

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ
FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DEL PERÚ

Metodología de optimización numérica multi-objetivo y de simulación numérica de la interacción fluido-estructura del desempeño de un agitador con impulsor PBT variando ángulo, altura y velocidad de rotación utilizando ANSYS CFX, MECHANICAL y DESIGN EXPLORER

Tesis para optar el Título de Ingeniero Mecánico,
que presenta el bachiller:

Gustavo Andrés Arrieta Valderrama

ASESORES:

Dr. Ing. Quino Martín Valverde Guzmán
Ing. Herbert Yépez Castillo

RESUMEN

Los tanques agitadores son ampliamente utilizados en diferentes industrias, en donde la eficiencia de las operaciones de mezclado tiene un impacto tanto en los costos como en la calidad del proceso, si a esto se le añade que para poder mantener la competitividad en el mercado, el tiempo de desarrollo del producto debe ser el menor posible y a un bajo costo, por ese motivo es necesario optar por nuevas formas para realizar nuevos diseños. En muchas empresas fabricantes de gran envergadura, el uso software de optimización se está convirtiendo en una herramienta ideal para conseguir estos objetivos.

En este trabajo se utilizó las herramientas computacionales ANSYS CFX, MECHANICAL y DESIGN EXPLORATION para realizar una metodología que permita realizar la simulación numérica tanto a nivel de fluidos y estructural como para realizar la optimización de un modelo de tanque agitador. Para la elaboración de este procedimiento se optó por variar en un rango determinado ciertos parámetros geométricos y de funcionamiento.

En el estudio fluido dinámico se trabajó tres fluidos: agua, metanol y aire, en donde los dos primeros se modelaron como “multicomponentes” es decir como fluidos miscibles, mientras que la interacción con el aire se modelo como “superficie libre”. Para esto, se utilizó el modelo de turbulencia SST (Shear Stress Transport), el cual demostró en un estudio anterior ser el que más se ajusta al ser contrastado con resultados experimentales, además se empleó los modelos de “marco de referencia móvil (MRF)” y de “Frozen Rotor” para tratar la interacción entre las partes móviles (rotor) y partes estáticas (tanque y deflectores). Para el análisis estructural se utilizó la metodología de interacción fluido-estructura (FSI) del tipo “unidireccional (one-way)” para determinar los esfuerzos y deformaciones en cada diseño. Finalmente, se utilizó el método de la superficie de respuesta (RSM) como base para la optimización, donde se utilizó un algoritmo estocástico (MOGA) como buscador de soluciones óptimas en el modelo del tanque agitador parametrizado, el cual consta de tres variables de entrada (ángulo de alabe, altura de impulsor y velocidad de rotación) y dos funciones objetivos: maximizar grado de mezcla y minimizar la potencia consumida.

El presente estudio demuestra que la velocidad y el ángulo son los parámetros más incidentes en las funciones objetivas mencionadas anteriormente y que al variar estos parámetros se pueden obtener mejoras significativas en los resultados. En este estudio en particular se encontró que el ángulo de 60 grados y una altura de 300mm con respecto al tanque, mejora en un 8% y 36% el consumo de potencia y grado de mezcla respectivamente, para las configuraciones del tanque dadas.

INDICE

RESUMEN	2
INDICE	3
LISTADO DE FIGURAS Y GRAFICOS	5
LISTADO DE TABLAS	9
1. INTRODUCCION	10
1.1. Potencial del CFD aplicado a agitadores	10
1.2. Requerimientos previos	12
2. DESCRIPCION DEL PROYECTO	14
2.1. Objetivos	15
2.2. Antecedente del proyecto	15
2.3. Consideraciones	17
2.4. Alcance de la tesis	18
3. CONCEPTOS DE AGITACION Y MEZCLA	20
3.1. Introducción	20
3.2. Equipos de mezcla	22
3.2.1. Tuberías	23
3.2.2. Mezcladores en tee	23
3.2.3. Mezcladores estáticos	23
3.2.4. Tanques agitados	24
3.3. Tipos de agitadores	25
3.3.1. Impulsores de flujo axial	26
3.3.2. Impulsores de flujo radial	27
3.3.3. Impulsores hidroala (<i>hydrofoil</i>)	28
3.3.4. Impulsores de alta cizalla (<i>highshear</i>)	28
3.4. Parámetros característicos en agitadores	29
3.4.1. Número de Reynolds de mezclado	29
3.4.2. Número de Froude	29
3.4.3. Potencia de la agitación	29
3.4.4. Número de Potencia	30
3.4.5. Caudal vehiculado	31
3.4.6. Número de Caudal	31
3.4.7. Efectividad (η)	31
3.4.8. Tiempo de mezclado	32
3.5. Grado de homogeneidad de mezcla	32

4. CONCEPTOS DE OPTIMIZACION	36
4.1. Introducción	36
4.2. Diseño de Experimentos (<i>DOE</i>)	39
4.2.1. Diseños de primer orden	42
4.2.2. Diseños de segundo orden	42
4.3. Método de superficie de respuesta (<i>RSM</i>)	43
4.3.1. Análisis de superficie de respuesta (<i>RSA</i>)	45
4.3.2. Metamodelos de funciones de interpolación	45
4.4. Algoritmos de optimización	46
5. METODOLOGIA DE SIMULACION Y OPTIMIZACION	47
5.1. Parametrización geométrica	47
5.2. Simulación Fluido dinámica	55
5.3. Simulación Estructural	62
5.4. Optimización	68
6. RESULTADOS	73
6.1. Superficie de respuesta de DOE	73
6.2. Superficie de respuesta final	75
6.3. Selección del diseño optimo	79
6.4. Diseño inicial	81
6.5. Diseño optimo	87
6.6. Comparación de diseño	94
6.7. Independencia de malla	100
Conclusiones	105
Referencias Bibliográficas	107

LISTADO DE FIGURAS Y GRAFICOS

Figura 1. Comparación de curvas experimentales y teóricas utilizando distintos modelos de turbulencia (SST y k-épsilon)

Figura 2. Esquema de las dimensiones utilizadas en el diseño inicial del agitador.

Figura 3. Diferentes equipos utilizados en procesos de agitación y mezcla. (a) mezclador en tuberías. (b) mezclador en tee. (c) mezclador estático. (d) tanque agitado.

Figura 4. Esquema general de un tanque agitador con eje central montado verticalmente.

Figura 5. Esquema de patrones de flujos axiales y radiales.

Figura 6. Patrones de flujos dado por diferentes impulsores.

Figura 7. Curva experimental del número de potencia vs Reynolds utilizando diferentes impulsores.

Figura 8. Curva experimental del número de caudal vs Reynolds para impulsor tipo PBT.

Figura 9. Volumen total de los fluidos en donde se caracteriza la mezcla.

Figura 10. Secciones transversales a lo largo del agitador en donde se caracteriza el grado de mezcla.

Figura 11. Esquema de las diferencias entre realizar una mejora y una optimización

Figura 12. Esquema general en una optimización – Parámetros de entrada, caja negra y parámetros de salida (1)

Figura 13. Grafica de una optimización con una sola función objetivo. (1)

Figura 14. Grafica de la frontera de Pareto en una optimización multi-objetivo. (1)

Figura 15. Cuadro esquemático general de los tipos y métodos de optimización.

Figura 16. Cuadro comparativo entre los diferentes diseños de experimentos

Figura 17. Grafica de la cantidad de experimentos a realizar en función de los parámetros de entrada variables.

Figura 18. Esquema representativo de un diseño 3^3 full factorial (27 puntos)

Figura 19. Esquema representativo de un diseño central compuesto de tres variables en dos niveles.

Figura 20. Modelo 3D del impulsor utilizado

Figura 21. Esquema de las dimensiones características en el alabe de impulsor PBT

- Figura 22. Esquema del impulsor y el ángulo variable utilizado.
- Figura 23. Esquema del el eje de coordenadas que controla la altura del impulsor
- Figura 24. Esquema del cubo del impulsor que muestra las dependencias de compatibilidad geométrica.
- Figura 25. Lenguaje utilizado en el *parameter manager* en Design Modeler.
- Figura 26. Esquema de dominios en el método MRF (marcos de referencia móviles) utilizado en el modelaje.
- Figura 27. División geométrica de los diferentes dominios y elementos utilizados.
- Figura 28. Mallado utilizado (elementos tetraédricos y hexaédricos). Detalle del *inflation* alrededor del alabe.
- Figura 29. Grafica de la calidad de malla del volumen de control (fluidos)
- Figura 30. Definición de dominios y condiciones de bordes.
- Figura 31. Esquema de la inicialización de los fluidos involucrados en el análisis
- Figura 32. Lenguaje utilizado en ANSYS CFX para creación de expresiones (CEL)
- Figura 33. Volumen creado para utilizarlo como región de medida mediante expresiones CEL.
- Figura 34. Interfaces utilizadas para medición del caudal.
- Figura 35. Cantidad de metanol y agua utilizados para cálculo de fracción de volumen ideal.
- Figura 36. Planos creados para la caracterización del grado de mezcla. (a) Planos distribuidos a lo largo del agitador. (b) plano tipo *sample* para medición y promedio de CV.
- Figura 37. Esquema del modelaje del motor y la condición de contorno utilizada
- Figura 38. Esquema del proyecto para realizar un FSI del tipo *one-way* (unidireccional).
- Figura 39. Mallado del tanque agitador para el análisis estructural.
- Figura 40. Gráfica de la calidad de malla y valores según criterio de calidad ortogonal.
- Figura 41. Condiciones de contorno aplicadas para el análisis estático estructural.
- Figura 42. Vectores de importación de cargas dadas por el análisis fluido dinámico como condición de contorno.
- Figura 43. Verificación de calidad de importación de cargas y mapeado de superficies.

- Figura 44. Parámetros de salida para comparación y verificación entre *CFX* y *Mechanical*.
- Figura 45. Expresión utilizada para controlar el error relativo del torque desde el *WorkBench*
- Figura 46. Entorno del software empleado: Design Explorer
- Figura 47. Puntos a simular requeridos por el DOE empleado (CCD)
- Figura 48. Interfaz del Design Explorer para la elección del meta modelo para la creación de la superficie de respuesta.
- Figura 49. Frontera de Pareto indicando funcione objetivos para la optimización.
- Figura 50. Superficies de respuesta de los parámetros variables con la función objetivo: Promedio CV.
- Figura 51. Superficies de respuesta de los parámetros variables con la función objetivo: Potencia CFD
- Figura 52. Velocidad de rotación vs. Altura de impulsor - función objetivo: Promedio CV.
- Figura 53. Velocidad de rotación vs. Angulo de alabe - función objetivo: Promedio CV.
- Figura 54. Angulo de alabe vs. Altura de impulsor- función objetivo: Promedio CV.
- Figura 55. Velocidad de rotación vs. Altura de impulsor - función objetivo: Potencia CFD
- Figura 56. Velocidad de rotación vs. Angulo de alabe - función objetivo: Potencia CFD
- Figura 57. Angulo de alabe vs. Altura de impulsor- función objetivo: Potencia CFD
- Figura 58. Sensibilidad de los parámetros en la potencia, torque y grado de mezcla
- Figura 59. Sensibilidad de los parámetros en el Re , N_p , N_q , P_{fect}
- Figura 60. Frontera de Pareto, soluciones elegidas para la selección del diseño óptimo.
- Figura 61. Fracción1 de masa de metanol en la altura del agitador.
- Figura 62. Fracción de masa de agua con diferentes escalas.
- Figura 63. Campo de velocidades con escala real (izquierda) y escala ajustada (derecha).
- Figura 64. Vectores de velocidad en el tanque y cerca al impulsor (derecha)
- Figura 65. Patrón de flujo, los colores indican velocidad.
- Figura 66. Cortes de sección con fracción de masa de metanol (izquierda) y vórtice formado en la superficie libre (derecha)
- Figura 67. Importación de campo de presión para análisis estructural.

- Figura 68. Esfuerzos y deformaciones en el eje-impulsor
- Figura 69. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor
- Figura 70. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor
- Figura 71. Esfuerzos y deformaciones en el tanque
- Figura 72. Esfuerzos y deformaciones en la base del tanque
- Figura 73. Fracción1 de masa de metanol en la altura del agitador.
- Figura 74. Fracción de masa de agua con diferentes escalas.
- Figura 75. Campo de velocidades con escala real (izquierda) y escala ajustada (derecha).
- Figura 76. Vectores de velocidad en el tanque y cerca al impulsor (derecha)
- Figura 77. Patrón de flujo, los colores indican velocidad.
- Figura 78. Cortes de sección con fracción de masa de metanol (izquierda) y vórtice formado en la superficie libre (derecha)
- Figura 79. Importación de campo de presión para análisis estructural.
- Figura 80. Esfuerzos y deformaciones en el eje-impulsor
- Figura 81. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor
- Figura 82. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor
- Figura 83. Esfuerzos y deformaciones en el tanque
- Figura 84. Esfuerzos y deformaciones en la base del tanque
- Figura 85. Diseños graficados en la Frontera de Pareto
- Figura 86. Comparación de fracción de masa de metanol en planos de corte en la altura del agitador
- Figura 87. Graficas de los resultados de la independencia de malla
- Figura 88. Graficas de los resultados de la independencia de malla (estructural)

LISTADO DE TABLAS

- Tabla 1. Dimensiones utilizadas en el diseño inicial del agitador.
- Tabla 2. Tipos de aplicaciones utilizadas en procesos de mezclado.
- Tabla 3. Coeficiente de variación como medida de grado de mezcla
- Tabla 4. Comparación entre meta modelos de primer y segundo orden.
- Tabla 5. Comparación entre algoritmos de optimización según los objetivos.
- Tabla 6. Especificaciones de los parámetros geométricos utilizados
- Tabla 7. Tipos de dominios y elementos utilizados en la configuración del modelo
- Tabla 8. Valores de calidad de malla según criterio de calidad ortogonal.
- Tabla 9. Materiales y propiedades usados en la configuración del modelo: Agua, aire y metanol.
- Tabla 10. Especificación del parámetro variable: Velocidad de rotación
- Tabla 11. Parámetros de ajuste del algoritmo MOGA
- Tabla 12. Interfaz para configuración de objetivos y elección de candidatos
- Tabla 13. Resultados de los diseños (inicial y optimo)
- Tabla 14. Comparación de diseños
- Tabla 15. Valores obtenidos del estudio de Independencia de malla fluido dinámico.
- Tabla 16. Resumen comparativo de los parámetros calculados a diferente número de elementos (fluido dinámico)
- Tabla 17. Valores obtenidos del estudio de Independencia de malla del análisis estructural.
- Tabla 18. Resumen comparativo de los parámetros calculados a diferente número de elementos (estructural)

CAPITULO 1: INTRODUCCION

En nuestro entorno podemos observar gran cantidad de fenómenos asociados con los fluidos y su interacción con lo que lo rodea, desde el vuelo de una gaviota o el agua recorriendo una tubería hasta la forma aerodinámica de un avión en pleno vuelo. A partir de estos fenómenos la ciencia planteó diversas formulaciones para su estudio a través de los modelos matemáticos. En la actualidad, no se dispone una ecuación analítica que pueda describir de forma general el comportamiento de los fluidos, sino se posee ciertas ecuaciones para cada tipo de fenómeno físico en particular bajo ciertas situaciones en concreto. El asunto se vuelve más complejo cuando se desea analizar el impacto o la interacción entre este comportamiento y su entorno como por ejemplo cuerpos sólidos o estructuras.

Las técnicas numéricas han tenido un gran desarrollo en los últimos años tanto en la parte de diseño estructural como en mecánica de fluidos, siendo esta última donde se ha tenido mayor repercusión por su dificultad mediante los métodos tradicionales. Para el estudio de cuerpos sólidos o estructuras se desarrolló el método por elementos finitos (FEM) mientras que para fluidos fue el método de los volúmenes finitos (FVM). Ambas técnicas numéricas tienen una disciplina computacional que aplica los métodos anteriormente mencionados y que realiza el análisis en cuestión.

Una disciplina altamente efectiva, para poder determinar el comportamiento de los fluidos y solucionar diferentes ecuaciones físicas involucradas e integrarlas para simular el comportamiento de flujo, es la dinámica de fluidos computacional (*CFD, computational fluid dynamics*). Esta disciplina nos permite realizar gran cantidad de cálculos, que desarrollan las leyes físicas por las que se rigen los fluidos, mediante el uso del computador, lo cual es una ventaja hoy en día ya que se tiene acceso a hardware más potentes a menor costo, lo cual ha llevado a que la dinámica de fluidos computacional no solo sea utilizado a nivel investigación sino también la resolución de problemas aplicados a ingeniería de carácter industrial. Por otro lado, tenemos el análisis por elementos finitos (FEA) que de manera similar realiza el análisis estructural de una manera efectiva, con ahorro en cuanto a construcción de prototipos y reducción de ensayos experimentales, obteniendo así una predicción del comportamiento de los sólidos.

Debido a la versatilidad de las herramientas computacionales y a la gran factibilidad de uso en fenómenos más complejos, estas se aplicaran directamente a un proceso de agitación y mezcla particular en el presente proyecto.

1.1. Potencial del CFD aplicado a agitadores

Tanques agitadores se utilizan ampliamente a nivel industrial tanto en aplicaciones tales como mezclado de solutos y solventes, disolución de sólidos, suspensión de sólidos, reacciones químicas hasta procesos más complejos utilizados en petroquímica, farmacéutica, minería y hasta en la industria alimentaria. En el sector químico se llevan múltiples operaciones las cuales incluyen la mezcla de líquidos, cristalización, transferencia de masa líquido-líquido, gas-líquido y reacciones químicas. Estos procesos están muy influenciados por las características de mezcla y también muy ligadas a la configuración del agitador.

La capacidad de agitación con relación al mezclado es muy importante debido a que tiene gran impacto en el costo de producción y operación del mismo. El diseño y fabricación de un sistema de agitación (impulsor, tanque, deflectores, etc.) tiene gran importancia ya que generan un impacto directo al proceso, lo que se traduce en calidad de mezcla, tiempo de mezcla y consumo de energía.

A lo largo de los años se han establecido tanto modelos, como ecuaciones empíricas y experimentales, conocido en química como procesos de operaciones unitarias, que simplifican el comportamiento de flujo en estos procesos de manera aceptable desde la perspectiva tradicional (2). Sin embargo, existen herramientas computacionales como las simulaciones numéricas capaces de generar aproximaciones que proporcionen mejoras en la predicción de un sistema agitado en cuanto a la eficiencia del estudio.

La fluido dinámica computacional es una herramienta muy potente para el análisis, cálculo y diseño de sistemas en donde existe transporte de masa, energía y cantidad de movimiento, lo cual se aplica directamente para agitación y mezclado. Tiene un gran potencial para mejorar procesos de agitación dado que se puede simular y cambiar diferentes parámetros del sistema, tales como los de funcionamiento, construcción estructural hasta propiedades de los fluidos involucrados lo cual le da gran versatilidad en menor tiempo y costo. Esto nos da una gran simplificación a los ingenieros en cuanto a cálculos, lo que nos hace enfocar más en la parte conceptual y diseño más que en las operaciones manuales a las que ya estamos acostumbrados, evitando así errores humanos por ese lado.

El uso de CFD nos puede facilitar los cálculos característicos en agitadores como concentración de los componentes, velocidades locales, presión, número de caudal, número de potencia hasta viscosidades y densidades promedios dentro del volumen de control.

Una de las ventajas más importantes es que el análisis CFD nos permite con gran flexibilidad cambiar parámetros del proceso, los regímenes del flujo, la ubicación de los impulsores, número de alabes y deflectores tan solo usando algunas estrategias en el CAD. De esta manera aquellos procesos que dependan básicamente de las características de la agitación podrán ser optimizados jugando con diferentes configuraciones del agitador, diferentes regímenes de giro, etc., todo ello sin la necesidad de construir diferentes prototipos cada vez.

Con las herramientas de análisis CFD se proporciona una comprensión más a detalle de los procesos que conducen a mayores rendimientos, además de reducir el desperdicio de materiales y el consumo de tiempo como el que se requiere prototipado y experimentación. En caso se cuente con prototipos de experimentación, estos no se aplican de manera genérica y se necesitan muchas pruebas para caracterizar el comportamiento de agitadores, mientras que el uso de CFD nos permite conocer virtualmente los fenómenos involucrados y tener un conocimiento detallado de lo que pasa interiormente, esto es algo que no se puede apreciar en ningún otro método.

Entre las ventajas puntuales podemos mencionar:

- Simular y obtener propiedades de los fluidos en estudio con gran detalle
- Ayuda al diseño de soluciones de mezcla y agitación de manera rápida evitando tiempo y costos característicos en la experimentación.
- Se puede tener una visualización al detalle de las variables involucradas en el proceso.
- Mediante el análisis de resultados se puede observar fenómenos locales en todo el dominio de estudio de las variables de interés.
- Se puede simular y analizar geometrías complejas
- Puede resolver gran cantidad de escenarios en donde los cambios entre uno y otro suelen tomar tiempo mediante el método clásico.
- Es posible optimizar ciertos parámetros de la configuración y características del sistema sin necesidad de recurrir al prototipado
- Reducción considerable del tiempo y dinero

Mientras que las desventajas con las que nos podemos encontrar son:

- Se requiere conocimientos previos en el manejo de software
- Se necesita cierta experiencia y especialización. Además de conocer el fenómeno físico.
- Consume recursos computacionales lo cual puede necesitar inversiones iniciales significativas
- El costo computacional aumenta conforme a la complejidad del problema
- Pueden existir errores por el método de cálculo o por error humano al momento de modelar ciertos fenómenos
- Por lo general modelar requiere de experiencia y buen criterio
- Es necesario contar con hardware potentes para reducir el tiempo computacional
- Algunas simulaciones (en el caso de agitadores) pueden tardar hasta días para obtener resultados visibles
- Puede ser largo y laborioso preparar e interpretar los resultados.

1.2. Requerimientos previos

En este estudio el uso en conjunto de las herramientas CFD con optimización de objetivos múltiples, demostró ser una opción interesante, que ofrece nuevas posibilidades para la mejora de la calidad de los productos fabricados por los tanques de mezcla, para minimizar los costos de operación y consumo energético.

Para realizar el estudio fluido dinámico, estructural y la optimización, básicamente se necesita acoplar campos de conocimientos variados, desde CAD hasta sofisticados software de optimización integrada con las simulaciones antes mencionadas.

Es decir se necesitaba un CAD que permita parametrizar ciertos valores en la geometría, la cual tiene que ser variable para que permita modificarse con fines de obtener curvas de respuesta y mejora. El CAD debe guardar operaciones en el modelado 3D para que el proceso de optimización logre ser automatizado dado que se deben simular cierta

cantidad de modelos específicos de manera repetitiva, es decir permita el procesamiento por lotes o “batch”.

El Software debe ser robusto y debe poder simular el agitador mediante el método de MRF (marco de referencia móvil), además de poseer capacidad de paralelización en la solución. Por otro lado, se debe tener un software que se puede acoplar completamente al estudio estructural mediante elementos finitos (FEA). Es decir, se debe realizar un estudio de un sistema acoplado de fenómenos – multifísica.

Por último se debe integrar lo antes mencionado con un potente software de optimización y generador de curvas de respuesta con capacidad de interpolación robusta para que sean confiables los puntos de diseños no simulados. Además, de tener la capacidad de identificar las fuentes de variación (parámetros de entrada) y relacionarlas con parámetros de salida y establecer funciones objetivos de más de un parámetro de entrada o salida (optimización multi-objetivo).

Debido a los factores mencionados anteriormente para el diseño CAD fue elegido el programa ANSYS DESIGN MODELER ya que muestra tener gran robustez en cuanto a la parametrización de modelos dado que permite guardar operaciones secuenciales de creación de geometrías, esto es necesario para generar la geometría de manera automática en cada variación de parámetros en la simulación.

Se eligió el programa ANSYS CFX como la herramienta de CFD. El software demostró proporcionar resultados muy precisos, soluciones robustas y de alta eficiencia de paralelización, además la solución numérica de problemas complejos. Este solucionador de gran eficacia promueve la interoperabilidad entre sus módulos para generar geometría tridimensional, malla, configuración física y post-procesamiento, además de obtener resultados validados en casos prácticos industriales. Además, se utilizó ANSYS MECHANICAL como software de elementos finitos para el análisis estructural, el cual tiene excelente acople en cuanto a la física de los análisis fluido dinámicos, lo cual permite estudiar la interacción entre fluido y estructura.

Finalmente, se eligió el software ANSYS DESIGN EXPLORATION como herramienta de optimización. Este potente software permite de manera relativamente sencilla poder ejecutar varios modelos integrados con los análisis anteriormente descritos y generar curvas de respuesta y resolución de optimización multi-objetivo.

Es por estos motivos que para la realización de este proyecto se tuvo que aprender y realizar tutoriales y capacitaciones de las herramientas computacionales antes descritas.

CAPITULO 2: DESCRIPCION DEL PROYECTO

El presente trabajo es una continuación de un proyecto de tesis (2) desarrollado por un compañero de la sección de Ingeniería Mecánica en el cual se toman como referencia los resultados sobre los modelos de turbulencia utilizados y comparados en su estudio.

Este trabajo empieza con el desarrollo de la geometría variable, es decir realizar la parametrización de las dimensiones y características a variar del tanque, agitador, y de los volúmenes de control para el análisis posterior correspondiente. Luego se realiza la simulación numérica fluido dinámica de un tanque agitador de paletas planas (PBT) con ángulo de inclinación determinado con el fin de cuantificar la calidad de mezcla en el agitador, y obtener los parámetros característicos de funcionamiento típicos de un agitador utilizando la herramienta computacional. Además se realizara la simulación numérica del análisis estructural de los componentes involucrados en el proceso de agitación, es decir, del tanque, deflectores, eje e impulsor. Finalmente se evaluara el desempeño del sistema de agitación variando algunos parámetros característicos geométricos y de funcionamiento.

El desempeño se hará variando los siguientes parámetros del sistema:

- Ángulo de los alabes
- Altura de ubicación de impulsor
- Velocidad de rotación del impulsor.

Para realizar este estudio se plantea que la distribución de capítulos esté enfocada para poder tratar todo lo concerniente al trabajo de simulación realizado. Los capítulos siguientes trataran de los siguientes temas:

Capítulo 3 – Conceptos de agitación y mezcla: se desarrolla los principales estudios desde el punto de vista clásico y estudios CFD sobre los tanques agitadores, características principales del funcionamiento y patrones de flujos característicos; además, se compara con otro tipo de agitador para poder extrapolar algunas características para el análisis del presente trabajo.

Capítulo 4 – Conceptos de optimización: se presentan conceptos clave relacionados con teorías de optimización y su aporte desde el punto de vista computacional, además se analiza a detalle las metodologías a utilizar en el desarrollo de la evaluación del desempeño del agitador. Esto es importante debido a que nos permite saber que se puede lograr y cuál es el significado de los resultados que se obtienen mediante estos métodos.

Capítulo 5 – Modelado y simulación del agitador: Este capítulo está totalmente dedicado a la parte computacional realizada, desde la Parametrización hasta la optimización. Además, se mostrara como se abordó el modelo del análisis fluido dinámico para fluidos miscibles, la elección del modelo para el análisis estructural, el uso del modelo de turbulencia, las propiedades físicas de los fluidos, el mallado, elección de los parámetros

geométricos y condiciones de contorno necesarias para correcta formulación de los modelos matemático.

Capítulo 6 – Resultados: Se analizan todos los resultados obtenidos con cada uno de los análisis en cuestión. Además, se evaluara el desempeño mediante la optimización y se muestra el diseño óptimo según las variaciones consideradas en la parametrización.

2.1. Objetivos

Este trabajo tiene como objetivo general modelar, simular y optimizar el desempeño de un tanque agitador con impulsor axial-radial PBT (*Pitched Blade Turbine*) mediante la fluidodinámica computacional (CFD) y ver su efecto a nivel estructural mediante el método de los elementos finitos (FEM).

Los objetivos específicos de este proyecto son los siguientes:

- Simular flujos continuos multifásicos en agitadores con impulsor de paletas planas tipo PBT.
- Utilizar el modelo matemático de turbulencia validado en estudio de tesis previo, el cual fue contrastado con resultados experimentales.
- Estudiar el comportamiento en la agitación de diferentes líquidos mediante el modelado de flujos multifásicos.
- Desarrollar un método matemático como medida de parámetros característicos en agitadores.
- Cuantificar el grado de mezcla en la agitación de dos fluidos.
- Desarrollar la metodología para realizar el acople entre las físicas fluido-estructural (interacción fluido y estructura)
- Modelar y realizar un análisis estático estructural del tanque, eje e impulsor del agitador.
- Desarrollar el procedimiento para la optimización de parámetros usando ANSYS Design Exploration
- Establecer funciones objetivos como medida para la optimización del desempeño del agitador y aplicarlo a la herramienta computacional.

2.2. Antecedente del proyecto

Este trabajo es la continuación y complementa un trabajo de tesis anterior (2), por lo que utiliza resultados de aquel proyecto como punto de partida incorporándolos en este trabajo.

En el trabajo de tesis predecesor se realizó la simulación numérica del mismo tanque (dimensiones iniciales) de flujos bifásicos tales como el agua y el aire para poder demostrar el comportamiento entre la interfaz de ambos modelándolo como superficie libre (*free surface*). Además se detalló claramente la metodología MRF (marco de

referencia móvil) para modelar el comportamiento de los dominios del tanque y del impulsor.

Por otro lado, este trabajo se apoya en las conclusiones obtenidas y los resultados en cuanto a la validación con datos experimentales lo cual nos deja como base la utilización del modelo de turbulencia SST (*shear stress transport*) dado que se obtienen mejores resultados en el comportamiento de la curva característica N_p vs. Re . En dicha comparación de los modelos de turbulencia, se pudo ver que el error utilizando el modelo *k-epsilon* fue aproximadamente de hasta 77% mientras que el modelo *SST* tenía una aproximación del 5.9% para flujo laminar ($Re = 30$). Además, para flujo turbulento el modelo *k-epsilon* tuvo un error de hasta 11.2% mientras que el modelo *SST* tuvo como máximo un error de 8.2% ($Re > 10000$). (2)

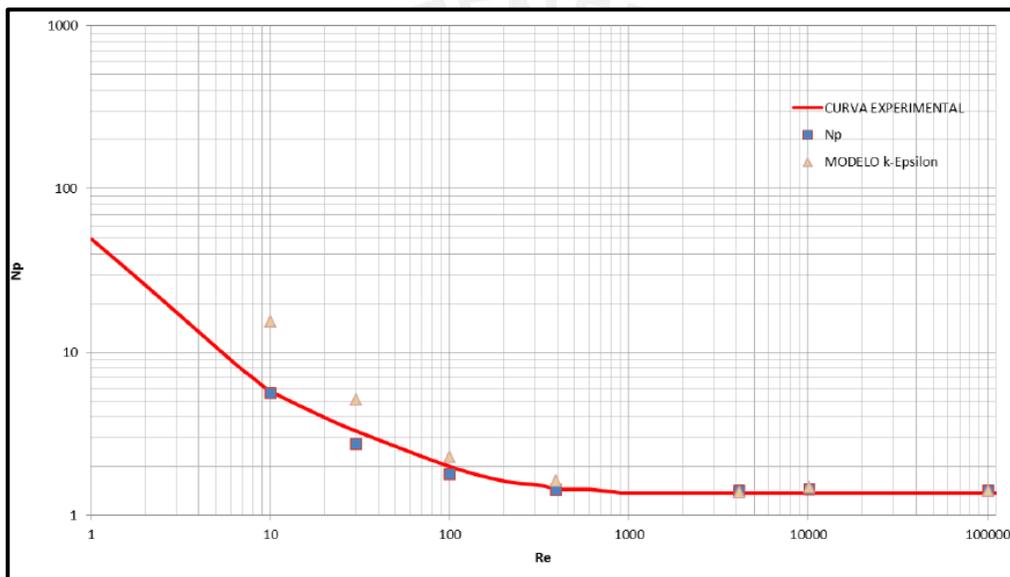


Figura 1. Comparación de curvas experimentales y teóricas utilizando distintos modelos de turbulencia (SST y k-épsilon) (2)

Finalmente, se atendió a las recomendaciones en cuanto a los requerimientos de malla cercanos a la superficie de los alabes como efectos de la mejora en cuanto a resultados computacionales.

En conclusión, este trabajo pretende continuar utilizando como base los resultados obtenidos en la bibliografía citada correspondiente al proyecto predecesor, teniendo como horizonte el continuar con las recomendaciones y que la investigación pueda aproximarse más a la complejidad física de los agitadores, agregando específicamente un fluido más al modelo y poder caracterizar comportamiento de la agitación de dichos líquidos, además de establecer una metodología efectiva para poder cuantificar calidad de mezcla y generar algunas aproximaciones en cuanto a la optimización del desempeño para dicho objetivo.

2.3. Consideraciones

El caso de estudio inicial es una simulación de un tanque agitado con un impulsor de paletas planas PBT (*pitched blade turbine*) con un ángulo de inclinación.

Las dimensiones del diseño inicial, para efectos de la evaluación del desempeño y mejora, son las indicadas:

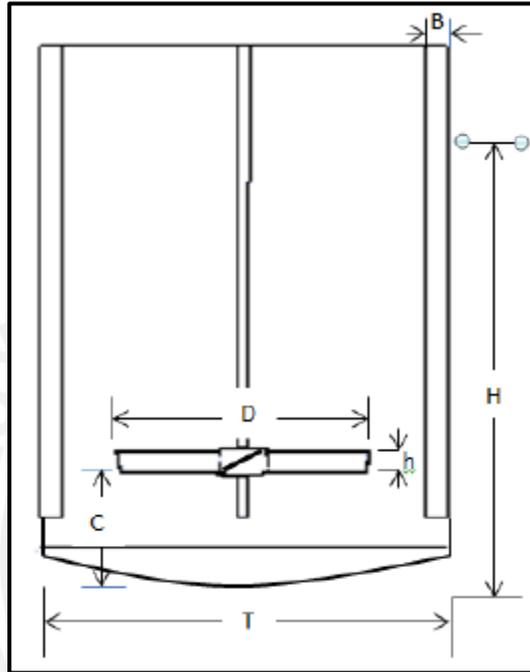


Figura 2. Esquema de las dimensiones utilizadas en el diseño inicial del agitador. (2)

Tabla 1. Dimensiones utilizadas en el diseño inicial del agitador.

Parámetros Geométricos	Símbolo	Dimensión (mm)
Diámetro del tanque	T	354
Profundidad de líquido	H	520
Diámetro de impulsor	D	220
Ancho del alabe	H	40
Ancho del deflector	B	22
Altura del agitador	C	240

La configuración estándar del equipo es la siguiente:

- Cuatro deflectores colocados simétricamente contra la pared del tanque en intervalos de 90°

- La base del tanque es de forma esférica, la cual se mantiene constante a lo largo del estudio, es decir no se considera los efectos que pudiera producir su configuración.

En este trabajo, la simulación del sistema de agitación se obtuvo mediante la utilización de un modelo desarrollado a partir de la solución numérica de ecuaciones conservación de la masa, cantidad de movimiento y turbulencia, teniendo en cuenta las siguientes hipótesis:

- Flujo constante global en el dominio del tanque
- Eje de rotación constante en régimen estable, mientras que la rotación del eje tiene una aceleración lineal con el tiempo para régimen transitorio
- Cálculo del régimen estacionario, para obtener aproximación del tiempo de mezcla en régimen transitorio
- Dos fases continuas. Una de las fases continuas se modela como dos fluidos mezclados a nivel molecular
- Fluido newtoniano
- Propiedades físicas constantes
- Deformaciones de la superficie libre del líquido libre
- Superficie libre con la acción de la tensión superficial
- Temperatura constante.
- Se modela bajo el abordaje de marco de referencia móvil (MRF), el cual considera dos dominios, uno rotatorio (cercano al impulsor) y otro estacionario.
- Se considera una distancia fija como límite del dominio móvil referente al impulsor, tanto en altura como en la dimensión radial.

2.4. Alcance de la tesis

- Se modelan dos fluidos cualesquiera para efectos de la caracterización del procedimiento empleado.
- El modelaje físico no será validado experimentalmente puesto que el objetivo de la tesis es presentar la metodología de optimización, es decir el modelaje de los fluidos son utilizados como herramientas matemáticas que permitan el desarrollo de los objetivos especificados anteriormente.
- No se considera la influencia del tamaño del dominio rotatorio, es decir, la distancia de la luz entre el impulsor y la interfaz del dominio estacionario.
- No se modela el efecto de la unión entre el cubo y los alabes, dado que se considera que no generan efectos importantes en la dinámica del fluido.
- No se considera la influencia de la configuración y de las dimensiones de la base del tanque
- La dimensión del eje es constante para la variación de la altura del impulsor y se sitúa a lo largo del tanque, es decir solo se considera el movimiento del impulsor como parámetro variable.

- Se utiliza un número de iteraciones relativamente bajas para el ahorro computacional lo cual puede tener efecto directo en la exactitud de los valores obtenidos teniendo en cuenta que para realizar una optimización se requieren una gran cantidad de puntos de simulación.



CAPITULO 3: CONCEPTOS DE AGITACION Y MEZCLA

3.1. Introducción

Durante mucho tiempo, la concepción y proceso para el diseño de los tanques de agitación se ha realizado de forma experimental, tomando en cuenta aspectos tales como la potencia requerida, su capacidad de cizallamiento, el bombeo, tiempo de mezcla y direcciones de flujo. La forma de cuantificar estos parámetros se logra empíricamente de manera efectiva utilizando modelos a escala de vidrio o cualquier otro material transparente que permite medir visualmente algunos parámetros; sin embargo, es complicado obtener comportamientos de flujo y determinar el grado de homogenización localmente. Además, es complicado obtener en ciertos casos el tiempo de mezcla dado que este se realiza de forma muy rápida.

Un diseño adecuado se logra cuando se puede crear sinergia entre el estudio computacional CFD y los métodos experimentales como validación. Dentro de las operaciones industriales se puede aprovechar esta tecnología para poder predecir patrones en el comportamiento del flujo y las variables mencionadas anteriormente que posee dificultad para cuantificarse mediante los métodos empíricos.

El éxito de ciertas operaciones industriales dependerá en gran parte de un buen proceso de agitación y mezclado, con un correcto diseño y elección de los componentes del sistema, por ejemplo, el tipo de impulsor que se utilice. En la actualidad existen variedad de impulsores, cada uno con una aplicación específica a un determinado proceso industrial. (3)

La agitación y mezclado es una operación unitaria, proceso en el cual se produce transferencia y cambio de energía y masa principalmente por medios físicos y físico-químicos (4), que se encuentra en la gran parte de procesos industriales, es difícil encontrar procesos industriales que no involucren de alguna u otra manera un proceso de mezclado, ya sea para lograr homogenización de fases, obtener reacciones químicas, realizar proceso de lixiviación, mezclado dentro de tuberías, entre otras. Este tipo de operación unitaria puede involucrar sistemas de una sola fase o de varias fases (sólido, líquidas y gaseosas) y se pueden realizar en equipos de mezclado del tipo estático o en sistemas agitados. (3)

El lograr un mezclado correcto dependerá muchas veces de una eficaz agitación o mezcla. A pesar de que agitación y mezcla se utilicen como términos similares, significan cosas distintas. Por un lado el proceso de agitación se refiere al movimiento inducido de un material en una forma específica, mientras que la mezcla simplemente es una distribución cualquier de dos o más fases inicialmente separadas (4). Un único fluido dentro de un recipiente puede ser agitado pero no será mezclado en cuanto no exista otro componente con el cual se genere una distribución en su volumen.

La palabra mezcla o mezclado, se aplica a gran cantidad de operaciones que finalmente no tienen que ver con el grado de homogeneidad de los materiales involucrados. Por ejemplo, en un caso, mezclamos arena y agua, mientras que por otro lado mezclamos arena y agua, luego de un periodo de tiempo diremos que ambos escenarios se

encuentran mezclados, sin embargo no nos estamos refiriendo al grado de mezcla relativo a ellos, es evidente que finalmente el grado de homogeneidad será diferente en ambos casos. (5)

En conclusión unas definiciones útiles y necesarias para identificar los procesos involucrados dentro del presente trabajo son las siguientes (3) :

Agitación: Es la operación por la cual se crean movimientos violentos e irregulares en el seno de una materia fluida, o que se comporte como tal, situando las partículas o moléculas de una o más fases de tal modo que se obtenga el fin pretendido en el mínimo de tiempo y con un mínimo de energía. En el caso de que no sea una única sustancia la que reciba este movimiento, sino dos o más sustancias, miscibles o no, se llamará mezcla. En ella se pretende realizar una distribución al azar de dichas sustancias o fases.

Mezclado: El término mezclado se refiere, en el contexto de la agitación, a conseguir la máxima interposición entre materiales, que pueden ser miscibles o no miscibles, para obtener un grado determinado de uniformidad entre los mismos.

Las aplicaciones más utilizadas en las industrias de procesos que requieren agitación y mezclado se pueden clasificar en ciertas operaciones unitarias básicas (6):

- Homogeneización de un fluido: mezcla de fluidos solubles, en donde se busca equilibrio del gradiente de temperatura y concentración.
- Suspensión de un sólido en un líquido: distribuir un sólido disperso en un fluido manteniendo los sólidos en suspensión, para conseguir una distribución homogénea y en algunos casos disolver los sólidos.
- Emulsión de dos fluidos insolubles: dispersar un fluido insoluble en otro para poder aumentar la superficie específica de uno de los fluidos.
- Dispersión de un gas en un líquido: dispersar un gas en un fluido.
- Intercambio de calor: favorecer e incrementar la transferencia de calor entre fluido y las superficies de los fluidos que se encuentran a distintas temperaturas.

Tabla 2. Tipos de aplicaciones utilizadas en procesos de mezclado.

Operación	Tipo Material	Ejemplos
Trasferencia de calor	Fluidos	<ul style="list-style-type: none"> • Enfriamiento / Calentamiento • Eliminación del calor de reacción • Disminución de viscosidad por temperatura.
Homogenización	Líquidos miscibles	<ul style="list-style-type: none"> • Mezcla alcohol – agua • Neutralización ácido-base • Homogenizar temperatura de fluidos • Diluir disoluciones de alta concentración • Floculación
Emulsión	Líquidos inmiscibles	<ul style="list-style-type: none"> • Extracción líquido-líquido • Polimerización
Suspensión	Líquido-sólido	<ul style="list-style-type: none"> • Cristalización • Reacciones con catalizador • Extracción de solvente

Dispersión	Líquido-gas	<ul style="list-style-type: none"> • Fermentaciones aerobias • Depuración • Ozonización • Fermentación
-------------------	-------------	--

De la tabla podemos observar que los sistemas agitadores son primordiales en la infraestructura de las industrias químicas, petroquímica, y hasta en minería.

Como mencionamos anteriormente el mezclado y agitación no significan lo mismo, por lo que hay muchas formas de lograr una mezcla sin necesidad de agitar un recipiente, lo cual se tocará en el siguiente tema. Sin embargo, el presente trabajo se enfocará finalmente en un sistema agitado.

3.2. Equipos de mezcla

En la industria existen diferentes formas de lograr el proceso de mezcla, sin embargo nos podemos limitar a cuatro configuraciones de particular interés y de mayor uso en la práctica: tuberías, mezclador en tee, mezclador estático, y tanques agitados. Como se puede ver en la siguiente figura:

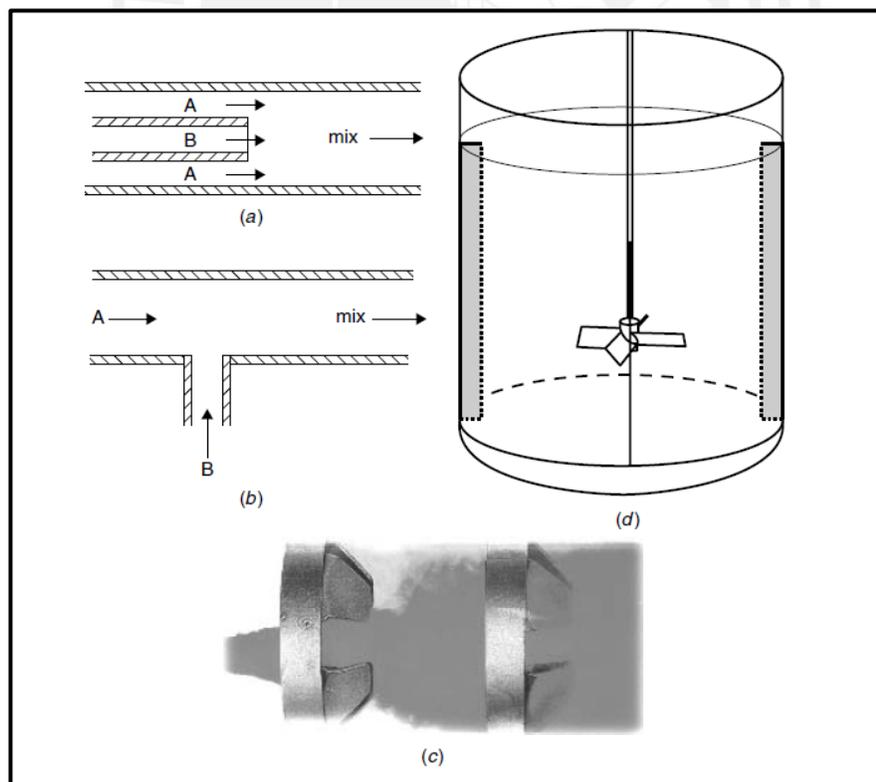


Figura 3. Diferentes equipos utilizados en procesos de agitación y mezcla. (a) mezclador en tuberías. (b) mezclador en tee. (c) mezclador estático. (d) tanque agitado. (2)

A continuación se hará una descripción de cada uno de estos tipos de configuraciones para el propósito en cuestión que es el mezclado (6).

3.2.1. Tuberías

Es el reactor químico más simple el cual es un tubo donde en un extremo ingresa una tubería inyectora de reactivos, la mezcla se va dando conforme fluyen hacia la salida del reactor tubular. Hay dos medidas de mezclas en un tubo, uno es el grado de uniformidad de la concentración media en la dirección radial y la otra es la desviación media de la fluctuación de concentraciones en varios lugares a lo largo de la tubería. El análisis de este sistema se asume que no hay distribución radial de concentración y la reacción se produce con el tiempo en su longitud. Reactores tubulares pueden operar en flujo laminar o turbulento. En el flujo laminar la difusividad radial es sólo molecular, la cual es muy lenta, en particular si la viscosidad es alta. En el flujo turbulento la fluctuación de la velocidad en la dirección radial produce la difusividad radial turbulenta que es mucho más rápida que la difusividad molecular. Muchos dispositivos se han desarrollado para promover la mezcla radial más rápida en flujo laminar, tales como mezcladores estáticos (desarrollados más adelante), ya que incluso en un flujo turbulento se puede tardar de 50 a 100 diámetros de tubo para lograr mezclando a 95% de uniformidad.

3.2.2. Mezcladores en tee

Para acortar la longitud con la que se mezcla uniformemente en un reactor de tubos, se puede usar mezcladores en tee. Este tipo de mezclador puede lograr el 95% de uniformidad a lo largo de una longitud equivalente de 3 a 5 diámetros. Este tipo de configuración es una versión simple del reactor tubular en el que se inyecta una sustancia reaccionante en un flujo del otro reactante por un lado de la tubería. Se debe tener cuidado, sin embargo, que el inyectado del reactivo permanezca adyacente a la pared de la tubería y no se mezcle con la corriente del fluido principal, lo cual puede suceder mayormente para un flujo laminar y de alta viscosidad. Otro tipo de mezclador tee involucra flujos opuestos de reactivos con salida a través de la salida lateral en un tubo de mezcla. Su uso es más frecuente para reacciones de fase líquida, por su facilidad de construcción a comparación del inyector coaxial, el cual se utiliza para reacciones rápidas en fase gaseosa tales como la combustión.

3.2.3. Mezcladores estáticos

A pesar de que estrictamente son mezcladores estáticos los tubos de inyección y los mezcladores en tee ya que no hay partes móviles en su interior; el mezclador en cuestión, se asocia más frecuentemente con dicho nombre dado que contiene desviadores de flujo internos y obstáculos que promueven la mezcla dentro de una tubería de forma más efectiva. Existen dos tipos comunes son el mezclador de cinta trenzada (Kenics KM) y el mezclador de empaque estructurado, el cual hace uso de capas de ondulaciones entrecruzadas (Koch-Sulzer SMV/SMX). Estos mezcladores son ideales en su elección

cuando se desea realizar mezcla dentro de tuberías de manera continua. Son esenciales en el régimen de flujo laminar y se establecen bien en procesos turbulentos, polifásicos y monofásicos, debido a su sencillez, su pequeño tamaño, y eficiencia en cuanto a consumo de energía. (7)

3.2.4. Tanques agitados

Hay una gran variedad de tipos de sistemas de agitación en tanques. Su aplicación se extiende desde procesos de régimen laminar hasta procesos altamente turbulentos en donde la proceso se realiza por lotes, semicontinuo y continuos. Los fluidos pueden ser de una sola fase líquida, con líquido suspendido, con catalizadores sólidos, el líquido rociado con reactantes gaseoso, líquidos con productos de vaporización (reactores de ebullición), con líquidos inmiscibles o reactores trifásicos. En este sistema de agitación se pueden dar reacciones del tipo isotérmica, endotérmicas y hasta exotérmicas en donde los reactores pueden variar en tamaño de 0,004 m³ a 10 m³ (de uno o dos galones hasta miles de galones). Pueden requerir vidrio u otros tratamientos superficiales especiales a inhibir la corrosión, y requieren una variedad de tipos de impulsor para alcanzar el éxito en todos los usos anteriormente mencionados.

En adelante profundizaremos en esta última configuración ya que el presente trabajo trata sobre el proceso de mezclado en sistemas de tanques agitados.

Un tanque agitador convencional consiste en un recipiente cerrado o abierto que generalmente es un tanque cilíndrico vertical equipado con un impulsor giratorio. Existen algunos tanques horizontales, de sección cuadrada o rectangular, que a veces se utilizan pero no son convencionales. El mezclador giratorio o agitador tiene varios componentes: un rodete o impulsor, eje, sello del eje, caja reductora, y un motor de accionamiento. En los tanques altos, el impulsor puede ser instalado desde la parte inferior para reducir la longitud del eje y proporcionar estabilidad mecánica. Existen tipos de impulsores que tienen entrada lateral o entrada a un ángulo de inclinación para almacenamiento grande de productos, en estos casos no se requiere deflectores (6). Además, para evitar zonas muertas, es decir de bajas velocidades, se suele eliminar las esquinas de la base empleando formas elípticas, cónicas, esféricas o toriesféricas decimales (Koppler), aunque en ocasiones se pueden encontrar bases planas (8).

Por otro lado, se incluyen deflectores de pared que se instalan generalmente para flujo en régimen transitorio y turbulento para evitar la rotación del fluido (remolino) que solo general mezcla axial entre la parte superior y la parte inferior del tanque. Este accesorio es una lámina colocada en el perímetro del tanque en posición vertical cuya función es impedir generación de vórtice y general turbulencias las cuales favorecen a la agitación y mezcla. Los deflectores suelen aumentar la fricción y el consumo de potencia del impulsor. Una configuración deflector estándar consta de cuatro placas verticales que tiene una anchura igual a 8 a 10% ($T/12$ a $t/10$) del diámetro del tanque. Deflectores mas cortos son utilizados a veces para sistemas de alta viscosidad, (anchura = 2% de T), o cuando se desea una pequeña turbulencia. Normalmente se utilizan de tres a cuatro deflectores sin embargo, no se suelen usar más ya que su adición no sigue afectando de manera significativa. Se puede ver en la siguiente figura un esquema común de un tanque agitado con eje superior.

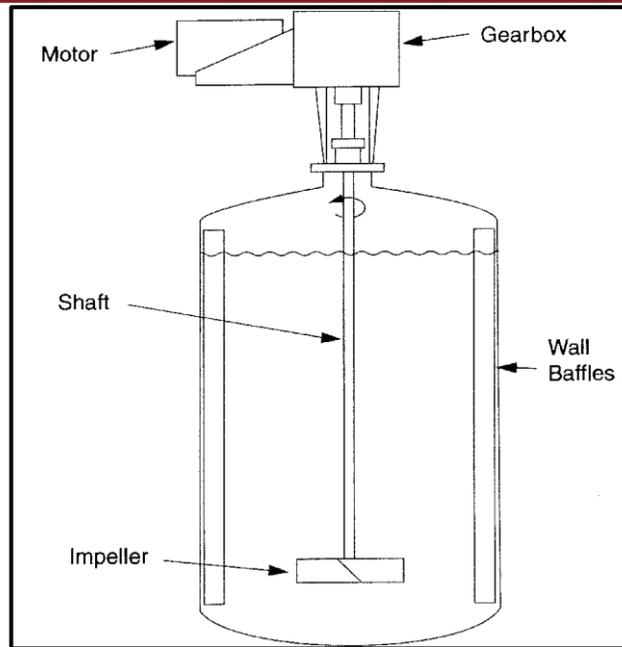


Figura 4. Esquema general de un tanque agitador con eje central montado verticalmente. (2)

3.3. Tipos de agitadores

Hay varias configuraciones para para tanques agitados dado los diferentes requerimientos de mezcla. Debido a esa variedad de necesidades de procesamiento y objetivos, se han desarrollado diferentes tipos de configuración de impulsores.

Los impulsores se pueden clasificar basados en el patrón de flujo, en las aplicaciones y en geometrías especiales. Por ejemplo, impulsores de flujo axial son eficientes para mezclar líquidos y sólidos en suspensión mientras que los de flujo radial son más utilizados para dispersión de gas. Las turbinas de paletas inclinadas planas (*pitched blade turbine PBT*) son clasificadas como de flujo axial, sin embargo se puede decir que son de flujo mixto, debido a que el flujo generado es en ambas direcciones; sin embargo por encima de una relación D/T mayor a 0.55 las turbinas del tipo PBT se convierten en impulsores de flujo radial.

La clasificación más reciente y con la que se puede aproximar mejor las aplicaciones son por la base de los patrones de flujo. La determinación del impulsor más eficaz debe basarse en la comprensión de los requisitos del proceso y el conocimiento de las propiedades físicas. En este estudio teórico nos centraremos en fluidos de baja a medio valor de viscosidad para flujos en régimen de transición y turbulencia. (6)

Hay cuatro tipos de impulsores de turbina, que se caracterizan por el patrón de flujo y el nivel de esfuerzo cortante que crean: flujo axial, flujo radial, hidroala (*hydrofoils*), y de alto corte (*highshear*). Estos tipos tienen la más amplia utilización en líquido de viscosidad baja y media. Por ejemplo en aplicaciones como: la suspensión de sólidos, líquido-líquido de emulsión, dispersión y gas.

Además de esta clasificación se puede agregar otra por forma física que tiene el agitador. Así podemos encontrar varias configuraciones como: la de los agitadores de hélice, la de los agitadores de turbina de paletas, las de los agitadores tipo ancla y la de los agitadores dentados.

Para escoger el tipo de agitador idóneo para el uso que sea necesario hay que tener en cuenta si ese proceso es flujo-controlado o tensio-controlado.

Los procesos tensio-controlados son aquellos que necesitan una buena circulación en todo el recipiente, como por ejemplo una transferencia de calor o una mezcla. En cambio los procesos flujo-controlados necesitan tener una gran turbulencia, por ejemplo para favorecer la dispersión en una transferencia de masa. Así en los procesos tensio-controlados se deberá escoger un agitador del tipo hélice o turbina mientras que en los procesos flujo-controlados se deberá coger un agitador de disco dentado. (3)

Los impulsores pueden tener desde 2 a 12 número de alabes, sin embargo dos alabes normalmente son inestables mecánicamente, mientras que a partir de seis la instalación se vuelve más complicada. Por lo general los impulsores de flujo axial tienen de 3 a 4 palas y los rodetes radiales se diseñan con 6 alabes.

3.3.1. Impulsores de flujo axial

Se utilizan para la mezcla, suspensión de sólidos, la incorporación de sólidos, inducción de gas, y transferencia de calor. El impulsor más antiguo de flujo axial es la hélice marina, que se utiliza a menudo como un mezclador con ingreso lateral en grandes tanques y con ingreso superior en tanques pequeños. Se puede diseñar con un paso diferente de alabe para cambiar la combinación de bombeo y potencia. Debido a su fabricación por moldeo, una hélice se vuelve muy pesada cuando es grande.

Una turbina de palas inclinadas o PBT consiste en un cubo con un número par de cuchillas atornilladas o soldadas en él. Las palas pueden estar en cualquier ángulo entre 10 y 90 ° respecto a la horizontal, pero el ángulo de la hoja más común es de 45 grados. El flujo de descarga de una PBT tiene componentes de velocidad tanto axial como radial en líquidos de baja a media viscosidad, y se considera un impulsor de flujo mixto.

Como se ha explicado anteriormente los agitadores axiales se caracterizan por generar una dirección de flujo axial. Por tanto la circulación que se crea sigue el siguiente camino: el flujo pasa a través del agitador, llega al fondo del tanque, sube hacia arriba por la pared vertical del tanque, se acerca al eje y vuelve a bajar a través del agitador completándose el ciclo. Este tipo de agitadores dan una circulación más alta con más caudal por unidad de potencia que los agitadores radiales, por tanto son más adecuados para los procesos tensio-controlados como la mezcla de líquidos miscibles. (3)

3.3.2. Impulsores de flujo radial

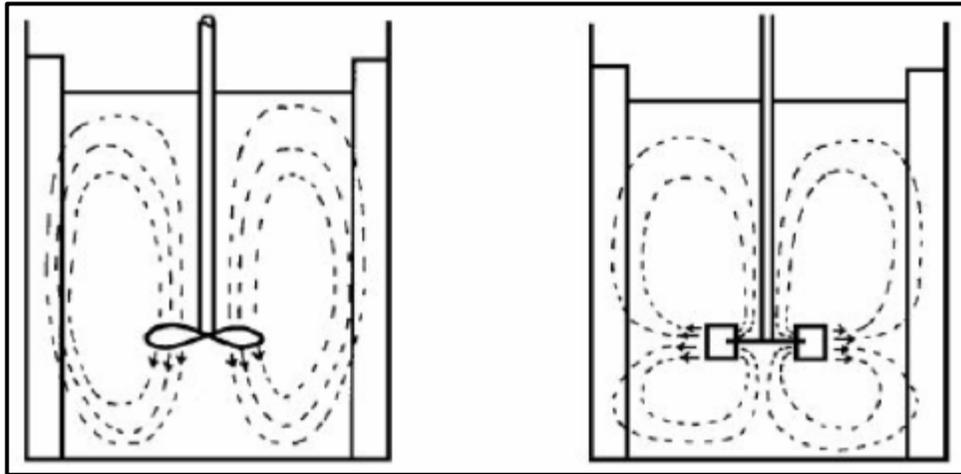


Figura 5. Esquema de patrones de flujos axiales y radiales.

Tal como los impulsores de flujo axial, los impulsores de flujo radial se utilizan para fluidos de baja a media viscosidad. A pesar de que se puede utilizar para cualquier tipo de mezcla de una y múltiples fases, son más eficaces para dispersión de gas-líquido y líquido-líquido. En comparación con los impulsores axiales, los radiales proporcionan mayor corte y niveles de turbulencia con un menor bombeo. La descarga del flujo radial del impulsor es en dirección radial hacia la pared del tanque.

Este tipo de agitadores descargan el flujo perpendicularmente a la dirección del eje de rotación. Crean un patrón de flujo característico, formando dos zonas de recirculación diferenciadas, una encima del agitador y la otra por debajo de éste.

En este tipo de agitadores se suelen crear zonas de elevada turbulencia alrededor del rodete. Por este motivo, estos agitadores son adecuados para procesos "tensio-controlados", como homogeneización, transferencia de calor, trituración, etc. Generan un flujo radial para cualquier número de Reynolds y proporcionan alta velocidad tangencial aunque baja capacidad de bombeo.

En la mayoría de los procesos industriales de mezclado, sin embargo, se busca una capacidad de impulsión lo mayor posible, mientras que la velocidad tangencial no constituye un factor de importancia. Por ello, este último agitador no es de uso extendido en la industria, siendo los más utilizados los denominados "de alta eficacia" (*hydrofoil*), que maximizan el flujo y minimizan la velocidad tangencial (8)

Los impulsores de flujo radial o bien pueden tener un disco (Rushton turbina) o estar abierto (FBT) y puede tener ya sea cuchillas planas o curvas (*backswept*). Sin el disco normalmente no bombean en una dirección radial real dado que hay una diferencia de presión entre cada lado del impulsor

Los impulsores de disco proporcionan un patrón de flujo radial más uniforme. Además, permite la adición de un gran número de álabes al rodete. La turbina de Rushton está construida con seis hojas verticales en el disco. Las dimensiones relativas estándar son:

un largo $D/4$, un ancho hoja $D/5$, y los diámetros de disco de 0.66 y 0.75D. La turbina backswept tiene seis hojas curvas con un número de potencia 20% menor que la turbina de Rushton. La naturaleza de los alabes del impulsor backswept evita la acumulación de material en las palas. Es también menos susceptible a la erosión. Las aplicaciones típicas incluyen los residuos en general y procesamiento de fibras en industrias de la celulosa y el papel. El impulsor helicoidal o tipo resorte fue desarrollado para sistemas en los que con frecuencia sólidos se depositan en el fondo del tanque. Cuando se entierran estos sólidos un impulsor de resorte es capaz de excavar dentro de estos in romper una paleta impulsora.

3.3.3. Impulsores hidroala (hydrofoil)

Los impulsores tipo hidroala (*hydrofoil*) se desarrollaron para aplicaciones donde el flujo axial es importante y se desea bajo cizallamiento. Tienen tres o cuatro cuchillas, que son de forma comba y en ocasiones fabricado con bordes de ataque redondeados. La forma de su alabe produce una velocidad más uniforme a través del área de descarga, obteniendo como resultados en un número menor potencia y mayor caudal por unidad de potencia que con una turbina de álabe inclinado. El patrón de flujo esta mas alineado en la dirección del bombeo, y los vórtices no es tan fuerte como en los de la turbina de álabe inclinado PBT.

3.3.4. Impulsores de alta cizalla (highshear)

Son operados a alta velocidad y se utiliza para la adición de una segunda fase (por ejemplo, gas, líquido, polvo sólido) en la molienda, la dispersión de pigmentos, y fabricación de emulsiones. Estos impulsores dispersantes tienen bajo bombeo y por lo tanto a menudo se utilizan junto con impulsores de flujo axial para proporcionar tanto la distribución homogénea y alta cizalla.

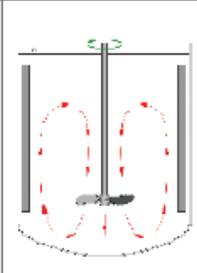
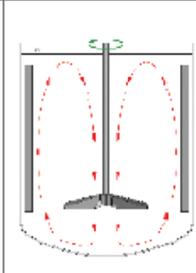
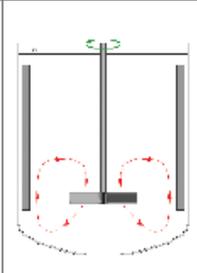
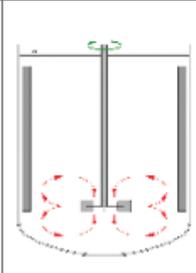
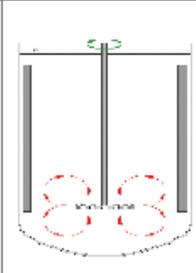
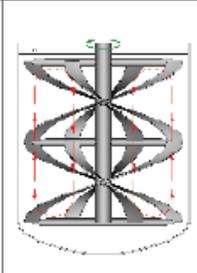
Hélice Propeller	Hidrofoil Hydrofoil	Turbina axial Pitched blade turbine	Turbina radial Radial turbine	Cowles Disperser disc	Cinta helicoidal Helical ribbon
					
axial axial	axial axial	axial y radial axial and radial	radial radial	radial radial	axial axial

Figura 6. Patrones de flujos dado por diferentes impulsores. (39)

3.4. Parámetros característicos en agitadores

Estos parámetros son relaciones empíricas que sirven para estimar ciertas características del tanque agitador en cuestión. Los siguientes números adimensionales caracterizan los impulsores descritos en la anterior sección, estos valores adimensionales son: Numero de potencia, numero de caudal, efectividad de bombeo, numero de Reynolds de mezclado, numero de Froude. A continuación haremos una breve descripción de cada uno de ellos:

3.4.1. Número de Reynolds de mezclado

El número de Reynolds representa una medida de la magnitud relativa de los esfuerzos inerciales con respecto a los esfuerzos viscosos. Si los esfuerzos inerciales dominan respecto los esfuerzos viscosos se dice que el flujo no puede ser laminar. La pérdida de laminaridad se la denomina simplemente turbulencia.

$$Re = \frac{N D^2 \rho}{\mu}$$

3.4.2. Número de Froude

Es la relación entre la fuerza de inercia de mezclado y la fuerza de gravedad, definido como: El número de Froude es importante en situaciones donde existe la formación de vórtice en la superficie del líquido y puede ser despreciado generalmente cuando el número de Reynolds es menor a aproximadamente 300. Para números de Reynolds más altos, los efectos del número de Froude son eliminados con el uso de deflectores o de agitación excéntrica.

$$Fr = \frac{DN^2}{g}$$

3.4.3. Potencia de la agitación

Para el diseño del tanque de agitación es fundamental conocer la potencia que se requiere suministrar al impulsor para lograr el grado de mezclado requerido. La potencia, P , se puede calcular mediante dos formas distintas; según si la potencia se entiende como la potencia disipada por el fluido en movimiento o si se entiende como la potencia aportada al sistema mediante el eje del agitador:

La potencia disipada por el fluido en movimiento se define como:

$$P = \int_V (\mu \phi_V + \rho \varepsilon) dV$$

Donde $P = \int_V (\mu \phi_V) dV$ corresponde a la pérdida de energía por rozamiento viscoso y $P = \int_V (\rho \varepsilon) dV$ corresponde a la energía disipada por la turbulencia. La potencia aportada al sistema mediante el eje del agitador se define como:

$$P = T \omega$$

donde T es el momento torsor en el eje del agitador y ω es su velocidad angular. En este estudio se ha optado por calcular la potencia siempre según la aportada al sistema mediante el eje del agitador debido a un post-procesado más sencillo en comparación con la otra opción.

3.4.4. Número de Potencia

El número de potencia es un número adimensional que da una idea de la cantidad total de potencia necesaria para el funcionamiento del agitador.

La presión característica en un sistema de agitación es la concentración de energía cinética que proporciona el impulsor, definida como:

$$p' = \rho v^2 \propto \rho N^2 D^2$$

La relación entre la caída de presión alrededor de un aspa o paleta y la presión característica, define el Número de Potencia, importante en la caracterización de la agitación y la determinación de los requerimientos de potencia, el cual representa la relación entre la fuerza suministrada al sistema y la fuerza de inercia.

$$N_p = \frac{(p - p_0)}{p'} = \frac{P}{\rho N^3 D^5}$$

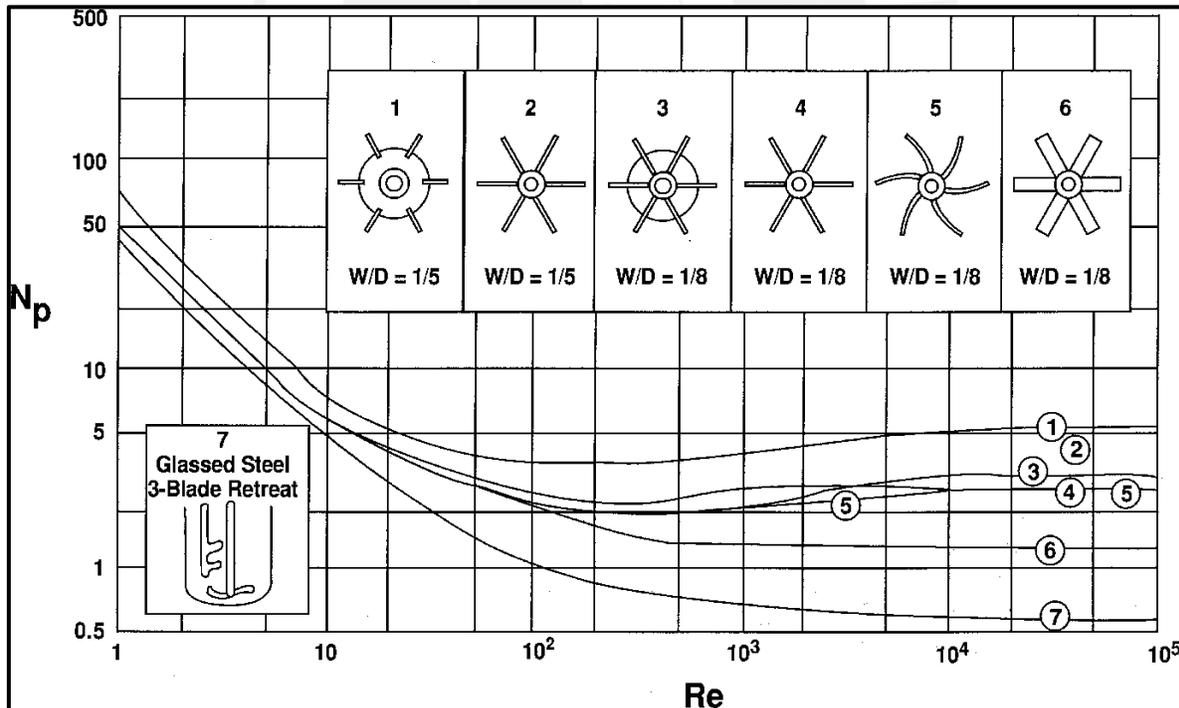


Figura 7. Curva experimental del número de potencia vs Reynolds utilizando diferentes impulsores. (2)

3.4.5. Caudal vehiculado

Se define como la cantidad de material líquido que sale en la descarga por la región del rotor del impulsor por unidad de tiempo. Esta cantidad es una característica importante del proceso y desempeña un papel importante cuando se calcula el tiempo de mezclado. El cálculo de este parámetro dependerá tanto de las características del agitador (si es axial o radial) como de los límites de integración que quieran ser impuestos.

3.4.6. Número de Caudal

El número de caudal o capacidad de bombeo es un número adimensional que da una idea del caudal (Q) que atraviesa el plano del agitador.

La capacidad de bombeo de un impulsor se puede expresar de forma adimensional relacionándola con el flujo volumétrico característico del tanque de agitación,

$$q' = ND^3$$

Dando como resultado el número de bombeo o número de flujo:

$$N_q = \frac{Q}{ND^3}$$

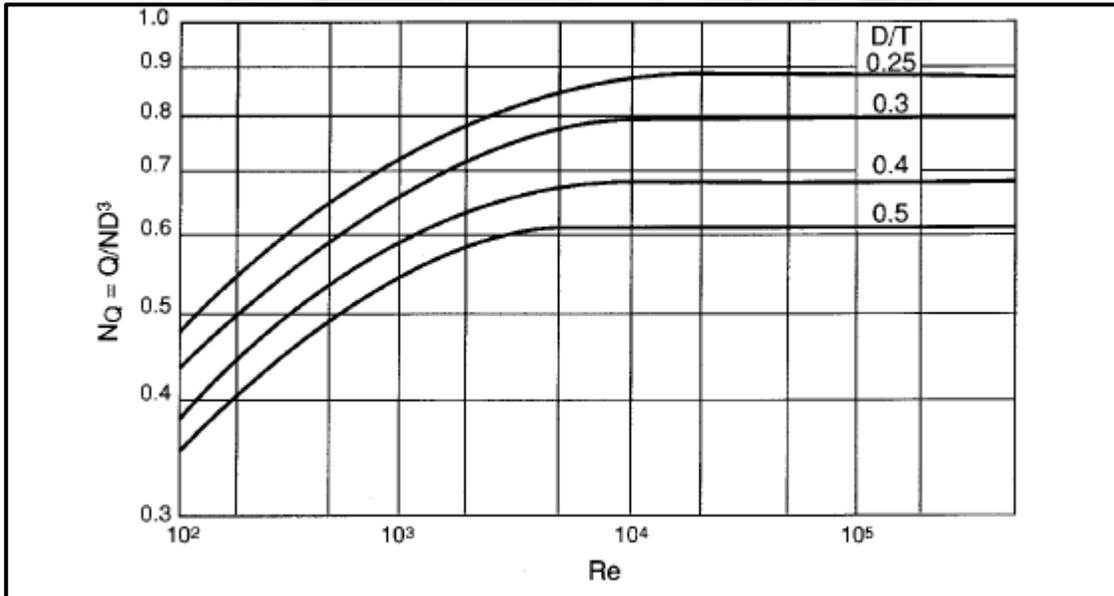


Figura 8. Curva experimental del número de caudal vs Reynolds para impulsor tipo PBT. (2)

3.4.7. Efectividad (η)

La efectividad (η) es el cociente entre el número de caudal (N_Q) y el número de potencia (N_P). Su interpretación física es el caudal entregado por unidad de potencia consumida.

Como es el resultado del cociente de dos números adimensionales, y por tanto adimensional, se puede utilizar para comparar diferente tipo de agitadores. Su fórmula es la siguiente:

$$\eta = \frac{Nq}{Np}$$

Cuanto mayor sea este parámetro mucho mejor porque significa que el agitador está expulsando hacia las paredes (en el caso de agitadores radiales) gran cantidad de fluido sin consumir demasiada potencia.

3.4.8. Tiempo de mezclado

Es el tiempo requerido para lograr algún grado especificado de uniformidad después de la introducción de un agitador. Algunos métodos experimentales para calcular el tiempo de mezclado son: toma sencilla, introducción de tinta, celda de conductividad, indicador ácido-base, etc. Estos métodos miden el tiempo de mezclado de diferentes maneras, por lo que el tiempo obtenido puede variar de un método a otro. Por esto, además de la dificultad de observar experimentalmente el grado de uniformidad, está sujeto a la buena manipulación y habilidad del investigador. Aquí, la simulación por computadora utilizando técnicas de CFD puede ser de gran ayuda y en principio puede sustituir la experimentación completamente, logrando obtener resultados más rápidos, baratos y sencillos, necesitando solamente la validación de los resultados numéricos. Cuando los efectos de la gravedad son despreciables, el tiempo de mezclado adimensional $t_b * = t_b N$ es una función del número de Reynolds como sigue

$$t_b * (D/T)^n = f(Re)$$

Para los casos extremos (región viscosa, $Re < 20$ ó región turbulenta, $Re > 10,000$), los números adimensionales presentados arriba son prácticamente independientes del número de Reynolds. Para Reynolds intermedios ($20 < Re < 10,000$) estos parámetros adimensionales dependen fuertemente del número de Reynolds (9)

3.5. Grado de homogeneidad de mezcla

La medida del grado de mezcla en mezcladores normalmente suele ser mediante el uso de parámetros estadísticos que tienen en consideración ciertos valores de mezcla como la fracción de masa, entre otros.

En mezcladores estáticos por ejemplo, se considera la sección transversal de la tubería como zona de medición de estos valores. Así pues, inicialmente la sección está completamente segregada en dos zonas, una ocupada por cada fluido o reactantes. La mezcla se produce, las áreas se entremezclan. Cuando esto ocurre se produce la mezcla y podemos describir el proceso mediante la estimación de la cantidad de cada uno. En este caso, se suele dividir o tomar diez puntos de medición los cuales cuantifican la fracción de masa y la desviación estándar entre estas mediciones. Además existe una normalización de la desviación estándar dividida entre la media dando un parámetro llamado el coeficiente de variación (Cv) (6).

$$Cv = \frac{\text{Desviacion estandar de concentracion}}{\text{Concentracion media}}$$

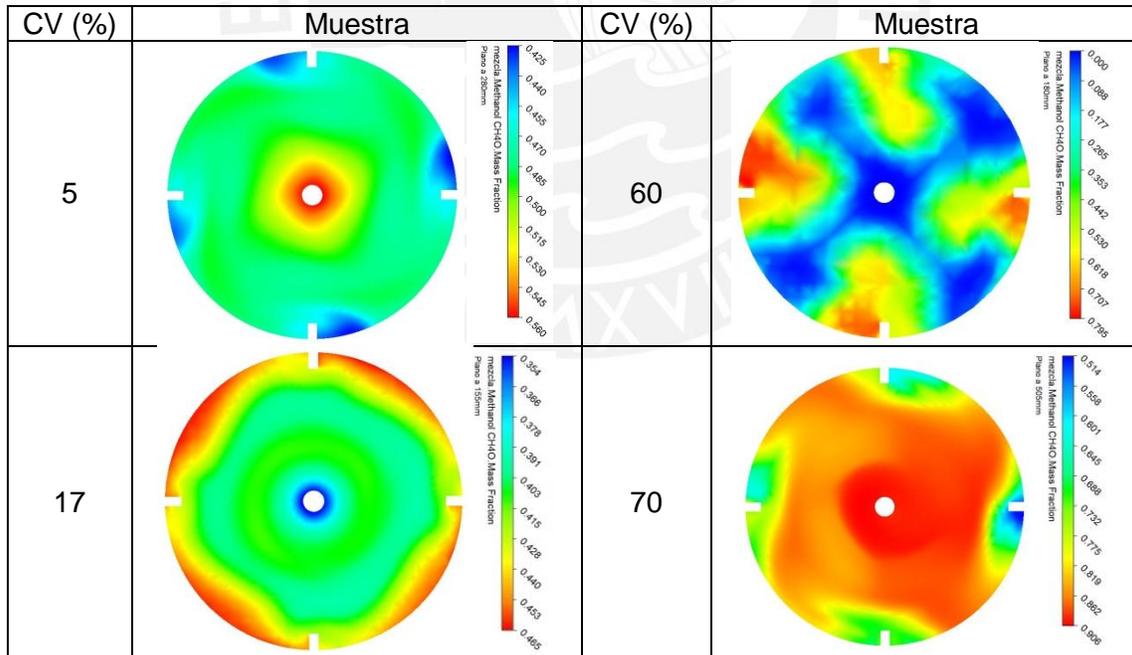
En cuanto a la caracterización de mezclado de gases existe una medición de velocidades locales y también se suele aplicar el coeficiente de variación con respecto a las velocidades de los gases además existe un coeficiente llamado índice de mal distribución (Cv / Cm). En donde Cv y Cm tiene la siguiente expresión (10):

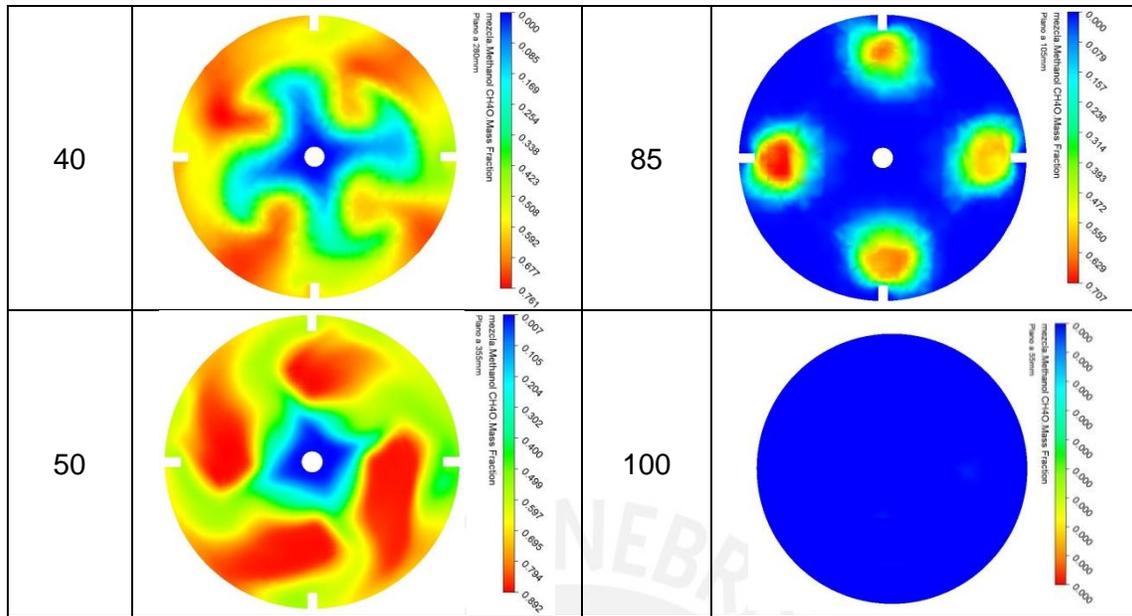
$$Cv = \left[\frac{1}{A_t} \sum_{i=1}^N A_i \left(\frac{u_i - \bar{u}}{\bar{u}} \right)^2 \right]^{0.5}$$

$$Cm = \left[\frac{1}{A_t} \sum_{i=1}^N A_i \left(\frac{u_i - \bar{u}_i}{\bar{u}_i} \right)^2 \right]^{0.5}$$

La manera de medir el grado de homogeneidad en un agitador es algo diferente debido a que no existe una entrada o salida para lo cual en el presente trabajo se extrapolo las diversas formas de caracterización de mezcla en otros sistemas de mezclado y se utilizó una metodología propia la cual demostró en este estudio tener buena forma de caracterización del mezclado, tal como se muestra en la siguiente figura:

Tabla 3. Coeficiente de variación como medida de grado de mezcla





Por lo que se optó por caracterizar la mezcla en el volumen de control calculando los parámetros de caracterización en varias secciones transversales del agitador en un número N de planos tal como se muestra en la figura. Los parámetros utilizados para cuantificar la homogeneidad en cada plano son las siguientes expresiones:

$$CV \% = \frac{\text{Desviación estandar}}{X} = \frac{s}{X}$$

$$s = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (C_i - X)^2 \right]^{0.5}$$

Donde s es la desviación estándar, C_i es la fracción de masa, y X es la fracción mezcla ideal, es decir la fracción del reactante con respecto al total inicial que ingresa al sistema agitado (a y b son las cantidades en volumen):

$$X = \frac{a}{a + b}$$

Como se puede ver, este CV depende de la cantidad inicial de reactantes en la mezcla. Se utilizó estos parámetros como funciones objetivas de salida, donde se busca minimizar la fracción de masa en los diversos planos transversales y su coeficiente de variación a lo largo del agitador. Además se utilizó el promedio de los CV a lo largo de estos planos:

$$Prom CV = \frac{CV \%}{N}$$

Donde N es el número de planos considerados por el nivel de líquido.

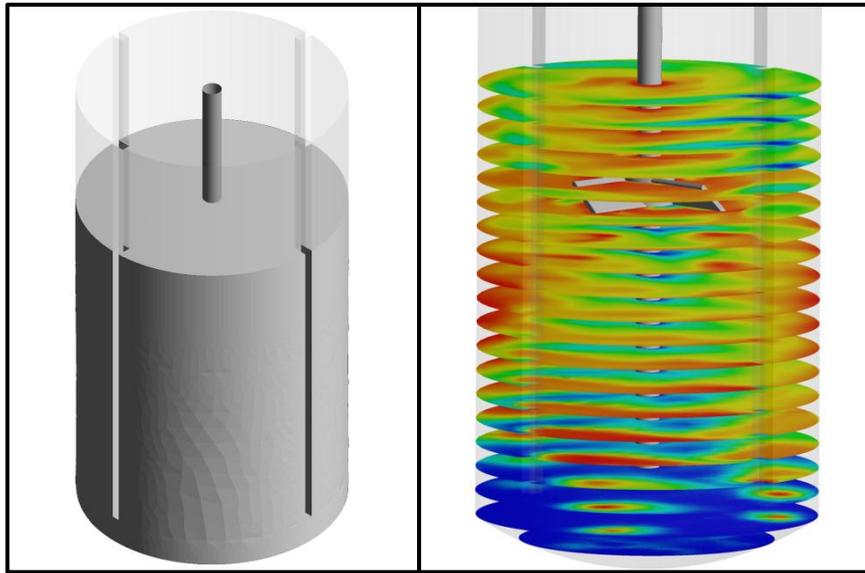
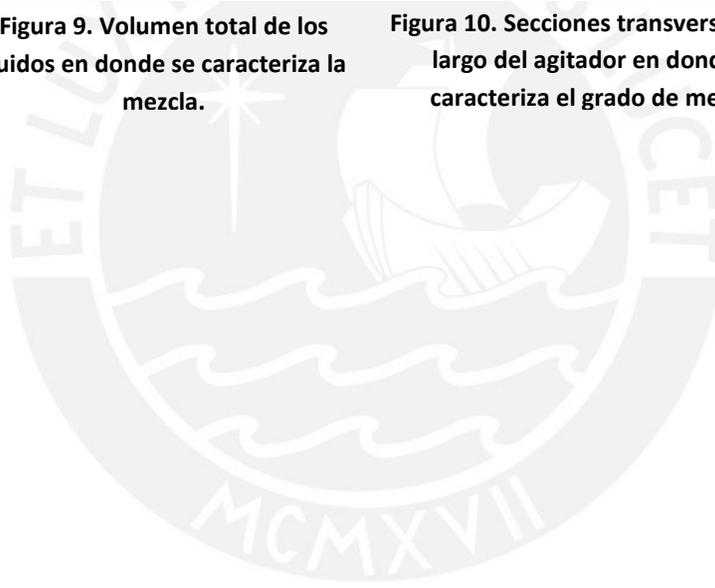


Figura 9. Volumen total de los fluidos en donde se caracteriza la mezcla.

Figura 10. Secciones transversales a lo largo del agitador en donde se caracteriza el grado de mezcla.



CAPITULO 4: CONCEPTOS DE OPTIMIZACION

4.1. Introducción

La optimización es un proceso complejo dentro de cualquier aplicación y más aún cuando se trata de un diseño de ingeniería. Se trata de escoger la mejor opción dentro de una gama de posibilidades. El reto está en que la solución elegida no sea una mejora, es decir una opción que es mejor en comparación con otra, y también en qué camino seguir para llegar a lo óptimo, es decir la opción que es mejor entre todas las otras posibles.

Con la optimización se busca pasar de la metodología tradicional del diseño y acercarnos al diseño de soluciones optimizadas. La primera consiste en tener una configuración o diseño inicial, luego evaluarlo o ponerlo en marcha, posteriormente se realiza una evaluación de los resultados de desempeño y finalmente una modificación del diseño si fuera necesario mejorar. Mientras que acercarnos a la optimización significa en diseñar modelos paramétricos es decir modelos variables en un rango, tener objetivos de diseño y obtener una serie de puntos de respuesta que nos permita seleccionar la mejor opción frente a todo el campo de posibilidades dadas por esa variación del modelo. (11)

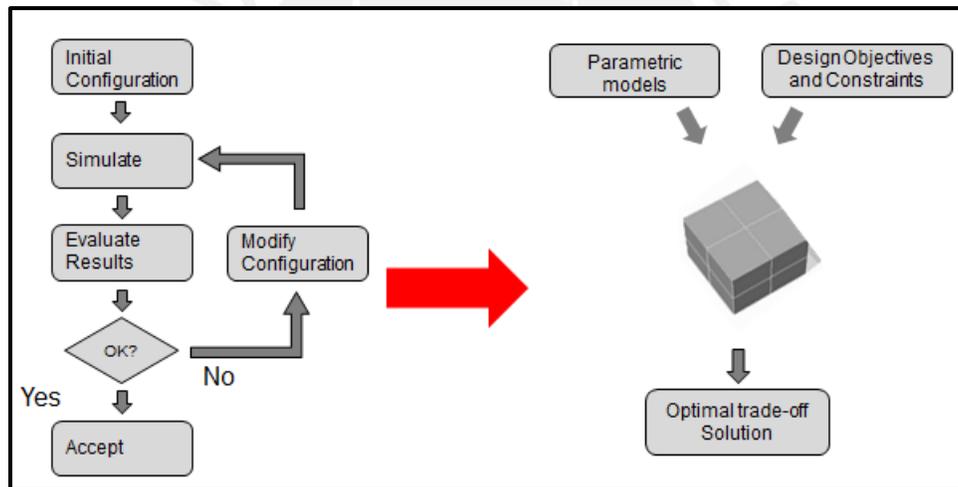


Figura 11. Esquema de las diferencias entre realizar una mejora y una optimización (11)

Realizar este proceso es matemáticamente complejo, sin embargo, en líneas generales para entender este proceso se necesita establecer ciertos conceptos importantes que son parte de toda optimización (1):

- **Parámetros de entradas:** Define el modelo a optimizar, pueden cambiar dentro de un rango de valores y pueden ser clasificadas como variables continuas o discretas. (modelo paramétrico)
- **Caja negra:** El cual es una serie de procesos, en este caso solucionadores matemáticos, que modelan y resuelven el fenómeno del problema. Al final obtenemos una serie de experimentos que producen una serie de datos importantes. Por ejemplo, este puede ser una herramienta de ingeniería para el diseño como la utilizada en este proyecto.

- **Parámetros de salida:** Respuestas obtenidas de la caja negra que describen el comportamiento del modelo y que son soluciones obtenidas de la caja negra.
- **Objetivos:** Lo que se desea lograr. Es analizado en el campo de los parámetros de salida.
- **Restricciones:** Son límites del campo de solución de la optimización, aplicado directamente de parámetros de entrada o salida.

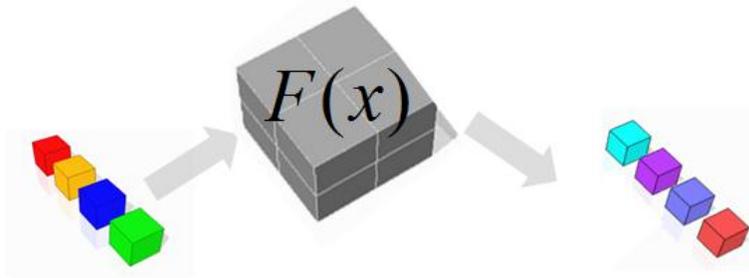


Figura 12. Esquema general en una optimización – Parámetros de entrada, caja negra y parámetros de salida (1)

Además es importante definir dos tipos de optimización respecto a los objetivos:

- Optimización simple: la cual busca la mejor opción teniendo como objetivo solo un parámetro, como por ejemplo reducir el espesor de una plancha, o reducir el esfuerzo resultante. Acá se obtiene solo un punto óptimo de solución (1).

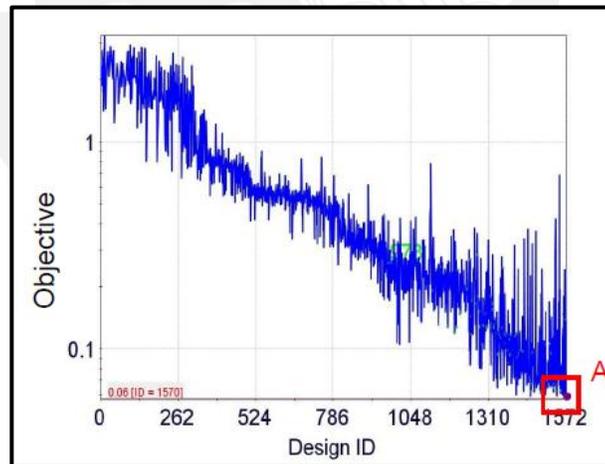


Figura 13. Grafica de una optimización con una sola función objetivo. (1)

- Optimización multi-objetivo: Mientras que por otro lado se tiene la optimización multi-objetivo, la cual busca la mejor opción con respecto a dos o mas funciones objetivo simultáneamente lo cual nos da como solución no solo un punto óptimo, sino un campo de óptimos puntos. A estos puntos de solución se le llama soluciones de Pareto o frontera de Pareto (1), mientras que a los puntos óptimos dentro de estas soluciones se le llaman Pareto óptimo:

- **Soluciones de Pareto:** Se compone de todas las soluciones no dominadas, es decir que no dependen de otra función objetivo, dentro de un dominio de las variables consideradas.
- **Pareto óptimo:** Se define como el vector variable de puntos solución $x^* \in F$ es Pareto óptimo si es que no existe otro punto $x \in F$ tal que $f_i(x) \leq f_i(x^*)$ para todo $i=1, \dots, k$ y $f_j(x) < f_j(x^*)$ para al menos un j (12)

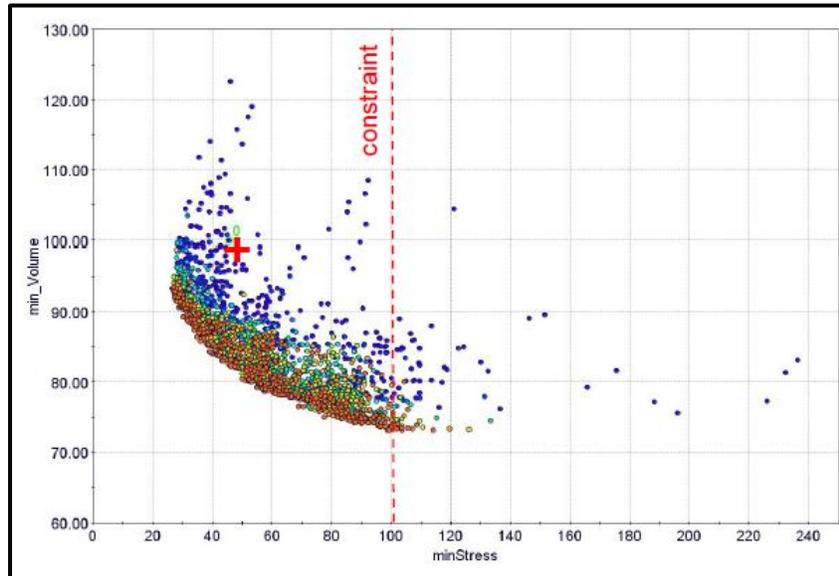


Figura 14. Grafica de la frontera de Pareto en una optimización multi-objetivo. (1)

Para lograr una optimización se necesitan desarrollar ciertos pasos fundamentales y posteriormente poder aplicar cierto método para aproximar o realizar la búsqueda del diseño más óptimo. En general, para la optimización normalmente se toma como base una gama de diseños posibles, y se considera como un gran número de candidatos de la familia en donde se trata de escoger la mejor. Al hacer esto, está llevando a cabo tres operaciones (13):

- 1) Selección de los candidatos, especificado por un conjunto de variables de diseño.
- 2) Generación de los diseños de experimentos (DOE): Generación de la información detallada necesaria.
- 3) Diseño de la superficie de respuesta (RSM)
- 4) Ejecución de la optimización: Evaluación del diseño en términos de los criterios utilizados para decidir cuál es el mejor. Se puede realizar basado en algoritmos específicos de optimización o en la aproximación de la interpolación dada por la superficie de respuesta.

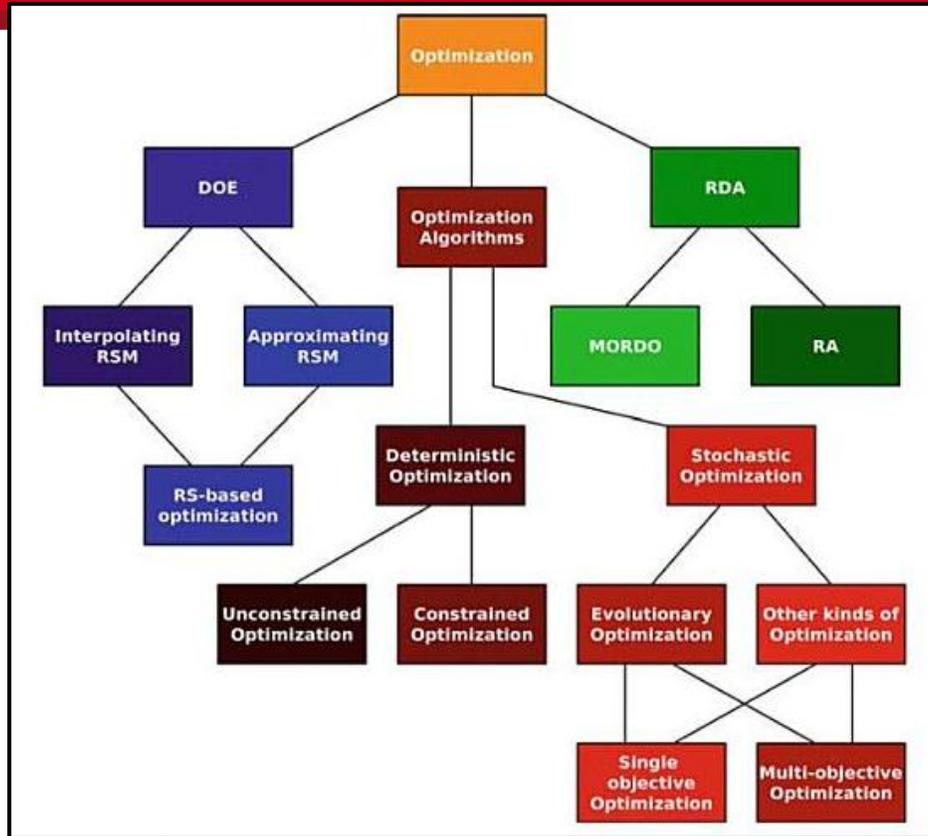


Figura 15. Cuadro esquemático general de los tipos y métodos de optimización. (13)

4.2. Diseño de Experimentos (DOE)

El método *Design of Experiments* (DOE de ahora en adelante) se originó inicialmente con el fin de maximizar el conocimiento obtenido a partir de datos experimentales. Antes el enfoque tradicional era poner a prueba uno de los factores a la vez. Durante la fase experimental, el primer factor se mueve mientras los demás factores se mantienen constantes, luego otro factor se examina, y así sucesivamente. Con estas técnicas antiguas, se necesitaba realizar muchas pruebas para obtener suficiente información, lo cual no es posible en muchos casos. El método DOE supera a estas técnicas, ya que considera todas las variables simultáneamente, cambiándolas al mismo tiempo y obteniendo la información más relevante con el mínimo esfuerzo. (13)

A partir de entonces, DOE es una metodología importante que maximiza el conocimiento del comportamiento experimental, usando puntos inteligentemente posicionados en el espacio de estudio. Esta metodología provee una herramienta potente para diseñar y analizar experimentos, eliminando redundancias y reduciendo tiempo y recursos para hacer los experimentos.

En general, podemos decir que una buena distribución de puntos hechos con la técnica del DOE puede extraer mucha información sobre el sistema, con la menor cantidad de datos posible. Idealmente, una serie de puntos hechos con un método DOE apropiado debe tener una buena distribución de los parámetros de entradas, lo que quiere decir que deben tener una baja correlación entre ellos, ya que si tienen una correlación alta

estaríamos aprendiendo muy poco acerca de otros campos de acción de otros parámetros de entrada y por lo tanto de aquellas parte del sistema en análisis. (1)

La selección de un diseño adecuado para construir la función aproximada es clave para modelar la superficie de respuesta basada en un conjunto de datos recogidos en los puntos de diseño. Es por eso que como se mencionó anteriormente se requiere que los puntos o conjunto de datos recogidos del DOE tengan ciertas características de acuerdo al interés del experimento a modelar, como por ejemplo:

- Realizar una distribución adecuada de puntos que entregue la mayor información posible de la región con el menor número posible de datos.
- El valor ajustado de la función f este lo más cerca de la función real para cada punto x obtenido.
- Permitir una estimación de la varianza del error

Además, sería conveniente elegir un modelo que fuera ortogonal o invariante por rotación, los cuáles se definen como:

Un diseño ortogonal es aquel en donde los términos del modelo ajustado no tienen correlación y por lo tanto las estimaciones de los parámetros también lo son. La varianza de la respuesta esperada en cualquier punto de la región experimental se puede expresar como la suma ponderada de las varianzas de los parámetros estimados en el modelo.

En un diseño invariante por rotación la varianza de la función aproximada, que depende de x , es función solamente de la distancia del punto al centro del diseño, lo que significa que es la misma en todos los puntos equidistantes al centro. Esta propiedad resulta interesante puesto que garantiza que el diseño proporciona estimaciones igualmente precisas en todas las direcciones. (14)

Para realizar el método DOE existen diversas técnicas que pueden construir puntos para la exploración del espacio de un diseño. Es importante evaluar los diferentes algoritmos de generación del DOE para poder obtener buena información del comportamiento del sistema. Los algoritmos generales para generación del DOE pueden ser (15):

- Elegidos por usuario: Basado en la experiencia previa del usuario
- DOEs de exploración, útiles para obtener información acerca del problema. Estos métodos entregan buenos puntos para la configuración del espacio. Puede servir como punto de partida para el siguiente paso de la optimización. Estos son: *Random sequence, Sobol, Latin Hypercube, Monte Carlo, Cross-Validation*
- DOEs factoriales, son una larga familia de técnicas esenciales para realizar buenos análisis estadísticos de un problema, estudiando las principales y las mayores interacciones entre variables. Estos son: *Full Factorial, Reduced Factorial, Cubic Face Centered, Box Behnken, Latin Square*
- DOEs Ortogonales, útiles cuando el propósito es identificar los principales efectos y cuando las interacciones son insignificantes. Estos son: *Taguchi matrix, Plackett Burman*.
- DOEs especiales, perfectos para tareas particulares dentro del plan del diseño y cuando los otros métodos no se aplican. Estos son: *D-Optimal, Constraint Satisfaction problem*.

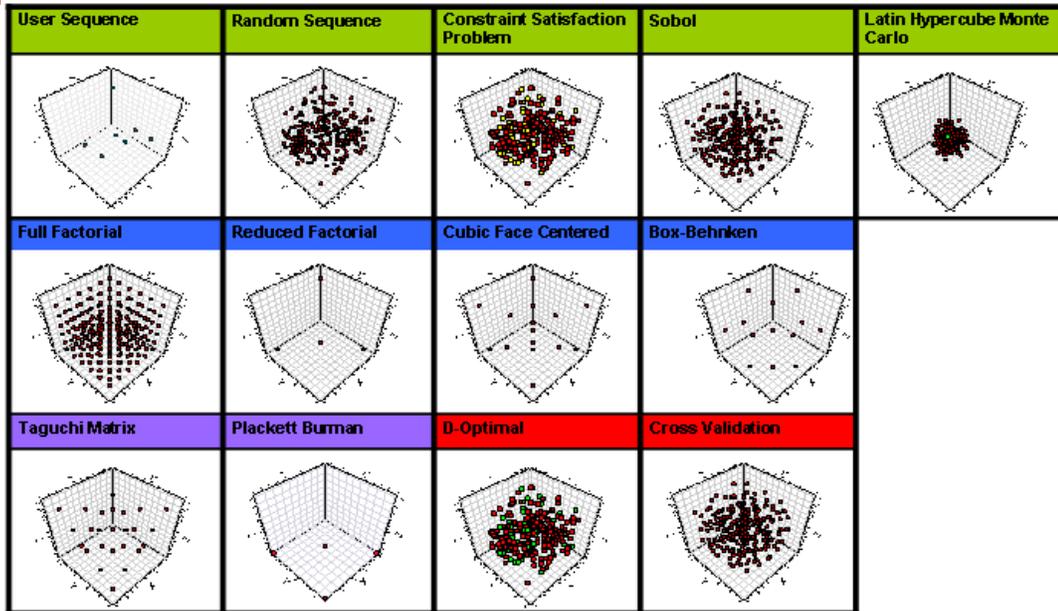


Figura 16. Cuadro comparativo entre los diferentes diseños de experimentos (15)

Los modelos clásicos para el ajuste de aproximación de la superficie de respuesta más usados frecuentemente son los metamodelos de primer y segundo orden. A los DOE apropiados y recomendados para aplicar dichos metamodelos se les llama diseños de primer y segundo respectivamente. Una de las características más importante de los DOE para estos modelos es la cantidad de elementos “n” necesarios para obtener la respuesta del sistema, ya que esto define el tiempo requerido en la obtención de datos, y por ende el costo computacional.

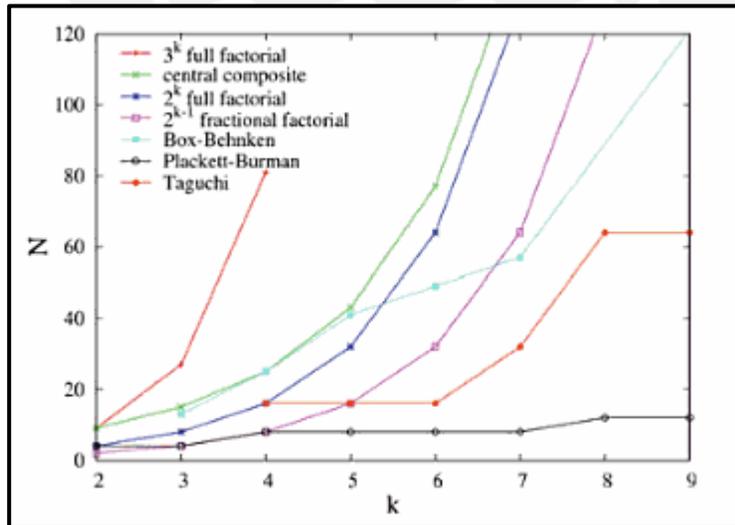


Figura 17. Grafica de la cantidad de experimentos a realizar en función de los parámetros de entrada variables. (14)

4.2.1. Diseños de primer orden

En este tipo de diseños se desea la ortogonalidad. Los diseños más comunes de primer orden son los 2^k factorial (k es el número de las variables controladas), Plackett-Burman, Simplex (16):

Diseño 2^k factorial: Para construir un modelo de aproximación que capture las interacciones entre N diseños variables, un diseño factorial puede ser necesario para investigar todas las posibles combinaciones. Un diseño factorial es una estrategia en donde cada variable de diseño varían en conjunto. En este tipo de diseño para cada factor se tienen dos niveles, que se codifican en los valores $+1$ (para el más alto) y -1 (para el más bajo). Considerando todas las posibles combinaciones de los niveles de los k factores se obtiene la matriz de diseño 2^k filas. El inconveniente es que no permite la estimación del error experimental.

Diseño simplex: Es un diseño con $n = k + 1$ puntos. Sus puntos de diseño son colocados en los vértices de forma regular ($k + 1$ vértices) y k dimensiones. Para un $k=2$ la figura geométrica es un triángulo, y para $k=3$ es un tetraedro.

Diseño Plackett-Burman: Este diseño permite dos niveles para cada variable k tal como un diseño 2^k factorial, pero requiere menos número de datos experimentales especialmente si es k es grande, por lo tanto es un diseño más económico. El número de diseños es igual a $k+1$. Este diseño solo se puede usar cuando el número de puntos de diseño son múltiplos de 4, lo que quiere decir que las variables deben ser igual a $4k-1$.

4.2.2. Diseños de segundo orden

Es un diseño que debe tener al menos tres niveles de cada factor ($-1, 0, 1$). Además se desea que tenga rotabilidad ya que permite estimaciones precisas en todas las direcciones. El número de parámetros deben ser al menos $p = 1 + 2k + \frac{1}{2} k(k-1)$. Los diseños más comunes son: 2^k , central compuesto y Box-Behnken.

Diseño 3^k factorial: Consiste en la combinación de los niveles de las k variables las cuales tienen tres niveles cada una. Cada nivel esta igualmente espaciado. El número de experimentos para este diseño son 3^k , lo cual es costoso para valores de k altos. Presentan el inconveniente que no son invariantes por rotación lo que hace que no sean buena elección para diseños de segundo orden (17)

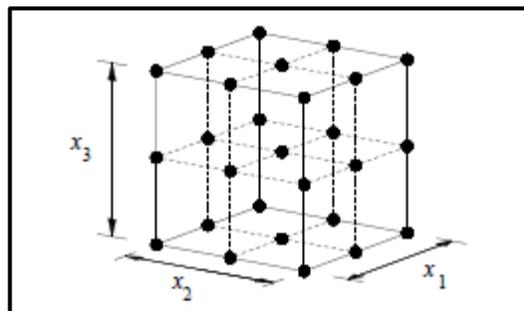


Figura 18. Esquema representativo de un diseño 3^3 full factorial (27 puntos) (17)

Diseño central compuesto (CCD): Este es el diseño más popular de segundo orden, consiste en las siguientes tres etapas (18):

- Una fracción de un diseño 2^k cuyos factores están en niveles $-1, 1$
- Una porción axial que consiste en 2^k puntos en los ejes correspondientes a cada uno de los factores situadas a una distancia α del centro del diseño.
- Uno o más puntos centrales

Por lo que el número de puntos en el diseño es $n = 2^k + 2k + c$ (*centros*)

La ortogonalidad y la rotabilidad se pueden obtener mediante la elección adecuada de α y c . Por todas estas cualidades que verifican este tipo de diseños son los más utilizados para ajustar superficies de respuesta de segundo orden.

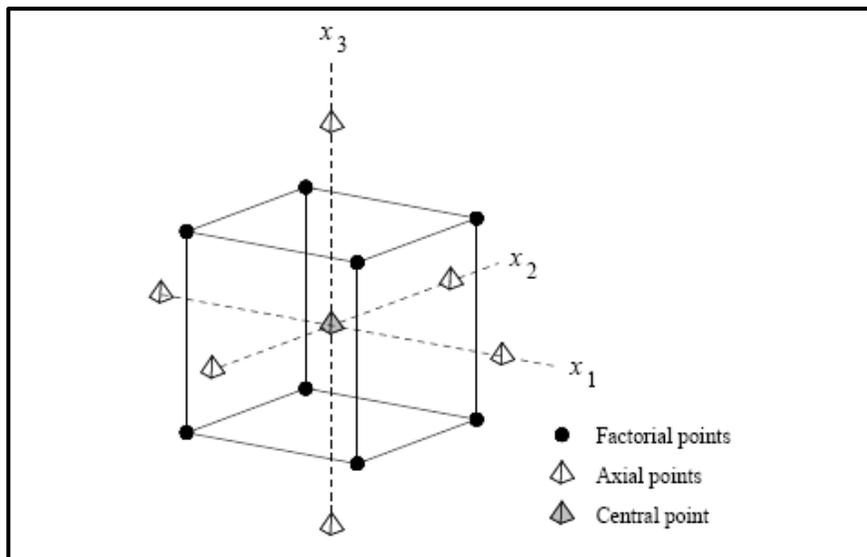


Figura 19. Esquema representativo de un diseño central compuesto de tres variables en dos niveles. (17)

Diseño 3^k factorial: Consiste en la combinación de los niveles de las k variables las cuales tienen tres niveles cada una. Cada nivel está igualmente espaciado. El número de experimentos para este diseño son 3^k , lo cual es costoso para valores de k altos. Presentan el inconveniente que no son invariantes por rotación lo que hace que no sean buenas.

4.3. Método de superficie de respuesta (RSM)

El DOE es generalmente seguido de un modelamiento de una superficie de respuesta (RSM). Llamamos un RSM a las técnicas matemáticas y estadísticas empleadas para interpolar o aproximar la información proveniente del DOE. Diferentes métodos de interpolaciones y aproximaciones (linear, no linear, polinomial, estocástico) dan como resultado diferentes superficies de respuesta. El beneficio de este modelamiento es crear una superficie de respuesta y posteriormente aplicar alguna técnica de optimización. El proceso de optimización es relativamente rápido usando este método debido a que se basa en la evaluación analítica de la función de interpolación. Si la información entregada

por el DOE es suficiente, el resultado del procedimiento de la optimización mediante el método de superficie de respuesta será exacto. (17)

La metodología de la superficie de respuesta desarrolla una relación entre una función de respuesta y de unos valores de entrada los cuales en este caso son los obtenidos mediante la técnica del DOE. La función f de la interpolación RSM en general es de una forma desconocida pero se puede modelar como la ecuación polinómica en los k factores x_1, x_2, \dots, x_k donde f es una función dependiente $y = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$. Los polinomios usados más frecuentemente como funciones de aproximación son de primer y segundo orden y vienen dados por los siguientes modelos (18):

$$\text{Primer orden:} \quad y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \varepsilon$$

$$\text{Segundo orden:} \quad y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i,j (i < j)} \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon$$

Donde ε es el error entre el resultado real y la aproximación polinomial.

La ventaja de aplicar con miras a optimización un DOE sumado a un RSM, es que es menos costoso que utilizar un algoritmo de optimización, debido a que generalmente se requiere menor números de puntos solución. La desventaja es que el resultado de una optimización basada en RSM es una aproximación; sin embargo, una forma de minimizar este inconveniente es realizar la optimización y agregar el punto solución como información al DOE hasta que converja hasta el valor resultado de la interpolación del RSM. (19)

Entre las ventajas principales para utilizar RSM para la optimización de un diseño tenemos (20):

- El RSM intenta sustituir un problema de optimización de un diseño con funciones computacionales costosas con una secuencia de problemas mucho más simples en donde todas las funciones se aproximan a superficies de respuesta. Esto permite realizar en tiempo real optimizaciones que no pueden ser resueltas por otros medios en un periodo razonable de tiempo
- Los fundamentos de la metodología de la superficie de respuesta (RSM) que incluye la utilización de técnicas de *design of experiments* (DOE) son relativamente sencillas, lo que resulta en una reducción de las teorías matemáticas complejas en cuanto a los algoritmos de optimización facilitando el uso a cualquier persona dedicada a ingeniería.
- Se puede usar RSM con modelos analíticos en el proceso de diseño aunque no sea un método exacto de optimización. Se puede visualizar el espacio del diseño
- Aproximaciones globales son muy beneficiosas en el caso de problemas multi-objetivo. Se puede reformular el problema usando la misma superficie de respuesta elaborada.
- Es un método potente para crear una optimización robusta, encontrando zonas donde se encuentren mesetas y no picos.
- Es posible la optimización con variables discretas de entrada.

Para poder reducir algunos puntos débiles de esta metodología es importante conocer algunas de sus desventajas (20):

- En el caso de aproximaciones globales, el uso de RSM puede llevar a un excesivo número de evaluaciones de la función de respuesta cuando el número de variables del diseño es alto.
- El RSM no es un sustituto de un modelo basado en la física. A pesar de que se puede interpolar razonablemente bien, la calidad de los datos más allá de la extrapolación pueden ser pobres.
- Puede existir un riesgo de sobre estimación de la capacidad de RSM. Recordar que es un método para explotar la información disponible, no para encontrar nueva información.

4.3.1. Análisis de superficie de respuesta (RSA)

El análisis de la metodología de la superficie de respuesta (RSA) tiene como objetivo interpolar los datos disponibles, en este caso obtenidos en el DOE, para poder predecir localmente o globalmente la correlación entre variable y objetivos. Una forma de clasificar los metamodelos es si poseen coeficientes lineales o no lineales, es decir de primer o segundo orden. (21)

Tabla 4. Comparación entre meta modelos de primer y segundo orden.

Primer Orden	Segundo Orden
Polinomial	Polinomial (de segundo orden),
Taylor Series,	Neural Networks
Fourier Series	Non-linear Kriging
Linear Kriging	GP (Genetic Programming)

4.3.2. Metamodelos de funciones de interpolación

- Polinomial estándar (de segundo orden) (22): asume “n” ejemplos de puntos y por cada uno de ellos se conoce los valores de los parámetros correspondientes de la superficie de respuesta. Determina la relación entre los parámetros de entrada, salida y de respuesta basados en estos puntos conocidos.
- Linear Kriging (22): Proporciona un buen ajuste de la aproximación de la superficie de respuesta. Combina un modelo polinomio con un término $Z(x)$ proveniente de una distribución normal gaussiana aleatoria con media y desviación estándar igual a cero

$$y(x) = f(x) + Z(x)$$

- Neural Networks (22): Técnica matemática basada en la red natural del cerebro humano con funciones ponderadas dadas por el algoritmo, el cual minimiza la distancia entre la interpolación y los valores conocidos. El error es revisado cada iteración.

4.4. Algoritmos de optimización

Cada vez se desarrollan algoritmos de optimización más sofisticados para la obtención de mejores resultados. La diferencia de cada algoritmo básicamente se traduce en la capacidad para trabajar con variables discretas o continuas, uno o varios objetivos, precisión de resultados y rapidez de convergencia.

Podemos mencionar algunos algoritmos de optimización más representativos como: Secuencia DOE, *Screening*, *multi objective genetic algorithm* (MOGA), *Bounded BFGS*, *multi-objective simulated annealing* (MOSA), *multi objective evolution strategy* (MMES), *Sequential quadratic programming* (NLPQLP). (13)

Una clasificación por su uso puede ser la siguiente:

Tabla 5. Comparación entre algoritmos de optimización según los objetivos.

ALGORITMO	Un objetivo	Multi-objetivo
MOGA		X
MOSA		X
MMES		X
MOGT		X
SIMPLEX	X	
Secuencia DOE		X
B-BFGS	X	
NLPQLP	X	

Los algoritmos con los que cuenta el software DESIGN EXPLORATION son los siguientes (22):

- *Screening* – es un método no iterativo de muestreo directo generado casi aleatoriamente.
- *MOGA (multi objective genetic algorithm)* – es un algoritmo genérico multi-objetivo con un método iterativo, el cual puede optimizar problemas con parámetros de entrada continuos.
- *NLPQLP (non-linear programming by quadratic lagrangian)* – es un algoritmo del tipo gradiente con optimizador de un solo objetivo.

MOGA es mejor para calcular puntos óptimos globales mientras que NLPQL es un algoritmo ideal para optimización local.

Para efectos del presente trabajo se utilizara un algoritmo genético de optimización llamado MOGA. Este es un algoritmo muy eficiente para optimización multi-objetivo, que utiliza un buscador inteligente el cual preserva excelentes soluciones sin converger prematuramente en resultados locales. Requiere pocos parámetros al usuario y utiliza parámetros internos para dar robustez y eficiencia (13). Este algoritmo se utilizara para determinar el conjunto de soluciones conocido como “frontera de Pareto”.

CAPITULO 5: METODOLOGIA DE SIMULACION Y OPTIMIZACION

En este capítulo se explicara la metodología para el modelado del sistema del agitador, tanto para el análisis fluido dinámico como para el estructural. Sin embargo, sabemos que para optimizar un diseño es necesario realizar una parametrización de variables geométricas para utilizarlas como variables de entrada.

En primer lugar, se explicara las consideraciones para realizar la parametrización geométrica, luego se entrara al modelamiento y simulación fluido dinámico y estructural. Finalmente se realiza un estudio de independencia de malla, el cual tiene por objetivo garantizar que los resultados numéricos no dependen del número de elementos utilizados. Para los estudios de CFD e independencia de malla, se requiere el uso de parámetros variables (parametrización) lo cual será indicada en dicha sección.

5.1. Parametrización geométrica

La Parametrización se realizó básicamente a todas las variables geométricas que controlan la configuración del impulsor. En nuestro caso el interés era variar el ángulo del alabe, y posición del impulsor en cierto rango, indicado a continuación:

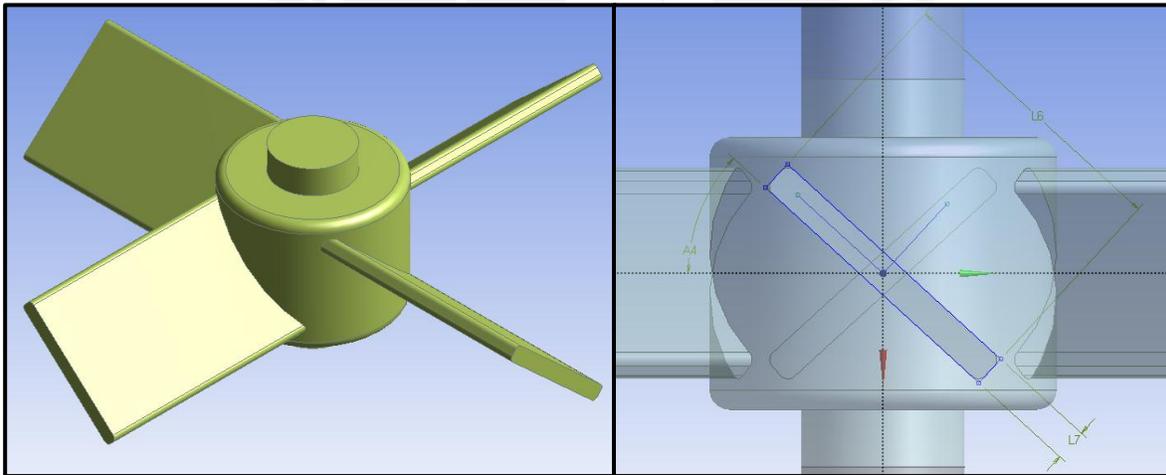


Figura 20. Modelo 3D del impulsor utilizado

Figura 21. Esquema de las dimensiones características en el alabe de impulsor PBT

Como vemos, los alabes están fijos al cubo el cual tiene dimensiones las cuales deben tener compatibilidad geométrica con el ancho y el ángulo de los alabes. Además, vemos que la magnitud de estas dimensiones es parametrizada para su variación según la siguiente tabla:

Tabla 6. Especificaciones de los parámetros geométricos utilizados

Parámetro geométrico	Diseño inicial	Rango de variación	Tipo de variable
Altura de impulsor	240 mm (desde la base)	De 210 a 470mm	Continua
Angulo de alabe (α)	45° (desde la horizontal)	De 15 a 70°	Continua
Ancho del alabe (a)	40mm	-	-
Largo de alabe (l)	110mm	-	-

Las consideraciones paramétricas se basaron en la cota correspondiente a la magnitud especificada en la tabla anterior. La metodología para la Parametrización de ambas variables geométricas fueron las siguientes:

- El ángulo de alabe se tomó a partir del ángulo de ataque del impulsor, es decir con respecto a la velocidad tangencial. Como se verá más adelante, esta variación del ángulo afecta a la dimensión del cubo para lo cual se realizaron consideraciones para garantizar la compatibilidad geométrica de estos componentes.

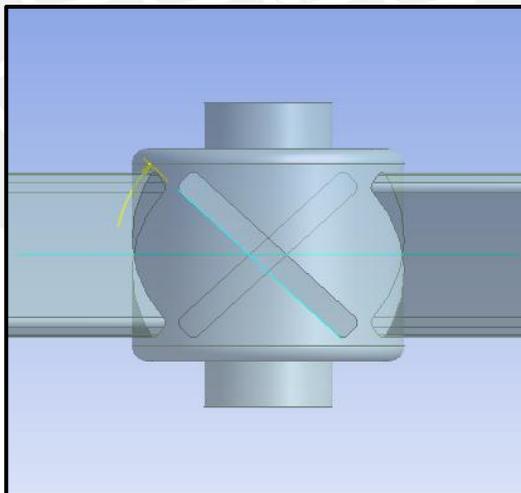


Figura 22. Esquema del impulsor y el ángulo variable utilizado.

- Mientras que la variación de posición (altura) del impulsor se consiguió a partir del movimiento del eje de coordenadas lo cual se puede observar en las siguientes figuras:

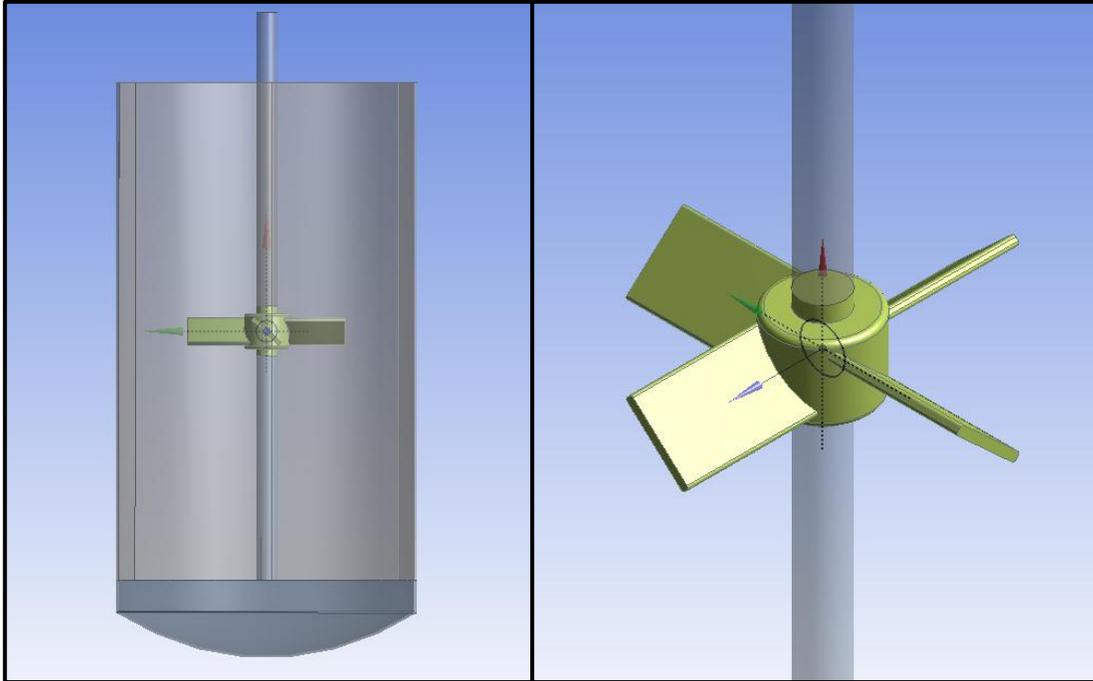
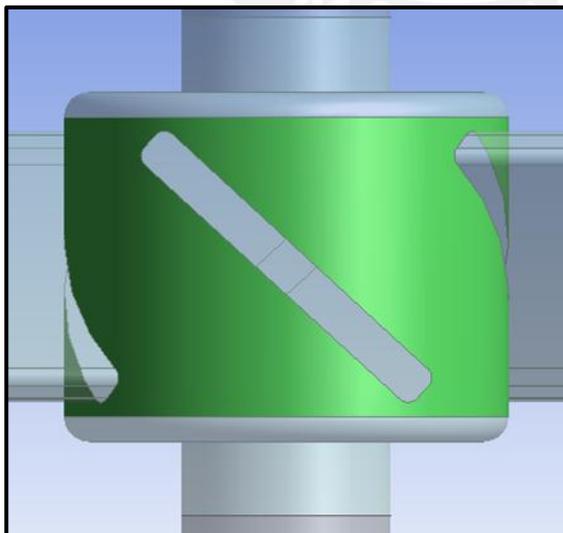


Figura 23. Esquema del eje de coordenadas que controla la altura del impulsor

Además, para las variaciones geométricas se tuvo que considerar la posibilidad del cambio automático del cubo debido a que conforme el alabe varia, tanto en ancho o en ángulo, el cubo tendría que variar su radio para que exista una compatibilidad geométrica, es decir, las dimensiones del cubo dependen claramente de las dimensiones del alabe como se puede ver en la siguiente figura. Sea h la altura del cubo, ϕ_{int} el diámetro interno y ϕ_{ext} el diámetro externo se tiene que:

Debido a eso se tuvo que agregar ciertas ecuaciones como consideraciones para que el



$$h = f(a, \alpha, \text{redondeos})$$

$$\phi_{int} = f(\phi_{eje})$$

$$\phi_{ext} = f(\#alabes, \phi_{int}, a, \alpha)$$

Figura 24. Esquema del cubo del impulsor que muestra las dependencias de compatibilidad

cubo no presente problemas geométricos al momento de realizar las variaciones según los rangos de los parámetros de entrada. Estas consideraciones fueron:

$$\text{Altura del cubo (mm)} = \frac{a \times \text{sen}\alpha + 12}{2}$$

$$\varnothing \text{ int cubo (mm)} = \text{Radio eje} \times 2$$

$$\varnothing \text{ ext del cubo (mm)} = 4 \times \# \text{alabes} + \varnothing \text{ int cubo} + \frac{a \times \text{cos}\alpha}{2}$$

El lenguaje de expresiones en el software utilizado (ANSYS DESIGN MODELER) se puede ver en la siguiente figura:

```

Parameter Manager
LARGO_ALABE.L7 = @ESPESOR_ALABE
Thin1.FD1 = @ESPESOR_TANQUE
DOMINIOMOVIL.FD1 = @GAP_DOM_MOVIL_IMPELLER
NUMERO_DEFLECTORES.FD3 = @NUMERO_DEFLECTORES
ALTURA_DOM_MOVIL.FD1 = (@ANCHO_ALABE*sin(@ANGULO_ALABE)+12)+@GAP_DOM_MOVIL_IMPELLER*2
DOMINIOMOVIL.R2 = @LARGO_ALABE+2*@GAP_DOM_MOVIL_ESTACIONARIO
Pattern4.FD3 = @NUMERO_COPIAS_ALABES
ALTURA_CUBO.FD1 = (@ANCHO_ALABE*sin(@ANGULO_ALABE)+12)/2
ALTURA_IMPELLER.FD1 = @ALTURA_IMPELLER
XYPlane.H1 = @RADIO_TUBO
LARGO_ALABE.FD1 = @LARGO_ALABE
PLANO_CUBO.D2 = (@NUMERO_COPIAS_ALABES)*4 + @RADIO_TUBO*2 + (@ANCHO_ALABE/2)*cos(@ANGULO_ALABE)
PLANO_CUBO.D1 = @RADIO_TUBO*2
LARGO_ALABE.A4 = @ANGULO_ALABE
LARGO_ALABE.L6 = @ANCHO_ALABE
    
```

Figura 25. Lenguaje utilizado en el *parameter manager* en Design Modeler.

5.2. Simulación Fluido dinámica

La simulación fluido dinámica consiste en evaluar el patrón de flujo y comportamiento de los líquidos dentro de un sistema agitador, cuantificar el grado de mezcla y el comportamiento del modelamiento multicomponentes y multifásicos en agitadores. En este trabajo se utilizó como fluidos agua, metanol y aire para desarrollar el procedimiento de trabajo en donde el metanol fue utilizado para poder cuantificar el grado de mezcla, es decir se utilizó como herramienta matemática.

En este trabajo se usa el método MRF (*mobile reference frame*) para modelar el sistema agitador el cual consiste en dividir el agitador en zonas móvil y estáticas para lograr simplificación en resolver el problema. Este método ha dado muy buenos resultados en cuanto a modelamiento se este tipo de sistemas, dado que es menos costoso computacional mente, las condiciones de borde son más simple y es más fácil de analizar que utilizando un método de dominio móvil (malla variable) (23). Esto es muy importante ya que influye en la decisión de la estrategia de mallado.

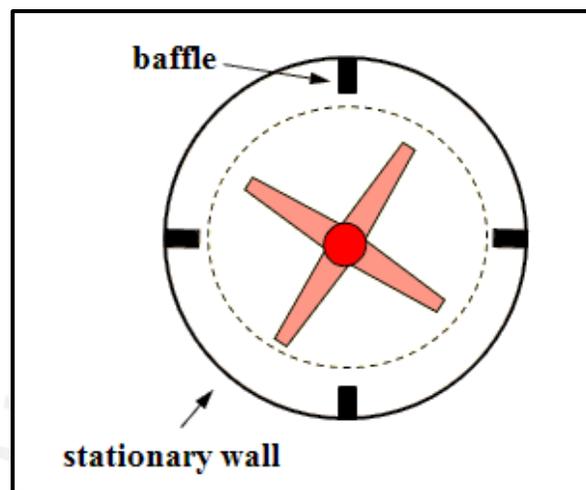


Figura 26. Esquema de dominios en el método MRF (marcos de referencia móviles) utilizado en el modelaje. (23)

Discretización numérica (mallado):

Para empezar con la simulación fluido dinámica, se consideró una discretización de los elementos (malla) dirigida al agitador, es decir se realizó la división del volumen de control en zonas para mejorar y reducir el tiempo de convergencia. Debido al método a utilizar (MRF), la división del volumen de control depende de la zona móvil del impulsor tanto en configuración como en tamaño de elementos debido a que la interacción del dominio móvil y estático debe ser bien representada por los elementos de la interfaz.

Los elementos utilizados para la discretización numérica fueron del tipo hexaédricos y tetraédricos, para la zona superior e inferior al impulsor respectivamente. Se buscó aprovechar la mayor cantidad de elementos hexaédricos debido a que su convergencia es más rápida y teniendo en cuenta la cantidad de modelos a evaluar para efectos del DOE, es necesario disminuir el tiempo de simulación. Las divisiones y elementos utilizados se muestran en la siguiente tabla:

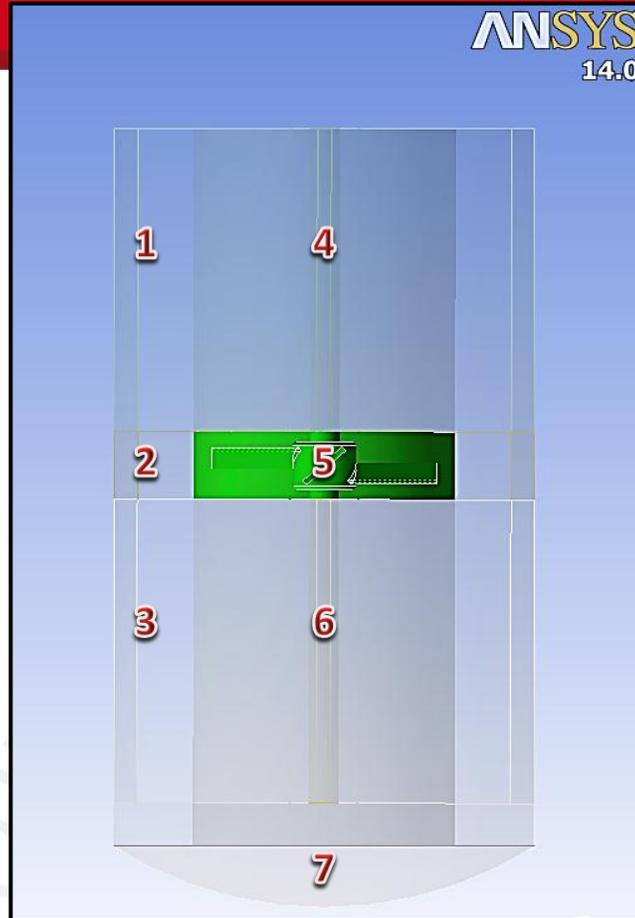


Figura 27. División geométrica de los diferentes dominios y elementos utilizados.

Tabla 7. Tipos de dominios y elementos utilizados en la configuración del modelo

Ítem	Tipo de dominio	Tipo de elementos
1	Estacionario	Hexaédricos
2	Estacionario	Tetraédricos
3	Estacionario	Tetraédricos
4	Estacionario	Hexaédricos
5	Móvil	Tetraédricos
6	Estacionario	Tetraédricos
7	Estacionario	Tetraédricos

Además de los elementos utilizados, para poder representar la forma geométrica de las paletas sin problemas se utilizó la herramienta *inflation* la cual generalmente se usa para obtener resultados y captar fenómenos de capa límite, en este caso se aplicó para capturar la forma geométrica de los alabes y refinar dado que está dentro del dominio

móvil lo cual es conveniente para obtener mejores resultados numéricos. El mallado utilizado y el conformado de los alabes se muestra en la siguiente figura:

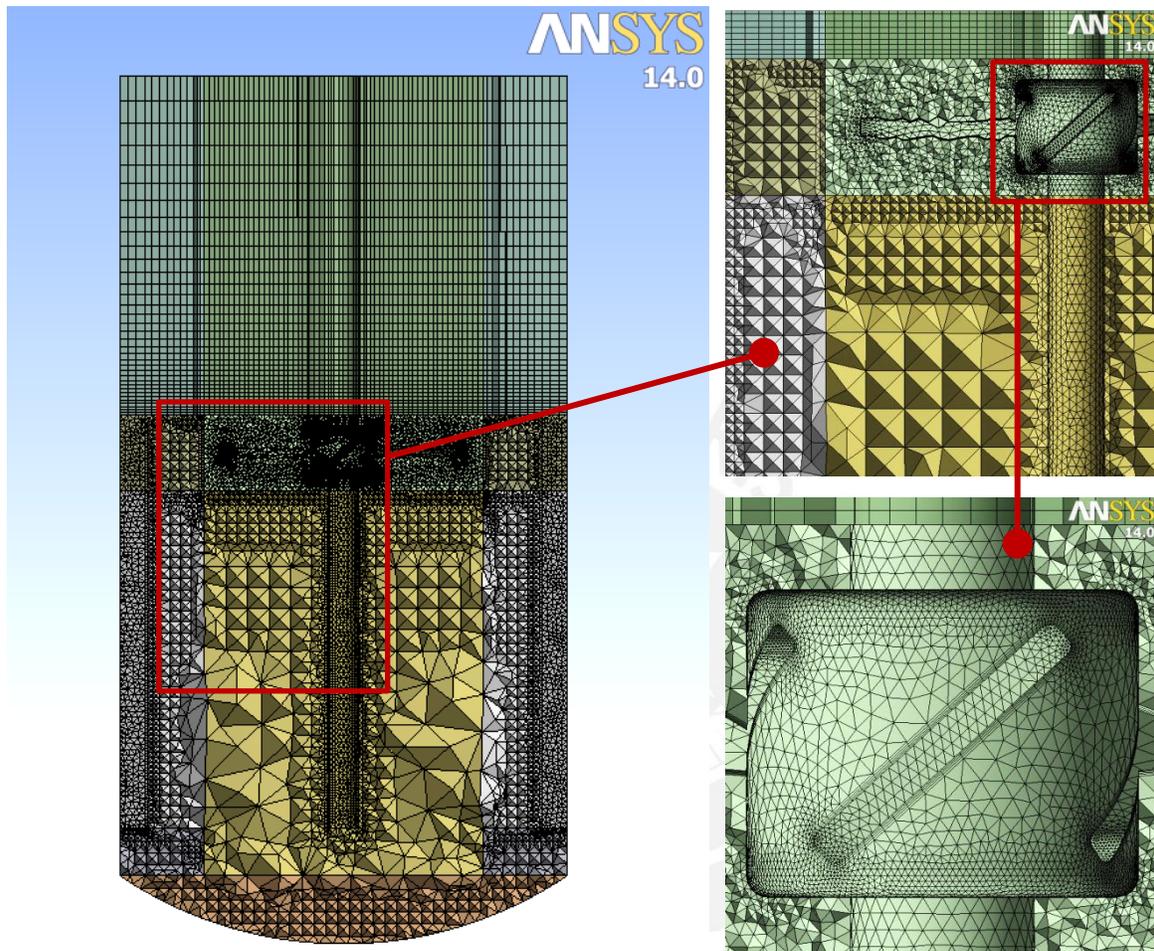


Figura 28. Mallado utilizado (elementos tetraédricos y hexaédricos). Detalle del *inflation* alrededor del alabe.

Como se puede observar, cada dominio que fue dividido anteriormente guarda cierto tamaño de elemento muy similar en las interfaces, esto es necesario ya que se requiere la menor interpolación de resultados numéricos en esas zonas y así poder evitar errores numéricos.

Debido a una recomendación dentro de la bibliografía (23) se procuró realizar este mallado de tal forma que la calidad ortogonal promedio y mínima de los elementos sea mayor a 60% y 5% respectivamente como se muestra en la siguiente figura. Dicha evaluación de la calidad de malla es importante dado que garantiza la calidad de los resultados.

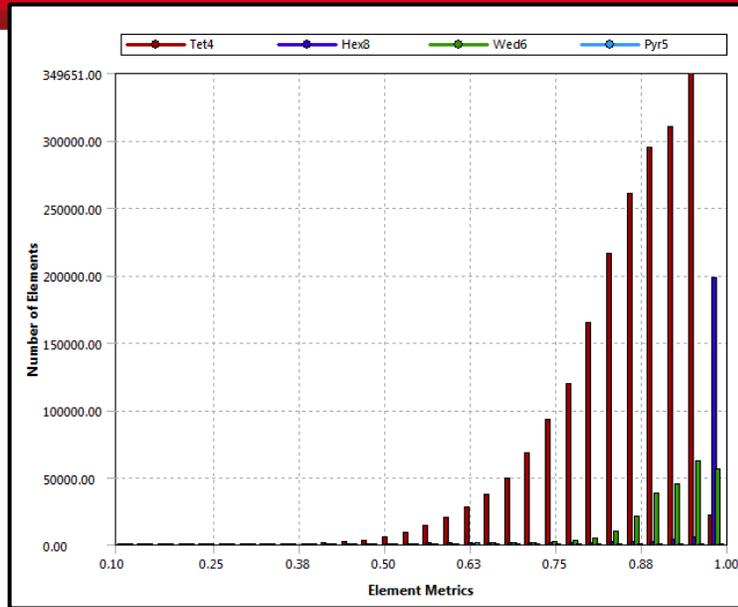


Figura 29. Grafica de la calidad de malla del volumen de control (fluidos) calidad ortogonal.

Tabla 8. Valores de calidad de malla según criterio de calidad ortogonal.

Statistics	
<input type="checkbox"/> Nodes	726028
<input checked="" type="checkbox"/> Elements	2522799
Mesh Metric	Orthogonal Quality
<input checked="" type="checkbox"/> Min	0.104414824190282
<input type="checkbox"/> Max	0.99999892037912
<input checked="" type="checkbox"/> Average	0.870253106208972
<input type="checkbox"/> Standard Deviation	9.84855124992111E-02

Como podemos ver el mallado es relativamente bueno, con calidad mínima 10% y una calidad promedio del 87% (para este diseño). Además, el número de elementos promedio para todos los diseños suele ser de 2.5 millones lo cual influye en el tiempo de simulación de manera directamente proporcional.

Pre-procesamiento de la física:

En lo que se refiere a pre-procesamiento, es decir la configuración del modelo físico se utilizaron dos dominios: tanque e impulsor (estacionario y rotatorio respectivamente).

El modelo consta de tres fases CFD (dos fases termodinámicas) las cuales son agua, aire y metanol. Las propiedades utilizadas y necesarias para efectos de este trabajo se indican en la siguiente tabla:

Tabla 9. Materiales y propiedades usados en la configuración del modelo:

Agua, aire y metanol.

Fluido (material)	Estado termodinámico	Masa molar [kg/kmol]	Densidad [kg/m ³]
Agua	Líquido	18.02	997
Metanol	Líquido	32.04	791
Aire a 25° C	Gas	28.96	1.185

El modelaje utilizado para estas fases fue euleriano de fases continuas en donde el agua-metanol se trató como una mezcla ideal a nivel molecular para lo cual se utilizó el abordaje de multicomponentes, mientras que para dicha mezcla y el aire se utilizó el abordaje multifásicos de superficie libre. La aplicación del modelaje como multicomponentes y multifásicos en CFD es (24):

Multicomponentes - Especies químicas se mezclan en un nivel molecular en donde cada especie tiene su campo de velocidades y se enfoca en la fracción de masa entre las especies.

Multifásicos – La mezcla de las fases se produce a nivel macroscópico. Cada fase se modela teniendo en cuenta su propio campo de velocidades lo cual implica la transferencia de momento entre las fases. Se enfoca a la fracción de volumen de las fases

Por otro lado el modelado con abordaje Euler-Euler (continuo-continuo) para el flujo abordado como multifásicos considera:

- Las fases se consideran como fases continuas
- Fases continuas - fases bien definidas en el espacio, en donde la transferencia de masa, calor y momento se produce a través de las interfaces
- Tienen propiedades diferentes en el mismo lugar en el espacio-tiempo.

Ambos dominios (estacionario y rotatorio) fueron configurados de la misma manera, exceptuando en la componente de velocidad agregada como movimiento del dominio. Para esto se agregó una expresión con el valor de la velocidad angular y posteriormente se parametrizó esta expresión para evaluar su desempeño con miras a la optimización. El rango de variación de esta variable se indica en la siguiente tabla:

Tabla 10. Especificación del parámetro variable: Velocidad de rotación

Parámetro	Diseño inicial	Rango de variación	Tipo de variable
Velocidad angular (ω)	100 rpm	De 80 a 1500 rpm	Continua

En cuanto al modelo de turbulencia se utilizó el SST (*shear stress transport*) debido a que este demostró tener mejor resultado en comparación con datos experimentales (2). Se utilizó también el modelo homogéneo debido a las características físicas del problema. Además se consideró efectos de la gravedad para tomar en cuenta los efectos de la presión hidrostática. Finalmente, como se mencionó anteriormente se utilizó el modelo de superficie libre para tratamiento de la interacción entre la mezcla (metanol-agua) y aire, utilizando un valor de tensión superficial de 0.0072 [N/m].

Las condiciones de contorno empleadas para un sistema agitador son básicamente de dos tipos: paredes y abertura (tapa superior). La configuración de las condiciones de contorno del tipo pared es estándar, con aplicación de velocidad de rotación a las paredes correspondientes al eje en el dominio estacionario. Esta aplicación de velocidad angular a estas paredes se debe a que en el dominio estático se debe considerar el movimiento del eje respecto al fluido y su repercusión en el fluido adyacente. En la condición de frontera correspondiente a la parte superior del agitador se consideró que la presión relativa era de 0 [Pa] debido a que ya presión de referencia global es la atmosférica, además, se indica que en dicha condición de borde solo existe aire (atmosférico) es decir la fracción de volumen del fluido aire es igual a 1 y de la mezcla igual a 0.

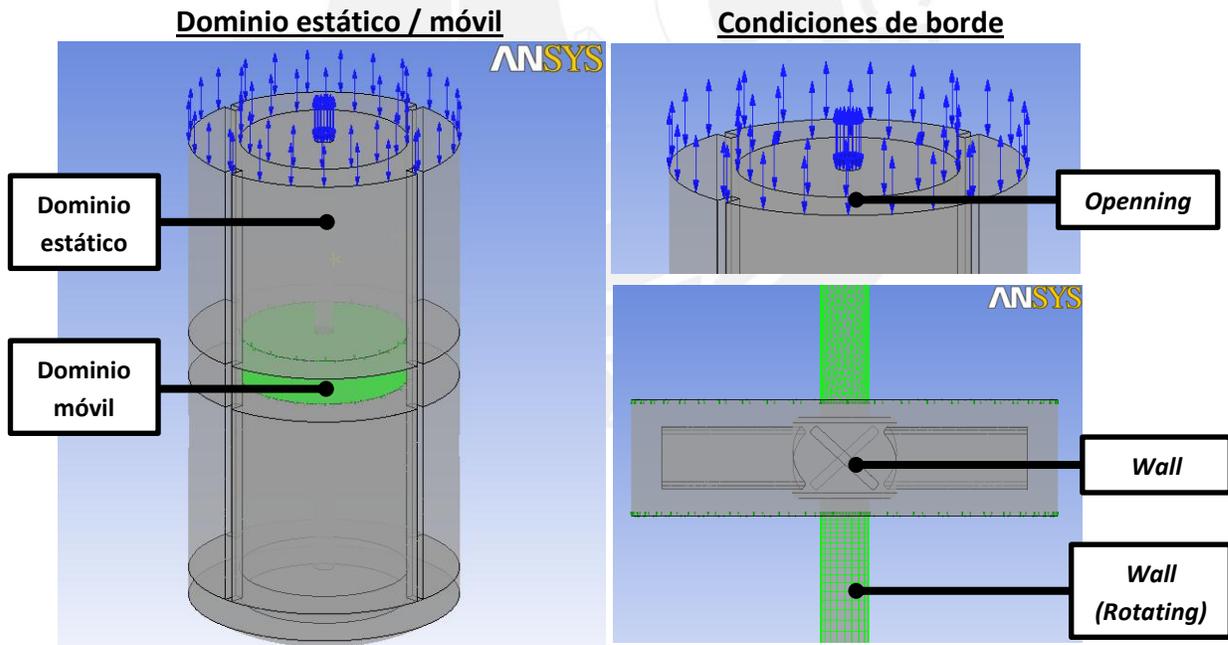


Figura 30. Definición de dominios y condiciones de bordes.

La configuración de las interfaces, es decir la interacción entre el dominio móvil y los estacionarios fue tomando en cuenta la malla realizada. Se utilizó el método de conexión de malla *GGI* (*general grid interface*) en las interfaces el cual se utiliza cuando los nodos de ambas interfaces no están alineados. Además se modeló con *frozen rotor* para aplicar

el método MRF, el cual trata el flujo desde un componente a otro cambiando el marco de referencia (móvil / estático) manteniendo la posición relativa de los componentes.

Condiciones iniciales

Para poder cuantificar el grado de mezcla ideal, es necesario indicar en las condiciones iniciales las cantidades totales y la posición de los fluidos con los que se trabaja. Es por eso que para este trabajo se crearon ciertas expresiones en lenguaje CCL (*CFX command language*). La altura inicial de la mezcla (agua-metanol) fue un total de 0.35m en donde se trabajó al metanol y agua inicialmente separados por densidad, en donde la altura de agua fue aproximadamente 0.27m, es decir 0.23m de metanol. Estos volúmenes inicialmente posicionados se muestran en la siguiente figura:

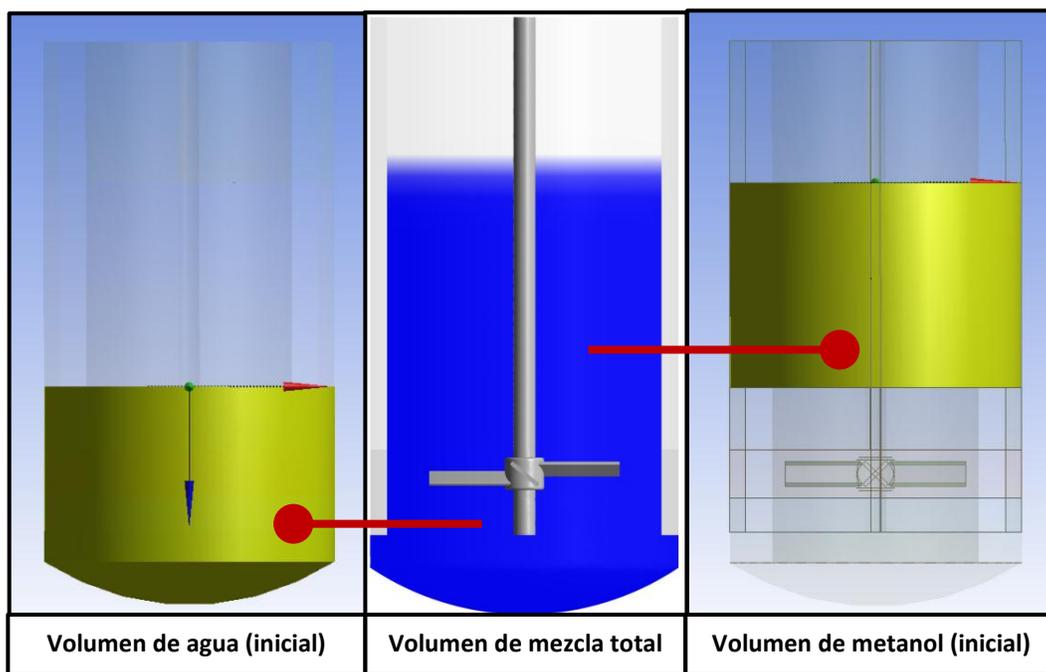


Figura 31. Esquema de la inicialización de los fluidos involucrados en el análisis

Para poder dar una configuración inicial a la configuración es necesario realizarlo a través de expresiones con funciones características conocidas como *if* o *step*. Las expresiones CCL utilizadas para lograr esta inicialización se indican a continuación:

$$Altura = 0.35[m]$$

$$AlturaWater = 0.269[m]$$

$$VFagua = if(y > -(AlturaWater - 0.169[m]), 1, 0)$$

$$VFmetanol = if(y > -(Altura), 1, 0) * if(y < -(AlturaWater - 0.169[m]), 1, 0)$$

$$VFaire = 1 - VFagua - VFmetanol$$

Además se define la expresión para la velocidad de rotación del impulsor, la cual será parametrizada y utilizada para el cálculo del *Physical Timescale* como controlador del solucionador como se muestra en la siguiente figura.

Para la obtención de una convergencia exitosa el valor para el *timescale* recomendado para maquinas rotatorias es de $1/\omega$ en segundos (23):

$$VelRPM = \omega [rev\ min^{-1}]$$

$$timescale = 1/VelRPM * 1[rad]$$

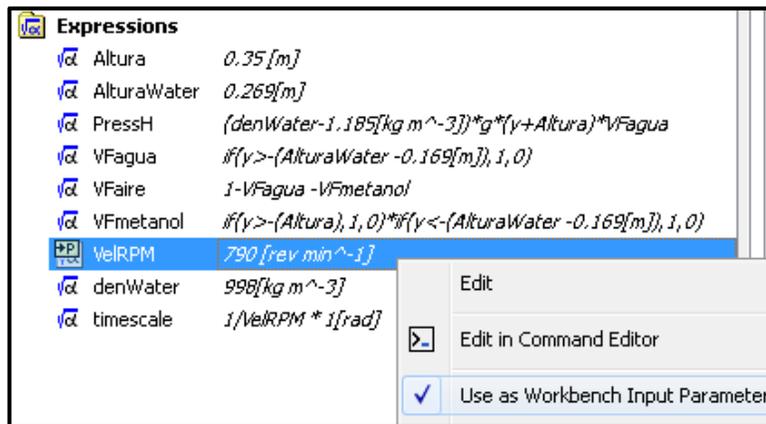


Figura 32. Lenguaje utilizado en ANSYS CFX para creación de expresiones (CEL)

Para definir las funciones anteriormente mencionadas como expresiones en lenguaje CCL se debe tener en cuenta el eje de coordenadas global según se haya realizado el CAD, en este caso el origen de coordenadas no se encuentra en la base del tanque sino a 0.169m con respecto al eje y (altura). Es por este motivo que en las ecuaciones se consideró el desfase del centro de coordenadas.

Post-Procesamiento

En el post-procesado se tienen las variables de campo resultas, las cuales son usadas para crear expresiones útiles para cuantificar valores característicos en agitadores como son, el número de Reynolds de agitación, numero de potencia, numero de caudal y potencia efectiva. Está claro que para obtener dichos números adimensionales es necesario primero calcular ciertos valores como: la densidad de mezcla, la viscosidad de mezcla, el caudal vehiculado por el impulsor y la potencia consumida en la agitación, además, para la creación de las expresiones correspondientes a el grado de mezcla y fracción de volumen promedio en el agitador. Esto se realizó mediante lenguaje de expresiones CCL.

Para el cálculo de la viscosidad y densidad, primero se creó un isovolumen de la zona en donde hay agua y metanol. Posteriormente, se crearon expresiones para calcular la densidad y viscosidad en dicha región:

$$\text{viscosidadRES} = \text{volumeAve}(\text{mezcla. Dynamic Viscosity})@\text{volumenFLUID}$$

$$\text{densidadRES} = \text{volumeAve}(\text{mezcla. Density})@\text{volumenFLUID}$$

Donde *volumeFLUID* es el isovolumen generado para el cálculo promedio de dichos parámetros, cuya altura es la de la mezcla en el volumen de control. Cabe decir que es el cálculo será un valor aproximado debido a que se calcula un promedio en todo el volumen. En la siguiente figura se muestra el isovolumen utilizado para el cálculo:

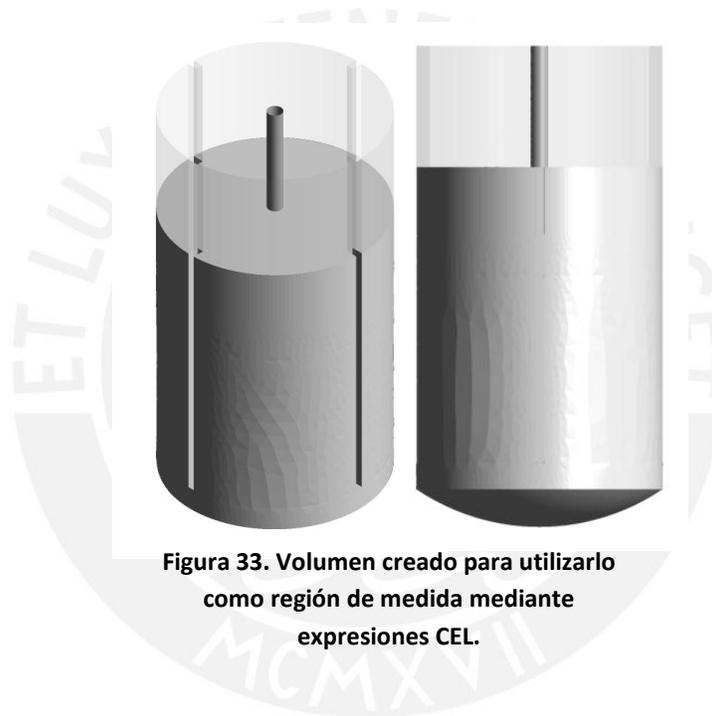


Figura 33. Volumen creado para utilizarlo como región de medida mediante expresiones CEL.

Para el cálculo del caudal vehiculado se utilizó como regiones de cálculo a las interfaces del dominio móvil. Teniendo en cuenta que el impulsor tiene componentes de flujo radial y axial, se consideran dos interfaces para cuantificar el flujo másico lo cual se muestra en la siguiente figura. Una buena aproximación de cálculo de caudal es utilizar expresiones de flujo másico y utilizar la densidad promedio en la región correspondiente para obtener el flujo volumétrico. Las expresiones utilizadas fueron:

$$\begin{aligned} Q_{\text{vehiculado}} = & \text{abs}((\text{massFlow}())@\text{Domain Interface 2 Side 1}) \\ & /(\text{areaAve}(\text{Density})@\text{Domain Interface 2 Side 1}) \\ & + (\text{massFlow}())@\text{Domain Interface 3 Side 1}) \\ & /(\text{areaAve}(\text{Density})@\text{Domain Interface 3 Side 1}) \end{aligned}$$

Donde *massFlow* es una función del sistema que calcula el flujo másico, *areaAve* realiza el cálculo del promedio de una variable en un área o región determinada y *Domain interface* son las regiones correspondientes las cuales se muestran en la siguiente figura:

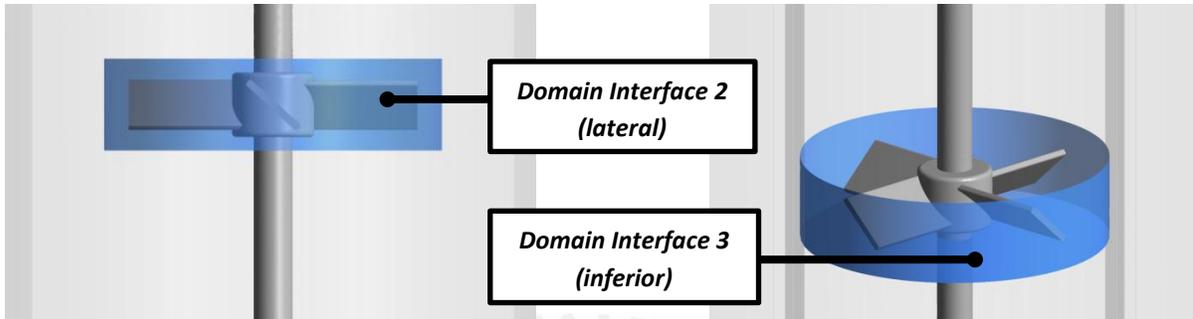


Figura 34. Interfaces utilizadas para medición del caudal.

Para la obtención de la potencia requerida se realizó el cálculo del torque sobre las paredes del impulsor ($P = T \omega$), hallando la resultante del torque en las componentes x, y, z, mediante la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \text{TorqueTotal} = & ((\text{torque}_z()@wall_alabe) + (\text{torque}_z()@wall_cubo) \\ & + (\text{torque}_z()@wall_eje))^2 + ((\text{torque}_y()@wall_alabe) \\ & + (\text{torque}_y()@wall_cubo) + (\text{torque}_y()@wall_eje))^2 \\ & + ((\text{torque}_x()@wall_alabe) + (\text{torque}_x()@wall_cubo) \\ & + (\text{torque}_x()@wall_eje))^2)^{0.5} \end{aligned}$$

$$\text{PotenciaW} = \text{TorqueTotal} * \text{VelRPM} * 1[\text{rad} - 1]$$

En donde *wall_alabe* y *wall_cubo*, son las regiones que conforman el impulsor. Luego la obtención de los números adimensionales (*Re*, *Np*, *Nq*, *Pefect*) se obtiene mediante las siguientes expresiones:

$$\text{Re} = ((\text{dimpulsor}^2) * \text{VelRPM} * \text{densidadRES}/\text{viscosidadRES})/((2 * \text{pi}) * 1[\text{rad}])$$

$$\text{Np} = \text{PotenciaW}/(\text{densidadRES} * (\text{VelRPM}^3) * (\text{dimpulsor}^5)) * (2 * \text{pi})^3 * 1[\text{rad}^3]$$

$$\text{Nq} = \text{Qvehiculado}/(\text{VelRPM} * (\text{dimpulsor}^3)) * (2 * \text{pi}) * 1[\text{rad}]$$

$$\text{Pefect Rendimiento} = \text{Nq}/\text{Np}$$

Finalmente, para realizar las expresiones necesarias para cuantificar el grado de mezcla y la fracción de volumen se necesita crear las regiones en donde se puedan medir estos parámetros. En este trabajo debido al tamaño del agitador se creyó conveniente crear 20 planos transversales a lo largo de la altura con una separación de 15mm. Estos planos fueron del tipo *sample* los cuales permiten tomar una N cantidad de muestras. En este caso se tomaron planos cuadrados con 50 puntos de muestras distribuidas a lo largo y

ancho del plano tal como se muestra en la siguiente figura. En estos planos se aplicaron las siguientes expresiones para el grado de mezcla (coeficiente de variación) y fracción de masa promedio de metanol:

$$Promedio VF a Ymm = ave(mezcla. Methanol CH4O. Mass Fraction)@Plano Sample Ymm$$

$$CV = \frac{((ave((mezcla. Methanol CH4O. Mass Fraction - X)^2)@Plano Sample 140mm)^{0.5})}{X} * 100$$

En donde Y representa la altura de cada plano en milímetros respecto al origen de coordenadas, *plano sample* corresponde a el plano con puntos de medición utilizado como región, CV es el coeficiente de variación con respecto a la fracción de masa en una mezcla ideal (X). Para calcular X, se debe tener en cuenta el volumen real de metanol y agua, debido a que mediante las expresiones se utilizó la altura como indicador de cantidad de mezcla en el tanque. Teniendo esto en cuenta se realizó el cálculo de la suma de los volúmenes para poder determinar el valor de la fracción de volumen ideal, es decir si los fluidos se mezclaran de manera perfecta:

$$Volumen total = (2.3767 + 2.4519) \times 10^7 \text{ mm}^3 = 4.8286 \times 10^7 \text{ mm}^3 = 0.048286 \text{ m}^3$$

$$X = Fraccion de volumen Metanol (ideal) = \frac{0.024519}{0.048286} = 0.5077$$

$$Fraccion de volumen Agua (ideal) = 1 - 0.5077 = 0.4922$$

Este valor es importante dado que puede servir como medida de referencia de la fracción de volumen máxima a poder alcanzar en una buena mezcla.

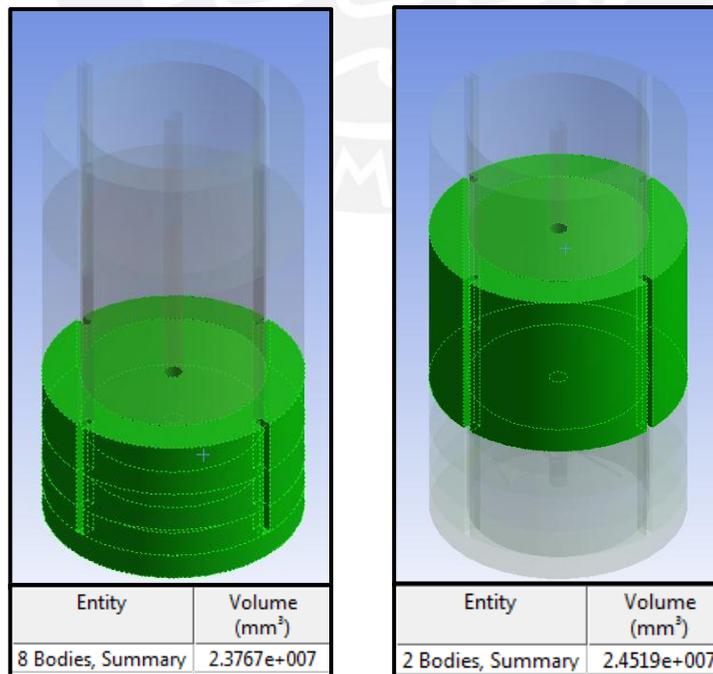


Figura 35. Cantidad de metanol y agua utilizados para cálculo de fracción de volumen ideal.

Finalmente las dos últimas expresiones se refieren a los promedios de los valores en los planos tomados, en este caso son 20 planos:

$$\text{Promedio VF de metanol} = \frac{\sum \text{Promedio VFi}}{20}$$

$$\text{Promedio del CV} = \frac{\sum CVi}{20}$$

Este promedio se utiliza para evaluar la función objetivo utilizado en la optimización ya que representa la tendencia de coeficiente de variación a lo largo del agitador.

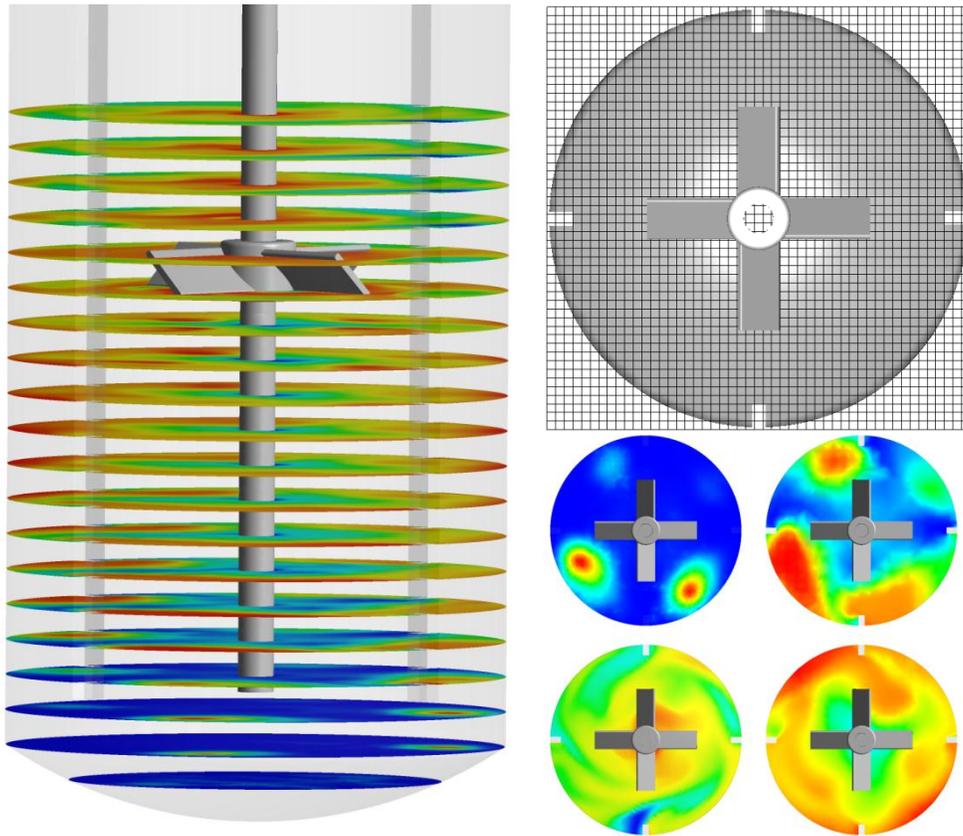


Figura 36. Planos creados para la caracterización del grado de mezcla. (a) Planos distribuidos a lo largo del agitador. (b) plano tipo *sample* para medición y promedio de CV.

5.3. Simulación Estructural

El modelamiento de la estructura del tanque agitado consistió en evaluar los esfuerzos provocados por la agitación para evaluar las zonas más críticas en el impulsor. En este trabajo no se tiene en cuenta la forma exacta del eje ni se pretende dimensionarlo. Para este fin, el acople al motor se modela como un cubo el cual esta fijo y no permite el

movimiento de tal manera se quiere modelar al motor como una condición de contorno la cual entrega el momento torsor necesario para mantener el sistema en equilibrio, como se muestra en la siguiente figura:

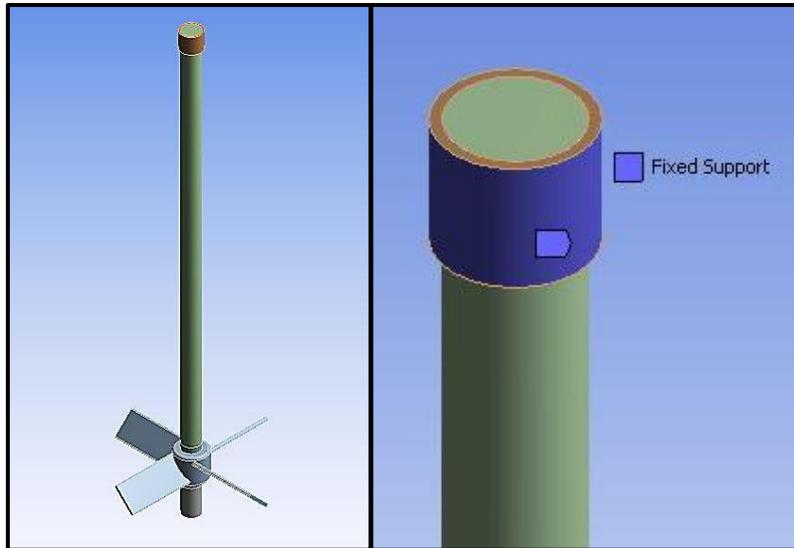


Figura 37. Esquema del modelaje del motor y la condición de contorno utilizada

Para simular los esfuerzos debido a las cargas fluido dinámicas, estáticas y gravitacionales, se utilizó la interacción entre fluido y estructura o FSI (*fluid structure interaction*) del tipo uni-direccional (*one way*) el cual consiste en exportar las cargas del campo de presiones generadas en el solucionador del análisis fluido dinámico en este caso CFX, las cuales se utilizan como condición de contorno como fuerzas aplicadas en las caras de los alabes, tanque, eje, cubo y deflectores. Esta exportación se puede realizar mediante el *Project schematic*, el cual permite acoplar un solucionador con otro.

Además, de realizar esta operación en el proyecto de trabajo en ANSYS, es necesario indicar las regiones de las condiciones de contorno del análisis fluido dinámico (CFX) y las regiones al cual van a ser aplicada sus respectivo campo de cargas. En el análisis estructural estas regiones pueden ser creadas fácilmente con la herramienta *name*

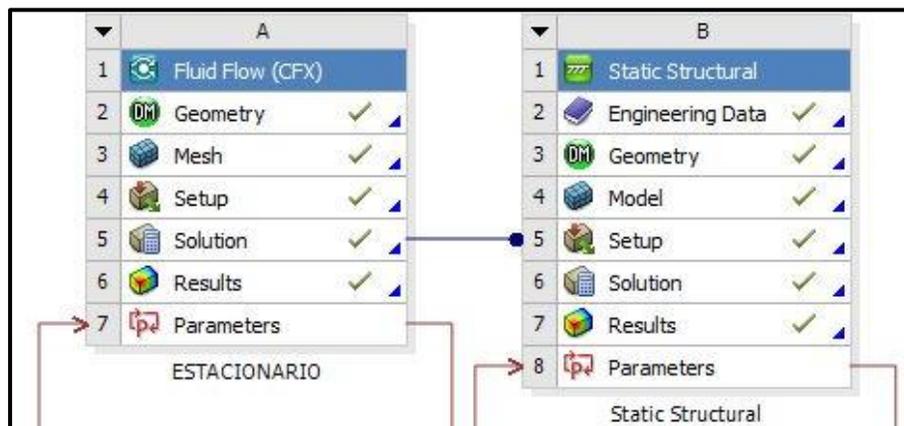


Figura 38. Esquema del proyecto para realizar un FSI del tipo *one-way* (unidireccional).

selection, de esa manera se puede hacer el traslado de cargas de una región (condiciones de borde en CFX) a otra región (*name selección en mechanical*).

Hay que tener en cuenta que esta exportación de cargas suele ser muy precisa si es que el mallado tanto de los volúmenes de control (fluido) como el del estructural son coincidentes, sin embargo, en la práctica no es tan sencillo obtener este tipo de mallado, por lo que muchas veces los resultados no suelen ser exactos. Teniendo en cuenta esto el primer paso es realizar un mallado con elementos del tamaño lo más parecido al realizado en el análisis fluido dinámico y así poder tener un análisis estructural confiable. El mallado realizado fue empleando el mismo tipo de elementos y métodos en las regiones más influyentes, tal como se muestra en la siguiente figura:

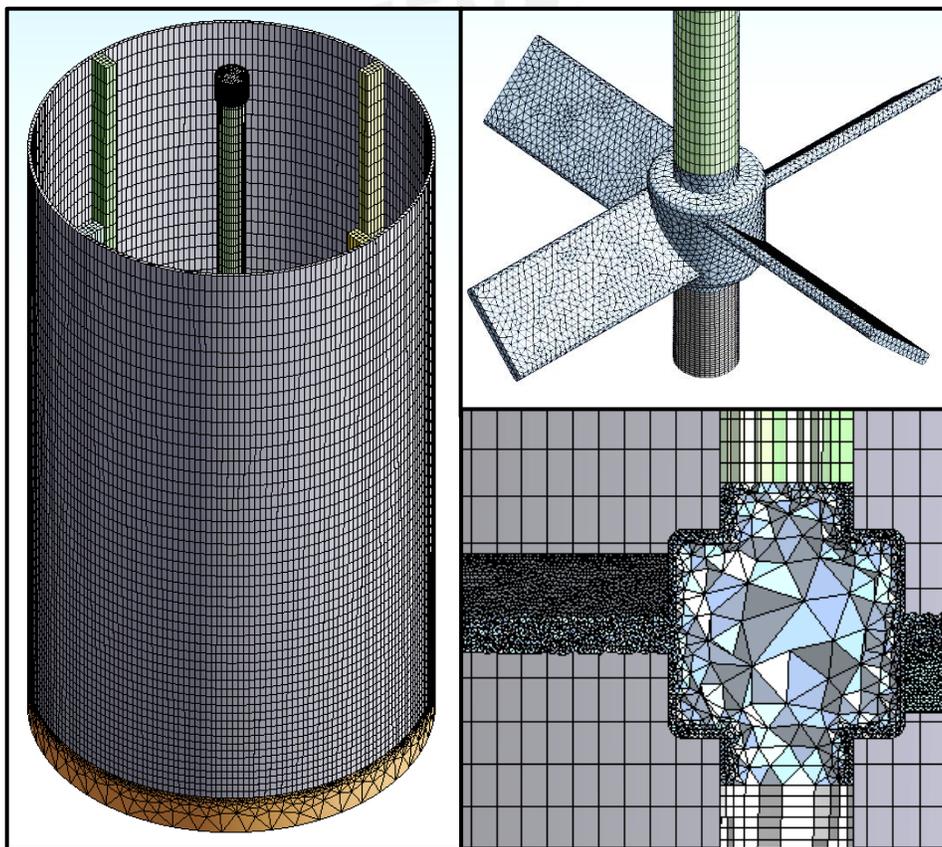


Figura 39. Mallado del tanque agitador para el análisis estructural.

Como se puede observar, cada sólido fue dividido y se aplicó métodos de mallado para obtener tipos de elementos similares al mallado de los volúmenes de control y además guarda relación en las regiones donde se aplicaran las cargas del análisis CFD. Además, podemos ver que el mallado es relativamente bueno, con calidad ortogonal promedio del 84% (para este diseño) como se puede ver en la siguiente figura:

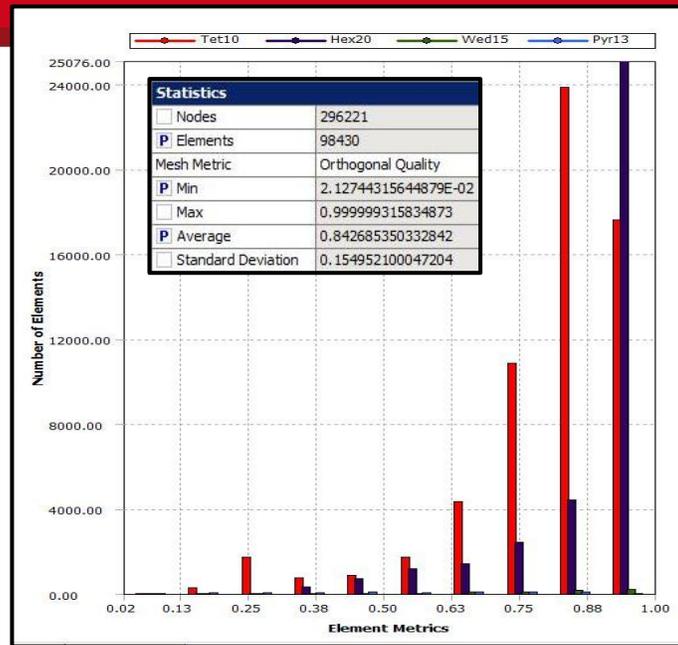


Figura 40. Grafica de la calidad de malla y valores según criterio de calidad ortogonal.

Condiciones de borde

Para modelar el tanque agitado se aplicaron 5 condiciones de borde, de las cuales 3 fueron condiciones de soporte y fijación, otra la de las cargas del campo de presiones del análisis CFD y por último se añadió los efectos de la gravedad. Las condiciones de contorno de sujeción se aplicaron a la parte superior del tanque modelando la tapa superior como si estuviera soldada, al cubo creado para modelar el comportamiento del motor como restricción de movimiento y por ultimo a la parte inferior del eje. Esta última sujeción fue del tipo *cylindrical support* restringiendo el movimiento radial del eje y se añadió para eliminar los errores matemáticos debido a las cargas importadas.

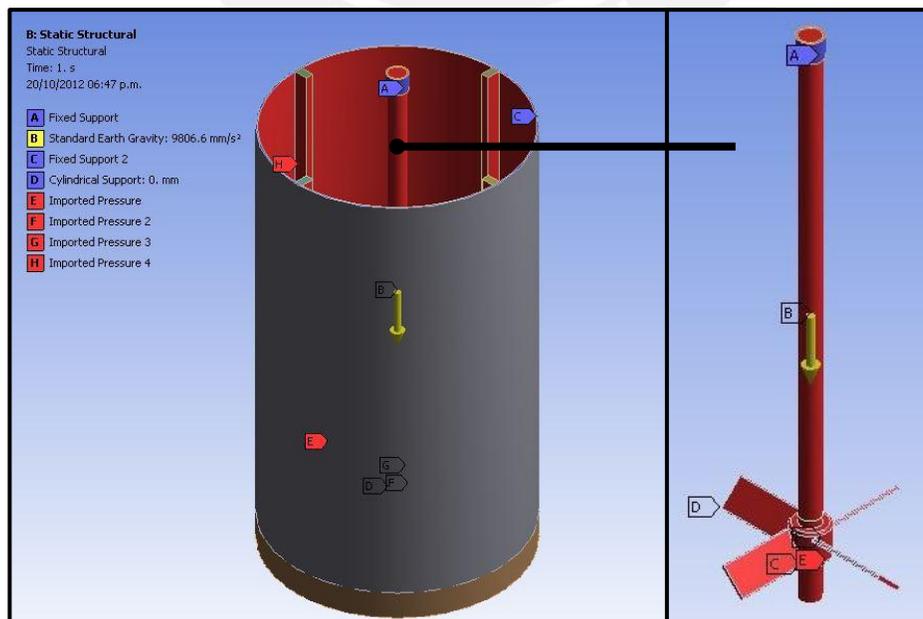


Figura 41. Condiciones de contorno aplicadas para el análisis estático estructural.

Las demás condiciones de borde fueron las cargas CFD aplicadas a las regiones correspondientes de la estructura, es decir se aplicó las cargas al tanque, al eje, al cubo y a los alabes del impulsor. A continuación se muestra la importación de las cargas en forma de vectores en todas las regiones de la estructura:

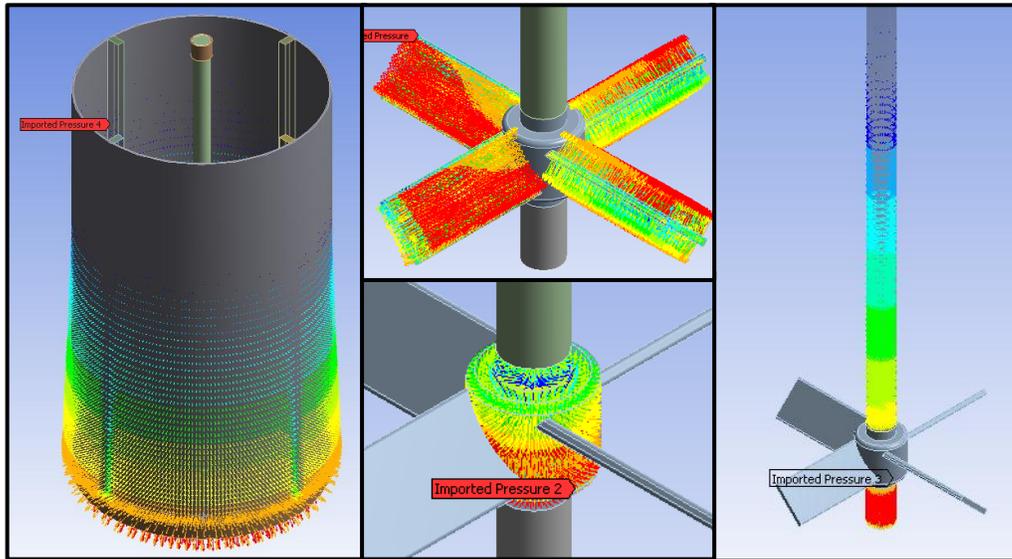


Figura 42. Vectores de importación de cargas dadas por el análisis fluido dinámico como condición de contorno.

Es necesario verificar la calidad de transferencia de las cargas de las regiones CFD a las regiones del análisis estructural, esto se puede hacer revisando el resumen del transporte de cargas (*import load transfer summary*). Este resumen provee la magnitud de la carga en CFD y la que se llegó a transportar al *mechanical* debido al mapeo de los nodos de las superficies. Al revisar esto debemos asegurar que la magnitud de la componente mayor de la carga sea la que tenga mayor similitud debido a que esta carga es la que más influye en la solución. En la siguiente figura se puede ver la verificación del diseño inicial:

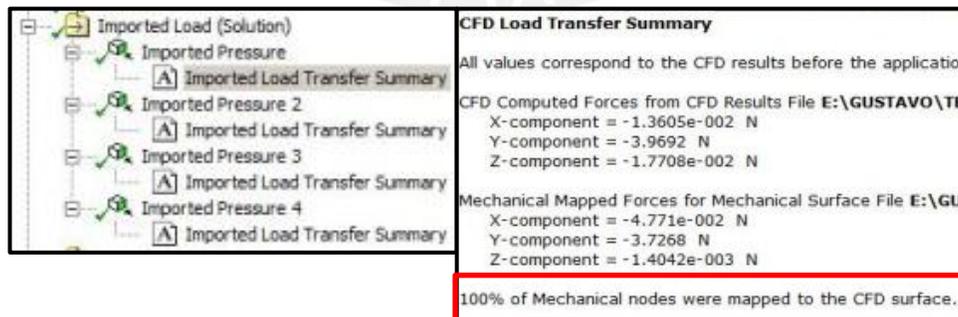


Figura 43. Verificación de calidad de importación de cargas y mapeado de superficies.

Como se puede ver para este diseño la calidad del mapeo es decir del traslape de cargas de las regiones CFD a las regiones del análisis estructural fueron del 100% y la componente en Y (la de mayor magnitud) tiene un error del 6.5%. Es recomendable obtener este valor lo más bajo posible para garantizar la calidad de los resultados.

Otra forma de comparar el error en entre lo calculado en el análisis CFD y estructural, es medir el momento en la reacción del cubo que modela al acople con el motor y compararlo con el torque total calculado con expresiones CCL. Para evaluar esta comparación podemos parametrizar estos valores y luego desde el editor de parámetros (*parameter set*) podemos observar los valores.

Output Parameters			
Static Structural (C1)			
P32	Equivalent Stress Maximum	2.478	MPa
P33	Total Deformation Maximum	0.0084674	mm
P34	Safety Factor 2 Minimum	15	
P35	Moment Reaction Maximum Y Axis	254.4	N mm
ESTACIONARIO (B1)			
P37	PotenciaW	2.5866	kg m ² s ⁻³ degree
P36	TorqueTotal	0.247	J

Figura 44. Parámetros de salida para comparación y verificación entre CFX y Mechanical.

En este caso podemos (diseño inicial) podemos ver que el torque calculado en el CFD fue de 0.247 Nm mientras que en el estructural fue de 0.2544 Nm, de esta manera podemos simular diferentes modelos y monitorear externamente la calidad del traslado de cargas. Además, podemos establecer un valor de comparación de error relativo según la siguiente formula:

$$Error\ relativo\ \% = \frac{Torque\ CFD - Torque\ Estructural}{Torque\ CFD} \times 100$$

Esta fórmula puede ser ingresada en el *parameter set* añadiendo un parámetro derivado creando una expresión matemática tal como se india en la siguiente figura. El resultado para este caso podemos fue de un 0.55%

Property	Value
General	
Expression	(P35-P36)/P36*100
Description	Diferencia de Torque entre CFX y Mechanical
Error Message	
Expression Type	Derived
Usage	Expression Output
Quantity Name	Dimensionless
P40	Error % torque : 0.55787

Figura 45. Expresión utilizada para controlar el error relativo del torque desde el WorkBench

5.4. Optimización

La optimización realizada en este trabajo se basa en el RSM, es decir en la generación de una superficie de respuesta que se aproxime al comportamiento del sistema y la obtención de los puntos óptimos que se ajustan a la función de aproximación a dicho comportamiento.

Para eso se realizan tres pasos fundamentales: las simulaciones para realizar el DOE, el diseño de la superficie de respuesta y por último la obtención de la frontera de Pareto óptima mediante la aplicación de un algoritmo de optimización. Este algoritmo de optimización realiza la búsqueda en puntos obtenidos aproximados por la función de respuesta. En la siguiente figura se puede ver el componente utilizado para el empleo del software Design Explorer, el cual tiene las herramientas para realizar los pasos anteriormente descritos:

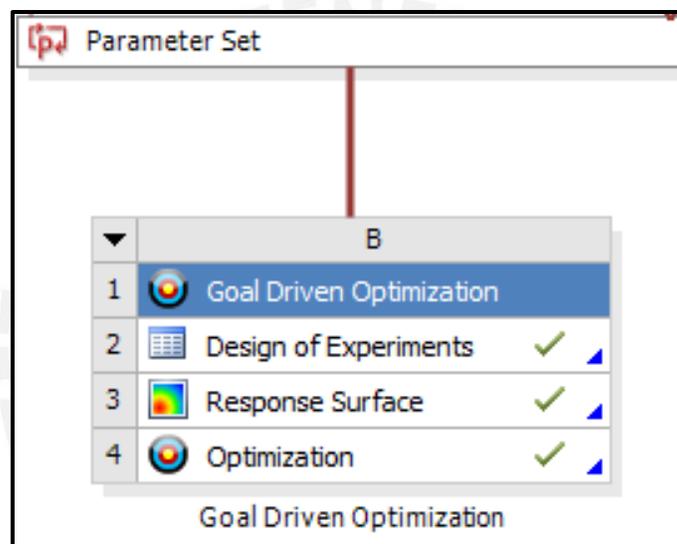


Figura 46. Entorno del software empleado: Design Explorer

Para realizar el diseño de experimentos se utilizó el diseño central compuesto (CCD), el cual es un diseño de segundo orden recomendado para una posterior modelación de superficie de respuesta.

Además, puesto que las variables a modificar son tres ($k=3$), se sabe los puntos requeridos para realizar el DOE según la fórmula:

$$n = 2^k + 2k + c = 2^3 + 2 \times 3 + 1 = 15$$

Es decir, se requieren quince puntos o simulaciones para realizar el estudio del DOE y así tener conocimiento del comportamiento del sistema en todo su rango de variación. Los puntos requeridos son calculados por el algoritmo de la técnica empleada, en este caso el diseño central compuesto, la cual entrega diferentes puntos definidos por la variación de los parámetros. Estos puntos necesarios son:

A	B	C	D
Name	P21 - VelRPM (rev min^-1)	P46 - ANGULO_ALABE	P48 - ALTURA_IMPPELLER
1	790	42.5	-170
2	80	42.5	-170
3	1500	42.5	-170
4	790	15	-170
5	790	70	-170
6	790	42.5	-300
7	790	42.5	-40
8	212.75	20.142	-275.69
9	1367.3	20.142	-275.69
10	212.75	64.858	-275.69
11	1367.3	64.858	-275.69
12	212.75	20.142	-64.306
13	1367.3	20.142	-64.306
14	212.75	64.858	-64.306
15	1367.3	64.858	-64.306

Figura 47. Puntos a simular requeridos por el DOE empleado (CCD)

Al obtener los resultados del DOE, se puede construir una superficie de respuesta con diferentes métodos (explicados en el capítulo 4), para este caso se utilizó una función polinomial estándar de segundo orden, la cual tiene buenas propiedades de aproximación y no es tan sensible a puntos de respuesta, lo que hace que la tendencia sea conservadora y confiable. En la siguiente figura se puede ver la interfaz del software en donde se establece el uso del metamodelo:

	A	B
1	Property	Value
2	Design Points	
3	Preserve Design Points After DX Run	<input checked="" type="checkbox"/>
4	Retain Files for Preserved Design Points	<input type="checkbox"/>
5	Meta Model	
6	Response Surface Type	Standard Response Surface - Full 2-nd Order Polynomials
7	Refinement	
8	Refinement Type	Manual
9	Verification Points	
10	Generate Verification Points	<input type="checkbox"/>

Figura 48. Interfaz del Design Explorer para la elección del meta modelo para la creación de la superficie de respuesta.

Es recomendable elegir la opción “*preserve design points after DX run*” la cual guarda los valores obtenidos en el *parameter set* para poder tener un registro de los puntos simulados con sus respectivos valores obtenidos. Además, se podría marcar la opción “*retain files for preserved design points*”, sin embargo se debe tener cuidado en cuanto a la memoria ya que esta opción activa el guardado de cada simulación de forma independiente.

El tipo de meta modelo usado nos entrega una función de aproximación del modelo el cual se puede representar mediante curvas de tendencia. Posteriormente estas se utilizan como punto de partida para refinar y enfocar, mediante el realizado de más simulaciones, zonas de interés para acercarnos más a la solución. Esto se muestra en el capítulo de resultados.

Finalmente, se realiza la búsqueda del diseño óptimo mediante el uso de un algoritmo de optimización. En este caso se utilizó el algoritmo llamado MOGA, el cual utiliza a la función de la superficie de respuesta para la obtención de los puntos requeridos para la búsqueda. Al utilizar este método es necesario indicar ciertos parámetros, tal como se muestra en la siguiente figura:

Tabla 11. Parámetros de ajuste del algoritmo MOGA

5	Optimization	
6	Optimization Method	MOGA
7	Number of Initial Samples	1000
8	Number of Samples Per Iteration	1000
9	Maximum Allowable Pareto Percentage	60
10	Maximum Number of Iterations	300
11	Size of Generated Sample Set	1000
12	Verify Candidate Points	<input type="checkbox"/>

Como se muestra, se realizó la búsqueda entre 1000 puntos de diseño del sistema (se recomienda utilizar un numero de muestras de como mínimo 10 veces el número de parámetros de entrada), además estas fueron procesadas en cada iteración y actualización del algoritmo. El parámetro “máximo allowable Pareto percentage” es para definir el máximo porcentaje de los puntos de la primera frontera de Pareto que se desea calcular, este valor se recomienda usar entre 55 y 75% (22).

Una vez configurado el algoritmo de optimización se indica los objetivos a encontrar, a continuación se indica la interfaz en donde se configura los dos objetivos en este estudio:

Table of Schematic B4: Optimization						
	A	B	C	D	E	K
1		P21 - VelRPM (rev min ⁻¹)	P46 - ANGULO_ALABE	P48 - ALTURA_IMPELLER	P37 - PotenciaW (W)	P67 - Promedio del CV
2	Optimization Domain					
3	Lower Bound	80	15	-300		
4	Upper Bound	1500	70	-40		
5	Optimization Objectives					
6	Objective	No Objective	No Objective	No Objective	Minimize	Minimize
7	Target Value					
8	Importance				Lower	Higher
9	Constraint Handling					
10	Candidate Points					
11	Candidate A	322.9	65.569	-127.34	★★ 118.3	★★★ 9.0217
12	Candidate B	354.55	63.413	-121.9	★★ 140.87	★★★ 8.415
13	Candidate C	390.29	62.452	-115.98	★★ 173.74	★★★ 7.7834

Tabla 12. Interfaz para configuración de objetivos y elección de candidatos

Minimizar el coeficiente de variación y la potencia indicado en la siguiente figura (frontera de Pareto):

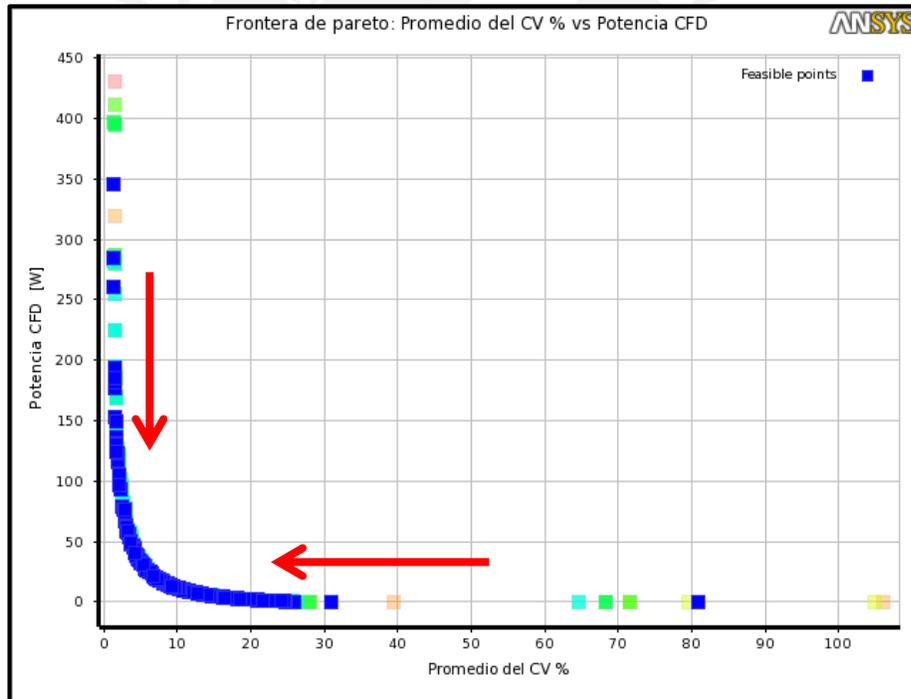


Figura 49. Frontera de Pareto indicando función objetivo para la optimización.

Finalmente, el optimizador realiza la búsqueda y nos muestra candidatos como se muestra en la figura anterior. La curva en azul de la figura está dada por un conjunto de puntos que se hallaron y que son obtenidos por alguna combinación en los rangos de los parámetros variables de entrada. Es decir es posible encontrar zonas óptimas según esas funciones objetivo. La labor posterior es simplemente refinar con más puntos de

simulación los resultados y la función de aproximación obtenida en el método de la superficie de respuesta. Una buena práctica es utilizar los resultados del algoritmo de optimización y utilizar esos puntos para refinar la superficie de respuesta hasta que converja la solución.

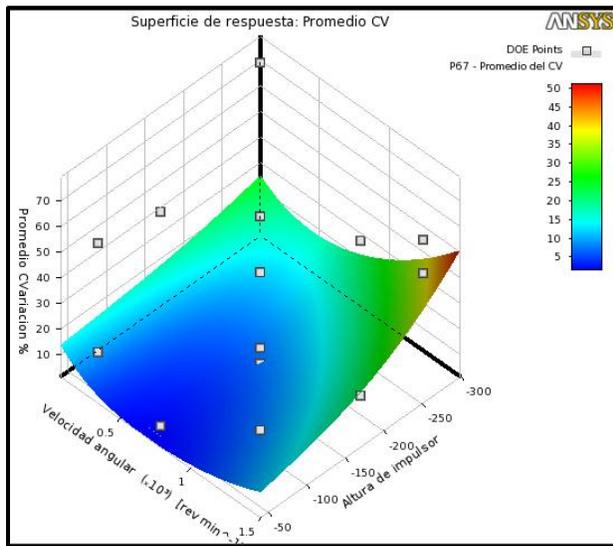


CAPITULO 6: RESULTADOS

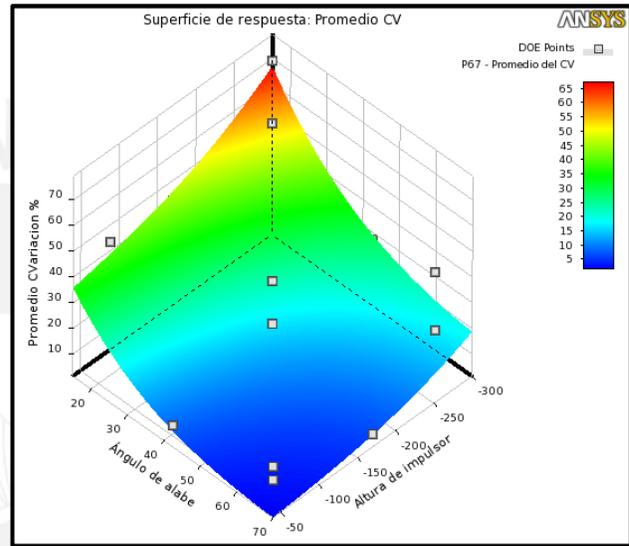
6.1. Superficie de respuesta del DOE

A continuación se muestra las superficies de respuesta en donde se observa la aproximación y la tendencia del comportamiento del sistema basado en los puntos simulados según lo requerido por el DOE (15 puntos). Cabe recordar que son tres parámetros variables: ángulo de alabe, altura de impulsor y velocidad de rotación.

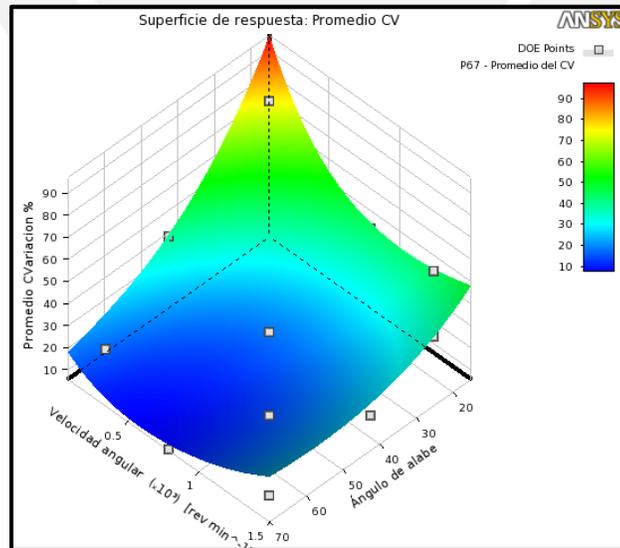
Función objetivo: Promedio CV



(a) Velocidad angular vs. Altura de impulsor



(b) Ángulo de alabe vs. Altura de impulsor

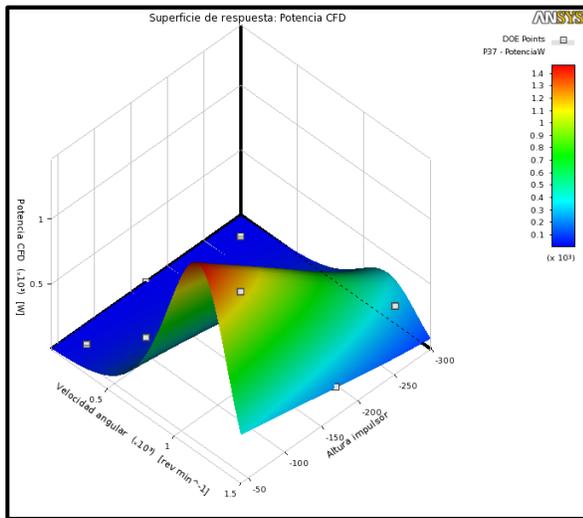


(c) Velocidad angular vs. Ángulo de impulsor

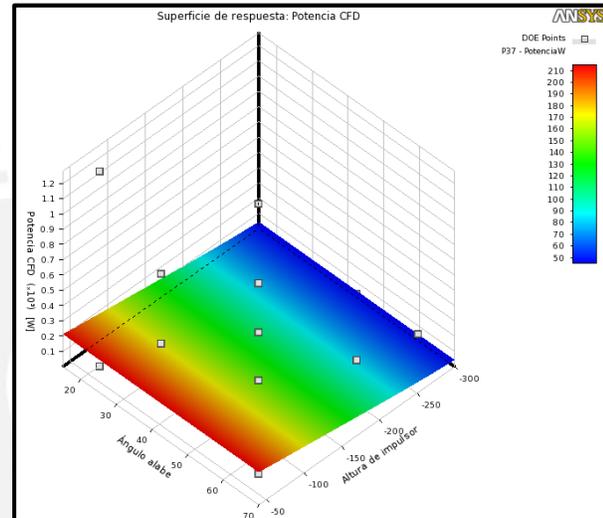
Figura 50. Superficies de respuesta de los parámetros variables con la función objetivo: Promedio CV.

A pesar de ser curvas obtenidas con tan solo 15 puntos de simulación, podemos ver que tienen una tendencia bien definida. Para el caso de las curvas que muestran el Promedio del coeficiente de variación podemos ver que al ser líquidos miscibles se tiene un rango bien amplio de buena mezcla (bajo CV) para la variación de los tres parámetros y que las zonas de bajo grado de mezcla son zonas en donde se tiene muy bajas velocidades de rotación, el ángulo del impulsor es pequeño o el impulsor esta muy alejado de la base.

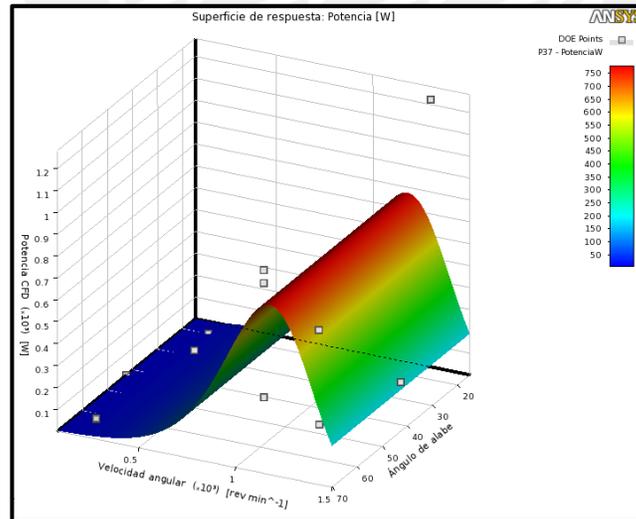
Función objetivo: Potencia CFD



(a) Velocidad angular vs. Altura de impulsor



(b) Angulo de alabe vs. Altura de impulsor



(c) Velocidad angular vs. Angulo de impulsor

Figura 51. Superficies de respuesta de los parámetros variables con la función objetivo: Potencia CFD

Por otro lado en las gráficas para la potencia se puede ver que esta tiende a aumentar conforme aumentan las revoluciones y que además aumentan conforme el impulsor se encuentra más cerca a la base del tanque. No se ve cambios apreciables de potencia con cambios del ángulo del alabe.

6.2. Superficie de respuesta final

El refinamiento de las curvas de respuesta se realizó en las zonas de interés en donde se tenía puntos cercanamente óptimos, para esto se utilizaron cerca de 100 simulaciones para definir las características de las zonas de interés, en donde se pueda ajustar mejor la superficie.

Función objetivo: Promedio CV

En la siguiente figura se muestra que la mezcla es buena en la mayor parte del campo de estudio y menor a 15% en donde se tiene velocidades de rotación de 300 a 1000rpm con alturas de impulsor de 260 a 400mm.

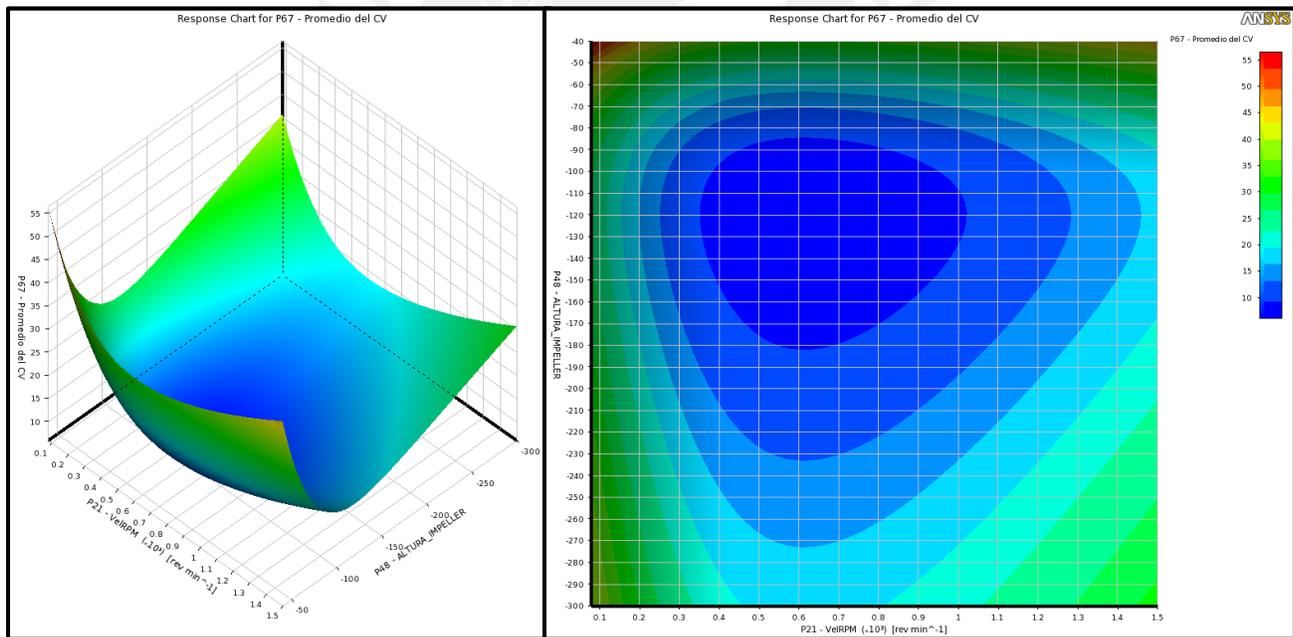


Figura 52. Velocidad de rotación vs. Altura de impulsor - función objetivo: Promedio CV.

En la curva en donde se muestra el parámetro de velocidad y posición con ángulo de alabe, se puede ver que también se tiene relativamente una buena mezcla en un gran rango de variación de los parámetros. En estos casos se muestra que la mezcla es mejor para ángulos mayores a 45 grados.

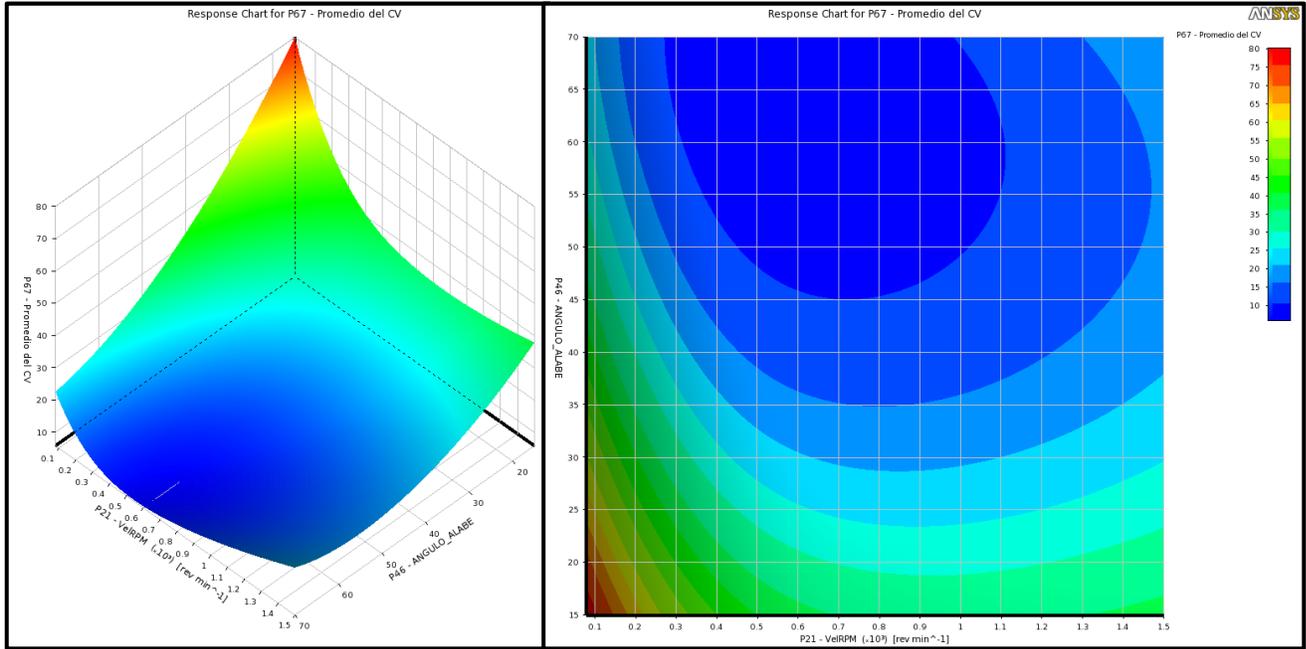


Figura 53. Velocidad de rotación vs. Angulo de alabe - función objetivo: Promedio CV.

Finalmente, en las tres graficas se puede observar la misma tendencia obtenidas en las gráficas del DOE. Se muestra que el grado de mezcla no es bueno para zonas de bajas velocidades, para ángulos muy bajos y cuando el impulsor está muy alejado de la base del tanque.

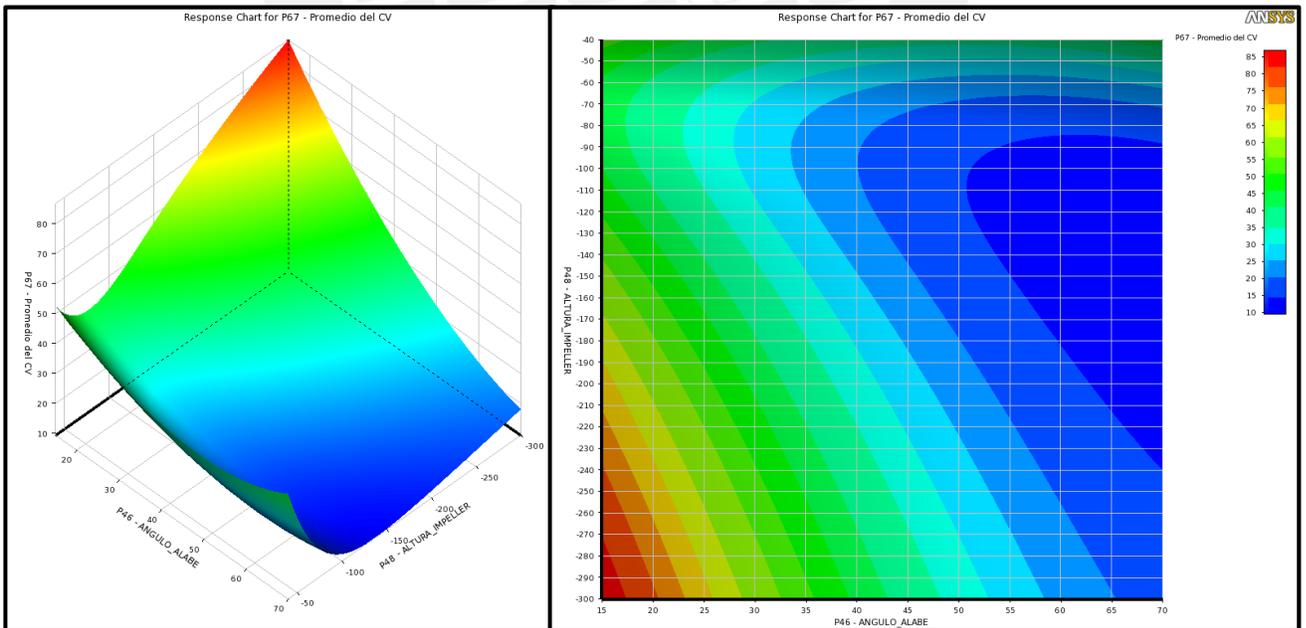


Figura 54. Angulo de alabe vs. Altura de impulsor- función objetivo: Promedio CV.

Función objetivo: Potencia CFD

En cuanto a la potencia requerida, se muestra que esta es menor para bajas revoluciones (menores a 500rpm), para altura del impulsor más alejado del tanque y para bajos ángulos de inclinación de los alabes. Se puede ver más al detalle en las siguientes figuras:

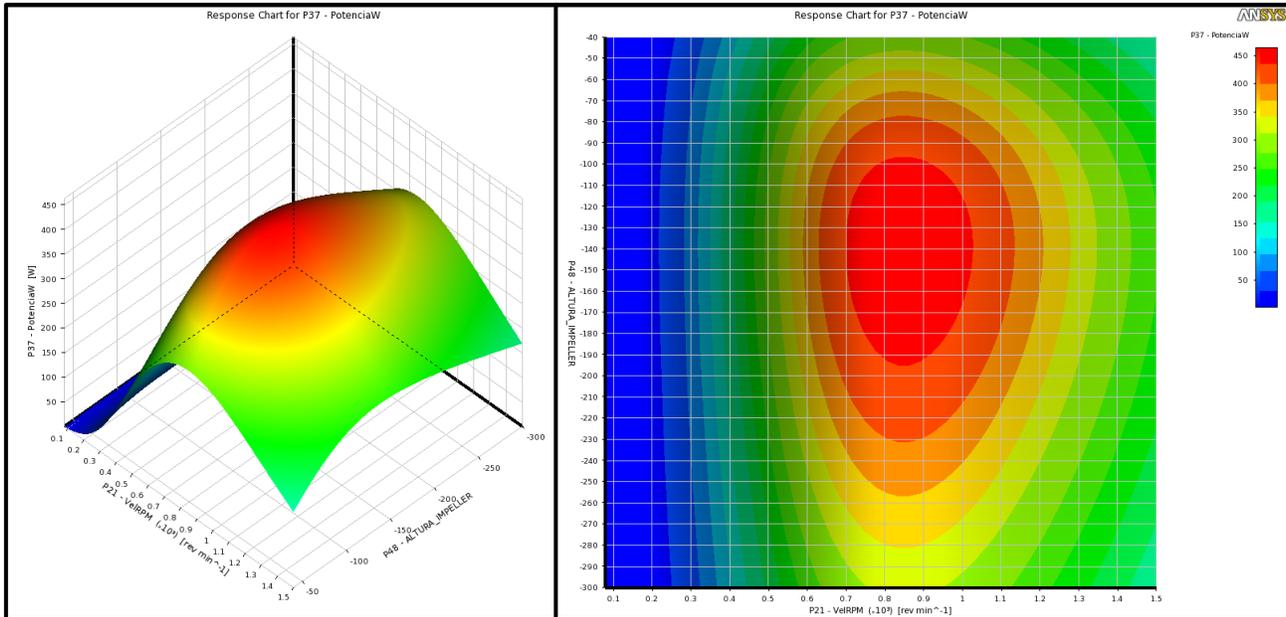


Figura 55. Velocidad de rotación vs. Altura de impulsor - función objetivo: Potencia CFD

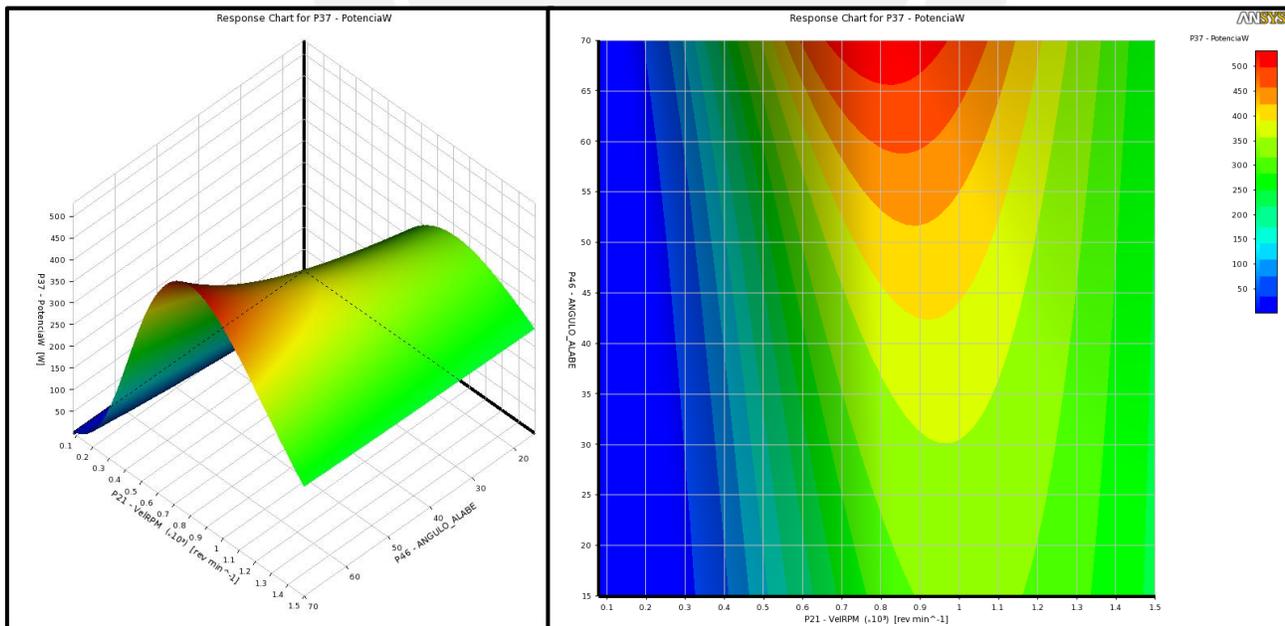


Figura 56. Velocidad de rotación vs. Ángulo de alabe - función objetivo: Potencia CFD

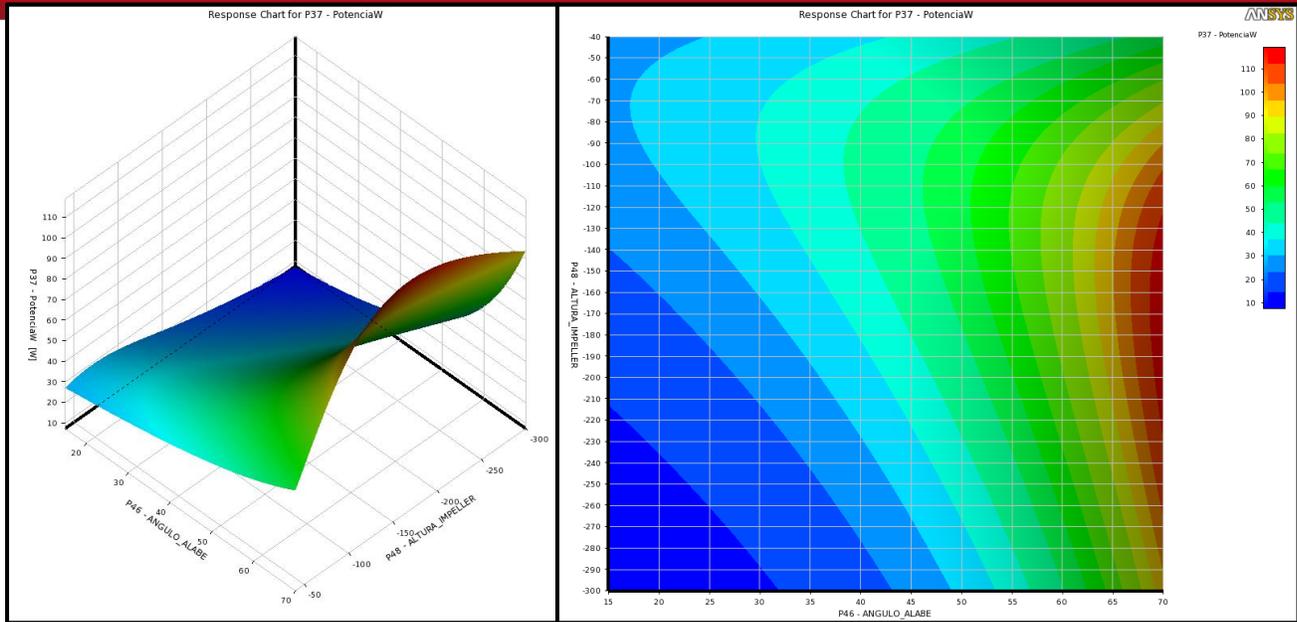


Figura 57. Angulo de alabe vs. Altura de impulsor- función objetivo: Potencia CFD

Se puede decir que una zona óptima sería intersectando todas estas curvas y buscando la mínima potencia y minimizando el coeficiente de variación lo cual caracteriza a un mejor grado de mezcla. Sin embargo, intersectar superficies y realizar una búsqueda manual suele complicarse cuando existen más objetivos o más parámetros variables, es por eso que se emplea un método o algoritmo de optimización en conjunto con una función de respuesta para poder obtener estos valores.

Por último, con la optimización podemos obtener una gráfica en donde se puede ver la sensibilidad de los parámetros, es decir cuánto influyen los parámetros de entrada en las variables de entrada. En la siguientes imágenes podemos ver cuánto influye la velocidad de rotación, altura de impulsor y ángulo de alabe en la potencia, torque, grado de mezcla

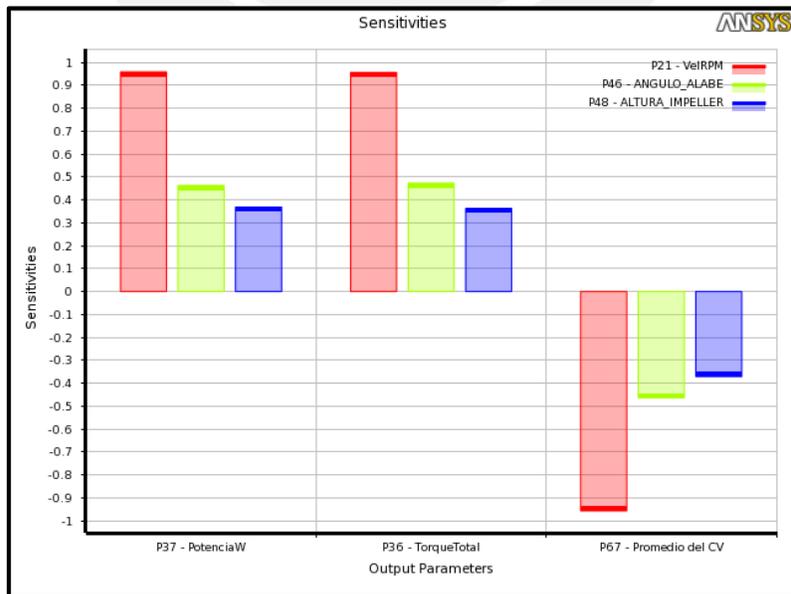


Figura 58. Sensibilidad de los parámetros en la potencia, torque y grado de mezcla

y números adimensionales como: N_q , N_p , P efecto.

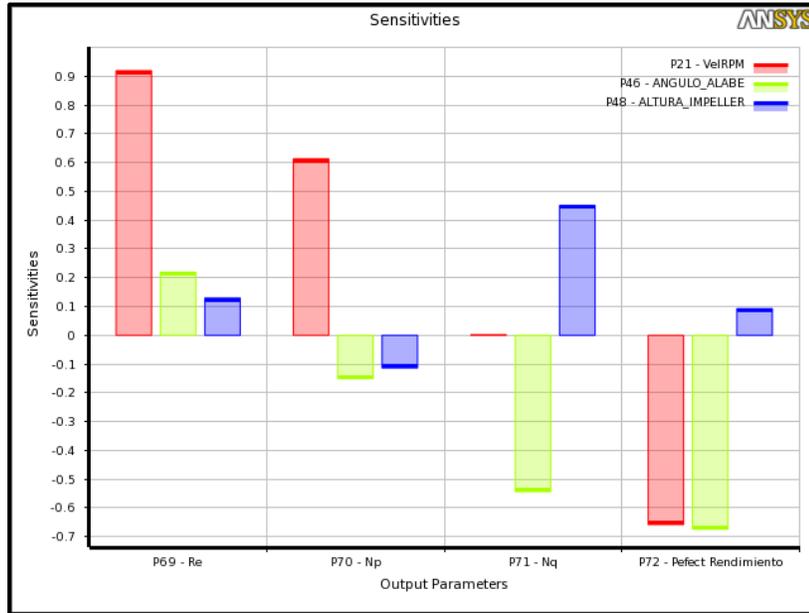


Figura 59. Sensibilidad de los parámetros en el Re, N_p , N_q , Pefect

Se observa que para las configuraciones geométricas dadas, la velocidad de giro es la variable que más influye en la potencia consumida, torque, grado de mezcla, numero de Reynolds y numero de Potencia; mientras que el ángulo del alabe es la segunda variable más influyente, cuyo impacto es mayor en el número de Caudal.

6.3. Selección de diseño óptimo

El resultado de la búsqueda de soluciones óptimas entrego muchas soluciones para lo cual se eligió cualquiera de ellas, para fines demostrativos de este trabajo. Cabe decir que hay muchas soluciones óptimas las cuales ponderan entre los diferentes objetivos de diferente manera. En este caso se podría tener una solución que tenga mejor consumo de potencia pero menor grado de mezcla y viceversa. Este campo de soluciones óptimas se conoce como "frontera de Pareto" la cual se grafica como un resultado de la optimización, mostrándonos este campo de soluciones posibles.

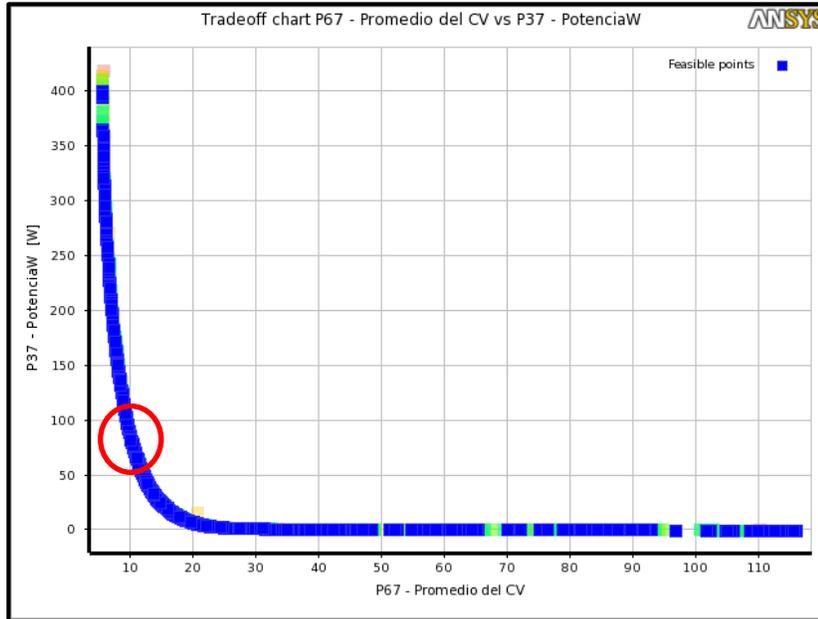


Figura 60. Frontera de Pareto, soluciones elegidas para la selección del diseño óptimo.

En este trabajo se ponderó más el grado de mezcla que la potencia consumida en lo que se refiere al campo de soluciones optimas como se puede ver en la figura anterior, sin embargo en cuanto a la comparación del diseño inicial (el que se tomó como base en este trabajo) se buscó una potencia consumida algo menor para poder apreciar la diferencia entre los diseños. En la siguiente tabla se muestran las características y la comparación de los diseños (inicial y óptimo).

Tabla 13. Resultados de los diseños (inicial y optimo)

PARAMETROS DE ENTRADA			
DISEÑO	Inicial	Optimo	
Velocidad de rotación	400	350	rpm
Angulo de alabe	45	60	grados
Altura de impulsor	240	299	mm
PARAMETROS DE SALIDA			
Potencia CFD	131.16	121.02	W
Promedio del CV	15.4	9.8	%
Promedio VF metanol	0.471	0.459	
Densidad mezcla	862	867	kg/m ³
Viscosidad mezcla	7.51E-04	7.54E-04	Pa s
Re	370519	324457	

Np	0.996	1.365	
Nq	0.514	0.379	
P efectiva	0.516	0.277	

6.3. Diseño inicial

En el diseño inicial se puede observar que la fracción de masa de metanol en la zona baja del tanque es baja, lo cual indica que no existe buen grado de homogenización.

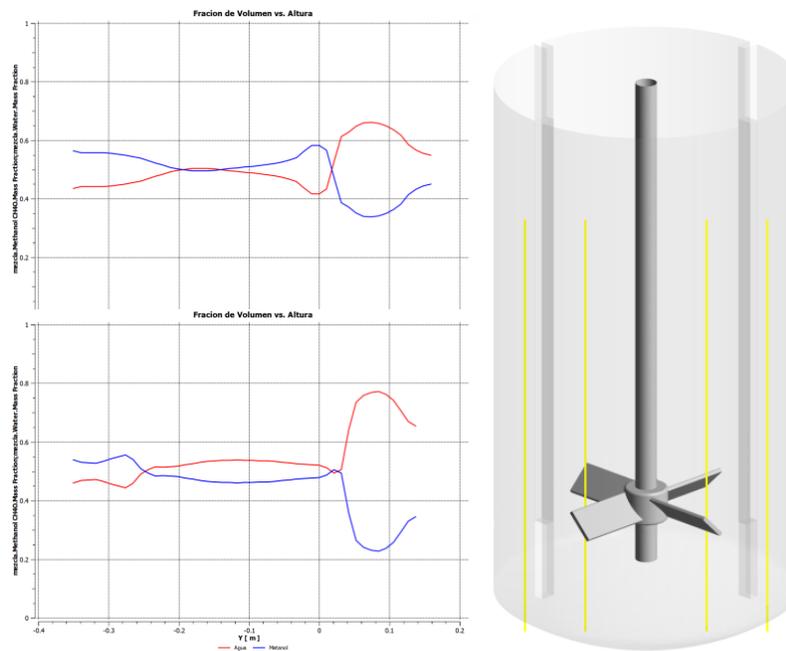


Figura 61. Fracción de masa de metanol en la altura del agitador.

En la figura anterior podemos ver que alrededor de 50mm desde la base tiene una mezcla con baja concentración de metanol (30%) y se sabe que la mezcla ideal debería tener un valor de 50%. Es decir en la parte inferior se tiene zonas con gran cantidad de mezcla con una gran cantidad de agua y poco metanol, esto se puede observar en la siguiente imagen:

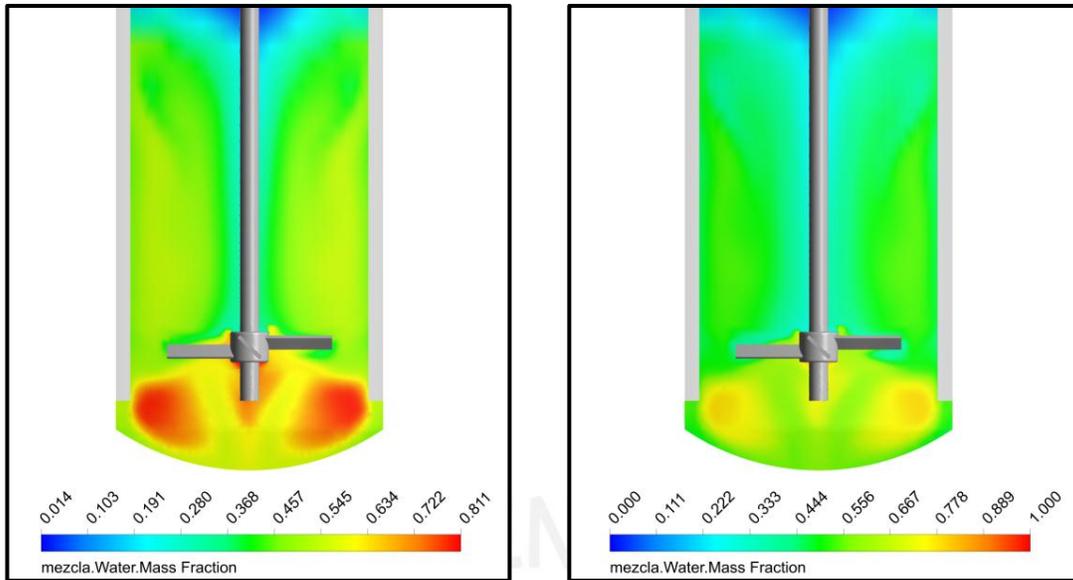


Figura 62. Fracción de masa de agua con diferentes escalas.

Las zonas inferiores al impulsor y cercanas a la pared tienen una cantidad de agua cerca a 80% por lo que la cantidad de metanol es de 20%, mientras que en las zonas superiores al impulsor se tiene una mezcla homogénea con aproximadamente 46% de agua y 54% de metanol.

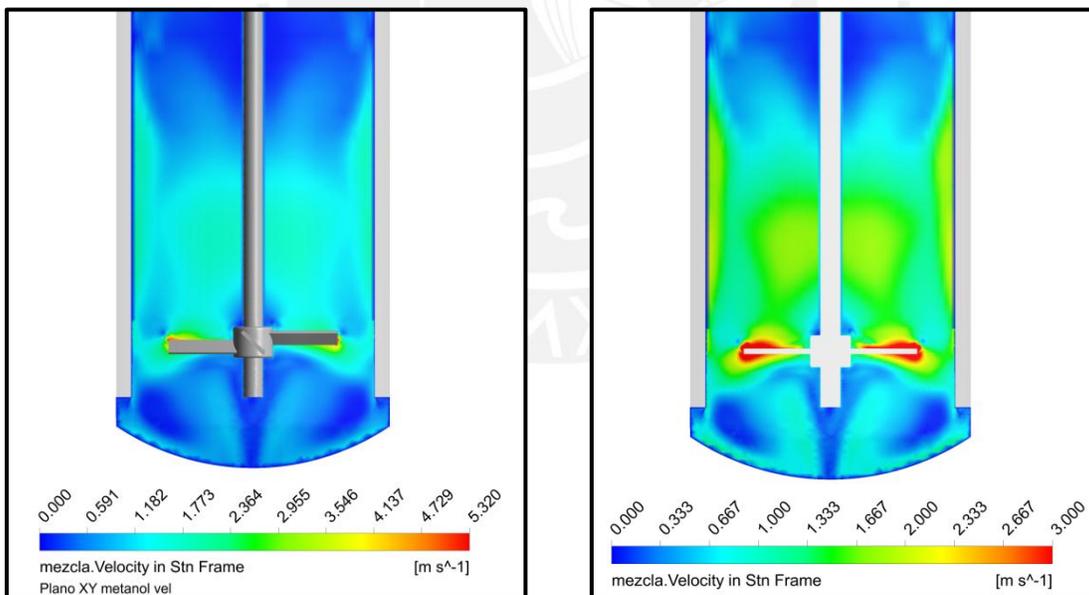


Figura 63. Campo de velocidades con escala real (izquierda) y escala ajustada (derecha).

Uno de las razones por la cual sucede esto es que el campo de velocidades presenta ciertas zonas de baja velocidad es decir de puntos de velocidad de metanol igual a cero, como se puede ver en la figura 63.

Esto se puede dar debido a que en la zona inferior de los deflectores se forma una vorticidad que genera zonas de baja velocidad la cual no permite buen mezclado, esto se puede observar en la siguiente figura:

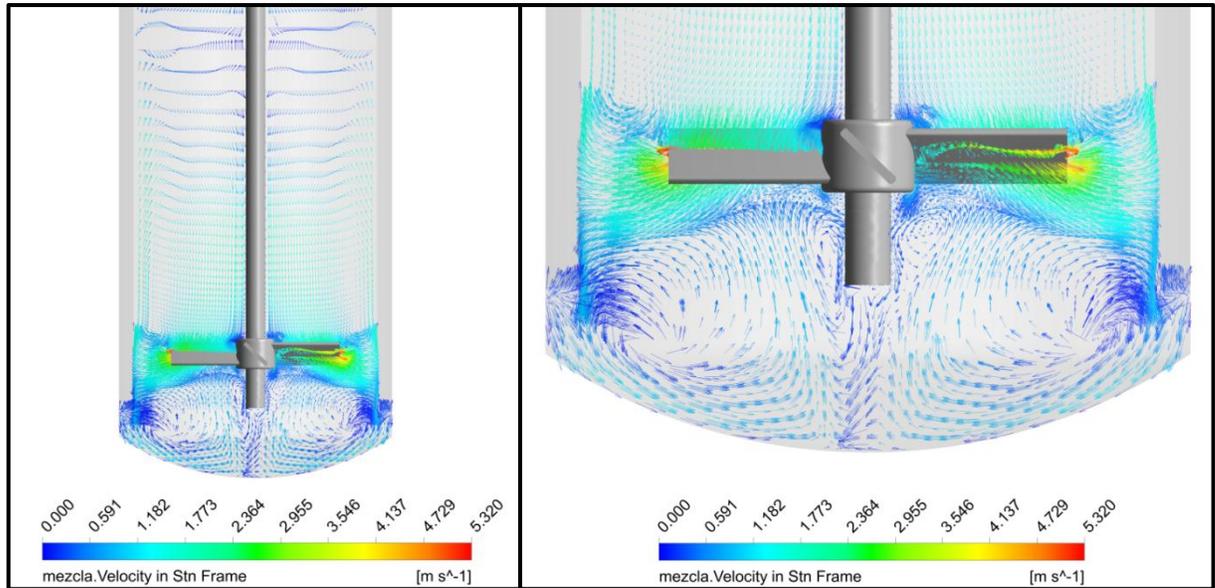


Figura 64. Vectores de velocidad en el tanque y cerca al impulsor (derecha)

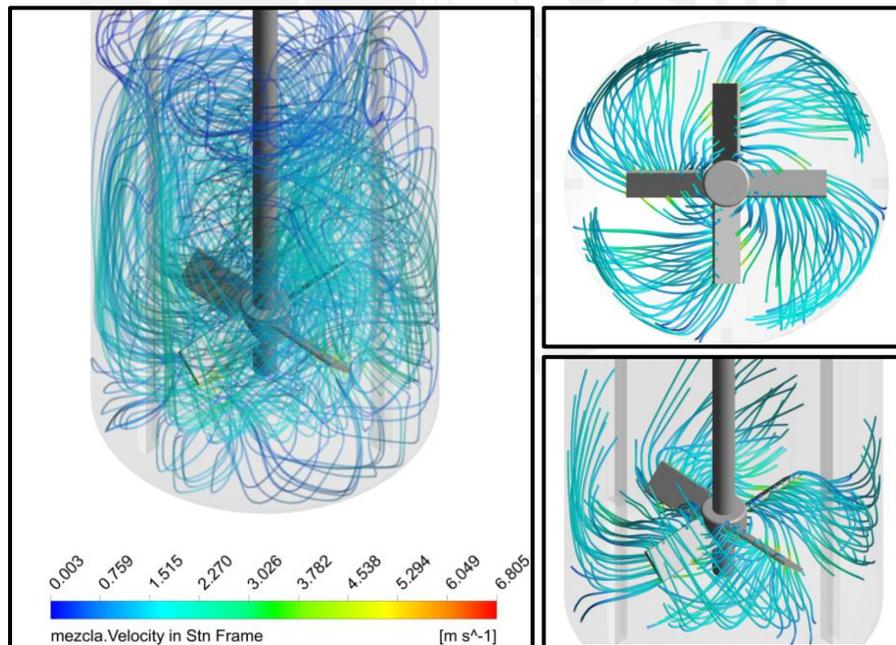


Figura 65. Patrón de flujo, los colores indican velocidad.

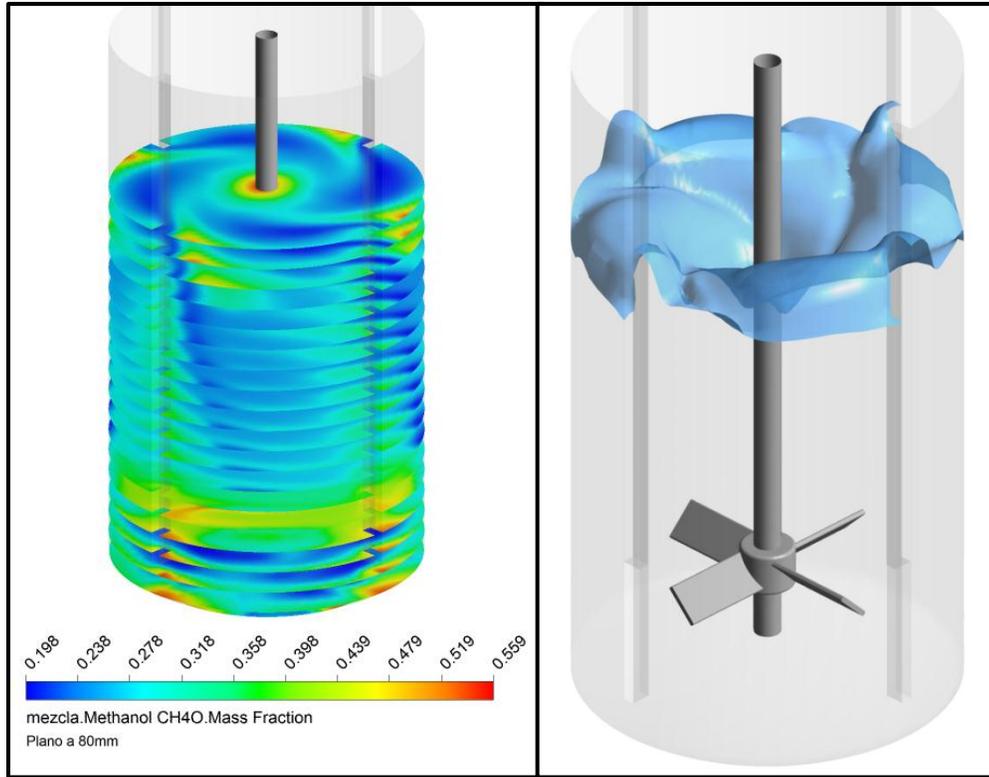
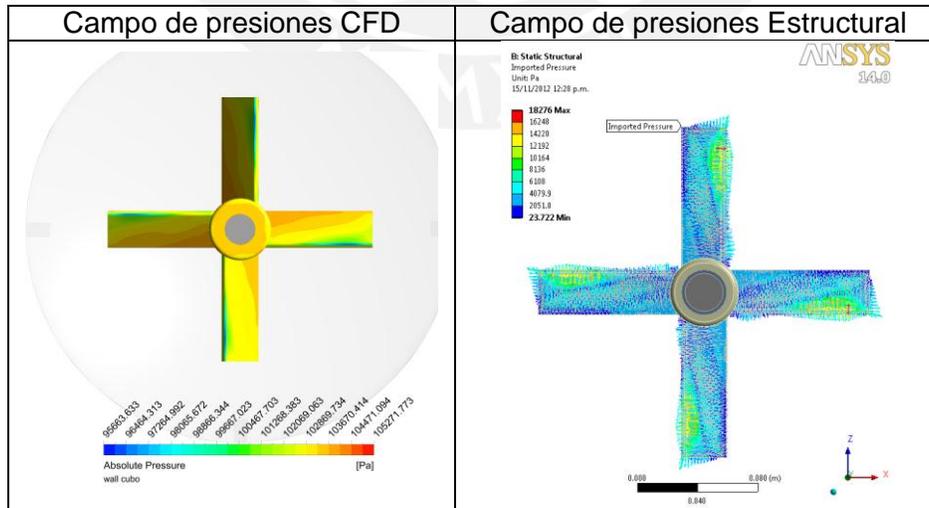


Figura 66. Cortes de sección con fracción de masa de metanol (izquierda) y vórtice formado en la superficie libre (derecha)

Análisis estructural

Por otro lado, se tiene la importación de cargas desde las presiones en CFD hacia el análisis estático estructural, lo cual se muestra en la siguiente figura:



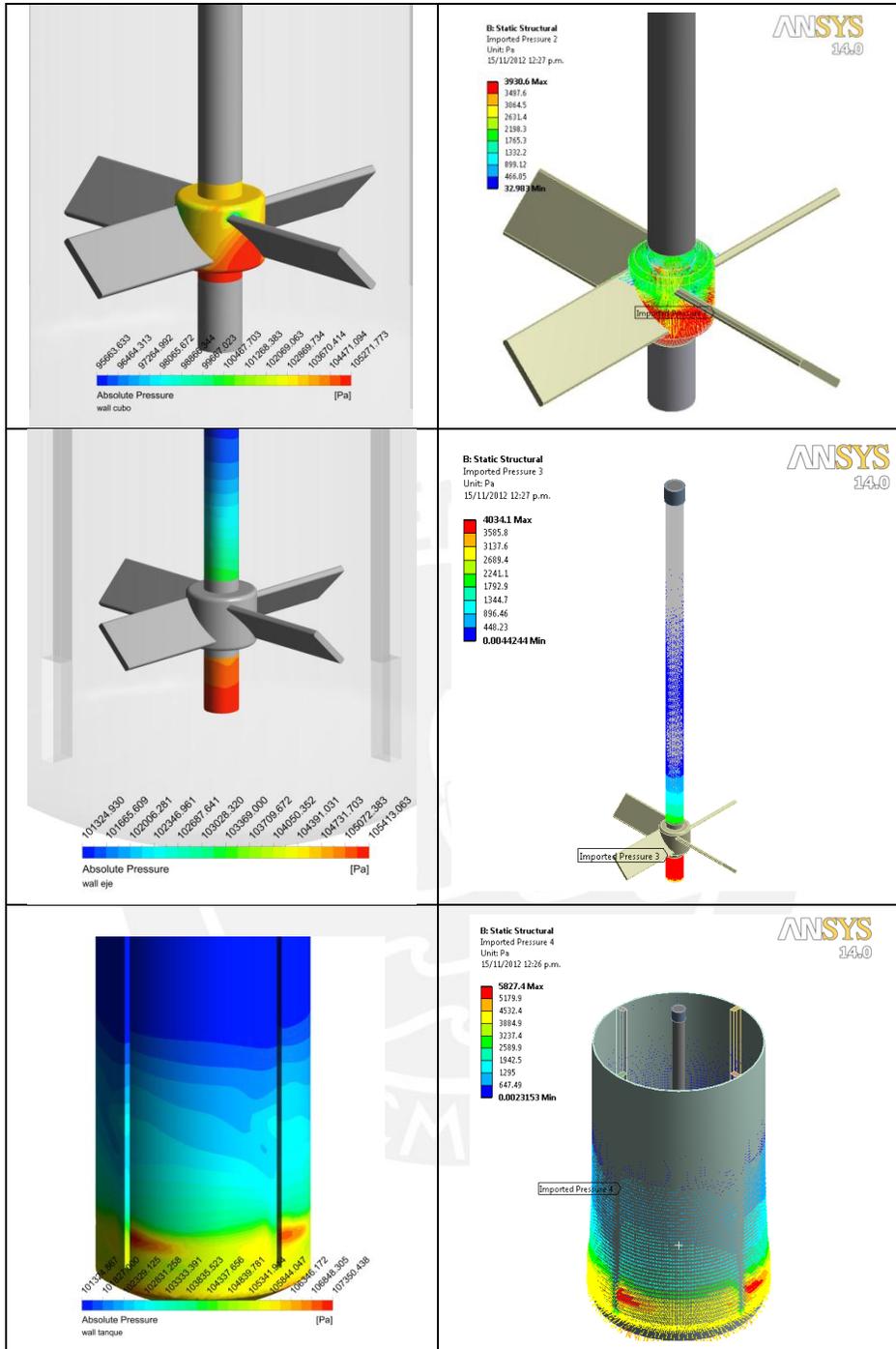


Figura 67. Importación de campo de presión para análisis estructural.

El resultado del análisis estructural (FEA) nos da un valor de 5.6 MPa máximo en el tanque agitador, el cual se da en el impulsor en la zona del empotramiento del alabe mientras que la deformación dada por dicho esfuerzo en el extremo del alabe es de 0.081mm. Esto se puede observar en las siguientes figuras:

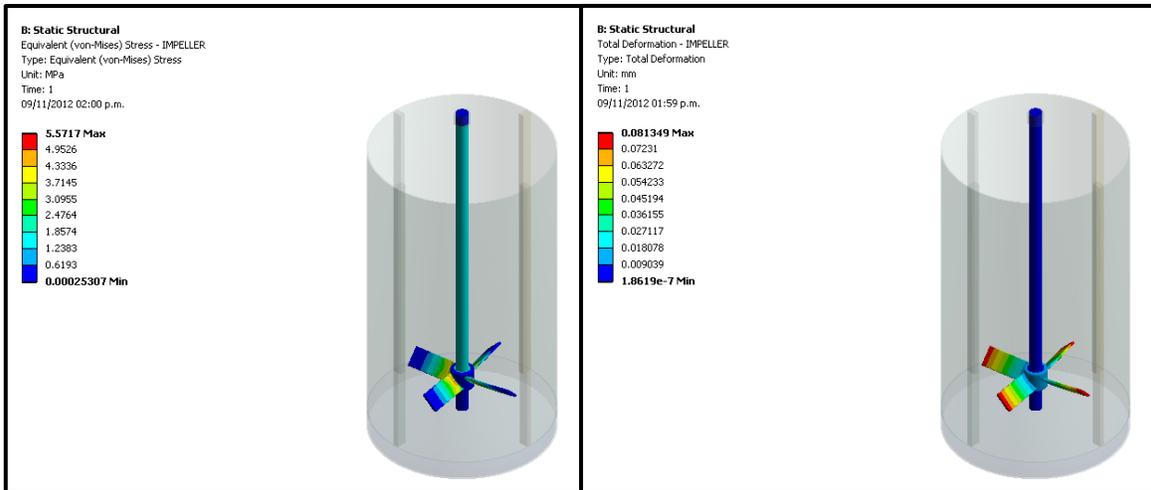


Figura 68. Esfuerzos y deformaciones en el eje-impulsor

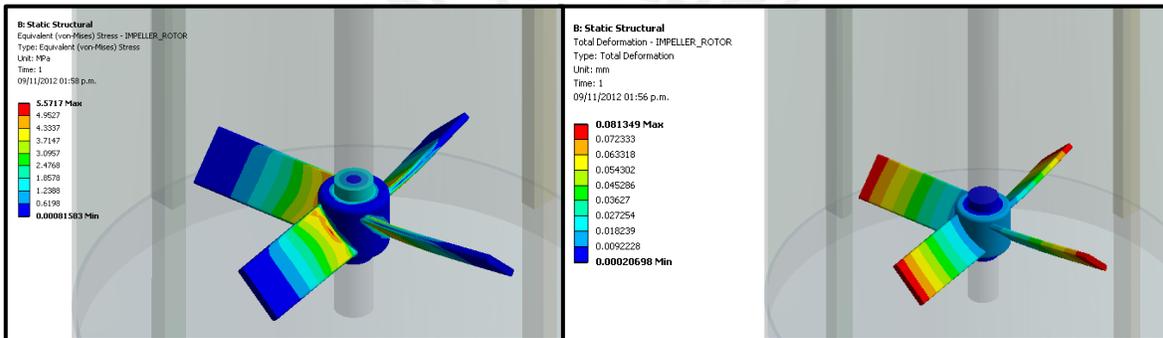


Figura 69. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor

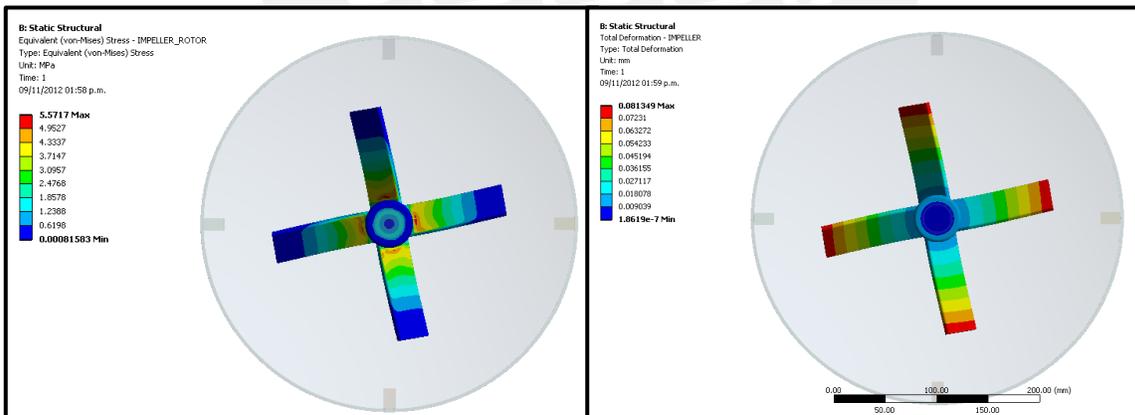


Figura 70. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor

Por otro lado, en cuanto análisis del tanque vemos que el máximo esfuerzo es de 1.3 MPa el cual se da entre las paredes laterales y la base del tanque. La deformación máxima es de 0.00192mm y se da en la base del tanque, la cual es la que soporta el peso de los fluidos más la presión ejercida por la agitación. Esto se muestra en las siguientes figuras:

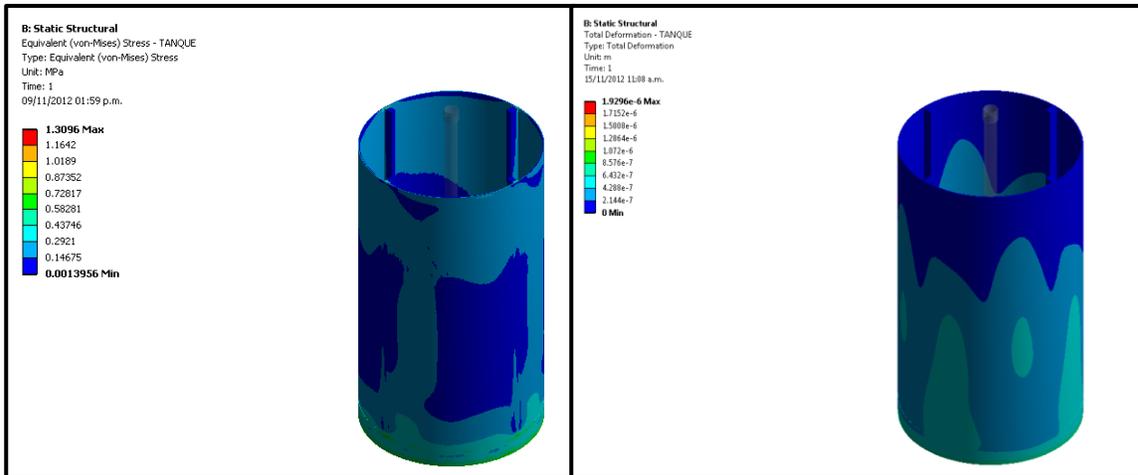


Figura 71. Esfuerzos y deformaciones en el tanque

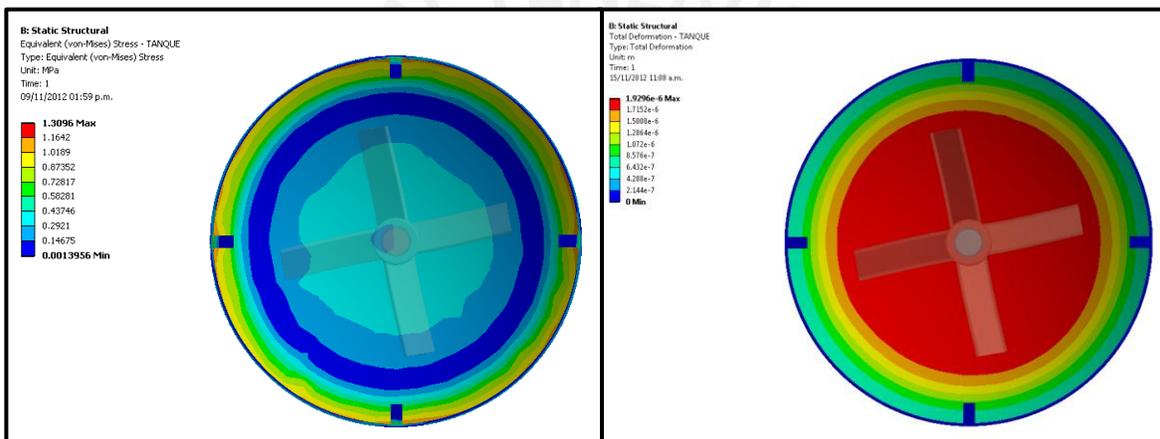


Figura 72. Esfuerzos y deformaciones en la base del tanque

6.4. Diseño óptimo

En el diseño óptimo se puede observar que la fracción de masa de metanol es mas uniforme en toda la altura del agitador y además se obtuvo una mejora de la calidad de mezcla en zonas inferiores al impulsor, en donde el peor caso muestra una concentración de metanol y agua de 40 a 60% respectivamente.

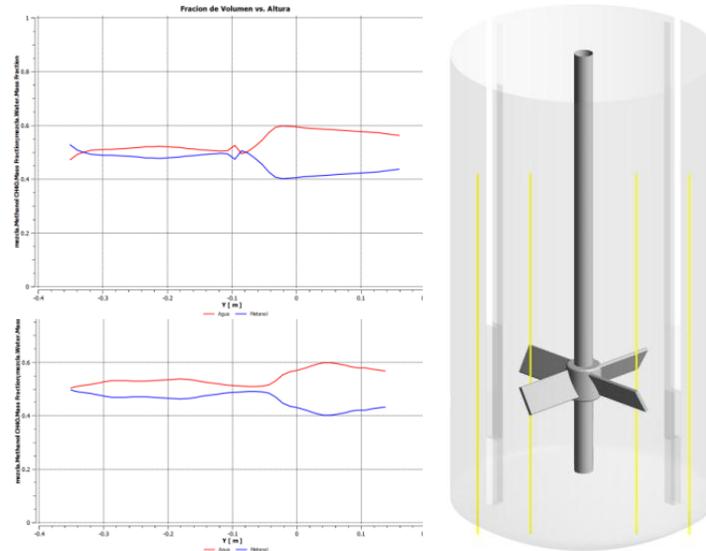


Figura 73. Fracción de masa de metanol en la altura del agitador.

En la figura anterior podemos ver que en la parte superior al impulsor, a pesar de que la mezcla ya resultaba aceptable en el diseño inicial, se mejoró aún más la proporción de fracción de masa y se mejoró considerablemente en la zona inferior en donde se ve un máximo de 60% de concentración de agua, esto se puede observar en la siguiente imagen:

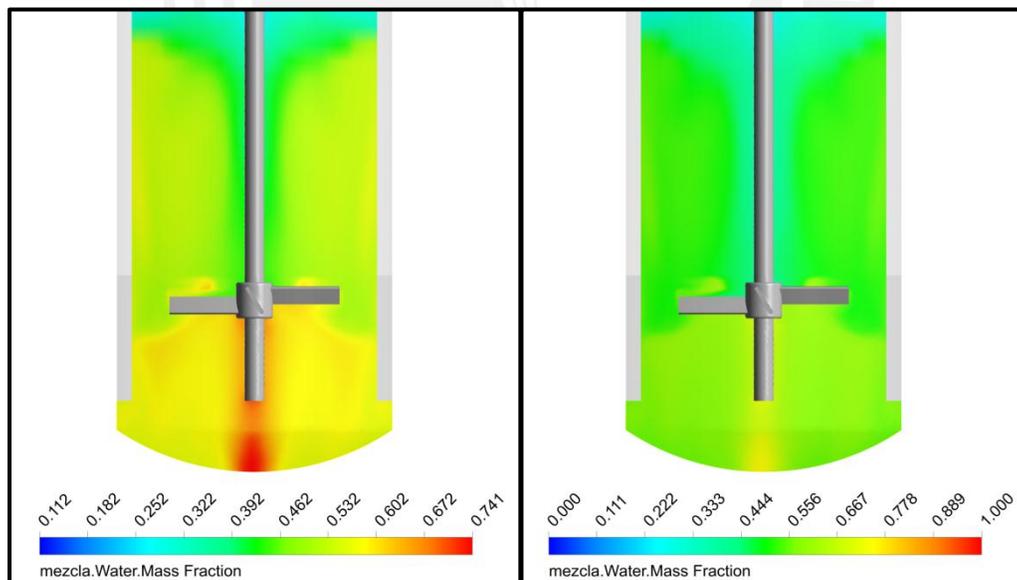


Figura 74. Fracción de masa de agua con diferentes escalas.

Mientras que en la zona superior al impulsor se puede observar una mezcla totalmente uniforme casi con un 50% de fracción de masa de metanol y agua.

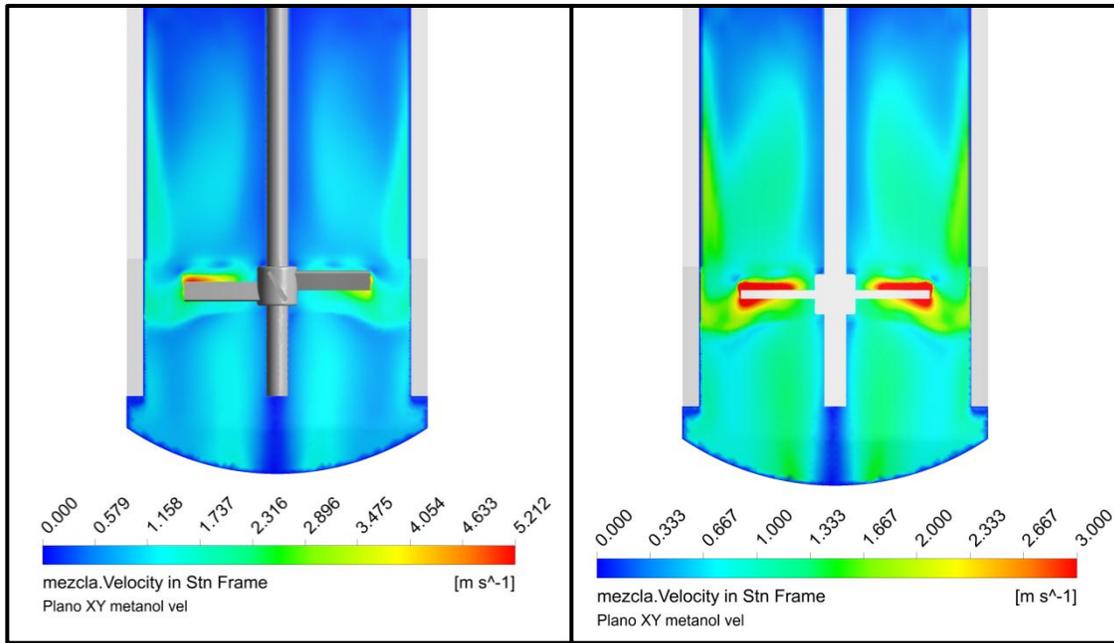


Figura 75. Campo de velocidades con escala real (izquierda) y escala ajustada (derecha).

Uno de los motivos por los que ha mejorado esta mezcla es porque existe una distribución mas uniforme en el campo de velocidad, en donde casi no se tiene puntos de velocidades bajas. Podemos comparar y ver que el diseño inicial tiene una velocidad alta y concentrada en la zona superior mientras que en el diseño optimo se tiene menor velocidad concentrada pero una mejor distribución de la misma en todo el tanque, como se puede ver en la figura 75.

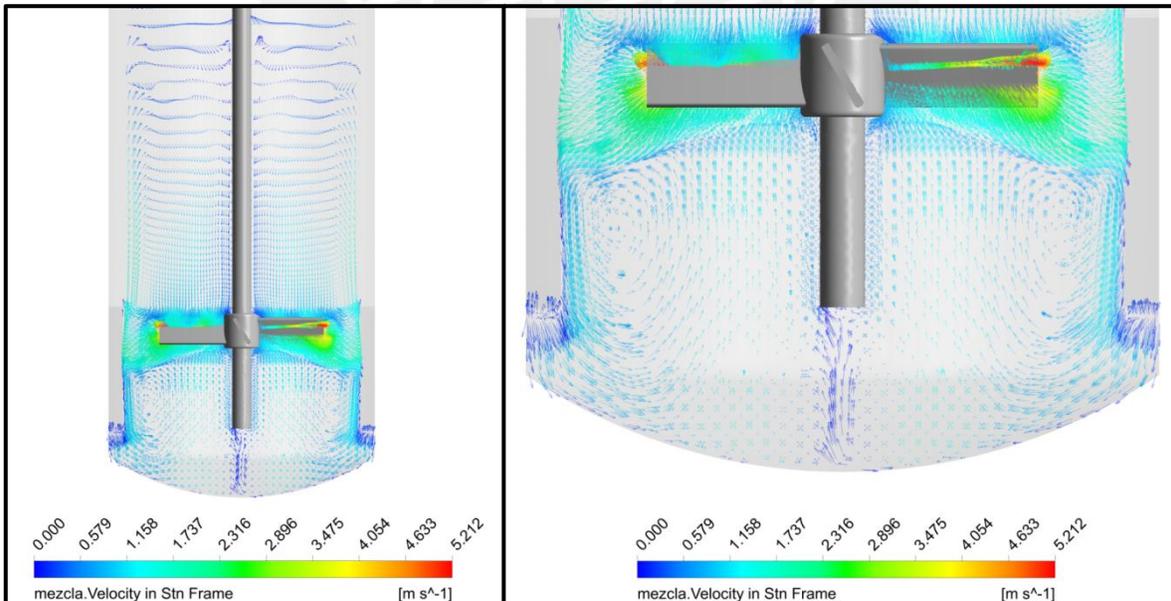


Figura 76. Vectores de velocidad en el tanque y cerca al impulsor (derecha)

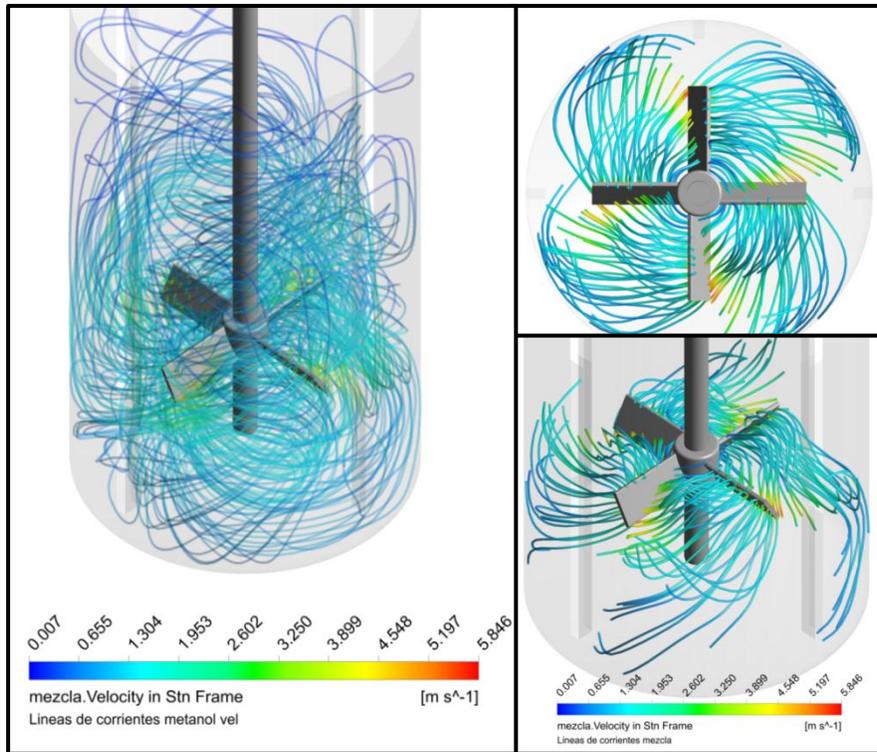


Figura 77. Patrón de flujo, los colores indican velocidad.

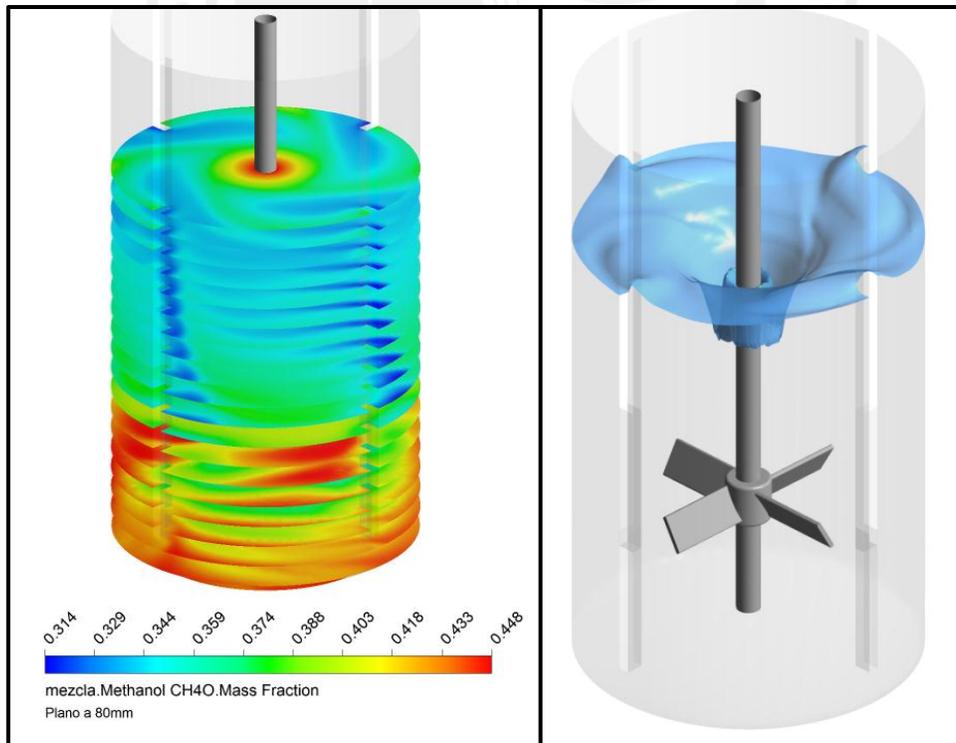
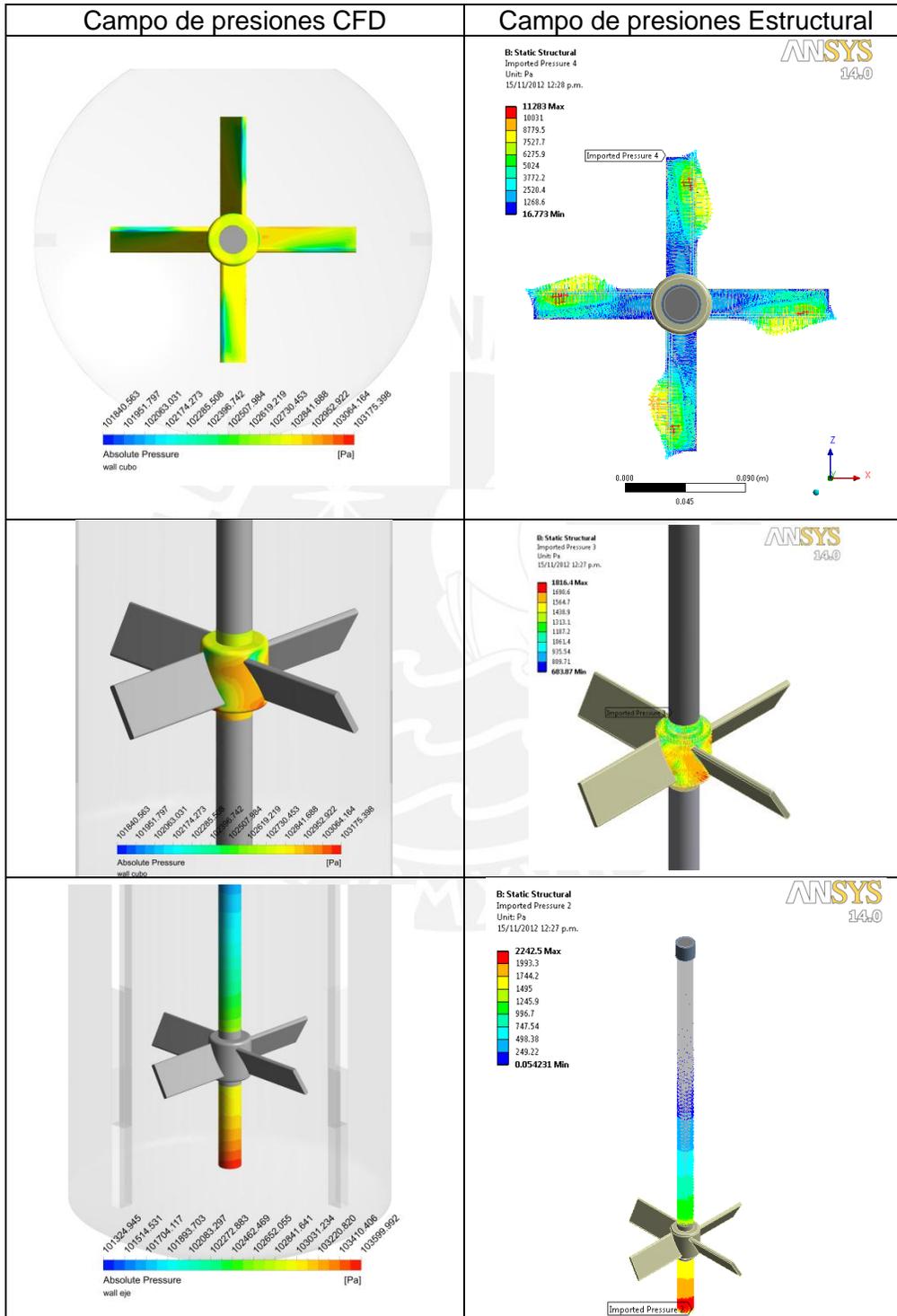


Figura 78. Cortes de sección con fracción de masa de metanol (izquierda) y vórtice formado en la superficie libre (derecha)

Análisis estructural

Por otro lado, se tiene la importación de cargas desde las presiones en CFD hacia el análisis estático estructural, lo cual se muestra en la siguiente figura:



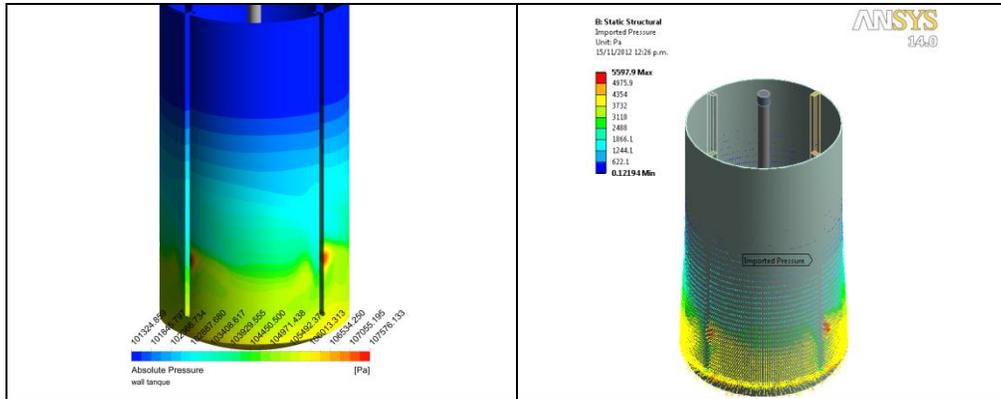


Figura 79. Importación de campo de presión para análisis estructural.

El resultado del análisis estructural (FEA) nos da un valor de 4.5 MPa máximo en el tanque agitador, el cual se da en el impulsor en la zona del empotramiento del alabe mientras que la deformación dada por dicho esfuerzo en el extremo del alabe es de 0.076mm. Esto se puede observar en las siguientes figuras:

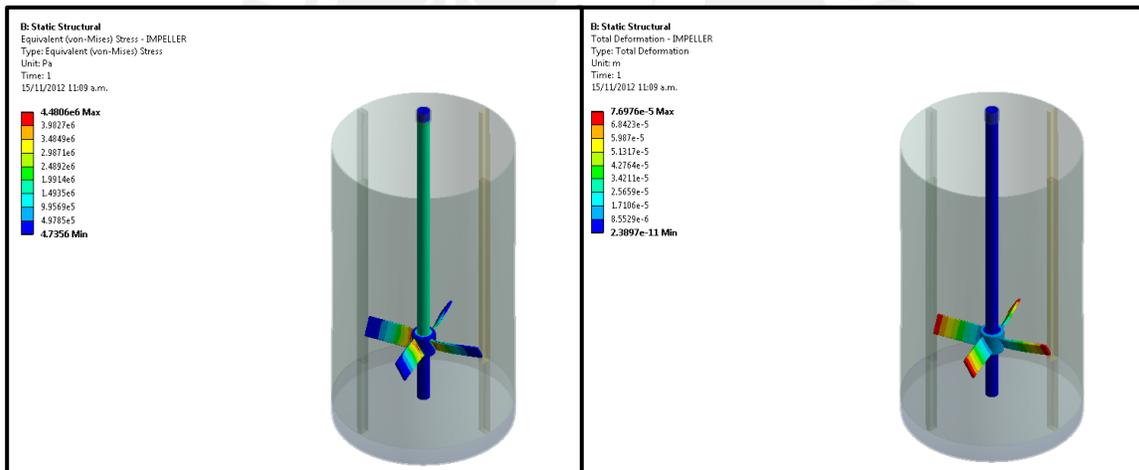


Figura 80. Esfuerzos y deformaciones en el eje-impulsor

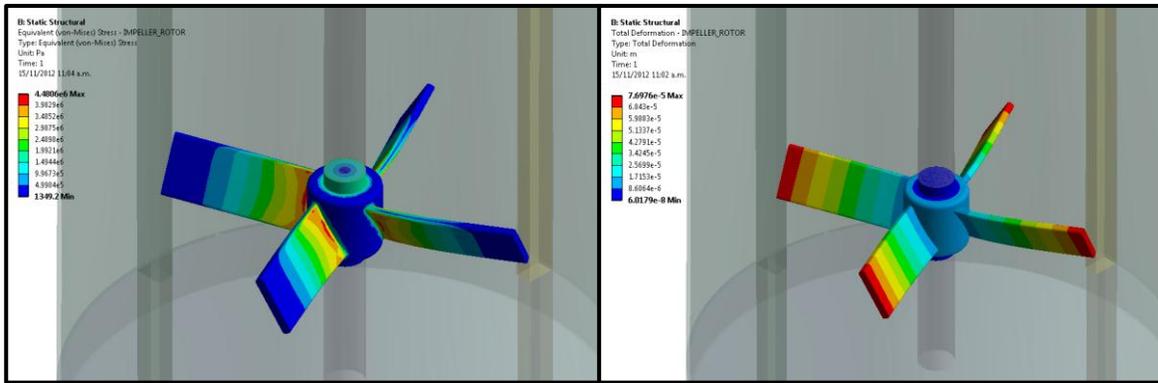


Figura 81. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor

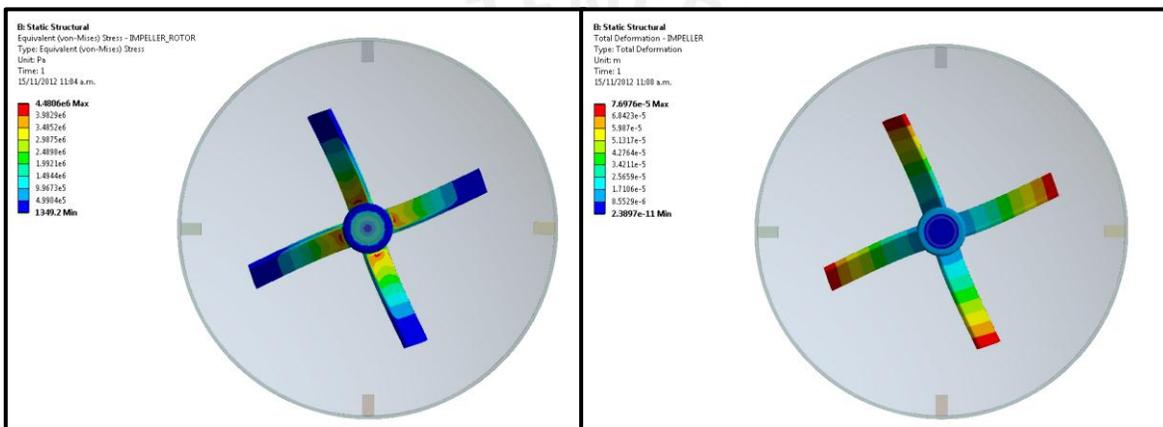


Figura 82. Esfuerzos y deformaciones en los alabes del impulsor

Por otro lado, en cuanto análisis del tanque vemos que el máximo esfuerzo es de 0.93MPa el cual se da entre las paredes laterales y la base del tanque. La deformación máxima es de 0.00156mm y se da en la base del tanque, la cual es la que soporta el peso de los fluidos más la presión ejercida por la agitación. Esto se muestra en las siguientes figuras:

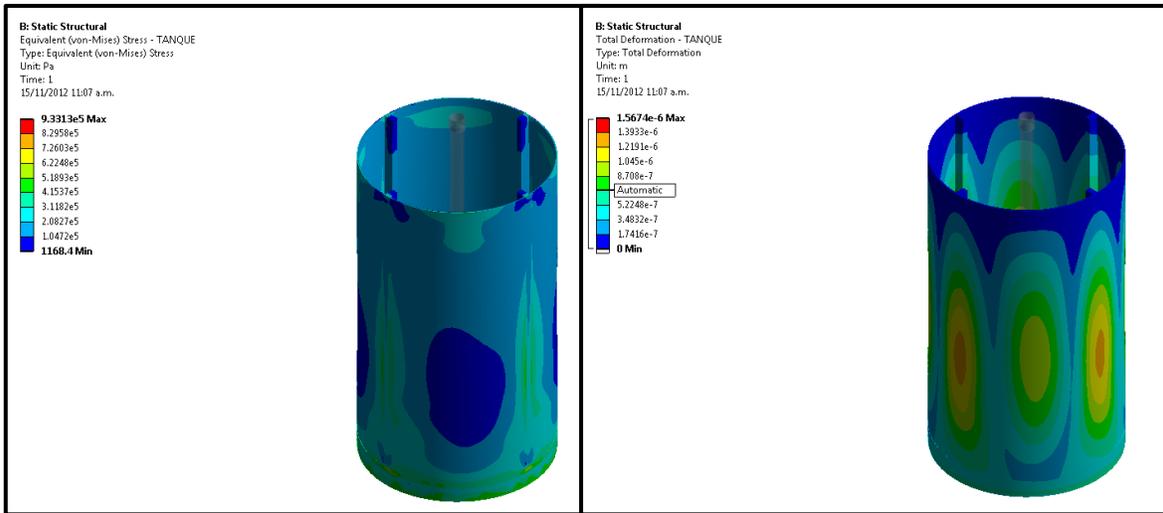


Figura 83. Esfuerzos y deformaciones en el tanque

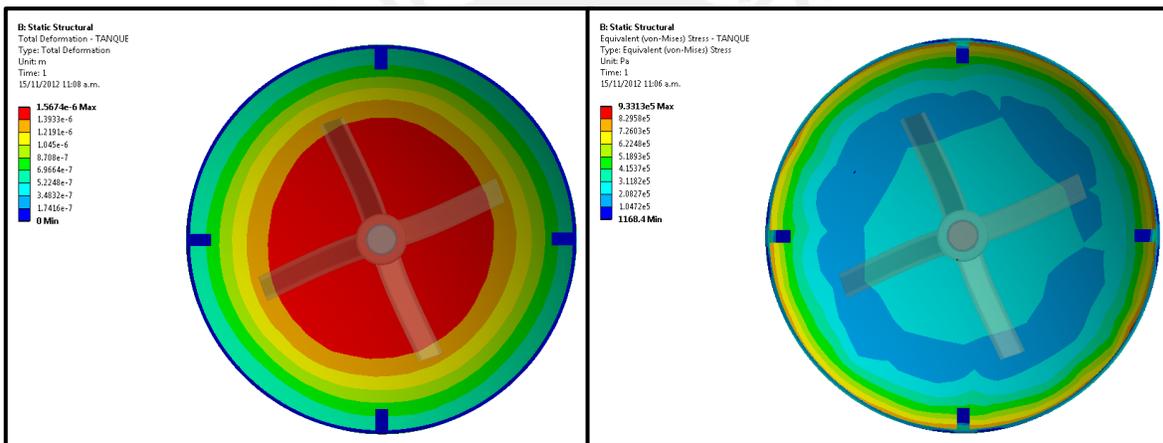


Figura 84. Esfuerzos y deformaciones en la base del tanque

6.5. Comparación de diseños

El diseño óptimo mejoró en un 8% en cuanto a consumo de potencia y un 36% en cuanto a mejora en la calidad de mezclado, tal como se muestra en la siguiente tabla:

Tabla 14. Comparación de diseños

Diseños			
Velocidad de rotación	400	350	rpm
Angulo de alabe	45	60	grados
Altura de impulsor	240	299	mm
Optimización			
Δ Potencia CFD %	131.16	121.02	8%
Δ Promedio del CV %	15.42	9.80	36%

Cabe decir que el diseño inicial el cual fue elegido arbitrariamente era un diseño aceptable ya que se encontraba relativamente cerca de la frontera de Pareto, sin embargo aun así se encuentra un diseño mejor. Esta grafica de ambos diseños se muestra en la siguiente figura:

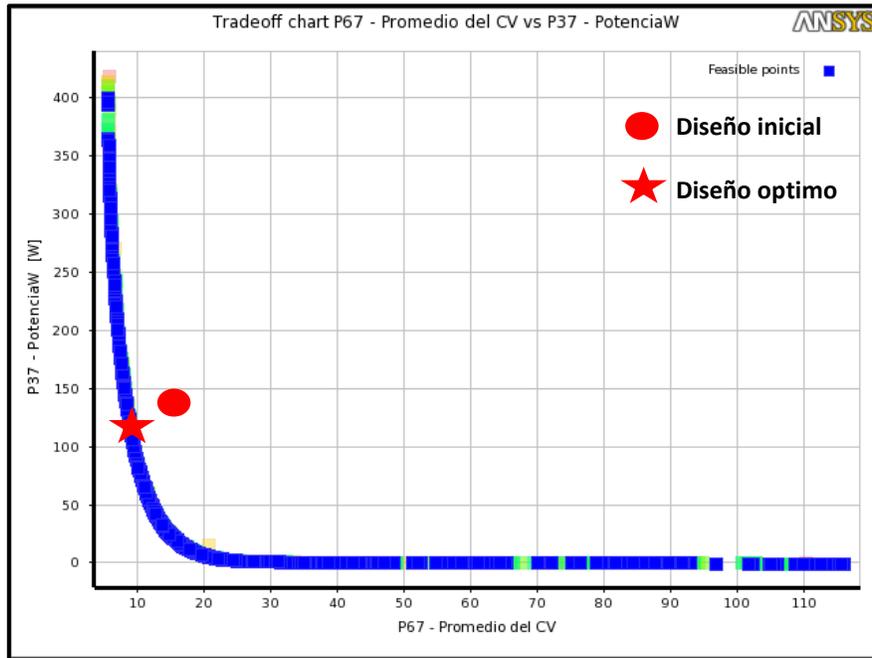
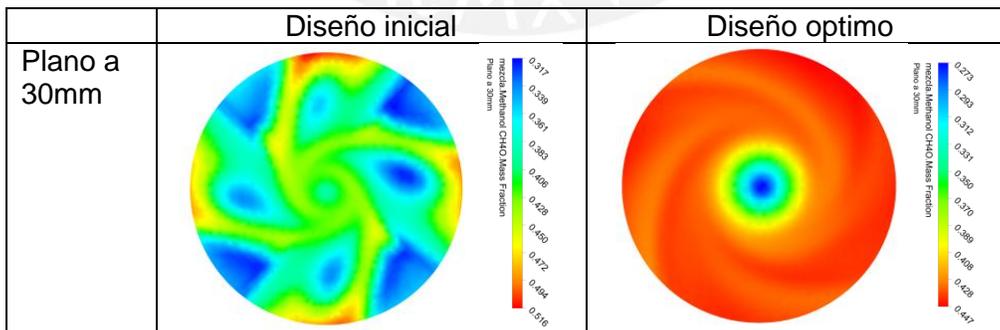
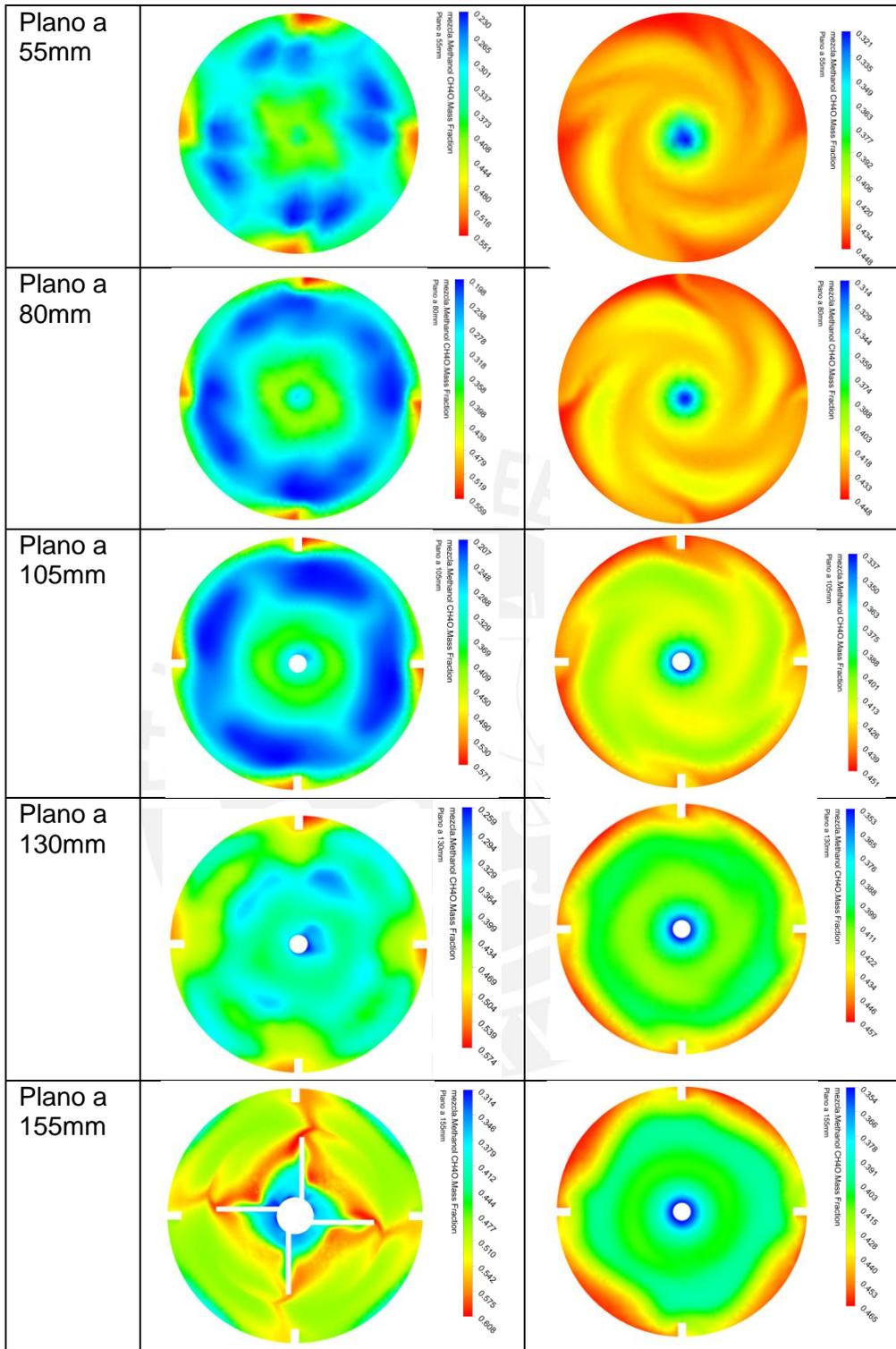
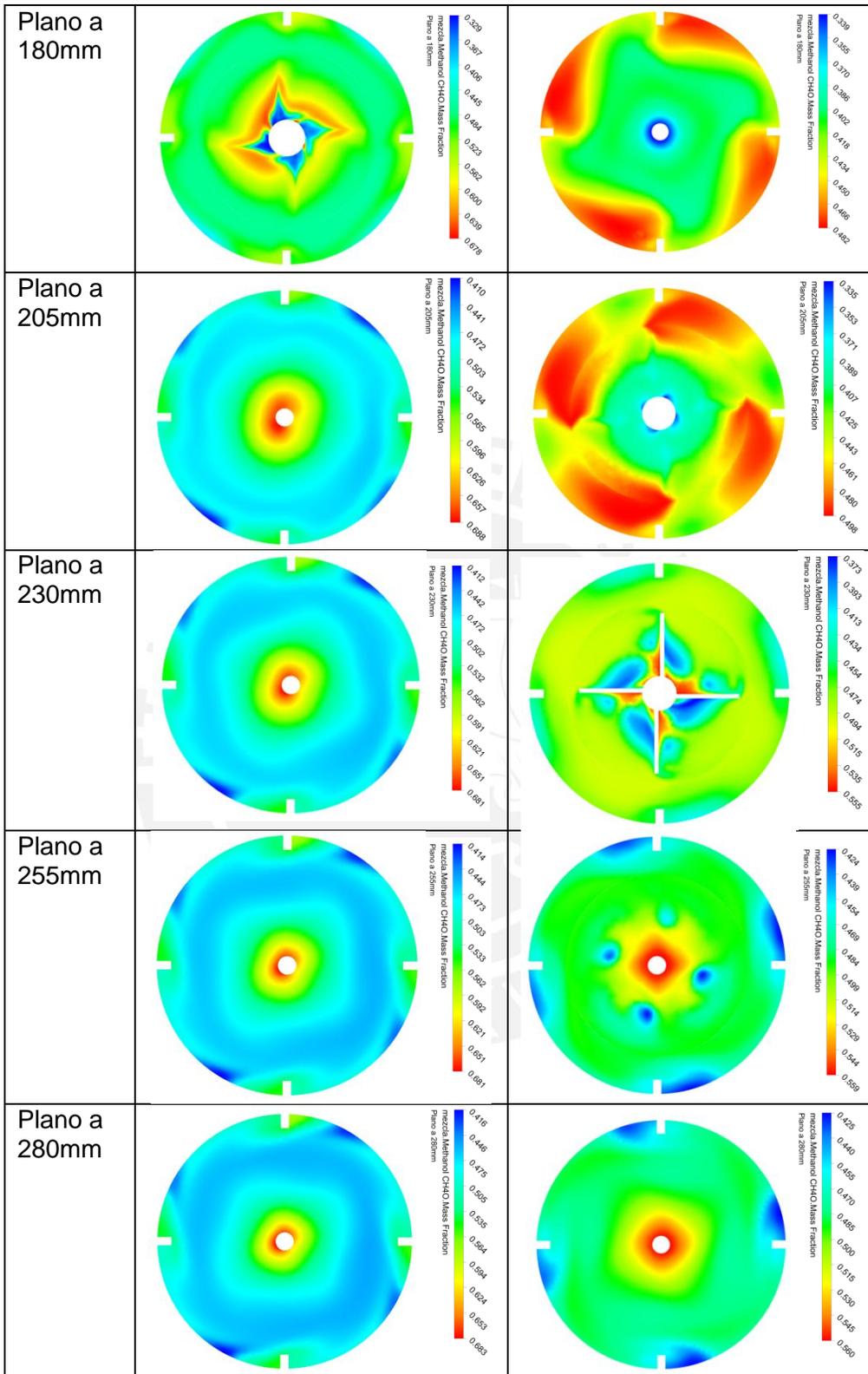


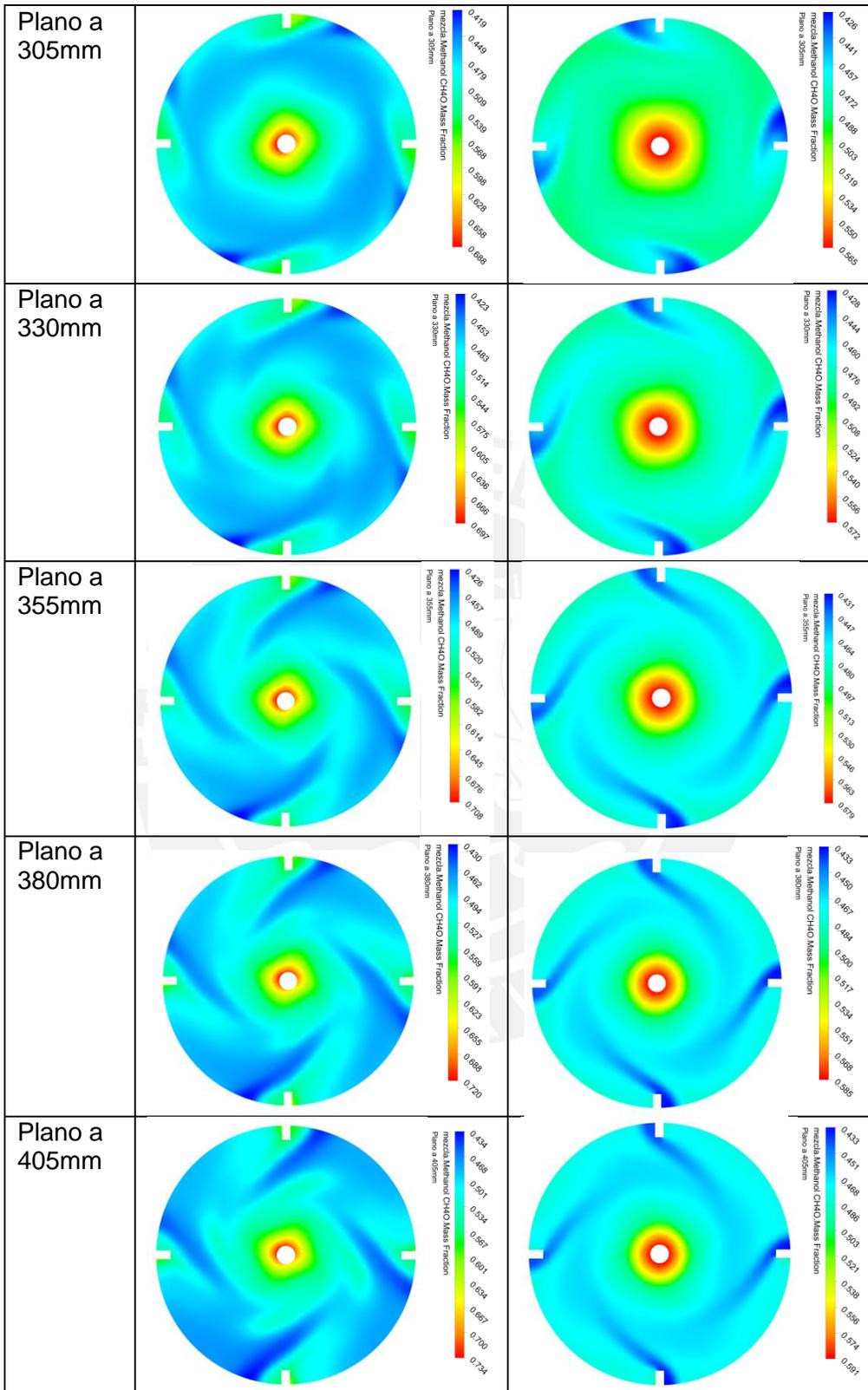
Figura 85. Diseños graficados en la Frontera de Pareto

En la siguiente figura se muestra la comparación de los planos en cuanto a fracción de masa de metanol, a diferentes alturas en el agitador:









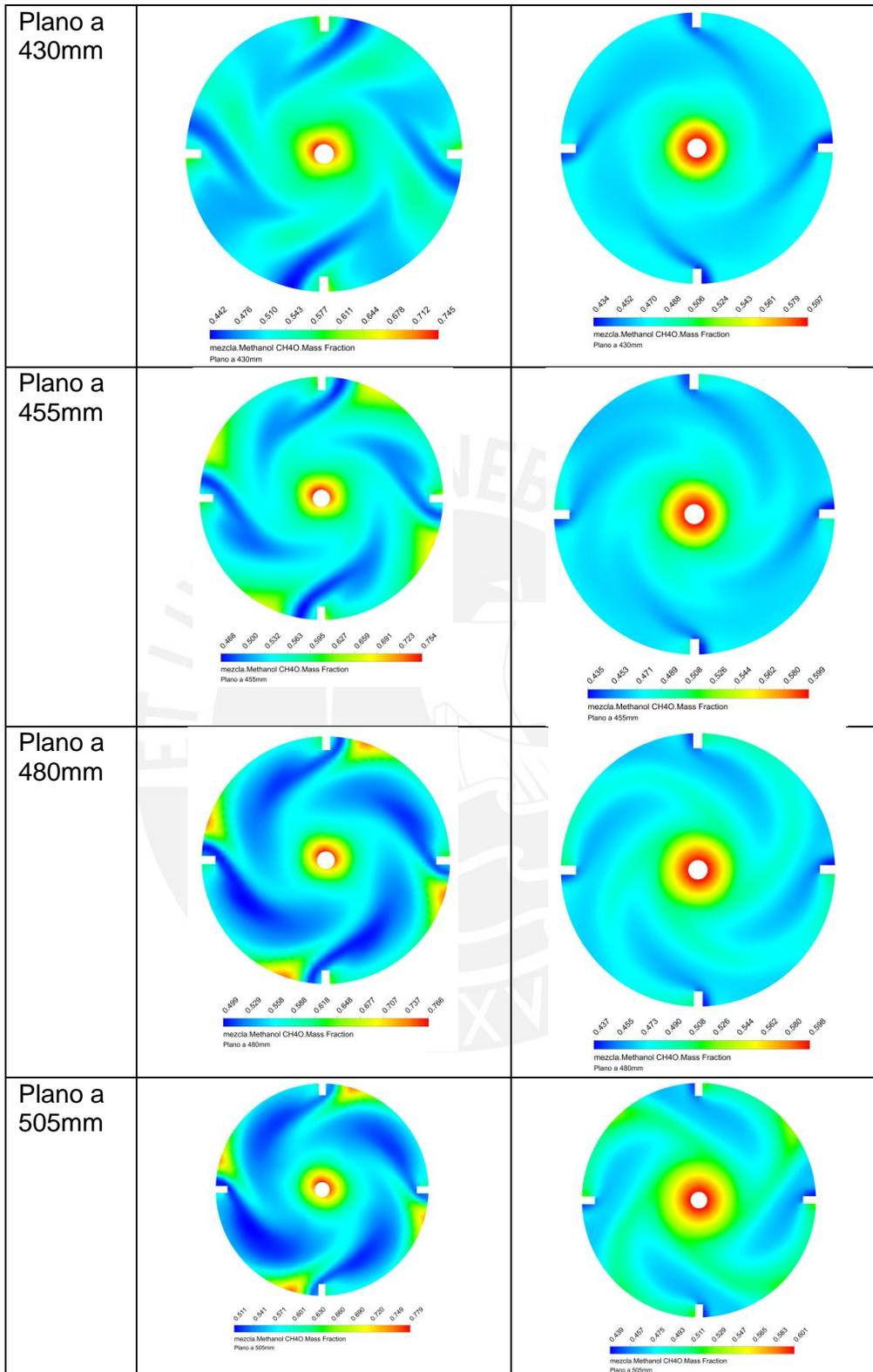


Figura 86. Comparación de fracción de masa de metanol en planos de corte en la altura del agitador

6.6. Independencia de malla

El estudio de independencia de malla consistió en variar el número de elementos y analizar si el resultado de interés varía de manera significativa ya que el número de elementos utilizado es el mínimo posible para disminuir el tiempo de simulación.

En ambos estudios se tomó 6 puntos de diferentes elementos, siendo esta variación mayor en el análisis de fluidos ya que es el análisis de mayor importancia en cuanto a variables de interés

Estudio en análisis fluido dinámico

Se varió los elementos desde 2.7 a 9.7 millones de elementos, es decir 3.5 veces más elementos, obteniéndose los siguientes resultados:

Tabla 15. Valores obtenidos del estudio de Independencia de malla fluido dinámico.

DP	# elementos (x10 ⁶)	Promedio CV	Potencia [W]	Nq	Np
1	2.704	57.4492	2.01601	0.474705	0.942076
2	3.104	59.5397	1.99002	0.466771	0.931052
3	3.772	60.3513	1.98584	0.466444	0.929049
4	4.699	61.3178	1.97274	0.465432	0.921225
5	7.152	60.9069	1.99591	0.465828	0.931854
6	9.791	62.6372	2.00412	0.452394	0.935554

Lo cual también se representa mediante las siguientes graficas:

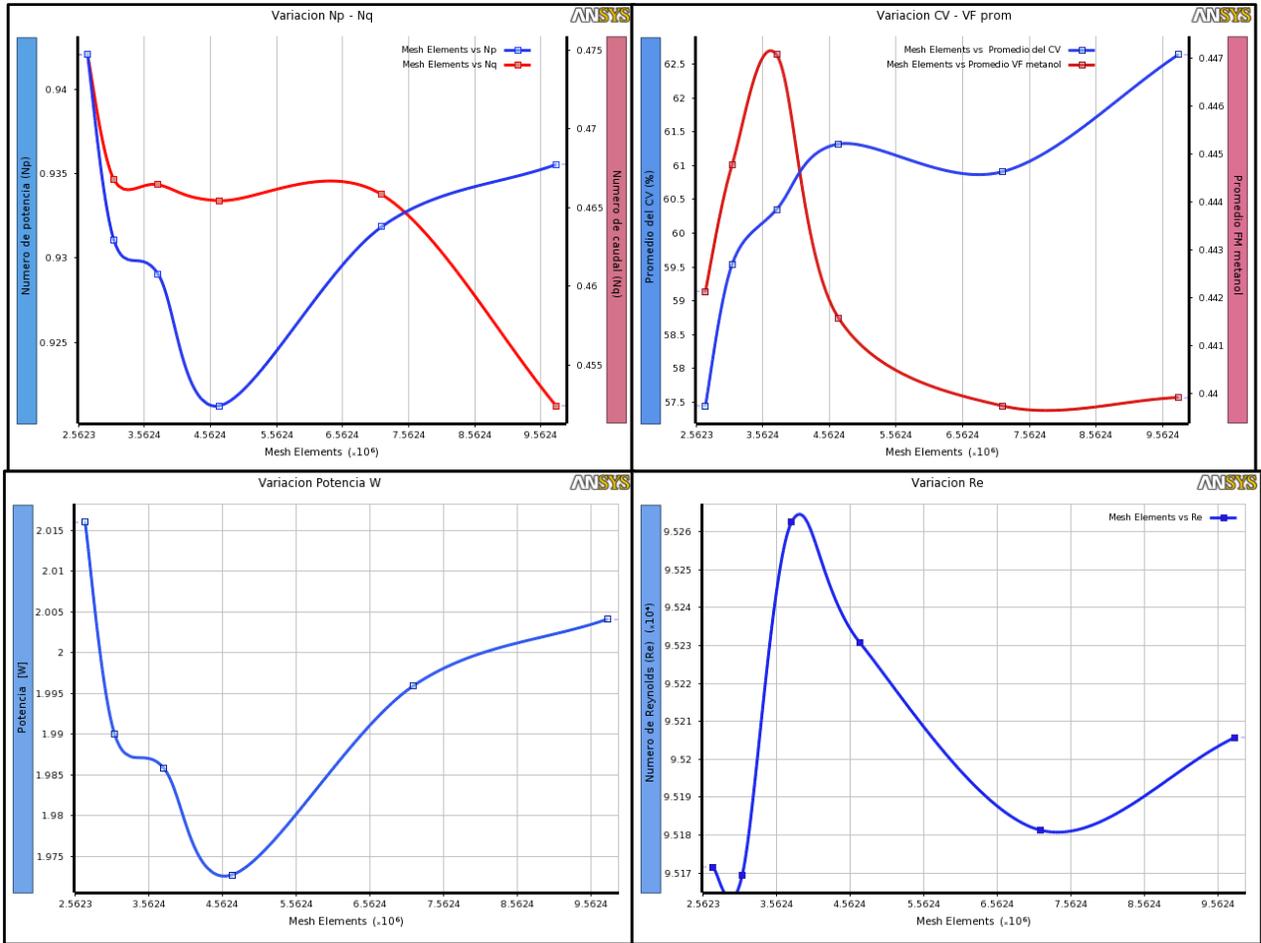


Figura 87. Graficas de los resultados de la independencia de malla

Estas graficas pueden ser confusas porque se ve una variación aparentemente significativa entre los resultados, sin embargo son resultados fluctuantes pero el error relativo es bajo como se puede ver en la siguiente tabla:

Tabla 16. Resumen comparativo de los parámetros calculados a diferente número de elementos (fluido dinámico)

#máx./#elementos (veces menos)	% error CV	% error Potencia	% error Nq	% error Np
3.62	8.3	0.6	4.9	0.7
3.15	4.9	0.7	3.2	0.5
2.60	3.6	0.9	3.1	0.7
2.08	2.1	1.6	2.9	1.5
1.37	2.8	0.4	3.0	0.4
promedio	4.3	0.8	3.4	0.8

Estos valores son tomados con los resultados dado por el punto de mayor número de elementos, como se puede ver en algunos casos tenemos hasta 3 veces menos en número de elementos mientras que el error relativo llega a ser como máximo un 8% y el promedio es de 4.3%. Además por la forma en como varían los resultados se puede decir ya nos encontramos en una zona de independencia de malla, ya que los valores son fluctuantes. En conclusión podemos decir que justifica ahorrar hasta 3.5 veces el tiempo de simulación.

Estudio en análisis estructural

Se realiza el mismo procedimiento para el estudio de independencia de malla para el análisis estructural, sin embargo la variación de elementos no fue tan significativa ya que los resultados no son tan trascendentes para la optimización en este caso.

Tabla 17. Valores obtenidos del estudio de independencia de malla del análisis estructural.

DP	# elementos (x10 ³)	Potencia [W]	Esfuerzo	Deformación (mm x 10 ⁻³)	Momento torsor
1	98.430	2.03626	2.24719	4.36995	194.44774
2	102.113	2.01003	2.26133	4.30892	191.94360
3	104.021	2.01849	2.37177	4.34691	192.75144
4	106.690	2.00320	2.43772	4.32013	191.29114
5	108.689	2.01237	2.53299	4.33941	192.16654
6	110.719	2.00862	2.56148	4.31876	191.80853

Lo cual podemos se puede ver gráficamente en la siguiente figura:

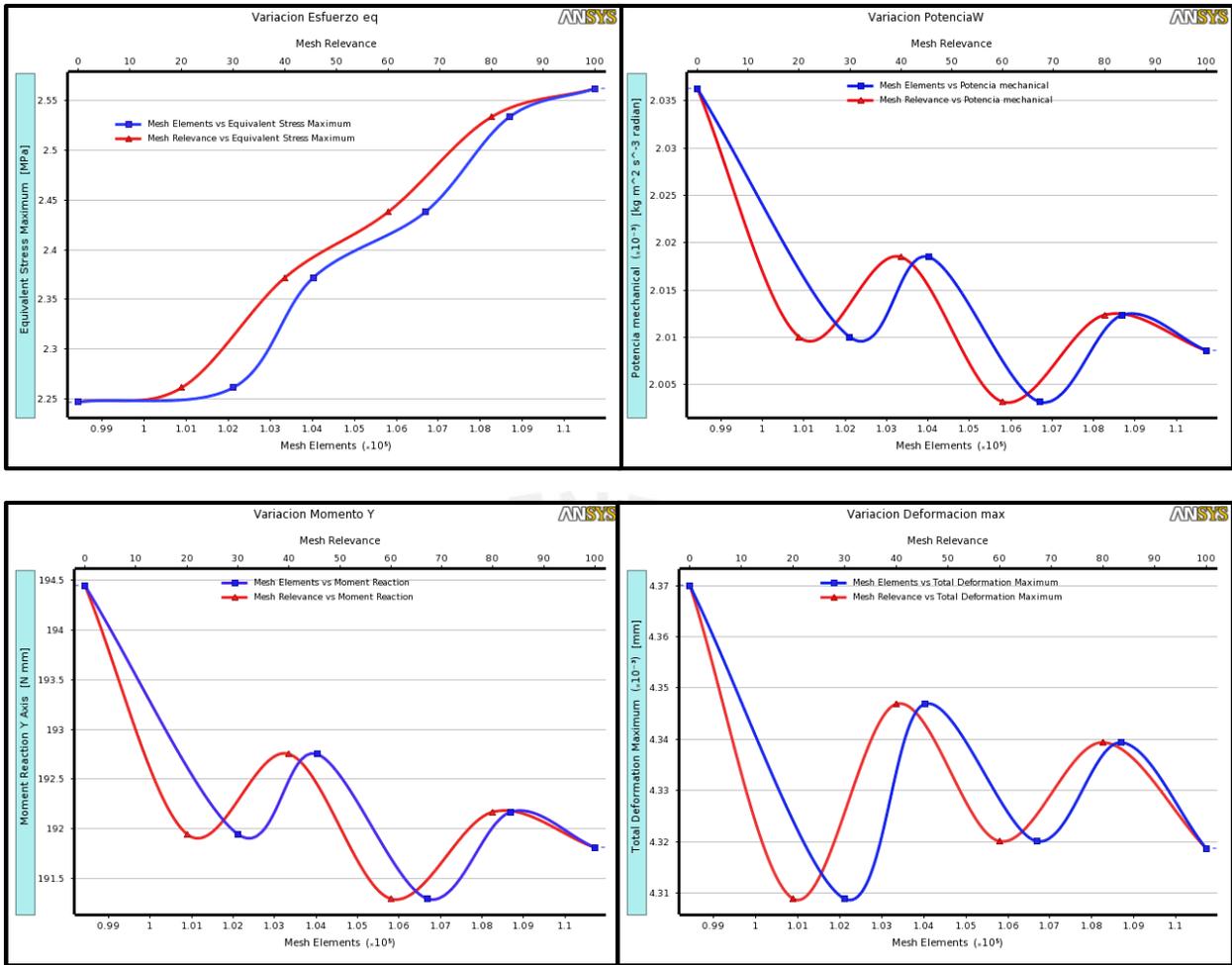


Figura 88. Graficas de los resultados de la independencia de malla (estructural)

Estas graficas pueden ser confusas porque se ve una variación aparentemente significativa entre los resultados, sin embargo son resultados fluctuantes pero el error relativo es bajo como se puede ver en la siguiente tabla:

Tabla 18. Resumen comparativo de los parámetros calculados a diferente número de elementos (estructural)

#máx./#elementos (veces menos)	% error Potencia	% error esfuerzo	% error Deformación	% error Momento
1.12	1.4	12.3	1.2	1.4
1.08	0.1	11.7	0.2	0.1
1.06	0.5	7.4	0.7	0.5
1.04	0.3	4.8	0.03	0.3
1.02	0.2	1.1	0.5	0.2
promedio	0.5	7.5	0.5	0.5

Igualmente, podemos ver que nos encontramos en una zona de independencia de malla ya que los valores de errores son muy bajos exceptuando en el esfuerzo obteniéndose un error de 12% con respecto al valor obtenido utilizando 10 mil elementos. Finalmente, este estudio es conceptual debido a que estos resultados no son imprescindibles para las funciones objetivas utilizadas en la optimización.



CONCLUSIONES

Las herramientas computacionales son una buena forma de poder predecir el comportamiento de fluidos y de su interacción con estructuras,

La simulación de método multicomponentes es una forma satisfactoria de poder modelar fluidos que se mezclan a nivel molecular.

La el uso del coeficiente de variación para poder caracterizar el grado de mezcla es una medida muy acertada que nos sirve como un buen indicador para poder comparar la distribución de componentes en un espacio determinado

Los parámetros más influyentes en este estudio son la velocidad de rotación y el ángulo del alabe. El primero es el más influyente en cuanto a los parámetros potencia, grado de mezcla, Re, Número de potencia, mientras que el segundo es la variable que más influye en el Número de caudal.

La distribución del campo de velocidades influye directamente en el grado de mezcla en toda altura del tanque. Es decir, a mejor distribución de velocidades en el agitador, se obtiene mejor mezcla en el mismo.

Realizar una optimización computacional ha demostrado ser una alternativa viable y que puede resultar una forma eficaz de realizar un diseño. Sin embargo para realizar la optimización se necesita buena infraestructura a nivel computacional para reducir el tiempo de obtención de resultados.

El uso del modelo multicomponentes es una forma satisfactoria de poder modelar fluidos que se mezclan a nivel molecular.

La el uso del coeficiente de variación para poder caracterizar el grado de mezcla es una medida muy acertada que nos sirve como un buen indicador para poder comparar la distribución de componentes en un espacio determinado

La distribución del campo de velocidades influye directamente en el grado de mezcla en toda altura del tanque. Es decir, a mejor distribución de velocidades en el agitador, se obtiene mejor mezcla en el mismo.

Realizar una optimización computacional ha demostrado ser una alternativa viable y que puede resultar una forma eficaz de realizar un diseño. Sin embargo para realizar la optimización se necesita buena infraestructura a nivel computacional para reducir el tiempo de obtención de resultados.

La simulación estructural FSI es confiable en la medida en que el traslado de cargas CFD-FEA se la más aproximada posible.

El grado de mezcla se ve seriamente afectado a velocidades bajas, con el ángulo de alabe muy bajo, y cuando el impulsor se aleja considerablemente con respecto a la base.

RECOMENDACIONES Y POSIBLES TRABAJOS FUTUROS:

- Realizar modelamiento con inclusión de sólidos o líquidos miscibles
- Acompañar resultados con experimentación
- Acondicionar resultados para comparativas con métodos experimentales
- Realizar estudio vibraciones incluyendo la influencia del medio viscoso



BIBLIOGRAFÍA

1. *Optimization Techniques using modeFrontier*. **Curty, Ana Paula**. Florianopolis, SC - Brazil : 2009 ESSS South American ANSYS Users Conference, 2009.
2. **Huerto Bujaico, Hebert**. *Simulación numérica de un tanque agitador con impulsor de paletas planas inclinadas 45 mediante ANSYS CFX*. Lima : s.n., 2012.
3. **Hernández, Pablo Martín**. *Predicción de datos de diseño en reactores provistos de turbina de flujo axial mediante CFD*. Departament d'Enginyeria Química, Universitat Politècnica de Catalunya. 2007.
4. **Gelmi Weston, Claudio**. *Fundamentos de Operaciones Unitarias*. s.l. : Pontificia Universidad Católica de Chile, 2006.
5. **McCabe, Warren, Smith, Julian and Harriott, Peter**. *Agitación y mezcla de líquidos. Libro Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. s.l. : McGrawHill.
6. **Paul, Edward L., Atiemo-Obeng, Victor A. and Kresta, Suzanne M**. *HANDBOOK OF INDUSTRIAL MIXING*. s.l. : John Wiley & Sons, Inc., 2004.
7. **Orellana Gajardo, Elías Gerardo**. *Cálculo computacional de la dinámica de fluidos de un mezclador a través del software Fluent*. Departamento de Ingeniería mecánica, Universidad del Bio-Bio. Concepción - Chile : s.n., 2006.
8. **Martínez López, David**. *Simulación de una turbina radial mediante CFD FLUENT: caso de una turbina Rushton*. Universidad Politecnica de Cataluña. Barcelona : s.n., 2006. Tesis Maestría.
9. **Uribe Ramírez, Agustín R., et al., et al**. *AGITACION Y MEZCLADO*. Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato. Guanajuato : s.n., 2012.
10. **Olujic, Z., Haaring, J.P. and Baak, R. van**. *Effect of a severe form of initial gas maldistribution on pressure drop of a structured packing bed*. Chemical Engineering and Processing. s.l. : ScienceDirect, 2006.
11. **Ferraz, Rodrigo**. *Multidisciplinary Optimization applied to engineering problems*. s.l. : ESSS Brazil, 2011.
12. *Multi-objective optimization*. **Duh, Kevin**. s.l. : Bayes Reading Group, 2011.
13. *modeFRONTIER 3 - User Manual*.
14. **Fernández Melcón, Carmen Dolores and Piñeiro Barcia, Montserrat**. *Superficies de respuesta: Metodos y Diseños*.
15. *modeFRONTIER v4 Tutorials*. **Esteco**. 1999-2012.

16. **Peregrina Peña, Paola.** *Empleo de superficies de respuesta para la solución de problemas de inventarios estocásticos.* Departamento de Ingeniería Industrial y Textil, Universidad de las Américas de Puebla. Cholula, Puebla : s.n., 2000.
17. **Alvarez, Luis.** *Approximation model building for design optimization using response surface methodology.* Department of Civil and Environmental Engineering, University of Bradford, UK. 2000.
18. **Khuri, André and Mukhopadhyay, Siuli.** *Response surface methodology.* s.l. : John Wiley & Sons, Inc, 2010.
19. **Cavazzuti, Marco.** *Optimization Methods: From Theory to Design.* Modena-Italia : Springer.
20. **Poloni, Carlo, et al., et al.** *The use of Design of experiments (DOE) and Response surface analysis (RSA) in PSO.* Product and System Optimization, University of Trieste. s.l. : FENET , 2002.
21. **Poloni, Carlo, et al., et al.** *The use of Design of Experiments (DOE) and Response surface analysis (RSA) in PSO.* Product and System Optimization. 2002.
22. **ANSYS INC.** *Design Exploration.* 2009.
23. **Inc., ANSYS.** *ANSYS CFX Help.* 2012.
24. **Engineering simulation and scientific software.** *Introduction to multiphase flow modeling.*
25. **I. Lerín (Solpharma), J. Sesé (IKA), F. Santamaría (Esteve).** *Aplicación tecnológica de la agitación en la industria químico-farmacéutica.* s.l. : Publicado en Industria Farmacéutica, 2007.
26. **Ropelato, Karolline, et al., et al.** *CFD STUDY FOR CHIMNEY TRAY DESIGN IN CRUDE FRACTIONATORS.* Brasil : s.n., 2007.
27. **Daymo, E. A.** *Industrial Mixing Techniques for Double-Shell Tanks.* Washington : United States Department of Energy, 1997.
28. **Subramanian, R. Shankar.** *An introduction to Mixing.*
29. **Catalogo Lightnin.** *Impeller Technology.* [Online] <http://www.lightnin-mixers.com>.
30. **Dari, E.A. and Blanco, P.J.** *Interacción fluido-estructura basada en dominios inmersos: aspectos computacionales.* s.l. : WSCHA, 2010.
31. **Spogis, Nicolas.** *Metodología para determinación de curvas de potencia y flujos característicos para impulsores axial, radial y tangencial utilizando fluidodinámica computacional.* Facultad de Ingeniería Química, Universidad estatal de Campinas. Sao Paulo : s.n., 2002.

32. —. *Desempeño de un impulsor de alta eficiencia a través de dinámica de fluidos computacional y optimización Multi-objetivo*. Facultad de Ingeniería Química, Universidad estatal de Campinas. Sao Paulo : s.n., 2007.
33. **Ansó, Sonia, Barge, Elena and Demming, Stefanie**. *Estudio Teórico experimental de la agitación*. Ingeniería Mecánica, Universidad de Zaragoza. 2007.
34. **Bakker, André, Fasano, Julio B. and Myers, Kevin J**. *Effects of Flow Pattern on the Solids*. s.l. : The Online CFM Book, 2000.
35. **Olujic, Z., Mohamed, A. and Jansens, P.J**. *Effect of the initial gas maldistribution on the pressure drop of structured packings*. Chemical Engineering and Processing, Laboratory for Process Equipment, Delft University of Technology. s.l. : Science Direct, 2003.
36. **Rix, A. and Olujic, Z**. *Pressure drop of internals for packed columns*. Chemical Engineering and Processing, Delft University of Technology, Process & Energy Department. s.l. : Science Direct, 2007.
37. **Prof. Marival, Bermejo**. *Mezcla*. Depto. Farmacia y tecnología farmacéutica, Universidad de Valencia. 2002-2003.
38. **Oldshue, James Y**. *Fluid mixing technology and practice*. Chemical Engineering. s.l. : McGraw-Hill Publication, 1983.
39. *Catálogo Agitadores LINKINDUSTRIAL. Link Industrial Process Engineering Equipment*. [Online] www.linkindustrial.es.
40. **Pérez Molero, Alvaro and Garre del Olmo, Carlos**. *Dinámica de fluidos computacional para gráficos*. [Online] http://www.gmr.v.es/~cgarre/TAG3D_CFD.pdf.
41. **Fernández Oro, Jesús Manuel**. *Introducción a la dinámica de fluidos*. Departamento de Energía – Área de Mecánica de Fluidos, Universidad de Oviedo. s.l. : Editorial Reverté, 2012.
42. **Richard, Plasun**. *Optimization of VLSI Semiconductor Device*. Fakultät für Elektrotechnik, Technischen Universität Wien. Viena : s.n., 1999. <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/plasun/node26.html>.
43. NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods. [Online] [Cited: Septiembre 22, 2012.] <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/>.
44. **L'OTTIMIZZAZIONE, ENGIN SOFT TECNOLOGIE PER**. *Why do optimization*. s.l. : modeFrontier, 1999-2022.