

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA
"Validación de la modelación matemática de flujo de fluidos en la refinación de Al por la técnica rotor-inyector"
TESIS
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO
P R E S E N T A
OSCAR MANUEL LABRADA MONTALVO





Universidad Nacional Autónoma de México



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. Carlos González Rivera.
SECRETARIO:	Prof. Marco Aurelio Ramírez Argáez.
1er. SUPLENTE:	Prof. Adrián Manuel Amaro Villeda.
2do. SUPLENTE:	Prof. Juan Manuel de la Rosa Canales.

Sitio donde se desarrolló el tema:

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

ASESOR DEL TEMA: Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez.

Firma

SUSTENTANTE: Oscar Manuel Labrada Montalvo.

Firma

Dedicado con amor y agradecimiento a mi Madre Patricia Montalvo y a mis hermanos Daniel y Patricia Labrada, por todo el cariño y apoyo que siempre me han brindado.

Con cariño a mi tío Jorge Labrada, mi tía Griselda y Karen, Alejandra y Erick Labrada.

Con especial cariño a Liliana Marín, gracias por estar siempre a mi lado y brindarme tu amor.

Con cariño y agradecimiento a mi abuela Bertha Machuca.

Con agradecimiento al Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez, por el tiempo y apoyo brindados.

Con respeto y como un homenaje a la memoria de una de las personas que más quise y más me apoyó , mi Padre, Oscar Labrada Hernández, porque aunque ya no esté conmigo, siempre será uno de mis principales motivos para esforzarme y seguir adelante.

Dedicado a la memoria de mis Abuelos; Oscar Labrada, Estela Hernández y María Chávez, quienes siempre me apoyaron y brindaron su amor. Se agradece por la beca brindada a CONACYT y al proyecto clave 60033, titulado "Modelación matemática y física de la desgasificación de aluminio líquido por medio de purgado de gases con la técnica Rotor-Inyector", a cargo del Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez (responsable técnico).

ÍNDICE GENERAL

1	CAPÍTULO I. A	NTECEDENTES 4
	1.1 Generali	dades del aluminio4
	1.1.1	Producción de aluminio5
	1.1.2	Principales usos de las aleaciones de aluminio8
	1.2 Justifica	ción y planteamiento del problema10
	1.3 Proceso d	le remoción de hidrógeno del aluminio12
	1.3.1	Termodinámica del proceso12
	1.3.2	Técnicas de medición de hidrógeno disuelto en aluminio13
	1.3.3	Generalidades de diferentes métodos para remoción de H ₂ 13
	1.3.4	Remoción de hidrógeno con purga de gases15
	1.3.5	Modelación matemática y/o física17
	1.4 Resumen	del estado del arte en modelado matemático para procesos de
	desgasifica	ación de aluminio 18
	1.5 Objetivos	

2	CAPÍTULO II.	MODELO MATEMÁTICO 22
	2.1 Descripc	ión del problema 22
	2.2 Suposici	ones simplificativas 23
	2.3 Ecuacion	nes gobernantes 23
	2.3.1	Ecuación de continuidad para cada fase
	2.3.2	Ecuación de conservación de momentum para ambas fases 24
	2.3.3	Ecuaciones del modelo de turbulencia $k\mathchar`e$ (solo para la fase líquida) 25
	2.4 Condicio	nes de frontera 26
	2.5 Propieda	des físicas y características geométricas
3	CAPÍTULO III.	METODOLOGÍA 31
	3.1 Descripci	ón de la obtención de resultados para el modelo físico
	3.2 Modelaci	ón matemática 33
	3.2.1	Descripción del software utilizado: PHOENICS
	3.2.2	Solución: Método numérico de volumen de control
	3.2.3	Trabajo experimental en computadora 37
	3.2.4	Descripción de las corridas realizadas
4	CAPÍTULO IV.	RESULTADOS Y VALIDACIÓN 39
	4.1 Resultado	s obtenidos para el rotor liso 39
	4.1.1	Resultados sin inyección de gas 39
	4.1.2	Resultados con inyección de gas (3 l/min) 42
	4.2 Resultado	s para el rotor estándar 47
	4.2.1	Resultados sin inyección de gas 47
	4.2.2	Resultados con inyección de gas (3 l/min) 53

5 CAPÍTULO	V. ANÁLISIS DE RESULTADOS	57
5.1 Anális	is del efecto de las variables del proceso sobre la fluidinámica del sistema	57
5.1	1 Efecto de la Velocidad de giro del rotor	57
5.1	2 Efecto de la inyección de gas	59
5.1	3 Efecto del tipo de rotor	59
5.2 Valida	ión	61
6 CAPÍTULO V	I. CONCLUSIONES	62
6.1 Traba	o futuro	64
ÍNDICE DE FIG	U RAS	65
ÍNDICE DE TAE	LAS	68
NOTACIÓN EM	PLEADA	68
APÉNDICE		71
REFERENCIAS	Y BIBLIOGRAFÍA	77

CAPÍTULO I. ANTECEDENTES

1.1 Generalidades del aluminio.

El aluminio es el tercer elemento más común encontrado en la corteza terrestre. Los compuestos de aluminio forman el 8% de la corteza de la tierra.

El aluminio puede ser resistente, ligero, dúctil y maleable. Es un excelente conductor del calor y de la electricidad y sus temperaturas de fusión y ebullición son de 660° C y 2467° C, respectivamente y tiene una estructura cristalina cúbica centrada en las caras.

Este metal sólo existe en la naturaleza en combinación con otros elementos y como éstos son muy estables, tomó varias décadas poder desarrollar métodos para obtener el aluminio en un estado razonablemente puro.

En 1808, Sir Humphrey Davy de Gran Bretaña, estableció la existencia del aluminio y le dio su nombre. En 1821, P. Berthier, de Francia, descubrió un material duro, rojizo y parecido a la arcilla que contenía 52% de óxido de aluminio, cerca de la villa de Les Beaux, al sur de Francia. Él lo llamó bauxita, el más común de los minerales de aluminio. No obstante, el elemento no fue aislado como tal hasta que, en 1825, el danés Hans Christian Oersted redujo cloruro alumínico con una amalgama de potasio. Posteriormente, otros químicos realizaron diferentes experimentos para estudiar las propiedades del metal; destaca Freidrich Wohler, alemán que en 1827 describió el proceso para producir aluminio como polvo haciendo reaccionar al potasio con clorato de aluminio anhídrico. Este científico estableció, también, la densidad específica del aluminio y una de sus propiedades únicas: la ligereza.

En 1854, el francés Henri Saint-Claire de Ville mejoró el método de Wohler para crear el primer proceso comercial. El metal era más caro que el oro o el platino. En la exposición internacional celebrada en París en 1855, se mostraron al público cuatro grandes bloques de aluminio a los que no se daba otra utilidad que la decoración. En 1885, Hamilton Y. Cassner (USA) mejoró el proceso de de Ville con una producción anual de 15 toneladas.

Al año siguiente, dos científicos, Paul Louis Toussaint Héroult (francés) y Charles Martin Hall (USA) trabajando de manera separada y sin conocer el trabajo del otro, inventaron simultáneamente un nuevo proceso electrolítico, que es la base para la producción actual del aluminio: el proceso Hall-Héroult. Ellos descubrieron que si disolvían óxido de aluminio (alúmina) en un baño de

criolita fundida y pasaban una fuerte corriente eléctrica a través de ésta, el aluminio se depositaba en el fondo del recipiente.

En 1888, se fundan las primeras compañías de aluminio en Francia, Suiza y Estados Unidos y en 1889, Freidrick Bayer (Austria), hijo del fundador de la compañía química Bayer, inventó el proceso Bayer para la producción en gran escala de alúmina a partir de la bauxita.

El aluminio sólo se ha producido comercialmente durante 144 años. El hombre ha usado bronce, plomo y estaño por miles de años; a pesar de esto, el aluminio los ha ido reemplazando poco a poco.

1.1.1 Producción de aluminio.

Existen numerosos depósitos de bauxita, principalmente en la zona tropical y subtropical del mundo, en Australia, Brasil, Venezuela, Jamaica y Guinea (de forma apreciable) y también en Europa, que forman estratos o bolsas que se encuentran generalmente a 12 metros o más abajo del suelo o de una cubierta de vegetación. México tiene sólo arcillas con bajo contenido (10%) de alúmina, es decir las condiciones para producir aluminio no son muy aptas para nuestro país. La clase de bauxita comercial debe contener al menos 40% de óxido de aluminio. La bauxita es generalmente extraída de una mina de tiro abierto. La cubierta se quita, se remueve la bauxita y se transporta a la refinería.

De dos a tres toneladas de bauxita son requeridas para producir una tonelada de alúmina dependiendo de la clase de bauxita. La bauxita es refinada en alúmina usando el proceso Bayer.

La bauxita se lava y se disuelve en hidróxido de sodio a una presión y temperatura alta. El resultado es un licor que contiene una solución de aluminato de sodio y residuos de bauxita sin disolver que contienen hierro, silicio y titanio. Estos residuos se hunden gradualmente hasta el fondo del tanque y son removidos. Son comúnmente conocidos como "barro rojo". De este licor se obtiene alúmina pura a través de varios procesos subsecuentes. Dos toneladas de alúmina se requieren para producir una tonelada de aluminio.

La base de todas las plantas fundidoras de aluminio primario es el proceso Hall-Héroult, inventado en 1886. La alúmina se disuelve mediante un baño electrolítico de criolita fundida (Na_3AlF_6 a 950°C (fluoruro alumínico sódico)) en un crisol. Una corriente eléctrica se pasa por el electrolito a un bajo voltaje pero con una corriente muy alta generalmente 150.000 A. La corriente eléctrica fluye entre el ánodo de carbono hecho del coque de petróleo y brea, y un cátodo formado por un recubrimiento de carbón grueso o grafito del crisol.

El aluminio fundido es depositado en el fondo del crisol y se revuelve periódicamente, se lleva a un horno, de vez en cuando se mezcla a una aleación especificada, se limpia y generalmente se funde.

Una fundición de aluminio típica consiste de alrededor de 300 crisoles. Estos producirían como 125,000 toneladas de aluminio anualmente. Sin embargo, algunos de las fundidoras de la última generación producen entre 350mil y 400 mil toneladas.

En promedio alrededor del mundo se toman 15.7 kW/hr para producir un kilogramo de aluminio de la alúmina. Mejoramientos en los diseños y procesos han reducido progresivamente este aspecto de 21 kW/hr de los años cincuentas.

Fundir el aluminio requiere de intensa energía que es por lo que fundidoras mundiales están localizadas en áreas dónde tienen acceso a un recurso de energía abundante (hidroeléctricas, gas natural, carbón y nuclear). Muchas localidades son remotas y la electricidad es generada específicamente para las plantas de aluminio.

El proceso de fundición es continuo. Un horno no se para y se vuelve a poner en funcionamiento con facilidad. Si la producción es interrumpida por una falta de energía de más de 4 horas, el metal en los crisoles se solidificará, requiriendo un proceso de reconstrucción con un alto costo.

La mayoría de los hornos produce aluminio del 99.7% de pureza que es aceptable para la mayoría de las aplicaciones. Sin embargo, el aluminio muy puro de 99.99% es utilizado para aplicaciones especiales, generalmente aquellas dónde la alta ductilidad y conductividad es requerida. El margen de diferencia en pureza del aluminio da cambios significativos en las propiedades del metal.

El aluminio ha reemplazado al cobre desde 1945 en las líneas de transmisión de alto voltaje y hoy en día es la forma más económica de transmitir electricidad. El aluminio pesa solo un tercio de lo que pesa el cobre y puede llevar el doble de electricidad que una onza de cobre. Por esta razón, las líneas de electricidad de aluminio son más ligeras y no requieren de grandes estructuras para sostenerse. Además, el aluminio tiene otras aplicaciones en este campo: los sistemas de electricidad de grandes edificios están hechos de aluminio; desde la década de los 50´s, la base de los focos se hace de aluminio y no de cobre o latón; también miles de antenas para televisores y para satélites son hechas de aluminio.

En México, el único productor de aluminio primario hasta agosto del 2003 fue Almexa Aluminio, en su planta Aluder, ubicada en Veracruz. Almexa formaba parte de Nacobre, subsidiaria del grupo Carso (Gcarso). El consejo administrativo de Gcarso decidió cerrar definitivamente la fabricación de aluminio primario debido a un fuerte incremento en el costo de la energía eléctrica, y por lo tanto en el costo de producción. La empresa mantiene actividades de transformación, pero con aluminio primario importado.

A nivel industrial, se usa el método Bayer, como ya se mencionó antes, para el beneficio de la bauxita con buenos resultados económicos. Además, la metalurgia de posibles sustitutos de la bauxita para la obtención de aluminio no ha sido optimizada aún. Por otro lado, la reducción electrolítica para procesar alúmina se ha impuesto en aproximadamente 150 empresas alrededor del mundo. Almexa utilizaba estos dos procesos en su planta de producción de aluminio primario.

Año	Producción de aluminio primario (TON)
1990	67500
1992	24800
1994	No disponible
1996	61458
1998	61848
2000	61200
2002	39000

Tabla 1. Muestra la producción de aluminio primario en México.Fuente: Anuario estadístico de la minería mexicana 2003. Edición 2004.

La Figura 1 muestra la producción mundial de aluminio en millones de toneladas métricas:



Figura 1. Producción mundial de aluminio en millones de toneladas métricas

Desde comienzos del siglo XX, la producción mundial de aluminio se duplicó cada nueve años hasta el año 1950, fue multiplicada por diez de 1950 a 1980 y aumentó un 80% aproximadamente en los últimos veinte años. La producción actual es superior a los 25 millones de toneladas (ver Figura 1). En la producción total de la industria de la fundición de México en 2000 el aluminio ya se encontraba en segundo lugar solo detrás de los hierros grises, incluso arriba del acero. En la Tabla 1 se presenta la producción de aluminio primario en toneladas en México.

En la industria se establecen 3 grupos de clasificación para la manufactura de productos de aluminio secundario (Aluminio obtenido por reciclaje o recuperación) y son la extrusión, la laminación y la fundición. Este trabajo se enfoca a la producción por fundición.

Hay 4 etapas básicas en la obtención de productos de aluminio vía fundición:

1).- Fusión del aluminio (en hornos de reverbero o de inducción generalmente) que usa como materia prima chatarra o lingotes de aluminio.

2).- Tratamiento del metal líquido para la eliminación de impurezas (hidrógeno y otras).

3).- Colada y solidificación de la pieza controladamente.

4).- Maquinado y acabado superficial de la pieza.

Las etapas cruciales para determinar la calidad del producto son la segunda y la tercera, ya que se pueden eliminar impurezas y gases y se puede optimizar, controlar y manipular la velocidad de enfriamiento y dirección de la solidificación para controlar la porosidad y por ende la calidad metalúrgica deseada.

1.1.2 Principales usos de las aleaciones de aluminio.

Por su elevada conductividad calorífica, se usa en utensilios de cocina y en los pistones de motores de combustión interna.

Su alta resistencia en relación a su peso y su resistencia a la corrosión lo hace útil en la construcción de aeronaves, embarcaciones, en perfiles y otros elementos de construcción, vagones de ferrocarril y chasis de coches y motocicletas y en general para todos aquellos usos en los que se necesiten metales resistentes y ligeros.

El peso del cable es muy importante en la transmisión de energía eléctrica de alto voltaje a largas distancias y por ello se usan los conductores de aluminio (en lugar de los de cobre) para tendidos eléctricos en líneas que soportan 700,000 V o más.

El papel de aluminio de 0.018 cm de grosor, es de uso doméstico común, ya que protege los alimentos y otros productos perecederos de la descomposición. A causa de su ligereza, facilidad de manejo y compatibilidad con alimentos y bebidas, el aluminio se usa ampliamente como envase en la industria alimentaria. La recuperación y reciclaje de estos recipientes es una medida de conservación de la energía cada vez más importante.

Los compuestos de aluminio se usan como catalizadores (Friedel Craft AlCl₃), purificación del agua (sulfato de aluminio) y en cerámicas (óxido de aluminio).

El Consumo de Al por sectores se presenta en la Tabla 2 y en la Tabla 3 se muestran los principales grupos de familias de aleaciones de aluminio y sus aplicaciones típicas.

Sector	%
Embalajes y recipientes	32
Transporte	25
Edificios y construcción	20
Equipos eléctricos	10
Bienes de consumo duraderos	8
Varios	5

Tabla 2. Muestra El Consumo de Al por sectores

Aleaciones con sus principales elementos	Series	Aplicaciones típicas
99.00% min. de	1777	Hoja, chapas para
aluminio	ΙΛΛΛ	litografía, chapas.
Cobre	2XXX	Industria aeronáutica.
Manganeso	3XXX	Latas, radiadores de edificios.
Silicio	AXXX	Intercambiadores de
Silicio	4777	calor e ingeniería.
Magnesio	5777	Latas, automóviles, fachadas,
Widghesio	JAAA	construcción, transporte.
Magnesio y silicio	6XXX	Automóviles, construcción,
Widghesio y sincio	071717	transporte.
Zinc	7XXX	Industria aeronáutica, radiadores.
Otros elementos	8 XXX	Hoja (Fe), industria
Guos ciementos	0/1/1/1	Aeronáutica (Li).

Tabla 3. Muestra los principales grupos de familias de aleaciones de aluminio y susaplicaciones típicas

1.2 Justificación y planteamiento del problema.

Hoy en día, el aluminio y sus diferentes aleaciones ocupan un lugar muy importante en la producción a nivel nacional y a nivel mundial (segundo lugar en ambos casos) de piezas por métodos de fundición (32% del total de los metales producidos por fundición), siendo los hierros colados el primer lugar (44% del total de los metales producidos por fundición). Este crecimiento en la producción puede ser atribuido a las diversas aplicaciones que tiene este metal en diversas áreas, sobre todo en la industria aeronáutica, automotriz y aeroespacial debido a sus excelentes características de resistencia mecánica y peso, que provocó que se sustituyeran piezas de acero y hierro colado por aleaciones de aluminio.

Este incremento continuo en la demanda de producción de aluminio depende de que las piezas satisfagan las altas demandas actuales de calidad que se requieren en las áreas de aplicación ya mencionadas, que son; piezas más ligeras, resistentes y delgadas (que ocupen el menor volumen posible) con el menor costo, menor consumo de energía y maximizando la productividad para competir en calidad y precio con otros materiales. Debido a todos estos requerimientos, en las plantas fundidoras se han tenido que enfocar en el desarrollo de tecnologías sofisticadas y en el cuidado exhaustivo de los procesos en los que se produce y solidifica el aluminio líquido para que se obtenga la calidad deseada. Desde hace dos décadas se ha perseguido producir aluminio y sus aleaciones con niveles óptimos de "limpieza" en el metal líquido para producir piezas coladas de calidad.

Básicamente se quiere librar al aluminio de las siguientes impurezas:

1) Elementos alcalinos y alcalinotérreos como Na, Li, Ca, etc.: El origen del Na en el Al se asocia a la producción de aluminio por el proceso electrolítico de las celdas Hall, este elemento causa grietas en productos laminados y pérdida de fluidez en el líquido, aunque también se usa como un excelente modificador da aleaciones Al-Si. El contenido máximo de Na es de 0.05%.

2) Inclusiones no metálicas: Pueden ser de dos tipos; endógenas (producto de la oxidación superficial del aluminio con la atmósfera por la sobreexposición del metal por la turbulencia dentro de este), como son; Al₂O₃, MgO, MgAl₂O₄ o exógenas (producidas por la degradación de refractarios o por la mala separación de productos de reacción con fluxes, sales que se generan durante la adición de cloro), como son; Al₄C₃, MgCl₂, NaCl, CaCl₂, etc. La presencia de estas inclusiones afecta de manera negativa las propiedades mecánicas del Al, sobre todo la resistencia a la tensión y la resistencia a la cedencia. Se toleran inclusiones menores a 5 micras, pero la presencia de inclusiones de arriba de 20 micras provoca efectos drásticos en la calidad.

3) Hidrógeno disuelto: Este es un problema muy fuerte, ya que el hidrógeno es el único gas soluble en el aluminio líquido. La fuente principal de hidrógeno es la humedad del medio ambiente, pero también cualquier utensilio, los fluxes, las materias primas que se cargan, incluso el recubrimiento cerámico de los hornos sin precalentamiento que pueden contener algo de humedad, los moldes en que se vacía el metal y los combustibles gaseosos y líquidos. Este problema se encuentra en la elevada solubilidad del hidrógeno en aluminio líquido, en su poca solubilidad en estado sólido y en la gran dependencia de la solubilidad con la temperatura.

Durante la solidificación, el sólido que se empieza a formar rechaza al exceso de hidrógeno que contenía en estado líquido hacia el líquido remanente y el hidrógeno supersaturado puede nuclear formando burbujas de gas que generan porosidad en la pieza. La porosidad puede darse también por otras causas, como lo es la diferencia de volúmenes específicos entre el líquido y el sólido. El aluminio sólido presenta menor volumen específico que el Al líquido, entonces cuando el metal solidifica tiende a contraerse. Cuando la pieza tiene formas intrincadas con distintas secciones, puede ocurrir que a nivel macroscópico una zona de la pieza quede aislada al cerrarse una sección y lo que provoca es la presencia de macroporosidad (rechupe localizado); mientras que a nivel dendrítico (microscópico), las dendritas de sólido que van creciendo durante la solidificación pueden impedir que el líquido alimente las contracciones de los brazos secundarios y entonces quedan microporosidades (rechupe disperso). La macroporosidad se ha resuelto fácilmente con el buen diseño de alimentadores y sistemas de colada que proveen metal líquido a regiones que fácilmente pueden presentar rechupes. El problema de la microporosidad es más difícil de atacar y depende de varios factores como la velocidad de enfriamiento, presencia de modificadores, niveles de refinadores de grano y nivel de todos los elementos de aleación.

Se puede distinguir entre un poro provocado por la presencia de hidrógeno, conocido como sopladura y entre otro provocado por contracción o rechupe, ya que la sopladura tiene un contorno redondeado y el poro por contracción tiene un contorno irregular. Sin embargo, se ha demostrado que ambos mecanismos son causantes de la mayoría de los poros en las piezas. Además, se sabe que la presencia de inclusiones ayuda a nuclear heterogéneamente poros de hidrógeno.

La porosidad afecta de forma negativa a las propiedades mecánicas, principalmente a la resistencia a la tensión, a la fatiga y al impacto, ya que los poros son sitios concentradores de esfuerzos donde inician y se propagan fácilmente las grietas que dan origen a las fracturas, además de que provocan una mala apariencia superficial.

En la Tabla 4 se presentan los límites aceptables de hidrógeno disuelto en piezas de aluminio.

Uso de la aleación	Concentración máxima permitida de hidrógeno disuelto
Para extrusión.	0.1 a 0.15 mL H ₂ /100g de Al
Piezas automotrices.	
Latas de bebidas.	\leq 0.1 mL H ₂ /100g de Al
Papel aluminio.	

Tabla 4. Muestra los niveles aceptables de hidrógeno disuelto en piezas de aluminio.

En este trabajo se trata solamente el problema de remoción de hidrógeno disuelto llamado desgasificación. Como se podrá constatar más adelante en el resumen del estado del arte, el conocimiento que se tiene sobre este tema aún no es el suficiente para explicar y cuantificar la cinética de desgasificación de aluminio, por lo cual, se justifica la realización de este trabajo.

1.3 Proceso de remoción de hidrógeno del aluminio.

Recientemente los procesos de desgasificación de aluminio han logrado substanciales mejoras, estrictas regulaciones en los niveles de contaminación, así como incrementos en las demandas de calidad que han obligado a investigar nuevos métodos de desgasificación.

A continuación se hace un breve estudio de los procesos y tecnologías de desgasificación del aluminio, el cual es el tema central de este trabajo.

1.3.1 Termodinámica del proceso.

El contenido de H₂ disuelto en Al dependerá de la temperatura y, en mayor medida, de la presión parcial de H₂ a la que se expone el metal líquido (% humedad). La solubilidad del hidrógeno en aluminio líquido, S (ml H₂/100g Al), se puede representar por la ecuación 1.

Donde P_{H2} = Presión parcial de H_2 (mmHg) y T = Temperatura absoluta.

Existen algunos elementos que provocan una disminución de la solubilidad de H_2 , como son el Zn, Cu y Mn, porque estos elementos provocan una desviación negativa de la actividad del hidrógeno. Sin embargo, existen otros como el Mg, Ti, Ni y Li que favorecen una desviación positiva de la actividad de H_2 y por lo tanto provocan un aumento en la solubilidad de este gas en el aluminio. Lo anterior indica que la solubilidad de H_2 de una aleación de aluminio dependerá también de su composición química. En la Figura 2 se aprecia la solubilidad de H en Al puro y en algunas aleaciones comerciales como función de la temperatura. La siguiente reacción muestra la absorción de H₂ y la oxidación del aluminio líquido:

 $2Al_{liq} + 3H_2O_{(vapor)} \rightarrow Al_2O_3 + 6H_{naciente}$



Fig. 2. Muestra la solubilidad de hidrógeno en diferentes aleaciones de aluminio y su variación con la temperatura.

1.3.2 Técnicas de medición de hidrógeno disuelto en aluminio.

El contenido de hidrógeno puede ser medido experimentalmente a nivel laboratorio y nivel industrial cuantitativamente y con una precisión muy buena, como con los sistemas Telegas[®] y Alscan[®] que pueden ser usados en plantas y el método de fusión al vacío (Leco), de presión reducida y análisis metalográfico, que pueden ser usados en el laboratorio. Estas técnicas permiten un control de H₂ en el baño metálico muy minucioso.

1.3.3 Generalidades de diferentes métodos para remoción de H₂.

El H₂ contenido en el baño metálico puede reducirse de dos maneras; a) Previniendo que el Al absorba H₂, y b) removiendo al H₂ ya absorbido en el baño metálico.

Para desgasificar al Aluminio líquido existen, en general, tres métodos:

1) Desgasificado natural: Consiste en eliminar H_2 disminuyendo la temperatura del fundido para que la solubilidad del gas en el baño metálico disminuya automáticamente. Sin embargo, este método es muy lento y no se aplica en la industria.

2) Desgasificado con vacío: Se basa en la ley de Sieverts, la cual dice que, para nuestro caso, la concentración de un gas disuelto en Al líquido es proporcional a la raíz cuadrada de la presión de hidrógeno, por lo que en este método se usa una atmósfera con una presión parcial de H_2 muy baja, lo cual establece, en el equilibrio, una concentración de H_2 disuelto también muy baja. Como esta técnica requiere de grandes inversiones iniciales de capital no es una técnica muy utilizada industrialmente.

3) Desgasificado con purga de gas: Es la técnica más usada industrialmente, en la que se hacen pasar burbujas de gas libre de H_2 que provocan una diferencia de potencial químico entre el aluminio (con hidrógeno disuelto) y las burbujas de gas de purga (que inicialmente no contienen H_2), la cual es la fuerza motriz que promueve la transferencia de H_2 desde el seno del baño metálico hasta las burbujas, las cuales atraviesan todo el baño metálico (arrastrando H_2) hasta llegar a la superficie y salir a la atmósfera descargando al H_2 que llevan consigo.

Hay tres etapas consecutivas en el mecanismo cinético de desgasificación:

1.- Transporte de H (hidrógeno atómico) a la vecindad de una burbuja de gas inerte por acción de mecanismos de transporte de masa convectivo y difusivo.

2.- Transporte difusivo a través de la delgada capa de fluido que rodea a la burbuja llamada capa límite.

3.- Adsorción química de átomos de hidrógeno en la intercara metal/gas y su posterior desorción como molécula gaseosa.

- 4.- Difusión de hidrógeno gaseoso dentro de la burbuja de gas.
- 5.- Remoción del H₂ al salir con la burbuja.

El mecanismo controlante en la remoción de H_2 es la etapa 2, sin embargo, para baños metálicos ya con poca cantidad de hidrógeno disuelto, puede existir poca fuerza motriz, por lo que el control sería de tipo químico. Entonces, la eficiencia de remoción de H_2 depende de varios factores que determinan la cinética de remoción de H_2 , los cuales se mencionan a continuación:

1).- Tamaño y número de burbujas: Esto se relaciona con el área superficial total de intercara gas/líquido disponible para atrapar hidrógeno. Un tamaño pequeño y un número grande de burbujas proporcionan un área de intercara gas/líquido mayor y por lo tanto mayor rapidez de remoción de H₂.



La Figura 3 muestra el efecto del tamaño de la burbuja en la eficiencia de la desgasificación.

Fig. 3. Muestra el efecto del tamaño de la burbuja en la eficiencia de la desgasificación.

2).- Posición de la burbuja: Si las burbujas están bien distribuidas en el baño, menos distancia tendrán que recorrer los átomos de H para alcanzar una burbuja libre de H₂.

3).- Tiempo de residencia de las burbujas: Mientras mayor es el tiempo de residencia de la burbuja, más hidrógeno puede atrapar y más eficiente es el desgasificado.

4).- Mezclado: El mezclado provee un transporte convectivo rápido de los átomos de H hasta una burbuja, el cual es fundamental cuando el baño se va empobreciendo de hidrógeno, ya que los átomos de H tendrán que recorrer una mayor distancia a la vecindad de una burbuja.

5).- Tipo de gas: Se pueden usar gases inertes (N2 o Ar); el Nitrógeno es un gas incoloro, no corrosivo y no flamable, es inerte excepto cuando es calentado a muy altas temperaturas. Como es un gas no corrosivo, no se requieren materiales especiales para su almacenamiento y control. El Nitrógeno ha sido usado como desgasificante con buenos resultados, su costo es inferior al del Argón, pero los tiempos de desgasificación son más prolongados y consecuentemente se reducen los niveles de producción y aumentan los costos de energía, además no se puede usar para aleaciones Al-Mg, ya que se forman nitruros, y el Argón es un gas monoatómico, incoloro, inodoro, no corrosivo y no flamable. El Argón no reacciona con ningún elemento ni compuesto, por lo que no requiere tanques de almacenamiento ni equipos de control de flujo especiales. Su eficiencia como desgasificante es muy alta y su emisión de contaminantes es nula; la remoción de Hidrógeno es mayor y los tiempos de desgasificación son menores que los del Nitrógeno, por lo que el Ar es el gas de purga más usado industrialmente. También se pueden usar gases reactivos (Cl2 o el Freón), mezclas de estos gases o se puede introducir gas con tabletas de hexacloroetano, que se descompone y forma Cl₂. El Cl₂ ha dejado de usarse por respeto al medio ambiente, ya que es tóxico y corrosivo. Esto ha impulsado el desarrollo de nuevos métodos de desgasificación, tales como, el uso de gases inertes los cuales tienen definitivamente una influencia directa sobre el aumento de la calidad del producto, y en la completa eliminación de los gases contaminantes.

1.3.4 Remoción de hidrógeno con purga de gases.

Hay varias formas de introducir los gases de purga, y en general son 4:

1.- Con lanzas: Son baratas, flexibles, requieren poco mantenimiento, pero como producen burbujas grandes, se concentran en la vecindad de la lanza y no promueven agitación suficiente, no son eficientes para remover H₂.

2.- Lanzas helicoidales (HLP): Tienen varias salidas de gas a través de tapones porosos que proyectan al gas con momentum radial y angular que mejora la dispersión y refina el tamaño de burbujas, sin embargo, no son muy eficientes.

3.- Tapones porosos: Proporcionan burbujas muy finas, pero sin la suficiente agitación y dispersión de burbujas.

4.- Rotores (Impellers): Son los más usados industrialmente y son constituidos por un rotor sostenido de una flecha que gira a alta velocidad angular y posee toberas o ranuras por las que fluye el gas. El corte promovido por el rotor provoca que las burbujas sean muy finas y que salgan con elevados momentos angulares y radiales, por lo que se dispersan por todo el fluido. Con la agitación vigorosa del rotor se presenta un excelente mezclado, que conjuntado con el intercambio de momentum entre las burbujas que ascienden a la superficie y el baño metálico se mejora aún más este mezclado. Esta técnica es la más eficiente y se puede reducir el contenido de hidrógeno del baño en menos tiempo que con otras técnicas de inyección, por lo que esta tecnología es la que domina en la desgasificación de Al que requiere niveles muy bajos de hidrógeno. Otra ventaja de esta técnica es que sirve para remover inclusiones no metálicas y metales alcalinos (Na) y alcalinotérreos (Mg) con muy buenos resultados, con la combinación de invección de fluxes con gases inertes y/o reactivos como en los procesos "Flux Injection/Rotary Degassing" (FI/RD) y Degassing/Fluxing con N₂/Cl₂ en circuito cerrado. Esta técnica puede usarse en proceso batch como en los procesos SNIF de Union Carbide o el proceso de Rapad Deggasing Unit RDU o los procesos MDU, FDU y el sistema GBF y también puede usarse para desgasificado continuo como en los procesos ALCAN o el de la canal con fondo poroso SIGMA. Los nuevos procesos se instalan basados en conocimiento empírico solamente.

Como se acaba de indicar anteriormente, los métodos empleados en la desgasificación del aluminio, se diferencían en dos factores: tipo de desgasificante y medio de inyección. En la Figura 4 se presenta una comparación entre tapones poros, rotores y lanzas y se ve que el rotor es más eficiente al disminuir el H en menos tiempo. En la Figura 5 se aprecia una representación esquemática de un proceso batch de desgasificación y en la Figura 6 se muestran fotografías de modelos físicos en agua, donde se puede comparar el tamaño y distribución de burbujas en lanzas y rotores.

El objetivo de la desgasificación es reducir el nivel del Hidrógeno en el metal líquido, así como el de reducir el número de inclusiones, ya que la formación de porosidad es promovida por la presencia de inclusiones en el metal, ya que éstas actúan como nucleantes para las burbujas durante la solidificación.



Figura 4. Compara la rapidez de desgasificación obtenida con tres distintos sistemas de inyección de gas.



1.3.5 Modelación matemática y/o física.

Como ya se mencionó anteriormente, a pesar de que la desgasificación de aluminio con la técnica rotor-inyector se ha usado intensamente, aún no se logra un entendimiento total del efecto de las principales variables de operación (flujo de gas, velocidad de rotación, tamaño de burbuja) y diseño (geometría de la olla y geometría del rotor), sobre la eficiencia y cinética de desgasificación. Una herramienta muy útil que posee un ingeniero de procesos y que puede ayudar a que se alcance el entendimiento necesario, así como ayudar a controlar, diseñar, predecir, optimizar y analizar a través de fundamentos teóricos el funcionamiento de diversos sistemas, es la modelación física y/o matemática.

Un modelo matemático, en general, es una ecuación o sistemas de ecuaciones algebraicas o diferenciales que representan fenómenos físicos o químicos en procesos metalúrgicos (para nuestro caso).

Existen dos tipos de modelos matemáticos:

1.- Fundamentales o mecanísticos: Se basan en primeros principios de las leyes que rigen la cinética, fenómenos de transporte, termodinámica, metalurgia física y mecánica en un proceso o fenómeno.

2.- Modelos empíricos: Son ecuaciones que relacionan variables dependientes con independientes a través de mediciones experimentales y están correlacionadas estadísticamente.

Cada uno de estos dos tipos de modelos matemáticos tiene sus ventajas y desventajas.

La construcción de un modelo matemático consta de varias etapas; a) Preparación del modelo, b) Formulación matemática, c) Solución (analítica o numérica), d) Validación del modelo, e) Aplicación del modelo al proceso y f) Síntesis (análisis e interpretación de conocimientos y datos generados).

En cuanto a la modelación física, en este trabajo no mencionaremos mucho sobre ella, ya que lo que se trata en este trabajo es, a través de un modelo matemático, representar la fluidinámica del sistema bifásico (líquido y burbujas de gas) que se dan en la olla de refinación de aluminio, por lo que solo basta con decir que en un modelo físico se trata de aproximar a la realidad (de un proceso o sistema) cumpliendo criterios de similitud (geométrica, dinámica, de propiedades, etc.) y puede servir para validar modelos matemáticos como es el caso en este trabajo, en el que el objetivo principal es validar la modelación matemática ya elaborada con las mediciones experimentales hechas en un modelo físico previamente fabricado.

Para la elaboración de modelos matemáticos se utiliza la ayuda de software (como el computacional fluid dynamics o CFD, que es el que se usa en este trabajo) y hardware computacionales y modelos previos (estado del arte).

1.4 Resumen del estado del arte en modelado matemático para procesos de desgasificación de aluminio.

En esta sección se pretende dar un panorama general de la situación actual de la modelación matemática para sistemas de desgasificación de aluminio y sus aleaciones, es decir, se hace una revisión del estado del arte para estos sistemas.

En su trabajo, David V. Neff^[1] da una visión general para comprender el proceso de desgasificación de aluminio, en el cual menciona dos métodos de desgasificación; a) Rotor-inyector y b) Inyección de fluxes, los cuales son los dos con purga de gases que se usan con más frecuencia y la diferencia más grande entre ellos radica en la capacidad de mezclado y por lo tanto de distribución de burbuja, lo cual se realiza mejor en la técnica con rotor-inyector. También establece que al incrementar la temperatura de un baño metálico de Al, incrementa la solubilidad de H₂ en el baño, la cual disminuye críticamente al solidificar la aleación y aquí la solidificación juega un papel muy importante, ya que si se controla, también podrá controlarse en cierta manera la porosidad en la pieza colada. Se establece la existencia de microrrechupes y la porosidad generada por gas (H₂) y se propone que estos dos defectos pueden distinguirse uno del otro, ya que casi siempre, ambos se encuentran combinados como defectos en las piezas. Define el posible origen del H₂ absorbido por

un baño metálico y las formas o técnicas con las que puede ser determinada la cantidad de este gas a nivel industrial y laboratorio. Define los gases de purga que pueden ser usados en estas técnicas; N₂, Ar, halógenos activos y mezclas de estos.

Ya adentrándonos más en el tema de la modelación matemática, encontramos que existen algunos esfuerzos reportados para simular los fenómenos de transporte que ocurren en la desgasificación de aluminio y podemos mencionar a M. A. Ramírez Argáez ^[2] quien menciona que existen principalmente 2 aproximaciones para cuantificar los fenómenos asociados a la desgasificación por la técnica de rotor – inyector;

- a) Balances globales de H₂ en dónde se encuentra una ecuación que describe el cambio en la concentración de H₂ con el tiempo en un proceso batch, donde se involucran parámetros como el coeficiente de transferencia de masa (K), en el que se engloba toda la información física de la cinética de remoción, el cual se obtiene ajustando los datos experimentales, los cuales varían de reactor en reactor. Por esto, la de descripción de la desgasificación con "K" es poco confiable y aunque se ajustan satisfactoriamente los cálculos con las mediciones experimentales, ese valor de K es solo válido para un caso en particular y no se puede escalar un modelo físico a un reactor industrial, o sea que el conocimiento generado es particular y no general.
- b) Modelado de flujo de fluidos bifásicos y transporte de masa para estudiar los patrones de flujo y la estructura turbulenta, así como la dispersión de gas en el reactor.

Uno de los trabajos que más llaman la atención y merece ser mencionado, es el de T. A. Engh y cols. ^[3], quien es uno de los más reconocidos investigadores en este campo. En su trabajo se consideran factores cinéticos y químicos en el uso de gases de purga para remover H_2 del Al fundido. Presenta un modelo de balance global donde se calcula la rapidez de remoción de H_2 con una cinética de primer orden y realiza un balance de masa en un elemento de volumen, donde se propone que la burbujas absorben H_2 conforme ascienden, por lo que la fuerza motriz para absorber H_2 (la presión parcial de H_2 en las burbujas) va disminuyendo y se obtiene que al inicio del proceso la etapa controlante es el transporte de masa y al final hay un control químico. Una de las desventajas de este tipo de modelos es, como ya se mencionó, que ocultan información física de la cinética de remoción de H_2 en el coeficiente de transporte de masa (K), además de que se usan correlaciones empíricas poco confiables para calcular diferentes parámetros como lo es el tamaño de las burbujas.

Como se ve, este tipo de modelos se enmarca dentro de las aproximaciones en que se hace un balance de masa global de H_2 .

Guthrie, S. J. y cols.^[4] habla sobre las técnicas para modelar matemáticamente la inyección de gases en una olla, uno de ellos es el modelo de 2 fases que se subdivide en modelos Eurelianos-Eurelianos y Lagrangianos-Eurelianos. Los primeros resuelven las ecuaciones de conservación tanto para la fase líquida como para la fase gaseosa y estas fases comparten el dominio computacional. La técnica Eureliana- Lagrangiana resuelve las ecuaciones de conservación para la fase líquida y la fase gaseosa que se tratan como una ecuación de trayectoria, en la que las burbujas se comportan como partículas individuales en un marco de referencia Lagrangiano, mientras que la segunda técnica es la modelación de fase cuasi-monofásico en donde se considera la mezcla de gas-líquido como una sola fase.

Lo anterior lo usó Warke y cols. ^{[5], [6]} para hacer un modelo matemático en un campo Eureliano en 3D, donde se simula el flujo de fluidos y la distribución de burbuja (de gas de purga). Este modelo predice la remoción de inclusiones y de H₂ del baño metálico y se validan los resultados con mediciones experimentales de remoción de H₂, sin embargo, no existe mucho realismo en la fluidinámica, ya que se obtienen vectores fuera del dominio de cómputo, lo que se traduce en falta de realismo en la superficie libre del reactor.

Un trabajo que ofrece el realismo necesario a la modelación matemática de desgasificación de Al por la técnica rotor-inyector es el presentado por M. A. Ramírez Argáez y cols. ^[7], el cual presenta un modelo bifásico Eureliano-Eureliano para analizar la fluidinámica y el mezclado en ollas de tratamiento de Al, donde se simula la operación con y sin inyección de gas a través del rotor y se emplea el código PHOENICS para resolver las ecuaciones de continuidad, momento y turbulencia k- ε de forma simultánea para la fase líquida y gaseosa. En este modelo se presenta un gran realismo, ya que se predice la forma del vórtice en la superficie libre y se diseñó apropiadamente la geometría de la olla, por lo que se considera a este trabajo como el estado del arte en modelación matemática para este proceso.

Con lo aquí presentado, podemos ver que existen modelos matemáticos basados en primeros principios, algunos de baja y otros de muy buena calidad, ya que algunos no describen realistamente los fenómenos de transporte en ollas de Al equipadas con rotor – inyector. La tesis que se presenta complementa el modelo ya elaborado en [7] validándolo con simulaciones con un sistema agua-aire, con dimensiones del modelo físico construido en CIATEQ ^[8] y cuyos resultados experimentales poseemos. Esta validación es muy importante para darle certeza al modelo matemático.

1.5 OBJETIVOS.

El objetivo principal de este trabajo, que se enmarca en un proyecto global de modelación física y matemática encaminado a representar un proceso de desgasificación batch con la técnica de rotor inyector, fue validar la modelación matemática ya elaborada con las mediciones experimentales hechas en un modelo físico construido en CIATEQ por Camacho-Martínez ^[8], lo cual implica simular la fluidinámica del modelo físico que es algo que no se ha hecho anteriormente.

Un objetivo particular del modelo es que pueda ser aplicado para analizar las variables y los procesos que gobiernan el fenómeno de desgasificación de aluminio por la técnica rotor-inyector, como son; la velocidad de giro del rotor, el flujo de gas inyectado y tipo de rotor, todo esto para identificar de que manera afectan estas al tiempo y eficiencia de desgasificación y así proponer una combinación óptima de estas variables con la que se pueda obtener piezas de aluminio provenientes de fundición con los estándares de calidad requeridos y de esta forma contribuir en la búsqueda de soluciones en esta problemática no solo de la industria nacional, sino mundial.

CAPÍTULO 2. MODELO MATEMÁTICO

2.1 Descripción del problema.

En la olla de tratamiento de desgasificación de aluminio equipada con rotor-inyector se introduce gas de tratamiento a través de un rotor que gira rápidamente y con el que se dispersan en el interior del baño metálico burbujas de gas muy finas (3-6 mm de diámetro) (ver Figura 6). En la superficie libre se genera un vórtice provocado por la velocidad de giro del rotor. Con el uso de este sistema se pretende disminuir el nivel de hidrógeno en el metal líquido (se obtienen concentraciones de hidrógeno de hasta 0.05 ml/100 g de Al (0.12 wt% H)), así como generar un buen mezclado para homogeneizar la composición química del baño e incluso eliminar algunas inclusiones no metálicas.

Como se mencionó en el capítulo anterior, existen algunos esfuerzos enfocados en la modelación matemática de sistemas de desgasificación de aluminio y sus aleaciones. Esta tesis es un esfuerzo más en el cual se simula la fluidinámica del modelo físico desarrollado por Camacho-Martínez ^[8], además de que se pretende validar la modelación matemática elaborada con las mediciones experimentales obtenidas a partir de este mismo modelo físico. En esta tesis se desarrolló un modelo matemático bifásico Eureliano-Eureliano que se basa en las ecuaciones que rigen los principios de conservación de masa y de momentum tanto para las burbujas como para el líquido. El modelo agua-aire desarrollado pretende representar la fluidinámica del modelo físico que se construyó a escala completa respecto a un reactor piloto (Aluminio-Nitrógeno) ^[8], para lo cual se resolvieron las ecuaciones de continuidad, las ecuaciones turbulentas de Navier-Stokes junto con el modelo de turbulencia *k*- ϵ para simular y predecir los patrones de flujo del modelo físico. La geometría del modelo físico y la formación del vórtice pudieron ser diseñadas apropiadamente, así como la geometría de los 2 rotores utilizados para este trabajo.

En la Figura 7 se presenta el modelo físico simulado matemáticamente y resuelto numéricamente con el código PHOENICS para esta tesis.



Figura 7. Geometría del modelo físico simulado en PHOENICS para esta tesis. 2.2 Suposiciones simplificativas.

Las suposiciones que a continuación se presentan se utilizan en la modelación matemática con el fin de simplificar el problema y facilitar su solución:

1.- Propiedades físicas constantes para ambas fases.

2.- Representación de burbujas por esferas rígidas de tamaño constante en todo el volumen de control (5mm) y no se consideran cambios de tamaño en la burbuja por cambios de presión metalostática, coalescencia o desintegración de burbujas.

3.- Baño isotérmico.

4.- Turbulencia representada por el modelo k- ε en 3-D, el cual es aplicado únicamente a la fase líquida o continua, ya que es donde se generan patrones de recirculación.

5.- La fase continua (líquido) sigue la ley de la viscosidad de newton, por lo que es considerada un fluido newtoniano.

6.- Sistema de coordenadas ajustadas al cuerpo (BFC) de PHOENICS para adaptar la geometría del modelo físico a su forma real.

7.- Se usa un coeficiente interfacial de fricción para describir la fuerza de arrastre que ejerce el gas sobre el líquido.

8.- Flujo de aire constante introducido por el rotor.

2.3 Ecuaciones gobernantes.

Para resolver un problema de dinámica de fluidos en sistemas bifásicos, como es el caso tratado en esta tesis, es necesario resolver las ecuaciones de transporte que gobiernan la fluidinámica y el transporte de masa en el modelo físico de desgasificación de aluminio por la técnica de rotorinyector, basadas en una aproximación Eureliana-Eureliana para flujos bifásicos usando el algoritmo IPSA (Interpenetrating Slip Algorithm) ^[9], las cuales son; a)Ecuación de continuidad para cada fase (aire y agua), b) Ecuación turbulenta de conservación de momentum para ambas fases y c) Ecuaciones de conservación asociadas al modelo de turbulencia k- ε (sólo para la fase líquida). Además, todas las ecuaciones anteriores deben ser resueltas para tres direcciones (r, θ y z).

A continuación son descritas las ecuaciones ya mencionadas.

2.3.1 Ecuación de Continuidad para cada fase.

La ecuación de continuidad representa la conservación de masa en nuestro dominio de cómputo, la cuál debe satisfacerse en todo punto del dominio. Esta ecuación puede aplicarse a fluidos monofásicos o a fluidos multifásicos en los que pueden tener lugar mecanismos de difusión y de dispersión de energía turbulenta y puede ser representada de la siguiente manera:

El primer término es el transitorio, el cual representa la acumulación de masa, el segundo término es el convectivo, el cual representa el transporte de masa por convección y el tercer término es el difusivo, el cual representa la dispersión de burbujas en el líquido debido a la turbulencia desde su entrada hasta que alcanza la superficie libre en agitación. Este último es un término poco común en la ecuación de continuidad, sin embargo, en flujos multifásicos es de vital importancia para representar a una fase dispersa en una fase continua. También se debe tomar en cuenta que en cualquier lugar del dominio se cumpla que la suma de fracciones volumétricas del líquido y el gas sea igual a la unidad (ecuación 3).

$$R_l + R_g = 1$$
.....(3)

2.3.2 Ecuación de conservación de momentum para ambas fases.

Esta ecuación es un balance de fuerzas y escrita como a continuación se presenta (ecuación 4) es la ecuación de conservación de momentum en 3 direcciones (r, θ y z), donde el término de transporte difusivo de momentum (segundo término del lado derecho de la ecuación) es de tipo tensorial, por lo que para cada dirección en donde se requiere hacer un balance de flujo de momentum existe una ecuación distinta.

El término del lado izquierdo de la ecuación es el transitorio, el primer término del lado derecho de la ecuación es el convectivo, que representa el transporte de momento por mecanismos de convección, el segundo término es el difusivo, que representa el transporte de momento por mecanismos de difusión o viscosos, mientras que el tercer término representa a las fuerzas de flotación de los cuerpos o fuerza boyante (de flotación/empuje) que promueve el ascenso de las burbujas de gas debido a que posee menor densidad que el líquido, el cuarto término representa al gradiente de presión y el quinto término es la fuerza de fricción que promueve el intercambio de cantidad de movimiento entre las fases presentes, el cual es de gran importancia en este tipo de procesos, ya que el arrastre ejercido por el gas sobre el líquido contribuye en gran parte a la agitación del baño y tiene la misma magnitud para la fase gaseosa que para la líquida, pero de signo opuesto, sin este término la agitación solo dependería de la velocidad del rotor. Estos últimos tres términos componen al término fuente o de fuerzas de cuerpo en la ecuación y permiten predecir la dispersión radial y la velocidad de ascenso de la burbujas de gas, por lo que es importante que se incluyan en la simulación.

Como se mencionó anteriormente, el término de transporte difusivo de momentum es de tipo tensorial, donde $\tau_{i,j}$ representa al tensor de esfuerzos para ambas fases, por lo que se requiere de ecuaciones constitutivas (esfuerzos newtonianos en coordenadas cilíndricas), con las cuales se obtiene a τ en función de las velocidades o de la deformación y sustituyendo estas ecuaciones en (4) obtenemos las ecuaciones de Navier-Stokes en cada dirección (r, θ y z) (ecuación 5), las cuales son las usadas para desarrollar este modelo. Tomando en cuenta que una de las consideraciones es que tratamos con fluidos newtonianos (μ =cte, ρ =cte) las ecuaciones constitutivas antes mencionadas pueden encontrarse en la bibliografía ^[10]. Se debe resaltar que debido a que el flujo es turbulento, para la fase líquida la viscosidad que aparece en las ecuaciones constitutivas es la viscosidad efectiva (viscosidad turbulenta más viscosidad molecular) y se presenta en la ecuación (6).

La única diferencia entre el significado de los términos de la ecuación (4) y la (5) es la forma de expresar al segundo término del lado derecho de la ecuación, sin embargo, este sigue siendo el término difusivo o viscoso.

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

En la ecuación (6) μ_{ef} es la viscosidad efectiva, μ es la viscosidad molecular, la cual es propiedad del material y μ_t es la viscosidad turbulenta que se obtiene con el modelo de turbulencia *k*- ε .

La fuerza de fricción entre fases, la cual es parte del término fuente en la ecuación (5) está dada por la ecuación (7).

$$F_{fricc} = C_f (V_i - V_{of}) \dots (7)$$

En la ecuación (7) C_f es el coeficiente de fricción, el cuál depende del coeficiente de arrastre C_D . C_f se calcula con la siguiente correlación ^[11]:

$$C_f = \gamma \cdot m \cdot R_l \cdot V_{slip} \dots \dots \dots \dots (8)$$

Donde R_l es la fracción volumétrica del gas, γ es la tensión superficial del líquido, *m* es la masa del metal y V_{slip} es la velocidad de deslizamiento entre las fases ($V_{gas} - V_{líquido}$).

2.3.3 Ecuaciones del modelo de turbulencia k- ε (solo para la fase líquida).

En el modelo de turbulencia k- ε , las ecuaciones de transporte usadas para la energía cinética turbulenta k y su rapidez de disipación ε , son las siguientes:

• Ecuación de conservación de energía cinética turbulenta (k):

$$\frac{\partial(\rho_l K)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_l V_l K\right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{ef}}{\sigma_K} \nabla K\right) + R_l \rho_l \left(G - \varepsilon\right)_{\dots,(9)}$$

En esta ecuación, analizando los términos del lado izquierdo, el primer término es el transitorio, el segundo término es el convectivo. Ahora, analizando los términos del lado derecho, nos encontramos con que el primer término es el difusivo y el segundo es el término fuente, donde G representa la generación de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de velocidad (ecuación (11)).

• *Ecuación de conservación de rapidez de disipación de energía cinética turbulenta* (ε):

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho_l V_l \varepsilon\right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{ef}}{\sigma_{\varepsilon}} \nabla \varepsilon\right) + R_l \rho_l \frac{\varepsilon}{K} \left(C_1 G - C_2 \varepsilon\right)....(10)$$

En esta ecuación también encontramos un término transitorio, término convectivo, término difusivo y término fuente, en el cual también está contenida G y se define también por la ecuación (11).

$$G = \mu_t \left\{ \left(\frac{\partial V_{Z,l}}{\partial r} + \frac{\partial V_{r,l}}{\partial Z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{Z,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{r,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left[\left(\frac{\partial V_{Z,l}}{\partial Z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial \theta} \right)^2 \right] \right\} \dots (11)$$

Para la ecuación (11) la viscosidad turbulenta (μ_t) es función de la energía cinética turbulenta (k) y de la disipación de la energía cinética turbulenta (ϵ), como se indica en la ecuación (12):

Los valores de C_1 , C_2 , C_3 , σ_k , σ_{ε} y C_{μ} que se utilizan en las ecuaciones anteriores, son constantes empíricas que utiliza PHOENICS para flujos turbulentos y están asociadas al modelo de turbulencia k- ε (ver tabla 5).

Constante	C_1	C_2	σ_{K}	σ_{ε}	C_{μ}
Valor	1.44	1.92	1.0	1.31	0.09

Tabla 5. Valores de las constantes usadas en el modelo de turbulencia k-e.*

2.4 Condiciones de frontera.

Para poder obtener una solución particular de nuestro problema, el cual está descrito por un sistema de 10 ecuaciones diferenciales parciales acopladas (hay que resolver ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden en 3 dimensiones), hay que plantear las condiciones de frontera para las derivadas espaciales, así como las condiciones iniciales para las derivadas temporales.

^{*}Nota: σ_K y σ_{ε} son los números de Prandtl turbulento para k y ε respectivamente.

En la Figura 8 se muestran las distintas fronteras en el modelo físico de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor-inyector en coordenadas BFC (Body Fitted Coordinates) y 3D usadas para la simulación.



Figura 8. Fronteras usadas en la simulación del modelo físico de la olla de desgasificación de Al equipada con rotor-inyector.

Como se ve en la Figura 8, la región (L) representa a la frontera de superficie libre, la región (B) a la boquilla del rotor, la región (E₁) al eje, la (P₁) a la pared, la (R) al rotor, la (F) al fondo de la olla y la (FC) a la frontera cíclica. Se usa una frontera cíclica para hacer la simulación solo en la cuarta parte del dominio con el fin de minimizar el tiempo de cálculo, lo que significa que las componentes angulares tendrán los mismos valores en cualquier posición tangencial, sin embargo, hay que aclarar que no hay ejes de simetría axial, solo que la geometría permite dividir al dominio de esta forma.

Las condiciones de frontera que se tienen en el modelo son: en las paredes y en el fondo de la olla hay condiciones de no deslizamiento y de impermeabilidad, así como de cero turbulencia. Sobre el rotor y el eje hay condición de impermeabilidad, además de que se adquiere una velocidad conocida en dirección angular (frontera deslizante) y hay condición de no deslizamiento en dirección axial. En la superficie libre no hay corte viscoso, ya que hay aire gaseoso y el gas inyectado al baño escapa a la atmósfera. En las boquillas el gas entra con una velocidad axial y tangencial. En la frontera cíclica hay condición de continuidad en el flujo.

Las condiciones de frontera se resumen en la tabla 6 que a continuación se presenta.

Parámetro	$\mathbf{E_1}$	R	P ₁	F	B	L	FC
V _{Ql}	V_{RE}	V _{RR}	0	0	0	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial \theta} = 0$
V _{¢g}	V _{RE}	V _{RR}	0	0	V _{RB}	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial \theta} = 0$
V _{r,l}	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial \theta} = 0$
V _{r,g}	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial \theta} = 0$
V _{z,l}	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{z,l}}{\partial \theta} = 0$
$V_{z,g}$	0	0	0	0	V in	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial \theta} = 0$
K	0	0	0*	0*	K _{in}	$\frac{\partial K}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial K}{\partial \theta} = 0$
3	0	0	0*	0*	E _{in}	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} = 0$
R_l	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$	0	0	$\frac{\partial R_l}{\partial \theta} = 0$
R _g	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$	1	$\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial \theta} = 0$

Tabla 6. Condiciones de frontera utilizadas para el modelo matemático (ver figura 8).*Los valores son obtenidos por el paquete de cómputo (PHOENICS) usando las funciones pared para
representar capa laminar cerca de las paredes.

Es importante resaltar que las ecuaciones que gobiernan al problema a resolver presentadas en la sección 2.3 y sujetas a las condiciones de frontera presentadas forman un sistema de ecuaciones diferenciales parciales acopladas, el cual no tiene solución analítica, por lo que son resueltas de forma numérica por el código comercial Computational Fluid Dynamics (CFD) PHOENICS 3.4 utilizando la técnica numérica de volumen de control, de lo cual se hablará más adelante.

2.5 Propiedades Físicas y características geométricas.

A continuación se presentan las propiedades físicas para el sistema agua-aire, así como para el sistema Aluminio-Nitrógeno (ver Tabla 7) y en la Figura 9 y en las Tablas 8 y 9 se presentan las características geométricas del sistema modelado, las cuales corresponden al modelo físico.

Finalmente,	la	Figura	10	presenta	planos	de	los	dos	rotores	empleados	У	que	están	basados	en
diseños indu	stri	iales.													

Propiedad	Aluminio fundido (670 °C)	Agua (20°C)	Nitrógeno	Aire (25 °C)
Viscosidad (µ) [kg/m·s]	2.9×10^{-3}	1.0×10^{-3}	3.8x10 ⁻⁵	1.383x10 ⁻⁵
Densidad (ρ) [kg/m ³]	2700	1000	1.18	1.23
Viscosidad cinemática(v)	$1.07 \mathrm{x10^{-6}}$	1.0×10^{-6}	3.22×10^{-5}	1.124×10^{-5}
[m ² /s]				

Tabla7. Propiedades del aluminio líquido, agua y gases usadas para la modelación.



Figura 9. Dimensiones de la olla generada en la simulación, que a su vez corresponden a las dimensiones del modelo físico.

Parámetro	Modelo Físico y olla simulada.	Equipo Piloto
Diámetro del rotor (mm)	A =106	110
	$\mathbf{B} = 100$	
Altura Total de la olla (mm)	540	600
Diámetro de la olla (mm)	320	360
Velocidad de rotación (rpm)	43, 536 y 800	400
Flujo de gas (lpm)	3.2	3

Tabla 8. Dimensiones principales y flujos de gas del modelo físico y el equipo piloto (en el quese basa el modelo físico).

Condición	
Nivel del agua en el recipiente (cm)	37.5
Altura del rotor respecto a la base del recipiente (cm)	7.5

Tabla 9. Dimensiones usadas para la simulación, las cuales corresponden al modelo físico.



Figura 10. Geometría de los rotores usados para la simulación.
CAPÍTULO 3. **METODOLOGÍA**

En este capítulo se da una descripción sobre el desarrollo experimental con el cual se realizaron mediciones y se obtuvieron resultados en el modelo físico (agua-aire), el cual se basa en un reactor piloto de desgasificación de aluminio equipado con rotor-inyector^[8], así como una descripción del software utilizado y el método de solución numérica que este emplea en la modelación matemática del problema, y que implicó un esfuerzo computacional extenso por la escritura de las subrutinas adecuadas para representar matemáticamente la fluidinámica en un modelo físico de una olla de desgasificado con la técnica rotor-invector.

3.1 Descripción de la obtención de resultados para el modelo físico.

Se construyó un modelo físico (agua-aire) cilíndrico basado en un reactor piloto de desgasificación de aluminio equipado con rotor inyector. A partir de dicho modelo físico se realizó un análisis hidrodinámico utilizando la técnica de velocimetría de imagen de partícula (PIV), con el cual se evaluó el efecto de la velocidad de rotación y la invección de gas para dos diseños de rotores (Figura 10) sobre los campos de velocidad, perfiles de velocidad radial, intensidad de turbulencia (IT) y energía cinética turbulenta (K_T) en un plano axial y cinco planos transversales localizados a diferentes alturas. Se obtuvieron los mapas de vectores bajo diferentes condiciones para los planos mencionados.

Para construir el modelo físico a partir del reactor piloto se tomaron como base criterios de similitud geométrica y dinámica. La similitud dinámica se consiguió igualando los números adimensionales de Froude y Reynolds, que son necesarios para considerar las fuerzas inerciales, viscosas y gravitacionales que dominan el flujo de fluidos en este sistema. El factor de escala utilizado es

 $\left(\frac{v_2}{v_1}\right)^{\frac{2}{3}} = 0.9 \text{ y para escalar la velocidad de rotación del modelo se utilizó un factor de escala de } \left(\frac{v_1}{v_2}\right)^{\frac{1}{3}} = 0.95 \text{, donde } v_1 \text{ y } v_2 \text{ son la viscosidad cinemática del fluido en el modelo físico y en el}$

equipo piloto respectivamente.

El modelo físico consiste en un sistema de rotación a base un motor con control de velocidad, una flecha de nylamid, ambos unidos mediante una junta rotativa, por donde se inyecta un gas. El recipiente cilíndrico es de acrílico transparente, el cual se llenó de agua. Se estudiaron dos diseños de rotores (Figura 10) que se construyeron de Nylmid.

Cada uno de los rotores se colocaron a la misma altura respecto al fondo del recipiente (7.5 cm) tal como se muestra en la Figura 9. Se obtuvieron mapas de vectores para 5 planos transversales a diferentes alturas y uno longitudinal. Los planos transversales se ubicaron a las siguientes alturas respecto al fondo del recipiente; 4, 9, 17, 25.5 y 36 cm, designados con la nomenclatura; h1, h2, h3, h4 y h5 respectivamente. Estos planos se muestran en la Figura 12.



Figura 11. Arreglo experimental construido para obtener resultados experimentales a partir del modelo físico, el cual consta de; 1. Reactor, 2. Recipiente externo, 3. Motor de velocidad variable, 4. Junta rotativa, 5. Flecha de Nylamid, 6. Rotor de Nylamid, 7. Rotámetro, 8. Regulador de presión, 9. Válvula, 10. Cámara de alta velocidad, 11. Sincronizador, 12. Arreglo óptico, 13. Generador de láser, 14. Fuente de poder, 15. Computadora y 16. Espejo plano.

Tal como se observa en la Figura 11, el equipo utilizado por Camacho-Martínez en [8] para la experimentación fue un sistema LASER SOLO PIV marca New wave research Modelo SOLO III 15 Hz sincronizado a una cámara KODAK MEGA PLUS Modelo ES 1.0 (DANTEC Systems). Esta misma Figura 11 muestra el arreglo experimental montado para medir las velocidades del líquido y su estructura turbulenta.



Figura 12. Ubicación del plano de análisis axial A1 y A2 y de los planos transversales h1-h5.

Se utilizó agua corriente con trazadores de poliamida de 50 µm pintados con Rodamina B. Las condiciones de adquisición y análisis fueron las siguientes: se tomaron 50 pares de fotos, un par cada 500 ms, para un total de 25 s por prueba, se hicieron tres repeticiones en diferentes momentos.

Los experimentos se realizaron de acuerdo al diseño experimental que se muestra en las Tablas 8 y 9 y las propiedades termofísicas del agua y aire se muestran en la Tabla 7.

A partir de este modelo físico se obtuvieron mapas de vectores para el corte longitudinal y para los cortes transversales, con ambos rotores con y sin inyección de aire y diferentes velocidades de rotación. Los resultados obtenidos también se muestran en gráficas de perfiles de velocidad en la olla. Al final de este capítulo se presenta un resumen de los casos analizados para realizar la validación de la modelación matemática (tabla 10).

3.2 Modelación matemática.

Como ya se mencionó en los capítulos anteriores, el problema a resolver está regido por un sistema de ecuaciones que debido a su complejidad no tiene solución analítica, por tal motivo es necesario recurrir a la programación estructurada para atacar este tipo de problemas, con la cual se da una solución numérica que es aproximada y discreta.

Para realizar la simulación y modelación matemática del modelo físico de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor-inyector, se usó una computadora Pentium IV® con 512 MB en RAM y 1.6GHz que estaba equipada con el programa de cómputo comercial PHOENICS versión 3.4®, empleado para realizar simulación de flujo de fluidos y fenómenos de transporte que forma parte de los paquetes de cómputo denominados CFD (Computational Fluid Dynamics). El tiempo de cómputo necesario para correr cada simulación fue, en promedio, de 2 horas.

3.2.1 Descripción del software utilizado: PHOENICS.

Existen diversos paquetes de cómputo que emplean diferentes técnicas numéricas para resolver las ecuaciones que rigen a los fenómenos de transporte, estos paquetes se engloban en un tipo de software conocido como CFD (Computational Fluid Dynamics) que realiza simulación de flujo de fluidos, transporte de masa y transporte de energía en diversos procesos. El software puede ser de tipo comercial o gratuito, entre los cuales se encuentran; SIMPLE, CONDUCT, TEACH 2D, PHOENICS, ANSYS, FLUENT, FLOW 3D, PROCAST y CFX. La mayoría de estos programas utilizan el método de volumen de control y elemento finito para dar solución a los problemas, los cuales están programados en el lenguaje FORTRAN, C++ u otros. Para realizar la simulación del

modelo físico de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor inyector se utilizó la programación en PHOENICS versión 3.4 que es un software comercial que emplea el método numérico de volumen de control (ver sección 3.2.2 de este capítulo) para dar solución a las ecuaciones que rigen a este proceso.

PHOENICS es un paquete de programación en el que todos los programas que utiliza pueden englobarse en 3 categorías; *Satellite* que funciona como pre-procesador, *Earth* que funciona como procesador o "solver" y el *Photon* que funciona como post-procesador. La información del problema (ecuaciones gobernantes, condiciones de frontera, condiciones iniciales, geometría requerida, malla utilizada, propiedades de los materiales, parámetros numéricos y modelo de turbulencia a emplear, en resumen se introduce la información matemática para dar vida el problema a resolver) que se quiere resolver se introduce por el usuario por medio de un archivo de texto llamado q1* en un lenguaje de entrada denominado PIL (Phoenix Input Language) que sirve como interfase entre el usuario y el software. En esta tesis, gran parte del trabajo consistió en escribir rutinas en lenguaje PIL para generar q1´s adecuados para representar realistamente la fluidinámica en el modelo físico de desgasificado en una olla con rotor-inyector.

Una vez que son introducidas por medio del q1 las condiciones de un problema en particular, el Satellite se encarga de pre-procesar, compilar o traducir la información de este archivo, para que Earth, el cual es el cerebro del programa, resuelva las ecuaciones con el método de volumen de control. Mientras se están realizando las iteraciones para resolver el sistema de ecuaciones, en la pantalla se muestran gráficos en los que se puede observar si hay una buena convergencia para cada ecuación de conservación y si los porcentajes de error disminuyen. Al terminar las iteraciones, Earth crea dos archivos; Phi y result en los que se guardan los resultados obtenidos para el problema. Una vez que termina la última iteración que resuelve al problema, el Photon permite visualizar gráficamente los resultados de los cálculos efectuados.

*Un ejemplo de un archivo q1 generado para esta tesis es presentado en el apéndice.

3.2.2 Solución: Método numérico de volumen de control.

En el capítulo 2 se realizó una descripción de las ecuaciones que gobiernan el proceso de desgasificación de aluminio con rotor-inyector y haciendo un recuento, en total se tiene un sistema de 10 ecuaciones diferenciales parciales acopladas con sus respectivas condiciones de frontera. Para resolver de manera simultánea este sistema de ecuaciones, el cual no tiene solución analítica, PHOENICS utiliza el método numérico de volumen de control. En este método numérico el dominio se discretiza en elementos de volumen conocidos como nodos y en cada uno de ellos se

integra cada una de las ecuaciones gobernantes. Como resultado de la integración de cada ecuación, se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas lineales que se resuelven numéricamente por medio de técnicas iterativas y se obtiene una solución discreta y aproximada. El método de volumen de control se divide en tres etapas principales:

a) Generación de la malla o discretización del dominio espacial y del tiempo, b) Integración de las ecuaciones gobernantes en cada nodo y c) Solución numérica del sistema de ecuaciones algebraicas asociado.

a) GENERACIÓN DE LA MALLA: COORDENADAS BFC.

Esta etapa del método de volumen de control consiste en dividir el dominio en volúmenes de control finitos colocando puntos nodales en todo el sistema que pueden estar o no espaciados uniformemente. Cada nodo está rodeado por otro volumen de control o celda sin estar traslapados.

Para generar la malla del modelo físico de desgasificación de aluminio equipado con rotor-inyector en 3D, se utilizaron coordenadas BFC (coordenadas ajustadas al cuerpo). En esta discretización, cada punto en el dominio tiene una coordenada radial (r), una angular (θ) y una axial (z). Para la discretización del sistema se emplearon 15 nodos en r, 10 en θ y 48 en z (mientras mayor sea el número de nodos, es decir, mientras más fina sea la malla generada, más aproximada al valor real será la solución) los cuales están espaciados uniformemente en r y en θ y en z están espaciados no uniformemente, debido a que en algunas zonas, como lo es cerca del rotor, se necesita hacer un análisis más detallado del proceso (ver Figura 13).

En esta simulación se generó la olla del modelo físico con sus dimensiones y forma real, lo cual es posible gracias al uso de las coordenadas BFC, que además son apropiadas para flujos internos o externos con fronteras irregulares. Para estos flujos, las coordenadas BFC proveen; representación geométrica apropiada, una apropiada refinación de la malla cerca de la superficie y apropiada representación de las capas límite superficiales, funciones pared y transferencia de calor.



Figura 13. Muestra un ejemplo del sistema generado en PHOENICS (a) y su respectivo enmallado en r - z (b) y en r - θ (c).

Una vez que el dominio está discretizado, se integran las ecuaciones de conservación en cada nodo, lo cual es la clave del método de volumen de control. Esta integración de las ecuaciones se hace con el fin de transformar el sistema de ecuaciones diferenciales parciales en un sistema lineal de ecuaciones algebraicas y aplicando un balance sobre un nodo P (figura 14), estas adquieren la forma:

$$a_{p}\phi_{p} = \Sigma a_{nb}\phi_{nb} + b$$
(13)

Donde las α_p son coeficientes del nodo sobre el que se hace el balance (P), las Φ_p son las variables de transporte para el nodo donde se hace el balance (P), las α_{nb} son los coeficientes de los nodos vecinos y las Φ_{nb} son las variables de transporte de los nodos vecinos y *b* en un término independiente. Todo lo anterior se obtiene para el balance sobre un nodo P afectado por un nodo al oeste y al este (nodos W y E) (ver Figura 14).



Figura 14. Sistema utilizado para hacer un balance de las ecuaciones de conservación sobre un nodo P, el cual se usa en el método de volumen de control.

Ahora, si el nodo sobre el que se realiza el balance es un nodo en la frontera, la ecuación queda de la forma:

Donde las α_B son coeficientes del nodo de la frontera sobre el que se hace el balance, las Φ_B son las variables de transporte para el nodo de la frontera donde se hace el balance y las S_B son los intercambios que pueden haber en la frontera.

c) SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL SISTEMA DE ECUACIONES ALGEBRAICAS ASOCIADO.

Ya obtenidas las ecuaciones discretizadas con la forma de la ecuación (13) o (14) para cada nodo del dominio, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales algebraicas, que al ser resuelto por medio de algún método numérico iterativo se obtienen valores discretos y aproximados de las variables dependientes para cada nodo del dominio.

Existe una manera de representar en una sola ecuación a todas las ecuaciones de conservación, tal como se muestra a continuación:

La ecuación (14) se conoce como ecuación general de conservación o balance, en la que Φ es la cantidad a conservar y Γ incluye diferentes términos dependiendo de la ecuación de conservación que se quiera representar. En esta ecuación, el primer término es el de transporte difusivo de Φ , el segundo es el de transporte convectivo de Φ , el tercero es el término fuente y el término del lado derecho de la ecuación es el transitorio. Entonces, sustituyendo los valores adecuados de ϕ , Γ y S_{ϕ}, se pueden generar todas y cada una de las ecuaciones de conservación.

El hecho de que todas las ecuaciones de conservación tengan la forma de la ecuación (14) implica que la técnica de solución usada por PHOENICS sea la misma sin importar la ecuación de conservación que se quiera resolver. Por lo tanto, PHOENICS resuelve la ecuación (14) dependiendo de los términos de esta que sean activados para generar cada ecuación de conservación en el archivo q1.

3.2.3 Trabajo experimental en computadora.

En el trabajo experimental en computadora se generaron programas (q1) en PHOENICS para realizar la simulación del modelo físico de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor-inyector usando coordenadas BFC para generar la geometría del sistema, de los cuales se anexa una copia en el apéndice. Es necesario resaltar que no se debe perder de vista el objetivo principal de esta simulación, el cual es validar la modelación de flujo de fluidos en la refinación de Al por la técnica rotor-inyector a partir de resultados obtenidos con el modelo físico realizado ^[8].

Se escribieron y desarrollaron archivos q1 para el rotor estándar y el rotor liso (ver Figura 10), ambos con inyección y sin inyección de gas y en todos los casos se utilizaron 536rpm y 800rpm. Solo el caso del rotor estándar sin inyección de gas cuenta con simulaciones a 43rpm, 536rpm y 800rpm. En total se realizaron 9 simulaciones que son comparadas con los resultados obtenidos a partir del modelo físico. Cabe destacar que se presentaron distintos problemas al comparar los resultados de las simulaciones con los del modelo físico y se notó que existe la posibilidad de que se hayan realizado mediciones erróneas al obtener los perfiles de velocidad en el modelo físico o también se estudió la posibilidad de que el material usado para construir el rotor en el modelo físico no fuera el apropiado, ya que al revisar los perfiles de velocidad en la olla obtenidos experimentalmente, los valores de velocidad en el líquido son muy bajos y en la frontera del rotor

nunca se adquiere la velocidad de la condición de frontera (que es la velocidad del líquido dada por la condición de no deslizamiento con un rotor que gira a un valor conocido de revoluciones por minuto), en su lugar se obtiene, también, una velocidad más baja. Esto no ocurre al realizar la simulación con el modelo matemático, ya que en este, la velocidad sobre el rotor siempre alcanza el valor de condición de frontera. Esto nos hace pensar que el material usado para construir el rotor en la modelación física no fue el apropiado, ya que era muy liso, es decir, no había un adecuado intercambio de momentum (fricción) entre el rotor y el líquido, por lo que la agitación fue menor a la esperada en el sistema industrial, lo cual provocó la obtención de medidas de velocidad muy bajas en el modelo físico. Todo lo anterior se tomó en cuenta al elaborar los archivos q1 para la simulación y en cada caso se tomó como condición de frontera la velocidad obtenida en la medición con el modelo físico y se simuló un material cuyas propiedades proporcionaran una muy buena agitación al baño para que la velocidad obtenida sobre el rotor fuera la de condición de frontera.

En la sección 3.2.4 se presenta un resumen de las corridas realizadas para llevar a cabo la validación de la modelación matemática (Tabla 10).

3.2.4 Descripción de las corridas realizadas.

La Tabla 10 presenta un resumen de las corridas realizadas para llevar a cabo la modelación matemática.

Caso	Velocidad de rotación	Velocidad de rotación usada	Tipo de	Flujo de
	reportada en el modelo	en la simulación	rotor	gas
	físico (rpm)	(rpm)		(L/min)
1	536	99	Liso	3
2	800	108	Liso	3
3	536	72	Liso	0
4	800	135.7	Liso	0
5	536	57.3	Estándar	3
6	800	76	Estándar	3
7	43	6.7	Estándar	0
8	536	164	Estándar	0
9	800	187	Estándar	0

Tabla 10. Casos analizados para la validación.

CAPÍTULO IV.

RESULTADOS Y VALIDACIÓN

En este capítulo se presentan los resultados arrojados por la simulación matemática de la olla de desgasificación de Al equipada con rotor-inyector. Se hace una comparación cualitativa y cuantitativa entre los resultados arrojados por la simulación y los resultados obtenidos con mediciones hechas en el modelo físico. En cada gráfico se incluyen las mediciones experimentales hechas a partir del modelo físico, las cuales son usadas para llevar a cabo la validación de la modelación matemática. Con relación a los gráficos presentados en esta sección, estos se trabajaron con la misma escala para todos los casos, con el objetivo de apreciar de una manera más sencilla la similitud en la tendencia de los perfiles de velocidad obtenidos experimentalmente a partir del modelo físico ^[8] y los obtenidos con la simulación realizada en esta tesis.

4.1 Resultados obtenidos para el rotor liso.

A continuación se presenta la comparación cualitativa y cuantitativa de resultados para el rotor liso con inyección y sin inyección de gas a diferentes velocidades de rotación. Se presentan los resultados de las mediciones experimentales obtenidas a partir del modelo físico ^[8] y los resultados que se obtuvieron a partir de la simulación y modelación matemática.

4.1.1 Resultados sin inyección de gas.

La Figura 15 muestra mapas transversales de vectores de velocidad en el líquido para el rotor liso sin inyección de gas a 536rpm en diferentes planos transversales de análisis (h1, h2 y h4, ver Figura 12) simulados numéricamente (derecha) y medidos experimentalmente (izquierda). Se pueden observar perfiles de velocidad parecidos, siguiendo un movimiento angular impartido por el mometum del rotor que gira angularmente.

La Figura 16 muestra los contornos de fracción de gas en un plano de corte longitudinal para el rotor liso sin inyección a 536rpm y 800rpm donde se puede apreciar la formación del vórtice (línea blanca), obtenidos con la simulación, viéndose mayor vórtice a 800 rpm que a 536 rpm.

La Figura 17 muestra los contornos de presión en un corte longitudinal para el rotor liso sin inyección a 536rpm y 800rpm, donde se pueden observar perfiles de presión estratificados axialmente debido a la presión hidrostática, pero conforme crece la velocidad de rotación del rotor se activan gradientes de presión radial (se inclinan los contornos de presión).

La Figura 18 muestra los contornos de viscosidad cinemática turbulenta en un plano longitudinal, obtenidos con la simulación para el rotor liso sin inyección a 536rpm y 800rpm, donde se aprecian zonas de alta turbulencia cerca de la superficie libre y conforme aumentan las revoluciones por minuto de rotación se tiene un flujo muy turbulento cerca del rotor y en general todo el líquido contenido en la olla tiene un régimen mucho más turbulento.

La Figura 19 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para el plano de análisis h2 (ver Figura 12) del rotor liso sin inyección de gas y 536rpm. Se nota una concordancia excelente entre ambos perfiles.



Figura 15. Cortes transversales de la olla que muestra los mapas de vectores para el rotor liso sin inyección de aire a 536rpm; a), b) y c) Obtenidos de las a partir del modelo físico correspondientes a los planos h1, h2 y h4 respectivamente (la magnitud del vector de referencia es 0.1 m/s); d), e) y f) Obtenidos a partir de la simulación y correspondientes a los mismos planos (la magnitud del vector de referencia es 0.2 m/s).



Figura 16. Cortes longitudinales de la olla simulada, donde se muestran los contornos de fracción de gas para el rotor liso sin inyección de gas; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 17. Cortes longitudinales de la olla simulada que muestran los contornos de presión para el rotor liso sin inyección de gas; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 18. Cortes longitudinales de la olla simulada, donde se presentan los contornos de viscosidad cinemática turbulenta para el rotor liso sin inyección; a) 536rpm y b) 800rpm.

Rotor LISO sin inyección de gas a 536rpm(h2)



Figura 19. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidad simulado y el obtenido experimentalmente en el plano h2 del rotor liso sin inyección de gas y a 536rpm.

4.1.2 Resultados con inyección de gas (3 l/min)

La Figura 20 muestra cortes transversales donde se comparan los mapas transversales de vectores de velocidad en el líquido para el rotor liso con inyección de gas a 536rpm en diferentes planos de análisis (h1, h2 y h4, ver Figura 12), para los resultados obtenidos con la simulación y los obtenidos a partir del modelo físico. Se pueden observar perfiles de velocidad cualitativamente muy parecidos, predominando aún el movimiento angular del giro del rotor. Es decir, la inyección de gas no cambia el hecho de que el flujo es dominado por la transmisión de momentum desde el rotor.

La Figura 21 muestra cortes longitudinales de los contornos de fracción de gas obtenida a partir de la modelación matemática para el rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm donde se puede apreciar la formación del vórtice (línea blanca) y el gas inyectado que sale por debajo del rotor en ambos casos. Nuevamente se aprecia con esta figura el vórtice formado que aumenta al incrementarse la velocidad angular del rotor, pero que con inyección de gas se ve un poco menor que sin inyección de gas (Fig.16).

La Figura 22 muestra cortes longitudinales de los contornos de presión calculados para el rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se puede observar que con inyección de gas y a altas revoluciones por minuto del rotor, los gradientes de presión radial disminuyen en relación al caso sin inyección.

La Figura 23 muestra cortes longitudinales de los contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación numérica para el rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se aprecia en general mayor turbulencia en el líquido con la inyección de gas que en el caso sin inyección de gas (Fig. 18).

La Figura 24 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para el plano de análisis h2 (ver Figura 12) del rotor liso con inyección de gas y 536rpm. Se nota una concordancia muy buena entre ambas curvas, por lo que el modelo con inyección también ha sido validado.

La Figura 25 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para el plano de análisis h1 (ver Figura 12) del rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se observan tendencias similares entre los perfiles de velocidad calculados y los medidos experimentalmente.



Figura 20. Cortes transversales de la olla, donde se comparan de los mapas de vectores para el rotor liso con inyección de aire a 536rpm; a), b) y c) Medidos experimentalmente y correspondientes a los planos h1, h2 y h4 respectivamente (la magnitud del vector de referencia es= 0.1 m/s); d), e) y f) Obtenidos a través de la simulación, correspondientes a los mismos planos (la magnitud del vector de referencia es= 0.3 m/s).



Figura 21. Cortes longitudinales de la olla que muestran los contornos de fracción de gas para el rotor liso con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 22. Cortes longitudinales de la olla que muestran los contornos de presión para el rotor liso con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 23. Cortes longitudinales de la olla, donde se muestran los contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor liso con inyección; a) 536rpm y b) 800rpm.

Rotor LISO con inyección a 536rpm (h2)



Figura 24. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales en el plano h2 del rotor liso con inyección de gas y 536rpm.



Rotor LISO con inyección de gas a 800 rpm y 536rpm (h1)

Figura 25. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) en el plano h1 del rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm.

4.2 Resultados obtenidos para el rotor estándar.

En esta sección se presenta la comparación cualitativa y cuantitativa de resultados para el rotor estándar con y sin inyección de gas a diferentes velocidades de rotación. Se presentan los resultados de las mediciones experimentales obtenidas a partir del modelo físico ^[8] y los resultados que se obtuvieron con la simulación y modelación matemática.

4.2.1 Resultados sin inyección de gas.

La Figura 26 muestra, en un corte longitudinal, la comparación cualitativa entre los mapas de vectores de velocidad del líquido obtenidos a partir de mediciones realizadas en el modelo físico y a partir de la simulación y modelación matemática a 536rpm y 800rpm para el rotor estándar sin inyección de gas. Se pueden observar perfiles de velocidad parecidos, donde se presentan 2 recirculaciones: una abajo y la otra arriba del plano del rotor. Se aprecia como característica del patrón de flujo obtenido con este rotor, que el fluido es dirigido radialmente desde el rotor hacia la pared de la olla, lo cual provoca sin duda esta doble circulación vista en el plano r-z. Sin embargo, se debe de tener en cuenta que sigue existiendo un fuerte movimiento angular en el fluido debido al giro de rotor (ver Fig. 20).

La Figura 27 muestra cortes longitudinales de los contornos de fracción de gas calculados para el rotor estándar sin inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se puede apreciar la formación del vórtice (línea blanca), aunque estos vórtices se ven menores que con el rotor liso (Fig. 16).

La Figura 28 muestra cortes longitudinales de los contornos de presión calculados para el rotor estándar sin inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se pueden observar zonas de baja presión justo debajo del rotor, debido al diseño del mismo.

La Figura 29 muestra cortes longitudinales de contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor estándar sin inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se aprecia en general mayor turbulencia generada con el rotor liso que con el rotor estándar, aunque la estructura turbulenta generada por el rotor estándar es más homogénea que con el rotor liso (ver Fig. 23).

La Figura 30 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre los perfiles de velocidades arrojados por la simulación y los obtenidos con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h1 y h2 (ver Figura 12) del rotor estándar sin inyección de gas y

536rpm. Se puede notar una concordancia entre ambas curvas del plano h2, pero diferencias entre los perfiles para el plano h1.

La Figura 31 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre los perfiles de velocidades arrojados por la simulación y los obtenidos con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h1 y h2 (ver Figura 12) del rotor estándar sin inyección de gas y 800rpm. Para h1 vemos una mayor diferencia entre los perfiles de velocidad y para h2 se ve una tendencia similar o mejor concordancia.

La Figura 32 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre los perfiles de velocidades arrojados por la simulación y los obtenidos con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h1, h2 y h3 (ver Figura 12) del rotor estándar sin inyección de gas y 43rpm *. En este caso, comparando vemos que los perfiles de velocidad simulados y los medidos experimentalmente presentan buenas concordancias en los planos h2 y h3 pero no tan buena en el plano h1.

La Figura 33 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre los perfiles de velocidades arrojados por la simulación y los obtenidos con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h4 y h5 (ver Figura 12) del rotor estándar sin inyección de gas y 43rpm *. Vemos una mayor diferencia entre los perfiles de velocidad simulados y los medidos experimentalmente en h5, mientras que en h4 se ve una tendencia más parecida entre estos perfiles.



Figura 26. Cortes longitudinales de la olla donde se presentan mapas de vectores para el rotor estándar sin inyección de gas; a) y b) medidos experimentalmente en el modelo físico a
536rpm y 800rpm respectivamente y c) y d) obtenidos a partir de la simulación y modelación matemática a 536rpm y 800rpm respectivamente.

*Debido a que los valores de velocidad obtenidos para 43rpm sin inyección de gas en el rotor estándar son muy pequeños, se utiliza una escala diferente a todos los casos presentados anteriormente con el objetivo de apreciar de mejor manera el comportamiento de los perfiles de velocidad y por ende la similitud entre los perfiles de velocidad obtenidos a partir de las mediciones experimentales realizadas con modelo físico y los obtenidos con la simulación de dicho modelo en esta tesis.



Figura 27. Cortes longitudinales de contornos de fracción de gas para el rotor estándar sin inyección obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 28. Cortes longitudinales donde se presentan contornos de presión para el rotor estándar sin inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 29. Cortes longitudinales de contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor estándar sin inyección; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 30. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente en los planos h1 y h2 del rotor estándar sin inyección de

gas y 536rpm.



Figura 31. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente en los planos h1 y h2 del rotor estándar sin inyección de gas y 800rpm.

Rotor ESTÁNDAR, sin inyección de gas y 43rpm (h1, h2 y h3)



Figura 32. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente en los planos h1, h2 y h3 del rotor estándar sin inyección de gas y 43rpm.



Figura 33. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente en los planos h4 y h5 del rotor estándar sin inyección de gas y 43rpm.

4.2.2 Resultados con inyección de gas (3 l/min).

La Figura 34 muestra los contornos de fracción de gas, la Figura 35 los contornos de presión y la Figura 36 los contornos de viscosidad cinemática turbulenta calculados para el rotor estándar con inyección de gas a 536rpm y 800rpm, donde se aprecian las mismas tendencias en estas variables observadas y ya comentadas para el rotor liso con inyección de gas. Aunque se aprecia que con este rotor se disminuye notablemente el vórtice con inyección de gas, lo cual también se refleja en contornos de presión más planos.

La Figura 37 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h1 y h2 (ver Figura 12) del rotor estándar con inyección de gas y 536rpm. Se observa que los perfiles de velocidad calculados y medidos presentan una gran similitud.

Igualmente, la Figura 38 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para los planos de análisis h4 y h5 (ver Figura 12) del rotor estándar con inyección de gas a 536rpm. Se observa una tendencia no tan parecida entre cada perfil de velocidades.

Finalmente, la Figura 39 (velocidad v.s. radio de la olla) muestra la comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para el plano de análisis h1 (ver Figura 12) del rotor estándar con inyección de gas a 800rpm. Se observa una tendencia parecida entre los perfiles de velocidad.



Figura 34. Contornos de fracción de gas para el rotor estándar con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 35. Contornos de presión para el rotor estándar con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 36. Contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor estándar con inyección; a) 536rpm y b) 800rpm.



Figura 37. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales en los planos h1 y h2 del rotor estándar con inyección de gas y 536rpm.



Rotor ESTÁNDAR con inyección de gas y 536rpm

Figura 38. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales en los planos h4 y h5 del rotor estándar con inyección de gas y 536rpm.



Figura 39. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales en el plano h1 del rotor estándar con inyección de gas y 800rpm

CAPÍTULO V. ANÁLISIS DE RESULTADOS.

En este capítulo se realiza el análisis de los resultados presentados en el capítulo 4.

5.1 Análisis del efecto de las variables del proceso sobre la fluidinámica del sistema.

En esta sección se analiza el efecto de las variables de proceso que fueron tratadas en esta tesis y se evalúa globalmente la validación hecha del modelo matemático.

5.1.1 Efecto de la velocidad de giro del rotor.

La velocidad de giro que tiene el rotor es un parámetro muy importante, ya que se encontró que la principal fuente de energía de mezclado o agitación en la olla es aportada por el giro del rotor, es decir, el giro del rotor es el principal responsable de que exista movimiento en el fluido, tal como se puede apreciar en los perfiles de velocidad obtenidos con la simulación numérica, donde vemos que las velocidades de mayor magnitud se encuentran en el plano h2 (ver Figuras 19, 24, 25, 30, 31, 32, 33, 37, 38 y 39) y se aprecia que cuanto más cerca se esté del rotor, mayor será la magnitud de la velocidad que se adquiera, esto debido a que el líquido advacente al rotor adquiere la velocidad de éste por el transporte de momento existente entre ambos, por lo que también, a mayores velocidades de giro del rotor, en general, se obtienen mayores velocidades en todo el dominio, tal como se puede apreciar en los perfiles de velocidad obtenidos para diferentes planos de análisis con el rotor liso y estándar con inyección y sin inyección de gas a distintas rpm, donde también vemos que cerca de las paredes de la olla la velocidad disminuye debido a que se empieza a alcanzar la condición de no deslizamiento en la pared (cero velocidad). También es importante destacar que la componente angular de los vectores es la que predomina, debido a que, como ya se dijo, el momento angular transferido por el giro del rotor es el que mayor efecto tiene sobre los patrones de flujo, o sea que, esta componente es de mayor magnitud en comparación con la componente radial y axial, tal como se ve en las Figuras 15 y 20 de cortes transversales en diferentes planos axiales de análisis para el rotor liso sin inyección y con inyección de gas respectivamente, por lo que se puede corroborar que el giro del rotor es el que promueve, en demasía, la agitación del baño. A consecuencia de aumentar la velocidad de giro del rotor, se produce un aumento en la turbulencia (aumento en el número de Reynolds), tal como se aprecia en las figuras de contornos de viscosidad cinemática turbulenta sin inyección y con inyección de gas para el rotor liso y estándar (ver Figuras 18, 23, 29 y 36), estos contornos de viscosidad cinemática turbulenta están ligados íntimamente al mezclado del baño y en ellos podemos apreciar que a mayores velocidades de giro del rotor se obtiene una mayor turbulencia, lo que implica mejor agitación, esto debido a que la energía mecánica suministrada por el eje y el rotor para que se lleve a cabo la agitación es absorbida y transformada en energía cinética turbulenta por el líquido, la cual actuará como energía de mezclado, por lo que se deduce que a mayor velocidad de giro del rotor se tendrá una mejor agitación en el baño y una mejor dispersión de burbujas en la olla y al mismo tiempo generación de burbujas más finas en el proceso, lo cual es importante para homogeneizar la temperatura y composición química del mismo, así como promover una cinética de desgasificación más rápida y arrastre de inclusiones en un proceso de desgasificación de aluminio líquido. Sin embargo, hay que tomar en cuenta que la formación del vórtice, que es indeseable en este tipo de operaciones, se favorece al aumentar la velocidad de giro del rotor, tal como se ve en las Figuras 16, 21, 27 y 34 de contornos de fracción de gas para ambos rotores con y sin invección de gas y diferentes velocidades de rotación, lo cual es provocado por el giro del rotor y está ligado al balance entre las fuerzas centrífugas asociadas a la rotación y las fuerzas de presión en dirección r, así como al balance entre el peso del fluido y la presión provocada por la columna de fluido, y de estas fuerzas, como siempre se tiene el mismo nivel de fluido y por ende el mismo peso, la que en realidad determina la formación y el tamaño del vórtice es la fuerza centrífuga. Ahora, si vemos las Figuras 17, 22, 28 y 35 donde se presenta un corte longitudinal de la olla con los contornos de presión generados sin inyección y con inyección de gas para el rotor liso y estándar, vemos que al disminuir la velocidad de giro del rotor, se tienen contornos de presión más planos y la formación del vórtice es promovida por las zonas de baja presión que se presentan en la región adyacente a la flecha y al rotor. Según lo anterior, podemos decir que a mayor velocidad de giro del rotor, se tendrán vórtices más pronunciados, por lo que no podemos decir que para lograr una desgasificación más eficiente sea idóneo utilizar las velocidades de giro más altas. Es necesario señalar que la franja de contornos que se presenta en la zona de la superficie libre (Figuras 18, 23, 29 y 36) se debe a errores numéricos en la simulación conocidos como "difusión numérica"^[12], ya que debería verse solo una línea que definiera claramente la forma que adquiere la superficie libre, sin embargo, esto no sucede. La "difusión numérica" es muy común al simular superficies libres.

Un fenómeno interesante observado en la simulación del rotor estándar es la formación de "ojos de recirculación", tal como se ve en la Figura 26 que muestra la comparación entre los cortes longitudinales de mapas de vectores de la olla simulada y de los medidos experimentalmente en el modelo físico para el rotor estándar sin inyección de gas a 536 y 800rpm, en donde se observa que estos ojos de recirculación se presentan a mayores velocidades de rotación, como es el caso del rotor estándar sin inyección a 536 y 800rpm, lo cual explica el porqué en ninguna otra simulación realizada en esta tesis se presentan (ver tabla 10), ya que en estas, las velocidades de giro del rotor son más bajas. Como es de suponerse, la formación de los ojos de recirculación promueven una buena turbulencia en la olla, lo cual es benéfico para la óptima agitación del baño, además de que ayudan a la buena dispersión de burbujas en la olla.

La presencia en el rotor estándar de flujo de líquido dirigido radialmente desde el rotor a la pared se debe al diseño del mismo, el cual presenta un hueco en la parte inferior, que al girar provoca una caída de presión. Esta caída de presión succiona fluido (se bombea líquido) que luego es expulsado radialmente por las ranuras del rotor estándar. Entonces, la geometría o el diseño del rotor juega un papel importante en la agitación de la olla y por ende en el mezclado y la desgasificación del aluminio.

5.1.2 Efecto de la inyección de gas.

El efecto que tiene la inyección de gas en la desgasificación de aluminio es de vital importancia en este proceso, ya que con ella se promueve el arrastre de inclusiones que pudieran estar presentes en el baño y la absorción y remoción de hidrógeno disuelto en este.

En este estudio se encontró que la inyección de gases produce un aumento en la turbulencia, tal como se puede apreciar en las Figuras 18, 23, 29 y 36, en donde se puede hacer una comparación entre los contornos de viscosidad turbulenta con inyección y sin inyección de gas para ambos rotores, este aumento en la magnitud de la viscosidad cinemática turbulenta al inyectar gases se debe a que la fuerza de arrastre que ejercen sobre el líquido las burbujas de gas inyectadas se suma como un término extra a la energía que promueve el giro del rotor, para de esta forma generar más energía de mezclado, lo cual obviamente propicia una mejor agitación en el baño y por lo tanto una mejor dispersión de burbujas de gas para una desgasificación más eficiente.

Comparando las Figuras 16, 21, 27 y 34 donde se muestran los contornos de fracción de gas para el rotor estándar y liso con y sin inyección de gas, se puede apreciar que con la inyección de gas se inhibe un poco la formación del vórtice, lo cual se debe al momentum ascendente que lleva el gas y que choca con la superficie libre, el cual inhibe un poco la formación del vórtice. Considerando que la formación del vórtice es indeseable en la desgasificación de aluminio en ollas equipadas con rotor-inyector, se puede afirmar que resulta benéfico inyectar gases en este proceso.

5.1.3 Efecto del tipo de rotor.

El tipo del rotor utilizado en la operación de desgasificación de aluminio con rotor-inyector juega un papel importante en la agitación y dispersión de burbujas en el baño. A continuación se hace un análisis de la influencia en el diseño del rotor en operaciones de este tipo. Si analizamos los perfiles de velocidad obtenidos con la simulación numérica, así como los obtenidos con mediciones experimentales hechas en el modelo físico (Figuras 19, 24, 25, 30, 31, 32, 33, 37, 38 y 39) y nos enfocamos en comparar las magnitudes de velocidad obtenidas con el rotor liso y las obtenidas con el rotor estándar con inyección y sin inyección de gases, podemos apreciar que al inyectar gases a través del rotor liso se obtienen magnitudes de velocidad mayores en todo el dominio que sin la inyección, en cambio, con el rotor estándar sucede lo contrario, es decir, las magnitudes de velocidad obtenidas con inyección de gas resultan ser menores a las obtenidas sin la inyección de gas, esta diferencia entre rotor liso y estándar se debe directamente al diseño de los rotores, ya que la descarga de gas para el rotor liso es por debajo de él, mientras que en el rotor estándar se descarga gas a través de ranuras laterales, lo cual interfiere con la transferencia de momentum angular entre el rotor y el fluido, porque el gas que fluye impide un mejor contacto entre el rotor y el líquido, esto ocasiona la obtención de velocidades más bajas con la inyección de gas por debajo, que es como se realiza con el rotor liso, por lo cual las velocidades encontradas al inyectar gas son de mayor magnitud en todo el dominio.

Como ya se había mencionado antes, si observamos la Figura 26 de mapas de vectores para el rotor estándar sin inyección de gas, vemos que se presentan patrones de recirculación. Una de las causas para que se presenten estos patrones de recirculación es, además de la elevada velocidad de giro del rotor, la presencia de zonas de baja presión justo debajo del rotor estándar, debido al hueco que este rotor tiene, tal como se aprecia en la Figura 28 de contornos de presión en un corte longitudinal de la olla para 536rpm y para 800rpm del rotor estándar sin inyección de gas, entonces el rotor actúa como una bomba de succión y, como ya se dijo, justo debajo de él existe una caída de presión, por lo que el líquido es succionado y posteriormente expulsado a través de las ranuras del rotor en dirección radial a gran velocidad, por lo que se genera un flujo dirigido hacia las paredes de la olla lo cual promueve la formación de los ojos de recirculación. Estos patrones de recirculación generan una mejor agitación en la olla.

Como es de suponerse, la geometría del rotor liso permite que únicamente se imparta un momento angular con su giro, en cambio, con el rotor estándar se imparte, además del momento angular proporcionado por su giro, una componente radial de momento debido al efecto de succión y expulsión de líquido a través de sus ranuras laterales, sin embargo, se encontró que se genera mayor turbulencia con el rotor liso que con el rotor estándar (ver Figuras 18, 23, 29 y 36) aunque la estructura turbulenta con el rotor estándar es más homogénea que en el rotor liso. Además se encontró, comparando los contornos de fracción de gas para el rotor liso y estándar con y sin

inyección de gas, que con el rotor liso se generan vórtices más pronunciados, aunque con la inyección de gas estos se ven un poco inhibidos.

El diseño del rotor juega un papel muy importante, ya que con el rotor liso el gas sale predominantemente por el fondo del rotor, mientras que con el rotor estándar algo del gas sale por las ranuras laterales y el giro del rotor rompe el chorro de gas en burbujas finas, lo cual es benéfico para el proceso de desgasificación. Es decir, el rotor estándar sería mejor que el rotor liso para generar burbujas chicas que aceleran el desgasificado del aluminio al proveer mayor área interfacial gas-líquido.

5.2 Validación.

En esta tesis se simuló la fluidinámica que se genera en el modelo físico de la olla de refinación de Aluminio equipada con rotor-inyector generado en [8], utilizando el modelo de turbulencia k- ε en 3D y con ayuda del código comercial PHOENICS.

A partir de los resultados obtenidos con la simulación numérica y su comparación con los resultados obtenidos a partir de mediciones hechas en el modelo físico, se obtuvo lo siguiente:

- Existe una excelente concordancia en la anatomía que presentan los mapas de vectores de velocidad del líquido para el rotor liso con inyección y sin inyección de gas en los diversos planos transversales de análisis (h1, h2 y h4) (ver Figuras 15 y 20).
- Se presenta una excelente concordancia en los perfiles de velocidad para todos los planos de análisis h2.
- Existe una buena concordancia en los perfiles de velocidad para los planos transversales de análisis h3.
- Se logró obtener una concordancia regular en los perfiles de velocidad para los planos de análisis h1, h4 y h5.
- La estructura en el flujo obtenida para el rotor estándar sin inyección de gas y 536rpm y 800rpm, muestra una excelente concordancia (ver Figura 26).

En conclusión, como se puede apreciar en los resultados presentados y tomando en cuenta que el flujo simulado es en demasía complejo en este tipo de operaciones, queda claro que se logró validar satisfactoriamente la modelación matemática ya elaborada con las mediciones experimentales hechas en un modelo físico construido en CIATEQ por Camacho-Martínez ^[8], por lo que se concluye que se logró simular adecuadamente la fluidinámica del modelo físico y por lo tanto el objetivo de la tesis se alcanzó satisfactoriamente.

CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES.

En esta tesis se desarrolló un modelo matemático Eureliano-Eureliano utilizando el modelo de turbulencia k- ε en 3D, que con ayuda del código comercial PHOENICS simula la fluidinámica del sistema bifásico (líquido y burbujas de gas) que se genera en el modelo físico de la olla de refinación de Aluminio equipada con rotor-inyector. Esto con el fin de validar la modelación matemática a partir de los resultados obtenidos de mediciones experimentales realizadas en el modelo físico. Los resultados numéricos y gráficos obtenidos con la simulación fueron comparados y analizados y a partir de ellos se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- Imponiendo condiciones de frontera experimentales en la simulación numérica del modelo físico de la olla de desgasificación de aluminio equipada con la técnica de rotor-inyector, se predicen muy satisfactoriamente los perfiles de velocidad del líquido en todos los planos transversales de la olla ubicados a la altura del rotor (h2, ver Figura 12), se predicen de buena forma los perfiles de velocidad en los planos de análisis inmediatos arriba del rotor (h3, ver Figura 12) y se predicen con una concordancia regular los perfiles de velocidad en los planos h1 (plano transversal ubicado debajo del rotor), h4 y h5 (planos transversales a la olla cercanos a la superficie libre). De igual forma se predicen con una concordancia excelente la anatomía que presentan los mapas de vectores de velocidad del líquido para el rotor liso con inyección y sin inyección de gas en los diversos planos transversales de análisis (h1, h2 y h4, ver Figura 12), así como los patrones de recirculación en la estructura del flujo obtenida para el rotor estándar sin inyección de gas y 536rpm y 800rpm.
- Los patrones de flujo son predominantemente angulares por el giro del rotor, aunque con el diseño del rotor estándar se forman dos recirculaciones en el plano r-z con componentes radiales y axiales de la velocidad del líquido.
- Se realizó satisfactoriamente la validación de la modelación matemática ya elaborada con las mediciones experimentales hechas en un modelo físico construido en CIATEQ por Camacho-Martínez^[8], por lo que se logró simular satisfactoriamente la fluidinámica de este modelo físico.

Se analizó el efecto de la velocidad de rotación, la inyección de gas y el tipo de rotor en la fluidinámica del sistema, obteniendo lo siguiente:

a) Efecto de la velocidad de giro del rotor:

El giro del rotor es el principal responsable de que exista movimiento en el fluido y la componente angular de los vectores es la que predomina en el flujo. Al aumentar la

velocidad de giro del rotor, se produce un aumento en la turbulencia, lo que implica mejor agitación y mejor dispersión de burbujas en la olla para los casos con inyección de gas, que es importante para homogeneizar la temperatura y composición química del mismo, así como promover la desgasificación y arrastre de inclusiones en un proceso de desgasificación de aluminio líquido.

- La formación del vórtice es indeseable en este tipo de operaciones y a mayor velocidad de giro del rotor, se tendrán vórtices más pronunciados.
- Los ojos de recirculación se presentan a mayores velocidades de rotación, promueven una mayor turbulencia en la olla, una buena agitación del baño y una buena dispersión de burbujas.

b) Efecto de la inyección de gas:

- Con la inyección de gas se promueve el arrastre de inclusiones que pudieran estar presentes en el baño y la absorción y remoción de hidrógeno disuelto en este. La inyección de gases produce un aumento en la turbulencia de la olla, propicia una mejor agitación en el baño y una mejor dispersión de burbujas de gas para una desgasificación más eficiente.
- Con la inyección de gas se inhibe un poco la formación del vórtice. Considerando que la formación del vórtice es indeseable en la desgasificación de aluminio en ollas equipadas con rotor-inyector, se puede afirmar que resulta benéfico inyectar gases en este proceso.

c) Efecto del tipo de rotor empleado:

- Al inyectar gases a través del rotor liso se obtienen magnitudes de velocidad mayores en todo el dominio que sin la inyección de gas y con el rotor estándar sucede lo contrario.
- Con el rotor estándar sin inyección de gas se presentan patrones de recirculación, los cuales generan una mejor agitación en la olla.
- Se genera mayor turbulencia con el rotor liso que con el rotor estándar aunque la estructura turbulenta obtenida con el rotor estándar es más homogenea.
- Con el rotor liso se generan vórtices más pronunciados, aunque con la inyección de gas estos se ven un poco inhibidos.
- El diseño del rotor es muy importante, ya que con el rotor liso el gas sale por abajo del rotor y con el estándar sale por las ranuras lo que favorece la formación de burbujas finas que mejoran la cinética de desgasificación.

En un proceso de desgasificación de aluminio es deseable tener una buena agitación en el baño y además se busca que el tiempo de residencia de las burbujas en el baño sea el máximo posible, todo

esto con el fin de lograr una temperatura y composición química homogéneas, además de que se logre obtener una mayor remoción de inclusiones y principalmente se tengan tiempos de desgasificación más cortos y más eficientes. Con la desgasificación por medio de rotor-inyector, la inyección de gas y el giro del rotor promueven una adecuada y más eficiente desgasificación, ya que las burbujas de gas inyectadas se desintegran por la acción de giro del rotor, generando burbujas de gas de menor tamaño, lo cual implica una mayor área interfacial disponible para absorber hidrógeno y remover inclusiones presentes en el baño, además de que se tiene una muy buena agitación que es indispensable para distribuir a las burbujas en toda la olla.

Aunque en este trabajo no se analizó como tal la simulación numérica de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor inyector, sino solo la fluidinámica del modelo físico agua-aire, tomando en cuenta los resultados y conclusiones obtenidos, se puede intuir que las condiciones óptimas en este proceso de desgasificación con la técnica de rotor-inyector se tendrían con el uso de un rotor estándar con inyección de gas y una velocidad de giro entre 536rpm y 800rpm, ya que con estas condiciones se generaría una buena y homogénea turbulencia que otorgaría una buena agitación y distribución de burbujas en la olla, por lo que se tendrían tiempos de tratamiento cortos y más eficientes, aunque la agitación mejoraría si se obtuvieran patrones de recirculación, los cuales no se tienen a estas velocidades de rotación, por lo que también podría proponerse que se aumentara un poco la velocidad de giro del rotor con el fin de que se obtuvieran "ojos de recirculación" para que no haya "zonas muertas" en la olla, y de esta forma se obtuviera una desgasificación más eficiente. Con la inyección de gas, como ya se dijo, se inhibiría un poco la formación del vórtice.

6.1 Trabajo Futuro.

Se puede proponer como trabajo futuro la modelación matemática o simulación numérica de un sistema real de la olla de desgasificación de aluminio equipada con rotor inyector, para que de esta forma se pueda tener un mayor y mejor entendimiento de este sistema.

ÍNDICE DE FIGURAS.

-Figura 1. Producción mundial de aluminio en millones de toneladas métrica7				
-Figura 2. Solubilidad de hidrógeno en diferentes aleaciones de aluminio y su variación con la				
temperatura				
-Figura 3. Muestra el efecto del tamaño de la burbuja en la eficiencia de la desgasificación14 -Figura 4.				
Rapidez de desgasificación obtenida con tres distintos sistemas de inyección de				
gas17				
-Figura 5. Muestra una unidad de desgasificado con rotor-inyector17				
-Figura 6. Compara la dispersión de burbujas de gas inyectado a través de un rotor y una lanza17				
-Figura 7. Geometría del modelo físico simulado en PHOENICS para esta tesis22				
-Figura 8. Fronteras usadas en la simulación del modelo físico de la olla de desgasificación de Al				
equipada con rotor-inyector				
-Figura 9. Muestra las dimensiones de la olla generada en la simulación, que a su vez corresponden				
a las dimensiones del modelo físico				
-Figura 10. Muestra la geometría de los rotores usados para la simulación30				
-Figura 11. Muestra el arreglo experimental construido para obtener resultados experimentales a				
partir del modelo físico, el cual consta de; 1. Reactor, 2. Recipiente externo, 3. Motor de velocidad				
variable, 4. Junta rotativa, 5. Flecha de Nylamid, 6. Rotor de Nylamid, 7. Rotámetro, 8. Regulador				
de presión, 9. Válvula, 10. Cámara de alta velocidad, 11. Sincronizador, 12. Arreglo óptico, 13.				
Generador de láser, 14. Fuente de poder, 15. Computadora y 16. Espejo plano32				
-Figura 12. Ubicación del plano de análisis axial constituido por A1 y A2 y de los planos				
transversales h1-h5				
-Figura 13. Muestra un ejemplo del sistema generado en PHOENICS (a) y su respectivo enmallado				
en r - z (b) y en r - θ (c)				
-Figura 14. Sistema utilizado para hacer un balance de las ecuaciones de conservación sobre un				
nodo P, el cual se usa en el método de volumen de control				
-Figura 15. Muestra cortes transversales de los mapas de vectores para el rotor A sin inyección de				
aire a 536rpm; a), b) y c) Obtenidos de las a partir del modelo físico correspondientes a los planos				
h1, h2 y h4 respectivamente (la magnitud del vector de referencia es 0.1 m/s); d), e) y f) Obtenidos				
a partir de la simulación y correspondientes a los mismos planos (la magnitud del vector de				
referencia es 0.2 m/s)40				
-Figura 16. Cortes longitudinales de la olla simulada, donde se muestran los contornos de fracción				
de gas para el rotor liso sin inyección de gas; a) 536rpm y b) 800rpm41				
-Figura 17. Cortes longitudinales de la olla simulada que muestran los contornos de presión para el				
rotor liso sin inyección de gas; a) 536rpm y b) 800rpm41				

-Figura 18. Cortes longitudinales de la olla simulada, donde se presentan los contornos de viscosidad cinemática turbulenta para el rotor liso sin inyección; a) 536rpm y b) 800rpm......41 -Figura 19. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidad simulado y el obtenido experimentalmente para el plano h2 del rotor liso sin inyección de gas y a 536rpm......42 -Figura 20. Cortes transversales de la olla, donde se comparan de los mapas de vectores para el rotor liso con inyección de aire a 536rpm; a), b) y c) Medidos experimentalmente y correspondientes a los planos h1, h2 y h4 respectivamente (la magnitud del vector de referencia es = 0.1 m/s); d), e) y f) Obtenidos a través de la simulación, correspondientes a los mismos planos (la magnitud del vector de referencia es= 0.3 m/s)......44 -Figura 21. Cortes longitudinales de la olla que muestran los contornos de fracción de gas para el rotor liso con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm......45 -Figura 22. Cortes longitudinales de la olla que muestran los contornos de presión para el rotor liso con inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm......45 -Figura 23. Cortes longitudinales de la olla, donde se muestran los contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor liso con inyección; a) 536rpm y b) 800rpm......45 -Figura 24. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales para el plano h2 del rotor liso con inyección de gas y 536rpm......46 -Figura 25. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales (modelo físico) para el plano h1 del rotor liso con inyección de gas a 536rpm y 800rpm......46 -Figura 26. Cortes longitudinales de la olla donde se presentan mapas de vectores para el rotor estándar sin invección de gas; a) y b) medidos experimentalmente en el modelo físico a 536rpm y 800rpm respectivamente y c) y d) obtenidos a partir de la simulación y modelación matemática a -Figura 27. Cortes longitudinales de contornos de fracción de gas para el rotor estándar sin inyección obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm......50 -Figura 28. Cortes longitudinales donde se presentan contornos de presión para el rotor estándar sin inyección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm......50 -Figura 29. Cortes longitudinales de contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor estándar sin inyección; a) 536rpm y b) 800rpm......50 -Figura 30. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente para los planos h1 y h2 del rotor estándar sin invección de gas y

66
-Figura 31. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente para los planos h1 y h2 del rotor estándar sin inyección de gas y -Figura 32. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente para los planos h1, h2 y h3 del rotor estándar sin inyección de gas -Figura 33. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre los perfiles de velocidad simulados y los obtenidos experimentalmente para los planos h4 y h5 del rotor estándar sin inyección de gas y -Figura 34. Contornos de fracción de gas para el rotor estándar con invección de gas, obtenidos con la simulación; a) 536rpm y b) 800rpm......54 -Figura 35. Contornos de presión para el rotor estándar con inyección de gas, obtenidos con la -Figura 36. Contornos de viscosidad cinemática turbulenta obtenidos con la simulación para el rotor -Figura 37. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales para los planos h1 y h2 del rotor estándar con inyección de gas y 536rpm......55 -Figura 38. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales para los planos h4 y h5 del rotor estándar con inyección de gas y 536rpm......55 -Figura 39. Velocidad v.s. radio de la olla. Comparación entre el perfil de velocidades arrojado por la simulación y el obtenido con mediciones experimentales para el plano h1 del rotor estándar con

67

ÍNDICE DE TABLAS.

-Tabla 1. Muestra la producción de aluminio primario en México7
-Tabla 2. Muestra El Consumo de Al por sectores9
-Tabla 3. Muestra los principales grupos de familias de aleaciones de aluminio y sus aplicaciones
típicas9
-Tabla 4. Muestra los niveles aceptables de hidrógeno disuelto en piezas de aluminio12
-Tabla 5. Valores de las constantes usadas en el modelo de turbulencia k - ϵ 26
-Tabla 6. Condiciones de frontera utilizadas para el modelo matemático
-Tabla7. Propiedades del aluminio líquido, agua y gases usadas para la modelación29
-Tabla 8. Dimensiones principales y flujos de gas del modelo físico y el equipo piloto (en el que se
basa el modelo físico)
-Tabla 9. Dimensiones usadas para la simulación, las cuales corresponden al modelo físico30
-Tabla 10. Muestra los casos analizados para la validación

NOTACIÓN EMPLEADA.

Símbolo	Significado y unidades
a _B	Coeficiente del nodo de la frontera sobre el que se hace el balance.
<i>a</i> _{<i>nb</i>}	Coeficientes de los nodos vecinos (nodo E o W).
a_p	Coeficiente del nodo (P) sobre el que se hace el balance.
b	Término independiente.
В	Boquilla del rotor.
C ₁	Constante para la ecuación de disipación energía cinética turbulenta (Adimensional).
C ₂	Constante para la ecuación de disipación energía cinética turbulenta (Adimensional).
C_{f}	Coeficiente de fricción interfacial (kg/s).
C_{μ}	Constante para la ecuación de rapidez de disipación de energía cinética turbulenta
	(Adimensional).
D_t	Coeficiente de dispersión (m^2/s).
Е	Nodo vecino al nodo P.
E ₁	Eje.
F	Fondo de la olla.
$ec{F}_b$	Fuerza boyante o de flotación (N/kg).
${ar F}_{\it fricc}$	Fuerza de fricción por unidad de volumen (N/m^3) .
FC	Frontera cíclica.

	69
Símbolo	Significado y unidades
G	Generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes principales de
	velocidad (J/kg).
K	Energía cinética turbulenta (J/g).
K _{in}	Valor de energía cinética turbulenta en la entrada de la boquilla (J/g).
т	Masa del baño (kg).
Р	Nodo sobre el cual se realiza el balance.
Р	Presión (N/m^2) .
P ₁	Pared de la olla.
P_{H2}	Presión parcial de H ₂ (mmHg).
r	Dirección radial (m).
R	Rotor.
R_g	Fracción volumétrica de gas (Adimensional).
R _i	Fracción volumétrica de la fase i, donde $i = líquido o gas (Adimensional).$
R_l	Fracción volumétrica del líquido (Adimensional).
S	Solubilidad del hidrógeno en aluminio líquido (ml $H_2/100$ g Al).
S _{\phi}	Término fuente.
t	Tiempo (s).
Т	Temperatura absoluta del baño (K).
\overline{V}	Vector de velocidades (m/s).
V _{gas}	Velocidad del gas (m/s).
V_i	Vector de velocidades de la fase i (m/s).
V _{in}	Velocidad que adquiere el gas en dirección axial al entrar por la boquilla del rotor.
V_l	Velocidad del líquido (m/s).
V_{of}	Vector de velocidades de la otra fase (m/s).
V _{RB}	Velocidad de rotación que adquiere el gas en la boquilla del rotor (m/s o rpm).
V _{RE}	Velocidad de rotación sobre el eje (m/s o rpm).
V _{r,g}	Componente de velocidad en dirección radial para el gas (m/s).
V _{RR}	Velocidad de rotación sobre el rotor (m/s o rpm).
V_{slip}	Velocidad de deslizamiento entre las fases (m/s).
$\overline{V} \overline{V}$	Diádica (tensor de orden 2) (m^2/s^2) .
V _{z,g}	Componente de velocidad en dirección axial para el gas (m/s).
$V_{z,l}$	Componente de velocidad en dirección axial para el líquido (m/s).
Símbolo	Significado y unidades

	70
$V_{ heta,g}$	Componente de velocidad en dirección angular para el gas (m/s).
$V_{ heta,l}$	Componente de velocidad en dirección angular para el líquido (m/s).
W	Nodo vecino al nodo P.
Z	Dirección axial (m).
∇	Operador matemático nabla.
$(\delta_x)_e$	Distancia entre el nodo P y E.
$(\delta_x)_w$	Distancia entre el nodo P y W.
З	Rapidez de disipación de energía cinética turbulenta (J/s·kg).
\mathcal{E}_{in}	Valor de rapidez de disipación de energía cinética turbulenta en la entrada de la boquilla
	$(J/s \cdot kg).$
μ	Viscosidad molecular (kg/m·seg).
$\mu_{_{ef}}$	Viscosidad efectiva (kg/m·seg).
μ_t	Viscosidad turbulenta (kg/m·seg).
θ	Dirección angular (°)
ρ_i	Densidad de la fase <i>i</i> , donde $i = líquido (l) o gas (g) (kg/m3).$
$ ho_l$	Densidad del líquido (l) (kg/m ³).
σ_k	Número de prandtl turbulento para k (constante del modelo de turbulencia)
	(Adimensional).
$\sigma_{arepsilon}$	Número de prandtl turbulento para ε (constante del modelo de turbulencia)
	(Adimensional).
$ au_{i,j}$	Tensor de esfuerzos donde la fuerza se aplica en el área <i>i</i> , en dirección <i>j</i> (N/m ²).
υ	Viscosidad cinemática (m ² /s).
ϕ	Cantidad a conservar (masa, energía, momentum, carga eléctrica, etc.).
$\phi_{\scriptscriptstyle B}$	Variables de transporte para el nodo de la frontera donde se hace el balance.
ϕ_{nb}	Variable de transporte de los nodos vecinos (nodo E o W).
ϕ_{p}	Variable de transporte para el nodo donde se hace el balance (P).
γ	Tensión superficial del líquido (N/m).
Г	Coeficiente difusivo (kg/m·s).

APÉNDICE.

En este apéndice se anexan ejemplos de los archivo q1 elaborados en esta tesis.

a) Rotor liso.

El siguiente código es el construido para al modelo físico con rotor liso sin inyección de gas y 536rpm.

TALK=F;RUN(1,1)

GROUP 1. Run title TEXT(LISO 536RPM sin inyección) TITLE REAL(DENLIQ,DENGAS,VELGAS,PI,QGAS,RBOQUI) REAL(EPIN,TEKIN,DP,DIFTE1,DIFTE2,ENULAR) REAL(HTOR,RTOR,HOLLA,HCONO,RUP,RDOWN,H1EJE) REAL(H2EJE,R1EJE,R2EJE,HSUPLI) REAL(VELTO1,VELTO2,VELTO3,VELTO4,VELTO5) REAL(RADIO,AREBOQ) HTOR=0.04818;RTOR=0.053;HOLLA=0.54;HCONO=0.12788 RUP=0.16;RDOWN=0.16;HSUPLI=0.375 H1EJE=0.075;H2EJE=0.110 R1EJE=0.16;R2EJE=0.16

PI=3.1415926535898 RADIO=.005 AREBOQ=PI*RADIO**2 BOOLEAN(RESTT) RESTT=F NAMFI=news DP=.005 DENLIQ=1000 DENGAS=1.2 QGAS=5.0E-5 VELGAS=QGAS/(AREBOQ) VELTO1=0.08;VELTO2=0.16;VELTO3=0.24 VELTO4=0.32;VELTO5=0.4

GROUP 2. Transience; time-step specification STEADY=F GRDPWR(T,200,200,1.0)

Groups 3 X-direction grid specification NX=10 NY=15 NZ=48 BFC=T NONORT=T

***BLOQUE1 GSET(P,A,0.0,0.0,0.0) GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0) GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE) GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,D,0.0,0.0,HCONO) GSET(P,DD,0.0,0.0,H2EJE) GSET(P,AA,0.0,0.0,H1EJE) GSET(L,L1,A,B,5,1.0) GSET(L,L2,B,BB,12,1.0) GSET(L,L3,BB,CC,5,1.0) GSET(L,L4,CC,C,1,1.0) GSET(L,L5,C,D,5,1.0) GSET(L,L6,D,DD,1,1.0) GSET(L,L7,DD,AA,5,1.0) GSET(L,L8,AA,A,12,1.0) GSET(F,F1,A,-,B,BB.CC,C,-,D,DD.AA) GSET(M,F1,+J+K,1,1,1)

***BLOQUE 2 GSET(I) GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0) GSET(P,E,0.0,RDOWN,0.0) GSET(P,EE,0.0,R1EJE,H1EJE) GSET(P,FF,0.0,R2EJE,H2EJE) GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE) GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE) GSET(L,L9,B,E,10,1.2) GSET(L,L10,E,EE,12,1.0) GSET(L,L11,EE,FF,5,1.0) GSET(L,L12,FF,F,1,1.0) GSET(L,L13,F,C,10,-1.2) GSET(L,L14,C,CC,1,1.0) GSET(L,L15,CC,BB,5,1.0) GSET(L,L16,BB,B,12,1.0) GSET(F,F2,B,-,E,EE.FF,F,-,C,CC.BB) GSET(M,F2,+J+K,1,6,1)

***BLOQUE3 GSET(I)

GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO)

GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO) GSET(P,GG,0.0,RUP,HSUPLI) GSET(P,G,0.0,RUP,HOLLA) GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA) GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI) GSET(L,L17,C,F,10,1.2) GSET(L,L18,F,GG,18,1.0) GSET(L,L19,GG,G,12,1.0) GSET(L,L20,G,H,10,-1.2) GSET(L,L20,G,H,10,-1.2) GSET(L,L21,H,HH,12,1.0) GSET(L,L22,HH,C,18,1.0) GSET(L,L22,HH,C,18,1.0) GSET(F,F3,C,-F,GG,G,-H,HH) GSET(M,F3,+J+K,1,6,19)

***BLOQUE4 GSET(I) GSET(P,D,0.0,0.0,HCONO) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI) GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA) GSET(P,I,0.0,0.0,HOLLA) GSET(P,II,0.0,0.0,HSUPLI) GSET(L,L23,D,C,5,1.0) GSET(L,L24,C,HH,18,1.0) GSET(L,L25,HH,H,12,1.0) GSET(L,L26,H,I,5,1.0) GSET(L,L27,I,II,12,1.0) GSET(L,L28,II,D,18,1.0) GSET(F,F4,D,-,C,HH,H,-,I,II) GSET(M,F4,+J+K,1,1,19) GSET(T,K13,F,K1,1,1,1,NY,-1.1) GSET(T,K21,F,K18,1,1,1,NY,1.1) GSET(T,K39,F,K21,1,1,1,NY,S1.1) GSET(T,KNZ+1,F,K39,1,1,1,NY,1.1) GSET(C,INX+1,F,I1,RZ,PI/2,0,0,INC,1) GSET(B,1,NX,1,NY,1,NZ,LAP10)

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMEd ONEPHS=F SOLVE(P1,U1,V1,W1,U2,V2,W2,R1,R2) SOLUTN(P1,Y,Y,N,N,N) SOLUTN(U1,Y,Y,N,y,N,Y) SOLUTN(V1,Y,Y,N,y,N,Y) SOLUTN(W1,Y,Y,N,y,N,Y) TURMOD(KEMODL) STORE(CFIPS,ENUT,REYN,VREL,CD,APRJ,WEB) store(prps)

Group 8. Terms & Devices scheme(supbee,r1,r2,u1,u2,v1,v2,w1,w2) TERMS(R1,N,Y,Y,Y,N) TERMS(R2,N,Y,Y,N,N) Group 9. Properties RHO1=DENLIQ RHO2=DENGAS ENUL=1.0E-06 PRT(U2)=1.E+10;PRT(W2)=1.E+10;PRT(V2)=1.E+10 PRNDTL(U2)=72.31;PRNDTL(V2)=72.31;PRNDTL(W2)=72.31 CFIPS=GRND2 CFIPC=0.914 CFIPA=0.

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields PATCH(EJE,INIVAL,1,NX,1,2,18,NZ,1, 1) INIT(EJE ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA,INIVAL,1,nx,1,5,13,17,1,1) INIT(TORTA,PRPS, 0., 1.980000E+02)

IF(RESTT) THEN INIADD=F FIINIT(P1)=0.0 FIINIT(U1)=READFI FIINIT(V1)=READFI FIINIT(W1)=READFI FIINIT(U2)=READFI FIINIT(V2)=READFI FIINIT(W2)=READFI FIINIT(R1)=READFI FIINIT(R2)=READFI FIINIT(KE)=READFI FIINIT(EP)=READFI FIINIT(CFIPS)=READFI ELSE INIADD=F FIINIT(KE)=0.05 FIINIT(EP)=0.1 FIINIT(P1)=0.0 FIINIT(U1)=0.0 FIINIT(V1)=0.0 FIINIT(W1)=0.0 PATCH(GAS,INIVAL,1,NX,1,NY,1,36,1,1) INIT(GAS,R2,0.0,0.0) INIT(GAS,R1,0.0,1.0) PATCH(GASS,INIVAL,1,NX,1,NY,37,NZ,1,1) INIT(GASS,R2,0.0,1.0) INIT(GASS,R1,0.0,0.0) ENDIF

GROUP 13. Boundary & special sources XCYCLE=T ***CF DE LA TORTA PATCH(BUGER1,VOLUME,1,NX,1,1,13,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER1,U1,FIXVAL, VELTO1) PATCH(BUGER2,VOLUME,1,NX,2,2,13,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER2,U1,FIXVAL, VELTO2) PATCH(BUGER3,VOLUME,1,NX,3,3,13,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER3,U1 ,FIXVAL, VELTO3) PATCH(BUGER4,VOLUME,1,NX,4,4,13,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER4,U1 ,FIXVAL, VELTO4) PATCH(BUGER5,VOLUME,1,NX,5,5,13,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER5,U1 ,FIXVAL, VELTO5) ***CF DEL EJE PATCH(AXE1,VOLUME,1,NX,1,1,18,NZ,1,LSTEP) COVAL(AXE1,U1,FIXVAL,VELTO1) PATCH(AXE2,VOLUME,1,NX,2,2,18,NZ,1,LSTEP) COVAL(AXE2,U1,FIXVAL,VELTO1) PATCH(AXE2,U1,FIXVAL,VELTO2) ***** GRAVEDAD Y BUOYANCY PATCH(GRAVITY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP) COVAL(GRAVITY,W1,FIXFLU,-9.81)

GROUP 15. Termination of sweeps LSWEEP=50 LITHYD=10 IDISPA=5 CSG1=H Group 17. Relaxation RELAX(P1,LINRLX,0.1) RELAX(V1,FALSDT,0.0001) RELAX(W1,FALSDT,0.0001) RELAX(U1,FALSDT,0.0001) RELAX(KE,linrlx,0.1) RELAX(EP,linrlx,0.1) RELAX(V2,FALSDT,0.00001) RELAX(W2,FALSDT,0.00001) RELAX(U2,FALSDT,0.00001) RELAX(R1,LINRLX,0.1) RELAX(R2,LINRLX,0.1)

GROUP 22. Spot-value print-out IPROF=2 PATCH(Wvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(Wvsr1,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(Vvsr1,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr1,U1,0.0,3) PATCH(kvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(kvsr1,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Wvsr2,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Vvsr2,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Uvsr2,U1,0.0,3) PATCH(kvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(kvsr2,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(Wvsr3,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(Vvsr3,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(Uvsr3,U1,0.0,3) PATCH(kvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(kvsr3,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(Wvsr4,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(Vvsr4,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr4, PROFIL, 1, 1, 1, 1, NY, 28, 28, 1step, 1step) PLOT(Uvsr4,U1,0.0,3) PATCH(kvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(kvsr4,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Wvsr5,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Vvsr5,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Uvsr5,U1,0.0,3) PATCH(kvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(kvsr5,KE,0.0,3)

GROUP 23. Field print-out and plot control Group 24. Dumps For Restarts IXMON=5 IYMON=6 IZMON=17 TSTSWP=-1 STOP

b) Rotor Estándar.

El siguiente código es el construido para al modelo físico con rotor estándar y con inyección de gas a 800rpm.

TALK=F;RUN(1,1)

GROUP 1. Run title TEXT(Estándar con inyección 800rpm) TITLE

REAL(DENLIQ, DENGAS, VELGAS, PI, QGAS, RBOQUI) REAL(EPIN, TEKIN, DP, DIFTE1, DIFTE2, ENULAR) REAL(HTOR, RTOR, HOLLA, HCONO, RUP, RDOWN, H1EJE) REAL(H2EJE,R1EJE,R2EJE,HSUPLI) REAL(VELTO1, VELTO2, VELTO3, VELTO4, VELTO5, VELTO6) REAL(RADIO, AREBOQ) HTOR=0.04818;RTOR=0.05;HOLLA=0.53;HCONO=0.12788 RUP=0.16;RDOWN=0.16;HSUPLI=0.375 H1EJE=0.075;H2EJE=0.110 R1EJE=0.16;R2EJE=0.16 PI=3.1415926535898 RADIO=.005 AREBOQ=PI*RADIO**2 BOOLEAN(RESTT) RESTT=F NAMFI=news DP=.005 DENLIQ=1000 DENGAS=1.2 QGAS=5.0E-5 VELGAS=OGAS/(AREBOO) VELTO1=0.08; VELTO2=0.16; VELTO3=0.24 VELTO4=0.32; VELTO5=0.4

GROUP 2. Transience; time-step specification STEADY=F GRDPWR(T,70,70,1.0)

Groups 3 X-direction grid specification NX=10 NY=15 NZ=48 BFC=T NONORT=T ***BLOQUE1 GSET(P,A,0.0,0.0,0.0) GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0) GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE) GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE) GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,DD,0.0,0.0,H2EJE) GSET(P,AA,0.0,0.0,H1EJE) GSET(L,L1,A,B,5,1.0) GSET(L,L2,B,BB,12,1.0) GSET(L,L3,BB,CC,5,1.0) GSET(L,L4,CC,C,3,1.0) GSET(L,L5,C,D,5,1.0) GSET(L,L6,D,DD,3,1.0) GSET(L,L7,DD,AA,5,1.0) GSET(L,L8,AA,A,12,1.0) GSET(F,F1,A,-,B,BB.CC,C,-,D,DD.AA) GSET(M,F1,+J+K,1,1,1) ***BLOQUE 2 GSET(I) GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0) GSET(P,E,0.0,RDOWN,0.0) GSET(P,EE,0.0,R1EJE,H1EJE) GSET(P,FF,0.0,R2EJE,H2EJE) GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE) GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE) GSET(L,L9,B,E,10,1.2) GSET(L,L10,E,EE,12,1.0) GSET(L,L11,EE,FF,5,1.0) GSET(L,L12,FF,F,3,1.0) GSET(L,L13,F,C,10,-1.2) GSET(L,L14,C,CC,3,1.0) GSET(L,L15,CC,BB,5,1.0) GSET(L,L16,BB,B,12,1.0) GSET(F,F2,B,-,E,EE.FF,F,-,C,CC.BB) GSET(M,F2,+J+K,1,6,1) ***BLOQUE3 GSET(I) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO) GSET(P,GG,0.0,RUP,HSUPLI) GSET(P,G,0.0,RUP,HOLLA) GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA) GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI) GSET(L,L17,C,F,10,1.2) GSET(L,L18,F,GG,18,1.0) GSET(L,L19,GG,G,10,1.0) GSET(L,L20,G,H,10,-1.2) GSET(L,L21,H,HH,10,1.0) GSET(L,L22,HH,C,18,1.0) GSET(F,F3,C,-,F,GG,G,-,H,HH)

GSET(M,F3,+J+K,1,6,21) ***BLOQUE4 GSET(I) GSET(P,D,0.0,0.0,HCONO) GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO) GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI) GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA) GSET(P,I,0.0,0.0,HOLLA) GSET(P,II,0.0,0.0,HSUPLI) GSET(L,L23,D,C,5,1.0) GSET(L,L24,C,HH,18,1.0) GSET(L,L25,HH,H,10,1.0) GSET(L,L26,H,I,5,1.0) GSET(L,L27,I,II,10,1.0) GSET(L,L28,II,D,18,1.0) GSET(F,F4,D,-,C,HH,H,-,I,II) GSET(M,F4,+J+K,1,1,21) GSET(T,K13,F,K1,1,1,1,NY,-1.1) GSET(T,K21,F,K18,1,1,1,NY,1.1) GSET(T,K39,F,K21,1,1,1,NY,S1.1) GSET(T,KNZ+1,F,K39,1,1,1,NY,1.1) GSET(C,INX+1,F,I1,RZ,PI/2,0,0,INC,1) GSET(B,1,NX,1,NY,1,NZ,LAP10)

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMEd ONEPHS=F SOLVE(P1,U1,V1,W1,U2,V2,W2,R1,R2) SOLUTN(P1,Y,Y,N,N,N) SOLUTN(U1,Y,Y,N,y,N,Y) SOLUTN(V1,Y,Y,N,y,N,Y) SOLUTN(W1,Y,Y,N,y,N,Y) TURMOD(KEMODL) STORE(CFIPS,ENUT,REYN,VREL,CD,APRJ,WEB) store(prps) Group 8. Terms & Devices scheme(supbee,r1,r2,u1,u2,v1,v2,w1,w2) TERMS(R1,N,Y,Y,Y,N) TERMS(R2,N,Y,Y,N,N)

Group 9. Properties RHO1=DENLIQ RHO2=DENGAS ENUL=1.0E-06 PRT(U2)=1.E+10;PRT(W2)=1.E+10;PRT(V2)=1.E+10 PRNDTL(U2)=72.31;PRNDTL(V2)=72.31;CFIPS=GRND2 CFIPS=GRND2 CFIPC=0.914 CFIPA=0.

Group 11.Initialise Var/Porosity Fields PATCH(EJE,INIVAL,1,NX,1,2,18,NZ,1, 1) INIT(EJE ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA,INIVAL,1,nx,1,5,16,17,1,1)

INIT(TORTA, PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA1,INIVAL,1,nx,4,5,13,14,1,1) INIT(TORTA1 ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA2,INIVAL,1,1,5,5,15,15,1,1) INIT(TORTA2 ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA3,INIVAL,9,10,5,5,15,15,1,1) INIT(TORTA3 ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA4,INIVAL,1,5,4,4,15,15,1,1) INIT(TORTA4 ,PRPS, 0., 1.980000E+02) PATCH(TORTA5,INIVAL,9,10,4,4,15,15,1,1) INIT(TORTA5 ,PRPS, 0., 1.980000E+02) IF(RESTT) THEN INIADD=F FIINIT(P1)=READFI FIINIT(U1)=READFI FIINIT(V1)=READFI FIINIT(W1)=READFI FIINIT(U2)=READFI FIINIT(V2)=READFI FIINIT(W2)=READFI FIINIT(R1)=READFI FIINIT(R2)=READFI FIINIT(KE)=READFI FIINIT(EP)=READFI FIINIT(CFIPS)=READFI ELSE INIADD=F FIINIT(KE)=0.05 FIINIT(EP)=0.1 FIINIT(P1)=0.0 FIINIT(U1)=0.0 FIINIT(V1)=0.0 FIINIT(W1)=0.0 PATCH(GAS,INIVAL,1,NX,1,NY,1,38,1,1) INIT(GAS,R2,0.0,0.0) INIT(GAS,R1,0.0,1.0) PATCH(GASS,INIVAL,1,NX,1,NY,39,NZ,1,1) INIT(GASS,R2,0.0,1.0) INIT(GASS,R1,0.0,0.0) ENDIF GROUP 13. Boundary & special sources XCYCLE=T ***CF DE LA TORTA PATCH(BUGER, VOLUME, 1, nx, 5, 5, 13, 15, 1, LSTEP) COVAL(BUGER, U1, FIXVAL, VELTO5) PATCH(BUG,VOLUME,1,nx,4,4,13,15,1,LSTEP) COVAL(BUG,U1 ,FIXVAL, VELTO4) PATCH(BUGER1,VOLUME,1,NX,1,1,16,17,1,LSTEP) COVAL(BUGER1,U1,FIXVAL, VELTO1) PATCH(BUGER2, VOLUME, 1, NX, 2, 2, 16, 17, 1, LSTEP) COVAL(BUGER2,U1 ,FIXVAL, VELTO2) PATCH(BUGER3, VOLUME, 1, NX, 3, 3, 16, 17, 1, LSTEP) COVAL(BUGER3,U1,FIXVAL, VELTO3)

PATCH(BUGER4, VOLUME, 1, NX, 4, 4, 16, 17, 1, LSTEP) COVAL(BUGER4,U1 ,FIXVAL, VELTO4) PATCH(BUGER5, VOLUME, 1, NX, 5, 5, 16, 17, 1, LSTEP) COVAL(BUGER5,U1 ,FIXVAL, VELTO5) ***CF DEL EJE PATCH(AXE1,VOLUME,1,NX,1,1,18,NZ,1,LSTEP) COVAL(AXE1,U1,FIXVAL,VELTO1) PATCH(AXE2,VOLUME,1,NX,2,2,18,NZ,1,LSTEP) COVAL(AXE2,U1,FIXVAL,VELTO2) **** FRONTERAS PAREDES WALL(PARED,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,LSTEP) WALL(FONDO,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,LSTEP) ***** GRAVEDAD Y BUOYANCY PATCH(GRAVITY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP) COVAL(GRAVITY,W1,FIXFLU,-9.81) COVAL(GRAVITY,W2,FIXFLU,-9.81) **** ENTRADAS DE GAS INLET(ENTGAS1,HIGH,5,6,1,1,15,15,1,LSTEP) VALUE(ENTGAS1,P2,VELGAS*RHO2) VALUE(ENTGAS1,W2,-VELGAS) VALUE(ENTGAS1,U2,VELTO1) PATCH(SUPERF,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,LSTEP) COVAL(SUPERF, P2, FIXP, 0.0) COVAL(SUPERF,W2,ONLYMS,0.0) COVAL(SUPERF, V2, ONLYMS, 0.0) COVAL(SUPERF,U2,ONLYMS,0.0) COVAL(SUPERF,W1,FIXVAL,0.0) COVAL(SUPERF,V1,ONLYMS,0.0) COVAL(SUPERF,KE,ONLYMS,0.0) COVAL(SUPERF, EP, ONLYMS, 0.0) ***** EXTRA SOURCES FOR TURBULENCE PATCH(KEDI,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP) EL1A=0.05 COVAL(KEDI, EP, FIXFLU, GRND3) COVAL(KEDI,KE,FIXFLU,GRND3) GROUP 15. Termination of sweeps LSWEEP=50 LITHYD=10 IDISPA=5 CSG1=H Group 17. Relaxation RELAX(P1,LINRLX,0.01) RELAX(V1,FALSDT,0.0001) RELAX(W1,FALSDT,0.0001) RELAX(U1,FALSDT,0.0001) RELAX(KE,linrlx,0.01) RELAX(EP,linrlx,0.01) RELAX(V2,FALSDT,0.00001) RELAX(W2,FALSDT,0.00001) RELAX(U2,FALSDT,0.00001) RELAX(R1,LINRLX,0.01) RELAX(R2,LINRLX,0.01) GROUP 22. Spot-value print-out

IPROF=2 PATCH(Wvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(Wvsr1,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(Vvsr1,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(Uvsr1.U1.0.0.3) PATCH(kvsr1,PROFIL,1,1,1,NY,7,7,lstep,lstep) PLOT(kvsr1,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Wvsr2,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Vvsr2,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(Uvsr2,U1,0.0,3) PATCH(kvsr2,PROFIL,1,1,1,NY,15,15,lstep,lstep) PLOT(kvsr2,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(Wvsr3,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(Vvsr3,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr3, PROFIL, 1, 1, 1, 1, NY, 22, 22, 1step, 1step) PLOT(Uvsr3,U1,0.0,3) PATCH(kvsr3,PROFIL,1,1,1,NY,22,22,lstep,lstep) PLOT(kvsr3,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(Wvsr4,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(Vvsr4,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(Uvsr4,U1,0.0,3) PATCH(kvsr4,PROFIL,1,1,1,NY,28,28,lstep,lstep) PLOT(kvsr4,KE,0.0,3) PATCH(Wvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Wvsr5,W1,0.0,3) PATCH(Vvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Vvsr5,V1,0.0,3) PATCH(Uvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(Uvsr5,U1,0.0,3) PATCH(kvsr5,PROFIL,1,1,1,NY,35,35,lstep,lstep) PLOT(kvsr5,KE,0.0,3) GROUP 23. Field print-out and plot control Group 24. Dumps For Restarts IXMON=5 IYMON=6 IZMON=17

TSTSWP=-1 STOP

REFERENCIAS Y BIBLIOGRAFÍA.

[1]. David V. Neff, Understanding aluminum degassing, ABI/INFORM Trade & Industry, Mayo 2002. 92(5): p. 24-26.

[2]. M. A. Ramírez Argáez, F. Contreras y C. González, *Resumen del estado del arte en la modelación física y matemática del proceso de desgasificación de hidrógeno*, Revista de metalurgia, Madrid, España, 2006. 42(3) (Mayo-Junio): p. 185 – 187.

[3]. T. A. Engh y G. K. Sigworth, *Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum*, Metallurgical Transactions B, 1982. 13B (Septiembre): p. 447 – 460.

[4].Guthrie, S. J. y R. I. L., *Modeling flows and mixing in steelmaking ladles designed for single and dual plug bubbling operations*. Metallurgical Transactions B, 1992. 23B: p. 765-778.

[5]. V. S. Warke, G. Tryggvason, M. M. Makhlouf, *Mathematical modeling and computer simulation of molten metal cleansing by the rotating impeller degasser. Part I. Fluid Flow*, Journal of materials processing technology, 168 (2005): p. 112 – 118.

[6]. V. S. Warke, S. Shankar, M. M. Makhlouf, *Mathematical modeling and computer simulation of molten aluminum cleansing by the rotating impeller degasser. Part II. Removal of hydrogen gas and solid particles*, Journal of materials processing technology, 168 (2005): p. 119 – 126.

[7]. M. A. Ramírez Argáez, F. Contreras y C. González, Modelación matemática del mezclado en ollas (cucharas) de aluminio equipadas con la técnica de desgasificación rotor – inyector, Revista de metalurgia, Madrid, España, 2006.
42(3) (Mayo- Junio): p. 187 – 202.

[8]. José Luis Camacho-Martínez, *Modelación física del tratamiento de refinación de aluminio líquido con impulsor rotatorio*, tesis de Doctorado, CIATEQ, Querétaro, Qro., 2007.

[9]. PHOENICS On-Line Information System (POLIS); PHOENICS 3.4. CHAM Company 2000.

[10]. R. B. Bird, W. E. Stewart and E. N. Lightfoot; *Fenómenos de transporte*, Ed. Reverté, México, D. F., 2002, p. 3-20.

[11]. PHOENICS On-Line Information System (POLIS); Referencia de modelos de coeficientes de fricción empírico de la ayuda de PHOENICS 3.4. CHAM Company 2000.

[12] Suhas V. Patankar, Numerical Heat transfer and fluid flow, Taylor and Francis, 1980.

[13] Demetrio Gerardo Vallejo Acosta, *Evaluación de distintos modelos de turbulencia en la modelación matemática de ollas agitadas con gas en la refinación secundaria de acero,* tesis de licenciatura, Facultad de Química, UNAM, México, D. F., 2008.

[14] F. King, El aluminio y sus aleaciones, Ed. Limusa, México, D. F., 1992. p. 270 - 325.

[15] Fernando Contreras Bustos, *Modelación matemática del flujo de fluidos y mezclado en ollas de tratamiento de aluminio equipadas con rotor – inyector*, Tesis de Maestría, ITM, Morelia, Mich., 2005.

[16] Hufnagel, Manual del aluminio, segunda edición, Ed. Reverté, Barcelona, España, 1992. p. 389-396.

[17] Inocencio Hugo Nava Ramos, *Modelación matemática del mezclado en hornos-olla agitados con gas*, tesis de licenciatura, Facultad de Química, UNAM, México, D. F., 2005.

[18] J. Szekely, *Fenómenos de flujo de fluidos en procesamiento de metales*, primera edición, Ed. Limusa, México, D.F., 1988.