



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

ANÁLISIS NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE LA AGITACIÓN DE  
FLUIDOS INMISCIBLES

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
ALFONSO PALACIOS MUÑOZ

TUTORES  
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ  
DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

INSTITUTO DE INGENIERÍA – UNAM

## Jurado asignado:

Presidente: Dr. Solorio Ordaz Francisco Javier

Secretario: Dr. Ascanio Gasca Gabriel

1<sup>er</sup>. Vocal: Dr. Vicente y Rodríguez William

2<sup>do</sup>. Vocal: Dr. Salinas Vázquez Martín

3<sup>er</sup>. Vocal: Dr. Zenit Camacho José Roberto

Lugar donde se realizó la tesis:

Instituto de Ingeniería – UNAM

Tutores de la tesis:

Dr. Vicente y Rodríguez William

Dr. Salinas Vázquez Martín

---

Firma

---

Firma

## *Agradecimientos*

No existen palabras para poder agradecer a mis padres, Alfonso Palacios y Cristina Muñoz, por todo el amor, comprensión y apoyo que me han brindado para alcanzar mis sueños, sencillamente no sería nada sin ellos. Gracias por formarme como persona, por los consejos y alentarme a seguir adelante. Los admiro, respeto y los amo demasiado, aunque nunca se los diga. Simplemente gracias.

Quiero agradecer a mis tíos Héctor, Verónica y Leticia, por cuidar de mí, por los consejos, porque siempre han estado en los momentos que más los he necesitado, por brindarme siempre su apoyo. A mis primas y primos, que son mis hermanas y hermanos, gracias Karina, Leticia, Alejandra, Montserrat, Verónica, José Luis y Kevin, por todo el cariño, por todos los momentos que hemos pasado juntos. Finalmente a todos mis sobrinos Paulina, Alan, Diego, Vanessa, Eva, Aracely, Allison y Valentina, quienes han llenado de alegría a toda la familia. Cada uno de ustedes ocupa un lugar muy especial en mi corazón, los quiero mucho.

El presente trabajo tiene una dedicación especial para mi abuelita Evangelina Domínguez. Siempre estará en mi corazón.

A mis asesores, al Dr. William Vicente y al Dr. Martin Salinas, por todo el apoyo brindado durante la elaboración del trabajo, que lo hicieron de una manera desinteresada, así como, por su amistad, consejos, paciencia y enseñanzas. A todos mis compañeros que se encuentran dentro y fuera del Laboratorio de CFD. Pero en especial al M.I. Jorge Ramírez y al M.I. Christian Lagarza, ya que con su ayuda y consejos, se pudo culminar este trabajo. Gracias.

Al Dr. Gabriel Ascanio, por el apoyo para realizar toda la parte experimental del presente trabajo, por la motivación para desarrollar la investigación, por sus consejos y enseñanzas. Gracias.

Al Dr. Francisco Solorio y al Dr. Roberto Zenit, por el tiempo dedicado a la revisión de este trabajo, por los consejos y comentarios, para mejorar el trabajo. Gracias.

A la UNAM, mi alma mater, a la cual le tengo un gran cariño y respeto, además, ha sido mi segundo hogar. A mí amada Facultad de Ingeniería, quien me ha hecho crecer como persona y ha inculcado grandes valores. Gracias

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por el apoyo económico durante mis estudios de posgrado. Gracias

# Contenido

Contenido.....	V
Resumen.....	1
1. Introducción.....	3
1.1 Fluidos multifásicos.....	3
1.2 Interfase.....	4
1.3 Tensión superficial.....	4
1.4 Agitación.....	6
1.5 Objetivos.....	11
1.5.1 Objetivo general.....	11
1.5.2 Objetivos particulares.....	11
2. Ecuaciones de gobierno.....	12
2.1 Ecuaciones de gobierno.....	12
2.2 Modelo de turbulencia.....	13
2.2.1 Simulación de grandes escalas (Large-Eddy Simulation, LES).....	13
2.2.2 Resolución de las ecuaciones.....	16
2.3 Esquema numérico.....	17
3. Interfase.....	19
3.1 Método Level-Set.....	19
3.2 Reinicialización.....	20
3.3 Esquema ENO y WENO.....	21
3.4 Integración temporal.....	23
3.5 Condiciones de frontera en la interfase.....	24
3.6 Tensión interfacial.....	24
3.7 Criterio Q.....	26
3.8 Fronteras Inmersas.....	27
4. Configuración del sistema.....	28
4.1 Configuración a simular.....	28
4.2 Detalles numéricos.....	30
4.2.1 Condiciones iniciales.....	32
5. Resultados.....	33

5.1	Evolución de la interfase .....	33
5.2	Validación de las simulaciones numéricas .....	38
5.3	Análisis en el estado estacionario .....	40
5.4	Interfase despreciando la tensión interfacial .....	44
	Conclusiones.....	47
	Trabajos futuros .....	48
	Referencias .....	49
	Bibliografía .....	50

## Resumen

En el presente trabajo se desarrolló un modelo numérico, con la finalidad de analizar la interacción existente entre dos líquidos inmiscibles, cuando son sometidos al proceso de agitación. Para poder validar la simulación numérica realizada, se recurrió a técnicas experimentales. El sistema consta de un tanque cilíndrico y un agitador circular con un ángulo de  $30^\circ$  con respecto a la horizontal. El desarrollo experimental se llevó a cabo a dos diferentes números de Reynolds ( $Re = 82$  y  $Re = 100$ ), siendo los fluidos de trabajo agua y aceite. El movimiento de los fluidos es producido por el agitador, el cual está sumergido en el aceite.

Asimismo, se realizó una tercera simulación donde se desprecia la tensión interfacial existente entre los líquidos inmiscibles. Esto con la finalidad de observar los efectos que tiene dicha fuerza en la interfase. Para la descripción espacial-temporal de la interfase, se utilizó el método llamado Level-Set.

La estructura de la tesis se encuentra distribuida de la siguiente manera:

- El capítulo uno contiene la introducción a los fluidos multifásicos; se presenta el fenómeno de tensión interfacial, así como, un preámbulo del proceso industrial llamado agitación; parámetros importantes de dicho proceso, y algunas aplicaciones. Para finalizar se establece el objetivo general y objetivos particulares, planteados para el presente trabajo.
- Para el segundo capítulo se presentan las ecuaciones que describen el movimiento de un fluido: continuidad y cantidad de movimiento, las cuales son resueltas en un marco cartesiano. Asimismo, la forma de modelar el tensor submalla, cuando las ecuaciones son filtradas. También, se describe el modelo de turbulencia; para el presente trabajo se utiliza la técnica simulación de grandes escalas (Large-Eddy Simulation, LES).
- En el tercer capítulo se presenta el método Level-Set, el cual es utilizado para describir el comportamiento de la interfase, así como las condiciones de frontera que son colocadas a ésta. Además, se muestra la manera de calcular la tensión interfacial existente entre dos líquidos inmiscibles y que es incluida en el modelo numérico.
- La descripción del sistema a simular se encuentra en el capítulo cuatro; se muestran las dimensiones del tanque y del agitador. También son presentadas las condiciones de operación, con los números adimensionales que caracterizan el flujo. Así como, los detalles numéricos, como son: las características del dominio computacional y las condiciones iniciales.

- El quinto capítulo, comprende el análisis de los resultados obtenidos de cada simulación numérica; se presenta la evolución de la interfase, desde el estado transitorio, hasta llegar a un estado estacionario. Adicionalmente, se muestra la validación numérica para los casos de estudio. Por último se presenta la forma de la interfase cuando se omite el efecto de la tensión interfacial.
- Finalmente, se presentan las conclusiones y trabajos futuros.

# 1. Introducción

Para este capítulo se da una breve introducción a los fluidos multifásicos. Asimismo se describe el fenómeno de tensión interfacial y los números adimensionales que caracterizan a éste. Además, se presenta el proceso de agitación, y algunas aplicaciones a las cuales está enfocada, como son la creación de emulsiones. Y finalmente, se presentan los objetivos para el presente trabajo.

## 1.1 Fluidos multifásicos

En la mecánica de fluidos, los fluidos multifásicos, son considerados como un sistema de dos o más fases. En la industria, se han realizado muchos estudios sobre este tipo de sistemas, ya que se encuentran en un gran número de procesos industriales, como en la producción de alimentos, industria petrolera, industria del papel, plantas geotérmicas, sistemas de refrigeración, intercambiadores de calor, así como, en la naturaleza. El análisis de los fluidos multifásicos aparece por la necesidad de las industrias de caracterizar el comportamiento de dichos flujos para mejorar el diseño y operación de equipos que utilizan flujos multifásicos. Además, para prevenir accidentes o para predecir el desempeño de los equipos que los contiene.

Pese a que han sido estudiados ampliamente, la complejidad del fenómeno no ha permitido tener un análisis completo, ya que la dinámica debe describirse para cada fase. Sin embargo, con ayuda de técnicas como son la velocimetría láser doppler (LDV), la velocimetría por imágenes de partículas (PIV) o la dinámica de fluidos computacional (CFD), se puede obtener un comportamiento aproximado de flujos multifásicos.

Un caso particular dentro de los fluidos multifásicos son los líquidos inmiscibles, los cuales se caracterizan por la presencia de dos líquidos que no se pueden mezclar, como por ejemplo; agua y aceite, junto con una interfase bien definida; el estudio de estos flujos se complica por el cambio dinámico de la interfase debido al movimiento de los fluidos.

Cuando se encuentran en contacto el agua y el aceite; éstos, no se pueden mezclar, debido a que están formados por diferentes moléculas. Las moléculas del agua son pequeñas, están formadas por tres átomos: dos de hidrógeno y uno de oxígeno. Adicionalmente las moléculas del agua tienen un extremo con carga eléctrica positiva y otro con carga eléctrica negativa (moléculas polares).

Por otra parte, las moléculas del aceite son más grandes, y están formadas por varios átomos de carbono e hidrógeno; no contiene átomos de oxígeno y las moléculas del aceite no contienen carga eléctrica. El agua está formada por

moléculas polares y el aceite por moléculas no polares, por lo que las moléculas se rechazan, evitando la mezcla de los líquidos. Por lo tanto un sistema de líquidos inmiscibles, ésta formado por dos fases líquidas y una superficie de contacto llamada interfase.

## 1.2 Interfase

La interfase es la zona de separación entre dos fases distintas, por ejemplo, agua – aire, metal – disolución, agua – disolvente orgánico, que corresponden respectivamente a las interfases líquido – gas, sólido – líquido y líquido – líquido. Esa zona o frontera, está presente en el estudio de una gran cantidad de procesos físicos y químicos, ya que en ella ambas fases tienen características diferentes a las existentes por separado. La interfase es una zona de discontinuidad, por tal motivo, las moléculas tienen propiedades características que originan fenómenos, como la formación de gotas o la capilaridad. La forma de la interfase se debe a las fuerzas de atracción, de repulsión y de gravedad.

Las moléculas de la interfase estarán sometidas a fuerzas de atracción o repulsión, de magnitudes diferentes, debido al contacto entre los líquidos. La Figura 1. 1 muestra un sistema de líquidos inmiscibles.

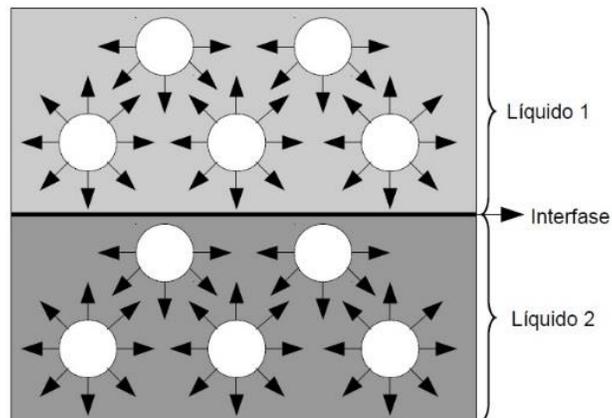


Figura 1. 1 Interfase entre los dos líquidos.

## 1.3 Tensión superficial

Las fuerzas de atracción entre las moléculas de un líquido tienen diferente magnitud dependiendo de la zona del líquido. Las moléculas que se encuentren cercanas entre sí se repelen y las que se encuentran en la superficie libre están menos comprimidas y se atraen unas a otras. Adicionalmente las moléculas que están en contacto con la superficie libre (Figura 1. 2) no están rodeadas por completo por otras moléculas del líquido ocasionando un desequilibrio en la superficie, originando

que la superficie esté sometida a una tensión; a este fenómeno se lo conoce como tensión superficial.

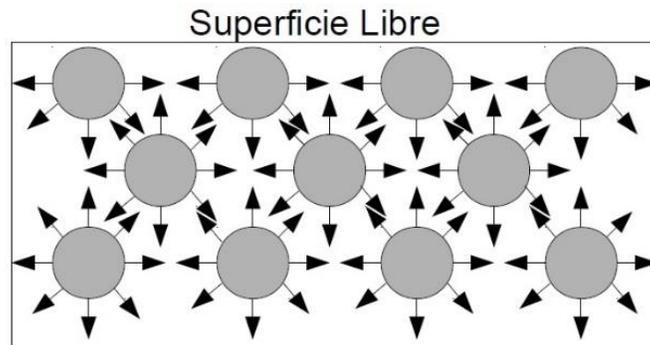


Figura 1. 2 Fuerzas que actúan sobre las moléculas y en la superficie libre.

Cuando existen flujos con superficie libre, hay dos números adimensionales que son importantes para los análisis; dichos números son: el número de Froude ( $Fr$ ) y el número de Weber ( $We$ ).

El número de Froude relaciona el efecto de las fuerzas inerciales con las fuerzas de gravedad, que actúan sobre el flujo. El número de Froude está definido como:

$$Fr = \frac{u^2}{gL} \quad (1)$$

Para relacionar la fuerza inercial del fluido con la tensión superficial está el número de Weber, el cual se define:

$$We = \frac{\rho u^2 L}{\sigma} \quad (2)$$

donde  $u$  es la velocidad del fluido,  $L$  es una longitud característica,  $\rho$  densidad del fluido,  $g$  es la gravedad y  $\sigma$  es el coeficiente de tensión superficial.

La tensión superficial es de gran importancia en los sistemas de líquidos inmiscibles, sirve como un indicador de las fuerzas de atracción intermoleculares. Por otra parte, es una medida de la energía libre por unidad de área de la interfase. Además, proporciona información sobre la emulsionabilidad (Gaonkar, 1989).

La Tabla 1. 1 muestra los valores de la tensión interfacial, existente entre el agua y algunos aceites vegetales.

	Aceite de oliva	Aceite de soya	Aceite de canola	Aceite de maíz
Tensión superficial (N/m)	0.023	0.025	0.026	0.026

Tabla 1. 1 Valores de la tensión interfacial.

La agitación de líquidos es de las operaciones más comunes dentro de los procesos químicos y de industrias afines; es esencial en la industria minera, petrolera, de alimentos, farmacéutica y papel por mencionar algunos ejemplos. La agitación de líquidos se emplea con distintos propósitos, según el objetivo que se pretenda en la etapa del proceso.

## 1.4 Agitación

El proceso de agitación es uno de los más importantes dentro de la industria ya que el éxito de muchas operaciones industriales depende de una eficiente agitación de fluidos; debido a la complejidad de los fenómenos de transporte que se encuentran involucrados, es uno de los procesos más difíciles de analizar y caracterizar. La agitación se refiere al movimiento inducido de un material en una forma específica, generalmente circulatorio y provocando vórtices.

La agitación se realiza para diferentes aplicaciones, algunas son:

- Dispersión de líquidos inmiscibles, para formar emulsión.
- Mezclado de líquidos miscibles.
- Dispersión de un gas en un líquido.
- Disolución de sólidos en líquidos.
- Suspensión de partículas sólidas.
- Mejorar la transferencia de calor y de masa.

Frecuentemente, los fluidos son agitados en un recipiente cilíndrico abierto o cerrado. Las dimensiones del tanque dependen de la aplicación de agitación. Casi siempre se utiliza un diseño típico (Figura 1. 3). La Figura 1. 3 muestra un tanque agitado el cual está formado por un agitador, quien da movimiento a los fluidos; el agitador se coloca sobre un eje, a su vez el eje esta acoplado a un motor. Estos elementos son quienes producen energía cinética. Además, se colocan mamparas con la finalidad de mejorar el proceso de agitación, dichas mamparas ocasionan flujo axial y flujo radial dando una mejor dispersión en los fluidos. El estudio del proceso de agitación incluye varias consideraciones básicas. La primera es el efecto del tanque (geometría del tanque, dimensiones y estructura), la segunda es el tipo de agitador a utilizar, y por último, el desempeño de la agitación.

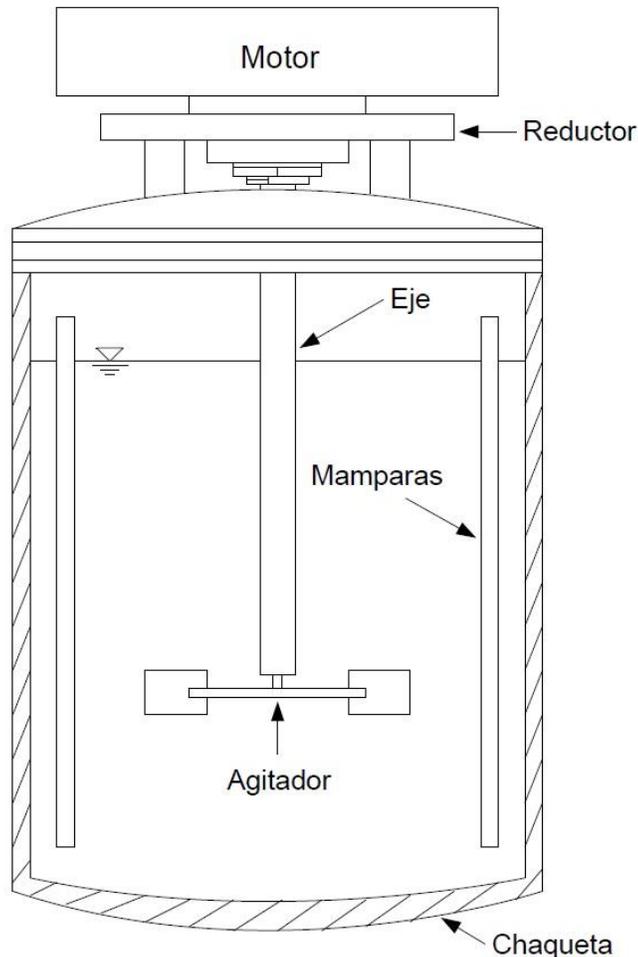


Figura 1. 3 Tanque típico de agitación.

El tipo de flujo que se produce dentro de un tanque agitado depende del tipo del agitador, de las características del fluido, del tamaño y proporciones del tanque, así como, de los desviadores. La velocidad del fluido tiene tres componentes. La primera componente de la velocidad es radial, actúa en dirección perpendicular al eje del agitador. La segunda es longitudinal y actúa en dirección paralela al eje del agitador. La tercera es tangencial, la cual actúa en dirección tangencial a la trayectoria circular descrita por el agitador

Para el diseño del tanque, se recomienda realizarlo a través de variables adimensionales, de esta forma, es posible cambiar de dimensión o tamaño, y adaptarlo a otra escala según el proceso. Las principales relaciones adimensionales (Figura 1. 4), que se utilizan en tanques agitados son: la relación de altura del fluido (H) con el diámetro del tanque (T), la razón del diámetro del agitador (D) con el diámetro del tanque (T) y la relación de la altura del agitador (C) con el diámetro del tanque (T). Para evitar las zonas donde no puedan acceder las corrientes del fluido, siempre el fondo del tanque es redondo y nunca plano y por lo regular, la altura del fluido es casi igual al diámetro del tanque.

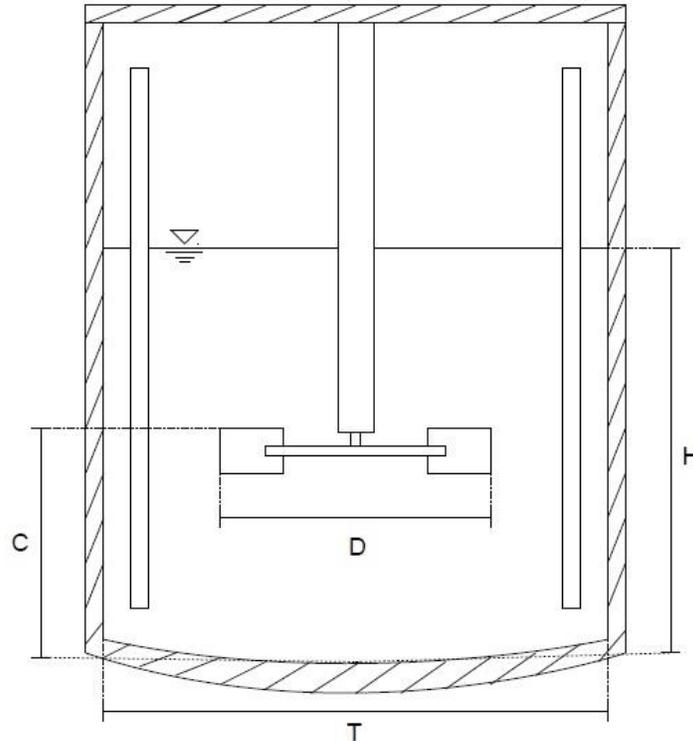


Figura 1. 4 Parámetros de un tanque agitado.

Para que el proceso de agitación sea eficiente, la selección del agitador que será utilizado debe ser la más adecuada. Existen una gran variedad de éstos y puede ser un gran problema si en cada nueva aplicación requiere de un nuevo diseño, por ello los agitadores son hechos en series similares, geoméricamente semejantes. Los agitadores se pueden dividir, generalmente, en dos tipos: agitadores de flujo axial, que generan corrientes paralelas al eje del agitador, y agitadores de flujo radial, que generan corrientes en dirección tangencial o radial. La Figura 1. 5 muestra el tipo de flujo que pueden generar los agitadores. Además, los principales agitadores son del tipo hélices, palas y turbinas.

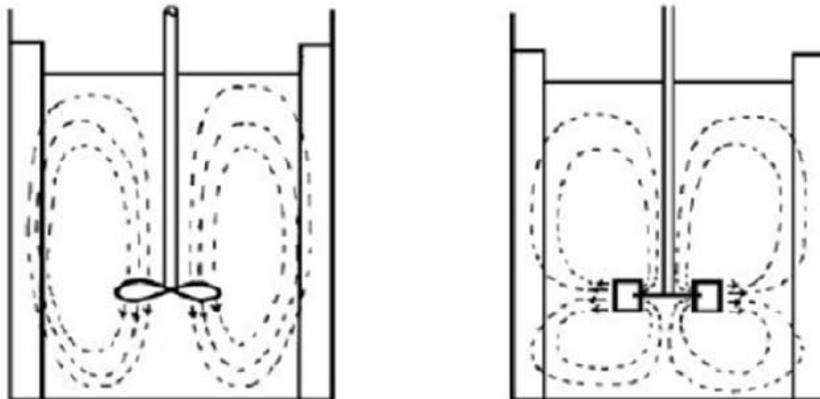


Figura 1. 5 Tipos de flujo. Imagen izquierda flujo axial, imagen derecha flujo radial.

Dentro de los agitadores del tipo hélice, uno de los más conocidos es el agitador de tres aspas de tipo marino, similar a la hélice de un motor. Este tipo de agitadores se utiliza para fluidos de baja viscosidad y el tipo de flujo que genera el agitador es del tipo axial. Además, los agitadores de hélice son eficaces para tanques de gran tamaño, del orden de 1500 m<sup>3</sup>. La Figura 1. 6 muestra los agitadores del tipo hélice.

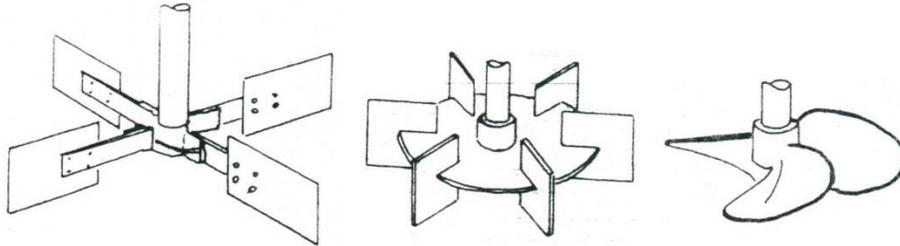


Figura 1. 6 Agitadores del tipo hélice.

El diámetro de los agitadores de hélice, raramente es mayor de 45 cm, independiente del tamaño del tanque. Para tanques de gran altura, se colocan dos o más agitadores sobre el mismo eje, generalmente, el movimiento del fluido es en la misma dirección.

Otro tipo de agitador es del tipo paletas, el cual consta de una pala plana que gira sobre un eje vertical; en ocasiones, las palas están inclinadas, pero lo más frecuente es que sean verticales. Este tipo de agitadores giran a bajas velocidades en el centro del tanque, impulsando al fluido radial y tangencialmente, sin que exista movimiento vertical, excepto que las palas estén inclinadas. Éste son utilizados con fluidos viscosos que pueden generar depósitos en las paredes, así como, para mejorar la transferencia de calor, sin embargo, no es un buen mezclador; es utilizado para procesar pastas de almidón, pinturas, adhesivos y cosméticos. En la Figura 1. 7, se aprecian algunos agitadores del tipo paletas.

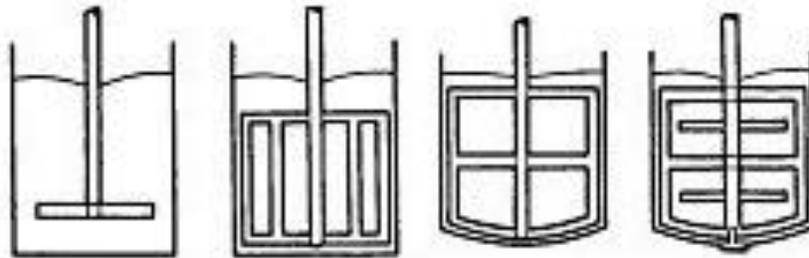


Figura 1. 7 Agitadores del tipo paletas.

La longitud total del agitador de paletas es del 60 al 80% del diámetro del tanque y el espesor de las paletas son de 1/6 a 1/10 de la longitud

Por último, se encuentran los agitadores de turbina, los cuales se muestran en la Figura 1. 8, y están compuestos por múltiples y cortas paletas, que giran a altas velocidades. Las paletas pueden ser rectas o curvas, inclinadas o verticales. Además, el agitador puede ser abierto, semicerrado o cerrado. Cerca del agitador

existe una zona de corrientes rápidas; la turbulencia es elevada y los esfuerzos cortantes son intensos. Las corrientes principales son radiales y tangenciales, las componentes tangenciales inducen la formación de vórtices, los cuales son destruidos por desviadores, para que la agitación sea más eficaz. El diámetro de una turbina suele ser del 30 al 50% del diámetro del tanque, por lo general el agitador de turbina tienen cuatro o seis paletas

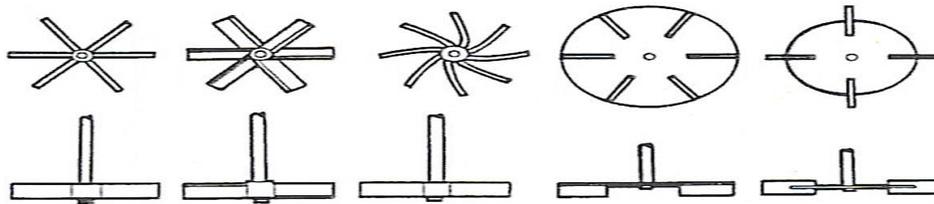


Figura 1. 8 Agitadores de turbina.

Independientemente de la naturaleza del problema de agitación; el agitador debe ser capaz de desplazar por completo al volumen de fluido en un tiempo razonable. Además, la velocidad de la corriente que abandona al agitador debe ser suficientemente elevada, con la finalidad que dicha corriente llegue a las partes más alejadas del tanque, ya que de lo contrario los fluidos que se encuentran en esas partes no llegarían a desplazarse. La corriente que abandona el agitador, contiene cantidad de energía cinética y esta energía se disipa por fricción debido a los esfuerzos cortantes a medida que la corriente fluye a través de la masa del líquido. Si la energía cinética es pequeña, la corriente no llega a los rincones más alejados del tanque, y por consiguiente, la velocidad del agitador sea tal que proporcione energía cinética, al fluido y éste se desplace por todo el tanque.

La energía que se suministra, es decir, la potencia no solo depende del tipo de agitador usado y de la rapidez con que se le hace girar, sino también depende de las características del fluido de trabajo, de la forma del tanque y de la posición de todos los componentes del sistema, como son: desviadores y soportes. De aquí que para caracterizar el comportamiento del sistema, es necesario tener en consideración el ambiente completo en el que opera.

Una de las aplicaciones del proceso de agitación, es la formación de emulsiones, las cuales se encuentran en la vida cotidiana, como por ejemplo en la naturaleza como el látex o la leche (Salager, 1999.), pero en general las emulsiones son producidas para una cierta aplicación. Además, se puede encontrar emulsiones en muchas aplicaciones domésticas o industriales, como la producción de medicamentos, las pinturas, productos farmacéuticos y cosméticos, etc. Los fabricantes de emulsiones deben enfrentarse a una serie de especificaciones, a veces complicadas, para que el producto final tenga las propiedades adecuadas para el uso.

Para poder comprender el proceso de emulsificación se han realizado trabajos experimentales y numéricos; por ejemplo, en la parte experimental algunos autores, han creado emulsiones con ayuda de los efectos de la inestabilidad electroquímica y disminución de la tensión interfacial. Además, describen patrones de flujo hidrodinámico y tamaño de gota (Takhistov & Paul, 2006). De igual manera se ha analizado los efectos que tiene el enfriamiento en la estabilidad de la emulsión; se observó que con un control adecuado del tamaño y distribución de cristales la emulsión puede estabilizarse a largo plazo (Ghosh et al., 2015).

De forma numérica (CFD) y con ayuda de la técnica de velocimetría de imágenes por partículas (PIV), se han analizado las características de la fase continua y dispersa. Modificando la velocidad del impulsor, se pudo concluir que existe un aumento de la intensidad de la turbulencia en la fase continua debido a la presencia a la fase dispersa (Laurenzi et al., 2009).

Dado que no existen investigaciones que analicen lo que sucede al inicio del proceso de emulsificación y no se toma en cuenta los efectos que ocasiona la tensión interfacial entre dos líquidos inmiscibles; los objetivos para el presente trabajo son:

## *1.5 Objetivos*

### *1.5.1 Objetivo general*

Analizar numéricamente la interacción entre dos fluidos inmiscibles, antes del proceso de emulsificación, en el interior de un tanque de agitación.

### *1.5.2 Objetivos particulares*

- Desarrollar un código numérico que permita analizar las características dinámicas de fluidos inmiscibles, que son movidos por un agitador circular; incluyendo el efecto de tensión interfacial.
- Describir el comportamiento de la interfase entre dos fluidos inmiscibles para flujos con dos diferentes números de Reynolds.
- Validar el código numérico mediante datos de visualización experimental.

## 2. Ecuaciones de gobierno

En este capítulo se presentan las ecuaciones que describen el movimiento de un fluido: continuidad, y cantidad de movimiento y son expresadas en coordenadas cartesianas. Para simular el flujo turbulento es utilizado un modelo basado en la alternativa de simulación de grandes escalas (Large Eddy Simulation, LES). Estas ecuaciones resultantes son resueltas mediante la técnica de diferencias finitas.

### 2.1 Ecuaciones de gobierno

Las ecuaciones que rigen a los fluidos se resolvieron en un marco de referencia cartesiano  $x, y, z$ . Dichas ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes, pueden ser escritas de la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = \mathbf{S}_o \quad (3)$$

donde  $\mathbf{U}$  es un vector de cuatro componentes:

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3) \quad (4)$$

Además  $u = (u_1, u_2, u_3)$  es el vector de velocidad,  $\rho$  es la densidad. La ecuación (3) y la ecuación (4) representan la conservación de masa (ecuación de continuidad) y de cantidad de movimiento para un flujo. Para el análisis (cuasi – incompresible), se utilizó el método descrito por Perrin & Hu (2006), donde se añade la ecuación de estado:

$$p = \rho c_s^2 \quad (5)$$

donde  $c_s$  es la velocidad del sonido en el medio. Si el flujo está limitado a bajos números de Mach (relación entre la velocidad y la velocidad del sonido) y las condiciones son casi isotérmicas, las ecuaciones anteriores deben aproximarse al caso incompresible (Kundu & Cohen, 2002, Perrin & Hu, 2006). Las perturbaciones de presión no serán transportadas de manera inmediata (caso incompresible), sino que viajarán a una velocidad de convección  $c_s$ .

Siendo  $\mathbf{F}_i$  los flujos definidos como:

$$\mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_1 u_i + p \delta_{1i} - 2\mu S_{i1} \\ \rho u_2 u_i + p \delta_{2i} - 2\mu S_{i2} \\ \rho u_3 u_i + p \delta_{3i} - 2\mu S_{i3} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Además  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker y  $S_{ij}$  es el tensor de tasa de deformación y se escribe:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \right) \quad (7)$$

donde  $\mathbf{S}_o$  es el término fuente, para este caso, las fuerzas debido a la tensión interfacial y a la gravedad.

$$\mathbf{S}_o = \begin{pmatrix} 0 \\ T_{\sigma 1} \delta_h \\ T_{\sigma 2} \delta_h \\ T_{\sigma 3} \delta_h + g \end{pmatrix} \quad (8)$$

Siendo  $T_{\sigma 1}$ ,  $T_{\sigma 2}$  y  $T_{\sigma 3}$ , las componentes de la tensión interfacial para cada dirección y  $\delta_h$  es una función delta de Dirac, la cual nos da la posición de la interfase, para que solo aquí se aplique la tensión interfacial  $\Gamma$ . Esto se explica en el Capítulo 4.

## 2.2 Modelo de turbulencia

### 2.2.1 Simulación de grandes escalas (Large-Eddy Simulation, LES)

La técnica simulación de grandes escalas (Large-Eddy Simulation, LES) consiste en simular únicamente las grandes escalas del flujo, las pequeñas escalas son filtradas, aunque estadísticamente influyen en el movimiento. Las ecuaciones de LES son encontradas por la aplicación de un filtro espacial  $G_\Delta(x)$  de tamaño vectorial  $\Delta$  en las ecuaciones de Navier-Stokes. Esto elimina las escalas más pequeñas que el filtro de tamaño  $\Delta$ , llamado escala submalla.

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

$$\bar{f}(x, t) = \int f(y, t) G_\Delta(x - y) dy \quad (9)$$

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

$$f = \bar{f} + f' \quad (10)$$

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

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \bar{F}_3}{\partial x_3} = \bar{S}_o \quad (11)$$

En LES se introduce comúnmente el promedio de Favre, donde, se denota por  $\bar{f}$  el peso-densidad filtrado de  $f$ , definido como:

$$\bar{f} = \frac{\bar{\rho}f}{\bar{\rho}} \quad (12)$$

Los flujos resueltos son:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \rho \bar{u}_i \\ \rho \bar{u}_1 u_i + p \delta_{1i} + 2\mu S_{i1} \\ \rho \bar{u}_2 u_i + p \delta_{2i} + 2\mu S_{i2} \\ \rho \bar{u}_3 u_i + p \delta_{3i} + 2\mu S_{i3} \end{pmatrix} \quad (13)$$

El tensor de esfuerzo submalla  $\bar{\mathfrak{S}}$ , se puede introducir como:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ij} = -\bar{u}_i \bar{u}_j + \rho \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (14)$$

Además, el tensor de esfuerzo submalla se puede dividir en sus partes isotrópica y desviador, la siguiente ecuación denota:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ij} = \mathfrak{S}_{ij} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \delta_{ij} + \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \delta_{ij} \quad (15)$$

donde:

$$\tau_{i,j} = \mathfrak{S}_{ij} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \delta_{ij} \quad (16)$$

Entonces, las ecuaciones (11) pueden ser leídas como:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \bar{u}_i \\ \bar{\rho} \bar{u}_1 u_i + \left( \bar{p} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \right) \delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \bar{\rho} \bar{u}_2 u_i + \left( \bar{p} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \right) \delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \bar{\rho} \bar{u}_3 u_i + \left( \bar{p} - \frac{1}{3} \mathfrak{S}_{ll} \right) \delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\bar{u}_i \\ \frac{\bar{\rho}\bar{u}_1 u_i + \bar{\omega}\delta_{i1} - \tau_{i1} - \frac{2\bar{\mu}\bar{S}_{i1}}{\bar{\rho}}}{\bar{\rho}\bar{u}_2 u_i + \bar{\omega}\delta_{i2} - \tau_{i2} - \frac{2\bar{\mu}\bar{S}_{i2}}{\bar{\rho}}} \\ \frac{\bar{\rho}\bar{u}_3 u_i + \bar{\omega}\delta_{i3} - \tau_{i3} - \frac{2\bar{\mu}\bar{S}_{i3}}{\bar{\rho}}}{\bar{\rho}\bar{u}_3 u_i + \bar{\omega}\delta_{i3} - \tau_{i3} - \frac{2\bar{\mu}\bar{S}_{i3}}{\bar{\rho}}} \end{pmatrix} \quad (18)$$

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

$$\tau_{i,j} \approx \bar{\rho}v_t\bar{S}_{ij} \quad (19)$$

Los términos restantes no calculables son términos de viscosidad molecular, que se pueden considerar de menor importancia cuando el número de Reynolds es suficientemente grande. Por lo tanto, simplemente reemplazamos la ecuación (16) por:

$$\bar{F}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\bar{u}_i \\ \frac{\bar{\rho}\bar{u}_1 u_i + \bar{\omega}\delta_{i1} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\bar{S}_{i1}}{\bar{\rho}\bar{u}_2 u_i + \bar{\omega}\delta_{i2} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\bar{S}_{i2}} \\ \frac{\bar{\rho}\bar{u}_3 u_i + \bar{\omega}\delta_{i3} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\bar{S}_{i3}}{\bar{\rho}\bar{u}_3 u_i + \bar{\omega}\delta_{i3} - 2(\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\bar{S}_{i3}} \end{pmatrix} \quad (20)$$

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

$$u_i \Rightarrow \bar{u}_i \quad \rho \Rightarrow \bar{\rho} \quad p \Rightarrow \bar{\omega} \quad (21)$$

$$\mu \Rightarrow \bar{\mu} + \bar{\rho}v_t \quad (22)$$

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

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

$$v_t(x, \Delta, t) = C_{ssf}\Delta\sqrt{\bar{\Lambda}(x, \Delta, t)} \quad (23)$$

donde  $C_{ssf}$  puede ser expresado como función de la constante de Kolmogorov (ecuación 21), por lo que  $C_{ssf} = 0.104$  cuando  $C_k = 1.4$ , así como  $\Delta$  se toma como

$(\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3)^{\frac{1}{3}}$  donde  $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3$  son los tamaños de malla locales en las tres direcciones espaciales.

$$C_{ssf} = f \left( C_k^{-\frac{3}{2}} \right) \quad (24)$$

De la ecuación (23) se tiene  $\bar{\Lambda}(x, \Delta, t)$ , que es la función de estructura de segundo orden de la velocidad, construida con el campo  $\bar{u}$ .  $\bar{\Lambda}(x, \Delta, t)$ , es calculado en el punto  $x$  con un promedio estadístico local de las diferencias de velocidad de los seis puntos más cercanos que rodean al punto  $x$  en la malla computacional. La interpolación se basó en la ley de Kolmogorov que se usa para la función estructura de la velocidad.

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

### 2.2.2 Resolución de las ecuaciones

El código numérico usa coordenadas generalizadas. La adaptación a estas coordenadas se realiza introduciendo una matriz Jacobiana que transforma una geometría curvilínea es un sistema cartesiano  $(x_1, x_2, x_3)$ , dentro de una geometría ortogonal simple con malla uniforme en el sistema de coordenadas generalizadas  $(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ . Cada término de la matriz Jacobiana inversa ( $J^{-1}$ ) se expresa como funciones analíticas de las medidas  $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$ . Las medidas son introducidas y calculadas por el esquema interno de primer orden, entonces la matriz ( $J$ ) es calculada directamente de ( $J^{-1}$ ).

De tal manera que la ecuación (1) se puede escribir como:

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial \xi_2} + \frac{\partial \hat{F}_3}{\partial \xi_3} = \hat{S}_o \quad (25)$$

Se tiene:

$$\hat{U} = \frac{1}{J} U \quad (26)$$

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

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

### 2.3 Esquema numérico

El sistema en coordenadas generalizadas se resuelve por medio de una extensión del complemento del esquema de McCormack, de segundo orden en el tiempo y cuarto orden en el espacio, desarrollado por (Gottlieb & Turkel, 1976). Debe observarse que cuando se usa  $\mathbf{U}$  tiende a ser reemplazada por  $\bar{\mathbf{U}}$ . El esquema numérico es un esquema corrector-predictor definido en una dimensión por:

Predictor:

$$U_j^1 = U_j^n + \frac{1}{6} \lambda (-f_{j+2}^n + 8f_{j+1}^n - 7f_j^n) + (\delta t) S_j^n \quad (27)$$

Corrector:

$$U_j^{n+1} = \frac{1}{2} (U_j^n + U_j^1) + \frac{1}{12} \lambda (7f_{j-2}^1 - 8f_{j-1}^1 - f_j^1) + \frac{1}{2} (\delta t) S_j^1 \quad (28)$$

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

La formulación generalizada en tres dimensiones se escribe como:

Predictor:

$$\begin{aligned}
U_{i,j,k}^{(1)} = U_{i,j,k}^{(n)} - J_{i,j,k}^P & \left[ \frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{1i+1,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{1i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{1i+2,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{1i+1,j,k}^{(n)}) \right] \right. \\
& + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{2i+1,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{2i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{2i+2,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{2i+1,j,k}^{(n)}) \right] \\
& \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{3i+1,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{3i,j,k}^{(n)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{3i+2,j,k}^{(n)} - \bar{F}_{3i+1,j,k}^{(n)}) \right] \right] \quad (29)
\end{aligned}$$

Corrector:

$$\begin{aligned}
U_{i,j,k}^{(n+1)} = \frac{1}{2} & (U_{i,j,k}^{(1)} + U_{i,j,k}^{(n)}) \\
- J_{i,j,k}^P & \left[ \frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{1i+1,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{1i,j,k}^{(1)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{1i+2,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{1i+1,j,k}^{(1)}) \right] \right. \\
& + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{2i+1,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{2i,j,k}^{(1)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{2i+2,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{2i+1,j,k}^{(1)}) \right] \\
& \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[ \frac{7}{6} (\bar{F}_{3i+1,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{3i,j,k}^{(1)}) - \frac{1}{6} (\bar{F}_{3i+2,j,k}^{(1)} - \bar{F}_{3i+1,j,k}^{(1)}) \right] \right] \quad (30)
\end{aligned}$$

## 3. Interfase

Dado que existen dos fases de diferente naturaleza, en este capítulo se presenta el método con el cual se describe, espacial y temporalmente, la evolución de la interfase, así como, las condiciones de frontera que tienen que ser colocadas en ésta. Adicionalmente, se presenta la forma de calcular la tensión interfacial que existe entre los líquidos inmiscibles y que es incluida en el modelo numérico. También, es introducido el método que permite la solución de ecuaciones diferenciales en configuraciones con geometrías complejas y/o en cuerpos en movimiento.

### 3.1 Método Level-Set

Un sistema de fluidos inmiscibles, es la existencia de líquidos separados en fases y con una superficie de contacto llamada interfase. Respecto a la descripción espacial-temporal de la interfase, se utilizó el método Level-Set. Con ayuda de este método se puede analizar la evolución de la interfase. Que se desarrolló originalmente por Osher (1988) y aplicado más tarde a la solución de problemas de flujo bifásico por Sussman et al. (1994) y Chang et al. (1996). En este último, la interfase  $\Gamma(t)$  es definida por el valor cero de la función  $\phi(x, t)$  y su signo representa cada una de los líquidos; lo cual se puede observar en la Figura 3. 1. Entonces:

$$\Gamma(t) = \{x \mid \phi(x, t) = 0\} \quad (31)$$

Para el presente trabajo, se tiene:

*Líquido 1 (Aceite) si  $\phi(x, t) < 0$*

*Líquido 2 (Agua) si  $\phi(x, t) > 0$*

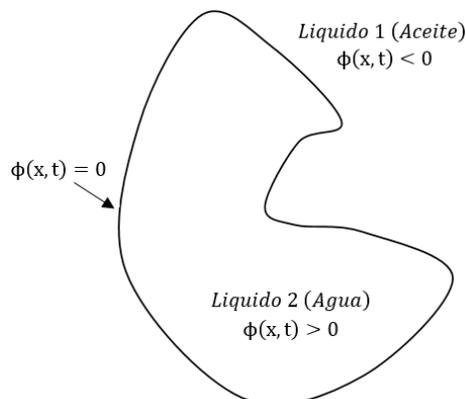


Figura 3. 1 La interfase está definida cuando el valor de la función Level-Set es igual a cero, el líquido 1 (Aceite) por el valor negativo y el líquido 2 (Agua) por el valor positivo.

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

$$\phi(x, t_0) = \pm d(x) \quad (32)$$

Con ayuda de la ecuación (32) se puede obtener algunas propiedades geométricas (por ejemplo la curvatura o normal). Una función distancia siempre satisface que  $|\nabla d| = 1$ . Lo anterior es una gran ventaja, ya que facilita los cálculos geométricos al momento de adaptar los líquidos inmiscibles.

Cuando se obtiene la forma de la interfase mediante la función Level-Set, su evolución es descrita por la ecuación (33):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (33)$$

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

La solución de dicha ecuación se realizó de forma explícita, mediante el método de Runge-Kutta-TVD de tercer orden, junto con un esquema espacial WENO (Osher, 2004) de quinto orden en la discretización espacial.

### 3.2 Reinicialización

Con el paso el tiempo y advecciones de  $\phi$ , ésta comienza a perder su propiedad como función distancia, por lo que es necesario reinicializarla, no solo para poder extrapolar algunas propiedades en las cercanías de la interfase, sino también para evitar un alto grado de difusividad numérica. Entonces  $\phi(x, t)$  es remplazada por  $d(x)$ , que tiene el mismo nivel cero, de igual manera satisface la propiedad  $|\nabla d(x)| = 1$ .

$$\frac{\partial d}{\partial \tau_p} + \mathbb{S}(\phi)(|\nabla d| - 1) = 0 \quad (34)$$

donde:

$$\mathbb{S}(\phi) = \frac{\phi}{\sqrt{\phi^2 + |\nabla \phi|^2 \Delta h^2}} \quad (35)$$

$\Delta h = \min(\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$ . La discretización de la ecuación (34) y (35) al igual de la ecuación (33), se realizó mediante el uso de esquemas WENO. La integración temporal fue resuelta mediante el método de Runge-Kutta TVD donde:

$$\Delta\tau_p = CFL \cdot \Delta h \quad (36)$$

donde  $\tau_p$  es un pseudo-paso de tiempo y CFL el número de Courant-Friedrich-Levy, con un valor de 0.5 para este trabajo. La reinicialización se llevó a cabo cada 10 pasos de tiempo, esto con el fin de ahorrar tiempo de cálculo.

### 3.3 Esquema ENO y WENO

WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) son esquemas de alto orden para ecuaciones de conservación de tipo hiperbólica; empleada en problemas que contienen discontinuidades y cuentan con una solución suave a trozos. Parten de los esquemas ENO desarrollados por Harten (1997), donde la idea es calcular los flujos utilizando interpolaciones polinomiales lo más suaves posibles, mediante un procedimiento no lineal adaptativo se selecciona la mejor plantilla, evitando así el cruce con discontinuidades.

Los esquemas WENO son centradas en lugares donde la solución es suave, sin embargo, actúan como esquemas ENO en regiones discontinuas. Para lograr lo anterior, los métodos WENO hacen uso de tres combinaciones convexas ENO de la siguiente manera:

$$\phi_x^1 = \frac{v_1}{3} - \frac{7v_2}{6} + \frac{11v_3}{6} \quad (37)$$

$$\phi_x^2 = -\frac{v_2}{6} + \frac{5v_3}{6} + \frac{v_4}{6} \quad (38)$$

$$\phi_x^3 = \frac{v_3}{3} + \frac{5v_4}{6} - \frac{v_5}{6} \quad (39)$$

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

Los flujos se dividen en su parte negativa ( $\phi_x^-$ ) y positiva ( $\phi_x^+$ ). Para calcular  $\phi_x^-$ , se utiliza el subconjunto de puntos nodales  $\{\phi_{i-3}, \phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi, \phi_{i+1}, \phi_{i+2}, \phi_{i+3}\}$ . Siendo  $v_1 = \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\Delta x}$ ,  $v_2 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$ ,  $v_3 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$ ,  $v_4 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$  y  $v_5 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$ . Entonces  $\phi_x^-$  estará dado por:

$$\phi_x^- = \omega_1 \phi_x^1 + \omega_2 \phi_x^2 + \omega_3 \phi_x^3 \quad (40)$$

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

$$\omega_1 = \frac{\alpha_1}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (41)$$

$$\omega_2 = \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (42)$$

$$\omega_3 = \frac{\alpha_3}{\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3} \quad (43)$$

Siendo  $\alpha_k$  definida como:

$$\alpha_1 = \frac{0.1}{(S_1 + \epsilon)^2} \quad (44)$$

$$\alpha_2 = \frac{0.6}{(S_2 + \epsilon)^2} \quad (45)$$

$$\alpha_3 = \frac{0.3}{(S_3 + \epsilon)^2} \quad (46)$$

donde:

$$S_1 = \frac{13}{12}(v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4}(v_1 - 4v_2 + 3v_3)^2 \quad (47)$$

$$S_2 = \frac{13}{12}(v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4}(v_2 - v_4)^2 \quad (48)$$

$$S_3 = \frac{13}{12}(v_3 - 2v_4 + v_5)^2 + \frac{1}{4}(3v_3 - 4v_4 + v_5)^2 \quad (49)$$

$$\epsilon = 10^{-6}\{v_1^2, v_2^2, v_3^2, v_4^2, v_5^2\} + 10^{-99} \quad (50)$$

En una región suave, los valores de las funciones de peso serán  $\omega_1 = 0.1$ ,  $\omega_2 = 0.6$  y  $\omega_3 = 0.3$ , lo que da como resultado un esquema de quinto orden.

El flujo  $\phi_x^+$  es calculado de la misma manera, sin embargo, utiliza un subconjunto de puntos nodales  $\{\phi_{i-3}, \phi_{i-2}, \phi_{i-1}, \phi, \phi_{i+1}, \phi_{i+2}, \phi_{i+3}\}$ . Siendo  $v_1 = \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\Delta x}$ ,  $v_2 = \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\Delta x}$ ,  $v_3 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x}$ ,  $v_4 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}$  y  $v_5 = \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\Delta x}$ .

En la advección de la función Level-Set, la elección del flujo (ya sea su parte positiva o su parte negativa) dependerá de su componente de velocidad (método de las características). Si  $u_i > 0$  significa que, la información se transporta desde la región

negativa hacia la positiva, por lo tanto,  $\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \phi_x^-$ . En el caso  $u_i < 0$  la información se desplaza de forma contraria, por lo que se utiliza  $\frac{\partial \phi}{\partial x} \approx \phi_x^+$ .

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

Cuando  $\phi \geq 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\max(\phi_x^-, 0)^2, \min(\phi_x^+, 0)^2) \quad (51)$$

Y, cuando  $\phi < 0$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \approx \max(\min(\phi_x^-, 0)^2, \max(\phi_x^+, 0)^2) \quad (52)$$

### 3.4 Integración temporal

En la parte temporal, como en la evolución de la función Level-Set como en la función de reinicialización se utilizaron esquemas Runge-Kutta TVD de tercer orden. Para ilustrarlo, si se escribe el término advectivo como  $-(u \cdot \nabla)\phi = L(\phi)$ , de tal forma que la ecuación (32) se puede reescribir como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = L(\phi) \quad (53)$$

Entonces, la integral de la ecuación (53), mediante el esquema Runge-Kutta TVD de tercer orden se define como:

$$\begin{aligned} \phi^* &= \phi^n + \Delta t L(\phi^n) \\ \phi^{**} &= \frac{3}{4}\phi^n + \frac{1}{4}\phi^* + \frac{1}{4}\Delta t(L(\phi^*)) \\ \phi^{n+1} &= \frac{1}{3}\phi^n + \frac{2}{3}\phi^{**} + \frac{2}{3}\Delta t(L(\phi^{**})) \end{aligned} \quad (54)$$

### 3.5 Condiciones de frontera en la interfase

La interfase no es capaz de almacenar cantidad de movimiento, así que las velocidades, densidades y viscosidades deben ser continuas. De tal manera que las condiciones de frontera, se definen de la siguiente manera:

$$\mathbf{u} = \begin{cases} \mathbf{u}_{L1} & \phi \leq 0 \\ \mathbf{u}_{L2} & \phi > 0 \end{cases} \quad (55)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el campo de velocidad del flujo. Además, los subíndices L1 y L2 son los valores del líquido 1 (Aceite) y líquido 2 (Agua), respectivamente. En virtud de las condiciones de frontera  $\mathbf{u}$  es continua a través de la interfase, recordando que la evolución de la interfase esta descrita por la ecuación (33).

Por otra parte, la densidad y la viscosidad son constantes en cada fluido, dichas propiedades toman valores diferentes dependiendo del signo de  $(\phi)$  (Herrman, 2013), por lo que:

$$\rho(\phi) = \rho_{L1} + (\rho_{L2} - \rho_{L1})H(\phi) \quad (56)$$

$$\mu(\phi) = \mu_{L1} + (\mu_{L2} - \mu_{L1})H(\phi) \quad (57)$$

donde  $H(\phi)$  es la función Heaviside.

Los cambios bruscos en la densidad y/o viscosidad, pueden ocasionar oscilaciones numéricas, para disminuir estos problemas; a la interfase se le fija un espesor ( $h$ ), el cual es proporcional al tamaño de la malla, lo que permite escribir la función Heaviside en función del espesor de la interfase (Sethian, 2003), como:

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \phi < -2h \\ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\phi}{2h} + \frac{1}{\pi} \sin \frac{\pi\phi}{2h} \right) & -2h \leq \phi \leq 2h \\ 1 & \phi > 2h \end{cases} \quad (58)$$

De esta manera la interfase tiene un espesor aproximado de  $2h/|\nabla\phi|$ .

### 3.6 Tensión interfacial

La tensión interfacial es un fenómeno de gran importancia cuando existen líquidos inmiscibles, por tal motivo, es indispensable realizar un buen análisis de dicha

propiedad, para el presente trabajo el cálculo de la tensión interfacial se realiza de la siguiente manera:

La interfase  $\Gamma(t)$  se encuentra definida por el valor cero de la función  $\phi(x, t)$  y su signo representa a cada uno de los líquidos, entonces la interfase está definida por:

$$\Gamma(t) = \{x \mid \phi(x, t) = 0\} \quad (59)$$

Cuando se obtiene la forma de la interfase mediante la función Level-Set, su evolución es descrita por la ecuación (60):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (60)$$

De la ecuación (60) se deduce (Herrman, 2013):

$$\delta(X - x) = \delta(\phi) |\nabla \phi| \quad (61)$$

donde  $\delta$  es la delta de Dirac. Además el vector normal de la interfase  $\mathbf{n}$  y la curvatura de la interfase  $\mathbf{k}$ , pueden expresarse en términos de la función Level-Set (Herrman, 2013), como:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \quad (62)$$

$$\mathbf{k} = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (63)$$

Una vez obtenido el vector normal y la curvatura de la interfase, así como, la posición de la interfase; la tensión interfacial  $\mathbf{T}_\sigma$  se puede expresar como:

$$\mathbf{T}_\sigma(x) = \sigma \mathbf{k} \delta_h(X - x) \mathbf{n} = \sigma \mathbf{k} \delta_h(\phi) |\nabla \phi| \mathbf{n} \quad (64)$$

donde  $\sigma$ , es el coeficiente de tensión interfacial. Además, la función  $\delta(\phi)$  nos proporciona la posición de la interfase.

La interfase se encuentra en constante movimiento y es preciso saber donde existe, con la finalidad de solo aplicar la tensión interfacial en la interfase. Con ayuda de una función delta de Dirac  $\delta_h(x)$ , se asegura la posición de la interfase (Gounley, 2015); de esta manea la función  $\delta_h(x)$  se define como:

$$\delta_h(x) = \delta_h(x_1) \delta_h(x_2) \dots \delta_h(x_d) \quad (65)$$

$$\delta_h(x) = \begin{cases} \frac{1}{4h} \left[ 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{2h}\right) \right] & |x| \leq 2h \\ 0 & |x| > 2h \end{cases} \quad (66)$$

donde  $h$ , es el espesor de la interfase; fuera de este intervalo la tensión interfacial es cero. Cabe mencionar que la diferencia de presión en la superficie libre es igual a la fuerza creada por la tensión interfacial, de igual manera las fuerzas creadas por la deformación de la interfase se distribuyen a los nodos del fluido cercano.

### 3.7 Criterio Q

El criterio  $Q$  está basado en el tensor gradiente de velocidad y define un vórtice como una región del fluido conectada con el segundo invariante del tensor gradiente de velocidad positivo, esto es  $Q > 0$ . Además, esta región debe cumplir con una presión menor a la presión ambiente. Desde la definición del segundo invariante podemos notar que  $Q$  representa un balance entre la tasa de deformación y la magnitud de la vorticidad, definiendo los vórtices donde la vorticidad es mayor que la tasa de deformación del fluido (Hunt et al, 1988).

El tensor gradiente de velocidad se define como  $D_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ . Este tensor es de segundo orden, y se puede descomponer en dos partes, una simétrica y una anti-simétrica:

$$D_{ij} = S_{ij} + \Omega_{ij} \quad (67)$$

donde  $S_{ij}$ , es el tensor tasa de deformación, el cual se define como:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (68)$$

Además,  $\Omega_{ij}$ , es el tensor de vorticidad, se define como:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (69)$$

La ecuación característica del tensor gradiente de velocidad es:

$$\lambda^3 + P\lambda^2 + Q\lambda + R = 0 \quad (70)$$

Donde  $P, Q$  y  $R$  son los tres invariantes del tensor gradiente de velocidad. Usando la definición del tensor gradiente de velocidad descompuesto, estas invariantes se pueden expresar:

$$P = -tr(D) = -S_{ij} \quad (71)$$

$$Q = \frac{1}{2}(P^2 - tr(D^2)) = \frac{1}{2}\|\Omega\|^2 - \|S\|^2 \quad (72)$$

$$R = -det(D) \quad (73)$$

### 3.8 Fronteras Inmersas

La técnica de fronteras inmersas permite la solución de ecuaciones diferenciales en configuraciones con geometrías complejas y/o en cuerpos en movimiento, mediante la incorporación de las condiciones de frontera en las ecuaciones de gobierno.

Para modelar los elementos que se encuentran dentro del dominio computacional (el tanque y el agitador), se utilizó la técnica de fronteras inmersas, el cual permite diferenciar entre las zonas donde se calculan las ecuaciones (fluido) y en donde no se realiza ningún tipo de cálculo (sólidos), lo cual se logra agregando un término fuente, el cual anula el movimiento natural del fluido en esta zona. La creación de estos elementos, se realizó mediante el bloqueo de celdas de la malla cartesiana y a éstos se les asignó características de velocidad, para el presente trabajo se impusieron velocidades nulas.

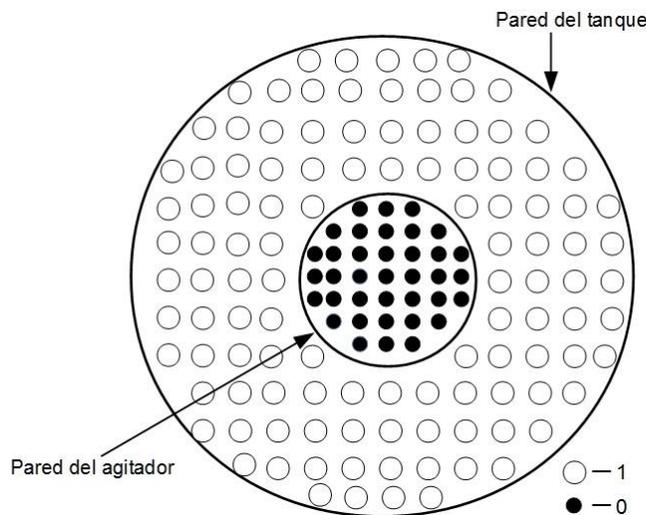


Figura 3. 2 Vista superior del tanque y agitador.

En la Figura 3. 2, se observan las zonas de fluido y de sólido, cuando el valor es igual a 1, existe fluido y ahí es donde se resuelven las ecuaciones, por otra parte, si el valor es igual a 0 ahí se encuentra el sólido, en este caso no se realizan ningún tipo de cálculo.

## 4. Configuración del sistema

En este capítulo se presenta la configuración del sistema a analizar, el cual consta de un tanque cilíndrico y un agitador circular con ángulo, así como, las propiedades de los fluidos de trabajo y demás condiciones de operación. También, se presentan los detalles numéricos que se utilizaron para simular el sistema.

### 4.1 Configuración a simular

El sistema está compuesto por un tanque cilíndrico y un agitador circular con ángulo. Este agitador tiene un ángulo de  $30^\circ$  con respecto a la horizontal, con un diámetro,  $d = 0.079$  [m], espesor,  $w = 0.001$  [m], y se encuentra a una altura,  $C = 0.073$  [m]. El tanque tiene un diámetro  $T = 0.20$  [m] y una altura  $H = 0.23$  [m]. La configuración esquemática del sistema se muestra en la Figura 4. 1.

El fondo del tanque es de forma cilíndrica, para evitar el estancamiento del fluido en del tanque. Aunque, la geometría del agitador no es comercial, esta geometría sencilla permite analizar el comportamiento de los fluidos antes del inicio del proceso de emulsificación. Este sistema se tiene físicamente en las instalaciones del Laboratorio de Ingeniería de Proceso del Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Nacional Autónoma de México.

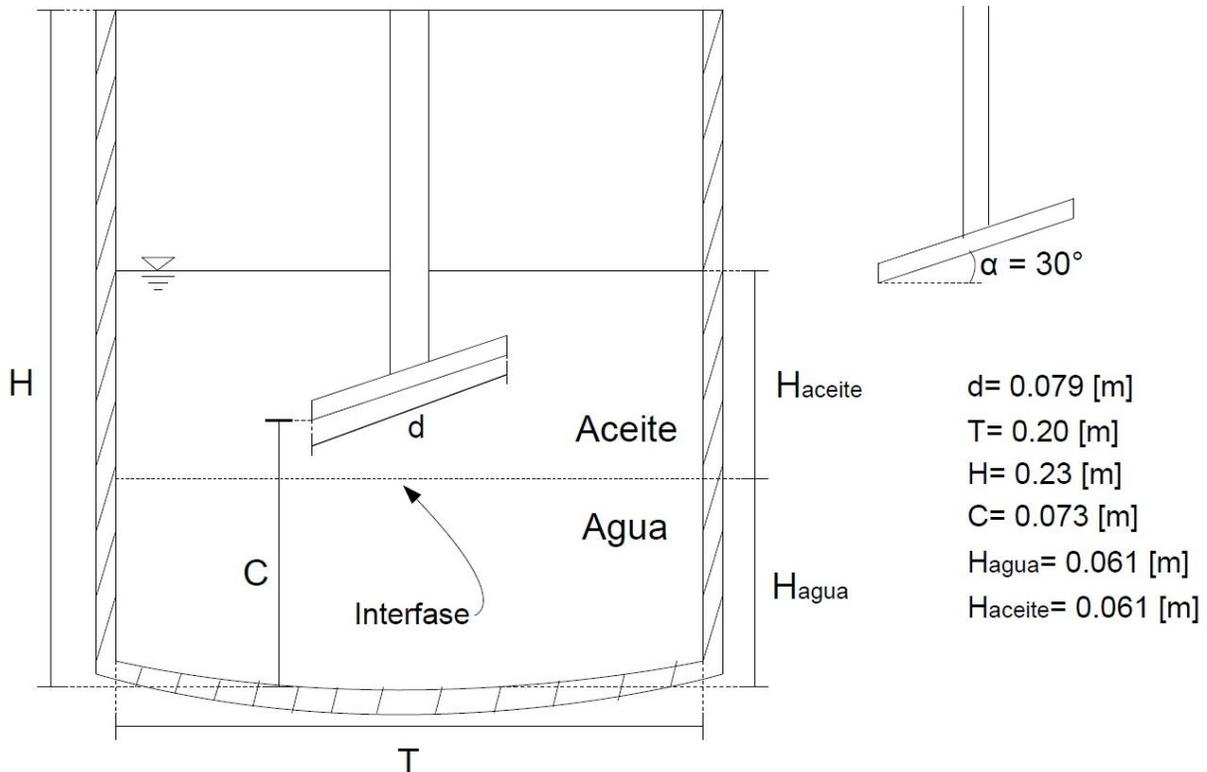


Figura 4. 1 Características del sistema de trabajo.

El tanque contiene a los fluidos de trabajo: agua y aceite; las propiedades de los fluidos se muestran en la Tabla 4. 1. El volumen ocupado por cada fluido fue de 1.9 litros, obteniendo una altura de columna por cada fluido de 0.061 [m]. Además, el agitador se encuentra sumergido en el aceite.

Fluido	Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]	Viscosidad [Pa·s]
Agua	998	1.002x10 <sup>-3</sup>
Aceite	908	62x10 <sup>-3</sup>

Tabla 4. 1 Propiedades de los fluidos.

El desarrollo experimental se llevó a cabo a bajas velocidades. Para el caso de estudio, se tienen números adimensionales que caracterizan el flujo, los cuales son: el número de Reynolds (*Re*), número de Weber (*We*) y número de Froude (*Fr*). Los cuales se definen para tanques agitados como:

$$Re = \frac{N\rho D^2}{\mu} \quad (74)$$

$$We = \frac{\rho N^2 D^3}{\sigma} \quad (75)$$

$$Fr = \frac{N^2 D}{g} \quad (76)$$

donde *N* es la velocidad del agitador (*rps*),  $\rho$  densidad del aceite ( $kg/m^3$ ), *D* diámetro proyectado del agitador (*m*),  $\mu$  es la viscosidad dinámica del aceite ( $Pa \cdot s$ ), *u* velocidad (*m/s*) y  $\sigma$  es el coeficiente de tensión interfacial (*N/m*). El valor del diámetro proyectado del agitador (*D*), se calcula como  $D = d \cos \alpha = (0.079) \cos 30$ . Además, el valor del coeficiente de la tensión interfacial entre el agua y aceite, se obtuvo de la literatura dicho valor se consideró de  $\sigma = 0.025 N/m$  (Gaonkar, 1989) Tabla 1. 1.

Las velocidades se variaron para observar las características dinámicas entre los fluidos. En la Tabla 4. 2, se muestran las velocidades de operación con las que se operó el sistema, así como, sus respectivos números adimensionales. Los números adimensionales se calcularon con las propiedades del aceite, ya que el agitador se encuentra sumergido en esta zona.

Evento	<i>N</i> (rpm)	<i>N</i> (rps)	<i>u</i> (m/s)	<i>Re</i>	<i>We</i>	<i>Fr</i>
1	72	1.2	0.082	82	16.74	0.010
2	86	1.43	0.098	100	23.86	0.014

Tabla 4. 2 Condiciones de operación.

## 4.2 Detalles numéricos

Para realizar las simulaciones, el sistema se adimensionalizó utilizando el diámetro proyectado del agitador ( $D$ ), obteniendo nuevas dimensiones para realizar las simulaciones numéricas: el diámetro del tanque es  $T/D = 2.9232$ , altura  $H/D = 3.3617$ , altura del agitador  $C/D = 1.067$  y con una altura de fluido  $H_{fluido}/D = 0.891$ . El sistema adimensionalizado se muestra en la Figura 4. 2.

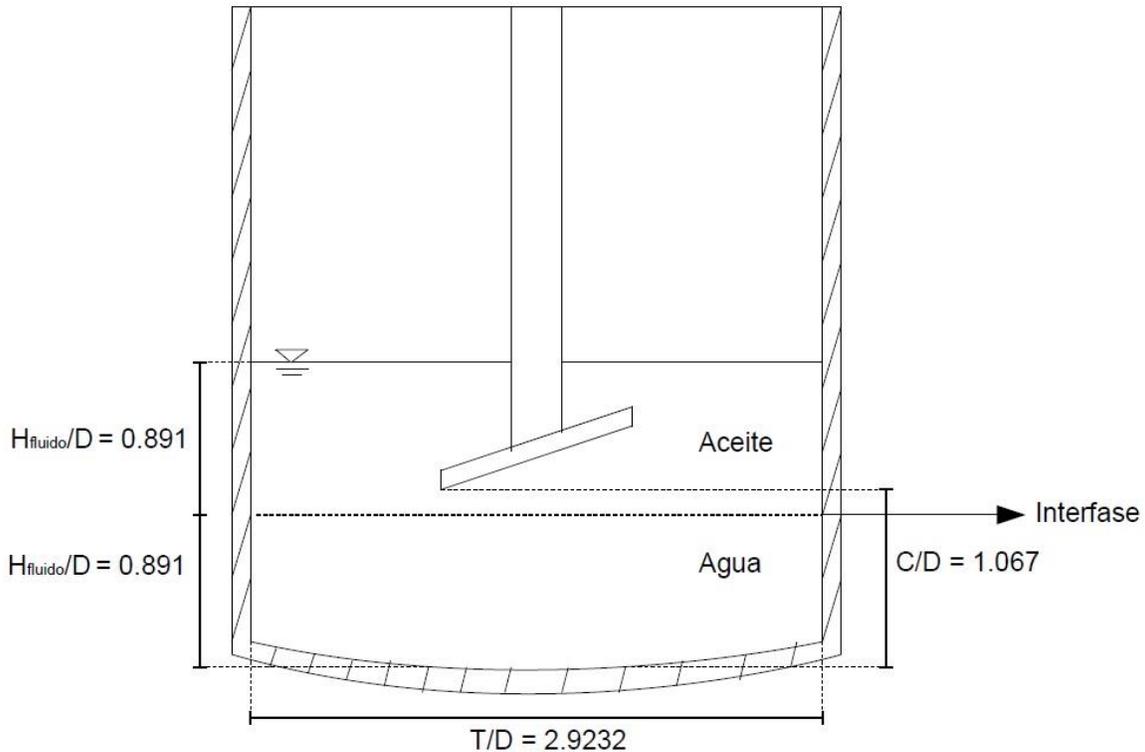


Figura 4. 2 Sistema a simular adimensionalizado.

Para este trabajo, se realizaron tres simulaciones numéricas, manteniendo la geometría de la Figura 4. 2, las dos primeras operan como se muestra en la Tabla 4. 2. Para la tercera simulación numérica se desprecia la tensión interfacial.

Para poder asegurar que los resultados no son dependientes de la malla, se realizó un estudio de independencia de malla, esto con la finalidad de conocer el mallado óptimo, donde se pueda describir de manera adecuada el fenómeno físico pero sin un alto costo computacional. La Figura 4. 3 muestra la variación de la velocidad radial para tres mallas, en una altura  $z/D = 0.50$ . La primer malla tiene una resolución de  $80 \times 80 \times 80$  (512 000 nodos), la resolución de la segunda es de  $100 \times 100 \times 100$  (1 000 000 nodos), y la última malla tiene una resolución de  $116 \times 116 \times 116$  (1 560 896 nodos). Con los resultados obtenidos se decidió trabajar con una malla de 1 560 896 nodos.

Las ecuaciones de gobierno se resolvieron en un marco cartesiano. El dominio computacional se definió como  $Lx_1/D = Lx_2/D = 2.9232$  y  $Lx_3/D = 1.7832$ . La malla computacional tiene una resolución de  $116 \times 116 \times 116$ , con un total de 1 560 896 nodos. Para la dirección  $x_1$  y  $x_2$  la malla es regular de valor  $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.027$  [mm], es decir, el espacio que existe entre nodos es constante. Para la dirección  $x_3$  la malla es irregular, se encuentra refinada en la zona central del tanque ( $\Delta x_{3min} = 0.0096$  [mm]), aumentando gradualmente hasta la parte superior ( $\Delta x_{3max} = 0.0291$  [mm]), porque es ahí donde se esperan los gradientes más importantes en el flujo.

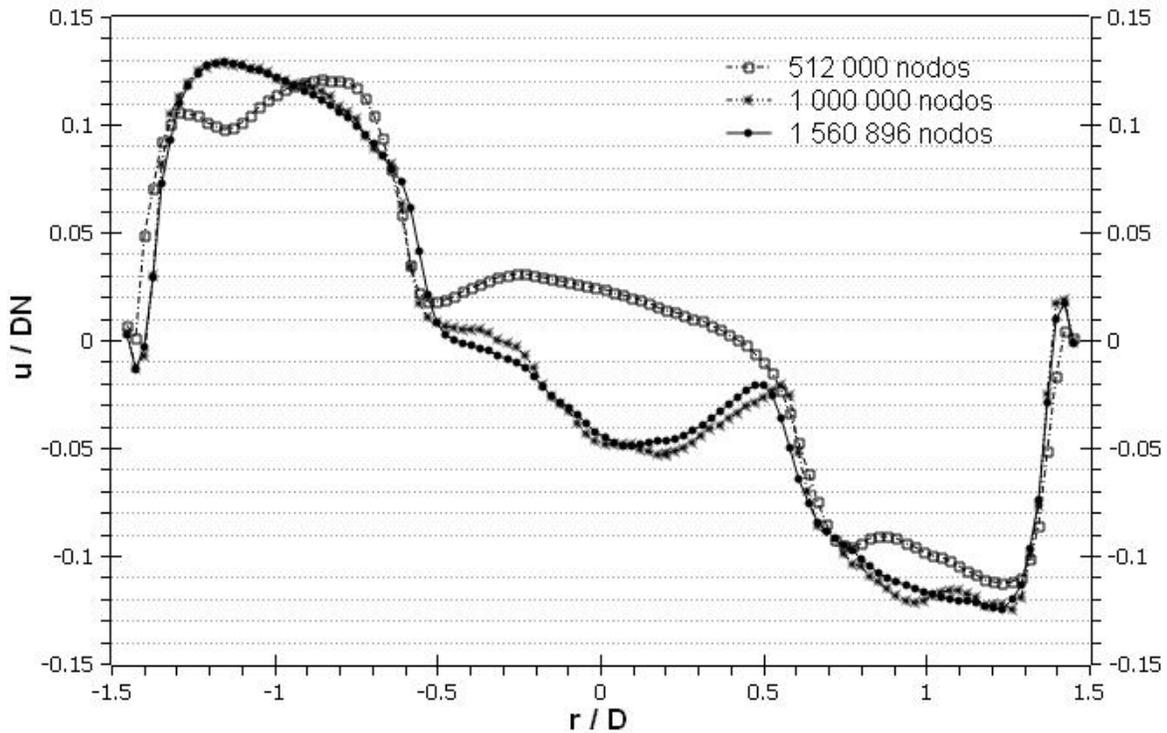


Figura 4. 3 Independencia de la malla.

Además, en las paredes del tanque se colocó una condición de no deslizamiento,  $u_{pared} = 0$ . Para el agitador se supuso una velocidad de cuerpo rígido:  $u_{agitador} = \omega r$  con giro en sentido horario; esta velocidad se puede descomponer como:

$$u_{agitador} = \begin{cases} u_x = \omega r \cos \alpha \\ u_y = \omega r \sin \alpha \\ u_z = 0 \end{cases}$$

donde  $r$  es el radio del agitador, y  $\alpha$  es el ángulo del agitador con respecto a la horizontal (ver Figura 4. 1).

Las paredes del tanque de sección transversal circular se generaron por medio de fronteras inmersas y se consideraron como paredes no deslizantes. Debido a que para estas condiciones, el cambio instantáneo de la superficie libre del aceite (interfase aceite-aire) es mínimo, en este trabajo no se caracterizó. Considerándose que la altura de la interfase no cambia, se mantuvo constante, la cual se modeló como una pared deslizante.

### 4.2.1 Condiciones iniciales

Cabe mencionar, que para analizar el sistema de una manera correcta, éste tiene que encontrarse en estado estacionario. Este estado se consigue cuando las variables promedio ya no varían en el tiempo y para este trabajo se determinó con el cálculo de la magnitud global de la vorticidad; dicho estado se alcanza cuando esta propiedad se mantenga en un cierto rango. Para el caso de estudio, el agitador tuvo que dar alrededor de 140 vueltas. El tiempo de cálculo, aproximadamente fue de 2.5 semanas; alrededor de 1000 h/máquina. Además, el código que resuelve las ecuaciones de gobierno, fue programado en Fortran90, utilizando 8 hilos de ejecución en un procesador AMD Opteron (TM) 6272.

Las condiciones iniciales aplicadas son:

- Proceso isotérmico,  $T = \text{cte.}$
- Velocidad del agitador es cero,  $u_{\text{agitador}} = 0$
- Perfil de presión hidrostático.  $P - P_r = \frac{\rho}{Fr} (z - z_r)$

donde  $P_r$  es una presión de referencia y  $Fr$  es el número de Froude.

- Altura de la interfase ( $\phi = 0$ ) en  $z/D = 0.8993$
- Velocidad del fluido nulo  $u = v = w = 0$

## 5. Resultados

En este capítulo se muestran los resultados de las simulaciones numéricas cuando dos líquidos inmiscibles se someten al proceso de agitación; se presenta la evolución de la interfase en el estado transitorio, así como, un promediado en fase para el estado estacionario. Para los dos estados se analiza la altura y forma de la interfase, también se presentan perfiles de velocidad y presión. Además, se realiza la validación numérica para dos condiciones de operación  $Re = 82$  y  $Re = 100$ . Finalmente, se presenta la forma de la interfase a dos diferentes valores del coeficiente de tensión interfacial, así como, cuando es omitida la tensión interfacial en el modelo numérico.

### 5.1 Evolución de la interfase

Uno de los objetivos del presente trabajo, es describir el comportamiento de la interfase, el cual se realiza desde el estado transitorio hasta llegar a un estado estacionario. El estado estacionario se encuentra cuando los valores promedio de las variables se estacionan alrededor de un valor. Para determinar que el sistema ha llegado al estado estacionario, para este trabajo se monitoreo la magnitud global de la vorticidad (bulk vorticity en inglés); la cual se calcula de la siguiente manera:

$$|\omega|_b = \frac{\iiint \omega_N dx dy dz}{\iiint dx dy dz} \quad (77)$$

Cuando el valor de la magnitud global de la vorticidad se mantiene en un rango del 2%, se asegura que el sistema se encuentra en estado es estacionario. Todos los análisis se llevaron a cabo, cuando el agitador se encuentra en una posición predeterminada; es decir, visualización en fase, con el objetivo de observar con mayor facilidad el comportamiento de la interfase y poder hacer un análisis estadístico en fase. La Figura 5. 1 muestra el tanque y la posición del agitador (visualización en fase), en la cual se realizaron los análisis. Es indispensable recordar que existen dos fluidos de trabajo, fluido inferior (agua) y fluido superior (aceite). Esto se menciona en la descripción del sistema (Capítulo 4.2).

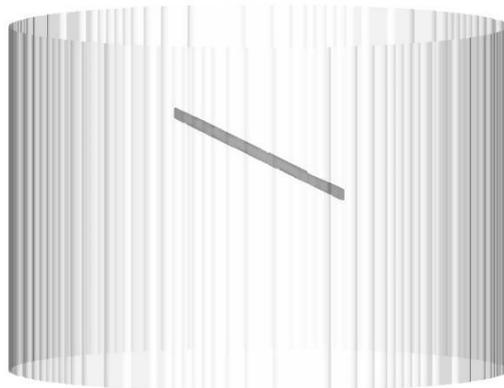


Figura 5. 1 Visualización en fase para el análisis.

En la Figura 5. 2 se aprecia la evolución de la magnitud global de la vorticidad, hasta llegar a un estado estacionario. Los tres primeros tiempos (A), (B) y (C), corresponden a un estado transitorio, por último, el tiempo (D) pertenece al estado estacionario. El estado estacionario se alcanza en un tiempo adimensional aproximado a 28; la magnitud global de la vorticidad se mantiene en un rango del 1.45%, con lo que se afirma que el sistema se encuentran en estado estacionario.

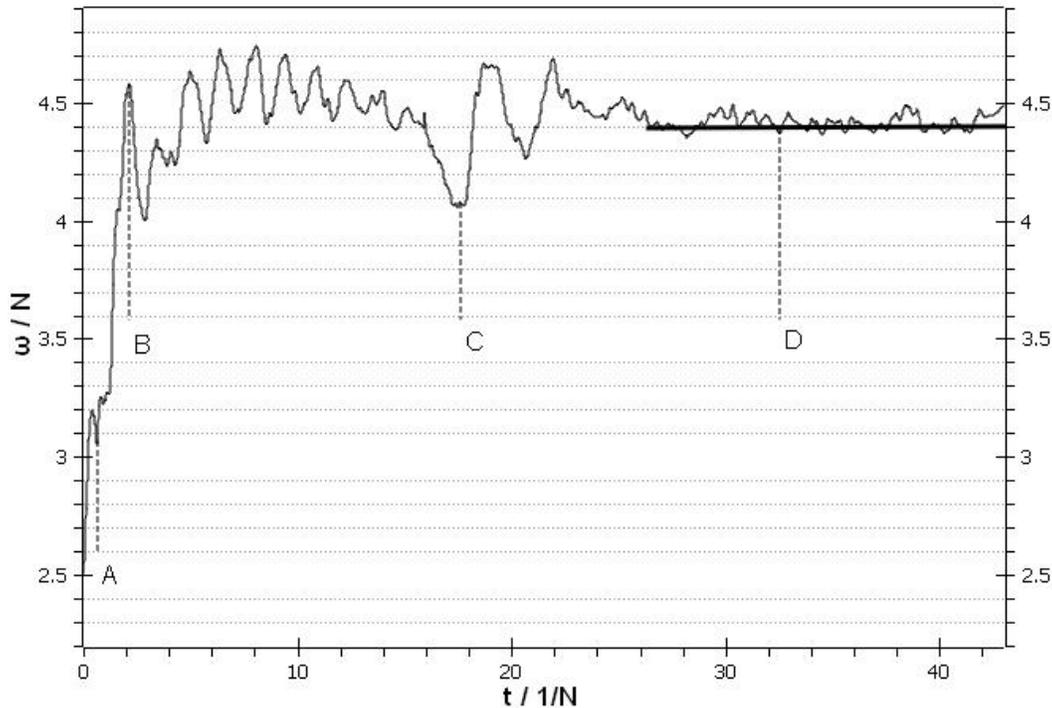


Figura 5. 2 Evolución del sistema para un  $Re=100$ .

A continuación, se presenta la evolución de la interfase en el estado transitorio tiempos (A), (B) y (C) para un  $Re = 100$ . Resultados similares se obtienen para los dos casos estudiados  $Re = 82$  y  $Re = 100$ , pero solamente se presenta el caso de  $Re = 100$ . La Figura 5. 3 muestra la altura y forma de la interfase para los tres tiempos de análisis. Conforme el agitador comienza a moverse, éste transmite su cantidad de movimiento al aceite ocasionando un desplazamiento del mismo, así como en el fluido inferior (agua); movimientos que causan la deformación de la interfase. La cantidad de movimiento se va transfiriendo de un fluido a otro, principalmente, por esfuerzos cortantes, los cuales arrastran fluido en la parte inferior del agitador, causando el levantamiento de la interfase. De igual manera, se aprecia que la altura de la interfase es, aproximadamente, la misma para los tres tiempos. Este proceso es casi instantáneo; sin embargo, transcurre un cierto tiempo en el que la cantidad de movimiento se transmite al resto de los fluidos y de ahí el comportamiento que se muestra en la Figura 5. 2. También, en la Figura 5.3 se observa que el nivel de la interfase disminuye en algunas zonas, ya que el fluido que es arrastrado debajo del agitador, por conservación de masa, viene de estas zonas con menor nivel.

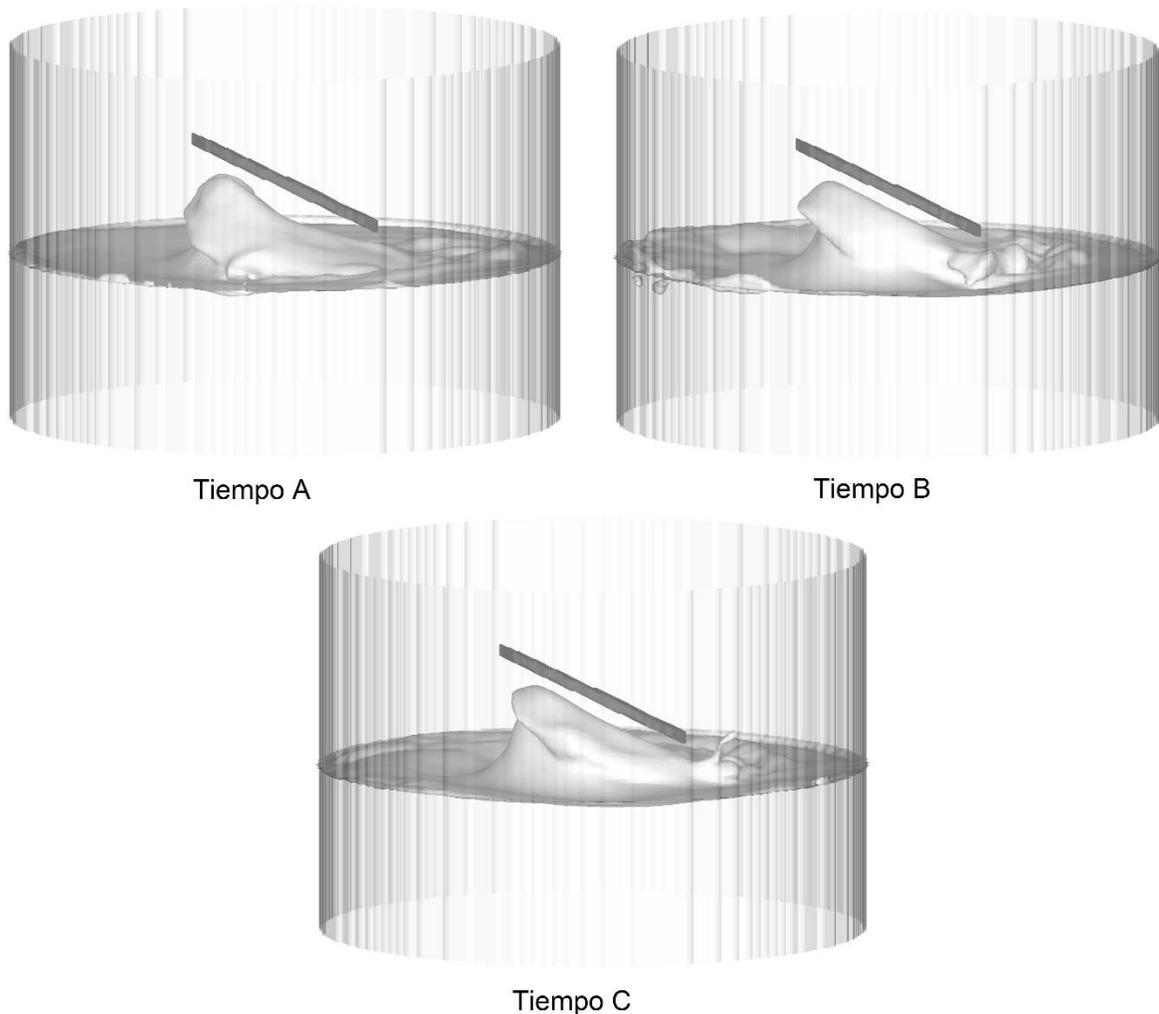


Figura 5. 3 Evolución de la interfase en los tres tiempos del estado transitorio. Tiempos A, B y C.  $Re=100$ .

Conforme se va moviendo el agitador se produce una espiral en el flujo del centro del tanque, el cual tiene origen en la parte superior del agitador y se transmite al fluido de abajo, vía esfuerzos cortantes. La formación de la espiral se aprecia en la Figura 5. 4, en la que adicionalmente se presenta isosuperficies de criterio Q que indican la rotación del fluido y los mayores cambios se presentan en la parte inferior del tanque.

En la Figura 5. 5 se muestran las líneas de trayectoria para los tres tiempos del estado transitorio ((A), (B) y (C)). El agitador desarrolla dos tipos de flujo axial y radial, desplazando a los fluidos radialmente y arrastrando al agua hacia él. Los vórtices que se aprecian en la Figura 5. 5 son producto de la interacción de estos flujos con la pared del tanque. De igual manera, se aprecia que los vórtices se encuentran, aproximadamente, en la misma posición, y con tamaño diferente. También, se observa, que en la parte del agua, parte inferior del tanque, el movimiento es mayormente perturbado, ya que la viscosidad de ésta es 62 veces menor; es decir, un mismo esfuerzo aplicado a dos fluidos con diferente viscosidad

produce una velocidad de deformación mayor en el fluido que tiene menos viscosidad. De acuerdo con lo anterior, el desplazamiento que se tiene en el aceite y por tanto, el agua, producen el levantamiento y la deformación de la interfase.

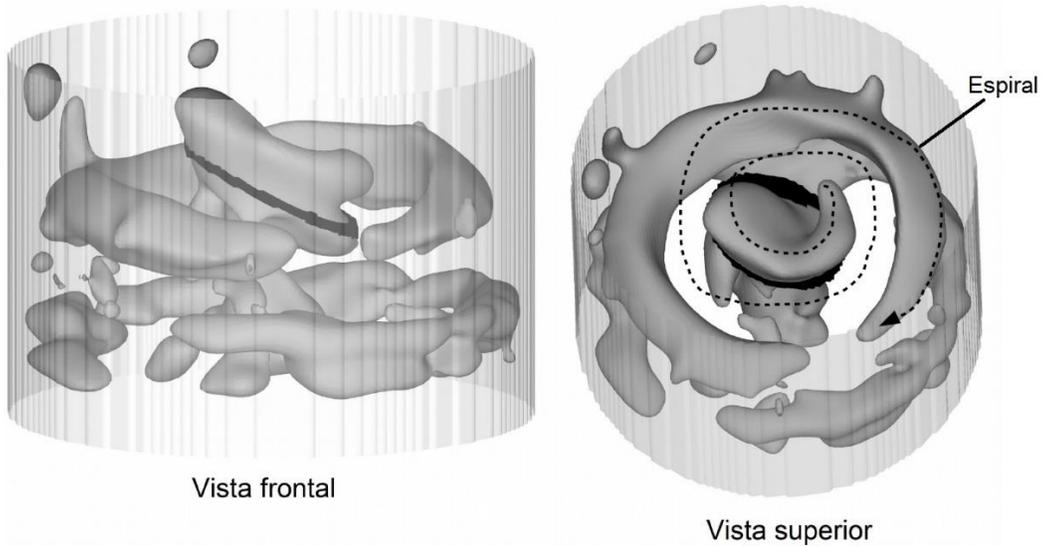


Figura 5. 4 Isosuperficies de criterio Q. Tiempo B.  $Re=100$ .

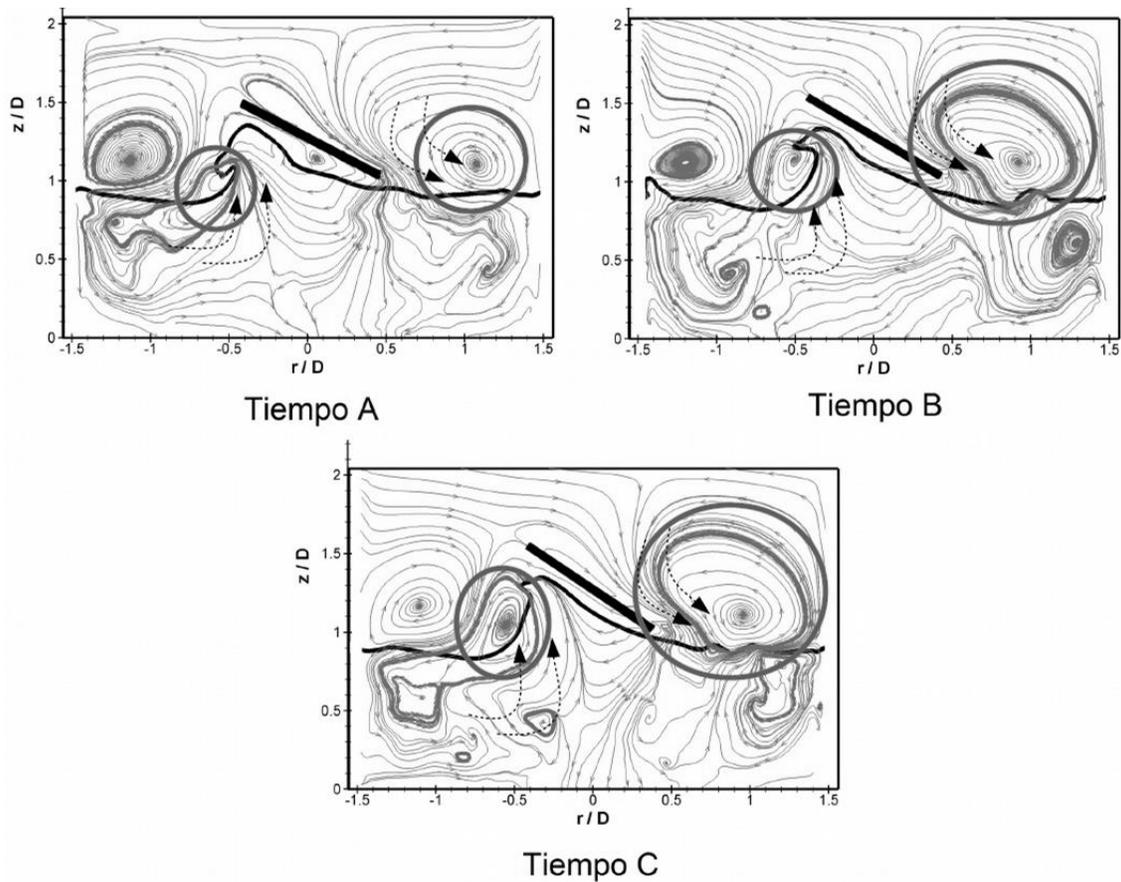


Figura 5. 5 Líneas de trayectoria en el estado transitorio. Tiempos A, B y C.  $Re=100$ .

Los perfiles de presión para el estado transitorio, tiempos (A), (B) y (C) se muestran en la Figura 5. 6. En los tres tiempos la altura de la interfase es prácticamente idéntica. De esta figura, también, se puede apreciar que los cambios significativos se encuentran en la zona central del tanque, que es debido al movimiento del fluido, como consecuencia del movimiento del agitador y a la presión hidrostática. Debido a esto último, tanto en la parte superior como inferior del tanque, la presión tiene un comportamiento casi constante. Por otro lado, la presión disminuye en las zonas donde la interfase sube de nivel, como producto del arrastre inducido por el agitador (la interfase se desplaza hacia el agitador), y aumenta, donde el fluido baja de nivel debido al empuje que ejerce el fluido superior en la interfase (desplaza la interfase hacia la parte inferior del tanque); es decir, cuando el valor de la presión es negativo se origina el levantamiento de la interfase. La zona por debajo del agitador se caracteriza por ser de baja presión.

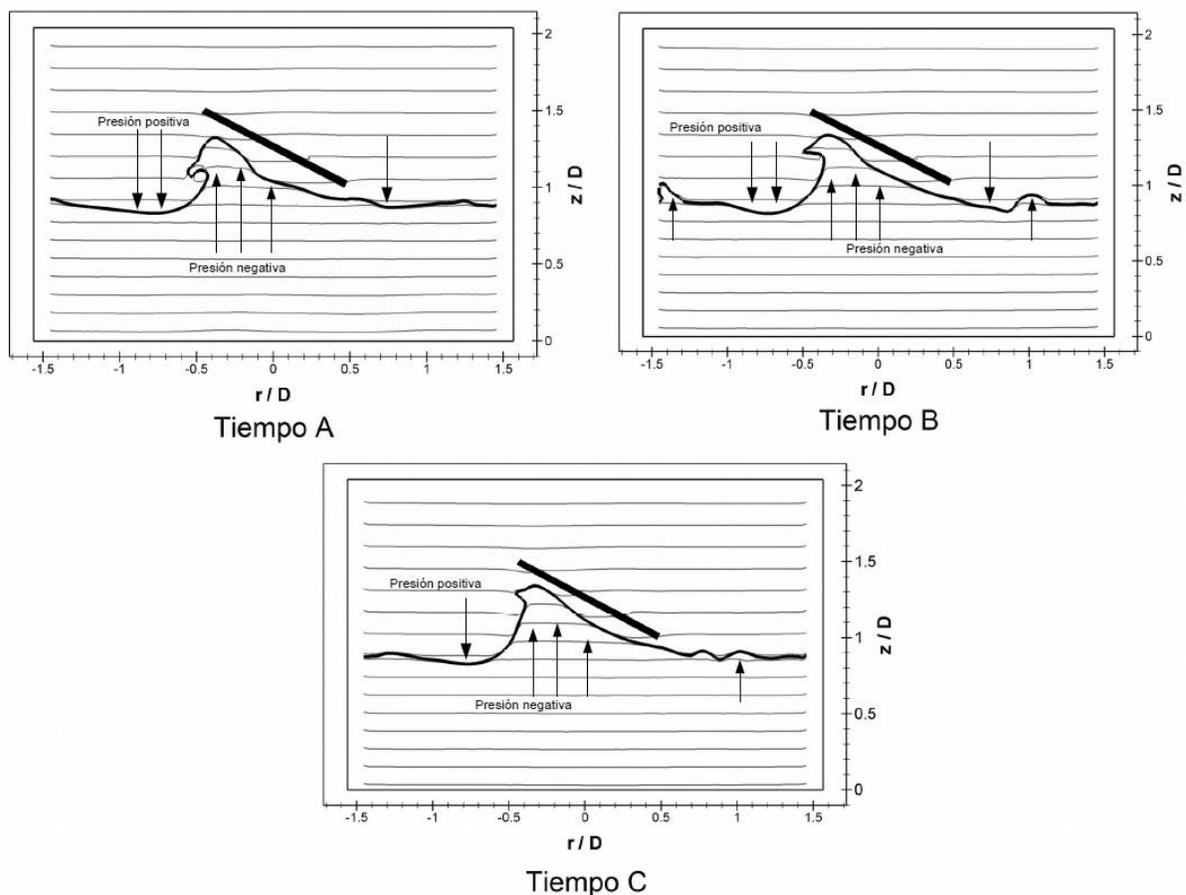


Figura 5. 6 Perfil de presión en el estado transitorio.  $Re=100$ .

En la Figura 5. 7 se muestra la velocidad de deformación en la dirección radial ( $dv/dr$ , donde  $v$  es la velocidad tangencial y  $r$  es el radio). De esta figura, se puede apreciar que la velocidad de deformación es mayor en los extremos del agitador, ya que, por un lado, es ahí donde éste tiene las máximas velocidades y por lo tanto, se produce un mayor desplazamiento de fluido, y por el otro, es ahí donde el flujo desplazado

interactúa con las paredes del tanque. Adicionalmente, es también en esta zona, donde el flujo superior arrastra y empuja al fluido inferior, teniendo como resultado, tales interacciones, un levantamiento de la interfase. El signo de la velocidad de deformación, indica que el fluido se está moviendo hacia arriba o hacia abajo del tanque. La dirección de los fluidos, que se indican de manera representativa en la Figura 5. 7, se deben al sentido con el que gira el agitador (sentido horario). La línea de trayectoria en la parte superior del agitador indica como después de dejar el agitador, el flujo empuja al agua (fluido inferior) hacia abajo. Finalmente, debido a lo expuesto anteriormente, la velocidad de deformación es mayor en el agua que en el aceite.

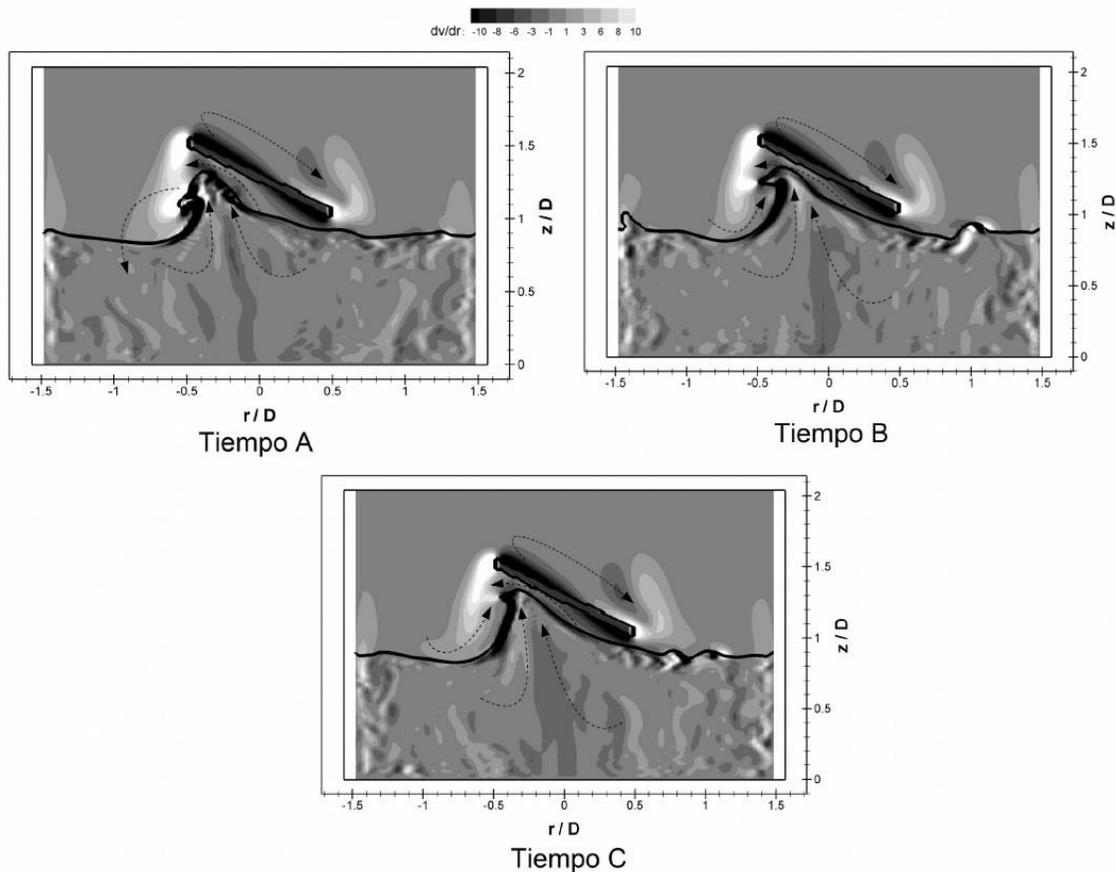


Figura 5. 7 Gradiente de velocidad en el estado transitorio.  $Re=100$

## 5.2 Validación de las simulaciones numéricas

Para validar las simulaciones numéricas se utilizaron visualizaciones experimentales realizadas con una cámara Phantom SpeedSense; se obtuvieron imágenes de la evolución de la interfase (altura y forma), para las condiciones de operación  $Re = 82$  y  $Re = 100$ . La Tabla 5. 1 muestra las características de la

cámara. Además, en la Figura 5. 8 se muestra la zona de medición, donde se obtuvieron la forma y altura de la interfase.

Resolución (fps)	140
Resolución del sensor	2560px x 1600px
Tiempo Interframe	2.5 $\mu$ s
Tamaño del sensor	16.6mm x 14mm
Digitalización	8,12 bits

Tabla 5. 1 Características de la cámara Phantom

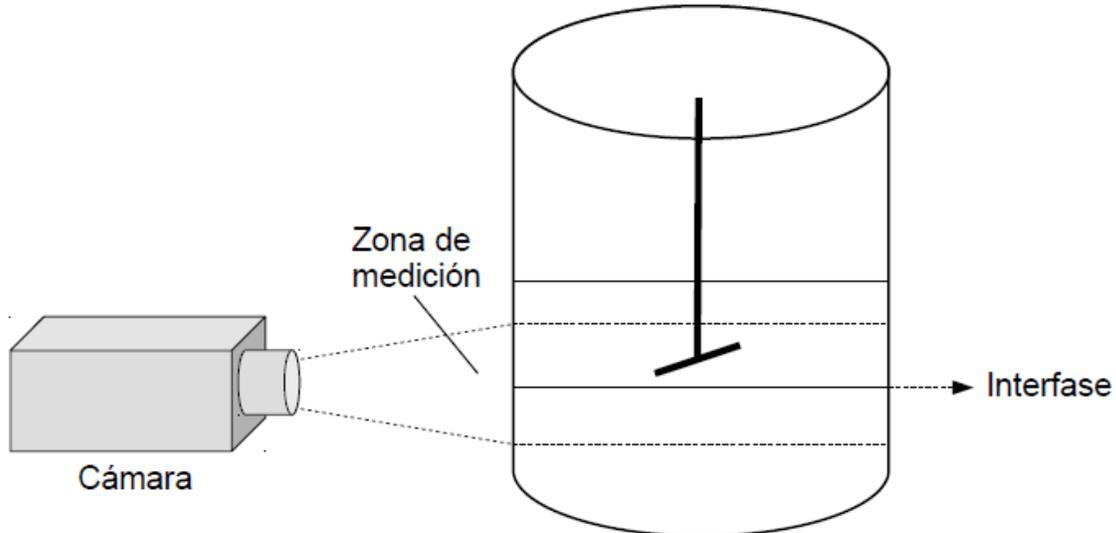


Figura 5. 8 Zona de medición.

La parte experimental se realizó en las instalaciones del Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México; con ayuda del equipo de trabajo del Dr. Gabriel Ascanio Gasca. Cuando la interfase y el campo de flujo se encontraban en estado estacionario (tiempo ( $D$ ), Figura 5. 2), los resultados numéricos se promediaron durante un tiempo equivalente a 18 vueltas del agitador; el promediado en fase se realizó de la siguiente forma:

$$\langle \Phi(x) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Phi(x, t) \quad (78)$$

donde  $n$  son las veces que pasa el agitador por la posición predeterminada de análisis (Figura 5. 1). A continuación se presenta la comparación de la simulación numérica (datos promediados) con los datos experimentales, de la altura y forma de la interfase para un  $Re = 82$  y  $Re = 100$ . En la Figura 5. 9, se muestran las comparaciones.

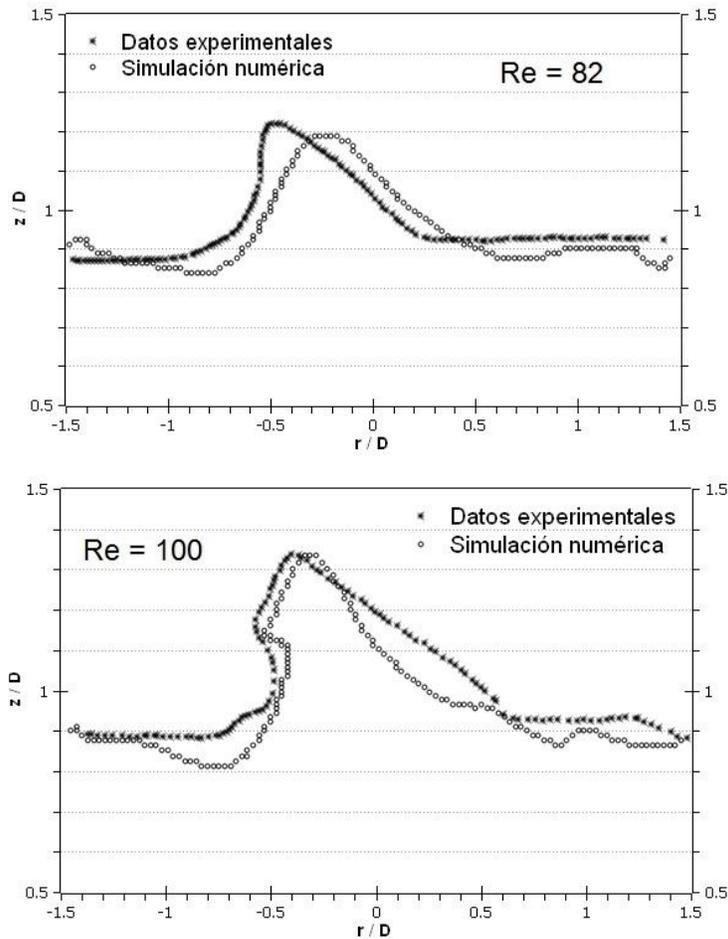


Figura 5. 9 Validación del código numérico. Para  $Re=82$  y  $Re=100$ .

El comportamiento de la interfase es similar entre la simulación numérica y los datos experimentales; para el caso de un  $Re = 82$ , el porcentaje de error es del 7% y para el caso de un  $Re = 100$ , el porcentaje de error es del 12%. Esta diferencia radica, por que al momento de tomar la evolución de la interfase, la cámara no se encontraba en, aproximadamente,  $90^\circ$ , y al obtener la evolución de la interfase no se tenía un punto de referencia preciso. Por otra parte, no se cuenta con el valor exacto de la tensión interfacial; se tomó un valor de la literatura (Gaonkar, 1989), aproximado a las propiedades de los fluidos de trabajo. Además; se ha visto que este flujo es muy sensible a la tensión interfacial.

### 5.3 Análisis en el estado estacionario

Los análisis que se presentan a continuación, son para las dos condiciones de operación  $Re = 82$  y  $Re = 100$  en el estado estacionario (Figura 5. 2) y tomando en cuenta la ecuación (71). En la Figura 5. 10, se observa la forma y altura de la interfase para los dos diferentes números de Reynolds. La altura y el área de la interfase aumenta cuando la velocidad de agitación se incrementa, que se debe a

que el agitador contiene mayor cantidad de movimiento, lo que propicia un aumento en los esfuerzos cortantes, pudiéndose arrastrar una mayor cantidad de fluido. Las recirculaciones mostradas anteriormente, se incrementan en tamaño cuando se eleva el número de  $Re$ .

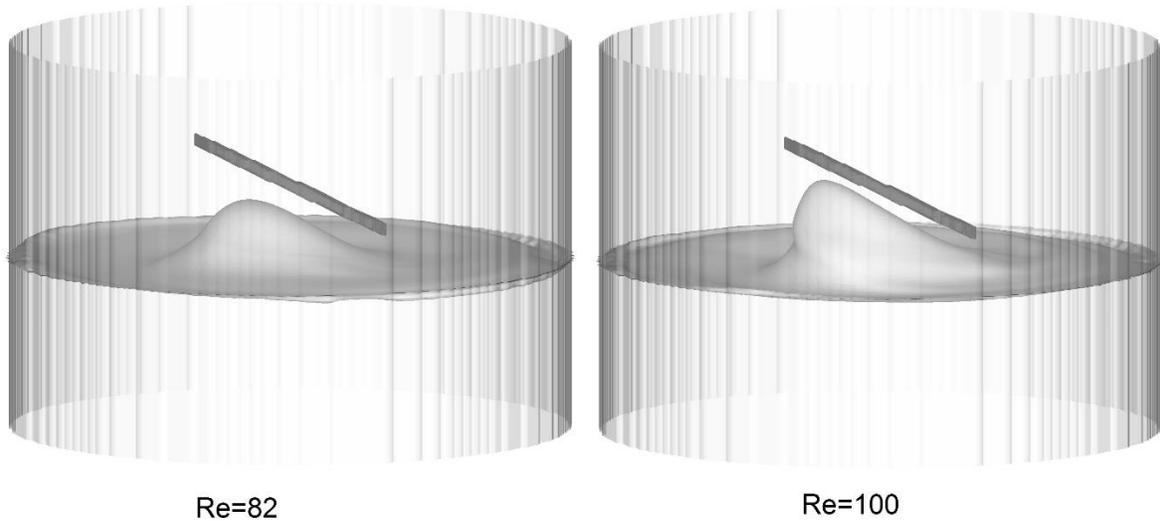


Figura 5. 10 Interfase promediada para las dos condiciones de operación.  $Re=82$  y  $Re=100$ .

La Figura 5. 11 muestra las alturas donde se van a presentar las predicciones de los perfiles promediados de velocidad radial y axial, y de presión. Estas alturas van desde  $z/D = 0.89$  hasta  $z/D = 1.38$ . Además para facilitar la lectura de las velocidades, éstas se recorrieron de la siguiente manera  $u = u + 0.4$  ( $z/D = 0.89$ ),  $u = u + 0.8$  ( $z/D = 1.03$ ), ... ,  $u = u + 1.6$  ( $z/D = 1.38$ ), por lo que existe una diferencia de velocidades entre líneas que corresponde a 0.4. Asimismo, para adimensionalizar la velocidad se utilizó una velocidad de referencia ( $u_{ref} = N * D$ ).

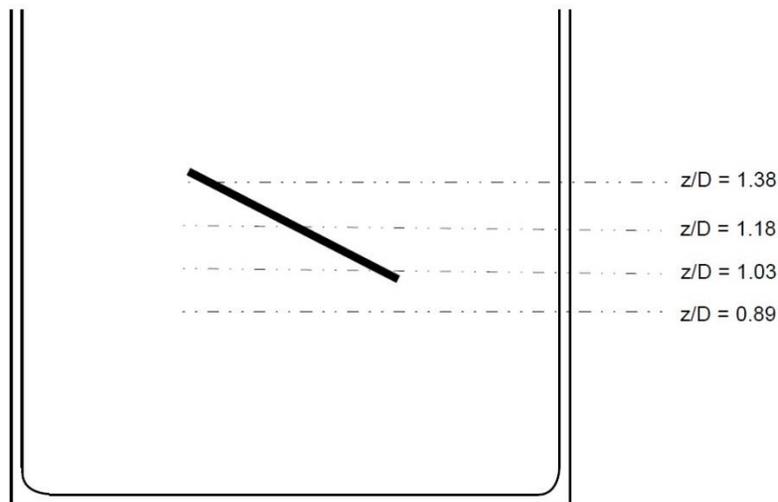


Figura 5. 11 Zona de medición.

La variación de la velocidad radial y axial promediada se muestra en la Figura 5. 12 y Figura 5. 13, respectivamente, para las dos condiciones de operación,  $Re = 82$  y  $Re = 100$ . Los perfiles tienen un comportamiento similar, pero existen algunas diferencias las cuales se originan por el aumento de velocidad en el agitador. Las diferencias se encuentran en la zona central del tanque; debido a que es ahí donde se localiza el agitador, es decir, la zona se tiene la mayor cantidad de movimiento, y por tanto, un mayor arrastre de fluido inferior (agua).

En los perfiles de velocidad (Figura 5. 12 y Figura 5. 13) se puede observar cambios de signo, que indican la presencia de recirculaciones, las cuales favorecen que el fluido sea arrastrado hacia el agitador. La línea de referencia de la Figura 5. 12 y Figura 5. 13, permite establecer el valor de la velocidad; por debajo de esta línea el valor de la velocidad es negativo, y por la parte superior de la misma el valor es positivo. Para un  $Re = 100$ , se presentan mayores cambios en la velocidades propiciando un aumento en las recirculaciones. Para una altura de  $z/D = 1.38$ , las velocidades son prácticamente idénticas entre ellas, ya que el efecto del agitador al parecer es despreciable; en esta zona, el agitador solamente desplaza al fluido radialmente.

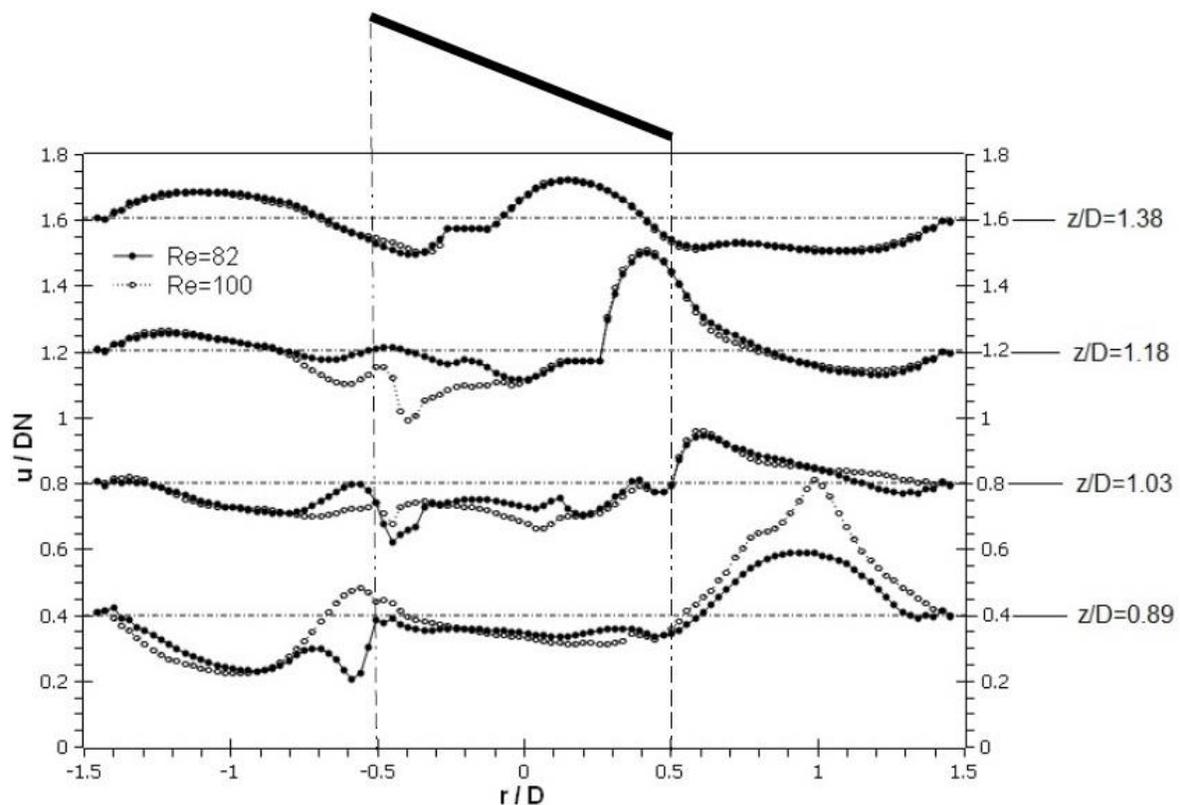


Figura 5. 12 Perfil de velocidad radial.

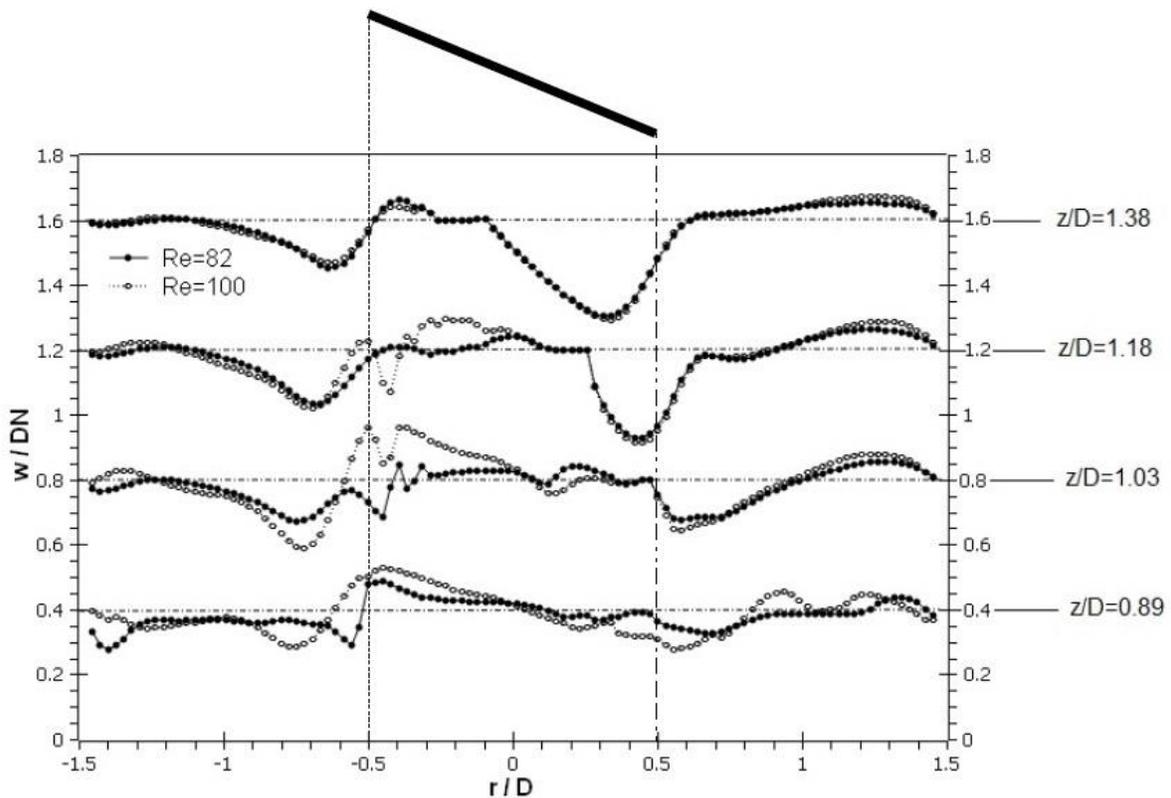


Figura 5. 13 Perfil de velocidad axial.

Los perfiles de presión a diferentes alturas de análisis se muestran en la Figura 5. 14, para las dos condiciones de operación de  $Re = 82$  y de  $Re = 100$ . Para este caso se presenta los cambios debido al movimiento del flujo, es decir presión dinámica. Es en la altura  $z/D = 0.89$ , donde los cambios son mayores, ya que es en esta zona donde se deforma mayoritariamente la interfase, debido a que se desplaza mayor cantidad de masa. En los extremos del agitador, por debajo del mismo, los valores de esta presión son los máximos negativos debido a que el agua, en estas zonas, empujan el aceite hacia abajo con las máximas velocidades. En el centro del agitador, los valores de presión tienden a cero, porque el fluido sube como producto de la inducción del agitador, y es una velocidad, menor, porque se tiene un área mayor para el flujo que está subiendo; todos estos cambios se originan por las recirculaciones. Para una altura  $z/D = 1.38$ , el cambio en la presión es pequeño con respecto a las demás alturas, dado que el efecto del agitador en el fluido va disminuyendo.

Entre mayor sea la altura de la interfase, el cambio en la presión es mayor, lo cual concuerda con lo que se muestra en la Figura 5.13 para cuando se cambia de un  $Re = 82$  a un  $Re = 100$ .

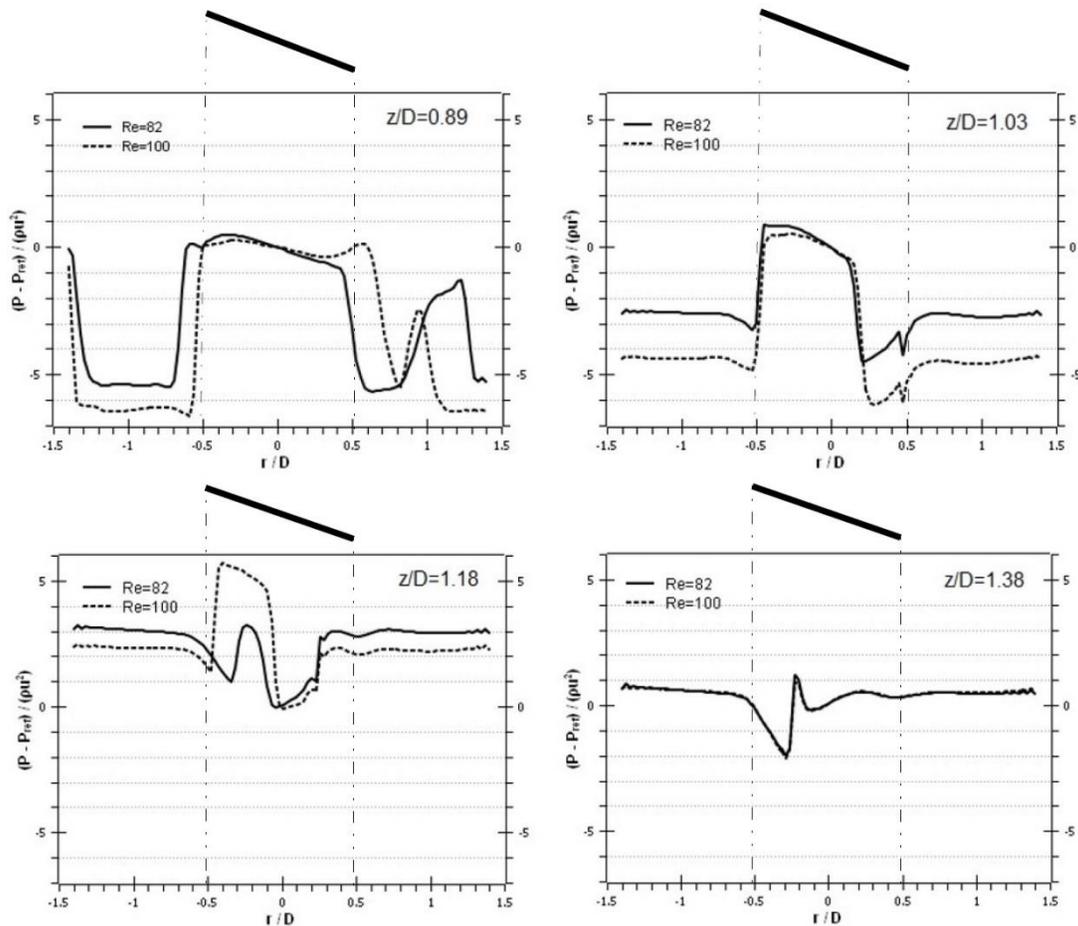


Figura 5. 14 Perfiles de presión.

## 5.4 Interfase despreciando la tensión interfacial

En esta parte del trabajo, se modificó el valor del coeficiente de tensión interfacial de  $\sigma = 0.025 \text{ N/m}$  (valor base) a  $\sigma = 0.050 \text{ N/m}$ , así como el caso en el cual no se considera el efecto de este fenómeno interfacial, es decir, un valor de  $\sigma = 0 \text{ N/m}$ ; con el objetivo de analizar el efecto de éste en el comportamiento de la interfase. El análisis que se presenta a continuación corresponde a un estado estacionario (tiempo  $(D)$ ). La Figura 5. 15 muestra la forma de la interfase para los dos valores presentados anteriormente del coeficiente de tensión interfacial y cuando se omite la tensión interfacial, para un  $Re = 100$ .

Como se observa en la Figura 5. 15, al modificar el valor de la tensión interfacial, éste influye en el área interfacial. Cuando el valor es  $0.025 \text{ N/m}$ , la interfase sufre ligeramente una mayor deformación, así como una mayor alteración en la misma, que para el caso de  $0.050 \text{ N/m}$ ; es decir, cuando el coeficiente de tensión interfacial aumenta, el área interfacial disminuye. Pese a que, la cantidad de movimiento es la misma para todos los casos, existe un cambio en la forma de la interfase, debido a que se van reduciendo las fuerzas en la misma, que se oponen al arrastre de los

fluidos, ocasionado por los esfuerzos cortantes que se transmiten del agitador al fluido. Debido a lo anterior, las recirculaciones que se obtienen en los fluidos se ven modificados, ya que se está desplazando menos cantidad de fluido, cuando el valor del coeficiente de tensión interfacial es más grande. Además, en el caso extremo, cuando se desprecia la tensión interfacial el desplazamiento de los fluidos es más desordenado, el nivel y forma de la interfase sufre de una mayor deformación, e incluso se puede observar que existe desprendimiento de la misma; todo ésto debido a la total eliminación de las fuerzas que existen en ésta.

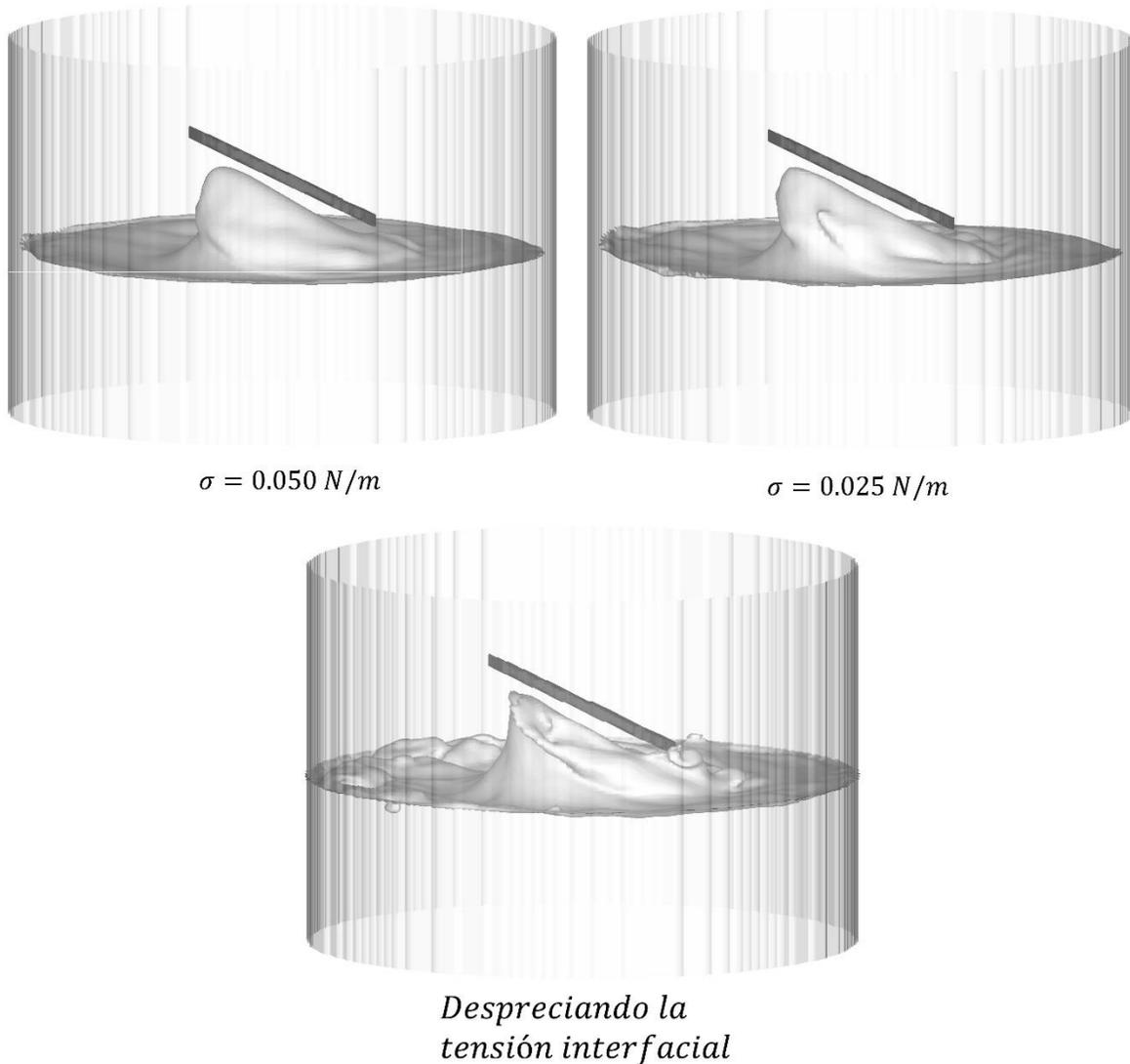


Figura 5. 15 Forma de la interfase con diferentes coeficientes de tensión superficial.  $Re=100$

En la Figura 5. 16 se muestra la relación entre el área interfacial y el número de Weber, como se puede observar cuando el número de Weber disminuye el área interfacial también disminuye, es decir, existe un incremento en el coeficiente de

tensión interfacial, ésto se puede observar en Tabla 5. 2, al aumentar dicho coeficiente, el área interfacial disminuirá. El valor del coeficiente que tiene mayor área superficial, es la que no tiene el efecto de la tensión superficial, y la de menor valor en el área es la que posee el valor del coeficiente de tensión superficial igual a  $0.050 \text{ N/m}$ . Para un valor de  $\sigma = 0.050 \text{ N/m}$ , la disminución del valor del área superficial es del 2% con respecto al área del caso base (caso con  $\sigma = 0.025 \text{ N/m}$ ) y para  $\sigma = 0 \text{ N/m}$  el aumento en el área superficial es del 7%. Como se mencionó anteriormente, las fuerzas de la tensión superficial equilibran las del movimiento del flujo, inducido por el agitador, vía esfuerzos cortantes, produciendo que en el caso de  $\sigma = 0 \text{ N/m}$  que la interfase se deforme más.

Área interfacial [ - ]	7.21	7.36	7.91
$\sigma \text{ [N/ m]}$	0.050	0.025	0

Tabla 5. 2 Cambio en el área debido al coeficiente de tensión interfacial.

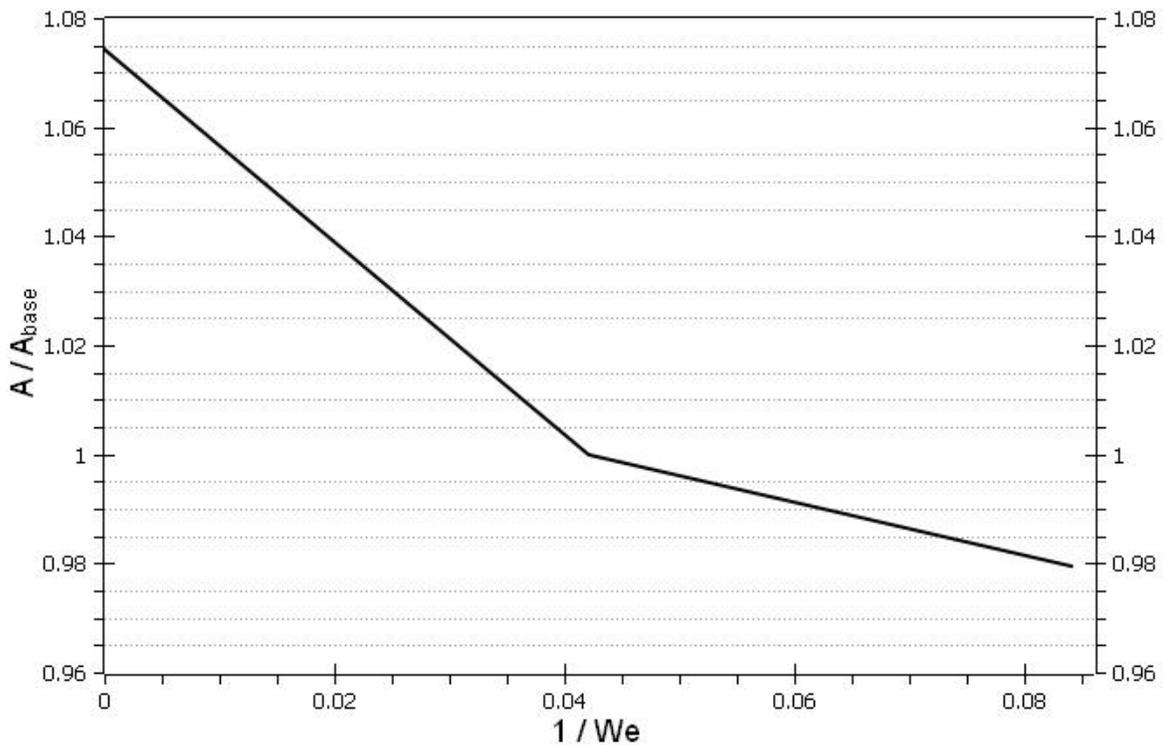


Figura 5. 16 Relación entre el área interfacial y el número de Weber.

# Conclusiones

Para el presente trabajo se desarrolló un modelo numérico, que permite analizar la interacción existente entre dos líquidos inmiscibles, antes de la emulsificación; los cuales se someten al proceso de agitación, a diferentes condiciones de operación  $Re = 82$  y  $Re = 100$  (el número de Reynolds está basado en el diámetro proyectado del agitador). Para modelar el flujo turbulento se utilizó la técnica de simulación de grandes escalas (Large Eddy Simulation). La evolución de la interfase se modeló con el método Level-Set y para modelar la geometría compleja de los cuerpos que se encuentran dentro del dominio computacional como son: el tanque y el agitador (el agitador está inclinado y su ángulo con respecto a la horizontal es de  $30^\circ$ ), se utilizó la técnica de fronteras inmersas. Las fuerzas de tensión superficial son incluidas en el modelo y los fluidos de trabajo que se utilizaron son agua y aceite.

Cuando el agitador comienza a moverse, éste transmite su cantidad de movimiento al aceite originando su desplazamiento, así como, el del agua; estas interacciones originan una deformación en la interfase. La cantidad de movimiento se transmite de un fluido a otro vía esfuerzos cortantes; éstos arrastran fluido en la parte inferior del agitador, originando el levantamiento de la interfase. Los cambios significativos de la velocidad de deformación del flujo se encuentran en la parte inferior del tanque, donde se encuentra el agua, debido a que la viscosidad es 62 veces menor y se puede desplazar con mayor facilidad.

El comportamiento de la interfase tiene una buena aproximación con respecto al obtenido experimentalmente, para un  $Re = 82$  se tiene un error, de aproximadamente, del 7%, y para un  $Re = 100$ , el porcentaje es del 12%.

Al modificar el número de Reynolds, la interfase se ve afectada en su forma y altura, el aumento de este número propicia el incremento en la altura y en el área interfacial. Estos cambios se deben a que la cantidad de movimiento es mayor, por lo que los esfuerzos cortantes son capaces de arrastrar mayor cantidad de fluido. También, se observó que los cambios en la presión son significativos, mientras el cambio en la presión sea mayor, la altura de la interfase aumentará; la interfase es muy sensible a los cambios de presión.

Cuando se modifica el coeficiente de tensión superficial, la interfase presenta una deformación en su área interfacial, que depende del valor de este coeficiente, ya que esta fuerza equilibra las demás, que están presentes en el movimiento del flujo. Si se desprecia dicho coeficiente, la interfase tiene un comportamiento caótico, y su deformación en el área interfacial es mayor; el aumento en el área interfacial es del 7%. Para un valor de  $0.050 \text{ N/m}$ , la disminución del área superficial es del 2% con respecto al caso base ( $\sigma = 0.025 \text{ N/m}$ ). Para este trabajo, a diferencia de las investigaciones numéricas encontradas en la literatura, se tomó en cuenta la tensión superficial, aportando una mejor representación cuando dos líquidos inmiscibles se encuentran en contacto.

En el trabajo se presentan flujos con número de Reynolds de 82 y 100. Estos números de Reynolds están en función de las propiedades del aceite. Debido a la gran diferencia, principalmente de la viscosidad entre ambos fluidos no se sabe el tipo de régimen que se tiene en el flujo, ya que en función de las propiedades del agua, estos números serían de 5593 y 6665. Esto no implica un problema, pues el modelo de turbulencia que se utiliza se adapta correctamente a los diferentes regímenes. En posibles zonas turbulentas, el modelo se activa, pero en zonas laminares el modelo se desconecta proporcionando una viscosidad turbulenta nula. En las simulaciones presentadas, se encontró que el máximo valor de la viscosidad turbulenta se encontró alrededor del agitador con valores instantáneos del orden de la unidad. Sin embargo, el valor promedio de la viscosidad turbulenta, resultó varios órdenes de magnitud inferior. Con lo anterior se puede intuir que el flujo que se tiene es muy cercano al flujo laminar, con posibles zonas muy localizadas de turbulencia (cerca del agitador).

## *Trabajos futuros*

Para comparar de manera detallada las predicciones del modelo numérico desarrollado, se recomienda la obtención de datos experimentales del flujo mediante velocimetría por imágenes de partículas (PIV) o algún otro método óptico que no perturbe el mismo. Además, sería conveniente estudiar el efecto de las viscosidades en el flujo, la posición del agitador en la dirección axial, incluido un cambio en el fluido, y su ángulo con respecto a la horizontal. También, es recomendable colocar un valor preciso del coeficiente de tensión superficial para los fluidos de trabajo, ya que para este caso se usó un valor aproximado localizado en la literatura. Finalmente, un aumento en el número de celdas de la malla computacional es recomendable, ya que se podría determinar las condiciones críticas en donde se inicia la emulsificación.

## *Referencias*

- Gaonkar, A. (1989). Interfacial tensions of vegetable oil/water systems: Effect of oil purification. *J Am Oil Chem Soc*, 66(8), pp.1090-1092.
- Takhistov, P. and Paul, S. (2006). Formation of Oil/Water Emulsions due to Electrochemical Instability at the Liquid/Liquid Interface. *Food Biophysics*, 1(2), pp.57-73.
- Ghosh, S., Pradhan, M., Patel, T., Haj-shafiei, S. and Rousseau, D. (2015). Long-term stability of crystal-stabilized water-in-oil emulsions. *Journal of Colloid and Interface Science*, 460, pp.247-257.
- Laurenzi, F., Coroneo, M., Montante, G., Paglianti, A. and Magelli, F. (2009). Experimental and computational analysis of immiscible liquid–liquid dispersions in stirred vessels. *Chemical Engineering Research and Design*, 87(4), pp.507-514.
- Perrin, A. and Hu, H. (2006). An explicit finite-difference scheme for simulation of moving particles. *Journal of Computational Physics*, 212(1), pp.166-187.
- Fluid Mechanics. By P. K. Kundu I. M. Cohen. Academic, 2002. 730 pp. ISBN 0-12-178251-4. 69.95. (2002). *J. Fluid Mechanics*, 477, pp.410-411.
- Métais, O. and Lesieur, M. (1992). Spectral large-eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence. *J. Fluid Mechanics*, 239(-1), p.157.
- Gottlieb, D. and Turkel, E. (1976). Dissipative two-four methods for time-dependent problems. *Mathematics of Computation*, 30(136), pp.703-703.
- Osher, S. and Sethian, J. (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1), pp.12-49.
- Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S. (1994). A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *Journal of Computational Physics*, 114(1), pp.146-159.
- Chang, Y., Hou, T., Merriman, B. and Osher, S. (1996). A Level Set Formulation of Eulerian Interface Capturing Methods for Incompressible Fluid Flows. *Journal of Computational Physics*, 124(2), pp.449-464.
- Osher, S., Fedkiw, R. and Piechor, K. (2004). Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. *Applied Mechanics Reviews*, 57(3), p.B15.

Harten, A., Engquist, B., Osher, S. and Chakravarthy, S. (1997). Uniformly High Order Accurate Essentially Non-oscillatory Schemes, III. *Journal of Computational Physics*, 131(1), pp.3-47.

J. A. Sethian and Peter Smereka. (2003). Level Set Methods For Fluid Interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35, pp. 341-372.

Jean-Louis Salager (1999). Formulación, composición y fabricación de emulsiones para obtener las propiedades deseadas. Parte A. Introducción y concepto de formulación físico-químico. Venezuela

Godunov, S. (1959). A finite difference method for the computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics. *Mathematics Sbornik*, 47, pp.357-393.

Rouy, E. and Tourin, A. (1992). A Viscosity Solutions Approach to Shape-From-Shading. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29(3), pp.867-884.

Herrman, M. (2013). A sub-grid surface dynamics model for sub-filter surface tension induced interface dynamics. *Computers & Fluids*, 87, pp.92-101.

Gounley, J. and Peng, Y. (2015). Response and Recovery Times of Elastic and Viscoelastic Capsules in Shear Flow. *Communications in Computational Physics*, 17(05), pp.1151-1168.

Hunt, J. C. R., Wrey, A. A. and Moin, P. (1988) Eddies, Streams, and Convergence Zones in Turbulent Flows. *Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases*, 2, pp.193-208.

## *Bibliografía*

Ramírez Cruz, J. (2015). Estudio numérico del flujo con superficie libre en un tanque agitado mediante un impulsor plano. Maestría. Universidad Nacional Autónoma de México. Instituto de Ingeniería.

Lagarza Cortes, C. (2011). Análisis numérico del flujo bifásico en un canal abierto. Maestría. Universidad Nacional Autónoma de México. Instituto de Ingeniería.

Paul, E., Atiemo-Obeng, V. and Kresta, S. (2004). *Handbook of industrial mixing*. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience.

Geankoplis, C. and Aguilar Ortega, M. (2006). *Procesos de transporte y principios de procesos de separación (Incluye operaciones unitarias)*. México: Compañía Editorial Continental.

Salinas Vázquez, M. y Vicente y Rodríguez, W. (2007). Simulación de la turbulencia de un flujo que pasa alrededor de un cilindro de sección cuadrada a partir de la utilización de la simulación de grandes escalas y de fronteras inmersas. *Revista Mexicana de Física*, 53(6), pp.461-469.

Jean-Louis Salager (1999). *Formulación, composición y fabricación de emulsiones para obtener las propiedades deseadas. Parte B. Propiedades de las emulsiones y su medición.* Venezuela.

Osher, S. (2001). Book Review: Level set methods and fast marching methods: evolving interfaces in computational geometry, fluid mechanics, computer vision, and materials science. *Mathematics of Computation*, 70(233), pp.449-451.

Sussman, M., Fatemi, E., Smereka, P. and Osher, S. (1998). An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, 27(5-6), pp.663-680.