partial r}{\partial \eta} & \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} \\ \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} \end{bmatrix} \quad \dots(2.40)$$

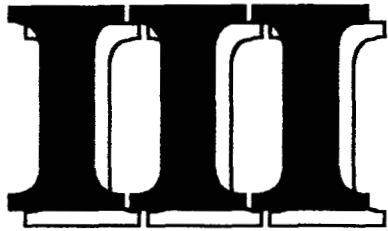
donde el jacobiano de la transformación es :

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial \xi} & \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \\ \frac{\partial r}{\partial \eta} & \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial \xi} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad \dots(2.41)$$

de aquí que :

$$|\mathbf{J}| = \frac{\partial r}{\partial \xi} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \quad \dots(2.42)$$





# DESARROLLO DEL MODELO DE TRANSPORTE DE MOMENTO

## 3.1 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

El proceso de mezclado en la industria química implica una gran inversión en consumo de energía para obtener el producto terminado bajo ciertas normas de calidad especificadas, las cuales dependen del grado de homogeneidad logrado. Con el objeto de estudiar el efecto de las variables más importantes en la eficiencia del proceso y poder efectuar una predicción de lo que ocurre a diferentes condiciones de operación, se realizó un análisis del comportamiento del sistema considerando diferentes niveles de temperatura, velocidad de agitación y configuración geométrica del impulsor empleado.

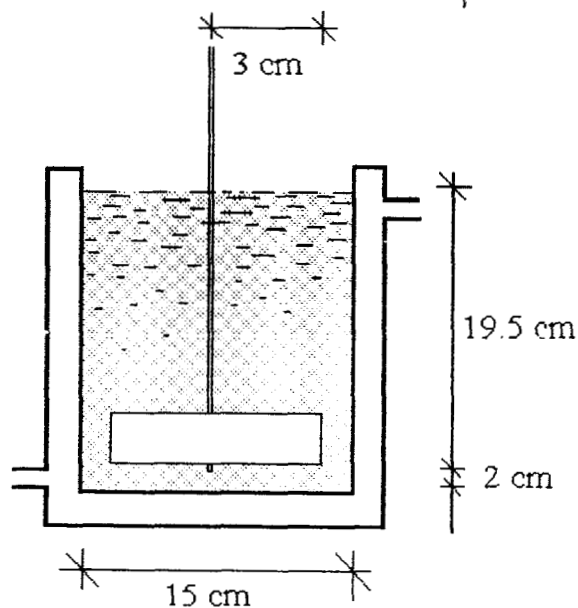


Figura 3.1., Tanque de agitación con impulsor de tipo paleta

La presente investigación tiene como base un estudio experimental realizado por Medina (1994), donde se obtuvieron resultados que demostraron que los impulsores de proximidad resultan ser más eficientes para alcanzar un nivel de homogeneidad deseado. En dicho trabajo se efectuó un estudio con fluidos viscoelásticos como polibutadieno 1,4 al 14.5 % en peso en Ciclohexano, para el cual se determinó una expresión de ley de la potencia para la viscosidad, a diferentes temperaturas. De este estudio se tomaron los datos de propiedades físicas para realizar la simulación, además de las dimensiones en el plano  $r - \theta$ , correspondientes al equipo experimental empleado que se muestran en las figuras 3.1 y 3.2.

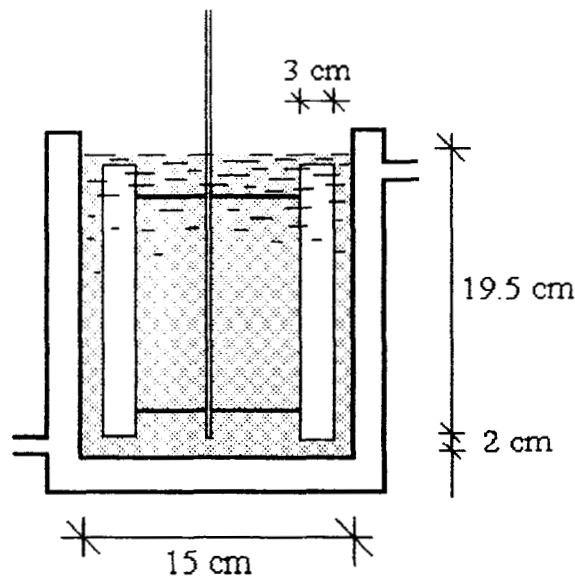


Figura 3.2., Tanque de agitación con impulsor de tipo ancla

El modelo resuelto se limita al análisis de un fluido Newtoniano viscoso bajo condiciones de operación en estado estacionario e isotermico. Bajo estas consideraciones, las propiedades físicas son constantes, para los dos niveles de temperatura considerados, usando los siguientes datos :

Temperatura de Operación	Viscosidad gr./cm.seg
25°C	500
80°C	80

El resolver un modelo en el plano  $r - \theta$ , nos ofrece información únicamente en cuanto a los patrones de flujo primario dentro del tanque, para obtener resultados que incluyan los patrones de flujo secundario mencionados por autores como Bird (1977), es necesario resolver un modelo tridimensional, el cual describa ambos patrones.

### 3.1.1 Ecuaciones de cambio

Las ecuaciones que gobiernan el proceso de flujo de un fluido Newtoniano incompresible (viscosidad y densidad constantes) dentro de un tanque agitado, es la ecuación generalizada de conservación de momento :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v = -[\nabla \cdot \rho v v] - \nabla \cdot \pi + \rho g \quad \dots(3.1)$$

$$\nabla \cdot v = 0 \quad \dots(3.2)$$

donde:

$$\begin{aligned} \pi &= -p \delta + \tau \\ \tau &= -\mu [\nabla v + (\nabla v)^T] \end{aligned} \quad \dots(3.3)$$

Se considera que las condiciones de operación del equipo son de estado estacionario, es decir, que no tenemos cambios en los patrones de velocidad con respecto del tiempo en cualquier posición fija dentro del espacio volumétrico del tanque en agitación.

Se consideró que los patrones de flujo primario son más importantes para obtener una mejor descripción del proceso de mezclado, y se supone que las componentes de velocidad son en las direcciones angular y radial.

La complejidad del método numérico limita los alcances en los resultados computacionales, debido a que el espacio en memoria y velocidad de procesamiento requerido es bastante costoso, por lo que se resolvió el

modelo para un fluido Newtoniano, solución a partir de la cual se pueden establecer las bases para una descripción de un problema de flujo más complejo, como sería el considerar la ecuación constitutiva de un fluido no Newtoniano.

Tomando en cuenta las suposiciones mencionadas, las ecuaciones de cambio a considerar en el proceso de flujo son :

componente r :

$$\rho \left[ v_r \frac{\partial}{\partial r} v_r + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} v_r - \frac{v_\theta^2}{r} \right] =$$

$$\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} v_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} v_\theta \right] \quad \dots(3.4)$$

componente  $\theta$  :

$$\rho \left[ v_r \frac{\partial}{\partial r} v_\theta + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} v_\theta + \frac{v_r v_\theta}{r} \right] =$$

$$\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} v_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} v_r \right] \quad \dots(3.5)$$

continuidad :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta) = 0 \quad \dots(3.6)$$

El término  $\rho \frac{v_\theta^2}{r}$  se conoce como la fuerza centrífuga, y corresponde a la fuerza efectiva en la dirección r que resulta del movimiento del fluido

en la dirección  $\theta$ . El término  $\rho \frac{v_r v_\theta}{r}$  es la fuerza de Coriolis; esta es una fuerza efectiva en la dirección  $\theta$  cuando existe flujo en ambas direcciones,  $r$  y  $\theta$ .

La discretización del problema es llevada a cabo empleando el método de elemento finito. Los elementos empleados son triángulos rectángulos de segundo orden, para ocupar el area que incluye el impulsor y el diametro del tanque.

### 3.1.2 Condiciones frontera

La imposición de las condiciones frontera para el impulsor del tanque agitado es un problema bastante difícil como para ser tratado como si existiese una frontera moviéndose dentro de una malla fija. Este problema requiere, ya sea que se esté adecuando continuamente la malla o por lo menos, mover la malla cada vez que avance el agitador, lo cual es muy costoso en términos computacionales.

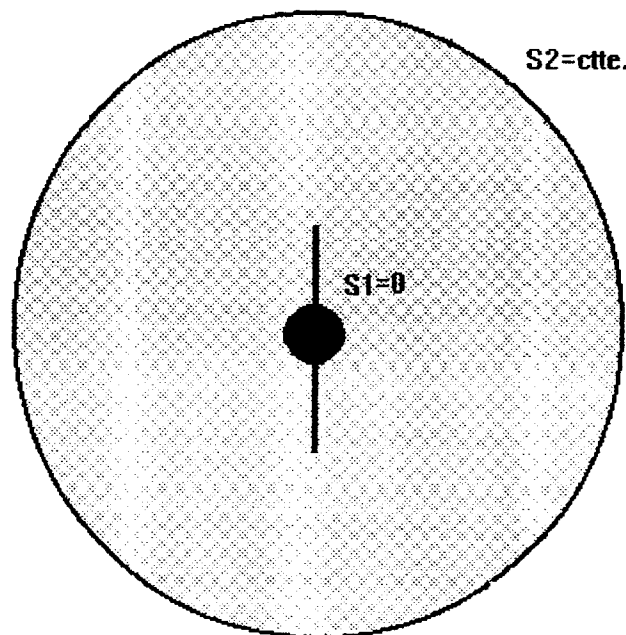


Figura 3.3., Vista superior del tanque con un impulsor de paleta.

Dentro del tanque se requieren definir las condiciones en la frontera tanto para el agitador como en la pared. La simetría de revolución del dominio llevo a considerar un punto de vista alternativo, el cual permite una simplificación drástica de la imposición de las condiciones frontera: ésta consiste en un observador moviéndose al mismo tiempo con el agitador del tanque, por lo que éste sentirá que lo que se está moviendo es la pared del tanque.

Debido a la naturaleza tridimensional del espacio en el mezclador y a la falta de una simetría plana, el dominio computacional se definió abarcando completamente el tanque. Se emplean coordenadas cilíndricas en dos dimensiones para expresar los operadores diferenciales en las ecuaciones de gobierno.

De este modo, las condiciones de frontera son bastante simples y consisten en condiciones de velocidad rotacional constante sobre la pared, y condiciones homogéneas para la velocidad sobre el agitador y la flecha, ver figura 3.3 y 3.4. El espesor de la hoja del agitador se considera despreciable.

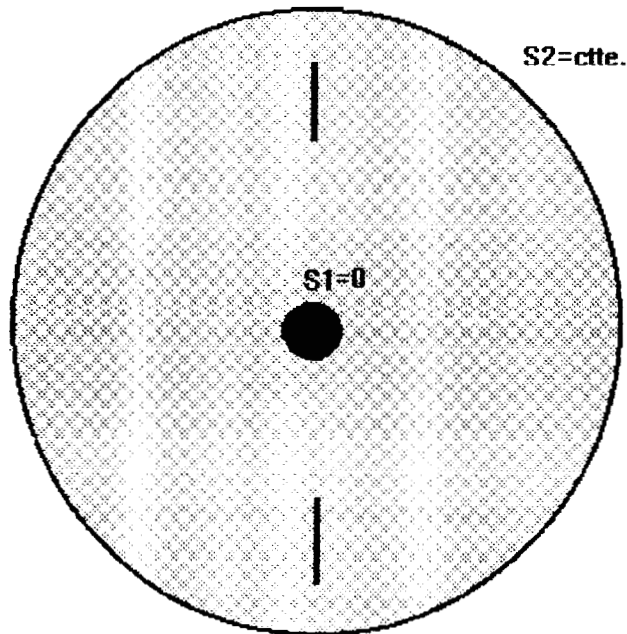


Figura 3.4., Vista superior del tanque con un impulsor de ancla

### 3.2 LA MALLA

La forma geométrica del elemento que fue seleccionado corresponde a un triángulo rectángulo, que consiste de tres nodos en los vértices, y otros tres en sus fronteras (ver figura 3.5). En general, se colocan más elementos en aquellas regiones donde se espera un cambio rápido de las variables involucradas en el problema. La mayor parte de los esfuerzos en tiempo invertidos al emplear elemento finito, es precisamente en la generación de la malla computacional; la creación de una buena malla ofrece por si misma como ventaja una más rápida solución del problema.

Como se mencionó anteriormente, la forma geométrica de éste elemento ofrece una fácil adecuación a la geometría del problema considerado, y la cantidad de nodos empleados, por ser mínima, es atractiva debido a que genera un sistema de ecuaciones por elemento no muy grandes en dimension, en comparación con el uso de otros elementos que pudiesen haber sido considerados en la discretización del problema.

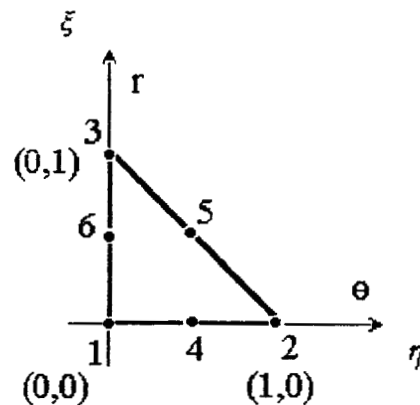


Figura 3.5., Elemento triangular de segundo orden

Para el dominio en dos dimensiones se define una partición de nodos en el intervalo  $0 \leq r \leq R$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ , con un numero finito de elementos que cubren completamente la geometría irregular del tanque, para ambos impulsores descritos, tal como se ilustra en las figuras 3.6 y 3.7. En el caso particular de la malla generada para el impulsor de paleta, cada uno de los elementos posee dimensiones de 0.2 cm. de diferencia radial y  $\pi/7$  radianes,

de diferencia angular. Debido a que se incluyeron dentro del modelo las coordenadas cilíndricas, al generarse la malla de forma automática, las zonas más abruptas en cuanto al perfil de velocidad, quedan establecidas con una buena cantidad de elementos, los cuales dan una definición aceptable, hablando en términos de porcentaje de error en la aproximación.

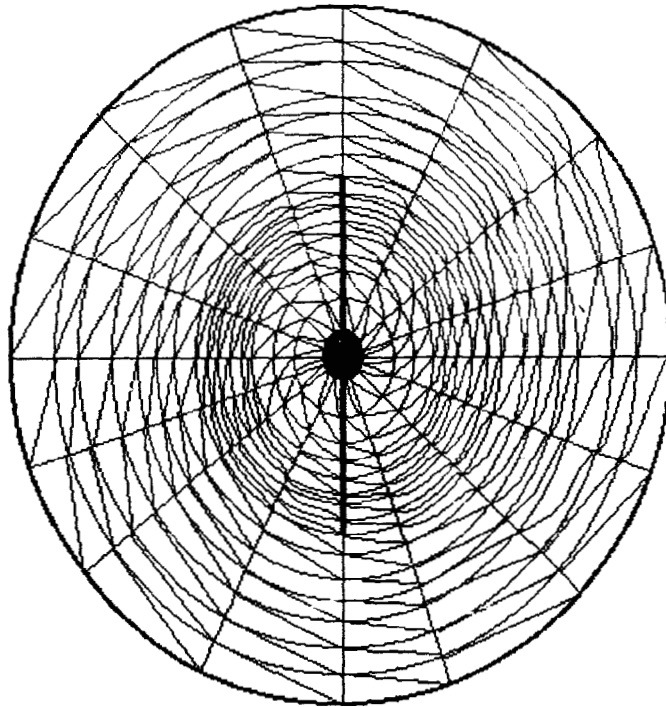


Figura 3.6., Malla bidimensional para un impulsor de tipo paleta.

Las coordenadas cilíndricas no favorecieron del mismo modo la generación de la malla para el impulsor de tipo ancla, en el que se tuvo que definir una partición no homogénea en la dirección radial, partiendo del centro del dominio. Los primeros cinco elementos contaron con una diferencia radial de 0.4 cm., los siguientes diez elementos con 0.2 cm. y el resto, hasta completar las 35 particiones de elementos que componen la malla, con 0.15 cm. de diferencia radial. Para la componente angular no se tuvo necesidad de hacer ninguna modificación en cuanto a su definición, debido a que las mallas de prueba que se generaron, con cambios orientados en este sentido, no presentaron una mejora sustancial en cuanto a la aproximación de los resultados.

Sobre cada uno de estos elementos, los perfiles de velocidad fueron aproximados empleando funciones conocidas predeterminadas de las



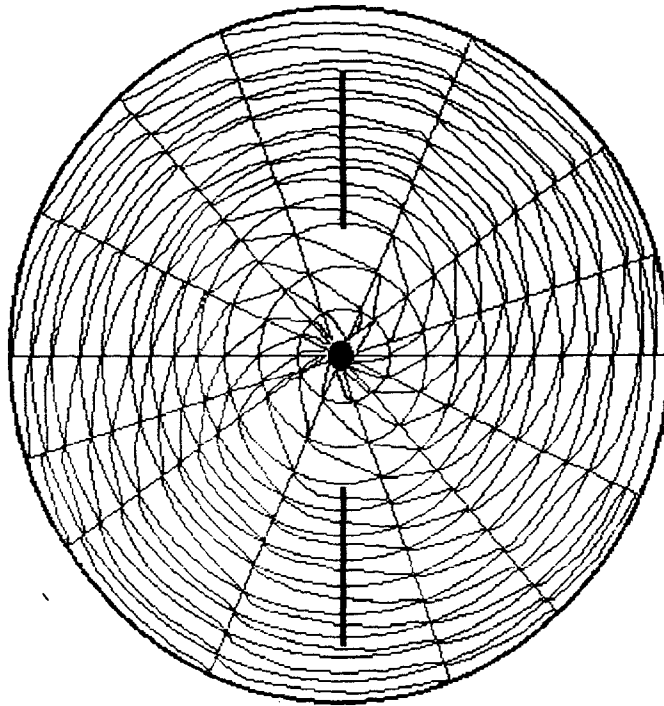


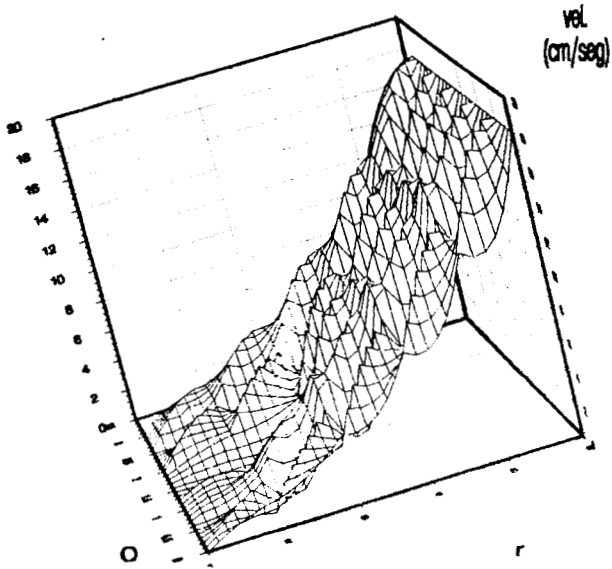
Figura 3.7., Malla bidimensional para un impulsor de tipo ancla

variables independientes  $r$  y  $\theta$ , expresadas por  $\phi_j(r, \theta)$ , y los correspondientes parámetros desconocidos  $a_j$ . De acuerdo con esto, cada elemento queda definido con un igual número de funciones al número de parámetros, de tal modo que una vez que los parámetros son conocidos, una aproximación de los perfiles de velocidad es conocida dentro de cada elemento.

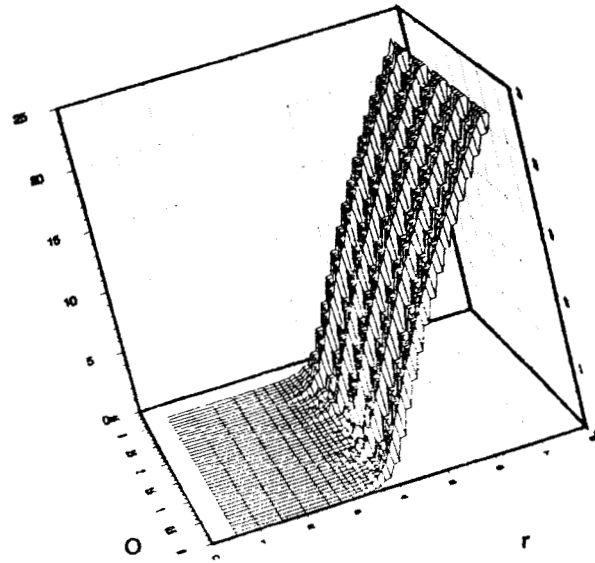
Sobre el dominio completo se puede escribir, para cada elemento:

$$v(r, \theta) \cong v_1 \phi_1(r, \theta) + v_2 \phi_2(r, \theta) + \dots + v_{n-1} \phi_{n-1}(r, \theta) \quad \dots(3.7)$$

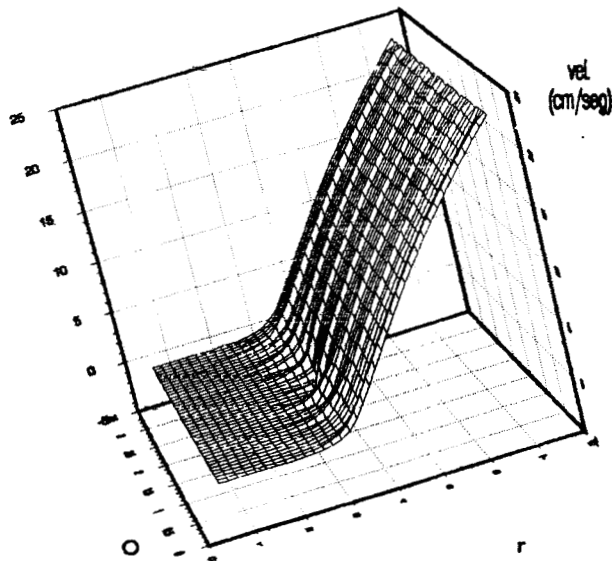
La cantidad de elementos colocados en la malla fue de 490, con las dimensiones mencionadas anteriormente; esto generó un sistema de 1988 ecuaciones algebraicas no lineales a resolver. Esto es en apariencia un sistema grande de ecuaciones, pero solamente se generó la cantidad necesaria de elementos con el objeto de adquirir resultados confiables en términos de definición en los perfiles de velocidad. La figura 3.8 muestra los perfiles de velocidad en el plano  $r - \theta$  para diferentes tamaños de malla generada.



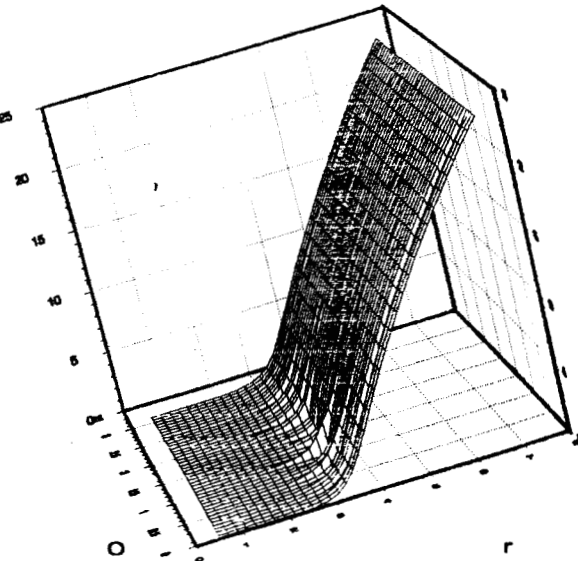
220 Ecuaciones



860 Ecuaciones



1522 Ecuaciones



1988 Ecuaciones

Figura 3.8., Perfiles de velocidad @ 25°C, 30 r.p.m., con diferentes tamaños de malla.

Se observa que al aumentar el orden del polinomio, se gana mayor precisión, pero el tiempo de computación crece al incrementarse el número de nodos por cada elemento colocado en la geometría considerada. Los diferentes perfiles generados en la figura 3.8, muestran la búsqueda que se efectuó con el fin de obtener resultados confiables en términos de una mejor aproximación numérica, a cambio de ganar precisión se tuvo que invertir en tiempo de computo.

### 3.3 DISCRETIZACIÓN DEL MODELO

La función  $v(r, \theta)$  se selecciona teniendo en mente que las expresiones 3.4 y 3.5, sean completamente satisfechas. De este modo, y tomando en cuenta la no linealidad del modelo, se eliminó la posibilidad de una búsqueda de solución analítica al problema, que difícilmente puede existir. Así se optó por una solución aproximada, definiendo una función 'residuo' asociada con el error en la aproximación :

$$R(v, r, \theta) = \rho v \cdot \nabla v - \mu \nabla^2 v \quad \dots(3.8)$$

Debido a que el modelo considerado se definió en las direcciones angular y radial, las fuerzas externas como son las de carácter gravitacional y de presión son despreciadas por ejercer su influencia en la dirección axial, siendo  $v$  es la aproximación a la solución verdadera  $v^*$  :

$$R(v^*, r, \theta) = 0 \quad \dots(3.9)$$

Empleando el método de los residuos ponderados :

$$\int_{\Omega} W(r, \theta) R(v, r, \theta) d\Omega = 0 \quad \dots(3.10)$$

Donde  $W(r, \theta)$  es la función peso. Seleccionando las diferentes funciones peso y reemplazándolas cada una en esta última expresión, se

genera un sistema de ecuaciones para los parámetros desconocidos. A partir del procedimiento de Galerkin, en el que los pesos son un conjunto igual a las funciones geométricas de interpolación, esto es :

$$W_i(r, \theta) = \phi_j(r, \theta) \quad \dots(3.11)$$

la expresión 3.10 queda :

$$\int_{\Omega} \phi(r, \theta) R(v, r, \theta) d\Omega = 0 \quad \dots(3.12)$$

Sustituyendo la expresión 3.9 en esta última, queda :

$$\int_0^L \phi(r, \theta) [\rho v \cdot \nabla v - \mu \nabla^2 v] d\Omega = 0 \quad \dots(3.13)$$

Con el objeto de tener una expresión 'débil' del problema, que sirva como base para su solución, al término de la segunda derivada se aplica el teorema de Green para una expresión en el plano<sup>(6)</sup> :

$$-\mu \int \phi \nabla^2 v d\Omega = -\mu \left\{ \int_{\Gamma} \phi \nabla v \cdot n d\Gamma - \int_{\Omega} \nabla \phi \nabla v d\Omega \right\} \quad \dots(3.14)$$

Debido a que las condiciones en la frontera son constantes, se desprecia el primer término del segundo miembro. Así la expresión 3.13 puede ser reescrita como :

$$\int_{\Omega} \phi(r, \theta) [\rho v \cdot \nabla v - \mu \nabla^2 v] d\Omega = \int_{\Omega} (\rho \phi v \cdot \nabla v + \mu \nabla \phi \cdot \nabla v) d\Omega \quad \dots(3.15)$$

Esta última expresión representa una forma "débil" del problema considerado puesto que éste contiene solo a las primeras derivadas de la solución; se debe notar que las aproximaciones todavía no han sido hechas.

Ahora, se aproxima el perfil de velocidades empleando las funciones geométricas de interpolación :

$$v(r, \theta) = \sum_{i=1}^6 \phi_i(r, \theta) v_i \quad \dots(3.16)$$

el límite superior de la sumatoria corresponde a la cantidad de nodos en el dominio del elemento empleado. De este modo, expandiendo los términos escritos tensorialmente, la expresión del modelo original queda finalmente discretizada al sustituirle esta última ecuación, llegando a las expresiones 3.17 y 3.18.

# EXPRESIONES DE CAMBIO DISCRETIZADAS

Componente radial :

$$\rho \left\{ \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \phi_j \frac{\partial \phi_k}{\partial r} \right) d\Omega \right] v_j v_k + \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \frac{\phi_j}{r} \frac{\partial \phi_k}{\partial \theta} \right) d\Omega \right] u_j v_k + \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \frac{\phi_j \phi_k}{r} \right) d\Omega \right] u_j u_k \right\} +$$

$$\mu \left\{ \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial r} \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right) d\Omega \right] v_j + \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} \frac{\partial \phi_j}{\partial \theta} \frac{1}{r^2} \right) d\Omega \right] v_{j+} \right\} \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} \frac{\phi_j}{r^2} \right) d\Omega \right] u_j = 0 \quad \dots(3.17)$$

Componente angular :

$$\rho \left\{ \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \phi_j \frac{\partial \phi_k}{\partial r} \right) d\Omega \right] v_j u_k + \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \frac{\phi_j}{r} \frac{\partial \phi_k}{\partial \theta} \right) d\Omega \right] u_j u_k + \left[ \int_{\Omega} \left( \phi_i \frac{\phi_j \phi_k}{r} \right) d\Omega \right] v_j u_k \right\} +$$

$$\mu \left\{ \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial r} \frac{\partial \phi_j}{\partial r} \right) d\Omega \right] u_j + \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} \frac{\partial \phi_j}{\partial \theta} \frac{1}{r^2} \right) d\Omega \right] u_{j+} \right\} \left[ \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta} \frac{\phi_j}{r^2} \right) d\Omega \right] v_j = 0 \quad \dots(3.18)$$

# IV

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 4.1 METODOLOGÍA

Con el objeto de tener una predicción de lo que acontece de manera real durante el proceso de agitación, se establecieron condiciones de operación análogas a las que reporta Medina (1994), definiendo para esto dos niveles de temperatura, con al menos tres de velocidad de rotación para cada geometría en particular, es decir :

Impulsor	Paleta	25°C	50 rpm
			70 rpm
			90 rpm
	Ancla	80°C	50 rpm
			70 rpm
			90 rpm
Paleta	25°C	50 rpm	
		70 rpm	
		90 rpm	
Ancla	80°C	50 rpm	
		70 rpm	
		90 rpm	

El modelo fue resuelto por medio del método de elemento finito, técnica que generó un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales. Este sistema de ecuaciones es resuelto usando el método de sobre relajación no

lineal, el cual, fue seleccionado como método de solución debido a que, en comparación de otros métodos, ofrecía un ahorro considerable en cuanto a memoria de acceso aleatorio de las computadoras empleadas.

El sistema de computo empleado para resolver el modelo fueron dos estaciones de trabajo HP-UX 9000 Apollo serie 700 con procesador RISC, los cuales contaban con un sistema operativo HP-UX versión 8.07 y una velocidad de trabajo aproximadamente de 14 megaflops. Debido a que el sistema de computo utilizado prestaba sus servicios a otros usuarios de manera eventual, además de que las condiciones de operación para cada simulación fueron muy distintas, no se puede precisar el tiempo de computo real ofrecido por la computadora.

La figura 4.1, muestra un diagrama de flujo computacional simplificado del código empleado para la solución de modelo, el cual resolvió un sistema de 1988 ecuaciones algebraicas no lineales generado por la técnica del elemento finito. Al iniciar el procedimiento iterativo los valores iniciales para el componente de la velocidad radial

fueron igualados a cero, mientras que para el componente de la velocidad angular se definió un perfil lineal con valores de cero en el centro del tanque y valores de la velocidad de rotación en la pared.

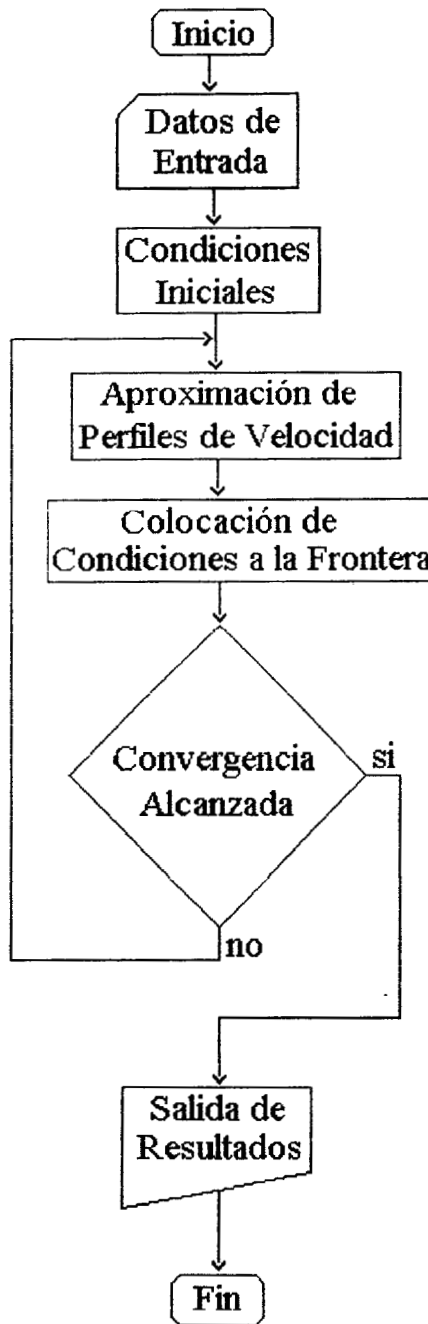


Figura 4.1, Diagrama de flujo Computacional



Para la solución del modelo se siguió como estrategia la creación de un código encargado de generar la malla, el cual crea un archivo de salida que contiene información respecto a la ubicación geométrica de los elementos además de las condiciones iniciales para las variables nodo. Este archivo de salida es leído por el código principal, el cual procede a resolver el modelo, ensamblando el sistema de ecuaciones que se genera por cada elemento colocado dentro de la malla. Dicha estrategia de solución en cuanto a dividir la solución del sistema de ecuaciones diferenciales en el aspecto computacional en dos fases es propuesta por varios autores, Akin (1981), Becker (1981), Pepper (1992), y Zienkiewics (1977).

El factor de relajación empleado para el método de sobre relajación fue de 0.5, definiéndose como criterio de convergencia :

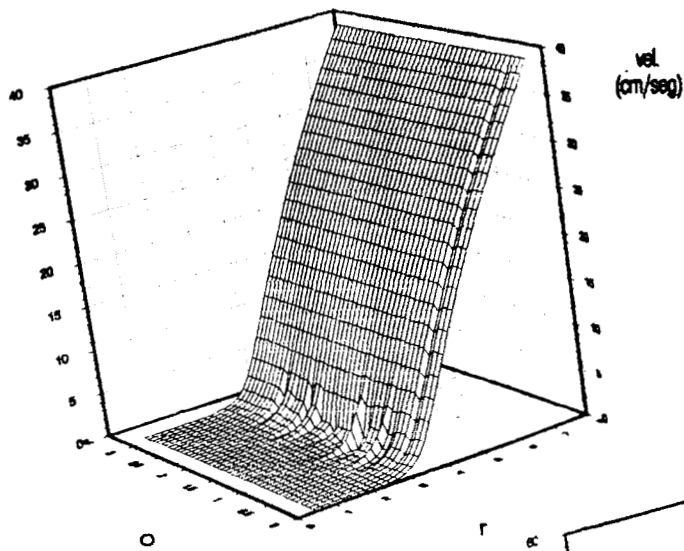
$$|f(x)| \leq 1 \times 10^{-5}$$

donde  $f(x)$  es el valor de las funciones igualadas a cero, evaluadas de acuerdo con el vector de solución aproximado  $x$  en cada iteración.

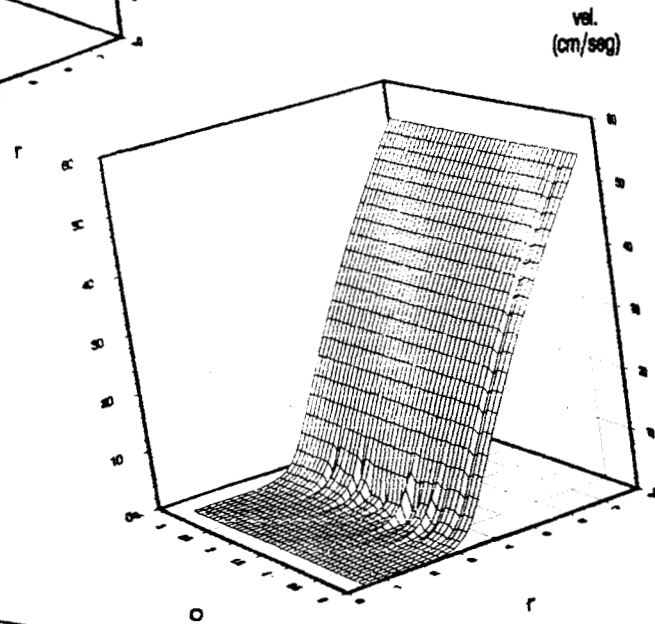
## **4.2 ANÁLISIS DE SIMULACIONES PARA EL IMPULSOR DE PALETA**

Las gráficas tridimensionales que muestran los perfiles de velocidad en el plano se extienden de 0 a  $\pi$  en la dirección angular. No se incluye la región que corresponde a la otra mitad del tanque, debido a la simetría del dominio. En la dirección radial se extiende de 0 hasta 7.5 cm., que corresponde a la distancia desde el centro del tanque hasta la pared del mismo.

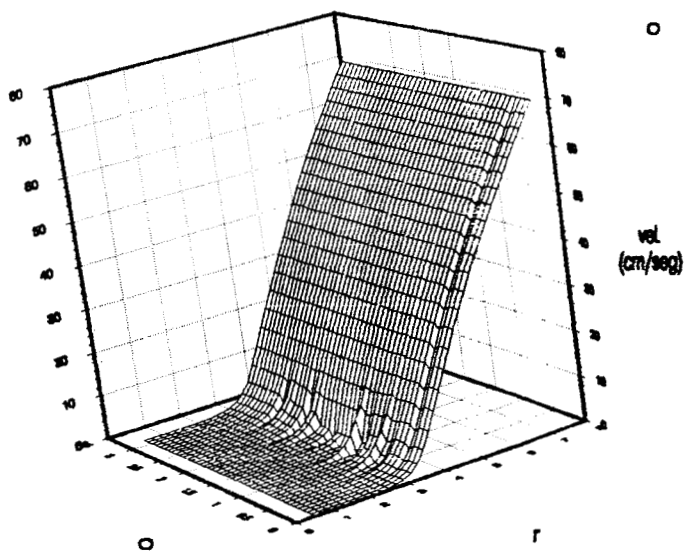
En la figura 4.2 a., se presenta el perfil de velocidad resultante en el plano radial-angular, con un impulsor de paleta como instrumento de agitación. En la dirección radial la gráfica muestra lo que está ocurriendo desde el centro del tanque hasta la pared del mismo. Las dimensiones geométricas corresponden a las mostradas en la figura 3.1, donde la paleta consta de una longitud a lo largo de la coordenada radial de 3 cm., a partir del centro del tanque.



a) 50 r.p.m.



b) 70 r.p.m.



c) 90 r.p.m.

Figura 4.2., Perfiles de velocidad en el plano @ 25° C, con un impulsor de paleta

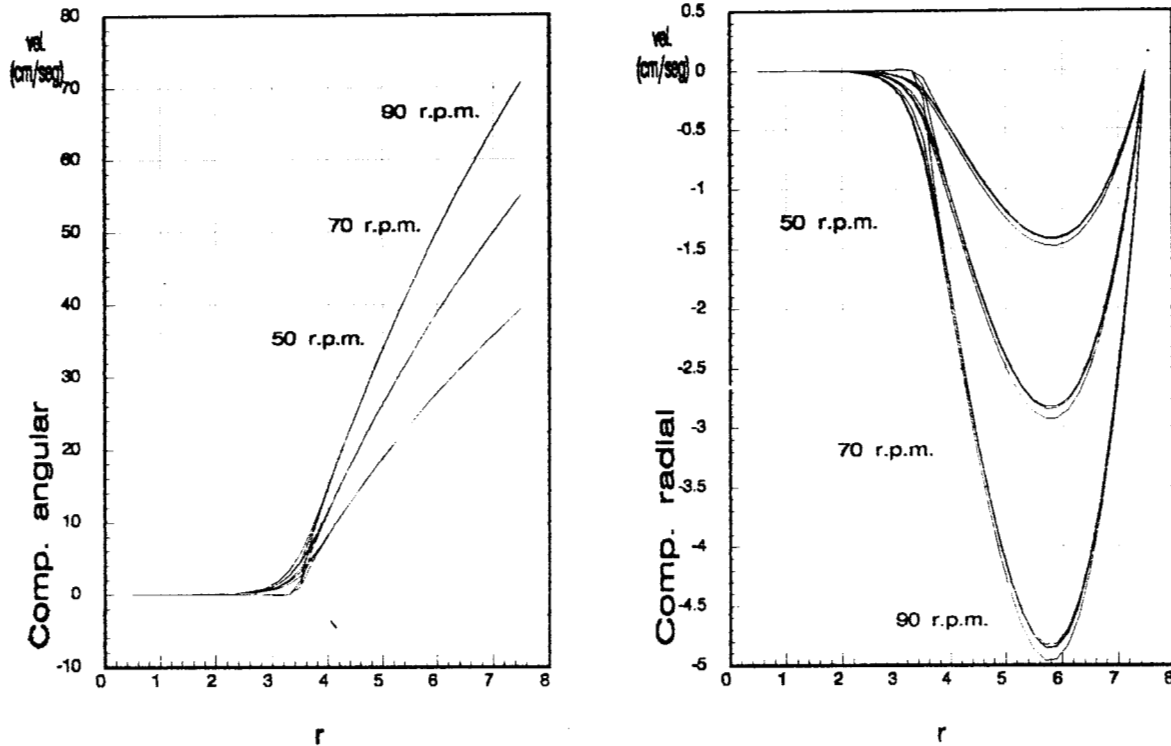


Figura 4.3., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 25°C con un impulsor de paleta.

Es necesario recordar que con el objeto de poder caracterizar la geometría irregular del tanque, durante el proceso de agitación con su respectivo agitador, se tuvo que considerar que el impulsor se encontraba inmóvil y a cambio de ello tener la pared girando a una velocidad constante.

Se puede apreciar en la figura 4.3 (50 r.p.m.), a la cual le corresponden el perfil de velocidad resultante mostrado en la figura 4.2 a, que el componente dominante durante el proceso de agitación es el angular, y se observa que el perfil de velocidad mostrado en la figura 4.3 (50 r.p.m.), es el mismo que en la figura 4.2 a, solo que graficado en el plano. La magnitud de la componente radial es mínima comparada con la magnitud de la componente angular.

Se efectuaron simulaciones a diferentes niveles de velocidad de agitación con el objeto de poder observar su influencia en el proceso de mezclado, ya que se considera una de las variables más importantes en el proceso, para lograr una mejor homogeneización del fluido en agitación.

Para una velocidad de agitación de 70 r.p.m. se puede observar en la figura 4.2 b, como existe una gran similitud entre los perfiles mostrados a 50 r.p.m. aún cuando sobre la pared del tanque ahora la velocidad de rotación es aún mayor. La presencia de la paleta, aproximadamente a 3.5 cm. del centro del tanque, se hace sentir de manera significativa para el fluido en movimiento, que empieza a decaer en su velocidad de manera drástica conforme se aproxima a los alrededores del impulsor.

Observando las componentes de velocidad angular y radial, resultan ser del mismo modo análogas que a más baja velocidad en cuanto a su forma. El componente de la velocidad radial presenta una penetración mayor hacia el centro del tanque, lo cual da una idea de que existe una mejor renovación del volumen ocupado por el fluido en esa zona, ver figura 4.3. (70 r.p.m.).

La situación a 90 r.p.m. no representa un cambio drástico en cuanto a los resultados obtenidos numéricamente por la computadora, como lo demuestra la figura 4.2 c. Se observa como la tendencia del fluido a moverse hacia el centro del tanque es aun mayor y por consiguiente se obtiene una mejor capacidad de desalojo. No obstante, no se esperaba una respuesta tan pobre en cuanto a capacidad de remoción del fluido, al aumentar la velocidad de agitación, la cual es considerada una de las variables de mayor influencia en el proceso.

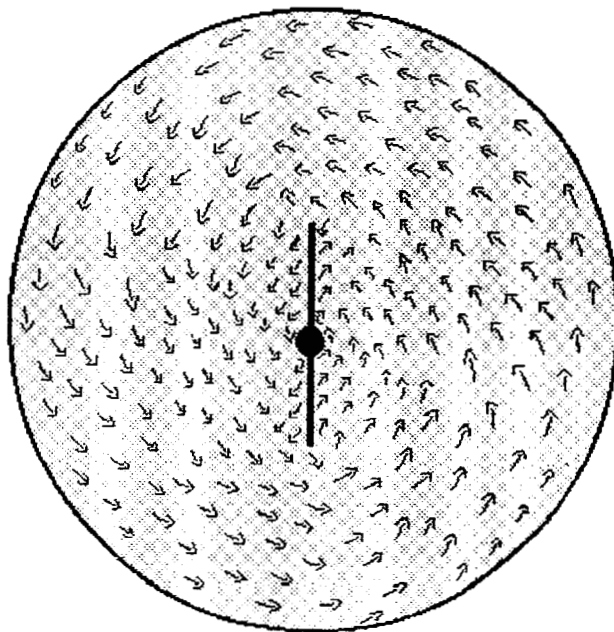


Figura 4.4., Patrones de flujo para un impulsor de paleta

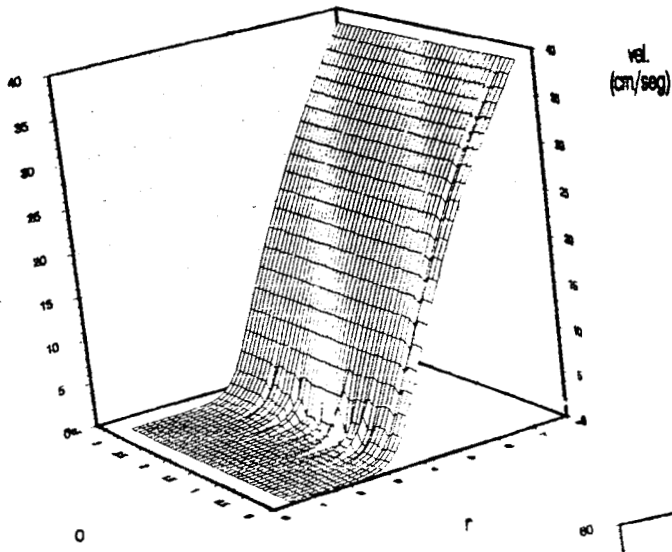
Una descripción del patrón de flujo que presentan los vectores se muestran en la figura 4.4., donde se aprecian de modo esquemático únicamente las direcciones puntuales dentro del tanque. El tamaño del vector no representa la magnitud del mismo. De hecho todas las simulaciones a estas condiciones ya mencionadas resultaron tener un comportamiento similar en cuanto a la dirección de las resultantes de los vectores. Incrementando la velocidad de agitación el movimiento del fluido hacia el centro del tanque se ve también favorecido.

Para un nivel de temperatura mayor, se espera que el fluido alcance perfiles de velocidad de mayor magnitud, debido a que éste presenta una menor resistencia al movimiento. Es decir, tiene una viscosidad más baja y por lo tanto el fluido adquiere mejores niveles de homogeneidad en el mezclado. En la figura 4.5 a), se puede observar el perfil de velocidad a 50 r.p.m. a una temperatura de  $80^{\circ}C$ . Se observa que aún para la viscosidad más baja, el agitador no permite con facilidad la remoción de los volúmenes adyacentes del fluido, presentando magnitudes de velocidad casi nulas.

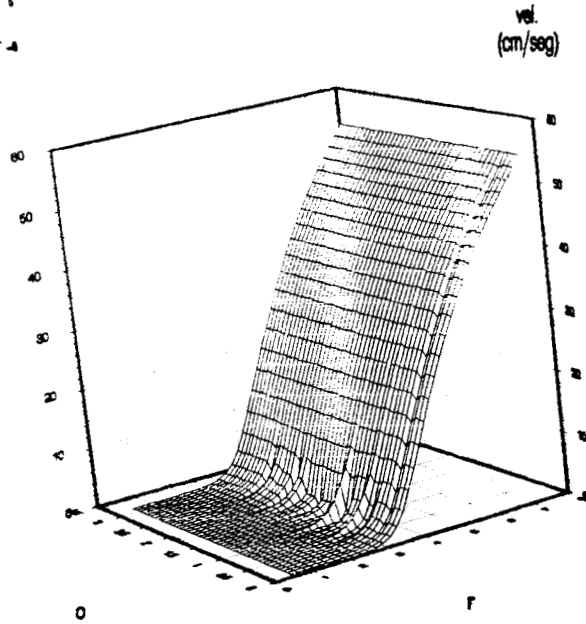
El beneficio que se recibe de la agitación al operar a una mayor temperatura se aprecia mejor al analizar los componentes de velocidad por separado. En especial, el componente de velocidad radial se ve afectado, presentando una tendencia a moverse hacia el centro del tanque conforme la magnitud es mayor respecto a condiciones análogas a más baja temperatura, ver figura 4.6 (50 r.p.m.). Aun cuando la velocidad máxima sea la velocidad de rotación en la pared del tanque, el fluido se remueve más eficientemente debido a que crece la magnitud de la componente radial.

Existe una mejor homogeneización con una agitación a una misma velocidad de rotación en la pared del tanque a  $80^{\circ}C$  que a  $25^{\circ}C$ , como se puede observar al comparar las figuras 4.5 b y 4.2 b. Es decir, que la homogeneización del fluido es mejor a mayores temperaturas que a un nivel más elevado de velocidad de agitación pero menor temperatura, esto debido a la influencia de la temperatura en la viscosidad del fluido.

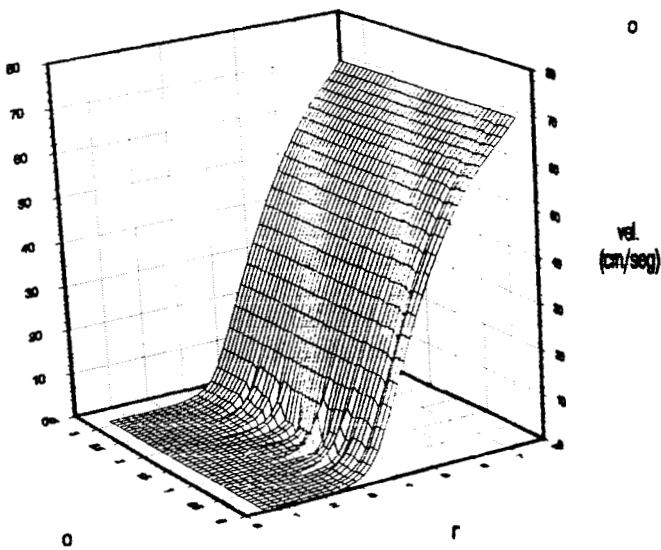
El criterio base para afirmar que el fluido alcanza un nivel adecuado de homogeneidad a un nivel de temperatura más alto, se encuentra en el análisis de las magnitudes del componente de velocidad radial. En la figura 4.6 se observa como los perfiles de velocidad para éste componente presentan una magnitud apreciable dentro del área que corresponden al impulsor.



a) 50 r.p.m.



b) 70 r.p.m.



c) 90 r.p.m.

Figura 4.5., Perfiles de velocidad en el plano @  $80^{\circ}C$ , con un impulsor de paleta

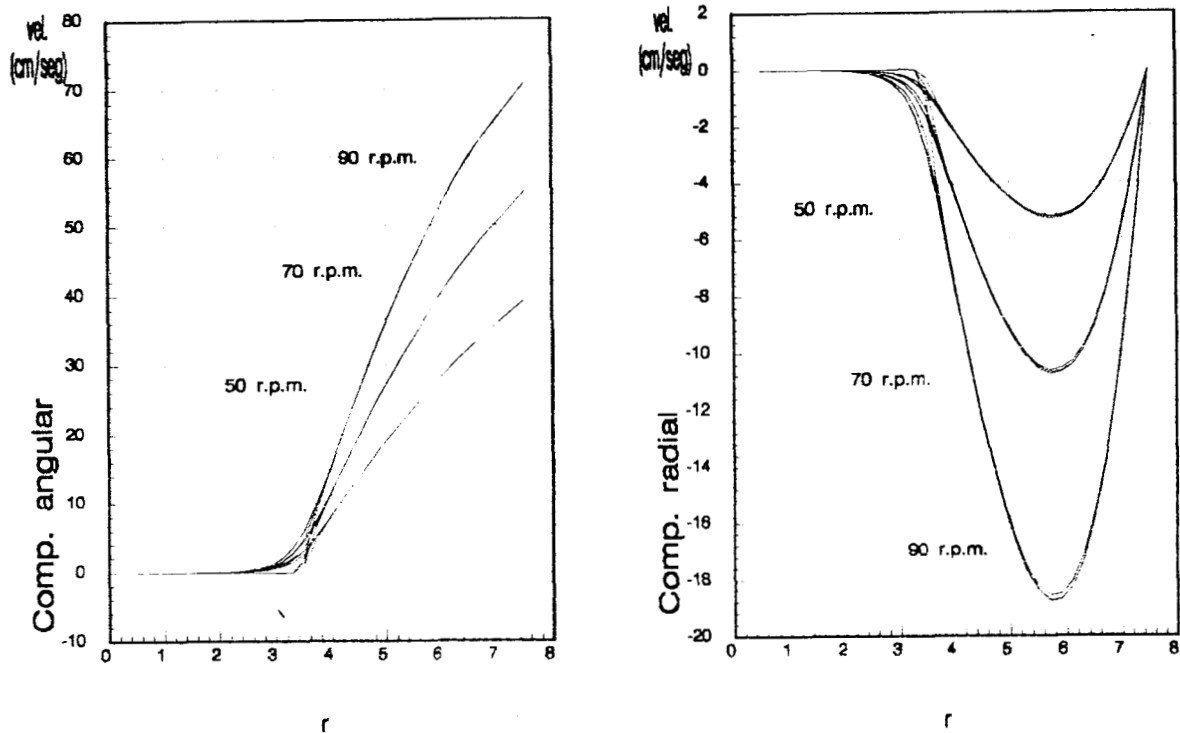


Figura 4.6., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 80°C con un impulsor de paleta

El perfil de velocidad se ve modificado en su forma cuando se aplica la condición de 90 r.p.m. (ver figura 4.5 c). Por lo que muestran los resultados, se afirma que entre mayor sea la velocidad de agitación operando en estado estacionario se alcanza el nivel de homogeneidad deseado en un tiempo más corto, para el fluido con un impulsor de paleta estas condiciones son mejores.

Mantener fijas las demás variables que afectan el proceso de mezclado y operar a temperatura mayor nos permite apreciar como el perfil de velocidad del fluido es diferente en su componente radial, en el sentido de que no solo aumenta su magnitud porque se ve disminuida su viscosidad, sino que también presenta un perfil de velocidad apreciable dentro de la región que rodea al impulsor, como se puede observar en la figura 4.7. Para una temperatura más elevada, el perfil no solo gana mayor profundidad, sino también muestra un ancho más amplio con magnitudes por encima de cero en las regiones más próximas al impulsor.

Los componentes de velocidad angular y radial muestran una mejor capacidad para remover los volúmenes de fluido que se encuentran en el centro del tanque a velocidades de rotación elevadas. El hecho de tener una viscosidad alta y el emplear un impulsor de paleta genera un volumen de estancamiento en el espacio que rodea al agitador, así, para renovar de forma continua todos los volúmenes de fluido que se encuentren en esta región, se requerirá de un tiempo considerable de operación en estado estacionario. Tomando en cuenta el volumen total del tanque, dicho tiempo puede llegar a ser tan grande que para alcanzar el nivel deseado de homogeneidad en el fluido, esto puede representar una inversión apreciable en consumo de energía.



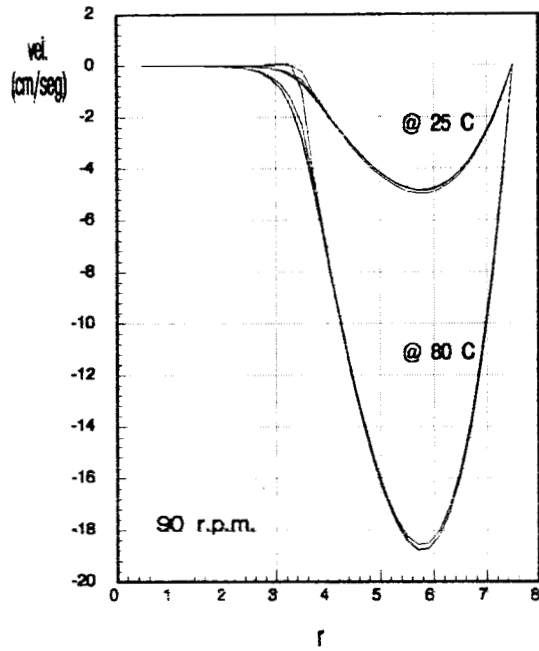
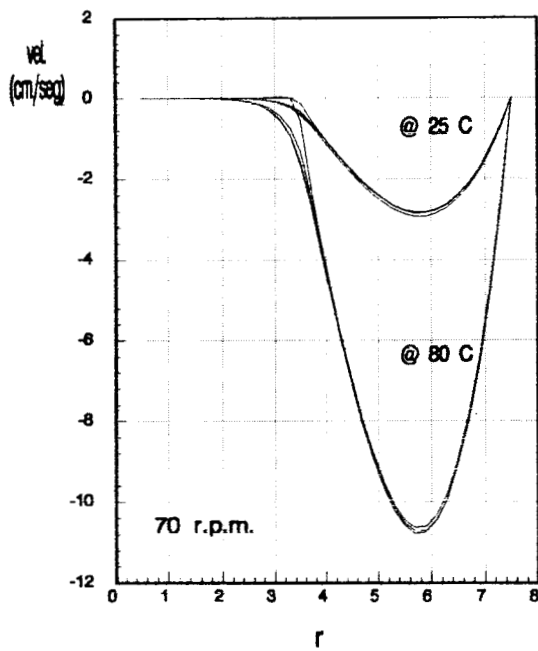
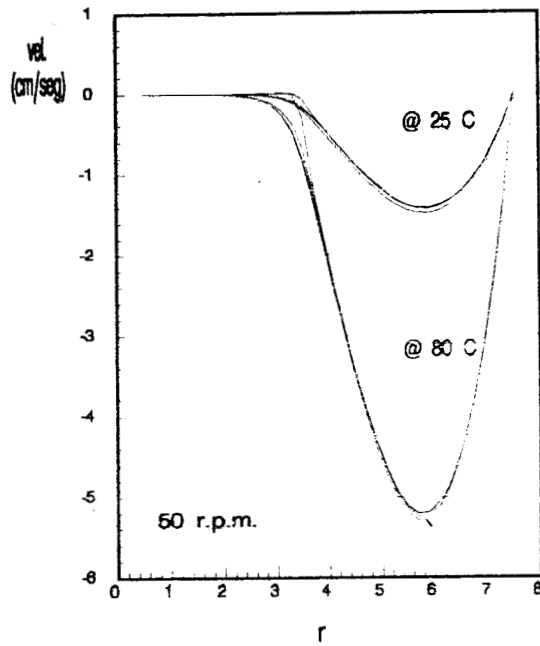


Figura 4.7., Componentes de velocidad radial para impulsor de paleta.

### 4.3 ANÁLISIS DE SIMULACIONES PARA EL IMPULSOR DE ANCLA

El proceso de mezclado se encuentra gobernado por diferentes variables que intervienen para alcanzar el grado deseado de homogeneización del fluido. Quizás una de las variables de mayor importancia es precisamente la geometría del impulsor empleado, el cual produce distintos patrones de flujo de acuerdo a su forma y posición dentro del tanque.

Las dimensiones del impulsor de tipo ancla se encuentran representados en la figura 3.2, el cual tiene un ancho de 3 cm. y se ubica a partir de 2.5 cm. del centro del tanque, comprendiéndose una región anular de 2 cm. en la que, por esperarse cambios abruptos en los perfiles de velocidad, le fue definida una malla aún más refinada para esa región, en comparación con el resto del tanque.

La figura 4.8 a, presenta los perfiles de velocidad en el plano  $r - \theta$  para el impulsor de ancla bajo condiciones de régimen laminar a  $25^{\circ}C$  y 50 r.p.m. Se puede observar como la forma que posee es casi similar a los perfiles mostrados para un impulsor de paleta, con la diferencia de que ahora el área de alta velocidad se ha desplazado hasta 5.5 cm. más allá del centro del tanque, que corresponde al punto donde se encuentran las fronteras del agitador.

Como se ilustra en la figura 4.9 (50 r.p.m.), los componentes de velocidad tanto radial como angular, presentan condiciones análogas, en cuanto su forma, a las mostradas para una impulsor de paleta. Las magnitudes tienen importantes diferencias, debido a que la geometría no es la misma; la posición de la hoja del agitador, más próxima a la pared del tanque, modifica directamente dichas magnitudes.

Resulta interesante la comparación de la agitación del fluido bajo estas condiciones. Se puede afirmar que el modo para hacer que exista el mezclado no solo basta con que el componente de la velocidad angular se manifieste, sino que también el componente de la velocidad radial, para que así pueda presentarse esa renovación de volúmenes de fluido en todo el espacio que ocupa dentro del tanque.

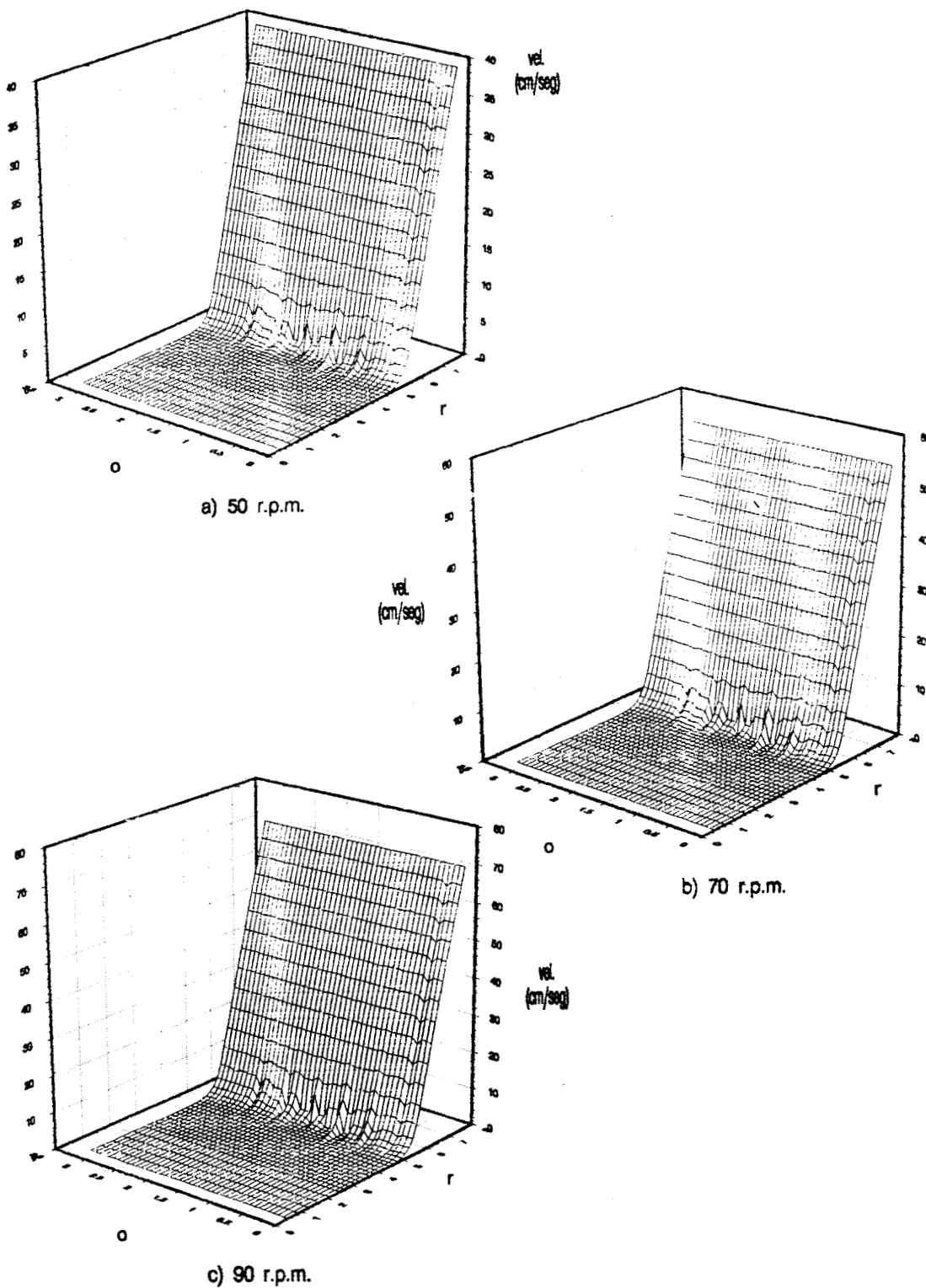


Figura 4.8., Perfiles de velocidad en el plano @ 25° C, con un impulsor de ancla

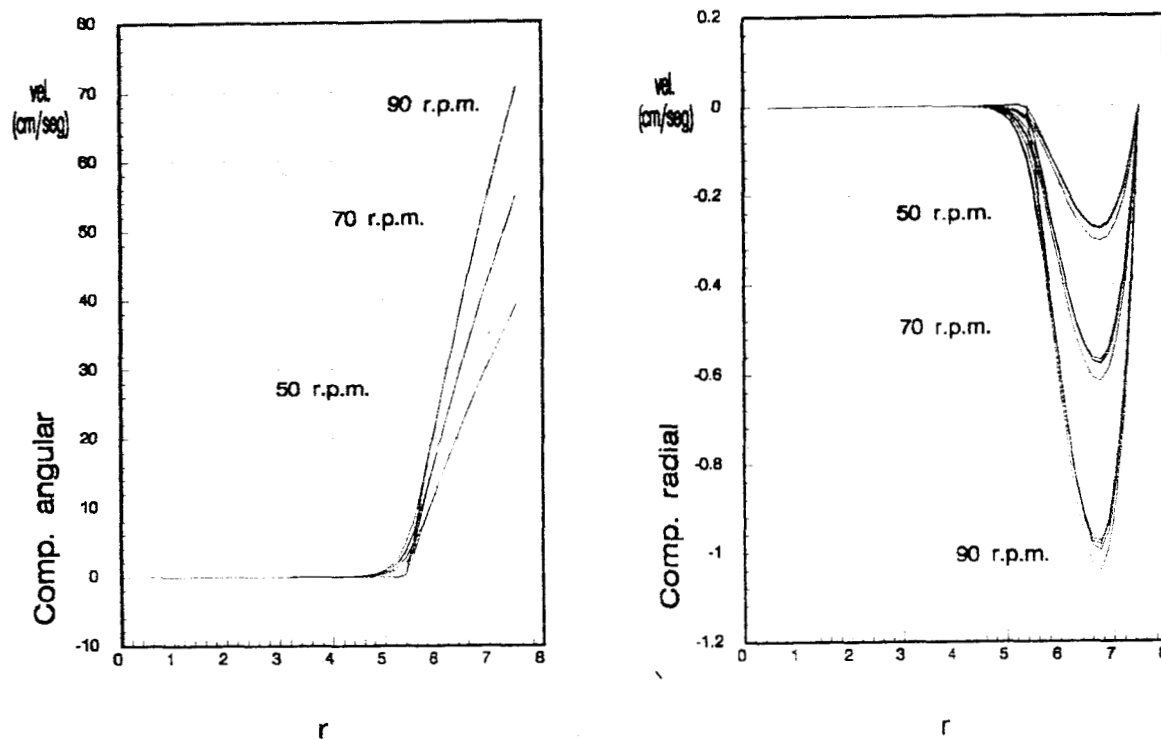


Figura 4.9., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 25°C con un impulsor de ancla.

El hecho de que el componente de la velocidad radial ahora presente una baja magnitud da una idea de como la presencia del impulsor no permite que los perfiles de velocidad sean de mayor magnitud, de hecho, tal parece como si frenara completamente el movimiento del fluido, producido desde la pared del tanque. La hoja del impulsor no permite perfiles de velocidad elevados hacia el centro del tanque, aun cuando sus dimensiones geométricas no cubran toda la región de baja velocidad.

Frente a un cambio de velocidad de rotación, como lo ilustra la figura 4.8 b., vemos como en la región donde el perfil de velocidad es más elevado, parece como si únicamente sufriera una modificación en la pendiente, y esto es debido a que la componente radial de hecho tiene una escasa contribución al perfil de velocidad resultante.

La magnitud del componente de la velocidad radial en la figura 4.9 (70 r.p.m.), no presenta un crecimiento apreciable en comparación con la magnitud del componente de la velocidad angular, razón por la que de hecho, aún el perfil en el plano de la velocidad resultante, casi es el mismo que el del componente de la velocidad angular.

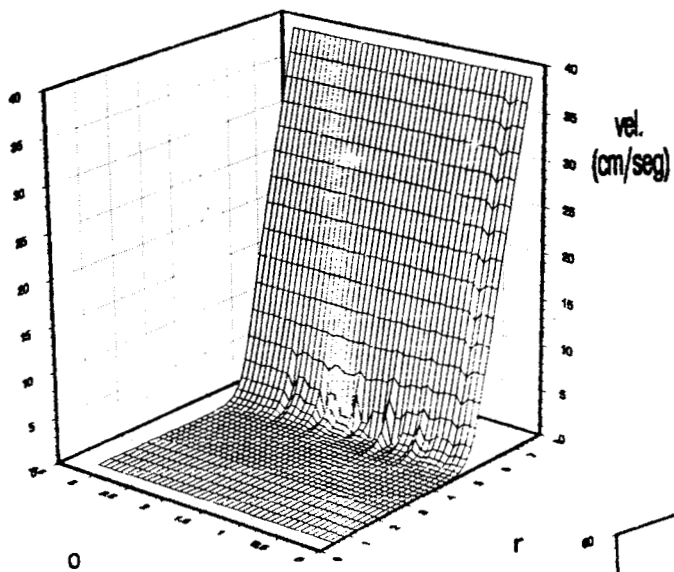
Dada la situación física real, de que el agitador se encuentra en movimiento, se generara un perfil de velocidad que muestra como los volúmenes de fluido son desplazados del impulsor a la pared del tanque. La perspectiva en dos dimensiones no permite predecir lo que ocurre bajo una solución en tres dimensiones, esto es que se ignora con que magnitud se podrían manifestar los patrones de flujo secundario presentes en el proceso de mezclado durante la agitación.

No obstante, la existencia de los patrones de flujo secundario ofrecen la idea de que dificultarían directamente al perfil del componente de la velocidad radial, en el sentido de que exista desplazamiento de volumen de fluido del impulsor hacia el centro del tanque. Esto permite afirmar que para el componente de la velocidad radial presentaría un perfil del impulsor al centro del tanque con una magnitud muy escasa.

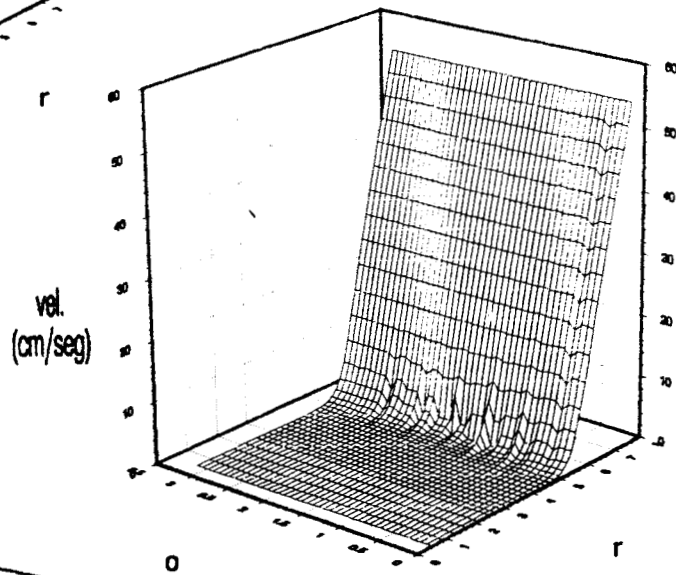
Se puede observar en la figura 4.8 c, que aún cuando la velocidad de rotación en la pared es mayor, la presencia del impulsor no permite que el fluido que se encuentra en el centro del tanque sea removido; de hecho, si se coloca un observador en el centro del tanque, este no tendría la sensación de que bajo tales condiciones de operación, exista en la pared del tanque movimiento.

Para tener una idea de la capacidad de desplazamiento de volumen de fluido que el impulsor de paleta ofrece, se tomó como punto de referencia la magnitud del componente de la velocidad radial, puesto que ante una situación real con el agitador en movimiento, se tendría un perfil de velocidad que tendería a desplazar el fluido del centro hacia la pared del tanque, debido a la fuerza centrífuga producida por la rotación del impulsor.

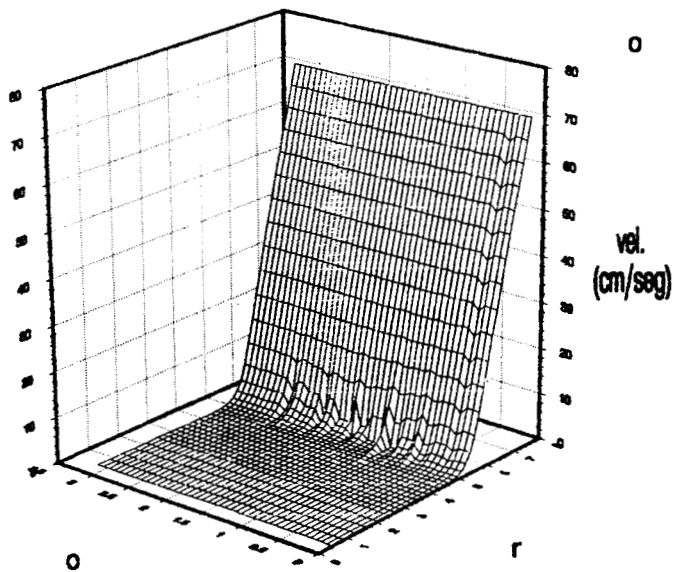
Para el impulsor de ancla, el análisis del componente de la velocidad radial es del mismo modo importante que para el de paleta, ya que este nos indica el desplazamiento del volumen del fluido. Evidentemente que para la situación de que el impulsor se encuentre en movimiento se tendrá un desplazamiento del fluido hacia la pared del tanque, pero para la región del impulsor al centro del tanque difícilmente se mostrara magnitudes para el componente de la velocidad radial que pudiesen representar una capacidad de desalojo de volumen de fluido escasa.



a) 50 r.p.m.



b) 70 r.p.m.



c) 90 r.p.m.

Figura 4.10., Perfiles de velocidad en el plano @  $80^{\circ}C$ , con un impulsor de ancla.

Se puede afirmar que la posición geométrica del impulsor de ancla no favorece la magnitud de los patrones de flujo secundario, que en un momento dado se pudiesen presentar ante una situación de tres dimensiones, por lo que con la perspectiva bidimensional del modelo propuesto y la consideración de fluido Newtoniano, resulta pues difícil de apreciar una eficiencia superior por parte del impulsor de ancla comparado con el de paleta para remover los volúmenes de fluido.

Aunque experimentalmente se hayan obtenido resultados que demuestran que para el polibutadieno 1,4 al 14.5 % en peso sea más eficiente un impulsor de proximidad que el de paleta, bajo el desarrollo del modelo teórico propuesto no se puede afirmar lo mismo, es necesario incluir en el análisis otras situaciones reales que debido a las suposiciones propuestas del modelo no están contempladas y restan herramientas de juicio para poder confirmar los resultados experimentales obtenidos. Notese que no se está negando la validez de los resultados experimentales obtenidos por Medina (1994), sino que teóricamente con el modelo propuesto no se puede realizar alguna aseveración que demuestre lo contrario o lo confirme, debido a la falta de consideraciones reales que fueron despreciadas en el modelo.

El fluido presenta mínimos cambios de velocidad en sus perfiles, aun cuando el proceso se realiza a temperatura mayor (ver figura 4.10. a). El agitador resulta ser un obstáculo para que el fluido pueda tener libertad de movimiento, su posición geométrica en el tanque tiene una influencia mayor para alcanzar un nivel de homogeneidad establecido de modo más eficiente que el disminuir la viscosidad del fluido al operar a una temperatura más elevada.

A un nivel de temperatura mayor, la componente radial en la figura 4.11 (50 r.p.m.), ha crecido en magnitud, pero aún su tamaño es muy pequeño en comparación con la componente angular. La única región que posee una remoción del fluido es precisamente la región anular del agitador a la pared del tanque, el resto queda sumergido en una velocidad mínima.

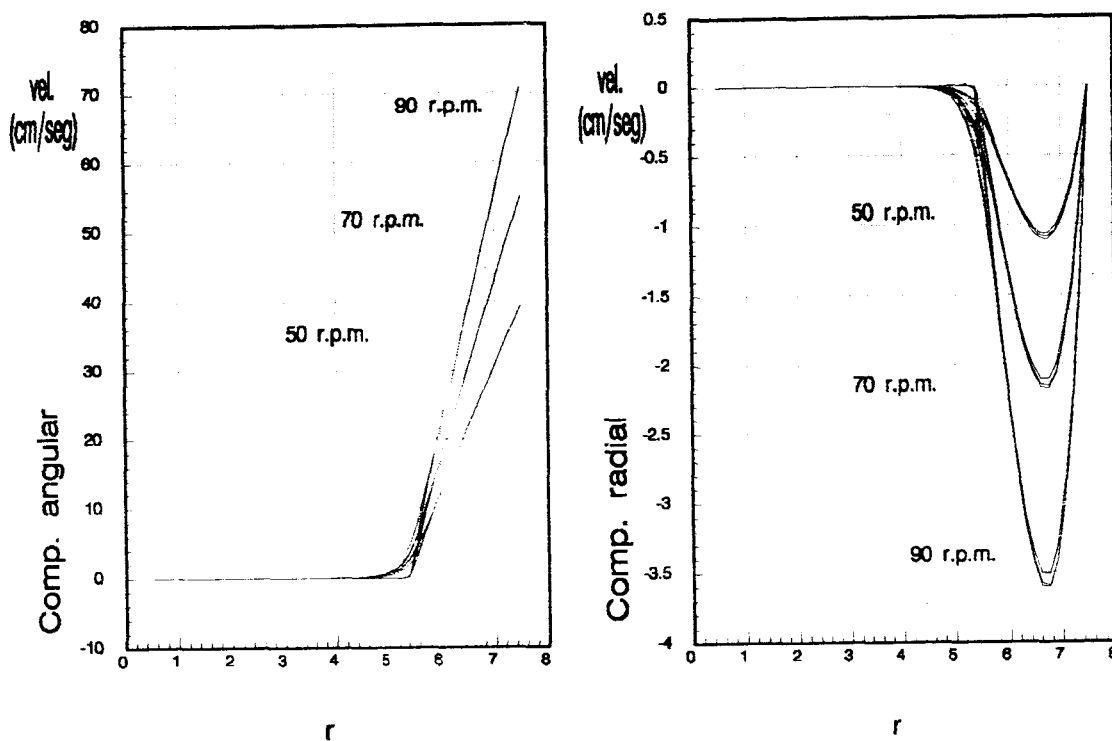


Figura 4.11., Componentes de velocidad angular y radial de tanque agitado @ 80°C con un impulsor de ancla.

Temperatura, velocidad de agitación y condiciones geométricas son las tres variables consideradas en la presente investigación. Los resultados muestran que la configuración geométrica del agitador puede influir aun más que la temperatura, ello se puede constatar al comparar los perfiles de velocidad en el plano de la figura 4.10, y 4.11 con la figura 4.8 y 4.9. Esto es que el modo más efectivo para desplazar volúmenes de fluido en el tanque, en el sentido de que favorezcan el mezclado, se logra a partir de la definición de una geometría adecuada.

De manera análoga al caso del impulsor de paleta, la componente radial crece al aumentar la velocidad de rotación del tanque, aunque no en la misma magnitud, como se aprecia en la figura 4.11 (70 r.p.m.). La componente angular por su parte, conserva el dominio del proceso de mezclado siendo aun muy superior al componente de la velocidad radial.

Una interpretación del patrón de flujo que siguen los vectores para la geometría del ancla se observa en la figura 4.12, donde el tamaño del vector no representa la magnitud del mismo, es únicamente una representación de un modo general de las direcciones que se conservan dentro del tanque, con la presencia del impulsor.



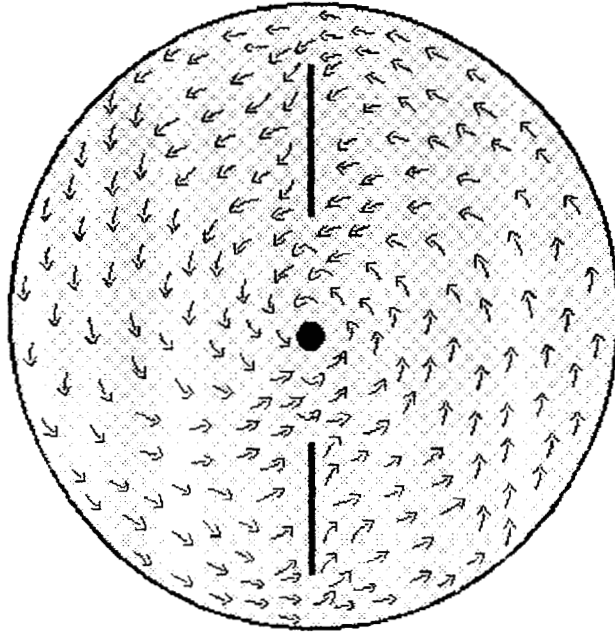


Figura 4.12., Patrones de flujo para un impulsor de tipo ancla bajo régimen laminar

El operar a un nivel de temperatura diferente modifica la profundidad del perfil para el componente radial, en cambio para la componente angular las modificaciones que sufre en su perfil no son significativas. El ancho del perfil del componente de la velocidad radial se ve beneficiado ya que se opera bajo una temperatura mayor, por lo que se afirma que, en la proporción con que puede aumentar la temperatura, el componente de velocidad radial aumentará en profundidad, lo cual implica que mostrará una tendencia mayor a fluir hacia el centro del tanque. El ancho del perfil será más amplio, esto implica que el fluido mantendrá velocidades con una magnitud apreciable en las regiones cercanas a las hojas de impulsor, ver figura 4.13.

Bajo condiciones de operación extremas con velocidad de rotación y temperatura de operación elevada, aun el crecimiento de la magnitud del componente de velocidad radial no es significativo. El factor que determina la eficiencia del impulsor de ancla, esta en el análisis para el perfil del componente de la velocidad radial, del mismo modo que para el impulsor de paleta. La figura 4.14 muestra el perfil para el componente de la velocidad radial en el plano para ambos impulsores, donde se aprecia las diferencias de los tamaños de fosa. Si no existiese una magnitud de velocidad en la dirección radial difícilmente podría existir el mezclado, razón por la que se considera como la variable que describe de mejor manera el desplazamiento de fluido en el tanque.

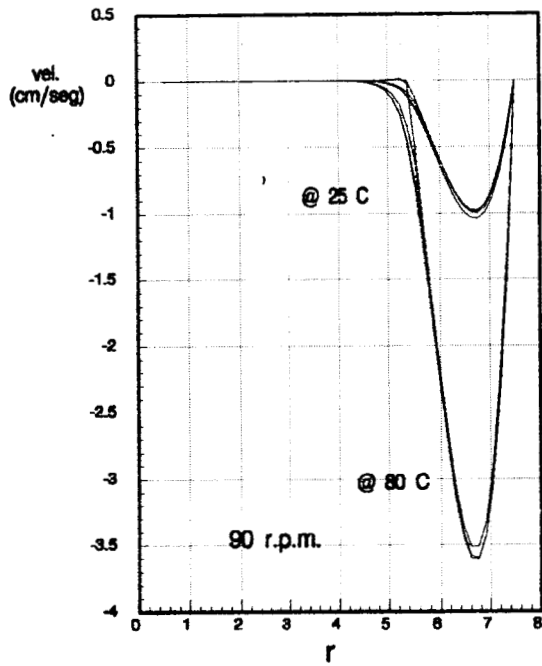
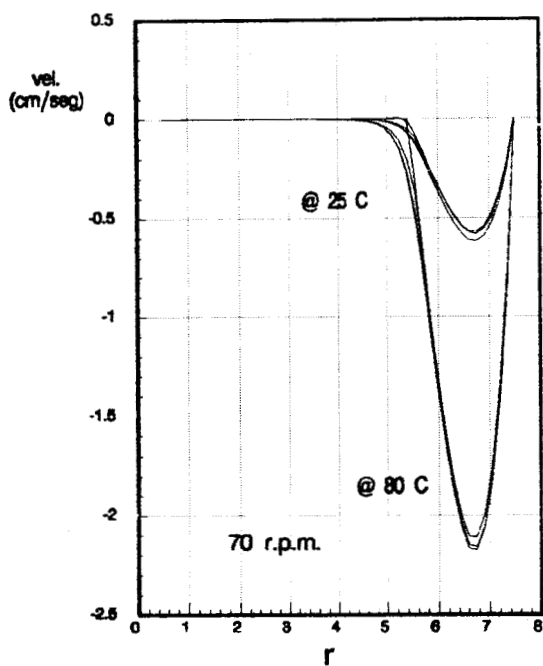
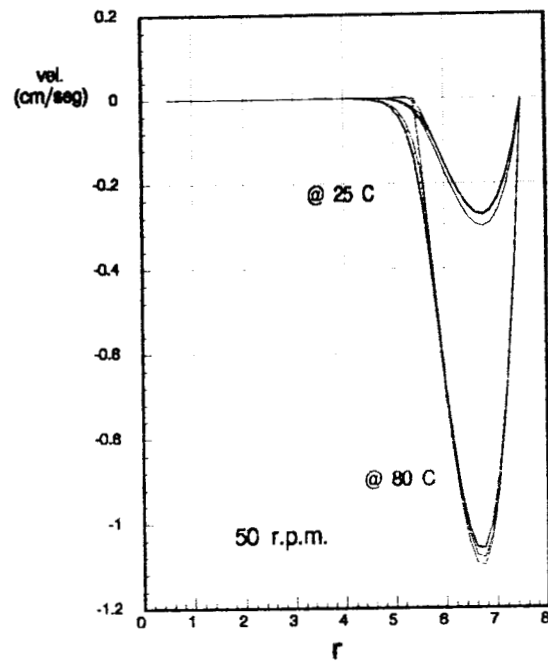
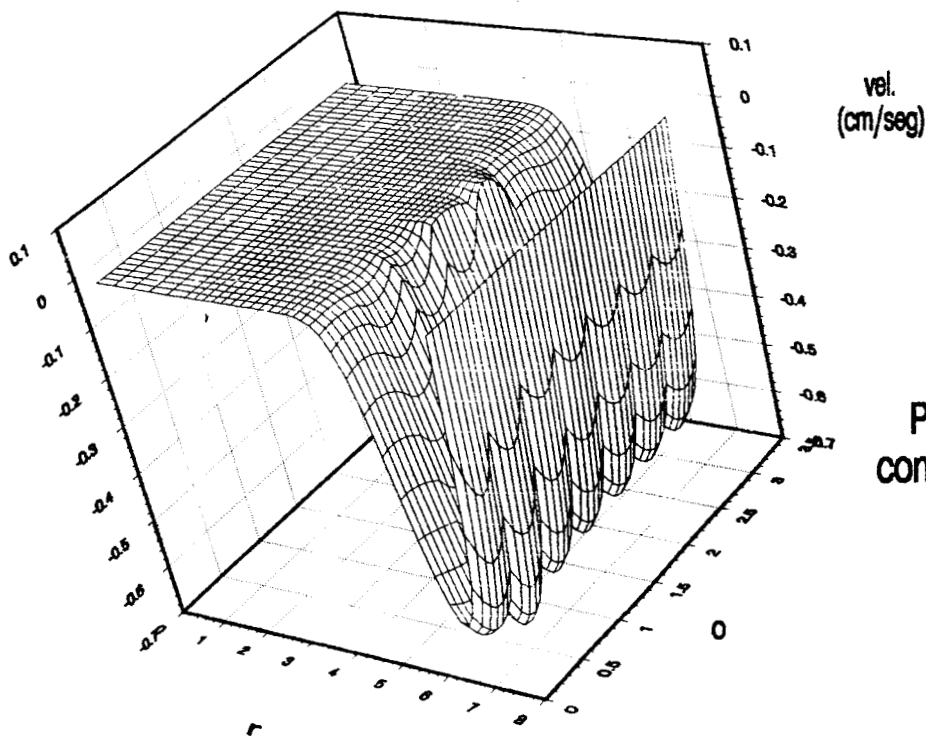
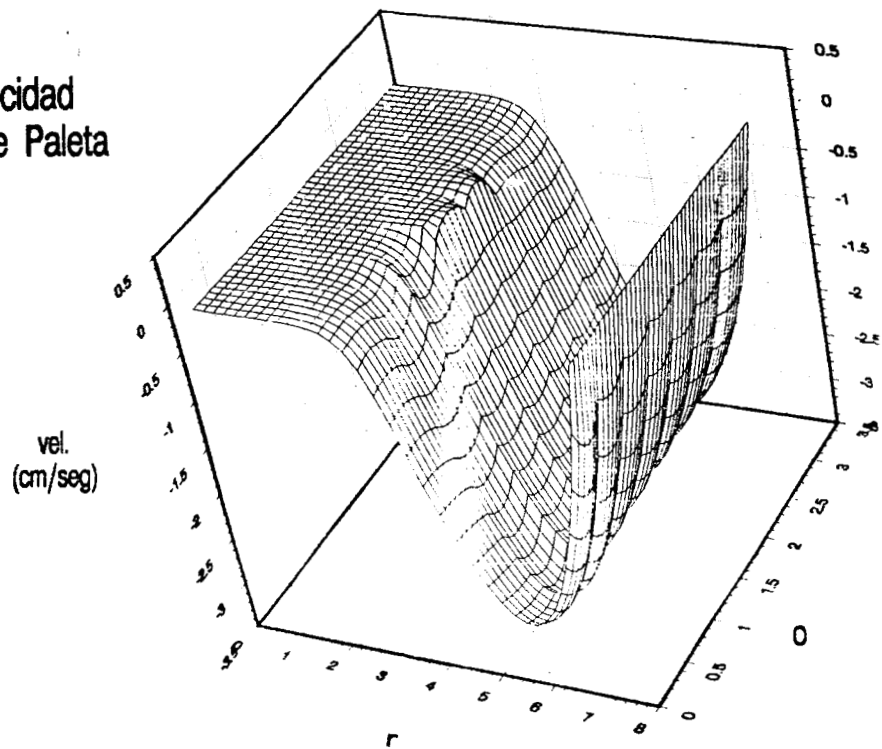


Figura 4.13., Componentes de velocidad radial para impulsor de ancla.

Perfil de Velocidad  
con Impulsor de Paleta



Perfil de Velocidad  
con Impulsor de Ancla

Figura 4.14., Perfiles del componente de velocidad radial en el plano, para impulsores de paleta y ancla @ 25°C, 70 r.p.m.



## CONCLUSIONES

En la presente investigación se realizó un estudio numérico de la eficiencia del proceso de mezclado de fluidos viscosos, considerando dos tipos de impulsores comúnmente usados en la industria, para diferentes valores de: temperatura y velocidad de agitación operando en estado estacionario. Al respecto se puede afirmar que :

- La configuración geométrica del impulsor tiene una mayor influencia en el sentido de favorecer la renovación de volumen de fluido, esto es que ofrece un beneficio mayor al mezclado del fluido, para las condiciones de operación simuladas el agitador de paleta resulto ser más eficiente.
- Las condiciones de operación más propicias para favorecer el mezclado, resultan al emplear un impulsor de paleta, y condiciones extremas tanto de temperatura como velocidad de operación. Las simulaciones efectuadas a condiciones fijas de temperatura de operación, aun cuando se hayan realizado con dos niveles no permiten predecir lo que en un momento dado pudiese ocurrir ante una situación dinámica de calentamiento en el tanque.
- La geometría de ancla resulta ser inadecuada de emplear en la agitación del fluido newtoniano de elevada viscosidad, debido a su escaso poder de remoción y a que en la forma en que desplaza los volúmenes de fluido no favorece los patrones de flujo secundario que se presentarían ante una perspectiva tridimensional.

- Los resultados obtenidos nos indican que la geometría del impulsor paleta es más recomendable para obtener un buen mezclado, debido a que genera regiones en las cuales se presentara un desplazamiento de volumen de fluido con magnitudes de velocidad apreciables por parte del componente radial, una vez que el impulsor se encuentra en movimiento.
- Las modificaciones en las variables como temperatura y velocidad de agitación no influyeron notablemente con la geometría de tipo ancla debido a su configuración, esto habla de que aun con operar a condiciones extremas, el beneficio que recibe el proceso de mezclado no es significativo en cuanto a que no favorece la renovación de volumen de fluido.

En base a los resultados obtenidos de las simulaciones efectuadas se recomienda para trabajos posteriores :

- Con las simulaciones efectuadas establecer un criterio a partir del cual la eficiencia del mezclado quede definida de forma cuantitativa.
- Se efectúen simulaciones en las cuales, se modifique la posición de la barra del impulsor tanto en posiciones próximas a la pared como en posiciones alejadas, así como también efectuar cambios en su ancho.
- Realizar cambios de coordenadas para los perfiles de velocidad obtenidos en el sentido de apreciar resultados numéricos frente a la situación del impulsor en movimiento.

# BIBLIOGRAFÍA

1. Akin J. E., (1981), "Applications and Implementations of Finite Element Methods ", New York : Academic Press.
2. Becker E. G., Carey G. F., y Oden J. T., (1981), "Finite Elements, An Introduction", Vol I, Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, Inc.
3. Bird R. B., Armstrong R. C., y Hassager O., (1977), "Dynamics Of Polymeric Liquids. Fluid Mechanics ", Vol. 1, John Wiley & Sons.
4. Brito de la Fuente E., Leuliet J. C., Choplin L., y Tanguy P. A., (1992), "On the Effect of Shear-Thinning Behavior on Mixing with a Helical Ribbon Impeller", AIChE Symposium Series, Vol. 88., No. 286, pp 28-32.
5. Burden R. I., y Faires J. D., (1985)," Análisis Numérico ", Grupo Editorial Iberoamérica.
6. Dautray R., y Lions J. L., "Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology", Vol. 1, Physical Origins and Classical Methods.
7. Hiraoka S., Yamada I., y Mizoguchi K, (1979), "Two Dimensional Model Analysis of Flow Behaviour of Highly Viscous Non-Newtonian Fluid in Agitated Vessel with Paddle Impeller", Journal Of Chemical Engineering Of Japan, Vol. 12, No. 1, pp 56-62.
8. Hiraoka S., Yamada I., Aragaki T., Nishiki H., Sato A., y Takagi T., (1988) "Numerical Analysis of Three Dimensional Velocity Profile of Highly Viscous Newtonian Fluid in an Agitated Vessel With Paddle Impeller", Journal of Chemical Engineering of Japan, Vol. 21, No. 1, pp 79-86.
9. Kaminoyama M., Arai K., y Kamiwano M., (1994), "Numerical Analysis of Power Consumption and Mixing Time for a Pseudoplastic Liquid in Geometrically Similar Stirred Vessels with Several Kinds of Plate-Type Impellers", Journal of Chemical Engineering of Japan, Vol. 27, No. 1, pp. 17-24.

10. Kaminoyama M., Saito F., y Kamiwano M., (1990) , "Numerical Analysis of Three Dimensional Flow of a Pseudoplastic Liquid in A stirred Vessel with a Turbine Impeller", International Chemical Engineering, Vol. 30, No. 4, pp. 720-728.
11. Kaminoyama M., Akabane K., Arai K., Saito F., y Kamiwano M., (1994), "Numerical Analysis of a Bingham Fluid in an Anchor Impeller", International Chemical Engineering, Vol. 34, No. 2, pp. 263-269.
12. Medina T. L., (1994), " Estudio de Mezclado en un Tanque Agitado y su Efecto en la Transferencia de Calor en Fluidos Newtonianos y no Newtonianos", Tesis de Maestria, Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.
13. Metzner A. B., y Otto R. E., (1957) ." Agitation of Non-Newtonian Fluids ", AIChE Journal, Vol. 3, No. 4, pp. 3-10.
14. Ohta M., Kuriyama M., Arai K., y Saito S., (1985), "A Two-Dimensional Model for the Secondary Flow in an Agitated Vessel with Anchor Impeller", Journal Of Chemical Engineering Of Japan, Vol. 18, No. 1, pp 81-84.
15. Pepper D. W., y Heinrich J. C., (1992), "The Finite Element Method. Basic Concepts And Applications", Hemisphere Publishing Corporation.
16. Tanguy P. A., Lacroix R., Bertrand F., Choplin L., y Brito de la Fuente E., (1992), "Mixing Of Non-Newtonian Viscous Fluids With Helical Impellers: Experimental And Three-Dimensional Numerical Studies ", AIChE Symposium Series, Vol. 88., No. 286, pp 33-37.
17. Tanguy P. A., Lacroix R., Bertrand F., Choplin L., y Brito de la Fuente E., (1992), "Finite Element Analysis Of Viscous Mixing With A Helical Ribbon-Screw Impeller", AIChE Journal, Vol. 38, No. 6, pp 939-944.
18. Zienkiewics O. C., (1977), "The Finite Element Method", 3er ed., London: McGraw-Hill Book Company.