

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**Evaluación de Distintos Modelos de Turbulencia en  
la Modelación Matemática de Ollas Agitadas con  
Gas.**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO**

P R E S E N T A:

**DEMETRIO GERARDO VALLEJO ACOSTA**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado Asignado:

|                |   |
|----------------|---|
| Presidente:    | Prof. Eusebio Candido Atlatenco Tlapanco. |
| Vocal:         | Prof. Roberto Galicia García.             |
| Secretario:    | Prof. Marco Aurelio Ramírez Argáez.       |
| 1er. Suplente: | Prof. Adrián Manual Amaro Villena.        |
| 2do. Suplente: | Prof. Juan Manuel De La Rosa Canales.     |

Sitio en donde se desarrolló el tema:

Edificio "D".  
Departamento de Ingeniería Metalúrgica.  
Facultad de Química, UNAM.

Asesor del tema: Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez.

Sustentante: Demetrio Gerardo Vallejo Acosta.

*“...El corazón de su padre estaba lleno de alegría por el hijo, el inteligente, el sediento de ciencia, en el que veía formarse un gran sabio... El pecho de su madre saltaba de contento cuando lo veía caminar, cuando lo veía sentarse y levantarse; Siddhartha, el fuerte, el hermoso, el que andaba sobre sus piernas esbeltas, el que la saludaba con toda dignidad...”*

Hermann Hesse  
SIDDHARTHA

## **INDICE GENERAL:**

### **CAPITULO 1. GENERALIDADES.**

#### **1.1 INTRODUCCIÓN**

##### **1.1.1 SEMBLANZA HISTÓRICA**

##### **1.1.2 MARCO NACIONAL**

##### **1.1.3 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO**

#### **1.2 REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA**

##### **1.2.1. ANTECEDENTES 10**

##### **1.2.2. TURBULENCIA**

##### **1.2.3. EDDYS**

##### **1.2.4. MODELOS DE TURBULENCIA**

##### **1.2.5. OBJETIVOS**

### **CAPITULO 2. MODELO MATEMÁTICO.**

#### **2.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA**

#### **2.2 SIMPLIFICACIÓN DEL PROBLEMA**

#### **2.3 ECUACIONES GOBERNANTES**

##### **2.3.1 ECUACIÓN DE CONTINUIDAD**

##### **2.3.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN DE MOMENTUM PARA AMBAS FASES**

##### **2.3.3 ECUACIONES DE TURBULENCIA**

#### **2.4 CONDICIONES DE FRONTERA**

## **CAPITULO 3.**

## **DESARROLLO.**

### **3.1 ANTECEDENTES COMPUTACIONALES**

### **3.2 DESCRIPCIÓN DEL SOFTWARE PHOENICS**

### **3.3 MÉTODO NÚMÉRICO DE VOLUMEN DE CONTROL**

### **3.4 DESCRIPCIÓN DE LAS CORRIDAS**

### **3.5 VALIDACIÓN**

## **CAPITULO 4.**

## **SOLUCIÓN.**

### **4.1 RESULTADOS**

#### **4.1.1 CAMPOS DE VELOCIDAD**

#### **4.1.2 CAMPOS DE ENERGÍA TURBULENTA**

### **4.2 ANÁLISIS DE RESULTADOS**

## **CAPITULO 5.**

### **5.1 CONCLUSIONES**

**INDICE DE FIGURAS**

**INDICE DE TABLAS**

**NOTACIÓN DEL MODELO**

**BIBLIOGRAFÍA**

## INDICE DE FIGURAS:

1. Gráfica de producción mundial de acero crudo hasta agosto del año 2007 .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
2. Diagrama de flujo del proceso de aceración a través de la ruta integrada .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
3. Esquema del sistema bifásico agua-aire para ejemplificar las etapas de la pluma de gas .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
4. Esquema del sistema bifásico acero-argón .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
5. Esquema de la olla de refinación secundaria ejemplificando los patrones de recirculación .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
6. Boceto de turbulencia realizado por Leonardo Da Vinci (circa 1500) .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
7. Esquema del modelo físico utilizado en este trabajo. Dimensiones, zona bifásica y patrones de recirculación .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
8. Representación de la malla utilizada. Simetría y condiciones de frontera .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
9. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
10. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.68$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados

experimentales .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

11. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H=0.9$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

12. Campos de velocidad predichos con los 7 modelos de turbulencia con un flujo de 13 L/min. Se presentan con un vector de referencia de 0.5 m/s. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen- kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL, e) Modelo MMK y f) Modelo Lam-Bremhorst. .... 38

13. Campos de velocidad predichos el modelo algebraico de turbulencia Smagorinsky, con un flujo de entrada de 13 L/min y con un vector de referencia de 0.0946 m/s. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

14. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H=0.3$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

15. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H=0.68$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

16. Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H=0.9$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

17. Campos de velocidad predichos con los 7 modelos de turbulencia con un flujo de 26 L/min. Se presentan con un vector de referencia de 0.5 m/s. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen- kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL, e) Modelo MMK y f) Modelo Lam-Bremhorst ..... 42

18. Campos de velocidad predichos el modelo algebraico de turbulencia Smagorinsky, con un flujo de entrada de 26 L/min y con un vector de referencia de 0.0198 m/s.  
.....  
**¡Error! Marcador no definido.**
19. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
20. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.68$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
21. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.98$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia con los resultados experimentales .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
22. Campos de energía cinética turbulenta predichos con los 5 modelos de turbulencia con un flujo de 13 L/min. La escala se presenta al lado derecho. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen- kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL y e) Modelo MMK ..... 46
23. Campos de energía cinética turbulenta predichos el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con un flujo de 13 L/min. La escala se presenta al lado derecho .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
24. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 5 modelos de turbulencia con los resultados experimentales .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
25. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.68$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 5 modelos de turbulencia con los resultados experimentales. Grevet .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
26. Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.98$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 5 modelos de turbulencia con los resultados

experimentales. Grevet .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

27. Campos de energía cinética turbulenta predichos con los 5 modelos de turbulencia con un flujo de 26 L/min. La escala se presenta al lado derecho. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen-kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL y e) Modelo MMK ..... 50

28. Campos de energía cinética turbulenta predichos el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con un flujo de 26 L/min. La escala se presenta al lado derecho .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

29. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 13 L/min .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

30. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

31. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

32. Diferencia global entre los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

33. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

34. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición

- radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
35. Diferencia cuantitativa de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
36. Diferencia global entre los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
37. Diferencia cuantitativa de los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
38. Diferencia cuantitativa de los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
39. Diferencia global entre los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales en las dos posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
40. Diferencia cuantitativa de los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
41. Diferencia cuantitativa de los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

42. Diferencia cuantitativa de los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
43. Diferencia global entre los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 26 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
44. Diferencias entre modelos a partir de acoplar los campos de velocidad y energía. Flujo 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**
45. Diferencias entre modelos a partir de acoplar los campos de velocidad y energía. Flujo 13 L/min. ....  
**¡Error! Marcador no definido.**

## INDICE DE TABLAS:

1. Primeros 15 países en la producción de acero primario para los años 2005 y

- 2006 .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
2. Producción nacional de acero primario hasta agosto del 2007 .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
3. Composición química del arrabio y del acero primario .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
4. Expresiones de energía de entrada propuestas por varios investigadores y resumidas por Mazumdar<sup>(7)</sup> .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
5. Expresiones para la fracción volumétrica de gas propuestas por varios investigadores y resumidas por Mazumdar<sup>(7)</sup> .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
6. Dimensiones de la olla y condiciones de operación utilizados por Grevet .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
7. Condiciones de frontera .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
8. Propiedades de transporte .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
9. Significado de las variables de la ecuación general de balance .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
10. Modelos utilizados en este trabajo .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
11. Resumen de resultados de la figuras 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35 y 36 las cuales indican cual es el mejor modelo en función de la posición radial. Campos de velocidad para ambos flujos .....  
**¡Error! Marcador no definido.**
12. Resumen de resultados de la figuras 37, 38, 39, 40, 41, 42 y 43 las cuales indican cual es el mejor modelo en función de la posición radial. Campos de energía para ambos flujos .....  
**¡Error! Marcador no definido.**

# CAPITULO 1

# GENERALIDADES

## 1.1 INTRODUCCIÓN

### 1.1.1 SEMBLANZA HISTÓRICA.

El acero ha sido un material imprescindible durante el desarrollo humano, no se conoce con exactitud la fecha en que se descubrió la técnica de fundir mineral de hierro para producir un metal susceptible de ser utilizado. Los primeros utensilios de hierro descubiertos por los arqueólogos en Egipto datan del año 3 000 A.C., y se sabe que antes de esa época se empleaban adornos de hierro. Los griegos ya conocían hacia el 1 000 A.C. la técnica, de cierta complejidad, para endurecer armas de hierro mediante tratamiento térmico.

Los antiguos artesanos de la India dominaban un método mejor para producir acero. Colocaban trozos de hierro carbonado o con "piel" de acero en un recipiente de arcilla cerrado, o crisol, y lo calentaban intensamente en un horno. El carbono se distribuía gradualmente a través del hierro y producía una forma de acero mucho más uniforme.

Las aleaciones producidas por los primeros artesanos del hierro (y, de hecho, todas las aleaciones de hierro fabricadas hasta el siglo XIV d.C.) se clasificarían en la actualidad como hierro forjado. Para producir esas aleaciones se calentaba una masa de mineral de hierro y carbón vegetal en un horno y a su vez era golpeado. Ese tratamiento reducía el mineral a una masa esponjosa de hierro metálico llena de una escoria formada por impurezas metálicas y cenizas de carbón vegetal. Esta esponja de hierro se retiraba mientras permanecía incandescente y se golpeaba con pesados martillos para expulsar la escoria y soldar y consolidar el hierro. El hierro producido en esas condiciones solía contener un 3% de partículas de escoria y un 0,1% de otras impurezas. En ocasiones esta técnica de fabricación producía accidentalmente **acero** en lugar de hierro forjado. Los artesanos del hierro aprendieron a fabricar acero calentando hierro forjado y carbón vegetal en recipientes de arcilla durante varios días, con lo que el hierro absorbía suficiente carbono para convertirse en auténtico acero.

Después del siglo XIV se aumentó el tamaño de los hornos utilizados para la fundición y se incrementó el tiro para forzar el paso de los gases de combustión por la carga o mezcla de materias primas. En estos hornos de mayor tamaño el mineral de hierro de la parte superior del horno se reducía a hierro metálico y a continuación absorbía más carbono como resultado de los gases que lo atravesaban. El producto de estos hornos era el llamado arrabio. El arrabio se refinaba después para fabricar acero.

En 1740, el inglés Benjamin Huntsman redescubrió el procedimiento indio por casualidad, al calentar una mezcla de hierro y una cantidad cuidadosamente medida de carbón vegetal en un crisol.

En 1856, el inventor inglés Henry Bessemer patentó un método más barato para fabricar acero en gran escala. Un chorro de aire atravesaba el hierro fundido y quemaba todo el

carbono necesario para obtener el acero. Bessemer construyó un recipiente cónico de acero forrado de ladrillos refractarios que se llamó convertidor y que se podía inclinar para vaciarlo. El hierro fundido se vertía en el convertidor situado en posición vertical, y se hacía pasar aire a través de orificios abiertos en la base. La inyección, que duraba unos veinte minutos, resultaba espectacular. El primer acero fabricado por este método era quebradizo por culpa del oxígeno absorbido.

El proceso de Siemens-Martin conocido también con el nombre de "horno abierto" de 1864, que hacía posible fundir el metal escarpado dentro del acero, fue un importante hito dentro de la producción siderúrgica. Hierro en lingotes, chatarra y menas de alta ley se fundían en un horno descubierta por medio de llamas de gas dirigidas contra ellos desde arriba. La materia prima se ponía en un horno en forma de cubeta, forrada interiormente con ladrillos refractarios y cubierta con un domo bajo de ladrillos refractarios también. Los gases combustibles y aire caliente se dirigían hacia el domo donde se quemaban a temperaturas muy altas. Los productos gaseosos de la combustión se empleaban para calentar los gases y el aire entrante.

En 1879, Thomas introdujo el uso de revestimientos básicos (Dolomita), haciendo posible el uso del método inyección para la refinación de arrabio a partir de concentrados con alto fósforo provenientes de Europa. Pese a la invención de otros procedimientos, siguió prefiriéndose el método del crisol para obtener acero de alta calidad, hasta que en 1902 el metalúrgico francés Paul Héroult (co-inventor del método moderno para fundir aluminio) inició la producción comercial del acero en horno eléctrico.

En los hornos eléctricos de arco se introduce chatarra de acero de composición conocida y se hace saltar un arco eléctrico entre la chatarra y grandes electrodos de carbono situados en el techo del horno. El calor desarrollado por el arco funde la chatarra y produce un acero más puro que el que ha estado en contacto con los gases de combustión. Se puede añadir mineral de acero para alterar la composición del acero, y cal o espato flúor para absorber cualquier impureza.

El siguiente desarrollo importante se realizó tras la segunda guerra mundial en varios países pero fue en 1952 en Linz y en Donawitz, Austria donde se iniciaron experimentos en con oxígeno puro en lugar de aire para los procesos de refinación de acero. En este proceso se introducía el oxígeno por la parte superior de la olla a través de una lanza vertical, debido a que el fondo no podía soportar oxígeno puro por que el oxígeno reaccionaba con el refractario y se corría el riesgo de perforar el horno. Con los avances en la Ingeniería de los materiales este proceso que antes era inconcebible actualmente representa la mayoría de la instalación en acerías. Este proceso es conocido como BOF (Por sus siglas en ingles Basic Oxygen Furnance).

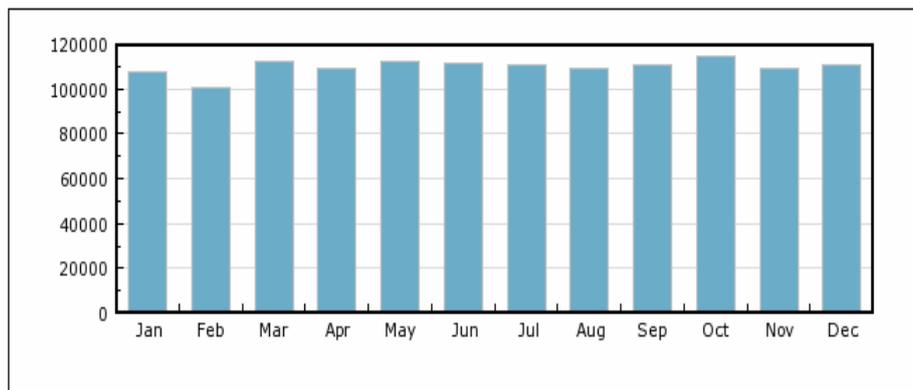
El proceso de inyección con oxígeno por el fondo fue desarrollado en los años 70, utilizando toberas protegidas con hidrocarburos (Propano o gas natural). El hidrocarburo tenía la finalidad de enfriar el refractario en la zona de la tobera. Los procesos correspondientes son conocidos como OBM, Q-BOP y LWS. Una de las ventajas de estos procesos es la alta eficiencia en la agitación a través de la inyección de oxígeno.

En la actualidad se conoce que el acero es una aleación de hierro con un 2 % máximo de carbono, además de elementos aleantes como: Cr, Va, Mo, Ni, entre otros; que dependiendo el procesamiento y la aplicación van a variar en cantidad. Actualmente existen más de 2500 clases de acero estándar en todo el mundo.

### 1.1.2 MARCO NACIONAL.

Conocer como evoluciona la producción de acero es importante para el propio sector y para las industrias demandantes de este producto a nivel mundial y en particular a nivel nacional.

Durante al año 2007 la producción mundial de acero fue de 1 316.7 millones de toneladas, lo que representa un aumento en la producción mundial del 7.3 % con respecto a las 1 220 millones de toneladas del año 2006. Para finales del año 2005 la producción fue de 1 141.9 millones de toneladas con un incremento confirmado del confirmando 6% desde el año 2000 de acuerdo con estadísticas del Instituto Internacional del Hierro y el Acero (IISI, por sus siglas en inglés) para 64 países a enero de 2007. En la *Figura 1* se presenta el comportamiento de la producción mundial a lo largo del año 2007.



**Figura 1.-** Producción mundial de acero en millones de toneladas a lo largo del año 2007 (¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

En la *Tabla 1*, mostrada a continuación se puede notar que China ha sido el país dominante en lo que se refiere a la producción de acero primario desde hace ya varios años particularmente en los años 2005, 2006 y 2007. Para Diciembre del 2007 China produjo un total de 487.3 millones de toneladas, lo que representa un aumento del 5.3 % en su producción con respecto al año 2006. (¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

| <b>Año</b>                | <b>2006</b>  |                        | <b>2005</b>  |                        |
|---------------------------|--------------|------------------------|--------------|------------------------|
| <b>País</b>               | <b>Lugar</b> | <b>Millones de TON</b> | <b>Lugar</b> | <b>Millones de TON</b> |
| China                     | 1            | 422.7                  | 1            | 355.8                  |
| Japón                     | 2            | 116.2                  | 2            | 112.5                  |
| Estados Unidos de América | 3            | 98.6                   | 3            | 94.9                   |
| Rusia                     | 4            | 70.8                   | 4            | 66.1                   |
| Corea del Sur             | 5            | 48.5                   | 5            | 47.8                   |
| Alemania                  | 6            | 47.2                   | 6            | 44.5                   |
| India                     | 7            | 44                     | 7            | 40.9                   |
| Ucrania                   | 8            | 40.9                   | 8            | 38.6                   |
| Italia                    | 9            | 31.6                   | 10           | 29.3                   |
| Brasil                    | 10           | 30.9                   | 9            | 31.6                   |
| Turquía                   | 11           | 23.3                   | 11           | 21                     |
| Taiwán, China             | 12           | 20.2                   | 13           | 18.9                   |
| Francia                   | 13           | 19.9                   | 12           | 19.5                   |
| España                    | 14           | 18.4                   | 14           | 17.8                   |
| <b>México</b>             | <b>15</b>    | <b>16.3</b>            | <b>15</b>    | <b>16.2</b>            |
| <b>Producción total</b>   |              | <b>1 244.2</b>         |              | <b>1 141.9</b>         |

**Tabla 1.-** Lugar que ocupa cada país de acuerdo a la producción de acero primario en millones de toneladas. Se muestra la estadística solo para el año 2005 y 2006.

Los principales productores a lo largo de los últimos 5 años han sido, además de China, Japón, Estados Unidos de América, Rusia, Corea del Sur, Alemania y la India. Hoy en día México se encuentra en el lugar número 15 con una producción de 17.215 millones de toneladas al término del 2007.

México produjo en enero del 2007 1 millón 465 mil de toneladas de acero, 1% menos respecto a Enero del 2006, de 1 millón 435 mil toneladas. Sin embargo, ya para el primer trimestre la producción nacional creció 3.8% en relación con el igual periodo de 2006, al alcanzarse un total de 4 millones 291 mil toneladas, a pesar de la desaceleración económica en México. (¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.) En la *Tabla 2* se puede apreciar el aumento en la producción nacional a lo largo del 2007.

| <b>ENERO</b> | <b>FEBRERO</b> | <b>MARZO</b> | <b>ABRIL</b> | <b>MAYO</b> | <b>JUNIO</b> | <b>JULIO</b> |
|--------------|----------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|
| 1,465        | 1,360          | 1,466        | 1,425        | 1,429       | 1,424        | 1,382        |

| <b>AGOSTO</b> | <b>SEPTIEMBRE</b> | <b>OCTUBRE</b> | <b>NOVIEMBRE</b> | <b>DICIEMBRE</b> |
|---------------|-------------------|----------------|------------------|------------------|
| 1,454         | 1,450             | 1,500          | 1,410            | 1,450            |

**Tabla 2.-** Se muestra el comportamiento de la producción de acero nacional. Enero- Diciembre del 2007. (mtm)

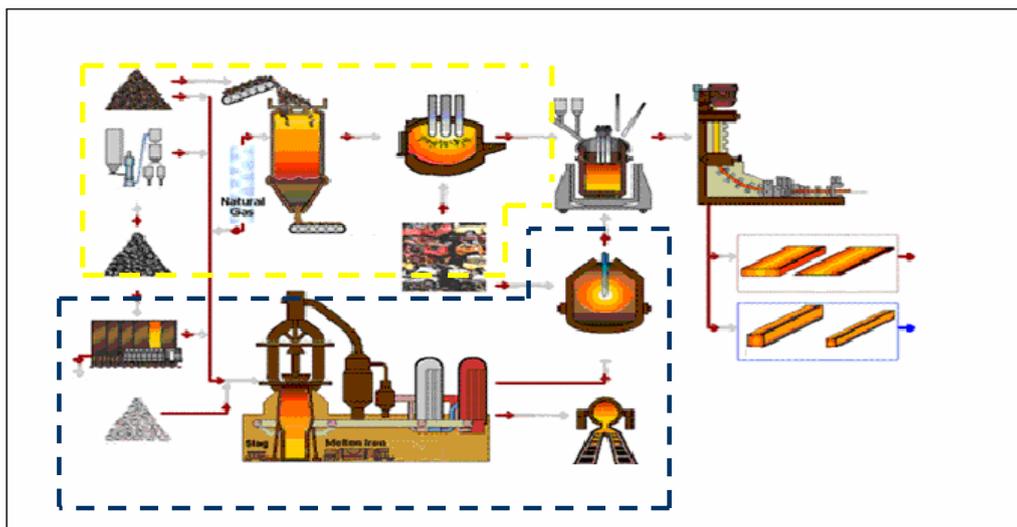
En México el Producto Interno Bruto (PIB) aumentó 2.8% en términos reales durante abril-junio de 2007 con relación al igual periodo de 2006. CANACERO refiere que de acuerdo

con el Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (INEGI), el Producto Interno Bruto (PIB) industrial creció 0.6% en el primer trimestre de 2007 y el manufacturero 0.5 % en el segundo trimestre, con respecto al 2006.

El Consumo Nacional Aparente (CNA) de acero disminuyó 4 % debido al bajo crecimiento de los sectores de la construcción y manufactura, que de enero a marzo registraron 2.1 y 0.1%, respectivamente. Los productos terminados que registraron mayor crecimiento fueron lámina rolada en caliente (13.9%), perfiles comerciales (10.4%) y tubos con costura para conducir agua (21.3%). La balanza comercial del sector fue superavitaria al crecer 17.4% las exportaciones y disminuir 7.4% las compras al exterior en igual periodo de tiempo. (¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

### 1.1.3 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE ACERACIÓN.

La producción de acero involucra diversas etapas que incluyen la extracción de mineral, la producción de arrabio, la metalurgia primaria y secundaria, colada, entre otros *Figura 2*. Estos procesamientos derivan en alguno de los siguientes procesos de fabricación: laminación en frío, conformado, forjado, unión, maquinado, revestimiento, etc.



**Figura 2.-** En esta figura se muestra el diagrama de flujo del proceso de aceración. Con colores se indican las rutas que este proceso sigue.

Los aceros pueden producirse ya sea a partir de materias primas (mineral de hierro, carbón y caliza) proceso que es conocido como ruta integrada; o bien, de chatarra de acero reciclada, lo cual es conocido como ruta no integrada. Las plantas integradas constan de todo el sistema de producción desde la extracción de los minerales de hierro hasta la formación de productos terminados como alambro, planchones, barras, componentes estructurales, entre otros. En contra parte, el proceso de las industrias no integradas inicia con la fusión de chatarra en hornos eléctricos.

Una vez producido el arrabio líquido, siguiendo la ruta integrada (*figura 2* señalada con azul), éste se envía a un convertidor básico al oxígeno (BOF, por sus siglas en inglés) el

cual tiene la finalidad de afinar el arrabio producido en el alto horno para poder obtener acero primario, que éste a su vez podrá ser nuevamente afinado durante la metalurgia secundaria para obtener, finalmente acero de alta calidad.

Las principales funciones del Convertidor BOF son la descarburación, la eliminación del fósforo contenido en el arrabio y la optimización de la temperatura del acero; para que cualquier otro tratamiento, previo a la colada, pueda realizarse con el mínimo recalentamiento o enfriamiento del acero. En la *Tabla 3* se pueden apreciar las composiciones más típicas antes y después de que el metal pase por el BOF.

Es importante mencionar que las reacciones exotérmicas de oxidación que ocurren durante el proceso en el convertidor generan gran cantidad de energía térmica, por lo general más de la necesaria para lograr la temperatura final del acero.

|                | %C   | %Mn     | %Si     | %P        | %S        | %O   | Temperatura ( °C) |
|----------------|------|---------|---------|-----------|-----------|------|-------------------|
| <b>Arrabio</b> | 4.7  | 0.2-0.3 | 0.2-1.5 | 0.06-0.12 | 0.02      | 0.0  | 1350-1400         |
| <b>Acero</b>   | 0.05 | 0.1     | 0.0     | 0.01-0.02 | 0.01-0.02 | 0.06 | 1620-1720         |

**Tabla 3.-** Se muestran las diferentes composiciones así como la temperatura con las que el arrabio es obtenido del alto horno. También se puede ver la composición del acero primario después del tratamiento en el BOF.

Las plantas integradas además de obtener arrabio en un alto horno pueden obtener hierro esponja (hierro reducido) a través de reducción directa como se muestra en la figura 2 (señalado en amarillo). El hierro esponja posteriormente se funde junto con cierta cantidad de chatarra en un horno eléctrico de arco.

Cuando el proceso de aceración inicia con la fusión únicamente de chatarra, quiere decir que en la planta no se procesa mineral de hierro para transformarlo en arrabio o hierro esponja. A este tipo de plantas se les conoce como plantas no integradas. Una amplia gama de materias primas son utilizadas. Cuando es posible, la alternativa de costo más baja es elegida – generalmente una chatarra gruesa pesada – siempre que el material se mantenga dentro de los parámetros de composición química.

En las plantas no integradas la chatarra es fundida y convertida en acero de alta calidad dentro de hornos eléctricos de arco (EAF, por sus siglas en inglés). La principal tarea de estos hornos, es convertir las materias primas sólidas en acero líquido lo más rápido posible para después afinarlas en los procesos sucesivos de metalurgia secundaria. De cualquier forma, si se dispusiera de tiempo y energía, prácticamente cualquier operación metalúrgica podría llevarse a cabo en el EAF (luego de la fusión), sin embargo por los altos costos de consumo de energía y la necesidad de producción masiva esto no es rentable, por tal razón es conveniente recurrir a la refinación secundaria.

De acuerdo a lo anterior, se puede resumir que la fabricación de acero se compone básicamente de dos etapas<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>.

- I. La producción de acero líquido con la composición, temperatura y limpieza requerida.
- II. La solidificación adecuada del acero líquido en máquinas de colada continua.

A partir del acero primario obtenido en el BOF y en el EAF el siguiente paso o etapa del proceso de aceración es la refinación, a la cual se le conoce como Refinación secundaria (metalurgia Secundaria o metalurgia de la olla). En esta etapa todos los tratamientos se realizan dentro de un reactor abierto (olla) en la cual el acero líquido se vacía proveniente del BOF o en su caso del EAF.

La refinación se conoce como proceso de metalurgia secundaria o metalurgia de la olla debido a que después de que el acero ha sido fundido pasa a una olla de diversas capacidades (60, 100, 200, 220 TON). La metalurgia secundaria tiene objetivos en los que destacan la adición de elementos aleantes (V, Cr, Ti, Mo), flotación de inclusiones, homogenización química y térmica del baño y sobre todo la desoxidación y desulfuración a través del intercambio metal escoria.

El acero en la cuchara es agitado comúnmente<sup>1</sup> por gases inertes, los cuales se inyectan en general por el fondo de la olla y permiten aumentar el rendimiento de las ferroaleaciones utilizadas, también se favorece la expulsión de ciertos gases disueltos los cuales son dañinos durante la solidificación. Estos fenómenos se encuentran directamente relacionados con la agitación del baño líquido y son gobernados principalmente por la convección y difusión en el baño metálico<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>.

En resumen, el propósito de la Metalurgia Secundaria es producir acero limpio, de tal forma que se satisfagan los estrictos requerimientos; superficiales, internos, estructurales y de propiedades mecánicas.

Cabe señalar que la inyección de gases al reactor de tratamiento no solo es para la industria del acero, además se utiliza en la industria del Cobre y del Aluminio.

Durante el desarrollo en tecnología del acero se encontró que la metalurgia secundaria podía ayudar, como se comentó anteriormente, a desoxidar, desulfurar, descarburizar, ajustar gradientes químicos y térmicos de tal forma que se incrementara la productividad y se disminuyera el tiempo y costo de refinación dentro de los hornos.

A partir de su implementación en planta la Refinación Secundaria con inyección de gases (Metalurgia de la olla) tiene las siguientes metas<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>:

- I. Controlar los gases: Mediante la desgasificación se disminuye la concentración de oxígeno e hidrógeno en el acero.
- II. Alcanzar niveles muy bajos de Azufre. Normalmente menor a 0.010 %.

---

<sup>1</sup> Sin embargo, existe otra forma de agitación la cual se conoce como agitación electromagnética.

- III. Realizar una microlimpieza (Remoción de partículas no metálicas, básicamente óxidos y sulfuros)
- IV. Mejorar la morfología de las inclusiones. Con la limpieza no es posible eliminar por completo las inclusiones en esta etapa es factible cambiar la composición y/o la forma de las partículas no deseadas para que no exista ninguna repercusión en las propiedades finales del acero.
- V. Mejorar las propiedades mecánicas.
- VI. Mejorar el rendimiento de las ferroaleaciones.
- VII. Disminuir el tiempo de proceso.

Por la importancia de esta etapa del proceso en la calidad final del acero, esta tesis está enfocada en el estudio de la fluidinámica en la olla de acero.

## 1.2 REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.

### 1.2.1 ANTECEDENTES

Mucho trabajo se ha realizado en cuestiones de proceso y operación en la etapa de refinación secundaria del acero. Las condiciones de trabajo en el proceso de aceración, específicamente en los tratamientos en la olla, son complejas a causa de la temperatura de tratamiento del acero, del gran tonelaje, de la falta de visibilidad dentro del reactor (opacidad del acero líquido y del reactor), de la dificultad para realizar mediciones, entre otros. Durante los últimos años se ha desarrollado lo que hoy se conoce como la Ingeniería de Procesos Metalúrgicos<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> la cual a través de Modelos Físicos, Modelos Matemáticos, mediciones en laboratorio, mediciones en planta piloto y en planta industrial ha logrado optimizar, desarrollar y analizar procesos anteriores y diseñar nuevos.

Los modelos son una representación aproximada de lo que sucede en la realidad. Por un lado los modelos físicos utilizan materiales diferentes a los que se ocupan en planta, a partir de los cuales es factible poder realizar mediciones bajo condiciones similares a las de la realidad. Por su parte, los modelos matemáticos describen aproximadamente lo que ocurre en el proceso a través de ecuaciones matemáticas, que a su vez, éstas pueden ser algebraicas, diferenciales ordinarias o diferenciales parciales.

En la literatura es relativamente sencillo encontrar trabajos sobre la Modelación Física y Matemática en ollas y en específico de ollas agitadas con gas. La gran mayoría de estos trabajos según comenta Mazumdar<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> se han realizado en las últimas 3 décadas, tiempo en el cual los avances científicos y tecnológicos, sobre todo

computacionales han permitido resolver con mayor facilidad y rapidez las ecuaciones que gobiernan los procesos que ocurren en la olla.

Se han registrado diversos estudios sobre los fenómenos involucrados en el proceso de refinación en ollas agitadas con gas entre los más analizados se encuentran: el estudio de la **dinámica de fluidos**, **mezclado**, **transporte de masa entre fluido-fluido**, **transporte de masa metal-escoria-gas**, **transferencia de energía**, **fenómenos de transferencia de energía y masa en conjunto**, entre los más representativos.

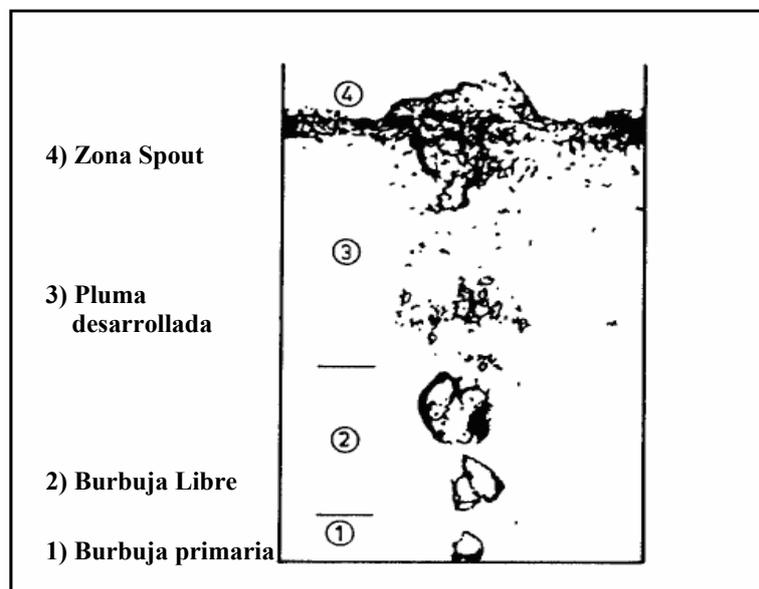
Como se mencionó, los modelos físicos han funcionado para observar y entender lo que sucede dentro de la olla a través de observaciones y mediciones. En la literatura se comenta que la mayoría de éstos se han desarrollado en modelos de acrílico (simulando la olla), agua (simulando al acero líquido por tener propiedades muy semejantes) y aire ( simulando la inyección de gases inertes) con la intención de estudiar la fluidinámica. Destacando: la **interacción bifásica líquido-gas**, **el mezclado**, **tiempo de mezclado**, **crecimiento y comportamiento de las burbujas dentro del líquido**, **características de la pluma de gas**, **estructura turbulenta**, **tiempo de inyección de gas**, **tipo de dispositivo de inyección de gas**, **flujo de gas**, **posición de inyectores**, etcétera.

Así mismo, los modelos matemáticos que se han desarrollado en cuestión de flujo de fluidos, lo han hecho considerando por un lado un marco de referencia Euleriano-Euleriano donde la ecuación de continuidad, las ecuaciones de Navier-Stokes y las ecuaciones de turbulencia se resuelven por separado tanto para la fase dispersa gaseosa y para la fase líquida continua. La unión entre ambas fases se da en la interfase donde existe transferencia de momentum. Otra forma que se ha encontrado es cuando se considera a la fase líquida continua como marco de referencia Euleriano y la fase de gas dispersa (burbujas de gas) se les considera como partículas individuales y a su movimiento se les asocia una ecuación de trayectoria. A este método se le conoce como formulación Euleriano-Lagrangiano. Por último, cuando se considera una sola fase homogénea; y además, la dimensión, forma y distribución de la pluma se conocen a priori, se resuelve el modelo de la fase cuasi-monofásica. En términos computacionales el último modelo es el más simple, sin embargo en los tres procedimientos es necesario conocer a priori algunos parámetros como tamaño de la burbuja, coeficientes de arrastre, entre otros.

Mazumdar<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, indica que donde mas difieren estos tres tipos de modelos es en la región dentro de la pluma y primordialmente en la vecindad de la superficie libre y en la zona de inyección de gas.

Además de encontrar modelos físicos y modelos matemáticos tratados por separados, es posible combinar las dos herramientas, para de esta forma tener mejores aproximaciones, validaciones confiables y en general realizar un análisis del proceso más efectivo. En la literatura se encuentran diversas referencias de estos casos, pero por lo general se han estudiado desde el punto de vista hidrodinámico y del de transporte de masa y energía.

De acuerdo a los objetivos de la refinación secundaria, después de que el arrabio ha sido transformado en acero primario o después de que el hierro esponja y la chatarra han sido fundidos en el horno de arco eléctrico<sup>2</sup> es requerido mezclar el baño para homogenizar la composición y la temperatura, remover inclusiones y a su vez trasladarlas a la escoria, así como desoxidar y desulfurar. A través del conocimiento plasmado en la literatura se sabe que el acero se encuentra a una temperatura antes del tratamiento de 1620-1720 °C en la olla. Al inyectar Ar o algún gas inerte se tiene el propósito, desde esta perspectiva<sup>3</sup>, de mezclar el baño metálico<sup>4</sup> y así acelerar los intercambios metal-escoria y mezclar más rápido. Al momento de inyectar el gas se generan dos fases una continua que es el líquido y una dispersa que en este caso es el gas; debido a la alta densidad del acero en comparación con el gas, la fuerza boyante y la tensión superficial no es factible que el gas salga como una fase continua, de tal forma que el gas comienza su camino dentro del seno del baño en forma de burbujas formando, en términos macroscópicos<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, una pluma de burbujas de gas, tal como se muestra en la figura 3.



**Figura 3.-** En esta figura se muestran las diferentes etapas de ascenso de las burbujas. Burbuja primaria, burbuja libre, Pluma desarrollada

<sup>2</sup> En la literatura se comenta que en el EAF también se puede realizar algún tratamiento de refinación.

<sup>3</sup> Ya que no es el único objetivo, además se intenta arrastrar las inclusiones, etc.

<sup>4</sup> En las Referencias número 4 y 12 se reportan las mejores condiciones de operación.

y Zona Spout.

Dentro de la pluma, durante la formación, crecimiento y nucleación de las burbujas se induce un arrastre de fluido (líquido) del fondo del reactor hasta la superficie del mismo, en otras palabras existe transporte de momentum inercial por acción del arrastre de las burbujas sobre el líquido (Grevet<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> y colaboradores indican que los flujos dentro del bulk son esencialmente inerciales y no a través de fuerzas turbulentas viscosas). Dicho transporte se refleja en un movimiento recirculatorio (Recirculación toroidal<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>) del líquido el cual sigue patrones de turbulencia como lo han demostrado en diversas ocasiones numerosos investigadores. En la figura 4 y 5 podemos apreciar cual es el patrón de recirculación que se forma al inyectar el gas. En la figura 5, también se percibe que las burbujas son de tamaño constante lo cual coincide con las suposiciones planteadas.

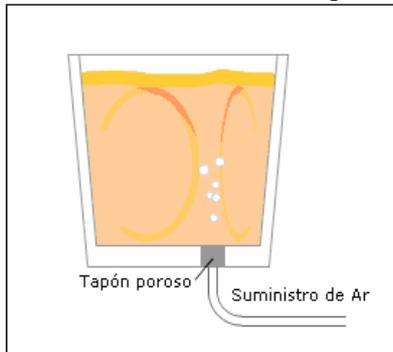


Figura 4.-Re circulación del fluido.

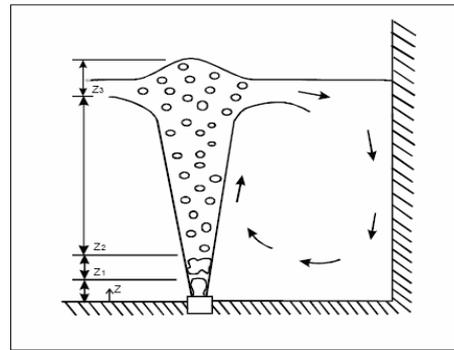


Figura 5.- Patrones de recirculación dentro de la olla.

En esta etapa de interacción entre las fases se han realizado varios estudios para determinar la fracción volumétrica de gas (Tabla 4), la frecuencia de las burbujas, la velocidad de ascenso de las mismas, entre los mas importantes (Tabla 3). La mayoría de los resultados indican que los perfiles de fracción volumétrica de gas y la frecuencia de las burbujas son esencialmente gaussianos<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>.

| Investigadores         | Expresiones para energía específica total de entrada   | Valor de energía específica total de entrada (W/t) |
|------------------------|--|--|
| Nakanishi y col.       | $\frac{0.0285 \cdot QT_L}{W} \text{Log} \left( 1 + \frac{L}{148} \right)$ <p>[L(cm); Q(N/min); W(t)]</p> $\frac{742 \cdot QT_L}{W} \text{Ln} \left( 1 + \frac{L}{10.34} \right)$ | 14.54  |
| Themelis y Stapurewicz | <p>[Únicamente en el modelo con agua; Q(m<sup>3</sup>/s)]</p> $\frac{\rho_L g QL}{\rho_L \pi R^2 L}$   | 2.5  |
| Mazumdar y Guthrie     |  | 1.13   |

|                      |   |      |
|----------------------|---|------|
|                      | $\frac{854 \cdot Q T_L}{W} \text{Log} \left( 1 + \frac{\rho_L g L}{\rho_o} \right)$             |      |
| Sinha y Mcnallan     | $\frac{4 Q \rho_a T_L}{298.2 \pi D^2 L} \text{Ln} \left( 1 + \frac{\rho_L g L}{\rho_o} \right)$ | 1.3  |
| Krishnamurthy y col. | $[Q(\text{Nm}^3/\text{s})]$   | 1.29 |

**Tabla 4.-** En esta tabla se ejemplifican algunas de las expresiones, para la energía de entrada, encontradas por varios investigadores y resumidas por Mazumdar (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

| Investigadores     | Expresiones para fracción volumétrica, ( $\alpha$ )  | Observaciones   |
|--------------------|--|---|
| Debroy y col.      | $\alpha \equiv \frac{1}{2\pi} \frac{Q}{\int_0^{nF} r(u + U_z) dr}$   | Se aplicaron los modelos de deslizamiento y no deslizamiento  |
| Szekely y col.     | $* \alpha \equiv \frac{Q - \pi r_c^2 U_s \alpha (1 - \alpha)}{\int_0^{nF} 2\pi r U_z dr}$                  | $U_z$ es estimada resolviendo por separado otra ecuación diferencial ordinaria                            |
| Sahai y Guthrie    | $\alpha \equiv \frac{Q \cdot \frac{L}{U_p}}{\pi r_{av}^2 L}$   | Modelo de no deslizamiento: Velocidad constante en la línea central se aplicó como condición de frontera. |
| Mazumdar y Guthrie | $\alpha \equiv \frac{Q \cdot \frac{L}{U_p}}{\pi r_{av}^2 L}$   | Modelo de no deslizamiento  |
| Blaji y Mazumdar   | $\alpha \equiv \frac{Q \cdot -\pi r_{av}^2 U_s \alpha (1 - \alpha)}{U_p \int_0^{rav} 2\pi r dr}$           | Condición de deslizamiento ;<br>$U_p = 4.5 Q^{1/3} L^{1/4} R^{-1/3}$                                      |
| Castillejos y col. | $\frac{\alpha}{\alpha_{\max}} \equiv \exp \left[ -0.7 \left( \frac{r}{r_{\max} / 2} \right)^{2.4} \right]$ | La fracción volumétrica del gas dentro de la pluma se estimó a través de correlaciones empíricas.         |

**Tabla 5.-** En esta tabla se ejemplifican algunas de las expresiones, generalizadas para la fracción volumétrica de gas calculadas a través del modelo de la fase cuasimonofásica, encontradas por varios investigadores y resumidas por Mazumdar (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

Además de la fluidinámica, en la literatura se menciona que poco trabajo se ha realizado con respecto a las interacciones metal-gas-escoria puesto que en los modelos se ha considerado la condición de superficie libre (En la mayoría de los modelos matemáticos dependiendo del caso que se esté resolviendo se considera a la superficie libre como una

condición de frontera) y la forma cónica de la pluma. Kim y Fruehan<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> así como Taniguchi<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> investigaron la absorción de gases a través del ojo de la pluma formado en la superficie, a mayor flujo de gas se incrementaba el tamaño del ojo proveniente de la pluma. En este sentido se encontró que una fase superior simulando la escoria podría ayudar a minimizar la absorción de gas. Algunos modelos físicos han utilizado sustancias orgánicas (aceite<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, benceno<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, ciclohexano<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>) para simular la interacción de la escoria y ayudar a minimizar la absorción del gas al seno del fluido.

Para simular las reacciones químicas entre las burbujas de gas y el líquido se ha utilizado  $\text{CO}_2$  (g) y NaOH para simular la interacción gas – metal.

Aunado a lo que se comentó anteriormente, la eficiencia intrínseca de muchas de las operaciones que se llevan a cabo dentro de la olla están relacionadas con el fenómeno de mezclado. El mezclado permite que las reacciones químicas se lleven a cabo con mayor eficiencia atrayendo a los reactantes hacia los sitios de reacción (intercara metal-escoria, gas-metal) y removiendo productos de reacción. También ajusta los gradientes térmicos y homogeniza la concentración de los solutos. En general el mezclado acelera la convección de masa y de energía.

El mezclado esta intrínsecamente relacionado con las fases presentes, por ejemplo, se ha encontrado que la intensidad del movimiento y el mezclado del líquido en el reactor son relativamente tardados en la presencia de una segunda fase líquida (escoria) en comparación de cuando ésta no existe.

La relación entre el mezclado con una cinética alta durante las reacciones es importante tanto en los sistemas homogéneos como en los heterogéneos. Dentro de los cuales es imprescindible conocer el estado de segregación y el tiempo de mezclado.<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>

Recientemente el concepto de tiempo de mezclado ha sido utilizado para representar el estado de agitación, de igual manera se ha trabajado para cuantificar experimentalmente el tiempo de mezclado en función de las variables de operación entre las que destacan: posición del o de los tapones en el reactor, número de tapones, flujo de gas, factor de forma, diámetro del tapón, etc.<sup>5</sup>

Alexiadis y colaboradores<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> comentan que la mayoría de los modelos matemáticos han considerado que dentro de la pluma gaseosa las burbujas son consideradas de tamaño constante dentro del seno del fluido, sin embargo, este no es el comportamiento real de las burbujas. Además, si este fuera el caso, los patrones de turbulencia que se formarían serían totalmente diferentes debido a que el arrastre de burbujas homogéneas en tamaño va a diferir al arrastre inducido por burbujas que cambian de tamaño en función de la profundidad o de la fuerza boyante.

---

<sup>5</sup> En la referencia número 4 se reportan las mejores condiciones de operación.

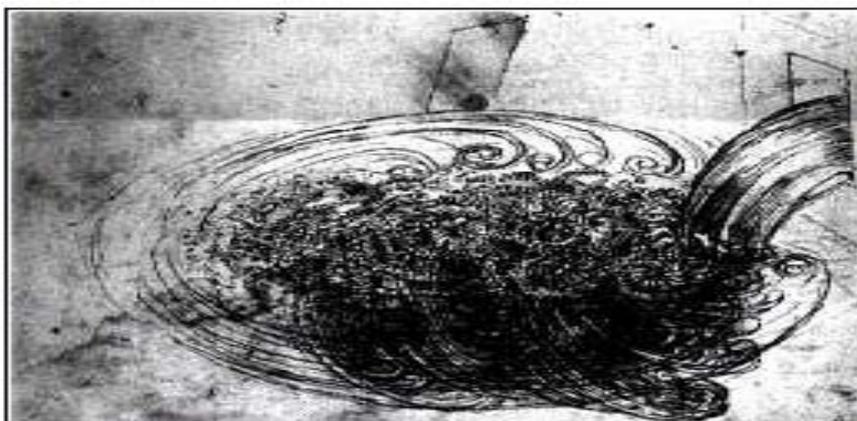
Cuando las burbujas se encuentran en la superficie, intercara metal-escoria, (etapa de “spout”) o desde otra perspectiva cuando se ha arrastrado fluido hasta la superficie, se genera una recirculación del fluido desde la superficie (*ver figura 4*) hacia las paredes, debido a esta trayectoria se forman patrones de recirculación o patrones de flujo turbulento, lo cual provoca que el baño se mezcle. <sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> Además, para evitar zonas muertas donde no exista recirculación del fluido debe de existir suficiente área de contacto entre las fases coexistentes.

## 1.2.2 TURBULENCIA

Antes de comenzar a definir turbulencia es conveniente citar el principio de este fenómeno que se presenta en los fluidos.

Un fluido es una sustancia que se deforma continuamente bajo la acción de una tensión de corte. La propiedad fundamental común para todos los fluidos es que un volumen de fluido no puede conservar su forma a menos que esté constreñido por fuerzas alrededor. Como se puede intuir existen varios tipos de fluidos entre los que destacan <sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>: Bingham, Ostwals-de Waele (pseudoplásticos), Prandtl-Eyring, Ostwals-de Waele (dilatantes), Reiner-Philippof, entre otros. Sin embargo los fluidos metálicos siguen la ley de la viscosidad de Newton, es decir son fluidos newtonianos.

Los fluidos newtonianos pueden, tener comportamientos laminares o turbulentos. El régimen laminar o turbulento esta en función de la velocidad del fluido, el tamaño del reactor o equipo donde estén contenidos, la viscosidad y la densidad del fluido. La transición entre un flujo laminar y uno turbulento es fuertemente afectada por factores como el gradiente de presión, niveles de velocidad, factores de fricción, rugosidad del contenedor y la transferencia de calor. <sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>



**Figura 6.**-Boceto de turbulencia realizado por Leonardo Da Vinci (circa 1500).

Se aprecia agua en movimiento entrando a una tina, se puede apreciar perfectamente la idea de lo que significa turbulencia. <sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>

Para poder distinguir entre cada régimen existen correlaciones como el número de Reynolds que representa una razón de fuerzas inerciales y fuerzas viscosas dentro de un

fluido. Experimentalmente se ha observado que fluidos con valores por debajo de lo que se conoce como el número de Reynolds crítico ( $Re_c$ ) tienen un movimiento a través de capas finas y adyacentes que se encuentran una sobre otra, cuando esto sucede es debido a que la velocidad del fluido es baja o la viscosidad del mismo es muy alta. A este comportamiento del fluido se le conoce como flujos laminares.

Por otro lado cuando el número de Reynolds se encuentra por arriba del  $Re_c$  una serie de eventos complejos toman lugar, los cuales eventualmente conllevan a un cambio radical en el comportamiento del fluido. Cuando esto sucede el fluido tiene un movimiento caótico y aleatorio. Cuando se presenta este régimen el flujo es conocido como flujo turbulento. Un boceto de Leonardo DaVinci (*Figura 6*) captura la naturaleza del flujo turbulento. El  $Re_c$  se determina de sistema a sistema de manera empírica.

El trabajo reportado en la literatura sobre el estudio de la turbulencia puede dividirse en tres grupos <sup>(33)</sup>:

- a. Estudios experimentales de flujos turbulentos, centrados tanto en la medición de los campos de velocidad como en los parámetros que caracterizan el comportamiento turbulento.
- b. Estudio estadístico de la turbulencia, dirigido hacia el desarrollo de las herramientas matemáticas para representar la naturaleza fluctuante y aleatoria de la turbulencia y finalmente para predecir el comportamiento de los campos de flujo turbulento a partir de primeros principios.
- c. Técnicas de cálculo semiempíricas enfocadas a la predicción de los campos de velocidad y la dispersión en flujos turbulentos de interés para la Ingeniería.

El primer grupo de estudio se enfoca básicamente a los modelos físicos, el segundo a los modelos empírico (aunque la teoría estadística de la turbulencia indica los tipos de mediciones deseables pero no tienen éxito en predecirlos) y en el tercer grupo se encuentran los modelos fundamentales o mecánicos que se basan en los primeros principios de las leyes que rigen los fenómenos de transporte. Szekely<sup>(33)</sup> comentó en 1988 que “... Estas técnicas de cálculo desarrolladas recientemente utilizan demasiado tiempo de computadora y todavía no corresponden satisfactoriamente a las mediciones, excepto para unos casos especiales...” sin embargo, hoy en día con todo el adelanto computacional en Hardware y software, en especial los paquetes de CFD, (por sus siglas en ingles provenientes de Computational Fluid Dynamics) se ha podido utilizar de manera adecuada los modelos fundamentales con mucha semejanza a lo que ocurre en la realidad.

La representación cuantitativa del comportamiento de flujo turbulento requiere que se caracterice tanto la velocidad media (promediada en el tiempo) y la naturaleza de las fluctuaciones como la amplitud, la frecuencia, entre otras.

### 1.2.3 EDDYS

Aún en flujos donde la velocidad y la presión de referencia varían solamente en una o dos dimensiones, las fluctuaciones siempre se presentan en un espacio tridimensional. Además, las visualizaciones del flujo turbulento revelan flujos de carácter rotacional. Estos flujos o elementos rotacionales son denominados como eddys y se forman cuando el fluido se mueve con una alta velocidad (alta energía cinética turbulenta).

En el movimiento de los eddys grandes (Los eddys grandes son altamente anisotrópicos, altamente direccionales) la disipación viscosa es despreciable; así la degradación de energía ocurre cuando los remolinos grandes transfieren su energía a los mas pequeños, en los que la energía cinética se consume entonces debido a la disipación viscosa.

Partículas de fluido que inicialmente se encontraban separadas por una gran distancia entre ellas pueden reunirse repentinamente a causa de los eddys dentro del flujo turbulento.

Debido a la obvia importancia práctica de los fenómenos de flujo turbulento en tuberías, existen mediciones extensivas de velocidad, a partir de las cuales se conoce que a cierta distancia de la pared del tubo, el perfil de velocidades es relativamente aplanado; esta región se llama comúnmente núcleo turbulento. En la vecindad inmediata de la pared, las fuerzas viscosas predominan lo que resulta en una caída en el gradiente de velocidad, esta región comúnmente suele llamarse subcapa laminar. Ciertos estudios muestran<sup>(33)</sup> que los remolinos llegan a penetrar esta zona. Finalmente existe una región inmediata, denominada capa amortiguadora (Buffer), en la que tanto los efectos turbulentos como los viscosos son importantes. Por tal razón a cierta distancia de la pared se aprecia que existen remolinos grandes y que mucha energía cinética del fluido se encuentra asociada con los remolinos de tamaño grande y mediano.

#### **1.2.4 MODELOS DE TURBULENCIA**

Un modelo de turbulencia es un procedimiento computacional que se aproxima al comportamiento real del fluido. Para propósitos ingenieriles es innecesario resolver los detalles de las fluctuaciones turbulentas. Comúnmente solo se requiere conocer los efectos de la turbulencia en el fluido de referencia. Para que un modelo de turbulencia sea útil en su propósito de CFD, debe de tener una amplia aplicación; debe ser preciso, simple y económico computacionalmente hablando.

Los modelos de turbulencia mas utilizados durante la mayor parte de los trabajos experimentales han sido los siguientes:

- Modelos clásicos. Basados en (tiempo-promedio).

- 1.- Modelo de cero ecuaciones (Modelo de longitud de mezclado).
- 2.-Modelo de dos ecuaciones (Modelo K- $\epsilon$ ).
- 3.-Modelo de las ecuaciones de esfuerzos de Reynolds.
- 4.-Modelo de esfuerzos con ecuaciones algebraicas.

- Simulación de Eddys largos.

Szekely y colaboradores<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> fueron los primeros en realizar una simulación numérica de flujo turbulento en ollas agitadas con gas, considerando las ecuaciones de Navier Stokes en conjunción con el modelo de turbulencia K- $\omega$ <sup>(36,37)</sup> en el seno del fluido de una olla agitada con gas, fuera de la pluma. Sin embargo, Debroy<sup>(38)</sup> y colaboradores realizaron una aproximación más realista y adecuaron el problema considerando la importancia de la pluma gaseosa, además asumieron que las burbujas estaban dispersas dentro de una columna y relacionaron la fracción volumétrica de gas con el flujo de entrada. En otro estudio, Woo y Szekely<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> utilizaron el modelo de turbulencia K- $\epsilon$  asumiendo que las burbujas dentro del seno del fluido estaban contenidas en una región cilíndrica de un diámetro dado.

Lance<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> y colaboradores y Theofanous y colaboradores<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> demostraron que bajo ciertas condiciones las burbujas pueden contribuir significativamente a la producción de turbulencia a lo cual Alexiadis<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> y colaboradores comentan que la disipación de la energía turbulenta en la estela de las burbujas se asume como una fracción de trabajo presentado por la fuerza de arrastre experimentada por las burbujas.

Como se ha visto hasta ahora y con las citas bibliográficas podemos intuir que cuando existe una distribución adecuada de la fase dispersa, en consecuencia se generan patrones de turbulencia que mejoran y actúan con mayor rapidez sobre objetivos metalúrgicos de la olla. Zhang<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> comenta que al momento de inyectar burbujas pequeñas no solamente se obtienen óptimas condiciones de mezclado, si no que se generan una mejor distribución de la fracción volumétrica del gas permitiendo una mayor limpieza en el acero.

Schwarz y colaboradores<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, reportaron investigaciones teóricas y experimentales en una olla a escala laboratorio agitada con nitrógeno, ellos utilizaron el código PHOENICS incorporando una aproximación computacional de las 2 fases incluyendo el modelo de turbulencia k- $\epsilon$  con el fin de predecir la turbulencia en función del flujo de nitrógeno inyectado.

Se han reportado comparaciones entre mediciones y las predicciones realizadas con el modelo de la fase cuasi-monofásica en conjunto con el modelo de turbulencia K- $\epsilon$ <sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> y los resultados coinciden en buena medida. Sin embargo Grevet y colaboradores<sup>(iError! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> establecieron que los coeficientes estándar del modelo K- $\epsilon$  eran inadecuados para simular los fenómenos de turbulencia en sistemas agitados con gas.

Como se ha descrito anteriormente existen muchos fenómenos que han sido estudiados por numerosos investigadores. Sin embargo el modelo de turbulencia que se ha ocupado en los diversos trabajos se han llevado a cabo con el modelo de turbulencia k- $\epsilon$ . Es decir, existe una falta de conocimiento acerca de que modelo es el que se ajusta mejor a las mediciones experimentales en una olla agitada con gas. Por lo tanto, debido a la importancia de la

metalurgia de la olla y de su impacto en la calidad del acero, este trabajo está enfocado en dilucidar el mejor medio de turbulencia en ollas agitadas con gas.

### **1.2.5 OBJETIVOS.**

- 1) Establecer el modelo de turbulencia que mejor describa el comportamiento real del flujo turbulento bifásico en la olla.
- 2) Analizar el desempeño de distintos modelos de turbulencia incluidos como parte de un modelo numérico que simule el flujo bifásico en una olla agitada por medio de burbujas de gas inyectadas por el fondo.
- 3) Concluir cual es el modelo que mejor reproduzca las condiciones experimentales reportadas en modelos físicos de una olla (sistema agua-aire)

## CAPITULO 2

## MODELO MATEMÁTICO

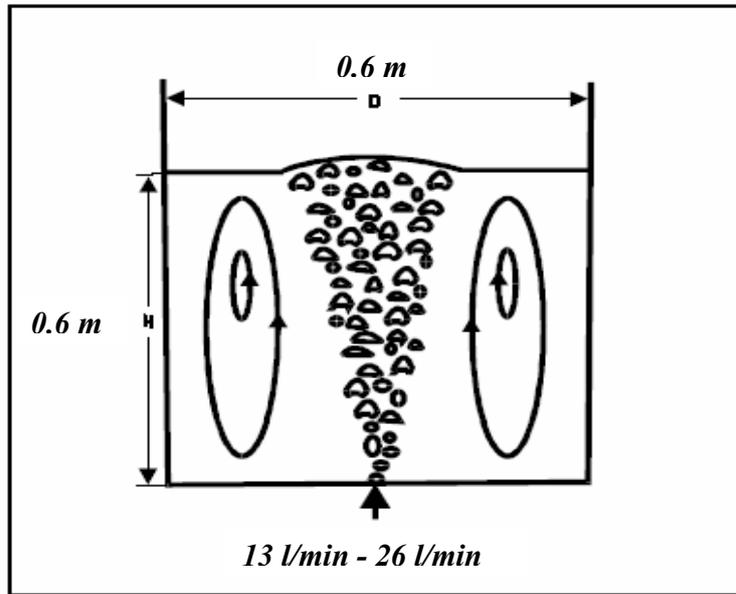
### 2.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA.

Como se mencionó en párrafos anteriores, existe mucho trabajo desarrollado a lo largo de los últimos 30 años referente a la modelación matemática de la operaciones y procesos que ocurren dentro de las ollas de refinación secundaria de acero. En particular, el estudio realizado por **Woo, Szekely, Castillejos y Brimacombe**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, sobre recirculación turbulenta, presenta resultados de perfiles de velocidad y de energía cinética turbulenta, obtenidos mediante la resolución de la ecuación de continuidad, las ecuaciones de Navier-Stokes y en especial las ecuaciones del modelo de turbulencia K- $\epsilon$ . Además, los resultados de este modelo matemático fueron validados con las mediciones experimentales de **Grevet**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, quien ocupó un modelo físico de acrílico, agua y aire.

Los autores indican que las predicciones teóricas coincidieron con las mediciones reales de **Grevet**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, lo cual nos brinda la pauta para retomar las condiciones que ellos utilizaron. Básicamente nuestro problema se enfoca en modelar el comportamiento turbulento dentro del reactor cilíndrico de **Grevet**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> y **Woo**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, bajo las mismas condiciones de operación, con la única diferencia de que el modelo de turbulencia será modificado con la intención de concluir cual es el mejor modelo para predecir el comportamiento dentro del reactor. Las dimensiones y condiciones de operación que se encuentran señaladas en tabla 6 y ejemplificadas en la *Figura 7* son las mismas que utilizó **Grevet**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>, y serán las que se retomaran en esta tesis.

|                                   |                    |
|-----------------------------------|--------------------|
| Diámetro del reactor              | 0.6 m              |
| Profundidad de agua en el reactor | 0.6 m              |
| Flujo de gas en la entrada        | 13 l/min, 26 l/min |
| Diámetro del tapón                | 0.0127 m           |

**Tabla 1.-** Dimensiones de la olla y condiciones de operación que utilizó **Grevet**<sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup> en su modelo Físico y son las que se usaran en esta tesis.



**Figura 1.-** En este esquema se pueden visualizar las medidas del reactor además se puede notar los patrones de recirculación, la entrada del gas y el tamaño constante de las burbujas.

## 2.2 SIMPLIFICACIÓN DEL PROBLEMA.

Como es de suponerse, atacar un problema de esta magnitud es un trabajo muy laborioso debido a la complejidad de las ecuaciones que describen los fenómenos fluidinámicos en el sistema. Por tal razón, para disminuir la complejidad del caso se deben hacer suposiciones que faciliten la resolución matemática, sin perder de vista que el modelo debe ser una representación muy cercana a la realidad.

De acuerdo a las características físicas del problema se sabe que el reactor tiene forma cilíndrica, el flujo de aire (constante) es introducido por el centro del reactor en estado estable, la pluma de gas que se forma y los patrones de flujo presentan simetría alrededor del eje axial por lo que solo se necesita una representación en el  $R - Z$  en coordenadas cilíndricas.

El modelo asume que en la entrada de gas comienzan a formarse burbujas, las cuales tienen el mismo tamaño durante todo su recorrido en el seno del fluido y cuando éstas se aproximan a la superficie se despreja la zona Spout teniendo en cuenta, además, que no se considera la presencia de una tercera fase como escoria por lo que se puede suponer una superficie libre plana.

El modelo de turbulencia solo se aplica en la fase continua debido a que es en donde se genera la recirculación, además, ésta fase sigue la ley de la viscosidad de Newton, por lo que se considera un fluido newtoniano. Por último, es muy importante señalar que en el dominio todas las propiedades deben mantenerse constantes para ambas fases.

## 2.3 ECUACIONES GOBERNANTES.

Para cualquier problema de dinámica de fluidos bifásicos se debe tener en mente que es requerido resolver por un lado un balance de masa descrito por la ecuación de continuidad para cada fase, y por otro lado, un balance de fuerzas descrito por las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales son ecuaciones vectoriales. Sin embargo, cuando se presenta más de una fase en el dominio, es necesario contemplar términos asociados a la interacción entre las fases en cada balance.

En este caso, en donde la turbulencia es un factor muy importante se deben cumplir en general dos características. La primera es la conservación de energía cinética y la segunda es la disipación de la misma en el sistema. Estas ecuaciones van a diferir de acuerdo al modelo de turbulencia utilizado. Además, cada modelo puede tener asociado diferentes condiciones de frontera para delimitar el dominio turbulento.

Para la aplicación de los modelos de turbulencia es necesario conocer las características anteriores y tener en cuenta los criterios de selección de modelos de turbulencia, de los cuales se hablará más adelante.

Las ecuaciones de transporte gobernantes de la agitación de ollas con gas que se deben resolver son:

- ◆ Ecuación de continuidad para cada fase.
- ◆ Ecuación de conservación de momentum para ambas fases.
- ◆ Ecuaciones del modelo de turbulencia solo para la fase líquida.

### 2.3.1 ECUACIÓN DE CONTINUIDAD.

La ecuación de continuidad expresa la conservación de masa en el dominio de cómputo para la fase  $i$ , donde  $i$  puede representar la fase líquida ( $i=l$ ) o la fase gas ( $i=g$ ).

$$\frac{\partial(\rho_i R_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i V R_i) - \nabla \cdot (\rho_i D_t \nabla R_i) = 0 \quad (1)$$

El primer término de la ecuación (1) representa la acumulación de masa, el segundo término representa la convección y el tercer término, que es poco común, representa la dispersión de burbujas en el líquido debido a la turbulencia. Adicionalmente, se debe de

cumplir que la suma de fracciones volumétricas de la fase gas y de la fase líquida debe resultar 1 en cada nodo a través del dominio entero (ecuación (2)).

$$R_l + R_g = 1 \quad (2)$$

### 2.3.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN DE MOMENTUM PARA AMBAS FASES.

A diferencia de la ecuación de continuidad, la ecuación de conservación de momentum es una ecuación vectorial; esto significa que existe una ecuación para cada dirección en donde se requiera hacer un balance de flujo de momentum.

$$\frac{\partial(\rho V)}{\partial t} - \nabla \cdot \rho V V + \nabla \cdot \tau + \rho \overset{D}{F}_b - \nabla P - \overset{D}{F}_{fricc} = 0 \quad (3)$$

La ecuación esta compuesta por un término transitorio, un término convectivo y un término difusivo. El término  $\tau$  representa al tensor de esfuerzos para las dos fases (esfuerzos newtonianos en coordenadas cilíndricas). Además ésta ecuación tiene asociada un término de flotación ( $\overset{D}{F}_b$ ) que promueve el ascenso de las burbujas de gas debido a la menor densidad del gas. El último término representa la fuerza de fricción ( $\overset{D}{F}_{fricc}$ ) que promueve el intercambio de momento entre la fase líquida y la fase gas. Este término es de suma importancia debido a que el arrastre que ejerce el gas sobre el líquido es lo que mueve y da agitación al baño líquido. Este término es igual en ambas fases pero con signos opuestos.

La fuerza de fricción esta dada por la siguiente ecuación:

$$\overset{D}{F}_f = C_f (V_i - V) \quad (4)$$

En donde el coeficiente de fricción  $C_f$  está en función del coeficiente de arrastre  $C_D$

$$C_f = \frac{0.75 C_D \rho_l R_l R_g V_{vol} V_{slip}}{D_p} \quad (5)$$

A su vez el coeficiente de fricción depende  $D_p = 0.02645$  m y  $C_D$ , que se encuentra en función del número de Re y el de We:

$$C_D = \frac{16}{Re} \text{ Para } Re \leq 0.49.$$

$$C_D = \frac{20.68}{Re} \text{ Para } 0.49 < Re < 100.$$

$$C_D = \frac{6.3}{Re^{0.385}} \text{ Para } Re \ll 100.$$

$$C_D = \frac{8}{3} \text{ si } Re \gg 100 \text{ y } We > 8.$$

$$C_D = \frac{We}{3} \text{ si } Re \gg 100 \text{ y } Re > \frac{2065.1}{We^{26}}$$

Es importante mencionar que dado que el flujo es turbulento, en la fase líquida la viscosidad que aparece en los tensores de esfuerzos es la viscosidad efectiva, es decir la suma de la viscosidad turbulenta y molecular, dada por:

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (6)$$

### 2.3.3 ECUACIONES DE TURBULENCIA.

1) Modelo estándar, K-ε.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho k V_r) = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right] + G_k - \rho \varepsilon + S_k \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho \varepsilon V_r) = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon}) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (8)$$

La primera ecuación representa la energía cinética turbulenta y la segunda representa la razón de disipación de energía turbulenta. Cada ecuación tiene asociada términos convectivos, difusivos, transitorios y términos fuente.  $G_k$  representa la generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes principales de velocidad:

$$G_k = -\rho V V \frac{\partial V_z}{\partial r} \quad (9)$$

$S_k$  es el término fuente asociado con la generación de turbulencia a causa de las burbujas.  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta la cual está calculada combinando K y  $\epsilon$  de la siguiente forma:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (10)$$

$S_\epsilon$  representa el término fuente asociado con la disipación de energía turbulenta.

El modelo k- $\epsilon$  tiene asociado constantes empíricas, para la mayoría de flujos turbulentos PHOENICIS utiliza las siguientes:

| Constante | $C_1$ | $C_2$ | $C_3$ | $\sigma_k$ | $\sigma_\epsilon$ | $C_\mu$ |
|-----------|-------|-------|-------|------------|-------------------|---------|
| Valor     | 1.44  | 1.92  | 1.00  | 1.00       | 1.31              | 0.09    |

En donde  $\sigma_k$  y  $\sigma_\epsilon$  son los números de Prandtl turbulento para K y  $\epsilon$  respectivamente.

## 2) Modelo Chen-Kim, **K- $\epsilon$** .

Este modelo tiene dos diferencias básicas con respecto al modelo K-  $\epsilon$  estándar:

a) Las constantes toman diferentes valores.

| Constante | $C_1$ | $C_2$ | $C_3$ | $\sigma_k$ | $\sigma_\epsilon$ | $C_\mu$ |
|-----------|-------|-------|-------|------------|-------------------|---------|
| Valor     | 1.15  | 1.9   | 0.25  | 0.75       | 1.15              | 0.09    |

b) En la ecuación de disipación de energía turbulenta se introduce en el término fuente una escala de tiempo extra  $\left(\frac{K\epsilon}{P_K}\right)$  por unidad de volumen.

$$S_\epsilon = \rho F_1 C_{3\epsilon} \frac{P_K^2}{K} \quad (11)$$

En donde  $F_1$  es la función amortiguadora de Lam-Bremhorst, la cual tiende a uno con números de Reynolds grandes y  $P_K$  es la velocidad de producción de energía cinética por unidad de volumen.

### 3) Modelo RNG, K-ε.

Éste modelo de turbulencia se deriva de las ecuaciones instantáneas de Navier-Stokes, usando una técnica matemática llamada renormalización de grupos (RNG). Este método consta de constantes diferentes a las del modelo K-ε estándar, además cuenta con términos y funciones adicionales en las ecuaciones de transporte k y ε.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho k V_r) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial z} \right) + G_k - \rho \varepsilon + S_k \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho \varepsilon V_r) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon}) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad (13)$$

En este modelo al igual que en k-ε, cada ecuación tiene asociada términos convectivos, difusivos, transitorios y términos fuente. La característica de este método se encuentra en el término difusivo en el cual se utiliza viscosidad efectiva en lugar de viscosidad turbulenta la cual se calcula como se indico en la *ecuación 6*:

$$\alpha_k = \alpha_\varepsilon \approx 1.393$$

En donde  $\alpha$  representa el inverso del número de Prandtl efectivo para k y ε.

### 4) Modelo Lam-Bremhorst, K-ε.

Éste modelo, para Reynolds pequeños, emplea una ecuación de transporte para la velocidad de disipación total de energía con la ventaja de que no necesita términos fuentes adicionales, sin embargo una de las desventajas es que en una de las funciones amortiguadora se requiere calcular la distancia local a la pared más cercana.

Para Reynolds grandes, en comparación con el modelo K-ε estándar, éste modelo multiplica las constantes  $C_1$ ,  $C_2$ , y  $C_\mu$  con las siguientes funciones:

$$F_1' = 1 + \left( \frac{0.05}{F_\mu} \right)^3 \quad (14)$$

y

$$F_2' = 1 - e^{(-\text{Re}_T^2)} \quad (15)$$

En donde:

$$\text{Re} = \frac{\sqrt{K} \cdot Y_N}{\mu_k} \quad (16)$$

y

$$\text{Re}_T = \frac{K^2}{\mu_k \varepsilon} \quad (17)$$

En el cuál  $Y_N$  es la distancia a la pared mas cercana. Para Reynolds altos las funciones  $F_\mu$ ,  $F_1$  y  $F_2$  multiplicadas por las constantes  $C_\mu$ ,  $C_1$  y  $C_2$  tienden a uno.

### 5) Modelo KL, K- $\epsilon$ .

Éste modelo difiere del modelo k- $\epsilon$  estándar solamente en la velocidad de generación volumétrica de energía turbulenta.

$$P_k = \nu_t S \Omega \quad (18)$$

En lugar de

$$P_k = \nu_t S^2 \quad (19)$$

En donde  $S$  y  $\Omega$  son, respectivamente, los parámetros de esfuerzo y verticidad definidos como:

$$S^2 = \frac{\left( \frac{\partial V_r}{\partial z} + \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)^2}{2} \quad (20)$$

$$\Omega^2 = \frac{\left( \frac{\partial V_r}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial r} \right)^2}{2} \quad (21)$$

Los niveles excesivos de  $K$  en las regiones afectadas son producidos por  $S$ . Ahora, en flujos de corte simples la modificación tiene pequeños efectos por que  $\Omega$  y  $S$  son esencialmente iguales. Por otro lado en regiones de estancamiento  $\Omega$  tiende a cero en consecuencia la generación de turbulencia se reduce mucho con esta modificación.

## 6) Modelo MMK, K-ε.

Este modelo difiere en lo que se refiere al cálculo de la viscosidad de los eddys (eddy viscosity).

$$\nu_t = F_\Omega C_\mu C_d \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (22)$$

## 7) Modelo algebraico LES-Smagorinsky.

Este modelo pertenece a los modelos algebraicos, donde  $\nu_t$  se obtiene a partir de correlaciones empíricas o fenomenológicas sin necesidad de resolver ninguna ecuación adicional a las planteadas en el modelo laminar.

En particular el método de Smagorinsky se basa en resolver las ecuaciones laminares con una viscosidad efectiva: suma de la molecular más la contribución turbulenta. Ésta última se calcula sobre la base de:

$$\nu_t = C_s \Delta h_{malla} \sqrt{S(u) : S(u)} \quad (23)$$

Siendo  $C_s = 0.18$  la constante de Smagorinsky,  $\Delta$  una función de amortiguamiento que disminuye la intensidad de la viscosidad turbulenta a medida que el flujo se acerca a objetos sólidos,  $h_{malla}$  es el tamaño de la malla, la cual produce el efecto deseado y a medida que se afina la malla la turbulencia aumenta y la parte modelada disminuye.

Por último  $\sqrt{S(u) : S(u)}$  es la traza del tensor velocidad de deformación, una variable local del flujo.

## 2.4 CONDICIONES DE FRONTERA.

Las condiciones de frontera son la columna vertebral de un buen modelo, ya que relacionan las fronteras físicas del dominio con la solución de cada ecuación y con las simplificaciones realizadas. En la Figura 8 se muestra el dominio 2D de una olla en donde se presentan con letras las fronteras y en la Tabla 6 se presentan las condiciones de frontera de cada variable. Estas condiciones indican de manera general condiciones de cero turbulencia y no deslizamiento en las paredes, una entrada de gas con velocidad constante de gas en la tobera, condiciones de cero flujo en el eje axisimétrico y cero corte de salida de gas en la superficie libre.

En la figura 8, las fronteras definidas por los ejes A-B, B-C, C-D y D-A son: la superficie libre, las paredes, el fondo del reactor y el eje de simetría respectivamente.

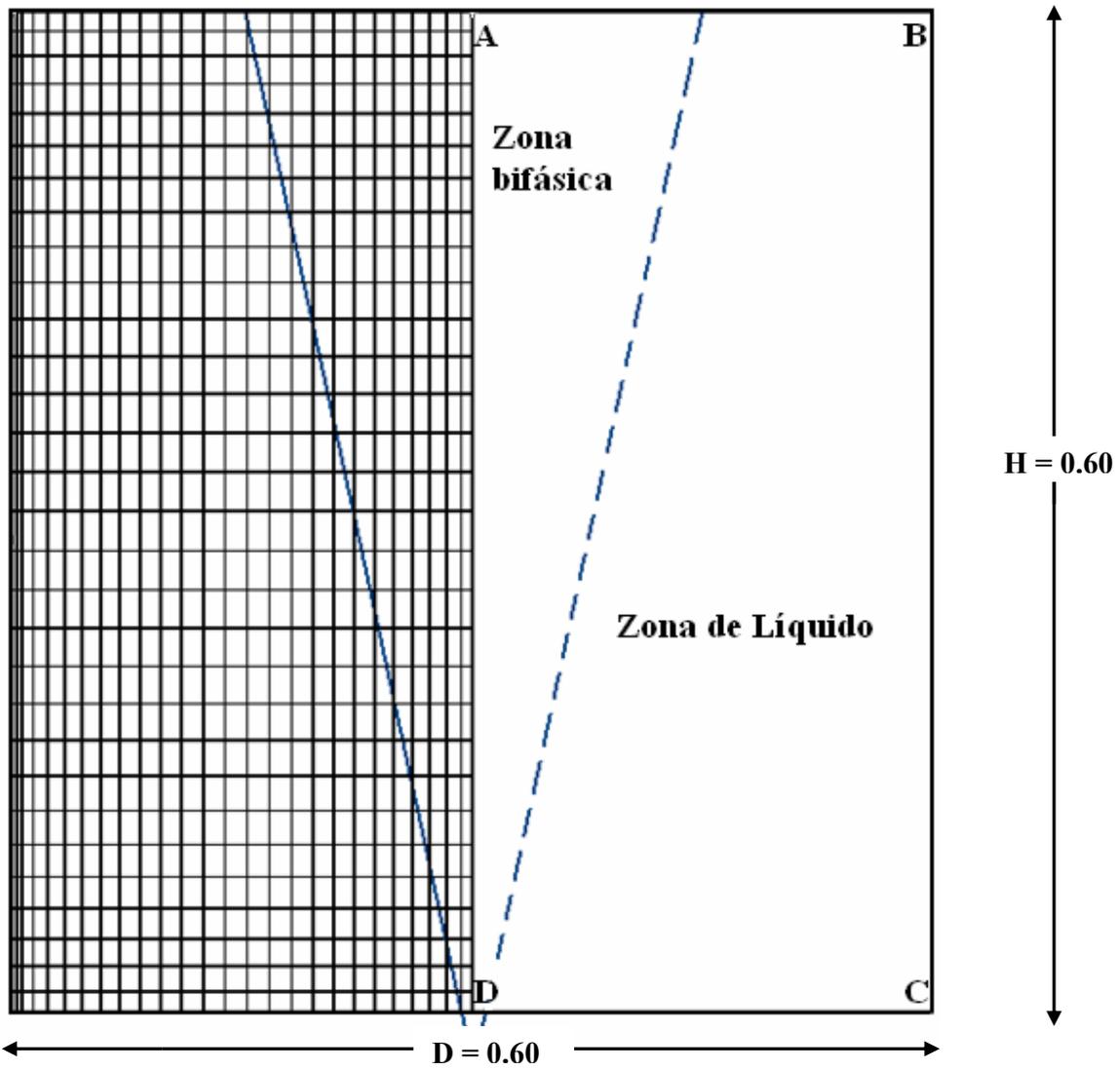


Figura 2.- Frontera física del problema.

| Parámetro  | Plano de simetría   | Pared del reactor   | Fondo del reactor                     | Boquilla                                | Superficie Libre                           |
|------------|---|---|---------------------------------------|---|--|
| $V_{r,l}$  | $\frac{\partial V_{r,l}}{\partial z} = 0$   | <b>0</b>  | <b>0</b>                              | <b>0</b>                                | $\frac{\partial V_{r,l}}{\partial z} = 0$  |
| $V_{r,g}$  | $\frac{\partial V_{r,g}}{\partial z} = 0$   | <b>0</b>  | <b>0</b>                              | $\rho V_r _b = \text{Flujo másico gas}$ | $\rho V_r _s = \text{Flujo másico gas}$    |
| $V_{z,l}$  | $\frac{\partial V_{z,l}}{\partial r} = 0$   | <b>0</b>  | <b>0</b>                              | <b>0</b>                                | $V_{z,l} = 0$                              |
| $V_{z,g}$  | $\frac{\partial V_{z,g}}{\partial r} = 0$   | <b>0</b>  | <b>0</b>                              | $\rho V_z _b =$                         | $\rho V_z _s =$                            |
| $R_l$      | $\frac{\partial R_l}{\partial r} = \frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$           | $\frac{\partial R_l}{\partial r} = \frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$ | $\frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$ | <b>0</b>                                | <b>0</b>                                   |
| $R_g$      | $\frac{\partial R_g}{\partial r} = \frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$           | $\frac{\partial R_g}{\partial r} = \frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$ | $\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$ | <b>1</b>                                | $\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$      |
| $K$        | $\frac{\partial k}{\partial z} = \frac{\partial k}{\partial r} = 0$               | $K = 0$   | $K = 0$                               | $K_{in}$                                | $\frac{\partial k}{\partial z} = 0$        |
| $\epsilon$ | $\frac{\partial \epsilon}{\partial z} = \frac{\partial \epsilon}{\partial r} = 0$ | $\epsilon = 0$  | $\epsilon = 0$                        | $\epsilon_{in}$                         | $\frac{\partial \epsilon}{\partial z} = 0$ |

Tabla 2.- Valores de la velocidad del fluido y del gas en el dominio de cálculo.

## Propiedades

| Símbolo       | Valor en el modelo   | Unidades             |
|---------------|----------------------|----------------------|
| $Q_g$         | 13                   | (L/min)              |
| $Q_g$         | 26                   | (L/min)              |
| $\rho_{aire}$ | 1.169                | (Kg/m <sup>3</sup> ) |
| $\rho_{agua}$ | 1000                 | (Kg/m <sup>3</sup> ) |
| $\mu_{agua}$  | $995 \times 10^6$    | (Kg/m·s)             |
| $\mu_{aire}$  | $19.3 \times 10^6$   | (Kg/m·s)             |
| $\nu_{agua}$  | $0.995 \times 10^6$  | (m <sup>2</sup> /s)  |
| $\nu_{aire}$  | $1.5689 \times 10^5$ | (m <sup>2</sup> /s)  |

Tabla 3.-Propiedades de transporte para el agua y aire.

## CAPITULO 3

## DESARROLLO.

### 3.1 ANTECEDENTES COMPUTACIONALES.

Debido a la complejidad de las ecuaciones gobernantes en el proceso de refinación es necesario recurrir a herramientas computacionales tales como la programación desde origen o la programación estructurada. Estas técnicas transforman las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) en sistemas de ecuaciones lineales algebraicas, las cuales a su vez se resuelven a través de métodos numéricos iterativos. La característica que tienen los métodos numéricos es que no dan una solución exacta sino que presentan una solución aproximada y discreta, esto quiere decir que la solución no es continua en el dominio. Entre mayor cantidad de iteraciones se realicen mayor será la precisión del modelo.

Existen diversas técnicas numéricas para poder resolver las ecuaciones diferenciales parciales que gobiernan el problema hidrodinámico en la olla de refinación secundaria entre las que destacan diferencias finitas, elemento finito y volumen de control. Los algoritmos de los métodos numéricos se encuentran programados en diferentes códigos libres y/o comerciales.

En la actualidad se tienen al alcance diversos software, los cuales tienen acoplados alguna técnica numérica para resolver las ecuaciones que se representen el caso. Entre los software libres destacan SIMPLEC, CONDUCT, TEACH 2D, entre otros. En el caso de los comerciales podemos encontrar ANSYS, FLUENT, FLOW 3D, PROCAST y PHOENICS.

La mayoría de estos programas tienen un lenguaje de entrada y se encuentran codificados en FORTRAN.

Para desarrollar este trabajo se utilizó una computadora personal marca DELL integrada con un procesador Pentium 4. Además, cuenta con el paquete comercial PHOENICS versión 3.4 para resolver el problema de flujo bifásico de la olla agitada con gas.

### 3.2 DESCRICIÓN DEL SOFTWARE PHOENICS.

PHOENICS cuenta con tres programas principales *Satellite*, *Earth* y *Photon* los cuales funcionan como preprocesador, procesador y postprocesador respectivamente. El usuario define el problema a través de un lenguaje propio que se llama *PIL* (Phoenix Input Language) a través del archivo *Q1* o a través del archivo *Ground.for* (Escrito en Fortran 7.7).

*Satellite* traduce y compila el contenido de *Q1* para *Earth* quien a su vez ejecuta los programas con los métodos numéricos iterativos seleccionados en *Q1*. Durante las iteraciones se muestran gráficas en la pantalla donde se puede apreciar si hay convergencia

en todas las ecuaciones de conservación que se están resolviendo. Por último, *Photon* despliega de manera gráfica los resultados obtenidos de los cálculos efectuados en *Earth*.

*QI* es un archivo de texto, su función es servir de interfase entre el software y el usuario. En éste archivo se define el problema a resolver, en otras palabras, aquí es donde se establecen las ecuaciones gobernantes, las condiciones de frontera, las condiciones iniciales, la geometría, la malla, las propiedades de los materiales, los parámetros numéricos y si son requeridos los modelos de turbulencia.

En el archivo *Ground.for* se introduce todo lo que no fue posible en *QI* como por ejemplo condiciones de frontera no lineales, propiedades de transporte, términos fuente y funciones complejas.

En el caso en que los dos archivos sean requeridos se debe utilizar un link llamado *Eardat* para ligar los dos archivos y poderlos compilar.

La solución se visualiza a través de dos archivos *Result* y *Phi*. El primero es un archivo de texto donde se guardan los resultados al final de una corrida en forma tabular y además muestra toda la información que tradujo *Satellite* para *Earth*. El archivo *Phi* contiene los resultados y los presenta de manera gráfica.

### 3.3 MÉTODO NUMÉRICO DE VOLUMEN DE CONTROL.

El método numérico que PHOENICS utiliza es el de volumen de control. En esta técnica el dominio de cálculo se discretiza en un número finito de pequeños volúmenes que a su vez tienen asociados nodos en el centro, de tal manera que hay un solo volumen de control rodeando cada nodo. La distancia entre los nodos puede ser uniforme o no uniforme dependiendo de las características físicas del problema. El tiempo también se discretiza en pequeños segmentos.

Una vez que el dominio se encuentra discretizado las ecuaciones se integran en cada nodo, el resultado de la integración es la transformación de un sistema de ecuaciones parciales a varios sistemas lineales de ecuaciones algebraicas de la forma:

$$a_p \psi_p = \sum a_{nb} \psi_{nb} + b \quad (1)$$

En donde  $a_p$  son coeficientes,  $\psi_p$  son las variables de transporte,  $b$  es un término independiente,  $nb$  = vecinos y  $p$  = nodo que se integra.

Estas ecuaciones pueden resolverse por técnicas numéricas iterativas. Cuando los sistemas lineales de ecuaciones son resueltos, la solución consiste en obtener los valores de las

variables dependientes en los nodos, es decir, en puntos discretos de las variables independientes.

Una de las características más interesantes que presenta éste método es que la solución resultante implica la conservación integral de la cantidad conservada dentro del volumen de control y por lo tanto en todo el dominio.

La ventaja principal de esta técnica es que todas las ecuaciones de conservación pueden escribirse de una manera similar en su forma, y por lo tanto la técnica de resolución puede ser la misma sin importar el fenómeno de transporte involucrado. Por lo tanto PHOENICS resuelve la siguiente ecuación general de balance:

$$\nabla \cdot \Gamma \nabla \phi - \nabla \cdot \rho \nabla \phi + S_\phi = \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \quad (2)$$

En donde el primer término representa el transporte difusivo de  $\phi$ , el segundo término es el transporte convectivo de  $\phi$ , el tercero representa un término fuente y la derivada con respecto al tiempo representa el término transitorio. En la tabla 8 se presentan los valores que toman las variables dependientes ( $\Gamma$ ,  $\phi$ ,  $S_\phi$ ) en función del fenómeno que esté ocurriendo.

| Variables | Continuidad | Navier-Stokes                                  | Conservación de energía | Conservación de especies |
|-----------|-------------|--|-------------------------|--------------------------|
| $\Gamma$  | 0           | $\mu$  | $\frac{K}{C_p}$         | $\tilde{D}_i \rho$       |
| $\phi$    | 1           | $V_i$  | H                       | $W_i$                    |
| $S_\phi$  | 0           | $-\frac{\partial \rho}{\partial i} + \rho g_i$ | $S_H$                   | $S_i$                    |

**Tabla 1.-** Significado de las variables en función del fenómeno de transporte que esté ocurriendo.

### 3.4 DESCRIPCIÓN DE LAS CORRIDAS.

Para lograr los objetivos planteados se generó un archivo Q1 el cual tiene el contenido del problema listo para realizar la simulación. Éste predice la fluidinámica y la turbulencia en un problema bifásico de una olla agitada con gas.

Se realizó una corrida para cada flujo de aire y con cada modelo de turbulencia mencionado en el capítulo 1 y 2. En total se discutirán 7 modelos señalados en la tabla 10.

| <b>Modelo</b> | <b>Autor</b>                     | <b>Clasificación</b> |
|---------------|----------------------------------|----------------------|
| k-ε           | Harlow y Nakayama (1969)         | Utiliza HVE          |
| Chen-Kim      | Chen y Kim (1987)                | Utiliza HVE          |
| RNG           | Yakhot y Orszag (1986)           | Utiliza HVE          |
| Lam-Bremhorst | Patel y col. (1984)              | Utiliza HVE          |
| MMK           | Murakami, Mochida y-kondo (1997) | Utiliza HVE          |
| KL            | Kato-Lauder (1993)               | Utiliza HVE          |
| Smagorinsky   | Smagorinsky (1963)               | Algebraico           |

**Tabla 2.-** Se muestran los modelos utilizados en este trabajo así como su autor, el año de su implementación y clasificación a la que pertenecen.

Los resultados fueron generados en el archivo *Result* a través del cual se importaron los valores numéricos de velocidad y de energía a *Excel*, en el cual se realizaron todas las gráficas que se presentan en el capítulo siguiente.

Los campos de energía y de velocidad que se obtuvieron en *Photon* fueron normalizados en escala. Además para la velocidad se utilizó el mismo vector de referencia en todas las corridas. Una vez que los campos estuvieron uniformes se importaron a Adobe para poder ser presentados.

### 3.5 VALIDACIÓN

La validación se presenta en la sección de resultados donde se comparan las predicciones del modelo con los distintos modelos de turbulencia y los resultados experimentales reportados por Grevet<sup>(¡Error! Marcador no definido.)</sup>.

## CAPITULO 4

## SOLUCIÓN.

### 4.1 RESULTADOS.

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación matemática de una olla agitada con gas. Se podrán observar los resultados de los campos de velocidades y de energía turbulenta predichos por los modelos de turbulencia k- $\epsilon$ , Chen-Kim, RNG, Lam-Bremhorst, MMK, KL y Smagorinsky. Así mismo en cada gráfica se presenta la validación con los resultados experimentales de Grevet<sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>.

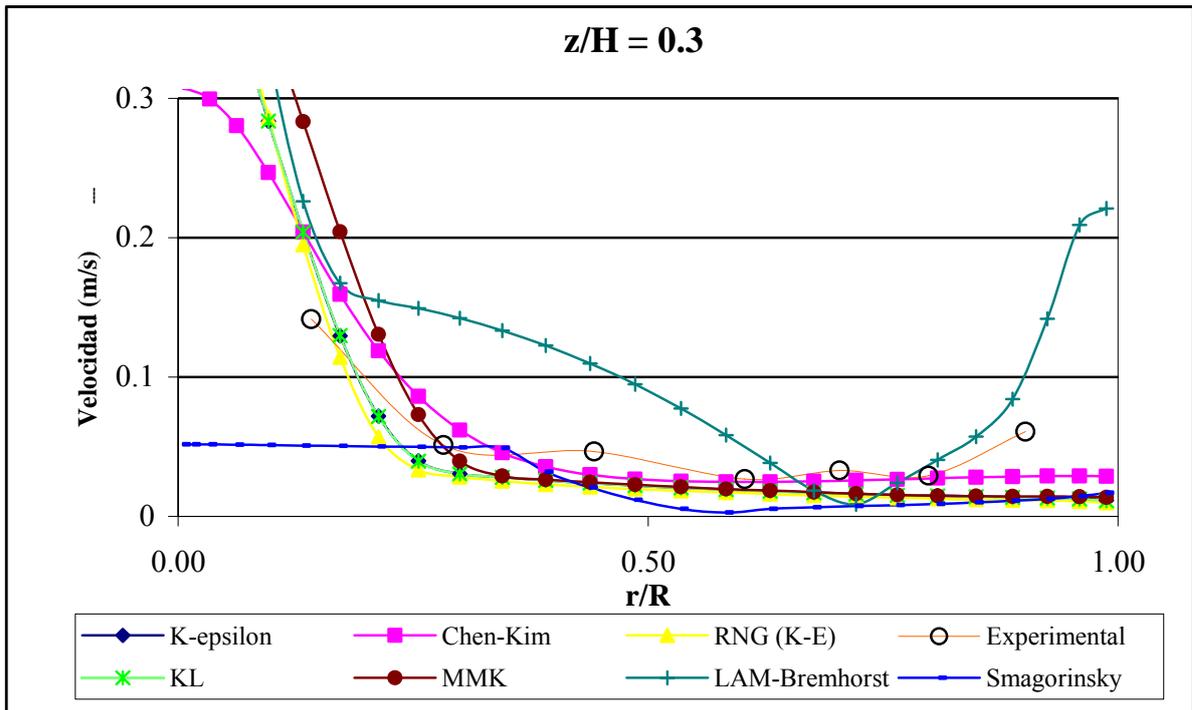
#### 4.1.1 CAMPOS DE VELOCIDAD.

- **Flujo de entrada 13 L/min.**

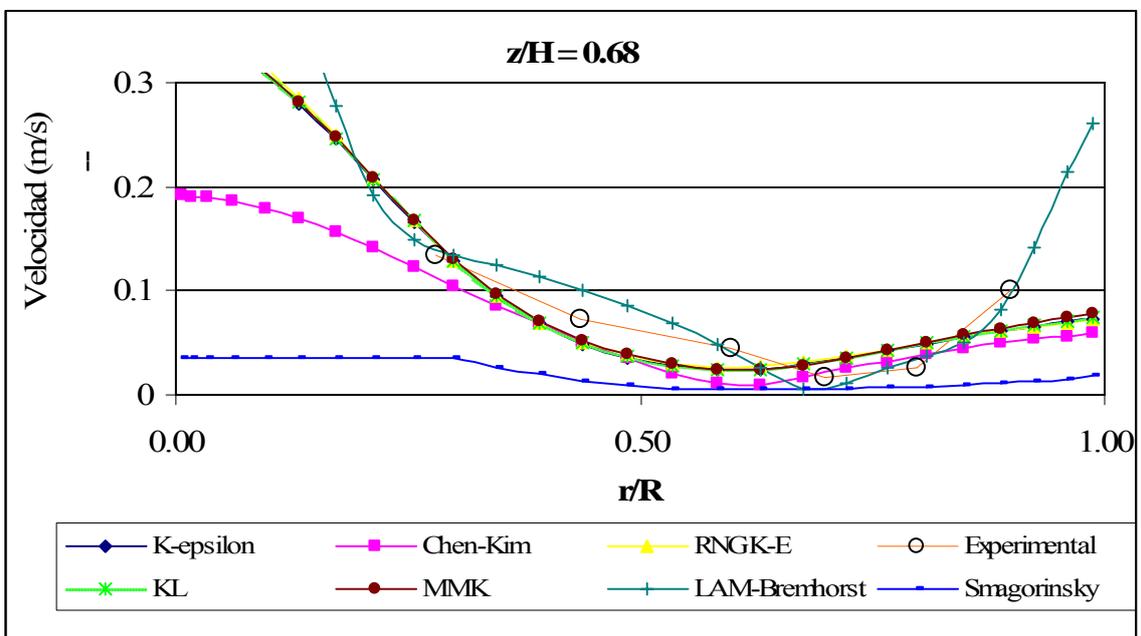
En las *Figuras 9, 10 y 11* se presentan comparaciones del perfil radial de la magnitud de la velocidad del líquido predicha por los 7 modelos de turbulencia y las mediciones experimentales reportadas por Grevet<sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>. Estos perfiles se encuentran a una altura  $z/H=0.3, 0.68$  y  $0.98$  con un flujo de 13 L/min de aire. En dichas figuras se aprecia que la mayoría de los modelos de turbulencia siguen una tendencia similar y cercana a los resultados experimentales. La magnitud de la velocidad es alta en el centro de la olla en donde está la pluma de gas que está arrastrando al líquido, luego cae conforme crece el radio llegando a un mínimo y aproximándose a la pared crece la velocidad, lo cual indica la naturaleza recirculatoria del patrón de flujo. Cualitativamente destaca la buena aproximación realizada por el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst. En contraste, se nota la mala aproximación lograda por el modelo Smagorinsky; mientras que el resto de los modelos tienen una tendencia similar. Sin embargo los modelos KL, MMK, RN, K- $\epsilon$  siguen una tendencia similar y cercana a los resultados experimentales. En  $z/H = 0.68$  el modelo Chen-Kim tiene una desviación en su tendencia en comparación con los modelos anteriores.

En la *Figura 11* se puede identificar que, a diferencia de las demás alturas en  $z/H = 0.98$ , es decir conforme nos acercamos a la superficie el alcance de los modelos disminuye, esto debido a la simplificación de la superficie libre superficie libre. Incluso podemos observar que los modelos que aproximaban muy bien las magnitud de velocidad en el fondo del reactor ahora tienen una gran diferencia con respecto a los resultados experimentales. Como se comentó, cualitativamente, el modelo Lam-Bremhorst tiene la mejor aproximación y es aún mejor en esta altura debido a los términos de generación que utiliza este modelo.

Se puede notar desde este punto que los modelos algebraicos, como el modelo Smagorinsky que se utilizó, parece no tener el alcance para modelar la turbulencia de una olla agitada con gas con un flujo de 13 L/min.



**Figura 1.-** Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



**Figura 2.-** Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.68$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

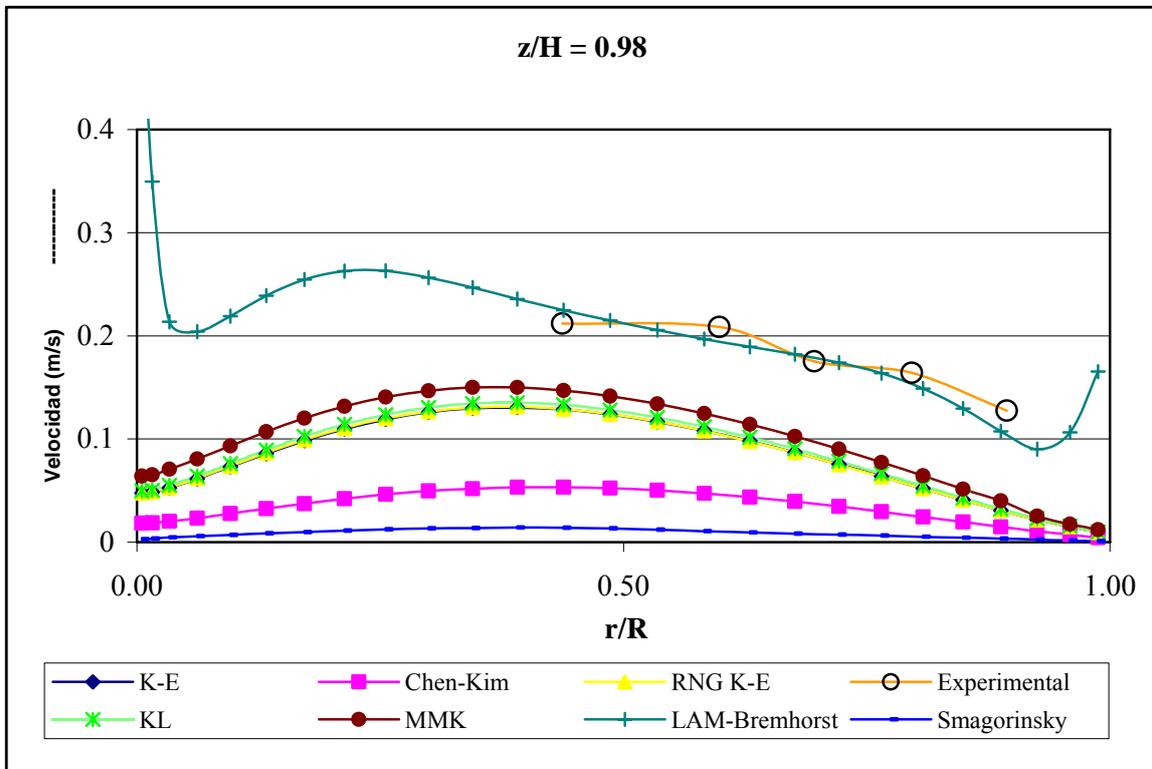
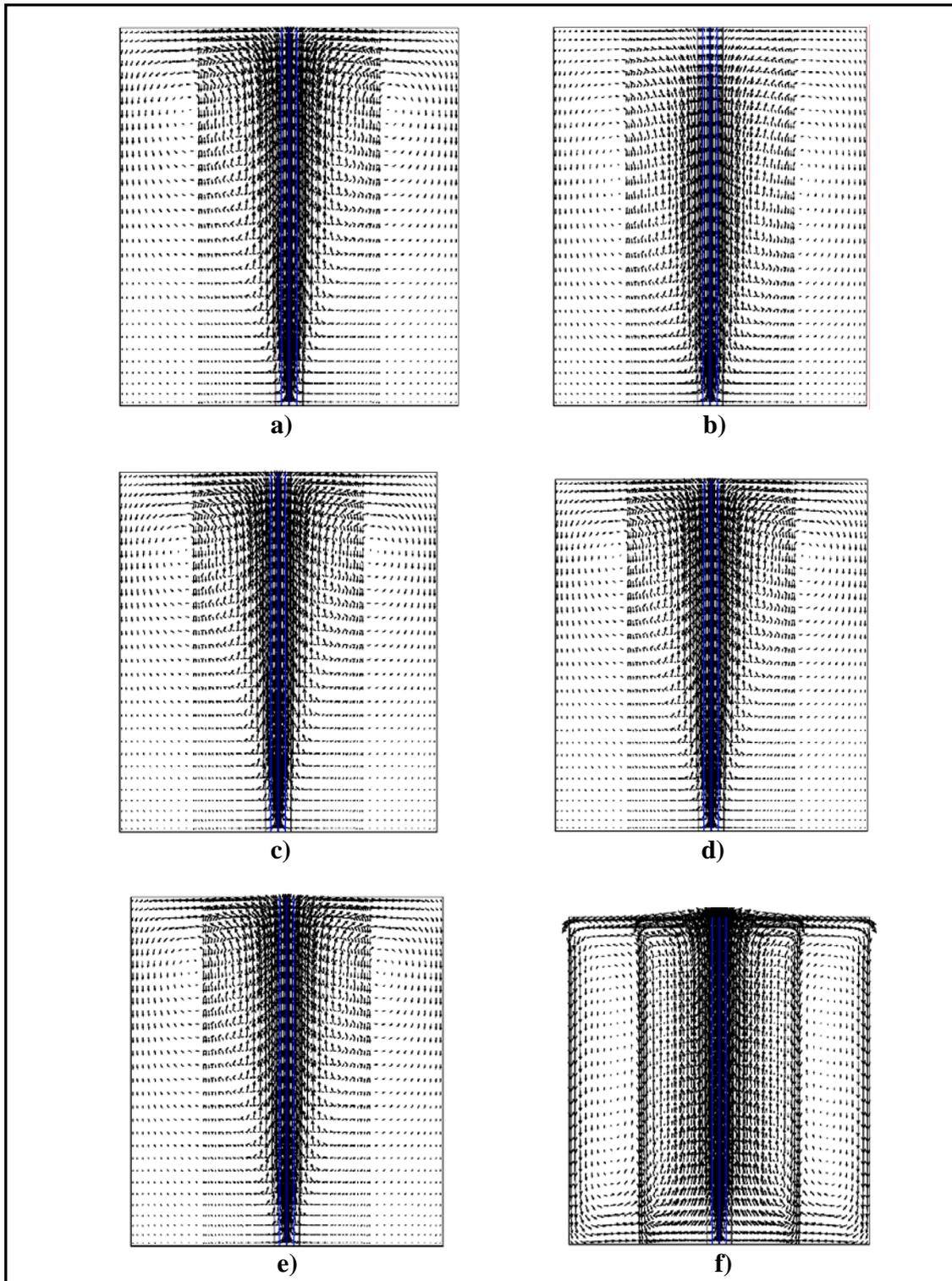
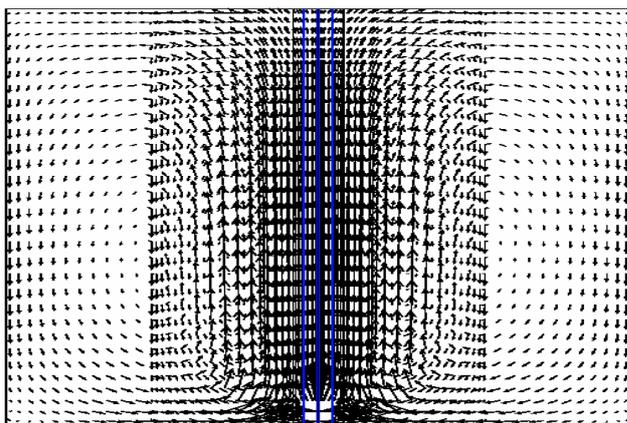


Figura 3.- Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H=0.9$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



**Figura 4.-** Campos de velocidad predichos con los 7 modelos de turbulencia con un flujo de 13 L/min. Se presentan con un vector de referencia de 0.5 m/s. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen- kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL, e) Modelo MMK y f) Modelo Lam-Bremhorst .

En la *Figura 12* se presentan los diferentes campos de velocidad predichos por 6 modelos de turbulencia utilizados a un flujo de 13 L/min y todos con un vector de referencia de 0.5 m/s. Se puede apreciar en todos, prácticamente la misma tendencia que consiste en un líquido moviéndose verticalmente en la zona de la pluma de gas y con dos toroides de recirculación así como zonas muertas en el fondo. Sin embargo, resalta la diferencia en la zona spout por el modelo Lam-Bremhorst a causa de la sobrestimación de la turbulencia así mismo en la parte baja no presenta las zonas muertas como en los demás casos.



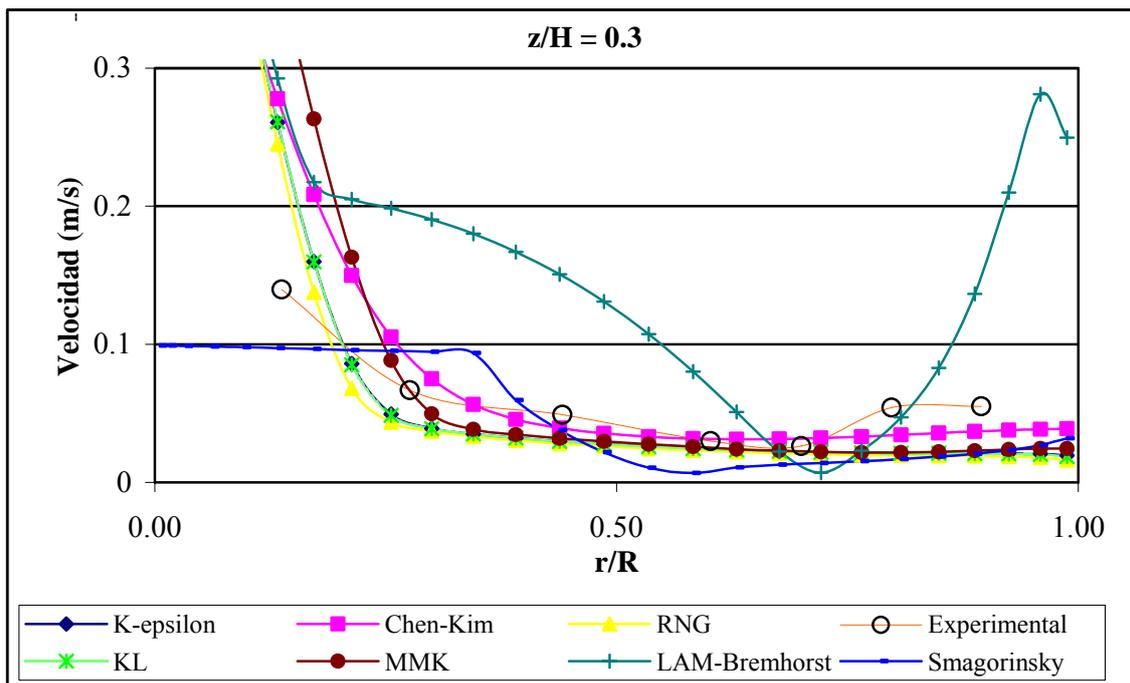
**Figura 5.-** Campos de velocidad predichos el modelo algebraico de turbulencia Smagorinsky, con un flujo de entrada de 13 L/min y con un vector de referencia de 0.0946 m/s.

En la *Figura 13* se loran apreciar, por separado, el campo de velocidades para el modelo Smagorinsky. Se presenta por separado este perfil porque el vector de referencia que se utilizó fue de 0.0946 m/s con el fin de poder visualizar mejor la interacción entre el líquido y la pluma de gas. Casi no se logran distinguir los toroides de recirculación, aunque las zonas muertas son muy visibles.

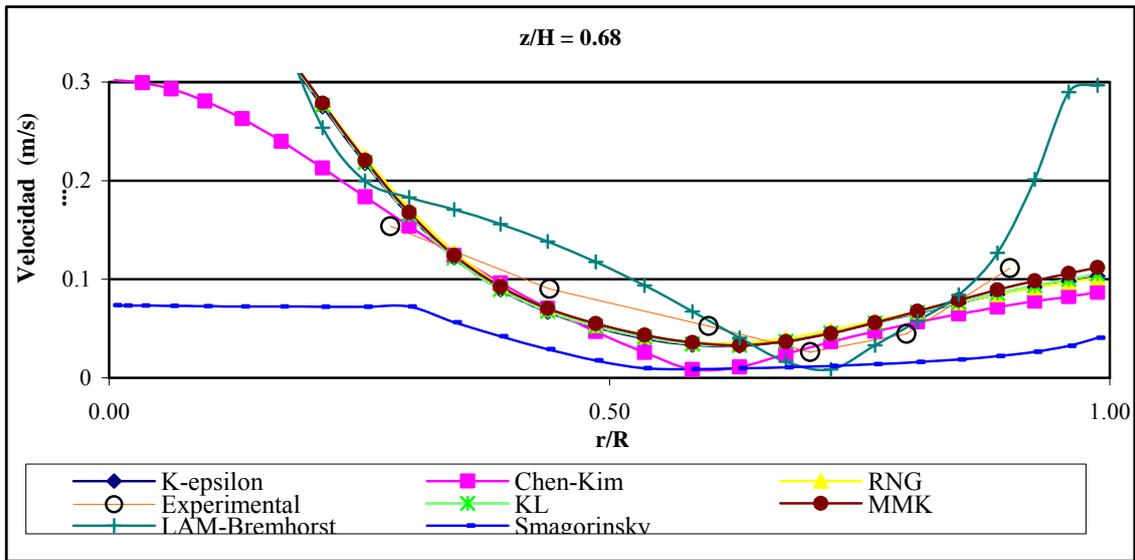
- **Flujo de entrada 26 L/min.**

En las *Figuras 14,15 y 16* se presenta una comparación del perfil radial de la magnitud de la velocidad del líquido predicha por los 7 modelos de turbulencia y las mediciones experimentales reportadas por Grevet<sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>. Estos perfiles se encuentran a una altura  $z/H=0.3, 0.68$  y  $0.98$  pero con un flujo mayor de 26 L/min de aire. Se observa el mismo comportamiento en la mayoría de los modelos, los cuales se encuentran aproximados al experimental; incluso el modelo Smagorinsky, que con un flujo de 13 era muy contrastante, parece estar aproximado en buen medida. El modelo Lam-Bremhorst que se había aproximado muy bien con flujos bajos ahora presenta un perfil alejado de los datos experimentales. En la *Figura 15* se observa el mismo comportamiento

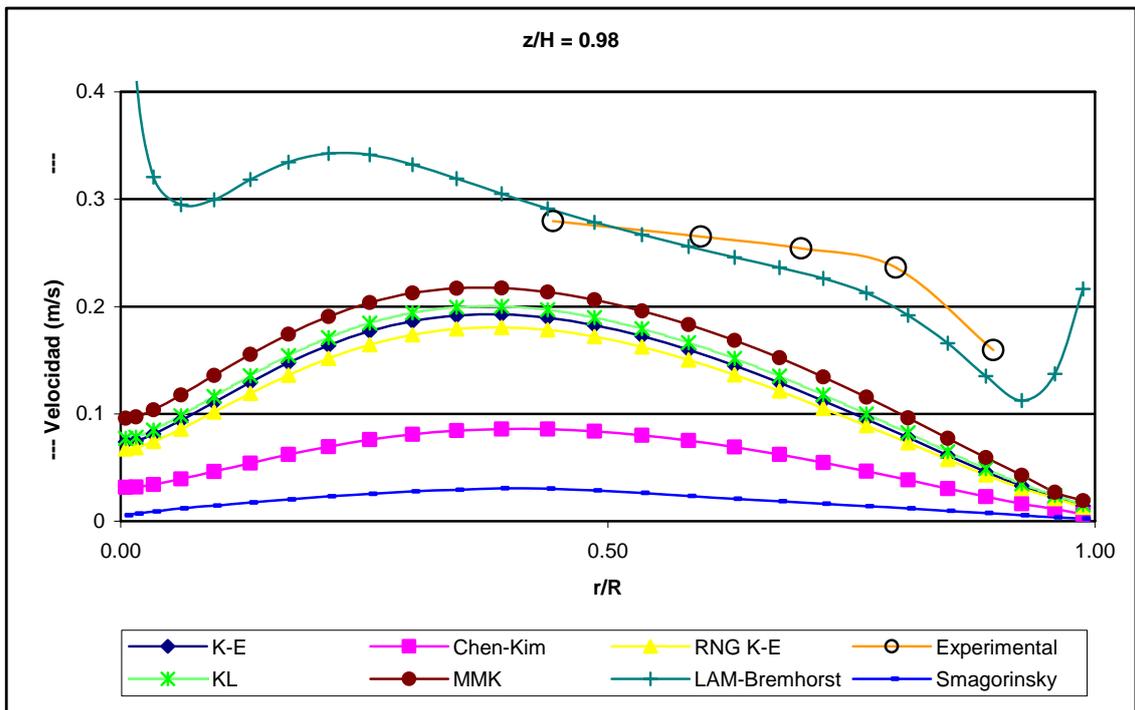
en la mayoría de los modelos. El menos aproximado continua siendo el modelo Smagorinsky y el modelo Lam-Bremhorst tiene la misma tendencia que los resultados experimentales. Finalmente, en la *Figura 16* se puede apreciar el mismo comportamiento en la mayoría de los modelos, aunque no la misma aproximación. Al igual que en el flujo de 13L/min, el menos aproximado continua siendo el modelo Smagorinsky, seguido por el modelo Chen-Kim. De nuevo el modelo Lam-Bremhorst presenta la mejor aproximación.



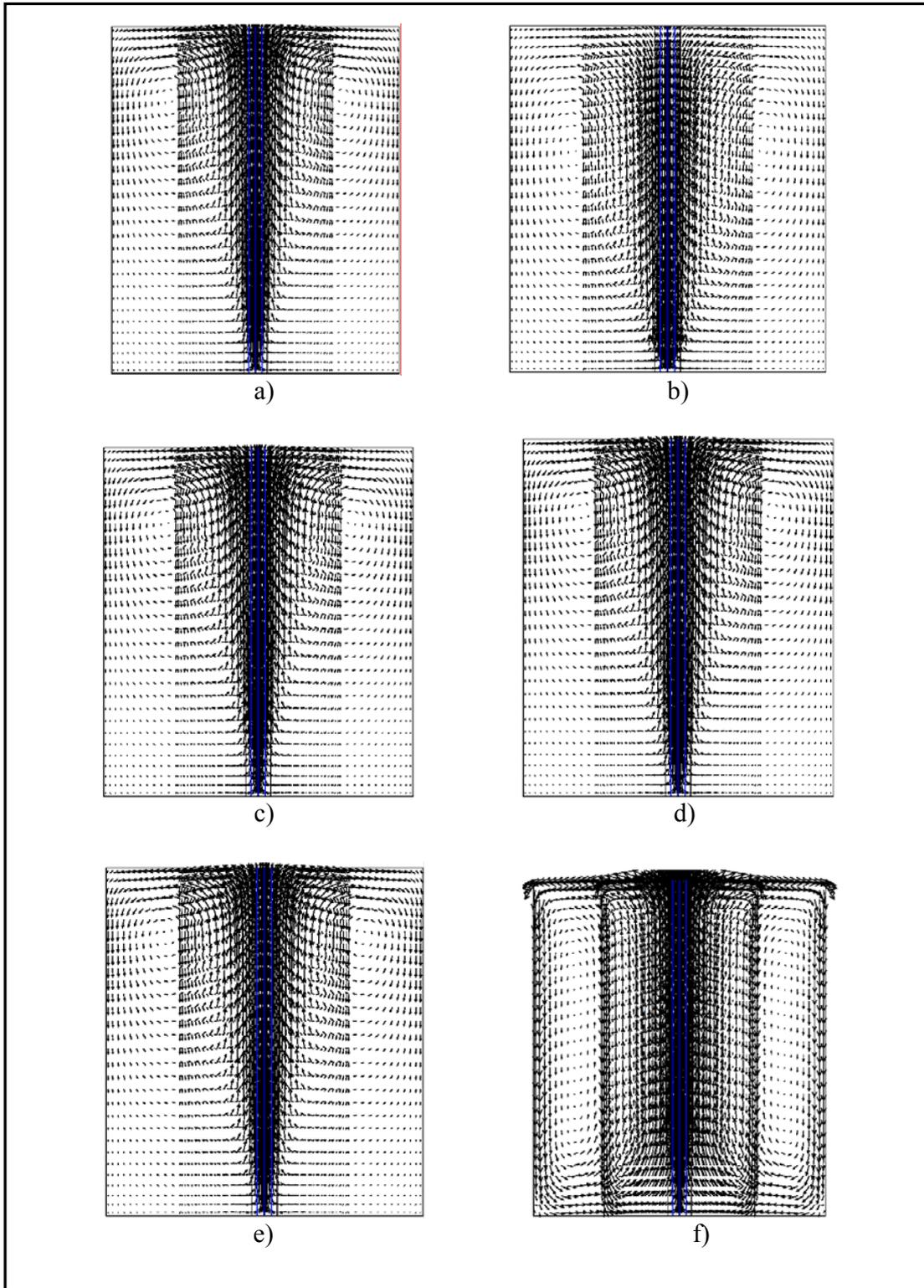
**Figura 6.-** Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales <sup>(Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>



**Figura 7.-** Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.68$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

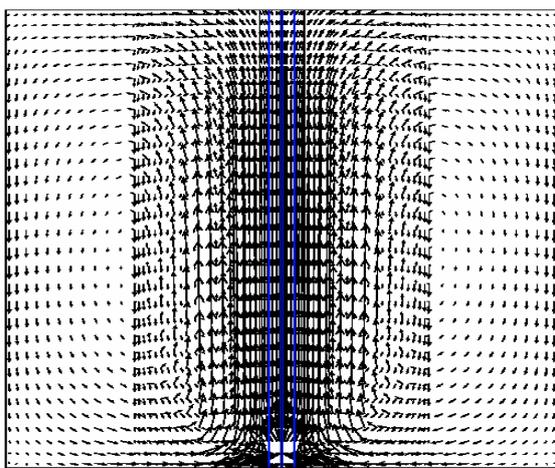


**Figura 8.-** Magnitud de la velocidad contra la posición radial a  $z/H = 0.9$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales. Grevet (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



**Figura 9.-** Campos de velocidad predichos con los 7 modelos de turbulencia con un flujo de 26 L/min. Se presentan con un vector de referencia de 0.5 m/s. a) Modelo k- $\epsilon$ , b) Modelo Chen- kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL, e) Modelo MMK y f) Modelo Lam-Bremhorst .

En la *Figura 17* se presentan los diferentes campos de velocidad predichos por 6 modelos de turbulencia utilizados a un flujo de 26 L/min y todos con un vector de referencia de 0.5 m/s. En comparación con el flujo de 13 L/min la interacción que existe entre el líquido y la pluma se nota mejor definida para todos los casos. De nueva cuenta el modelo Lam-Bremhorst sobrestima la turbulencia en la zona spout y la agitación eliminando las zonas muertas del fondo.



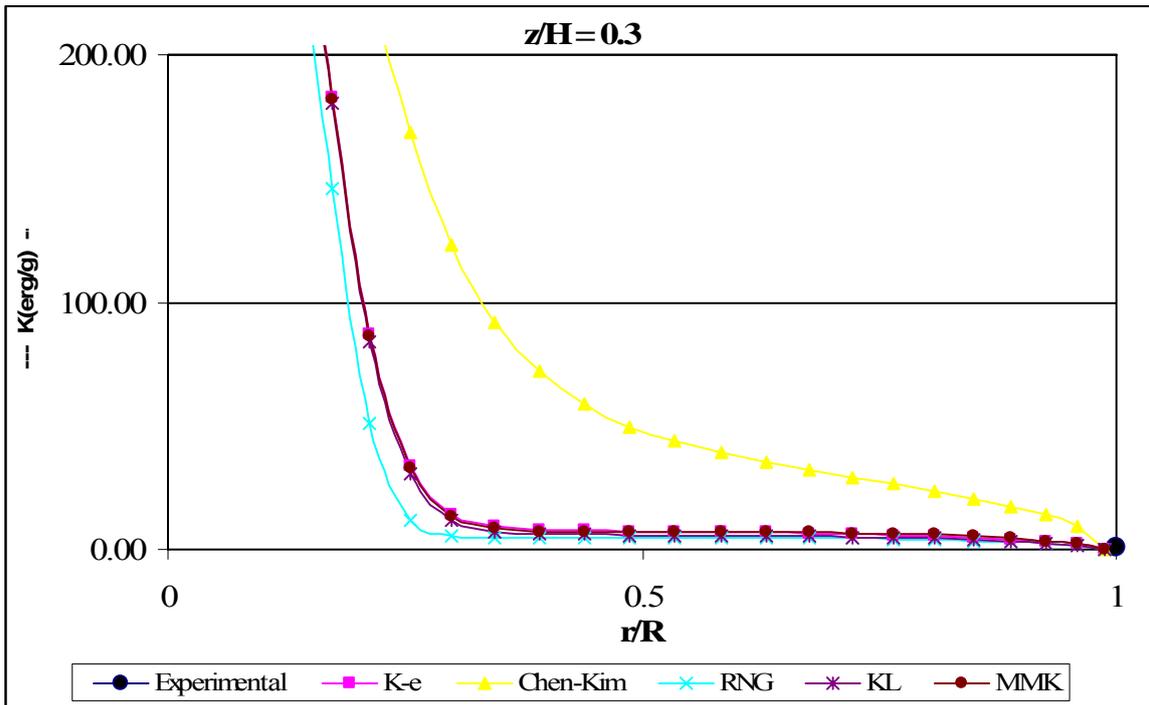
**Figura 10.-** Campos de velocidad predichos el modelo algebraico de turbulencia Smagorinsky, con un flujo de entrada de 26 L/min y con un vector de referencia de 0.0198 m/s.

En la *Figura 18* se aprecia, por separado, el campo de velocidades para el modelo Smagorinsky. Se presenta de ésta manera porque el vector de referencia que se utilizó fue de 0.01986 m/s con el fin de poder visualizar mejor la interacción entre el líquido y la pluma de gas. Se logran apreciar ligeramente los patrones de recirculación, así como la pluma de gas y la interacción del mismo con el agua a la entrada.

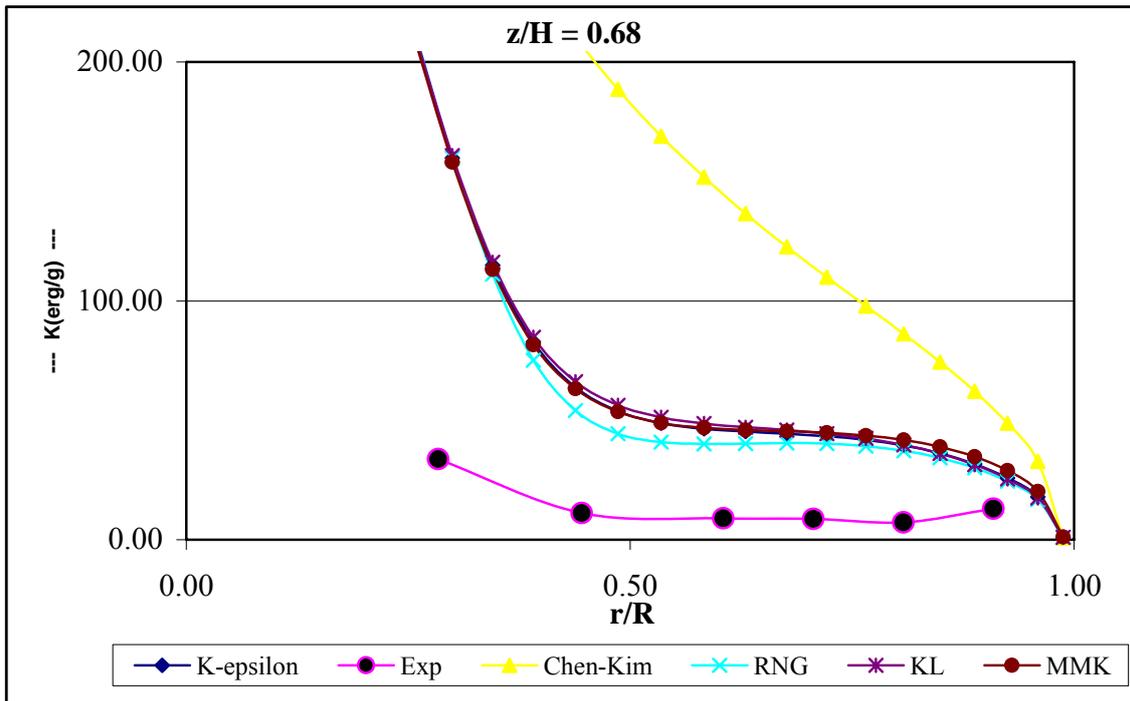
#### 4.1.2 CAMPOS DE ENERGÍA TURBULENTA.

- **Flujo de entrada 13 L/min.**

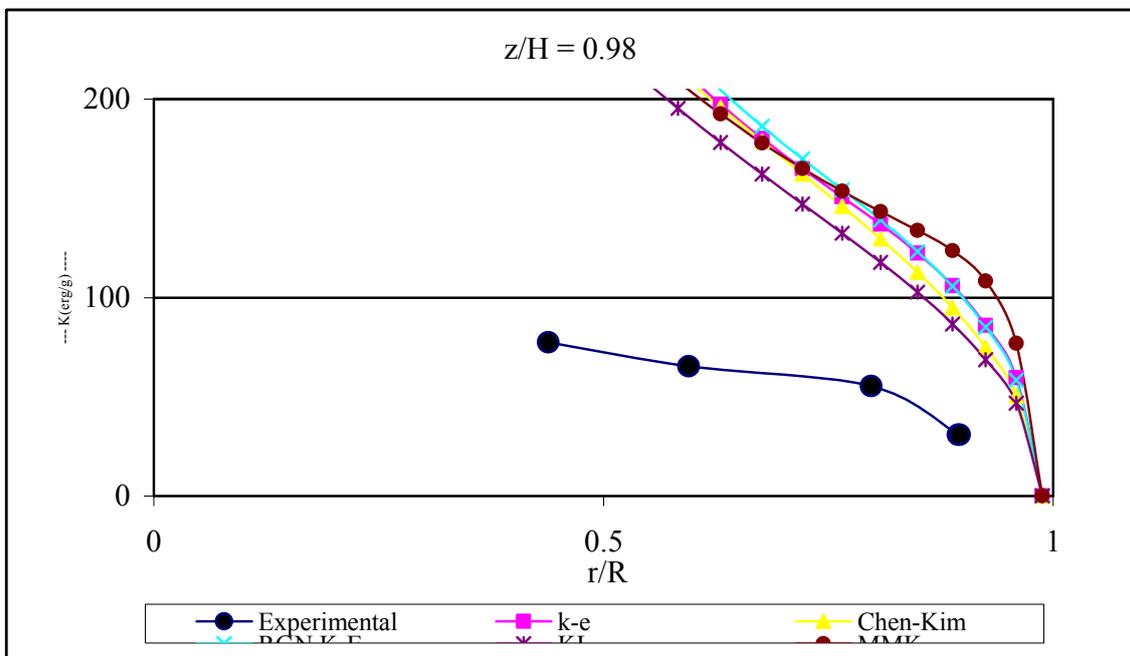
En las *Figuras 19, 20 y 21* se presenta una comparación del perfil radial de la energía cinética turbulenta en el líquido predicha por los 5 modelos de turbulencia. Estos perfiles se encuentran a una altura  $z/H = 0.3, 0.68$  y  $0.98$  con un flujo de 13 L/min de aire. Para el caso de  $Z/H = 0.3$  no se cuenta con una validación experimental (no se reportaron los resultados experimentales), por lo que el análisis de las tendencias se realizará entre estos mismos. En el centro sobre la pluma de gas se observan valores altos de  $k$ , que bajan conforme aumenta el radio hasta llegar a la pared donde  $k$  vale cero. Se observa el mismo comportamiento en la mayoría de los modelos, sin embargo el modelo Chen-Kim difiere en su aproximación en comparación con el resto de los modelos prediciendo mayores energía cinética turbulenta. En la *Figura 20* se observa el mismo comportamiento en la mayoría de los modelos. Sin embargo todos los modelos sobreestiman la turbulencia respecto a las mediciones experimentales. De la misma manera que en la *Figura 19*, el modelo Chen-Kim es el que más diferencia presenta en comparación con los valores experimentales. En la *Figura 21* se observa el mismo comportamiento en la mayoría de los modelos, incluso el modelo Chen-Kim que anteriormente mostraba gran variación con respecto a los demás.



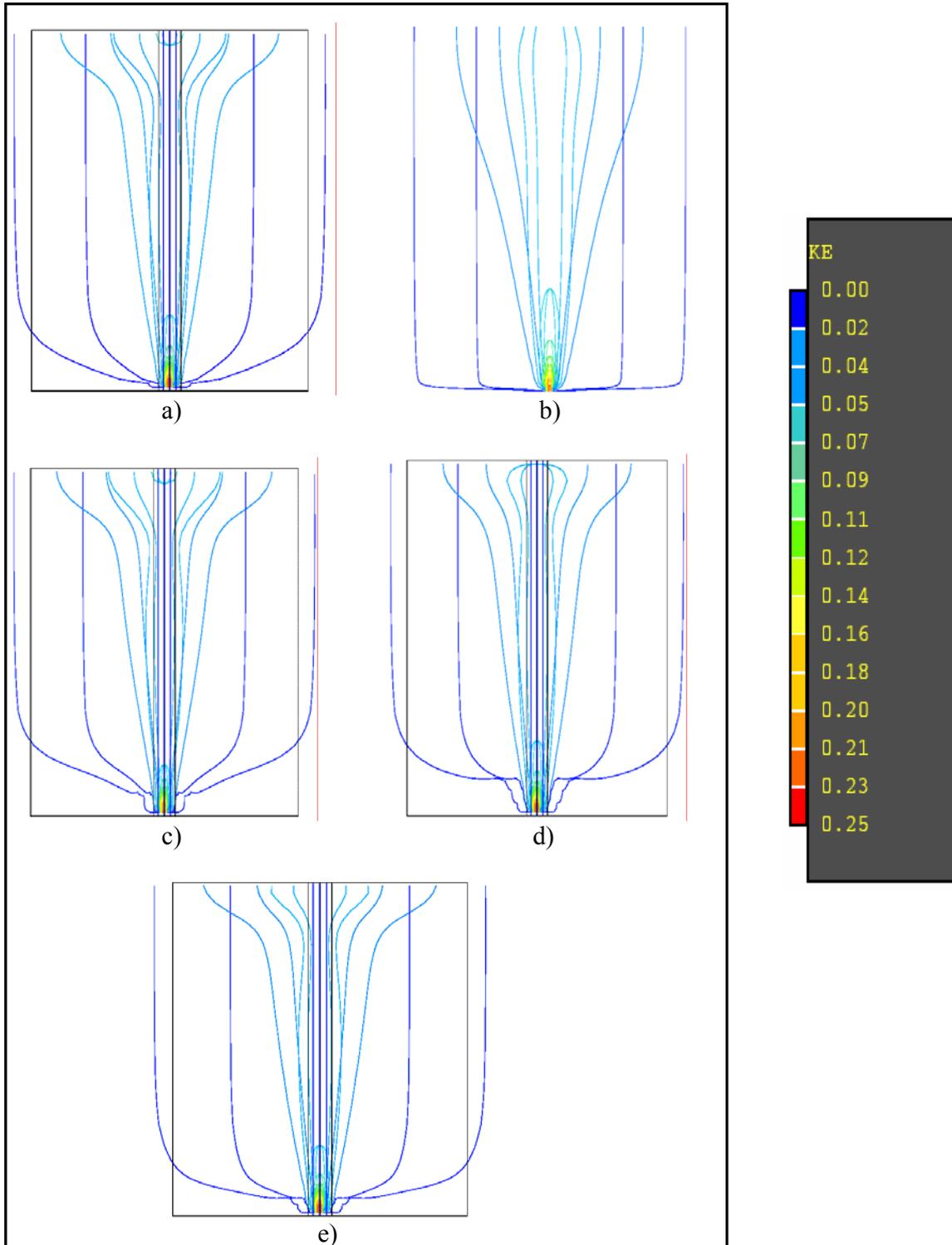
**Figura 11.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia.



**Figura 12.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H=0.68$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

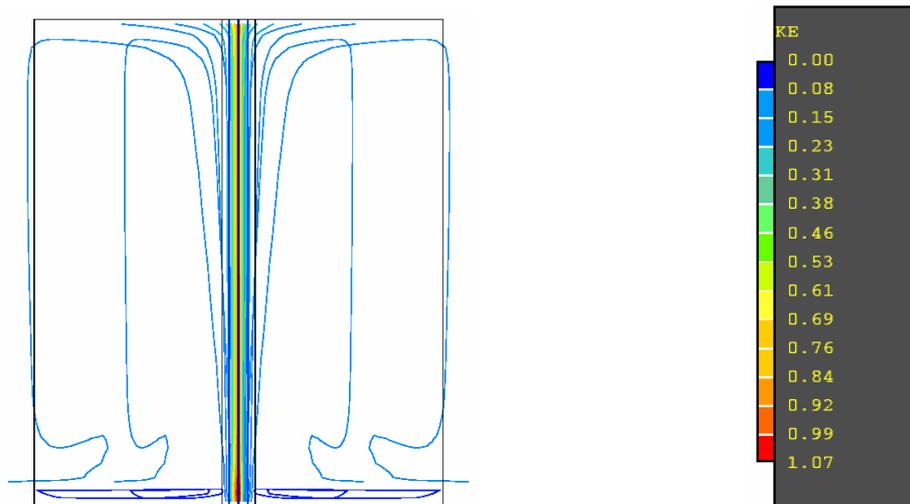


**Figura 13.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H=0.98$  con flujo de 13 L/min. Predicciones con los 7 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



**Figura 14.-**Campos de energía cinética turbulenta predichos con los 5 modelos de turbulencia con un flujo de 13 L/min. La escala se presenta al lado derecho. a) Modelo k-ε, b) Modelo Chen-kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL y e) Modelo MMK.

En la *Figura 22* se muestran los campos de Campos de energía cinética turbulenta predichos con 5 modelos de turbulencia con un flujo de 13 L/min. A la derecha se muestra la escala utilizada en J/kg para todos los casos. Aunque el perfil de energía en todos los modelos es parecido la energía turbulenta generada en la entrada difiere para cada modelo. Básicamente se presenta una zona de alta turbulencia en la pluma de gas, en especial en la entrada de gas y zonas de baja turbulencia en el fondo y en la vecindad de las paredes.



**Figura 15.-** Campos de energía cinética turbulenta predichos el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con Un flujo de 13 L/min. La escala se presenta al lado derecho.

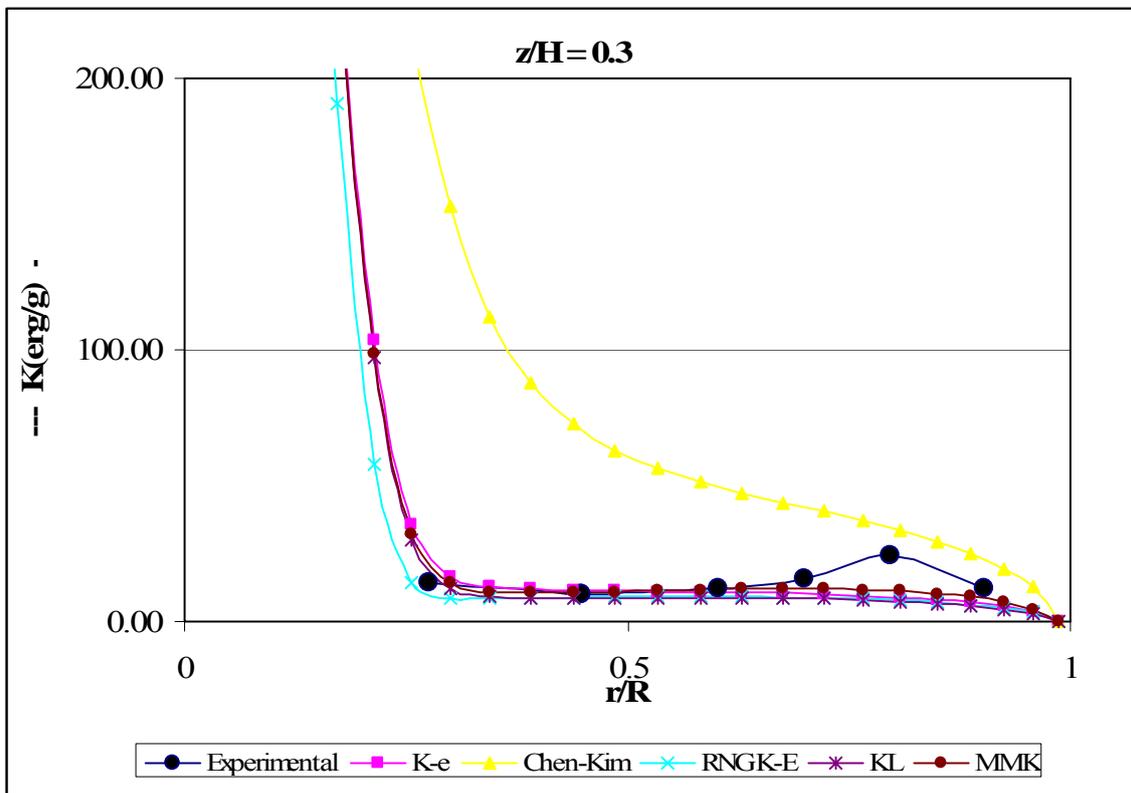
En la *Figura 23* se muestran los campos de Campos de energía cinética turbulenta predichos con el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con un flujo de 13 L/min. Este campo de se muestra por separado debido a que la cantidad de energía cinética turbulenta que genera éste modelo es mucho mayor que en los modelos anteriores y la escala usada no alcanza. El perfil de distribución de energía difiere bastante con los perfiles anteriores, se aprecia que existe una gran cantidad de energía en el interior de la pluma y que se mantiene constante a lo largo de el eje z, sin embargo, en las paredes también se presentan las energías mas bajas.

- **Flujo de entrada 26 L/min.**

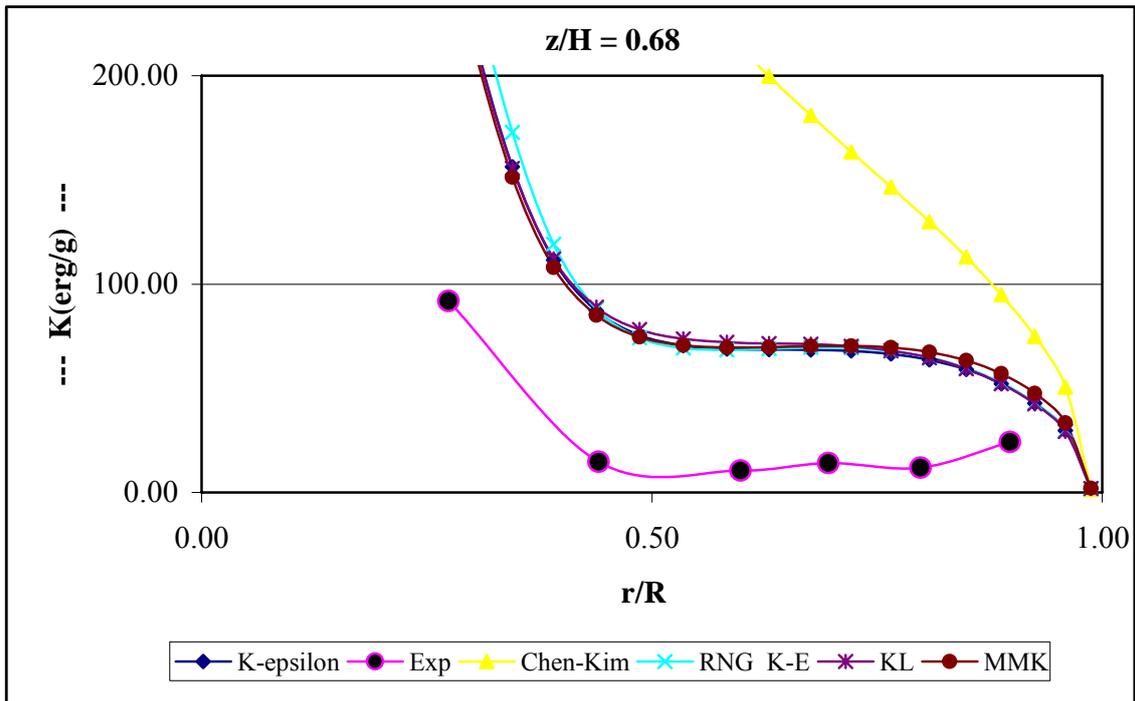
En las *Figuras 24, 25 y 26* se presentan una comparación del perfil radial de la energía cinética turbulenta en el líquido predicha por 5 modelos de turbulencia con los resultados experimentales de Grevet<sup>(¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.)</sup>. Estos perfiles se encuentran a una altura  $z/H = 0.3, 0.68$  y  $0.98$  con un flujo de 26 L/min de aire. Se observa una buena aproximación de todos los modelos con respecto al experimental, sin embargo el modelo Chen-Kim de nuevo sobrestima los valores de k. En la *Figura 25* se puede apreciar que las

aproximaciones predichas por los 5 modelos se alejan de la medición real. Aún así la tendencia de los modelos K- $\epsilon$ , RNG, KL y MMK se mantiene similar. De nuevo el modelo Chen-Kim es el que mas se aleja en tendencia y aproximación. En la *Figura 26* es evidente apreciar que en esta posición del reactor los modelos ya no se aproximan a los resultados experimentales con gran apego, sin embargo la tendencia que presentan los 5 modelos es similar entre ellos mismos y con los valores experimentales. La lejana aproximación de los modelos de turbulencia en esta posición está asociada con la suposición realizada de superficie libre.

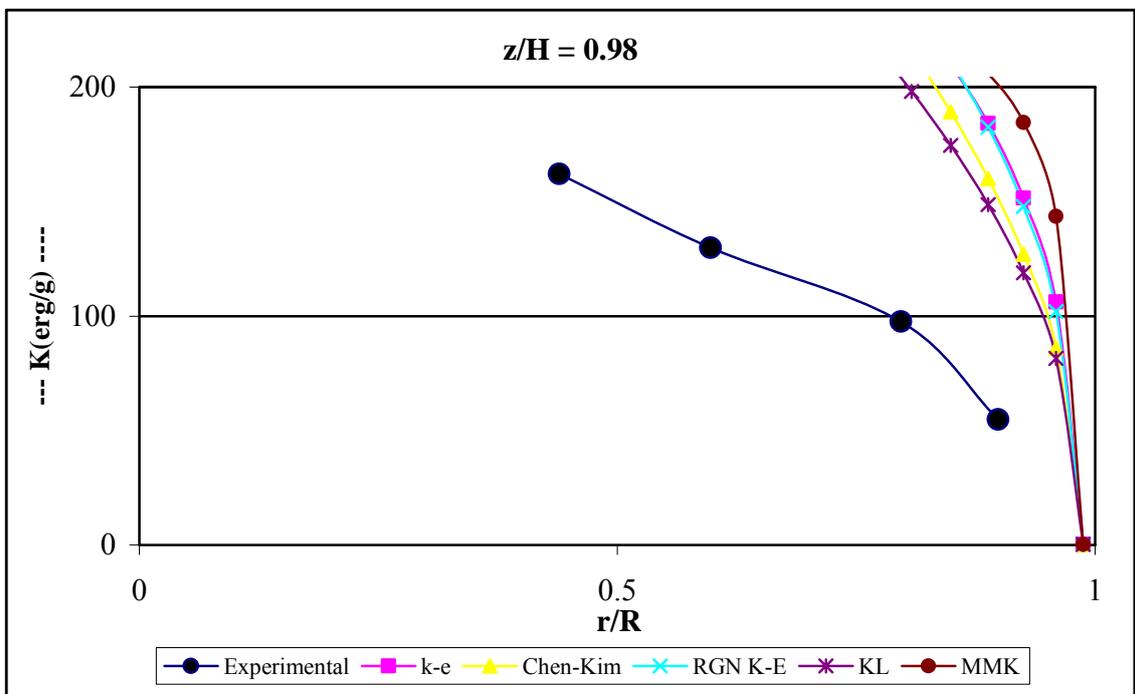
A través del modelo Lam-Bremhorst (el cual aproximó muy bien la velocidad en la olla) se calcularon los campos de energía turbulenta; sin embargo debido a la gran sobreestimación que éste modelo presentó, los resultados se encontraron fuera de escala y por lo tanto no aparecen en las figuras.



**Figura 16.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H = 0.3$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 5 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)

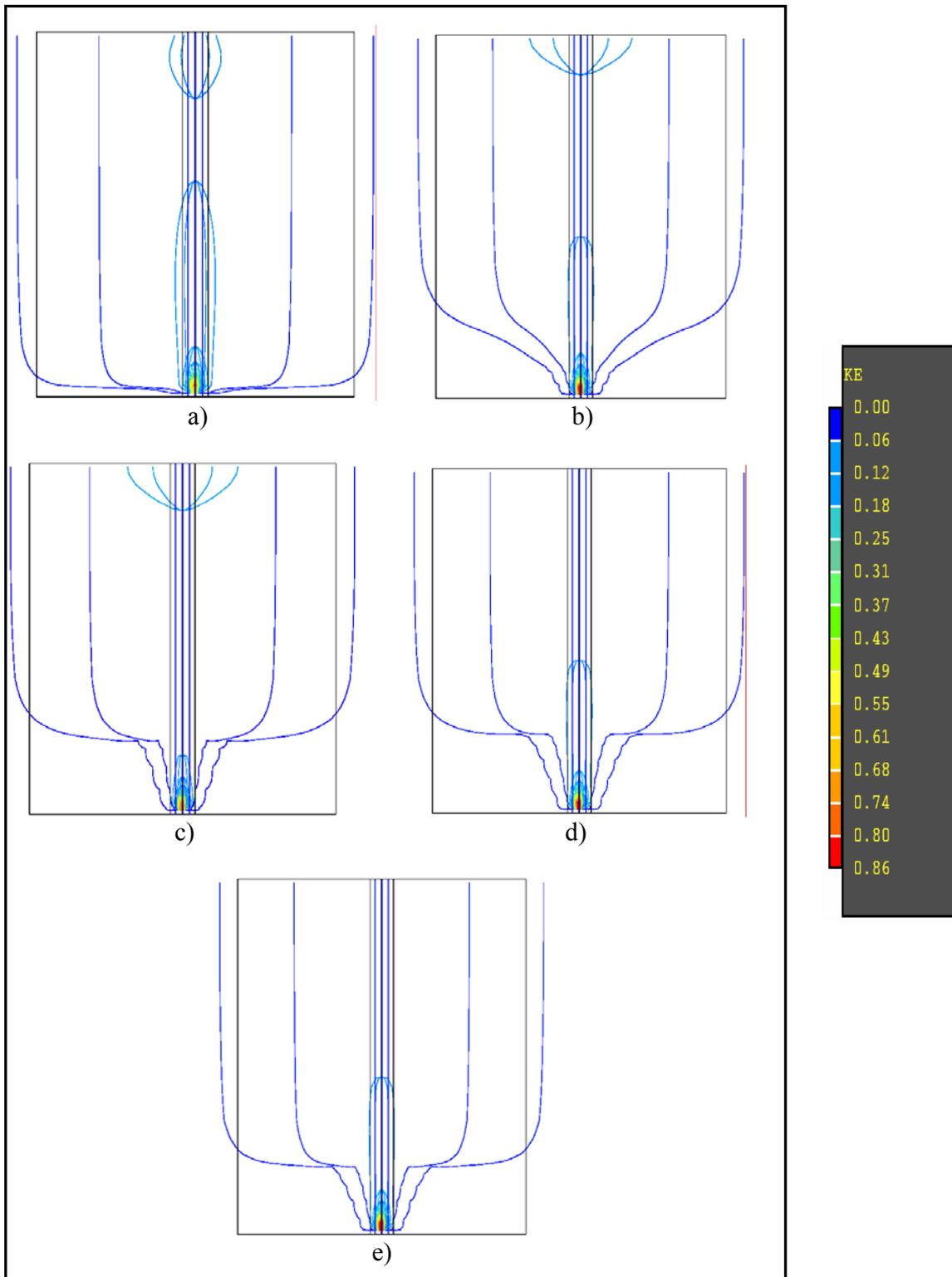


**Figura 17.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H=0.68$  con flujo de 26 L/min. Predicciones con los 5 modelos de turbulencia y resultados experimentales (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



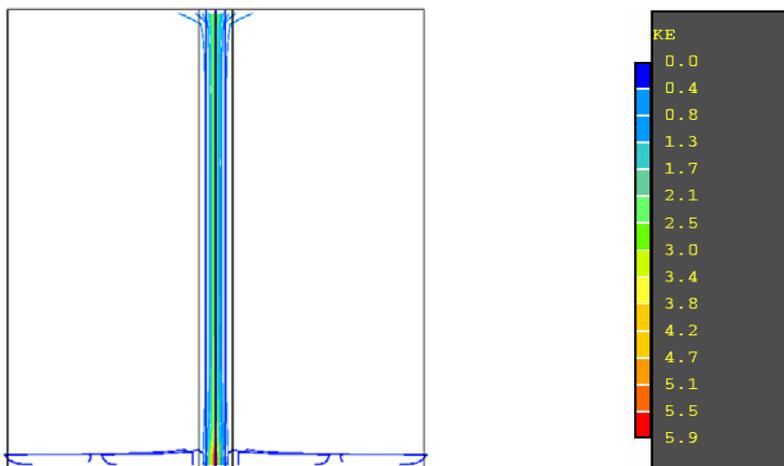
**Figura 18.-** Energía cinética turbulenta contra la posición radial a  $z/H=0.98$  con flujo de 26 L/min.

Predicciones con los 5 modelos de turbulencia y resultados experimentales. Grevet (Error! No se encuentra el origen de la referencia.)



**Figura 19.-** Campos de energía cinética turbulenta predichos con los 5 modelos de turbulencia con un flujo de 26 L/min. La escala se presenta al lado derecho. a) Modelo k-ε, b) Modelo Chen-kim., c) Modelo RNG, d) Modelo KL y e) Modelo MMK.

En la *Figura 27* se muestran los campos de Campos de energía cinética turbulenta predichos con 5 modelos de turbulencia con un flujo de 26 L/min. A la derecha se muestra la escala utilizada en J/kg para todos los casos. El perfil de energía en casi todos los modelos es parecido (Máximo en la entrada y mínimo en las paredes), no obstante el modelo k-ε mantiene el perfil que se obtuvo con un flujo de 13L/min. En esta figura es apreciable que la máxima energía turbulenta se concentra en la entrada.



**Figura 20.-** Campos de energía cinética turbulenta predichos el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con un flujo de 26 L/min. La escala se presenta al lado derecho.

En la *Figura 28* se muestran los campos de Campos de energía cinética turbulenta predichos con el modelo de turbulencia Lam-Bremhorst con un flujo de 26 L/min. Este campo se muestra por separado debido a que la cantidad de energía cinética turbulenta que genera éste modelo es mucho mayor que en los modelos anteriores. El perfil de distribución de energía difiere bastante con los perfiles anteriores, sin embargo cabe resaltar que en comparación con el mismo modelo pero con un flujo de entrada de 13 L/min la máxima energía se encuentra solamente en la entrada y no se presenta a lo largo del eje z.

## 4.2 ANÁLISIS DE RESULTADOS.

### ➤ COMPARACIÓN CUALITATIVA DE LOS MODELO DE TURBULENCIA EN LOS CAMPOS DE VELOCIDAD.

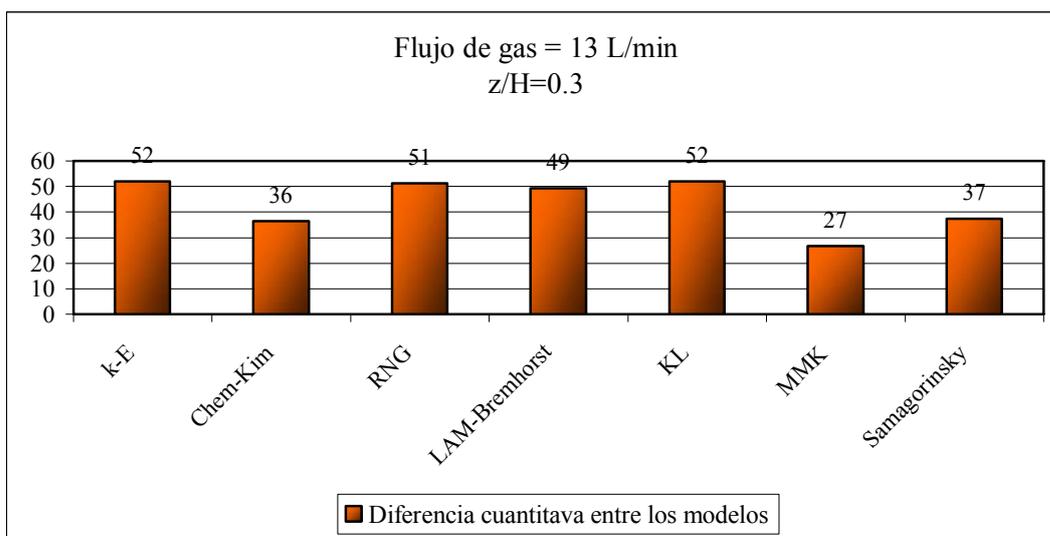
En general se aprecia una buena predicción cualitativa de las velocidades por la mayoría de modelos, pudiendo reproducir las tendencias en los patrones de flujo recirculatorios medidos experimentalmente. Cuantitativamente el modelo de Lam-Bremhorst es el que mejor se ajusta a las mediciones experimentales. En cuanto a las energías turbulentas también se lograron buenas representaciones cualitativas generando la tendencia experimental, la cual establece una zona turbulenta que se encuentra en la pluma y zonas poco turbulentas cerca de las paredes de la olla. Existe una sobreestimación generalizada de la energía cinética turbulenta por los modelos empleados comparada con los datos medidos experimentalmente y que se magnifican cerca de la superficie libre. Esta sobrestimación cerca de la superficie libre se debe sin duda a la suposición empleada para una superficie libre plana, la cual en realidad es flexible y se deforma por la acción del flujo que mitiga la turbulencia.

Como se logró apreciar en la sección de resultados, las gráficas de velocidad y energía son insuficientes para poder concluir cual es el mejor modelo de turbulencia; ya que en algunos casos la mejor aproximación en los campos de velocidad es la peor en los de energía. Además se tiene la desventaja de no conocerse cuantitativamente la diferencia que existe entre los modelos utilizados y los resultados experimentales. Teniendo en cuenta que tanto la velocidad y la energía son parámetros de vital importancia para cumplir los objetivos de la refinación secundaria en ollas agitadas con gas (agitación y mezclado en la olla), el modelo que se proponga como el mejor debe tener buenas aproximaciones tanto en velocidad como en energía.

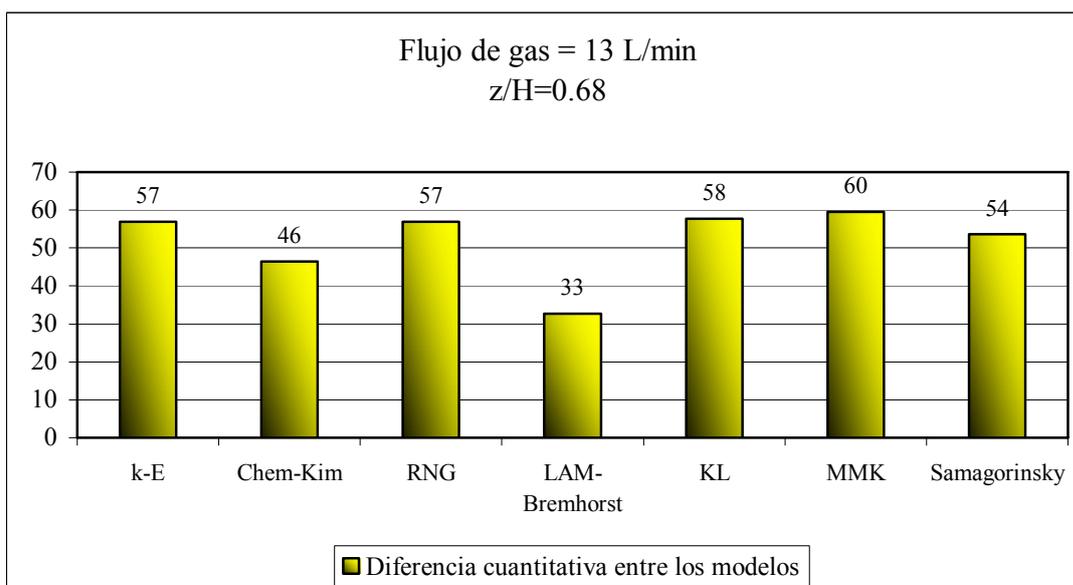
Para poder conocer con certeza que modelo se desempeñó mejor de acuerdo a estas dos características (predicción de velocidades y turbulencia), se calculó el error entre los valores experimentales y los valores resultantes de cada modelo en las tres las posiciones radiales. Una vez obtenidas las diferencias entre cada modelo y los datos experimentales, éstas se normalizaron con el máximo valor de cada diferencia para definir cuantitativamente el error relativo de cada modelo tanto en velocidades como en energías cinéticas turbulentas.

En las gráficas siguientes se podrá apreciar el error relativo entre cada modelo con respecto a los resultados experimentales. Se presentan gráficas para flujos de 13 y 26 L/min; en velocidad y energía respectivamente y en cada posición radial  $z/H = 0.3, 0.68$  y  $0.9$ . Finalmente se aprecian gráficas de error relativo global; es decir la diferencia de cada modelo con respecto a los datos experimentales tomando en cuenta todas las posiciones radiales juntas.

En la *Figura 29*, *Figura 30*, y *Figura 31* se muestran los errores relativos de las magnitudes de las velocidades medidas a  $z/H=0.3$ ,  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$  respectivamente para un flujo de 13 L/min. En  $z/H=0.3$  el modelo con el menor porcentaje de error relativo es el MMK con un 27%, mientras que en  $z/H=0.68$  y a  $z/H=0.98$  el menor porcentaje de error lo da el Lam-Bremhorst con un 33 y 50 por ciento por ciento respectivamente. En contraste los que presentan la mayor diferencia son los modelos K- $\epsilon$  y Chen-Kim a  $z/H=0.3$ , a  $z/H=0.68$  el modelo que presenta la mayor diferencia es el modelo MMK, y a  $z/H=0.98$  el peor modelo es el K- $\epsilon$  siguiéndole el modelo Smagorinsky.

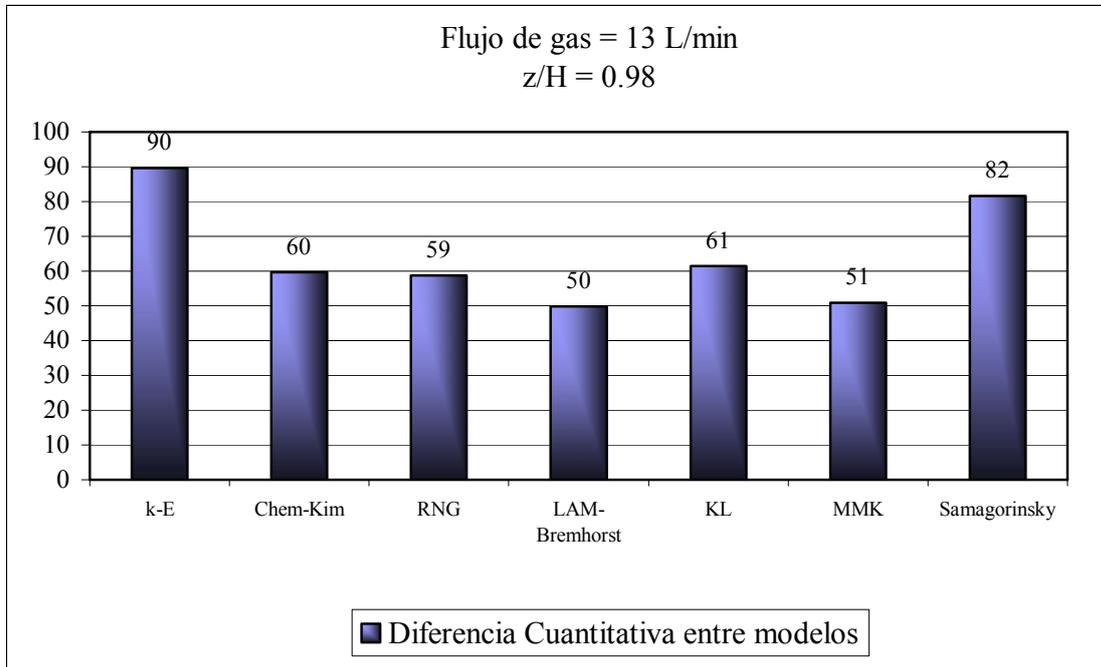


**Figura 21.-** Error normalizado de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 13 L/min.

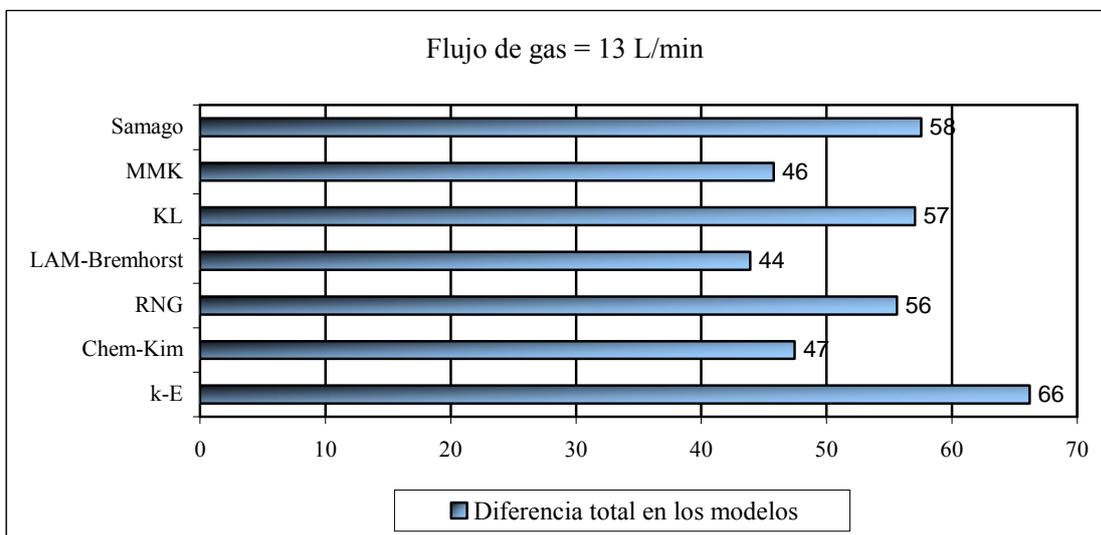


**Figura 22.-** Error relativo cuantitativo de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales.

experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 13 L/min.



**Figura 23.-** Error relativo de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 13 L/min.

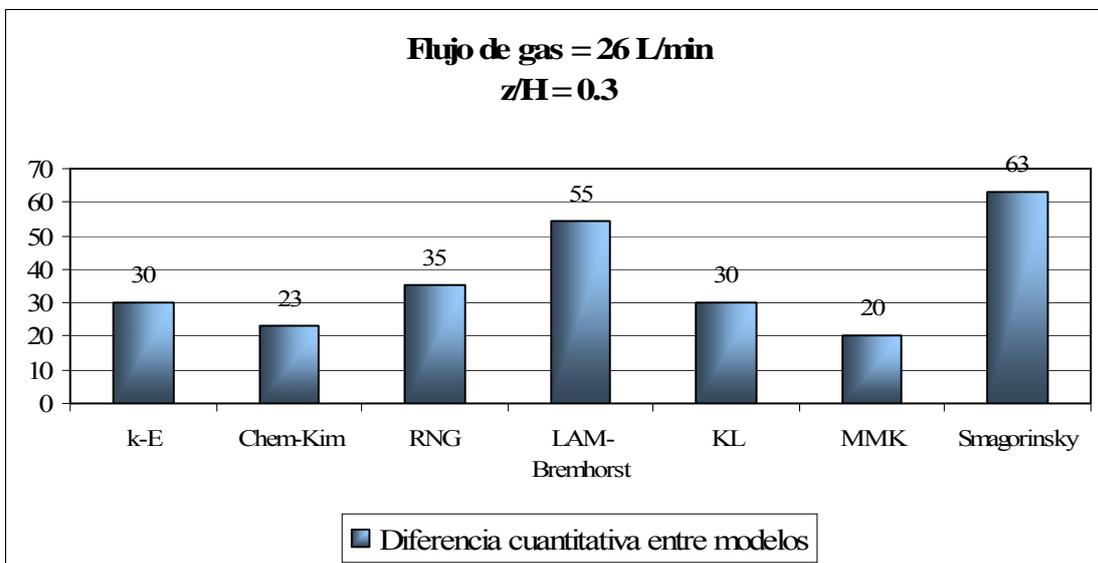


**Figura 24.-** Error relativo global entre los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores Experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 13 L/min.

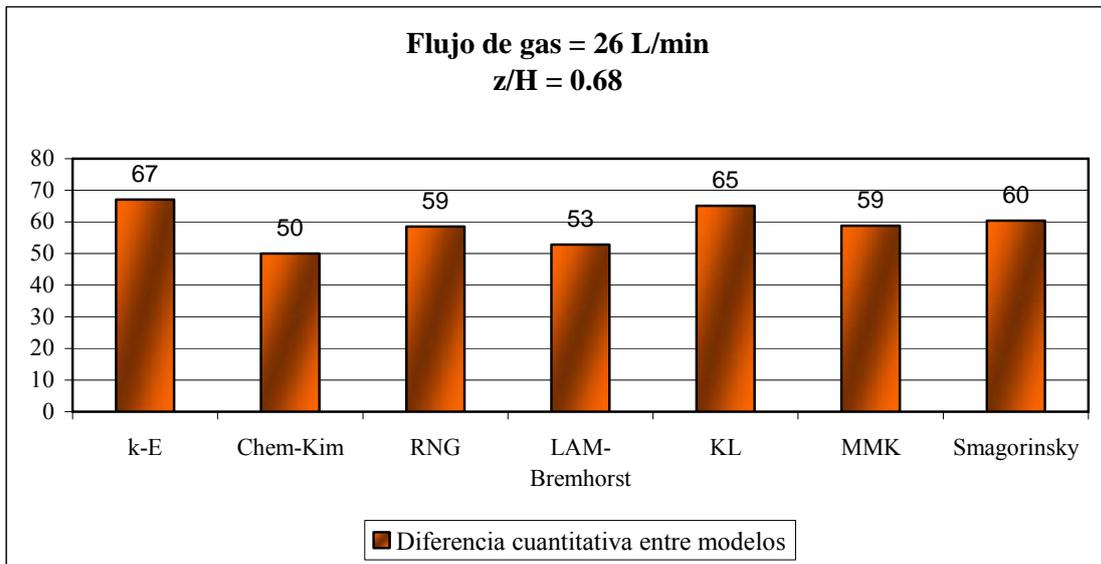
En la figura 32 se puede apreciar claramente que globalmente el modelo que predice mejor las velocidades, con 44 % de diferencia, para una olla agitada con gas con un flujo de entrada de 13 L/min es el modelo Lam-Bremhorst. Esto se puede constatar en las *Figuras*

9,10 y 11, en donde la tendencia experimental es seguida muy de cerca por la aproximación con dicho modelo.

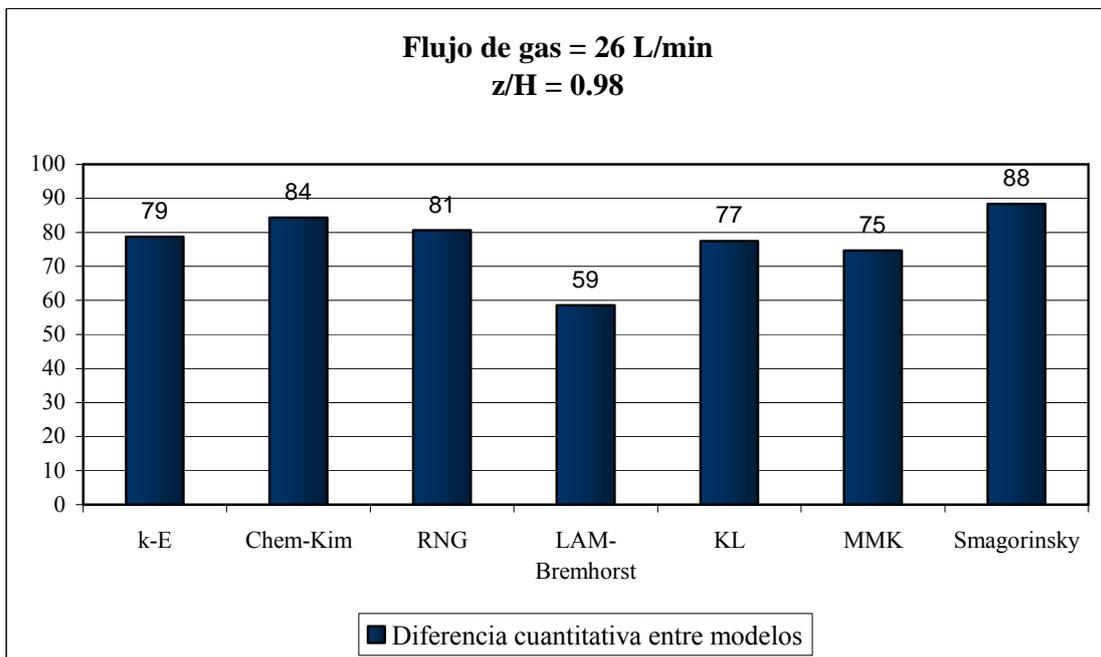
En la *Figura 33*, *Figura 34*, y *Figura 35* se muestran los errores relativos de las magnitudes de las velocidades medidas a  $z/H=0.3$ ,  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$  respectivamente para un flujo de 26 L/min. En  $z/H=0.3$  el modelo con el menor porcentaje de error relativo es el MMK con un 20%, mientras que en  $z/H=0.68$  el menor error se da con el modelo Chem-Kim (50%) y a  $z/H=0.98$  el menor porcentaje de error lo da el Lam-Bremhorst. En contraste los que presentan la mayor diferencia es el modelo Smagorinsky en  $z/H=0.3$  y  $z/H=0.98$ , mientras que a  $z/H=0.68$  el peor modelo es el K- $\epsilon$  siguiéndole el modelo Smagorinsky.



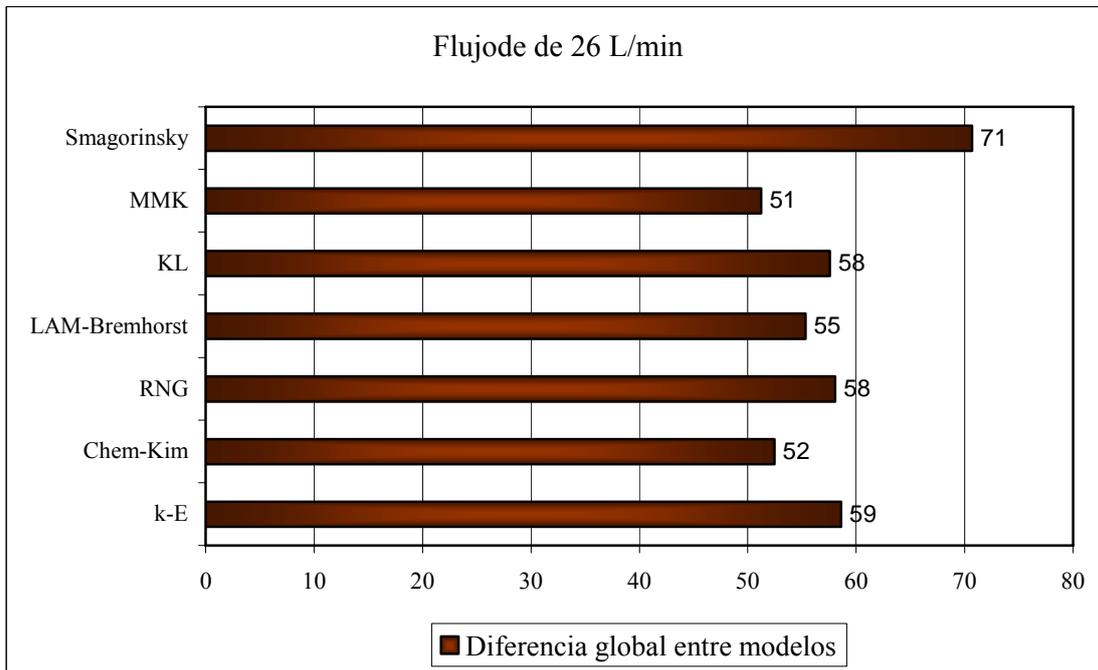
**Figura 25.-** Error relativo de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 26 L/min.



**Figura 26.-** Error relativo de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 26 L/min.



**Figura 27.-** Error relativo de los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 26 L/min.

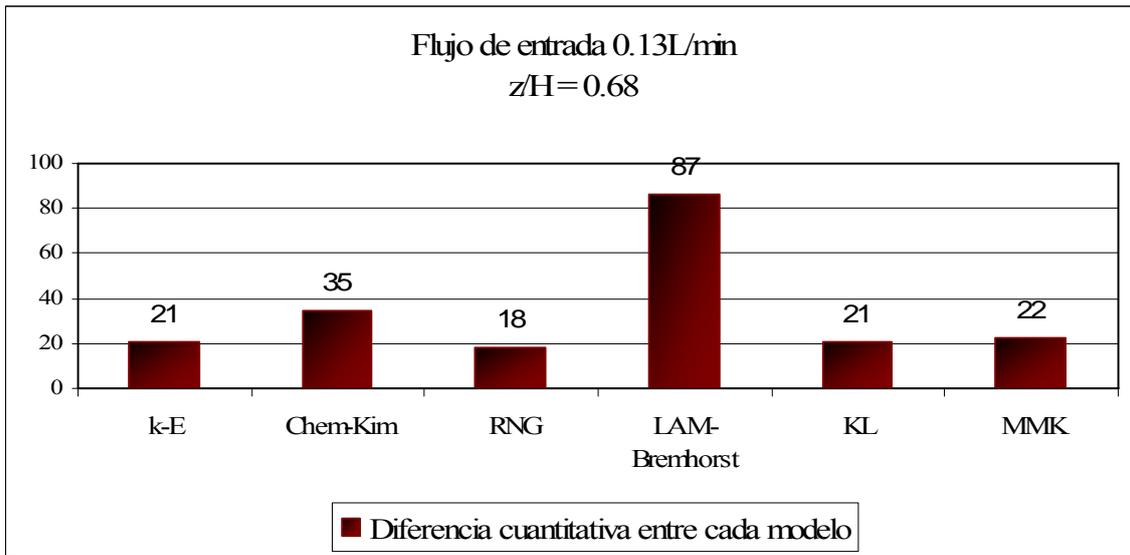


**Figura 28.-** Error global entre los campos de velocidad para los 7 modelos de turbulencia y los valores Experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 26 L/min.

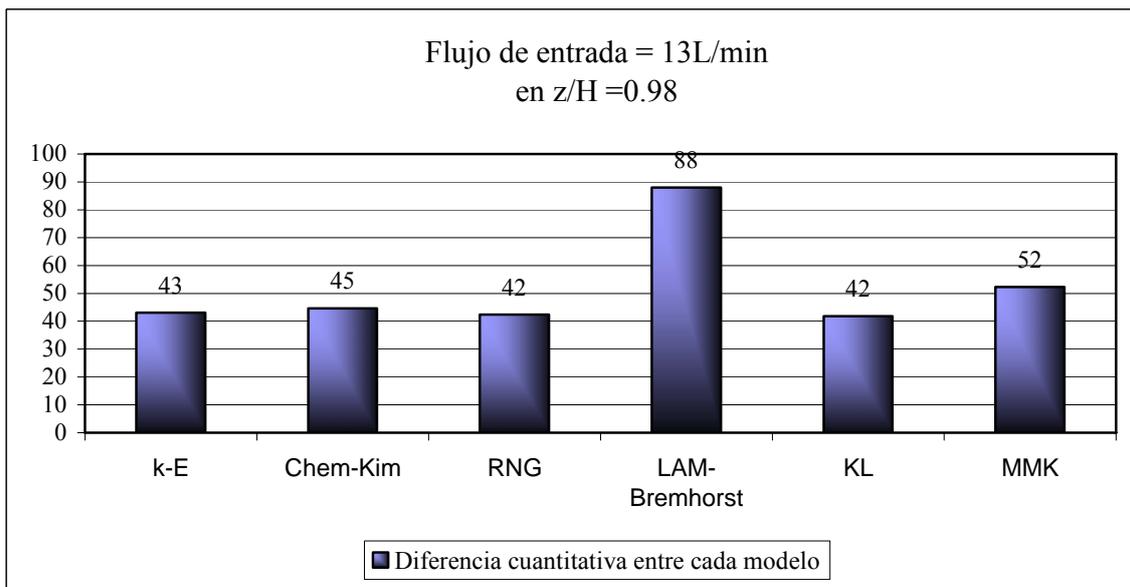
En la *Figura 36* se puede apreciar que el modelo MMK es le que mejor aproxima los campos de velocidad en una olla agitada con gas con un flujo de entrada de 26 L/min. Algo importante de resaltar, es que puntualmente éste modelo en ninguna de las tres posiciones radiales presentó la menor diferencia; sin embargo su aproximación se mantuvo constante en dichas posiciones. En las *Figuras 14, 15 y 16* se puede observar la aproximación de este modelo.

➤ **COMPARACIÓN CUANTITATIVA DE LOS MODELOS DE TURBULENCIA EN LOS CAMPOS DE ENERGÍA TURBULENTO.**

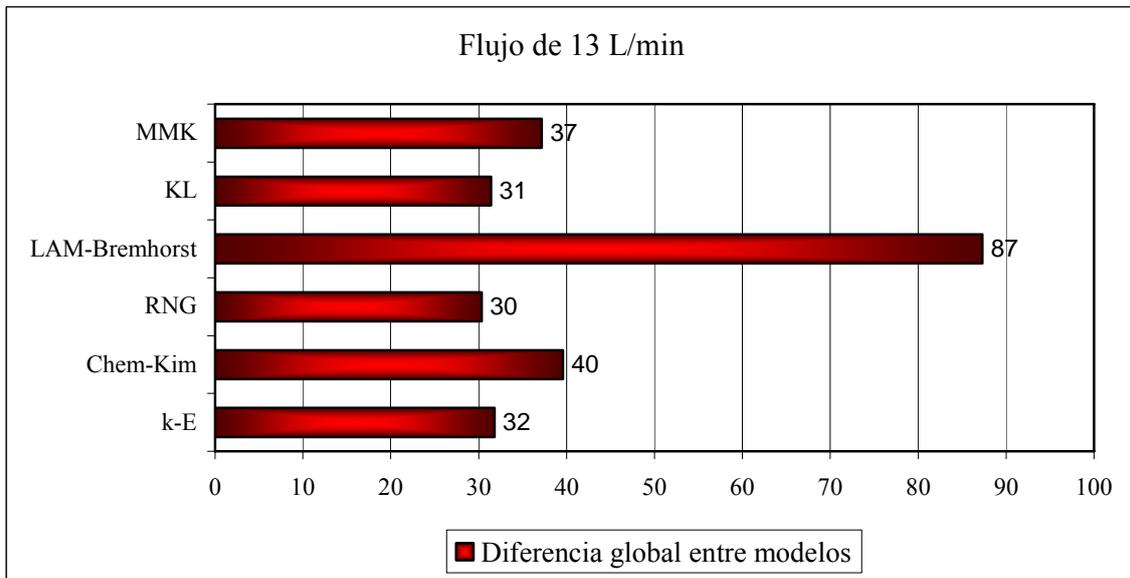
En la *Figura 37* y *Figura 38* se muestran los errores relativos de las magnitudes de las energías cinéticas turbulentas medidas a  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$  respectivamente para un flujo de 13 L/min. En  $z/H=0.68$  el modelo con el menor porcentaje de error relativo es el RNG con 18%, no obstante los modelos KL, k- $\epsilon$  y MMK presentan diferencias muy bajas (21,21 y 22 respectivamente). En  $z/H=0.98$  los modelos KL, k- $\epsilon$  y RNG presentan los menores errores. En contraste el modelo Lam-Bremhorst presenta la mayor diferencia en  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$ , mientras que a  $z/H=0.68$ .



**Figura 29.-** Error relativo de los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 13 L/min.



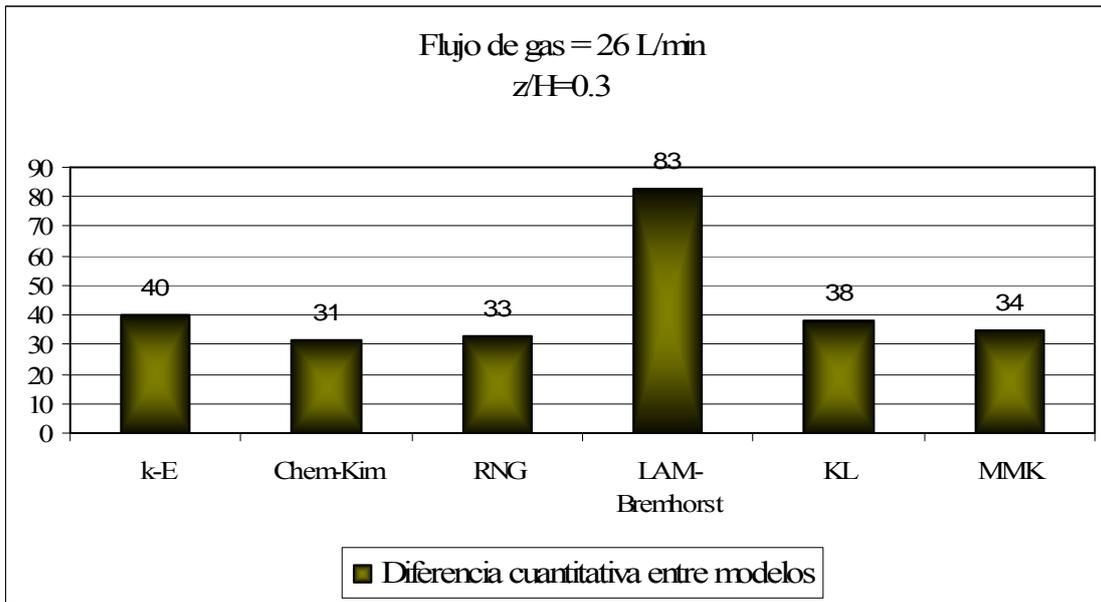
**Figura 30.-** Error relativo de los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 13 L/min.



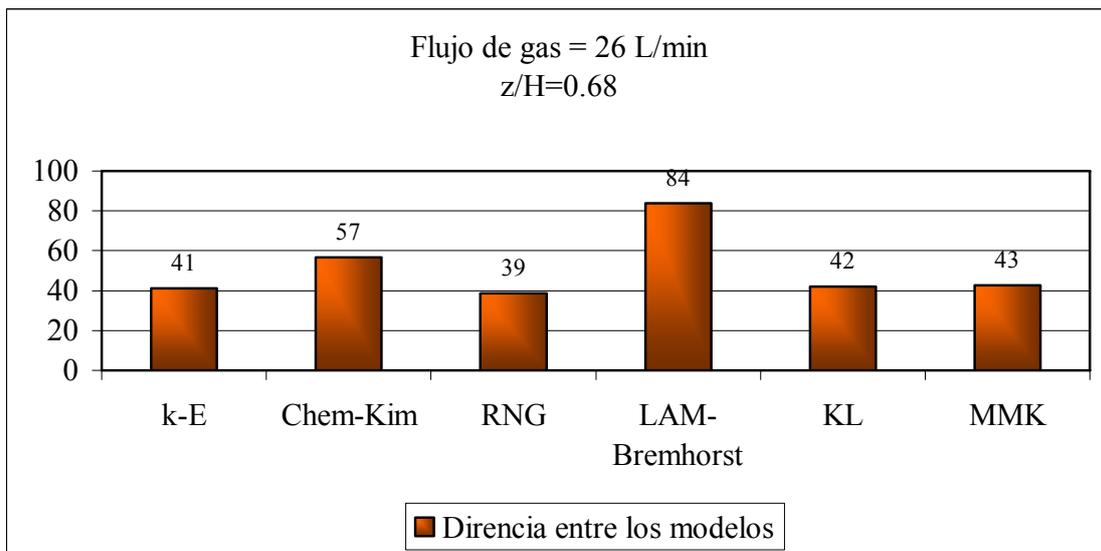
**Figura 31.-** Error global entre los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores Experimentales en las dos posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 13 L/min.

El modelo RNG presenta el menor error global según muestra la *Figura 39*, por lo que éste modelo es el que mejor aproxima los campos de energía en una olla agitada con gas con un flujo de entrada de 13 L/min.; sin embargo los modelos KL y K-ε también presentan una buena aproximación según se nota en las *Figuras 20 y 21*.

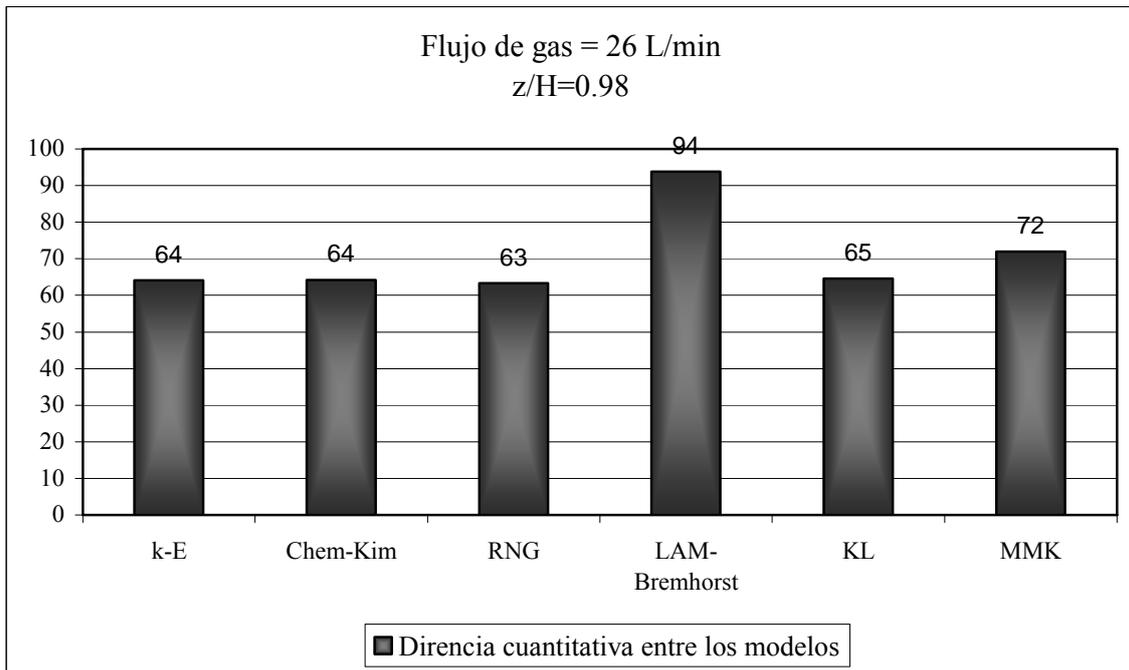
En la *Figura 40*, *Figura 41*, y *Figura 42* se muestran los errores relativos de las magnitudes de las energías cinéticas turbulentas medidas a  $z/H=0.3$ ,  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$  respectivamente para un flujo de 26 L/min. En  $z/H=0.3$  el modelo con el menor porcentaje de error relativo es el Chen-Kim con 33%. En  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$  el modelo RNG presenta el menor error. En contraste el modelo Lam-Bremhorst presenta la mayor diferencia en todas las posiciones axiales, es decir,  $z/H=0.3$ ,  $z/H=0.68$  y  $z/H=0.98$ .



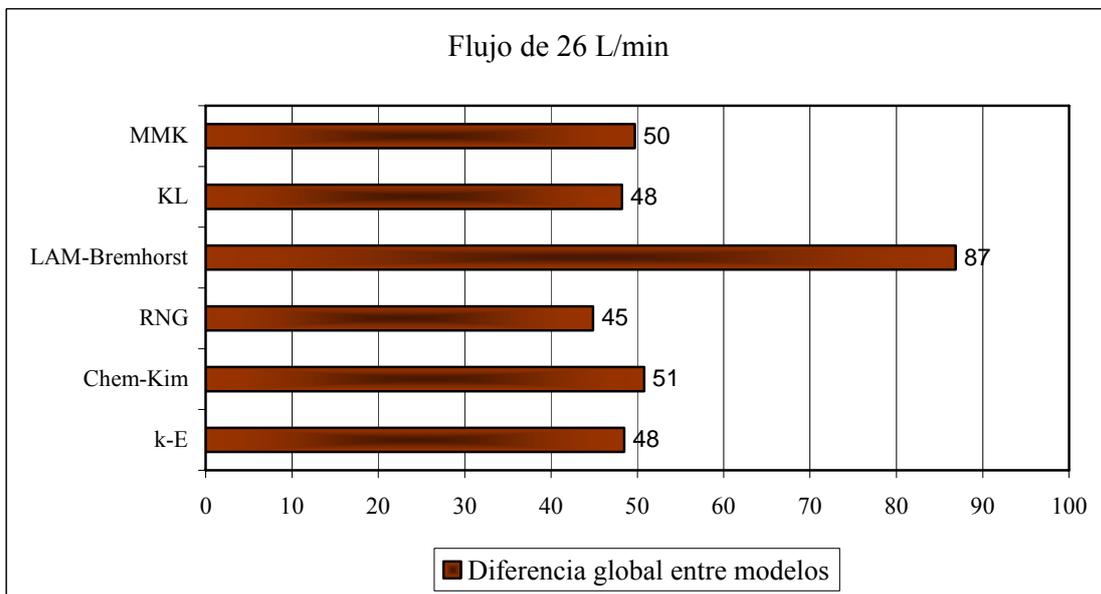
**Figura 32.-** Error relativo de los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.3$ . Flujo de entrada 26 L/min.



**Figura 33.-** Error relativo de los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.68$ . Flujo de entrada 26 L/min.



**Figura 34.-** Error relativo de los campos de energía cinética turbulenta para los 6 modelos de turbulencia y los valores experimentales. Campos de velocidad en una posición radial de  $z/H = 0.98$ . Flujo de entrada 26 L/min.



**Figura 35.-** Diferencia global entre los campos de energía para los 6 modelos de turbulencia y los valores Experimentales en las tres posiciones radiales utilizadas. Flujo de entrada 26 L/min.

El modelo RNG presenta el menor error global según muestra la *Figura 39*, por lo que éste modelo es el que mejor aproxima los campos de energía en una olla agitada con gas con un flujo de entrada de 26 L/min., al igual que lo hace si el flujo es de 26 L/min. De la misma

forma que en la *Figura 39* los modelos KL y K- $\epsilon$  también presentan una buena aproximación.

De acuerdo a lo que se ha analizado hasta este momento se sabe que el mejor modelo será aquel que se aproxime mejor a los resultados experimentales en función del flujo de gas y de la posición axial. Estos resultados se resumen en las *Tablas 11* y *12*.

| <b>Posición axial</b>          | <b>13 L/min</b>            | <b>26 L/min</b>     |
|--------------------------------|----------------------------|---------------------|
| <b><math>z/H = 0.3</math></b>  | Modelo MMK                 | Modelo MMK          |
| <b><math>z/H = 0.68</math></b> | Modelo Lam-Brmhorst        | Modelo Chem-Kim     |
| <b><math>z/H = 0.98</math></b> | Modelo Lam-Brmhorst        | Modelo Lam-Brmhorst |
| <b>Global</b>                  | <b>Modelo Lam-Brmhorst</b> | <b>Modelo MMK</b>   |

**Tabla 1.-** Resumen de resultados de la figuras 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35 y 36 las cuales indican cual es el mejor modelo en función de la posición radial. Campos de velocidad para ambos flujos.

| <b>Flujo de gas a la entrada</b> | <b>13 L/min</b>   | <b>26 L/min</b>   |
|----------------------------------|-------------------|-------------------|
| <b><math>z/H = 0.3</math></b>    |                   | Modelo Chem-Kim   |
| <b><math>z/H = 0.68</math></b>   | Modelo RNG        | Modelo RNG        |
| <b><math>z/H = 0.98</math></b>   | Modelos RNG y KL  | Modelo RNG        |
| <b>Global</b>                    | <b>Modelo RNG</b> | <b>Modelo RNG</b> |

**Tabla 2.-** Resumen de resultados de la figuras 37, 38, 39, 40, 41, 42 y 43 las cuales indican cual es el mejor modelo en función de la posición radial. Campos de energía cinética turbulenta para ambos flujos.

Como se pudo observar en las distintas figuras de éste capítulo en el fondo del reactor la diferencia entre los modelos es mínima y la aproximación a los valores reales es mejor en ambos flujos. Esto se debe a que los modelos resuelven dos ecuaciones diferenciales contemplado la generación de turbulencia por acción de las convección en el fluido y la disipación de la energía turbulenta, en el fondo la disipación es menor ya que la velocidad del fluido disminuye. Además todos estos modelos utilizan (con excepción del modelo algebraico de Samagorinsky) la hipótesis de la viscosidad efectiva la cual contabiliza la viscosidad laminar mas la viscosidad turbulenta (*ecuación 6*) y además la velocidad está promediada en el tiempo.

Es posible observar en las *Figuras 12, 17, 22* y *27* que cerca de las paredes la velocidad tiende a cero y que la energía es sumamente baja esto debido a la condición de no deslizamiento en paredes lo cual provoca que los eddys largos formados dentro del dominio pierdan su intensidad; ya que a causa de la turbulencia éstos rebotan con una capa de fluido laminar adherida a las paredes; de esta forma los eddys largos colapsan en eddys pequeños que a su vez generan menor velocidad, al tener menor velocidad se genera menor cantidad de movimiento y por tanto existe menor disipación de energía y menor tiempo de recirculación. Las fluctuaciones en el tiempo disminuyen provocando que los términos de generación de las ecuaciones (turbulencia) tiendan a cero lo cual provoca que la aproximación sea mas exacta.

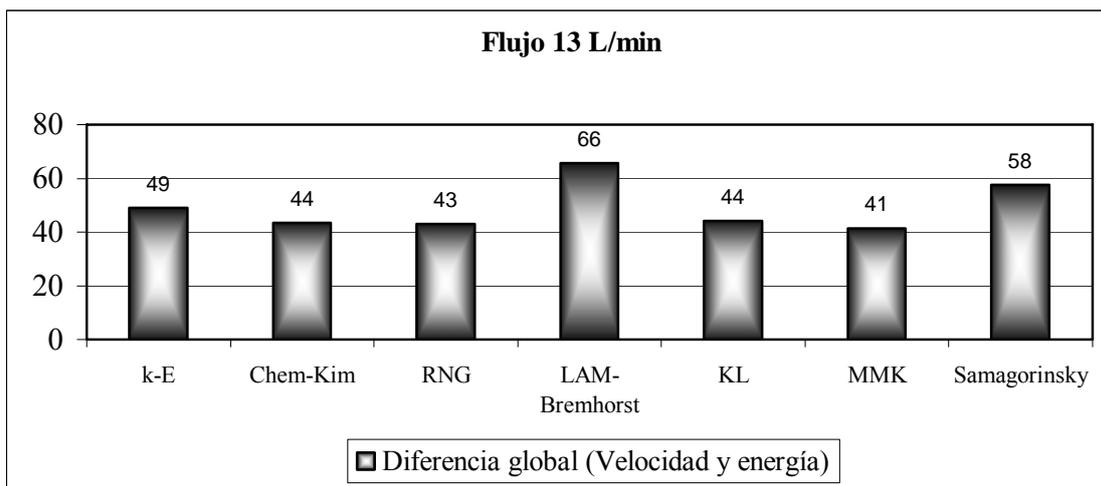
Se puede notar que, en  $z/H = 0.98$ , las predicciones de velocidad y de energía (*Figura 11, 16, 21* y *26*) no son muy aproximadas con respecto a los resultados experimentales planteados esto es debido a la simplificación del problema en la superficie libre. En este

caso se supuso una superficie libre plana inflexible, pero en realidad la superficie si se deforma, lo cual provoca una menor turbulencia que la calculada con la superficie libre plana, así como una mayor velocidad ahí.

En la *Tabla 11* podemos observar que los modelos que mejor aproximan la velocidad no necesariamente lo hacen con la energía esto se debe a que la velocidad está relacionada con el flujo de entrada y con el tiempo de recirculación y la turbulencia está relacionada con la disipación lateral. Esto quiere decir que el modelo cuantifica el flujo de entrada y en base al término de generación en la ecuación estima la recirculación y la disipación. Por ejemplo el modelo Lam-bremhorst (*Figura 12.f y 17.f*) describe la interacción entre el liquido y la pluma de gas, sin embargo en la zona spout se puede notar como por acción de la velocidad de la pluma (sobreestimada por el modelo) la superficie se rompe y se observan patrones de recirculación diferentes a los demás. Cuando esto sucede significa que el modelo no tiene el alcance requerido en la simplificación de superficie libre. Si se observan detalladamente las *Figuras 12.f y 17.f*, es claro notar que la velocidad de entrada no es mayor que la del centro, lo cual nos induce a pensar que el término de generación de éste modelo incrementa sustancialmente la velocidad en el centro de la pluma. En contraste, en las *Figuras 12. a-e y 17.a-e* se logra ver que la velocidad más alta se encuentra en la entrada.

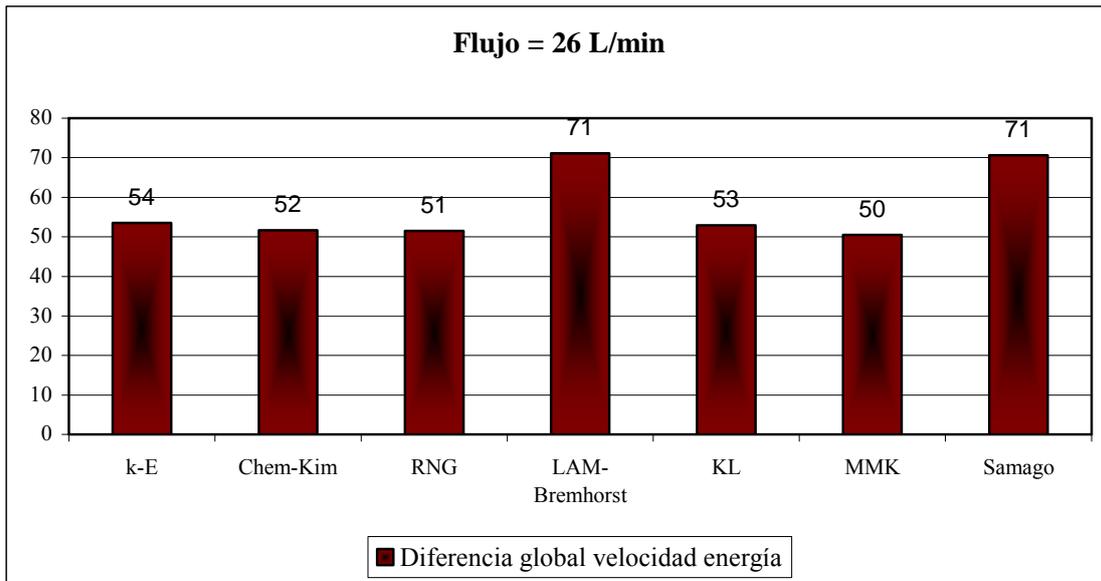
De acuerdo a la *Tabla 11* los modelos que mejor aproximan los campos de velocidad es el Lam-Bremhorst para 13 L/min y MMK para 26 L/min. Y de acuerdo a la *Tabla 12*, el que mejor aproxima los campos de energía para ambos flujos es el modelo RNG. Sin embargo tanto la velocidad y la energía turbulenta son dos variables muy importantes dentro de la olla de refinación secundaria, las cuales están íntimamente relacionadas con el tiempo de recirculación, la disipación de energía y el mezclado.

Debido a que estas dos variables juegan un papel preponderante dentro de la olla, es conveniente hacer un análisis de las variables acopladas.



**Figura 36.-** Diferencias entre modelos a partir de acoplar los campos de velocidad y energía. Flujo 13 L/min.

En la *Figura 44* se puede observar como los modelos utilizados difieren de los resultados experimentales tanto en función de la velocidad y de la energía turbulenta. Se aprecia que el modelo que se aproxima mejor teniendo un flujo de entrada de 13 L/min es el modelo MMK. En contraste, la aproximación más lejana la presenta el modelo Lam-Bremhorst, a diferencia de lo que se pensaba en las *Figuras 10,11,12* y *32* el modelo RNG,KL y Chen-Kim también pueden aproximar correctamente los campos de velocidad y energía acoplados.



**Figura 37.-** Diferencias entre modelos a partir de acoplar los campos de velocidad y energía. Flujo 13 L/min.

Se puede observar en la *Figura 45* la proximidad que existe entre los modelos MMK, RNG, Chem-Kim, KL y K-ε, sin embargo se logra apreciar que el mejor modelo teniendo un flujo de entrada de 26 L/min es el modelo MMK. En contraste, la aproximación más lejana la presenta los modelos Lam-Bremhorst y Smagorinsky.

## CAPITULO 5

## CONCLUSIONES

### 5.1 CONCLUSIONES.

En este trabajo se utilizó un modelo matemático capaz de predecir los campos de velocidad y energía cinética turbulenta dentro de una olla de refinación secundaria. Se utilizaron diferentes modelos de turbulencia con el objetivo de establecer cual de todos éstos describe mejor el comportamiento real del flujo turbulento bifásico en la olla. Además los resultados fueron validados con resultados experimentales obtenidos por Grevet (Error! No se encuentra el origen de la referencia.).

- 1) El modelo que aproxima mejor las condiciones reales de velocidad y energía dentro de una olla de refinación secundaria, teniendo un flujo de entrada de 13 L/min es el modelo MMK.
- 2) El modelo que aproxima mejor las condiciones reales de velocidad y energía dentro de una olla de refinación secundaria, teniendo un flujo de entrada de 26 L/min es el modelo MMK.
- 3) Los modelos que utilizan la hipótesis de la viscosidad efectiva y que utilizan dos ecuaciones diferenciales son los que mejor predicen el comportamiento turbulento dentro de una olla de refinación secundaria.
- 4) Los modelos que utilizan la hipótesis de la viscosidad efectiva con menos de dos ecuaciones no funcionan para predecir las condiciones reales de velocidad y energía dentro de una olla de refinación secundaria.
- 5) Los modelos algebraicos como Smagorinsky no cuentan con el alcance suficiente para poder predecir los campos de velocidad dentro de una olla de refinación secundaria.
- 6) Las predicciones realizadas por cada modelo se aproximan mejor a los valores experimentales cuando se miden los campos cerca del fondo del reactor.
- 7) Cerca de la superficie libre las predicciones que realizan todos los modelos no son muy aproximadas a los valores experimentales, ya que en la realidad la superficie libre no es plana (suposición del modelo) y se puede deformar mitigando la turbulencia.

## NOTACIÓN DEL MODELO:

| <b>Símbolo</b> | <b>Significado</b>   | <b>Unidad</b>       |
|----------------|--|---------------------|
| $C_D$          | Coefficiente de arrastre   | Adimensional        |
| $C_f$          | Coefficiente de fricción interfacial.                              | (Kg/s)              |
| $C_p$          | Calor específico.  | (J/kgK)             |
| $C_s$          | Constante en el modelo Samagorinsky.                               | Adimensional        |
| $C_{1e}$       | Constante para la ecuación de disipación de energía                | Adimensional        |
| $C_{2e}$       | Constante para la ecuación de disipación de energía                | Adimensional        |
| $C_{3e}$       | Constante para la ecuación de disipación de energía                | Adimensional        |
| $C_\mu$        | Constante para la ecuación de disipación de energía                | Adimensional        |
| $D$            | Diámetro de la tobera.   | (cm)                |
| $\tilde{D}_i$  | Coefficiente de difusión del elemento i.                           | (m <sup>2</sup> /s) |
| $D_p$          | Diámetro de burbuja.   | (m)                 |
| $\tilde{F}_b$  | Fuerza de flotación.   | (N/kg)              |
| $\tilde{F}_f$  | Fuerza de fricción por unidad de volumen.                          | (N/m <sup>3</sup> ) |
| $F_l$          | Función amortiguadora  | Adimensional        |
| $F_l'$         | Función del modelo Lam-Bremhorst.                                  | Adimensional        |
| $F_2'$         | Función del modelo Lam-Bremhorst.                                  | Adimensional        |
| $F_\mu$        | Función del modelo Lam-Bremhorst.                                  | Adimensional        |
| $F_\Omega$     | Función del modelo MMK   | Adimensional        |
| $g_i$          | Gravedad en dirección i.   | (m/s <sup>2</sup> ) |
| $G_k$          | Generación de energía cinética turbulenta                          | (J/kg)              |
| $H$            | Entalpía   | (J)                 |
| $h_{malla}$    | Tamaño de la malla   | (m)                 |
| $K$            | Energía cinética turbulenta.                                       | (erg/g)             |
| $P$            | Presión.   | (N/m <sup>2</sup> ) |
| $P_k$          | Velocidad de producción de energía cinética por unidad de volumen. | (m/s)               |
| $Q_g$          | Flujo de gas inyectado.  | (m <sup>3</sup> /s) |
| $R$            | Coordenada radial.   | (m)                 |
| $Re$           | Número de Reynolds.  | Adimensional        |
| $Re_T$         | Número de Reynolds turbulento.                                     | Adimensional        |
| $R_i$          | Fracción volumétrica de la fase i.                                 | Adimensional        |
| $R_l$          | Fracción volumétrica de la fase del líquido.                       | Adimensional        |
| $R_g$          | Fracción volumétrica de la fase del gas.                           | Adimensional        |
| $S$            | Parámetro de esfuerzo.   | (N)                 |

|                   |   |                                      |
|-------------------|---|--------------------------------------|
| $S_k$             | Término fuente por la generación de energía turbulenta. | (Kg/m <sup>3</sup> ·s <sup>3</sup> ) |
| $S_\epsilon$      | Termino fuente de disipación de energía.                | (Kg/m <sup>3</sup> ·s <sup>3</sup> ) |
| $S_\phi$          | Termino fuente de la cantidad $\phi$ a conservar.       | Adimensional                         |
| $S_H$             | Termino fuente para balance de energía.                 | (Kg/m <sup>3</sup> ·s <sup>3</sup> ) |
| $S_i$             | Termino fuente para balance de especies.                | (Kg/m <sup>3</sup> ·s)               |
| $S(u)$            | Traza del tensor velocidad de deformación               | (1/s)                                |
| $t$               | Tiempo.   | (s)                                  |
| $\vec{V}$         | Vector de velocidades.                                  | (m/s)                                |
| $V_i$             | Vector de velocidades de la fase i.                     | (m/s)                                |
| $V_g$             | Velocidad del gas.                                      | (m/s)                                |
| $V_l$             | Velocidad del líquido.                                  | (m/s)                                |
| $V_{\theta,l}$    | Velocidad en dirección angular del líquido.             | (m/s)                                |
| $V_{\theta,g}$    | Velocidad en dirección angular del gas.                 | (m/s)                                |
| $V_{r,l}$         | Velocidad en dirección radial del líquido.              | (m/s)                                |
| $V_{r,g}$         | Velocidad en dirección radial del gas.                  | (m/s)                                |
| $V_{z,l}$         | Velocidad en dirección axial del líquido.               | (m/s)                                |
| $V_{z,g}$         | Velocidad en dirección axial del gas.                   | (m/s)                                |
| $V_{slip}$        | Velocidad de desplazamiento.                            | (m/s)                                |
| $V_{vol}$         | Volumen de celda.                                       | (m <sup>3</sup> )                    |
| $VV$              | Diádica (tensor de orden 2).                            | (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )    |
| $W_i$             | Fracción masa de i.                                     | Adimensional                         |
| $We$              | Número de Webber.                                       | Adimensional                         |
| $Y_N$             | Distancia a la pared mas cercana.                       | (m)                                  |
| $Z$               | Coordenada axial.                                       | (m)                                  |
| $\Delta$          | Función de amortiguamiento en el modelo Samagorinsky    | Adimensional                         |
| $\alpha_k$        | Inverso del número de Prandtl efectivo para K           | Adimensional                         |
| $\alpha_\epsilon$ | Inverso del número de Prandtl efectivo para $\epsilon$  | Adimensional                         |
| $\epsilon$        | Disipación de energía cinética turbulenta.              | (J/s·Kg)                             |
| $\mu$             | Viscosidad molecular.                                   | (Kg/m·s)                             |
| $\mu_t$           | Viscosidad turbulenta.                                  | (Kg/m·s)                             |
| $\mu_{er}$        | Viscosidad efectiva.                                    | (Kg/m·s)                             |
| $\theta$          | Coordenada angular.                                     | (m)                                  |
| $\rho$            | Densidad del medio.                                     | (Kg/m <sup>3</sup> )                 |
| $\rho_i$          | Densidad de la fase i.                                  | (Kg/m <sup>3</sup> )                 |
| $\rho_g$          | Densidad del gas.                                       | (Kg/m <sup>3</sup> )                 |
| $\rho_l$          | Densidad del líquido.                                   | (Kg/m <sup>3</sup> )                 |
| $\sigma_\epsilon$ | Número de prandtl turbulento para $\epsilon$            | Adimensional                         |
| $\sigma_k$        | Número de prandtl turbulento para K                     | Adimensional                         |
| $\tau$            | Tensor de esfuerzos.                                    | (N/m <sup>2</sup> )                  |
| $\nu$             | Viscosidad cinemática.                                  | (m <sup>2</sup> /s)                  |

|          |                                     |                     |
|----------|-------------------------------------|---------------------|
| $\nu_i$  | Viscosidad cinemática de la fase i. | (m <sup>2</sup> /s) |
| $\nu_t$  | Viscosidad de los eddys             | (Kg/m·s)            |
| $\Omega$ | Parámetros de verticidad.           | Adimensional        |
| $\Gamma$ | Propiedad de transporte.            | (kg/m·s)            |

## BIBLIOGRAFÍA:

1. <http://www.worldsteel.org>
2. <http://www.cicm.org.mx>
3. [http://adiac.com.mx/noticias\\_detail](http://adiac.com.mx/noticias_detail)
4. Ramírez-Argáez, MA, Author, Reprint Author Ramirez-Argáez M. A. Ramirez-Argáez, M. A. , Tapia, J, et al. **Mathematical modelling of mixing in gas stirred ladles**, REV METAL MADRID 42 (1): 56-75 JAN-FEB 2006.
5. **The Making, Shaping and Treating of Steel**. 10<sup>th</sup> Edition. United States Steel. Edited by William T. Lankford Jr., Norman L. Samways, Robert F. Craven and Harold E. McGamon (Editor Emeritus).
6. J.K. Brimacombe. **The Extractive Metallurgy in an Emerging World of Materials**. The 1989 Extractive Metallurgy Lecture. The Minerals, Metals and Materials Society. Metallurgical Transactions, Vol. 20B June 1989.
7. Dipak MAZUMDAR, Roderick I. L. GUTHRIE. **The Physical and Mathematical Modelling of gas Stirred Ladle Systems**, ISIJ International, Vol 35, No. 1, 1995.
8. J.S. Woo, J. Szekely, A.H. Castillejos, and J. K. Brimacombe. **A Study on the Mathematical Modeling of Turbulent Recirculating Flows in Gas-Stirred Ladles**. METALL TRANS B. Volume 21B: 269- 277 APRIL 1990.
9. Lifeng Zhang. **Mathematical Simulation of Fluid Flow in Gas Stirred Liquid Systems**. JSPS. Taniguchi Laboratory, Department of Metallurgy Graduate School of Engineering, Tohoku University.
10. P. E. Anagbo. J. K. Brimacombe and A. H. Castillejos: Can. Metall. Q., 28 (1989) 323.
11. P. E. Anagbo and J. K. Brimacombe: Metall. Trans., 21B(1990), 637
12. Inocencio Hugo Nava Ramos. **Modelación Matemática del Mezclado en Hornos – Olla Agitados con gas**. Tesis de Licenciatura. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Mexico D.F. 2005.
13. K. Nakanishi, K. Saito. T. Nozaki, Y. Kato, K. Suzuki and T. Emi: Proc Steelmaking Conf., 65 (1982), 101.
14. M. Froberg, F. Geriachand, G. Handschuh: Steel Res., 61 (1990), 151.
15. R. J. Matway. R. J. Fruehan and H. Henien: Iron Steelmaker, 9(1989), 51.

16. S. H. Kim, R. J. Fruehan and R. I. L. Guthrie: *Steelmaking Conf. Proc.*, 70 (1987), 107.
17. S. H. Kim and R. J. Fruehan: *Metall. Trans.*, 18B(1987), 381.
18. S. Taniguchi, M. Ohmi, S. Ishiura and S. Yamauchi: *Trans. Iron Steel Inst. Jpn.*, 23 (1983), 565.
19. S. Taniguchi, M. Ohmi and S. Ishiura: *Trans. Iron Steel Inst. Jpn.*, 23 (1983), 572.
20. S. Taniguchi, Y. Okada, A. Sakai and A. Kikuchi: *Proc. 6<sup>th</sup> Int. Iron Steel Cong., ISIJ, Tokyo, (1990)*, 394.
21. Hasmet Turkoglu and Bakhtier Farouk. **Effect of gas injection velocity on Mixing and Heat transfer in Molten Steel Baths.** *Numerical heat transfer, Part A, Vol. 21*, pp. 377-399, 1992.
22. J.L. Xia and T. Ahokainen. **Homogenization of temperature field in a steelmaking ladle with gas injection.** *Scandinavian Journal of Met* 2003; 32:211-277.
23. J. Szekely, T. Lehner and C.W. Shang. **Flow Phenomena, Mixing and Mass Transfer in Argon Stirred Ladles, Ironmaking Steelmaking**, Vol. 6, 1979.
24. D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie: *Metall. Trans.*, 17B(1986), 725.
25. M. Sano and K. Mori: *Trans. Iron Steel Inst. Jpn.*, 23(1983), 169.
26. U. P. Sinha and M. J. McNallan: *Metall. Trans.*, 16B(1985), 850.
27. S. Joo and R. I. L. Guthrie: *Metall. Trans.*, 23B(1992), 765.
28. Alexiadis, A, Gardin, P, Domgini, JF. **Spot turbulence, breakup, and coalescence of bubbles released from a porous plug injector into a gas-stirred ladle**, *Metall Mater Trans B* 35 (5): 949-956 Oct 2004.
29. J. H. Grevet, J. Szekely, and N. El-Kaddah: *Int. J. Heat Mass Transfer*, 25 (1982), 487.
30. S.T. Johansen and F. Boysan. **Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part II. Mathematical Modeling.** *Metall Trans B. Volume 19B: 755-764 OCT 1988.*
31. J. Mietz, S. Schneider and F. Oeters: *Steel Res.*, 62 (1991),
32. R. Byron Bird. **Transport Phenomena**, . Wiley International Edition.

33. J. Szekely. **Fenómenos de Flujo de Fluidos en Procesamiento de Metales, 1ª Edición.** 1988. Editorial Limusa, S.A.
34. H.K. Versteeg and W. Malalasekera. **An introduction to computational fluid dynamics The finite volume method.** New York 1995.
35. [http://www.windows.ucar.edu/physical\\_science/physics/thermal/Leonardo\\_jpg\\_image.html](http://www.windows.ucar.edu/physical_science/physics/thermal/Leonardo_jpg_image.html).
36. J. Szekely, H. J. Wang and K. M. Kiser: Metall. Trans., 7B (1976), 287.
37. J. Szekely, A. H. Dilawari and R. Metz: Metall. Trans., 10B (1979), 33.
38. T. Debroy, A. K. Majumdar and D. B. Spalding: Appl. Math. Model., 2(1978), 146.
39. M. P. Schwarz, J. K. Wright and P. R. Badlock: Proc., Symp. On Mathematical Modelling of Materials Processing Operations, (1987), 565.
40. M. Lance and Bataille: Ann. N.Y. Acad. Sci., 1983, pp 515-17.

#### **LIBROS CONSULTADOS:**

- ✓ J. Szekely. **Fenómenos de Flujo de Fluidos en Procesamiento de Metales, 1ª Edición.** 1988. Editorial Limusa, S.A.
- ✓ H.K. Versteeg and W. Malalasekera. **An introduction to computational fluid dynamics The finite volume method.** New York 1995.
- ✓ R. Byron Bird. **Transport Phenomena,** . Wiley International Edition.
- ✓ Inocencio Hugo Nava Ramos. **Modelación Matemática del Mezclado en Hornos – Olla Agitados con gas.** Tesis de Licenciatura. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Mexico D.F. 2005.
- ✓ D. R. Gaskell. **An Introduction to TRANSPORT PHENOMENA in MATERIALS ENGINEERING.** 1992.
- ✓ Shoji TANIGUCHI, Seiji KAWAGUCHI, Atsushi KIKUCHI, **FLUID FLOW AND GAS-LIQUID MASS TRANSFER IN GAS-INJECTED VESSEL. Second International Conference on CFD in the Materials and Process Industries** CSIRO, Melbourne, Australia. 6-8 December 1999.
- ✓ **The Making, Shaping and Treating of Steel.** 10<sup>th</sup> Edition. United States Steel. Edited by William T. Lankford Jr., Norman L. Samways, Robert F. Craven and Harold E. McGamon (Editor Emeritus).