



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
FACULTAD DE QUÍMICA**

**ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE DESGASIFICACIÓN DE ALUMINIO CON LA
TÉCNICA DE ROTOR-INYECTOR ASISTIDO POR MODELADO
MATEMÁTICO**

**TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN METALURGIA**

**PRESENTA:
IQM. ARTURO ALEJANDRO SÁNCHEZ SANTIAGO**

**TUTOR
Dr. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ, UNAM F.Q.**

MÉXICO, D. F. SEPTIEMBRE 2013



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: DR. ARTURO JUÁREZ HERNÁNDEZ (UANL)

SECRETARIO: DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ (FQ, UNAM)

VOCAL: DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA (FQ UNAM)

1^{ER} SUPLENTE: DR. JOSÉ ALEJANDRO GARCÍA HINOJOSA (FQ, UNAM)

2^{DO} SUPLENTE: DR. BERNARDO FABIÁN CAMPILLO ILLANES (ICF, UNAM)

LUGAR DONDE SE REALIZÓ LA TESIS:

DEPARTAMENTO DE INGENIERIA METALURGICA, FACULTAD DE QUÍMICA UNAM.

TUTOR DE TESIS

DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ

Agradecimientos:

A la Universidad Nacional Autónoma de México.

AI Dr. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ.

AI Dr. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA.

A WINER.

A TODOS LOS QUE CONTRIBUYERON A LA REALIZACIÓN DE ESTE TRABAJO DIRECTA E INDIRECTAMENTE, A LOS QUE YA NO ESTÁN CON NOSOTROS.

INDICE

RESUMEN.....	5
ABSTRACT.....	6
CAPÍTULO1. ANTECEDENTES.....	7
1.1 Planteamiento del problema.....	7
1.1.1 Objetivos.....	11
1.1.2 Hipótesis.....	11
1.1.3 Justificación y alcance del trabajo.....	11
1.1.4 Estado del arte.....	12
1.2.1 Modelado matemático del proceso de desgasificado de aluminio líquido.....	12
a) Modelos analíticos.....	12
b) Modelos que utilizan dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics (CFD)).....	15
CAPÍTULO 2. DESARROLLO DEL MODELO MATEMÁTICO.....	16
2.1 Modelo Matemático.....	16
2.1.1 Suposiciones del modelo matemático.	18
Discusión de las consideraciones.....	18
2.1.2 Balance de masa en un volumen de control.....	20
2.1.2 Balance en reactores batch.....	22
2.2 Correlaciones para el cálculo de las propiedades termodinámicas.....	23
2.3 Determinación de coeficientes de transporte de masa.....	26

2.4 Determinación del diámetro promedio de burbuja.....	27
2.5 Método de Solución.....	28
CAPÍTULO 3. RESULTADOS y ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	30
3.1 Resultados	30
3.2 Análisis de Resultados.....	37
CAPÍTULO 4. CONCLUSIONES.....	38
BIBLIOGRAFÍA.....	39
ANEXO I. LISTADO DEL PROGRAMA.....	41

RESUMEN.

La presencia de hidrógeno en las piezas coladas de aluminio provoca poros que son perjudiciales a sus propiedades mecánicas. Por eso, en piezas de alto desempeño con aplicaciones en la industria automotriz, aeronáutica entre otras, se debe evitar la presencia de defectos como la porosidad debida al atrapamiento de hidrógeno. Para tal efecto se usan técnicas de desgasificado con purga de gases inertes y reactivos o mezcla de ambos, los cuales son inyectados mediante rotores (impeller). En este trabajo se estudia la cinética de desgasificación del aluminio con el método de rotor inyector, para lo cual se desarrolló un modelo matemático fundamental para la desoxidación de agua (similar a la deshidrogenación de aluminio líquido), basado en un balance global de masa que considera la cinética del transporte de oxígeno del seno del baño a la burbuja de gas nitrógeno, a través de un coeficiente global de transporte de masa. El modelo matemático se validó de manera satisfactoria contra datos experimentales de la cinética de desoxidación medida en un modelo físico construido de acrílico y que usa agua para simular al aluminio y nitrógeno para simular al argón y que se construyó en otros trabajos. Asimismo se realizó un análisis de las variables del proceso: velocidad de rotación del rotor, rapidez de flujo del gas de purga y forma de inyección del mismo (se inyectó gas de manera convencional desde la flecha y saliendo por el rotor y también se exploró la inyección de gas por el fondo de la olla). En general se encontró una concordancia buena entre las predicciones que arroja el modelo y las mediciones experimentales hechas en el modelo físico. Se encontró que la velocidad de rotación y el flujo de gas altos mejoran la cinética de desgasificado y su eficiencia, y que la formación del vórtice muy grande puede provocar desviaciones entre las predicciones hechas por el modelo y las mediciones experimentales, por lo que se sugiere que el coeficiente de transporte de masa elegido en este trabajo para describir la cinética de desgasificado no es el adecuado cuando el vórtice es muy grande.

ABSTRACT

The presence of hydrogen in aluminum castings causes pores that are detrimental to their mechanical properties. Then, high performance parts with applications in the automotive, aeronautics among other industries, should avoid the presence of defects such as porosity due to hydrogen pick up. For this purpose, degassing techniques based on purge of inert and reactive gases or mixtures of both are widely used. The best degassing technique is when the gas or gases are injected through a high angular speed rotor (impeller). In this study a mathematical model was developed to predict the deoxidation kinetics from water (which is similar to the dehydrogenation of liquid aluminum), based on an overall mass balance and on the kinetics of degassing of aluminum with the rotor-injector technique, by considering the mass transfer of oxygen from the bulk towards the gas bubble being controlled by a global coefficient of mass transport. The mathematical model was successfully validated against experimental data for deoxidation kinetics measured in a physical model built in acrylic, where water simulates aluminum and nitrogen replaces argon. Also, a process analysis was conducted to determine the effect of the main process variables on the degassing kinetics. Such variables are: rotational speed of the rotor, the flow rate of purge gas and the point of gas injection (gas injected conventionally from the nozzles of the rotor and a new technique proposed in this work where gas is injected at the bottom of the ladle). It was found that at high the rotational speed and high gas flow rates, degassing kinetics and efficiency are improved, and that the vortex formation may cause large deviations between the model predictions and the experimental measurements, so it is suggested that the mass transport coefficient chosen in this work to describe the kinetics of degassing is not adequate when the vortex is very large.

CAPITULO 1.

ANTECEDENTES.

1.1 Planteamiento del problema.

El aumento en el consumo de aluminio, lo coloca como un metal no ferroso de suma importancia económica. Se encuentra en formas diversas que van desde planchones hasta hojas delgadas, así como piezas obtenidas por fundición. Sus aplicaciones importantes son en la industria automotriz, aeronáutica, militar entre otras [1].

Debido a los altos requerimientos de calidad de las aleaciones de aluminio para estas industrias, se han desarrollado proyectos de investigación encaminados a la reducción de defectos y rechazos en la fabricación de piezas de aleaciones de aluminio. Para obtener piezas de alta calidad y libres de defectos, al metal en estado líquido se le quitan impurezas tales como elementos y compuestos indeseables, también gases atrapados como el hidrógeno, el cual genera sopladuras y poros, lo que demerita las propiedades mecánicas y la calidad de las piezas vaciadas [2].

La porosidad por contracción y gas puede presentarse junta o separadamente en aleaciones de aluminio obtenidas por fundición, si son a escala micrométrica se les llama microporosidad, la cual causa reducción en la resistencia a la fatiga, a la tensión y degradación de la superficie de la pieza [2].

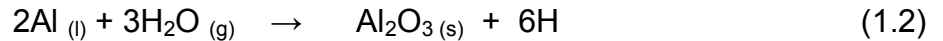
La formación de la microporosidad se atribuye a la contracción acompañada con una falta de alimentación interdendrítica durante la solidificación de la zona pastosa (poros por contracción) [2], así como la evolución de burbujas de gas hidrógeno. Dicho gas tiene una solubilidad apreciable en el aluminio y sus aleaciones. Su solubilidad varía directamente con la temperatura. En el aluminio puro, en su punto de fusión, el hidrógeno tiene una solubilidad de 0.02 ml/100 g en sólido pero de 0.7 ml/100 gr en líquido [3], lo que representa una disminución drástica de solubilidad cuando solidifica el metal. La solubilidad del hidrógeno en aluminio líquido puro a una atmósfera de presión se da por la ecuación (1.1):

$$\log_{10}S = - 2550/T + 2.62 \quad (1.1)$$

En la ecuación (1.1) la solubilidad "S" está en mililitros de hidrógeno a temperatura y presión estándar por cada 110 gramos de aluminio y la T es la temperatura en grados Kelvin. La temperatura es muy importante en la solubilidad ya que por cada 110°C de sobrecalentamiento la solubilidad del hidrógeno en el aluminio líquido se incrementa al doble. Por esto, durante la solidificación el hidrógeno disuelto en grandes cantidades originalmente disueltas en el líquido es rechazado por el sólido que va formándose, resultando en una concentración acumulada de hidrógeno en el líquido interdendrítico y en la eventual creación de una porosidad dentro del producto solidificado. Poco hidrógeno es absorbido de la atmosfera, la mayor cantidad se obtiene de la disociación del vapor de agua en la superficie del metal líquido, de los gases de combustión de los hornos y de otras fuentes de humedad que entran en contacto con el líquido [4].

También los tratamientos en estado líquido de algunas aleaciones de aluminio-silicio tienen un gran efecto en la presencia de poros, como la modificación con Sr de la morfología del Si eutéctico de laminar a fibroso. Se ha reportado [5] que la modificación del eutéctico

incrementa la porosidad, donde los poros son remplazados por porosidad más fina y ampliamente distribuida. Si se utiliza sales base Na para modificar, como éstas son higroscópicas, pueden introducir humedad e hidrógeno al baño metálico. El hidrógeno liberado por la reacción de la humedad con el aluminio está en forma atómica de acuerdo a la siguiente reacción:



El hidrógeno atómico es muy reactivo y rápidamente es absorbido por el aluminio fundido donde queda disuelto.

La absorción del hidrógeno se puede minimizar mediante técnicas de fusión apropiadas. Por otro lado, el hidrógeno disuelto se puede remover del aluminio líquido por medio del uso de técnicas de desgasificación, dentro de las cuales tenemos al desgasificado natural, al desgasificado por vacío, y al desgasificado con purga de gas, siendo esta última técnica la más utilizada en la industria de la fundición de aluminio y sus aleaciones.

Para la remoción del hidrógeno por purga de gases se usan gases inertes y reactivos o mezcla de ambos. Actualmente se emplean gases o mezclas de gases compuestos de nitrógeno, argón y cloro. Los gases son inyectados mediante lanzas, tapones porosos y/o rotores. La inyección por medio de lanzas no suelen ser tan eficientes como los métodos por tapón poroso y rotor. La inyección de gases mediante el uso de lanzas genera grandes burbujas y tiempos de residencia muy cortos, lo cual afecta directamente al coeficiente de transporte de masa y de ahí su baja eficiencia [6]. El uso de tapón poroso por debajo del reactor es otro método. Por esta vía se alcanzan tamaños de burbuja pequeños y la eficiencia respecto al uso de lanzas es mayor [7]. Para las técnicas antes mencionadas se han diseñado reactores con varios elementos para aumentar la eficiencia del proceso. El uso de rotores para inyectar el gas de purga ha demostrado ser el proceso más eficiente de los tres [8], ya que se obtienen tamaños de burbuja muy pequeños y el esfuerzo de corte generado proporciona un buen mezclado, con lo cual se obtienen tiempos de residencia más largos y áreas interfaciales mayores.

Dado que el hidrógeno existe en el aluminio en forma atómica ya que este no forma H_2 , para que se lleve a cabo la remoción de hidrógeno se requiere que los átomos de hidrógeno se combinen para formar moléculas, sin embargo, la formación de burbujas de gas en el líquido no es fácil y que implica la nucleación homogénea que es termodinámicamente difícil por lo que se tienen que introducir burbujas libres de hidrógeno, para que los átomos de hidrógeno puedan difundir desde el seno del metal líquido hacia las burbujas y entonces formar las moléculas de H_2 de acuerdo a la siguiente reacción en la intercara burbuja-líquido para que el hidrógeno pueda ser acarreado por la burbuja hacia la superficie del baño.



El principio por el cual se remueve el hidrógeno con purga de gases se basa en fenómenos de transporte de masa donde las etapas involucradas en la cinética de remoción del hidrógeno son [9]:

a) Transporte de hidrógeno a través del aluminio fundido hacia la interfase aluminio fundido – burbujas de gas inerte (el mecanismo de transporte predominante es convectivo en presencia de un rotor o una propela rotatoria que agite el baño), ver Figura 1.

b) Transporte difusivo a través de la capa límite (δ_L) del lado del líquido a la intercara metal-gas (ver Figura 2).

- c) Adsorción de los átomos de hidrógeno en la superficie de la burbuja.
- d) Reacción entre dos átomos de hidrógeno para la formación del hidrógeno molecular H_2 dentro de la burbuja de argón. Para los incisos (c) y (d) del mecanismo de remoción de hidrógeno (ver Figura 3).
- e) Transporte difusivo del hidrógeno molecular hacia el seno de la burbuja (ver Figura 4).
- f) Expulsión del H_2 hacia la atmósfera (ver Figura 5).

Se sabe que la etapa controlante de la remoción de hidrógeno es por difusión a través de la interfase metal/gas.

Las diferencias entre las técnicas de desgasificado se deben al tipo de gas o como son introducidas las burbujas al baño. La eficiencia del desgasificado es dependiente del tamaño de la burbuja [10]. La técnica de desgasificación con purga de gases con el rotor-inyector puede emplear reactores continuos o batch. Con esta técnica se inyecta gas a través de una flecha en cuya punta rota un impeller o rotor que rompe al gas de purga en burbujas pequeñas de gas que se distribuyen en toda la olla y que a su vez promueve la agitación necesaria al líquido para acelerar las etapas de remoción de hidrógeno señaladas con anterioridad.

Aunque es conocida la operación de los dispositivos desgasificadores de aluminio usando la técnica del rotor-inyector, aún falta mucha comprensión de los fenómenos que gobiernan la cinética de desgasificación, por lo que el uso de las herramientas de análisis de procesos como el modelado físico y matemático sirven para analizar, optimizar, controlar y diseñar este procesos de desgasificado. Específicamente, el uso de modelos matemáticos fundamentales, que describan la cinética de desgasificado validado con modelos físicos en tanques de acrílico transparentes, que guarden estrictos criterios de similitud geométrica, cinemática y dinámica para estudiar la fluidinámica [4 - 5], son de gran utilidad para comprender los fenómenos asociados al proceso de desgasificado de aluminio y sus aleaciones con la técnica del rotor-inyector.

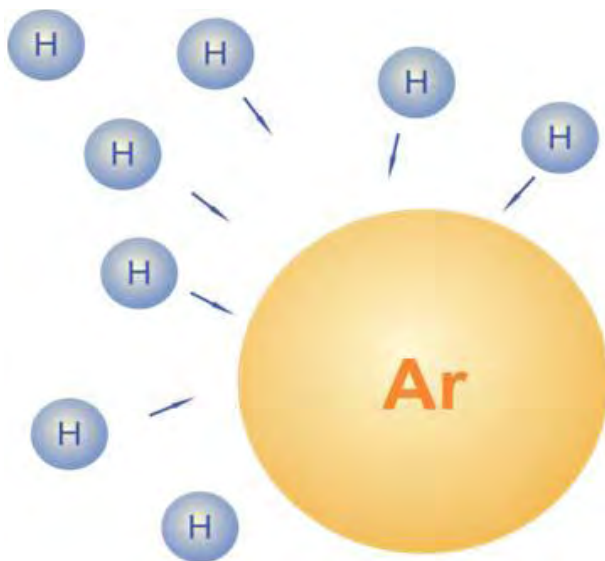


Figura 1. Transporte de H desde el seno del líquido hacia la burbuja de Ar por difusión y convección.

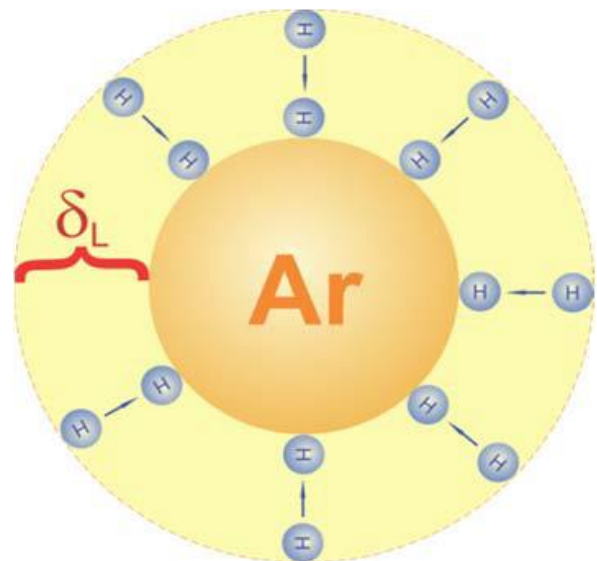


Figura 2. Transporte difusivo del H a través de la capa límite.

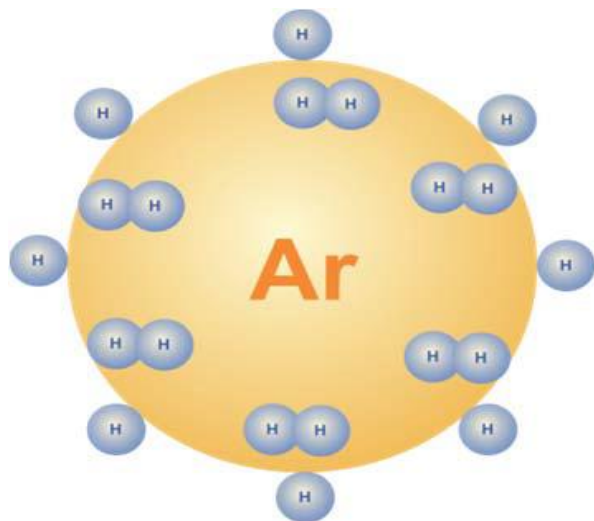


Figura 3. Proceso de adsorción-desorción en la superficie de la burbuja

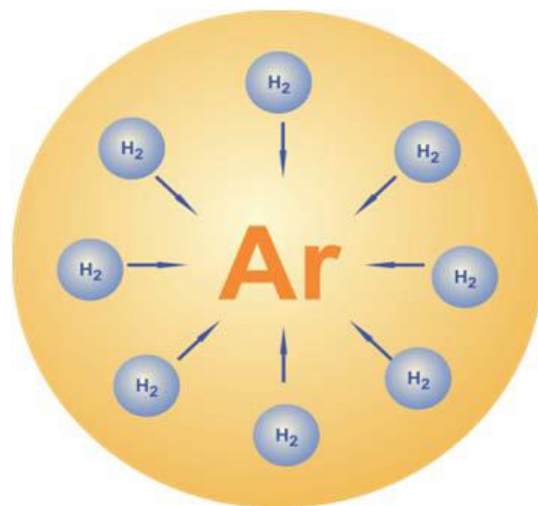


Figura 4. Difusión de H₂ dentro de la burbuja de Ar.

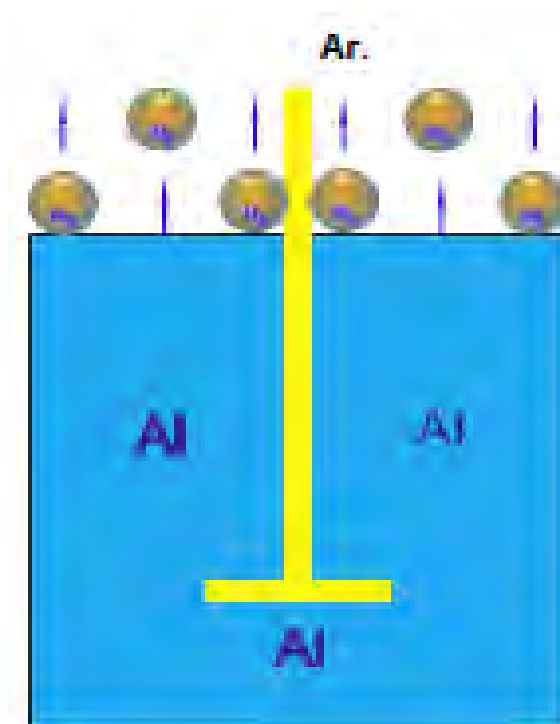


Figura 5. Remoción de H₂ a través de la superficie del Al líquido.

1.1.1 OBJETIVOS

- Desarrollar un modelo matemático que describa realísticamente la desoxidación de agua mediante un balance global de masa que considere la cinética del transporte de masa a través de un coeficiente global de transporte de masa.
- Validar el modelo con datos experimentales en un modelo físico.
- Analizar el efecto de las distintas variables de diseño (punto de inyección de gas) y de operación (flujo de gas y velocidad de rotación) sobre la cinética de desgasificación de aluminio y sus aleaciones con el método del rotor inyector.

1.1.2 HIPÓTESIS

La cinética de desoxidado de agua es similar a la cinética de desgasificado (deshidrogenizado) de aluminio y sus aleaciones líquidas. Esta cinética supone un control difusivo en la capa límite burbuja-baño que se puede representar con un coeficiente global de transferencia de masa.

1.1.3 Justificación y alcance del trabajo.

Es difícil medir en planta las variables que afectan la eficiencia del proceso de desgasificado de aluminio, como lo son el flujo de gas, la velocidad de rotación del rotor, la temperatura o incluso el diseño de la olla y rotor. Por eso, se puede construir como una herramienta de análisis ingenieril un modelo matemático junto con un modelo físico, las cuales son herramientas que permiten comprender la fenomenología que ocurre dentro de los crisoles donde se desgasifica el aluminio, ya que la cinética de desgasificación no se puede medir físicamente de manera fácil, y además, debido a la opacidad visual del sistema así como a las altas temperaturas que se manejan es mucho más práctico analizar el proceso con un modelo matemático validado con mediciones en un modelo físico, y mediante el cual se puede analizar el proceso para ver el efecto de variables como velocidad de giro del rotor en RPM, flujo de gas, posición del rotor, y estudiar la fluidinámica así como procesos de transporte de materia del aluminio líquido en sistemas bifásicos (líquido-gas). Con el desarrollo del modelo matemático para el desgasificado en un sistema agua-oxígeno, que es similar al desgasificado aluminio líquido, podemos entender y mejorar la desgasificación en el aluminio líquido para obtener piezas de buena calidad al ser vaciadas.

1.1.4 Estado del arte.

Existe en la literatura una gran variedad de modelos matemáticos para describir el proceso de desgasificado de aluminio desde la década de los años 80's, iniciando con los trabajos de Dantzig, Clumpner [11], Saturnus and Botor [12], Sigworth and Engh [13], para la década de los 90' s con el uso de computadoras más rápidas se utilizaron las técnicas de CDF (Computational Fluid Dynamics), para estudiar los efectos del desgasificado de aluminio Johansen [14], Guo and Irons [15], Xu and Mc Grath [16], Dong, Johansen [17], Jones and Launder [18].

José Luis Camacho Martínez, y colaboradores [19], realizaron un estudio hidrodinámico de la desgasificación de aluminio por la técnica de rotor-inyector en un modelo físico de H₂O-O₂, para tres distintas geometrías de rotores. Los autores reportan mapas vectoriales de velocidad, perfiles radiales de velocidad en diferentes planos propuestos para cada uno de los tres diseños de rotores.

J. J. J. Chen y J. C. Zhao [20], estudiaron la distribución de burbujas dispersas por un rotor en un modelo físico, para describir el proceso de tratamiento de aluminio fundido.

1.2.1 Modelado matemático del proceso de desgasificado de aluminio líquido.

a) Modelos analíticos

J. A. Dantzig, J. A. Clumper y E. Tyler [21] desarrollaron un modelo matemático para el proceso de desgasificación de aluminio mediante la inyección de un gas insoluble, se considera la difusión del hidrógeno disuelto en el metal fundido hacia la burbuja del gas inerte y la cinética de adsorción de hidrógeno en la superficie de la burbuja. El modelo se desarrolló, en una columna de diámetro reducido. Para este modelo se consideran tres grupos de números adimensionales β , N_D y α

El primer grupo es β , dada por la ecuación (1.4):

$$\beta = \frac{b}{r} \quad (1.4)$$

donde β es un factor geométrico, siendo b el radio interno de la columna y r el radio del cilindro. El segundo grupo N_D se da por la ecuación (1.5):

$$N_D = \frac{d_b^2 n_b k r (C_0 - C_{eq})}{b D} \quad (1.5)$$

N_D es la rapidez de incorporación de hidrógeno dentro de la columna de la burbuja con respecto a la rapidez de difusión de hidrógeno a través del líquido, en donde d_b corresponde al diámetro promedio de la burbuja, n_b es el número de burbujas por unidad de longitud en la columna, k es la constante de rapidez de la reacción de desgasificado por unidad de área de burbuja, C_0 concentración inicial de hidrógeno, C_{eq} concentración de hidrógeno en equilibrio con el gas de purga, D es el coeficiente de difusión del hidrógeno en aluminio líquido.

Finalmente el tercer grupo se da en la siguiente ecuación:

$$\alpha = \frac{2C_{eq}}{C_0 - C_{eq}} \quad (1.6)$$

Este grupo α , determina la concentración al equilibrio de hidrógeno en el líquido que es estimada totalmente *a priori*. El modelo se validó con diferentes flujos de gas y tamaños de reactor obteniendo resultados aceptables.

Qian Fu y James Evans [22], desarrollaron un modelo matemático para la remoción de Mg en aluminio líquido, las dimensiones y procedimientos realizados se encuentran detallados en la primera parte de este trabajo [22]. Las principales consideraciones para este modelo son:

1. El Cl_2 es convertido a $AlCl_3$ en un tiempo mucho menor que el tiempo de residencia de la burbuja dentro del metal líquido.
2. El $MgCl_2$ producido por la subsecuente reacción con el $AlCl_3$ no interfiere con el avance de la reacción.
3. El transporte de masa en la interface gas-metal del lado del gas, no es la etapa determinante.
4. La cinética de reacción en la interface gas-metal no es la etapa controlante.
5. La composición dentro del metal líquido es uniforme.
6. Las burbujas son de forma esférica y tienen la misma temperatura que el metal fundido.
7. La velocidad terminal de ascenso de las burbujas a través del metal fundido es determinada por el tamaño de la burbuja, pero no es afectado por la presencia de otras burbujas. La presión en la burbuja es igual a la presión metalostática a la altura H más la presión en la superficie del metal.
8. La reacción en la superficie del metal es despreciable.

Con estas consideraciones se obtiene un modelo para el cambio en el contenido de $AlCl_3$ en una burbuja que asciende a través del metal fundido, dado por el balance de masa expresado en la ecuación (1.7):

$$\frac{dn_{AlCl_3}}{dt} = \frac{d(V_b \rho_g C_g)}{dt} = -\frac{2}{3} k A_b \rho_l (C_l - C_{eq}) \quad (1.7)$$

Donde n_{AlCl_3} es el número de burbujas del $AlCl_3$, V_b corresponde al volumen de la burbuja, ρ_g y C_g son la densidad y concentración del gas, k corresponde al coeficiente de transporte de masa, A_b es igual al área de la burbuja, ρ_l denota la densidad del líquido, C_l es la concentración de metal fundido, C_{eq} corresponde a la concentración del $AlCl_3$ al equilibrio. Con el modelo propuesto los autores lo aplicaron a nivel industrial obteniendo buenos resultados.

Jeong-Whan Han y colaboradores [23], simularon en un modelo físico H_2O-O_2 la cinética de desgasificación de hidrógeno en la refinación de aleaciones base Mg (AZ91D). Los autores

realizaron una revisión teórica de la cinética de desgasificación de hidrógeno. Se tienen dos consideraciones principales del sistema de estudio, las cuales son:

1. El oxígeno disuelto se encuentra homogéneamente distribuido en todo el reactor.
2. La remoción de oxígeno, es determinada por la rapidez de transporte de masa de oxígeno disuelto en el agua hacia la superficie de la burbuja.

A partir de estas consideraciones se obtiene el siguiente modelo matemático, que es un balance de masa expresado por la ecuación (1.8).

$$-V_l \frac{dC_{O_2}}{dt} = k A_b (C_{O_2}^0 - C_{O_2}) \quad (1.8)$$

V_l es el volumen del líquido, C_{O_2} corresponde a la concentración del oxígeno al tiempo t , k es el coeficiente de transporte de masa, A_b es el área de la burbuja, $C_{O_2}^0$ denota la concentración inicial de oxígeno.

Con las condiciones iniciales y de frontera adecuadas se obtiene la solución analítica de la ecuación (1.8):

$$C_{O_2} = (C_{O_2})_0 + [(C_{O_2})_0 - (C_{O_2})_{eq}] \exp\left\{-\frac{k A_b}{V_l} t\right\} \quad (1.9)$$

En el artículo, se describen las dimensiones del sistema, así como resultados obtenidos durante la experimentación, pero no muestra la aplicación industrial del modelo.

Z.C. Hu, E.L., Zhang y S.Y Zeng [24], desarrollaron un modelo matemático para simular la remoción de hidrógeno en una aleación de Mg (AZ92), mediante la técnica de rotor-inyector. Se utilizó un modelo físico H_2O-O_2 , para determinar el área superficial total de las burbujas de gas inyectadas. De acuerdo al modelo propuesto por Warke, V.S. et al [25], la concentración de hidrógeno en el metal fundido es descrita por el siguiente balance general de masa, dado por la ecuación (1.10):

$$k A_b C_H = V_l \frac{dC_H}{dt} \quad (1.10)$$

A_b es el área de la burbuja, k corresponde al coeficiente de transporte de masa, C_H denota la concentración de hidrógeno en el metal líquido, V_l es el volumen del metal líquido.

La solución de la ecuación (1.10) es la ecuación (1.11):

$$C_H = (C_H)_0 \exp\left(-\frac{A_b}{V_l} t\right) \quad (1.11)$$

Con los resultados obtenidos experimentalmente para el área superficial total de las burbujas y el coeficiente de transporte de masa, se verificó el modelo en un reactor con una aleación comercial de Mg (AZ91) a una temperatura de 700 - 750 °C. El desgasificado se llevó a cabo con un rotor a 280 rpm y un flujo de Ar de 1.0 litro por minuto, obteniendo resultados concordantes entre el modelo propuesto y los valores experimentales.

b) Modelos que usan dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics (CFD))

Byung S. Choi y colaboradores [26] realizaron estudios de CFD (Computational Fluid Dynamics por sus siglas en inglés) en el en la predicción del tiempo de residencia y compararon los resultados obtenidos contra datos experimentales utilizando un modelo de turbulencia en el software FLUENT versión 6., obteniendo perfiles de vectores de velocidad para flujos turbulentos.

D. Mazumdar, R. I. L. Guthrie y Y. Sahai [27] desarrollaron modelos matemáticos para describir los fenómenos de flujo y turbulencia en tanques agitados axisimétricos, basados en evidencia teórica y experimental los cálculos fueron realizados con el Software PHOENICS, resolviendo el conjunto de tres ecuaciones diferenciales parciales, es decir, resolviendo la ecuación de continuidad, la ecuación de conservación de momentum en la dirección radial y axial respectivamente. Aunque se obtuvieron resultados similares con los datos experimentales llegan a existir algunas discrepancias significativas que son tratadas por los autores.

M. A. Ramírez Argáez [28], ha estudiado el efecto de las diferentes variables en el proceso de refinamiento del aluminio con técnicas CFD y modelado físico en sistemas Agua-oxígeno, obteniendo campos de velocidad, la influencia de la profundidad, geometría, y rapidez del rotor, velocidad de flujo, método de inyección.

En el presente trabajo se desarrolló un modelo matemático para la desoxidación de agua basado en un modelo de la desgasificación de aluminio mediante un balance global de masa que considera la cinética del transporte de masa a través de un coeficiente global de transporte de masa; el modelo matemático se validó con datos experimentales en un modelo físico de manera satisfactoria. Asimismo se realizó un análisis de las variables del proceso: velocidad de rotación del rotor, rapidez de flujo del gas de purga y el punto de inyección del mismo.

Capítulo 2

Desarrollo del Modelo Matemático

2.1 Modelo Matemático

El presente modelo se desarrolló para describir el proceso de desgasificación de un sistema H_2O-O_2 . Este sistema de desgasificado emplea la inyección de N_2 gaseoso. El modelo físico fue construido por Iván Torres [7] y colaboradores, para simular la desgasificación de aluminio puro, donde el agua sustituye al aluminio, el O_2 disuelto al H_2 y el gas de purga Ar es remplazado por N_2 . Este modelo físico representa un reactor de tipo batch de escala 1:1, diseñado por la empresa Cooper Crouse Hinds (ver Figuras 2.1 y 2.2). El modelo físico consiste en un cilindro de acrílico de 0.52 metros de diámetro (tanque d) el cual es llenado hasta una altura igual a la del diámetro del reactor (ver Figura 2.3)

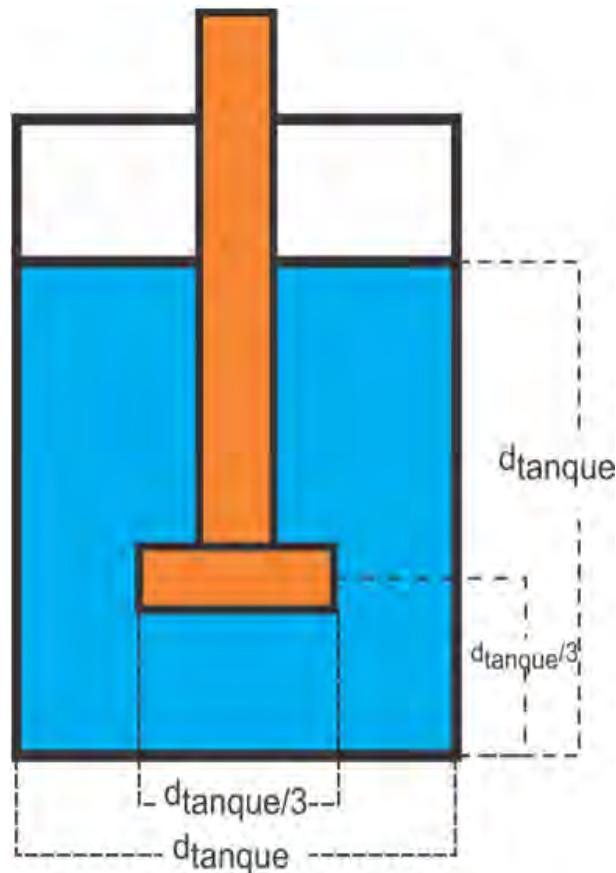


Figura 2.1 Esquema de las dimensiones del modelo físico escalado 1:1 al sistema real.



Figura 2.2. Reactor industrial para el desgasificado de aluminio.

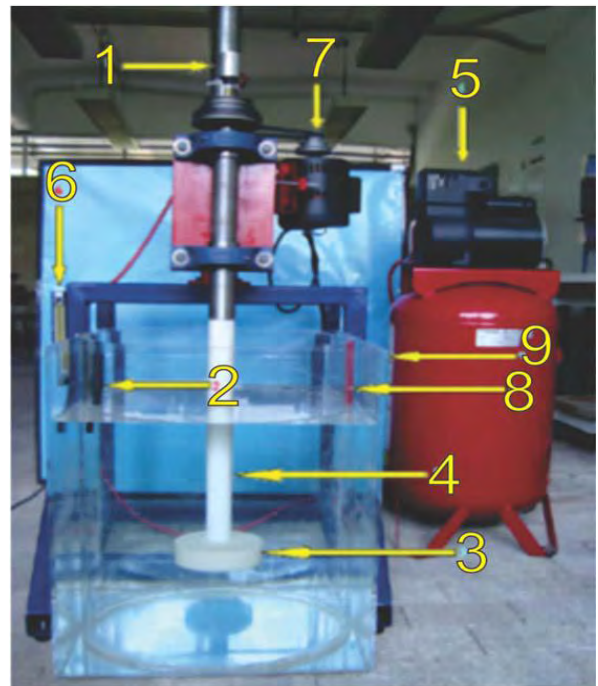


Figura 2.3. Modelo físico del reactor. 1) Junta rotativa. 2) Oxímetro. 3) Rotor de Nylamid. 4) Flecha de Nylamid. 5) Compresor. 6) Flujómetro. 7) Motor. 8) Reactor. 9) Recipiente externo del reactor



Figura 2.4. Rotor FDU-SPR de FOSECO



Figura 2.5. rotor B fabricado en Nylamid.

Torres [5], desarrolló un diseño experimental en un modelo físico que construyó, donde analizó los principales parámetros de operación y su efecto combinado, las variables son: la velocidad de rotación del rotor, velocidad de flujo del gas de purga y método de inyección del gas de purga (por el fondo y de manera convencional a través del rotor). Para ello utilizó un rotor FDU-SPR patentado por la compañía FOSECO TM (ver Figura 2.4), el cual fue fabricado en Nylamid™ para la realización del trabajo experimental con el modelo físico (ver Figura 2.5).

Todo modelo matemático consiste en formular suposiciones simplificativas, plantear las ecuaciones gobernantes y las condiciones iniciales pertinentes.

2.1.1 Suposiciones del modelo matemático.

1. El baño se encuentra bien agitado de tal forma que la concentración de oxígeno disuelto es la misma o es uniforme en todo el reactor.
2. La presión parcial de oxígeno, P_{O_2} en las burbujas, a la misma altura en el volumen de control es la misma.
3. El transporte de masa del oxígeno disuelto en la capa límite en la burbuja, es la etapa controlante del proceso.
4. El baño es poco profundo (menor a 1 metro), de forma que no se toma en cuenta el cambio total de presión y por lo tanto no se considera una posible expansión de burbujas.
5. La presión parcial de oxígeno es mucho más pequeña que la presión total de la burbuja.
6. El área superficial de las burbujas es función solamente de la altura del baño
7. Las burbujas son esferas rígidas.
8. Se desprecia la coalescencia de las burbujas.
9. El baño es isotérmico.

Discusión de las consideraciones.

La consideración de la primera suposición no siempre es válida. En reactores que utilizan tapones porosos no se logra un mezclado homogéneo lo cual causa que existan gradientes de concentración. En reactores que utilizan impeller con un diámetro igual a un tercio del diámetro del reactor $d_{imp} = \frac{d_{tanque}}{3}$ se logra un mezclado homogéneo, por lo que es válida esta suposición en nuestro caso.

La presión parcial de oxígeno depende del diámetro de la burbuja (es mayor en burbujas pequeñas). Además, estrictamente hablando esta consideración es válida solo si no existe una gran distribución en el tamaño y velocidad de ascenso de las burbujas.

El mecanismo de desgasificación se lleva mediante los siguientes pasos:

- a) El oxígeno se transporta en líquido hacia la vecindad de una burbuja de las de purga mediante convección y difusión.

- b) Transporte difusivo a través de la capa límite que rodea a la burbuja.
- c) La adsorción y desorción química en la superficie de la burbuja.
- d) Difusión del oxígeno hacia el centro de la burbuja del gas de purga.
- e) Remoción del oxígeno a través de la superficie del líquido.

Por evidencia experimental se sabe que la etapa b) es la más lenta de todas las mencionadas [8, 23] et al y por lo tanto controla la cinética de la desoxidación.

En cuanto a la presión total de la burbuja y su posible cambio de presión con su ascenso, se tiene que dicha presión total se da por:

$$P_t = P_b + \rho g \Delta H + 4 \frac{\sigma}{d_b} \quad (2.1)$$

Donde P_b representa la presión de la burbuja, el segundo término $(\rho g \Delta H)$ representa la presión hidrostática del fluido y el tercer término $[4 \frac{\sigma}{d_b}]$ representa la presión debido a las fuerzas de tensión superficial.

Para burbujas de un centímetro de diámetro se ha demostrado que el término $[4 \frac{\sigma}{d_b}]$ es alrededor de 0.017 atm y el producto ρg es $0.227 \frac{atm}{m}$. Entonces, las presiones debidas a la tensión superficial y columna de agua son despreciables para reactores relativamente pequeños.

La suposición número 5 asume que todas las burbujas tienen el mismo comportamiento de ascenso, independientemente de la posición donde se encuentren dentro del reactor.

La presión total dentro de la burbuja (despreciando las fuerzas de viscosidad) es:

$$P_T = P_{N_2} + P_{O_2} \quad (2.2)$$

Si consideramos que la presión ejercida por el oxígeno es despreciable tenemos:

$$P_{O_2} \ll P_{O_2} \quad (2.3)$$

$$P_T \simeq P_{N_2} \quad (2.4)$$

Por lo tanto, se tiene que la presión dentro de la burbuja es constante y esto aplica para reactores que no trabajan bajo condiciones de vacío y la presión de trabajo es igual a una atmósfera de presión.

La suposición número 7, el error involucrado es probablemente pequeño, debido a que las propiedades como es el coeficiente de transporte de masa k , el área superficial A_b y la velocidad de ascenso de la burbuja U_b , se encuentran relacionadas con el volumen de la burbuja V_b .

La coalescencia de burbujas ascendiendo a través del baño no es considerada en el modelo dada la complejidad del fenómeno. Finalmente, no se considera la expansión térmica de la burbuja ya que se trabajó con bajas temperaturas en el modelo físico que está en equilibrio térmico con sus alrededores (alrededor de 20.0 °C).

La coalescencia de burbujas ascendiendo a través del baño no es considerada en el modelo dada la complejidad del fenómeno. Finalmente, no se considera la expansión térmica de la

burbuja ya que se trabajó con bajas temperaturas en el modelo físico que está en equilibrio térmico con sus alrededores (alrededor de 20.0 °C).

2.1.2 Balance de masa en un volumen de control.

La disolución de oxígeno en agua se puede expresar de la siguiente forma:



Es conocido que el oxígeno se disuelve en agua de forma molecular (ecuación (2.5)). Para el desarrollo del modelo matemático, se consideró el ascenso de una burbuja del gas de purga dentro de un volumen de control de espesor Δh en el reactor (ver Figura 2.6). El balance de masa para O_2 es el siguiente:

$$O_2 \text{ que se encuentra en la burbuja} = O_2 \text{ disuelto en el líquido}$$

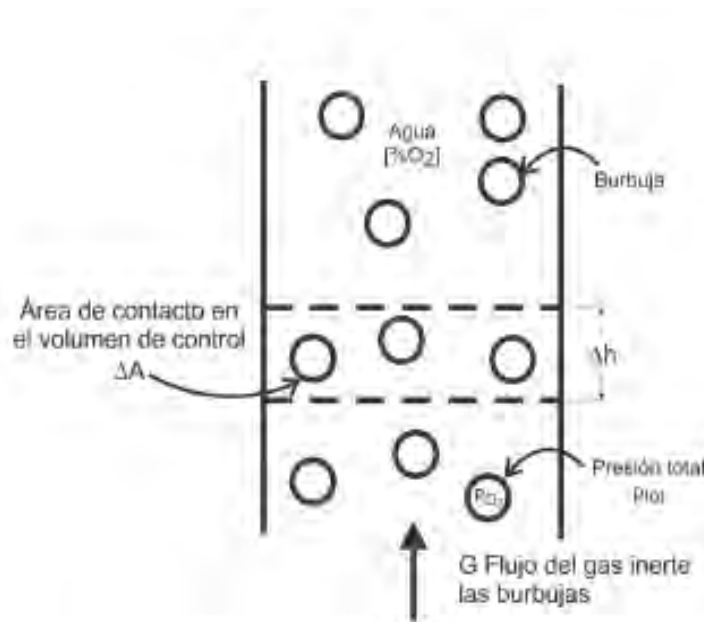


Figura 2.6. Volumen de control en el reactor con el gas de purga.

En forma matemática se tiene:

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b}{100 M W_{O_2}} ([\% O_2] - [\% O_2]_{eq}) = \dot{G} \Delta \left[\frac{P_{O_2}}{P_{tot}} \right] \quad (2,6)$$

Donde $([\% O_2] - [\% O_2]_{eq})$ es la fuerza motriz para la difusión de oxígeno. $[\% O_2]_{eq}$ es la concentración al equilibrio de oxígeno en el agua en ppm, k es el coeficiente de

transporte de masa en $\frac{m}{s}$, ΔA_b es el área superficial de las burbujas en el volumen de control en m^2 , \dot{G} es la rapidez del flujo molar del gas de purga $\frac{kmol}{s}$, MW_{O_2} es la masa molecular del oxígeno gaseoso en $\frac{kg}{kmol}$, P_{tot} , P_{O_2} y P_{inert} son la presión total en la burbuja, P_{O_2} es la presión parcial de O_2 y P_{inert} la presión parcial del gas de purga en *atm*. La concentración al equilibrio de $[\% O_2]_{eq}$ en la superficie de la burbuja está dada por la relación de la constante de equilibrio.

$$K = \frac{P_{O_2}}{[\%O_2]_{eq} f_{O_2}} \quad (2.7)$$

$$h_{O_2} = f_{O_2} [\%O_2] \quad (2.8)$$

Donde f_{O_2} es el coeficiente de actividad henriano de oxígeno en agua y h_{O_2} es la actividad henriana del O_2 en agua.

Si combinamos la ecuación (2.6) y (2.7) obtenemos:

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b}{100 MW_{O_2} \dot{G}} = \frac{1}{P_{tot}} \frac{\Delta P_{O_2}}{\left\{ [\%O_2] - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} K} \right\}} \quad (2.9)$$

Rearreglando los términos, llegamos a la siguiente expresión:

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b P_T}{100 MW_{O_2} \dot{G}} = \int_0^{P_{O_2}} \frac{dP_{O_2}}{[\%O_2] - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} K}} \quad (2.10)$$

Integrando desde el fondo de la olla hasta la superficie del baño $P_{O_2}^\circ$ se obtiene:

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b P_T [\%O_2]}{100 MW_{O_2} \dot{G}} = \int_0^{P_{O_2}^\circ} \frac{dP_{O_2}}{1 - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} [\%O_2] K}} \quad (2.11)$$

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b P_T [\%O_2]}{100 MW_{O_2} \dot{G}} = -\frac{f_{O_2} [\%O_2]}{K} \ln \left\{ 1 - \frac{K}{f_{O_2} [\%O_2]} P_{O_2}^\circ \right\} \quad (2.12)$$

$$\frac{k \rho_l \Delta A_b P_T}{100 MW_{O_2} \dot{G} f_{O_2}} = \ln \left\{ \frac{[\%O_2]}{[\%O_2] - \frac{P_{O_2}^\circ}{f_{O_2}}} \right\} \quad (2.13)$$

Si introducimos el número adimensional Z y lo definimos como:

$$Z = \frac{K P_{O_2}^\circ}{f_{O_2} [\%O_2]} \quad (2.14)$$

Sustituyendo la ecuación (2.14) en (2.12) se tiene:

$$\frac{k \rho_l A_b P_T [\%O_2]}{100 MW_{O_2} \dot{G}} = - \frac{f_{O_2} [\%O_2]}{K} \ln(1 - Z) \quad (2.15)$$

El parámetro Z representa la capacidad de las burbujas para remover el oxígeno a través de la superficie de las burbujas. Este parámetro Z fue sugerido por Engh [29]. Si se define el número adimensional Ψ como:

$$\psi = \frac{k \rho_l A_b P_T K}{100 MW_{O_2} \dot{G} f_{O_2}} \quad (2.16)$$

Entonces la ecuación (2.13), puede ser escrita como:

$$Z = 1 - \exp(-\psi) \quad (2.17)$$

Para el número Ψ pueden apreciar que:

$$\psi = \frac{\rho_l P_T}{100 MW_{O_2} \dot{G}} \frac{k K}{f_{O_2}} A_b \quad (2.18)$$

El primer término de lado derecho de la ecuación 2.18 corresponde a una constante (densidad del líquido, presión total, peso molecular rapidez de flujo molar del gas de purga \dot{G}), el segundo término relaciona los parámetros cinéticos y termodinámicos del sistema (coeficiente de transporte de masa k , la constante de equilibrio K , el coeficiente de actividad f), mientras que el tercer término es función de los parámetros de operación (área de la burbuja).

2.1.3 Balance en reactores batch.

Para reactores batch, el balance de masa total de oxígeno disuelto $[\%O_2]$ se puede expresar de la siguiente forma:

$$- \frac{M}{100 MW_{O_2}} \frac{d}{dt} [\%O_2] = \dot{G} \frac{P_{O_2}^\circ}{P_T} \quad (2.19)$$

Si despejamos $P_{O_2}^\circ$ de la ecuación (2.14) y sustituimos el valor de $P_{O_2}^\circ$ en la ecuación (2.19) se obtiene:

$$\frac{d[\%O_2]}{[\%O_2]} = - \frac{100 f_{O_2} Z MW_{O_2} \dot{G}}{M P_T K} dt \quad (2.20)$$

M es la masa del baño metálico. Si integramos la ecuación (2.20) desde $[\%O_2] = [\%O_2]_0$ hasta $[\%O_2]$ y desde $t = 0$, hasta $t = t$ se obtiene:

$$\frac{[\%O_2]}{[\%O_2]_0} = \exp \left\{ - \frac{100 f_{O_2} Z MW_{O_2} \dot{G}}{M P_T K} t \right\} \quad (2.21)$$

En donde $[\%O_2]_0$ representa la concentración inicial de O_2 disuelto en el reactor y $[\%O_2]$ representa la concentración de O_2 disuelto en el reactor al tiempo t .

De lo anterior se puede observar que solo es necesario determinar el coeficiente de transporte de masa k y el área interfacial total del gas de purga A_b para definir la evolución de O_2 mediante la purga con N_2 gaseoso. Los parámetros restantes son conocidos o son variables de operación del proceso.

2.2 Correlaciones para el cálculo de las propiedades termodinámicas

Se recopilaron correlaciones teóricas, semiempíricas y experimentales para el cálculo de las propiedades termodinámicas y cinéticas. La Tabla 4 muestra las correlaciones utilizadas en el modelo propuesto. En dicha tabla, μ_{H_2O} y μ_{N_2} son las viscosidades de agua y nitrógeno respectivamente en Kg/ms, ρ_{H_2O} y ρ_{N_2} son las densidades de agua y nitrógeno en Kg/m³, T es la temperatura en K, P_T es la presión en atm, K es la constante del equilibrio (2.5), $D_{O_2-H_2O}$ es el coeficiente de difusión de oxígeno disuelto en agua en m²/s y σ_{H_2O} es la tensión superficial en N/m, MW_{N_2} y MW_{H_2O} son los pesos moleculares de nitrógeno y agua en Kg/Kgmol, mientras que otros números como μ_{res} , μ_{dil} , δ , τ , T_c y Ω son definidos en la misma tabla.

Autor	Fórmula	Unidades	intervalo
Densidad Kell	$\rho_{H_2O} = [999.83952 + 16.945176(T - 273.15) - 7.9870401 * 10^{-3}(T - 273.15)^2 - 46.170461 * 10^{-6}(T - 273.15)^3 + 105.56302 * 10^{-9}(T - 273.15)^4 - 280.54253 * 10^{-12}(T - 273.15)^5] / (1 + 16.879850 * 10^{-3}T)$ <p style="text-align: right;">(2.22)</p>	$\frac{Kg}{m^3}$	$0 \leq T \leq 150^\circ C$ P=0.1MPa
Viscosidad Patek, J. y Colaboradores	$\mu_{H_2O} = 1 * 10^{-6} (280.68 T^{-1.9} + 511.45 T^{-7.7} + 61.131 T^{-19.6} + 0.45903 T^{-40.0})$ <p style="text-align: right;">(2.23)</p> $T^* = \frac{T}{300K}, T [=] K$ <p style="text-align: right;">(2.24)</p>	Pa s	$253.15 \leq T \leq 383.15 K$ P=0.1MPa
Coeficiente de difusión Wike y Chang	$D_{O_2-H_2O} = 7.4 * 10^8 \frac{(2.6 MW_{H_2O})^{0.5} T}{\mu_{H_2O} (V_m^{0.6})_{O_2}}$ <p style="text-align: right;">(2.25)</p> $MW_{H_2O} [=] \frac{g}{mol}, \quad \mu [=] cp, \quad V_m [=] \frac{cm^3}{mol}, \quad T [=] K$	$\frac{cm^2}{s}$	No específica
Tensión Superficial Vargaftik, N.B. y colaboradores	$\sigma_{H_2O} = 235.8 * 10^{-3} \left[\frac{T_c - T}{T_c} \right]^{1.256} \left[1 - 0.625 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \right]$ <p style="text-align: right;">(2.26)</p>	$\frac{N}{m}$	$273.15 \leq T \leq 647.15 K$
Constante de equilibrio Tromans	$K = \exp \left[\frac{0.046T^2 + 203.35T \ln \left(\frac{T}{298} \right) - (299.378 + 0.092T)(T - 298) - 20.591 * 10^3}{RT} \right]$ <p style="text-align: right;">(2.27)</p>		$273.15 \leq T \leq 400 K$

Tabla 4a. Fórmulas termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo.

Autor	Fórmula	Unidades	intervalo
Densidad Castellan G.	$\rho_{N_2} = \frac{P_T}{RT} MW_{N_2} \quad (2.28)$ $P_T [=] atm, \quad R [=] \frac{\text{litro atm}}{\text{mol } ^\circ K}, MW [=] \frac{kg}{kmol}$	$\frac{kg}{m^3}$	Temperaturas altas Presiones bajas
Viscosidad Lemmon	$\mu_{N_2} = 1 * 10^{-6} (\mu_{dil} + \mu_{res}) \quad (2.29)$ $\mu_{dil} = \frac{0.02666958 \sqrt{MW_{N_2} T}}{\sigma^2 \Omega}, \quad \sigma [=] nm \quad (2.30)$ $\Omega = \left[\begin{array}{l} 0.43100 - 0.4623(\ln \tilde{T})^{1.0} + 0.08406(\ln \tilde{T})^{2.0} \\ + 0.00331(\ln \tilde{T})^{3.0} - 0.00331(\ln \tilde{T})^{4.0} \end{array} \right] \quad (2.31)$ $\tilde{T} = \frac{T}{\left(\frac{\sigma}{K}\right)} \quad (2.32)$	Pa s μPa s Adimen- sional Adimen- sional	$233 \leq T \leq 523K$ $0.09 \leq P \leq 29.7MPa$
Viscosidad Lemmon	$\mu_{res} = \frac{10.72\tau^{0.10}\delta^{2.00} + 0.3989\tau^{0.25}\delta^{10.0}\exp(-\delta^{1.0}) + 0.001208\tau^{3.20}\delta^{12.0}\exp(-\delta^{1.0})}{7.402\tau^{0.90}\delta^{2.0}\exp(-\delta^{1.0}) + 4.620\tau^{0.30}\delta^{1.0}\exp(-\delta^{3.0})} \quad (2.33)$ $\tau = \frac{T_c}{T}, \quad T_c [=] K \quad (2.34)$ $\delta = \left(\frac{\rho}{\rho_c}\right)_{N_2}, \quad \rho [=] \frac{kmol}{m^3} \quad (2.35)$	μPa s Adimen- sional Adimen- sional	

Tabla 4b. Fórmulas termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo

2.3 Determinación de coeficientes de transporte de masa.

La determinación de los coeficientes de transporte de masa en tanques agitados en una tarea difícil, ya que este parámetro puede estar afectado por:

1. Variables geométricas: diámetro del reactor (d_{tanque}), diámetro del impeller (d_{imp}), la altura del impeller desde la base del reactor (H_F).
2. Variables de operación: tipo de inyección del gas dentro del reactor, velocidad de rotación (N), altura del líquido (H), altura del líquido por encima del impeller (H_L), temperatura y presión parcial del gas (P).
3. Variables fisicoquímicas: Viscosidad del líquido (μ_l), densidades del gas y líquido (ρ_l , ρ_g) tensión superficial del líquido (σ_l) difusión del líquido (D_{g-l}) y la composición impurezas/mezcla (X_W).

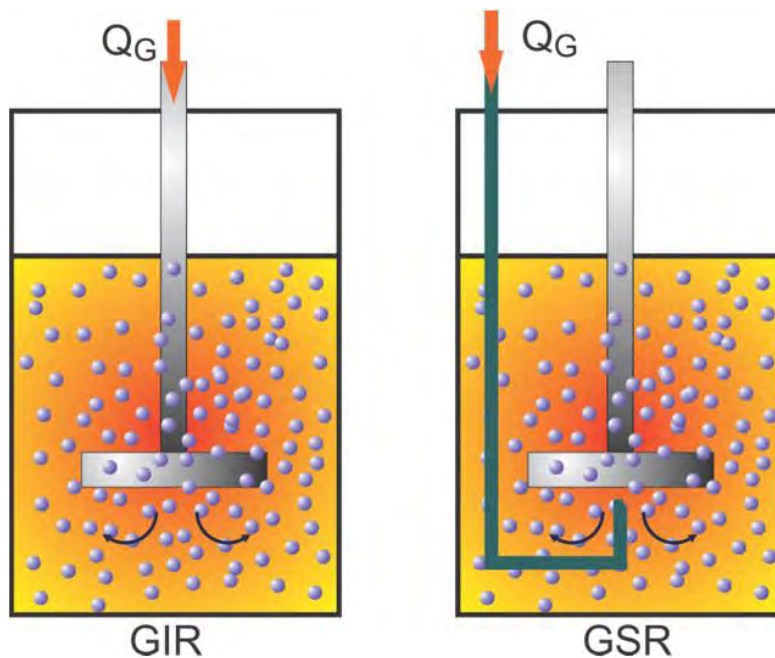


Figura 2.7 Representación esquemática de los reactores GIR y GSR

Para el cálculo del transporte de masa y el diámetro promedio de la burbuja se utilizaron las correlaciones y el algoritmo propuesto por Lemoire [30] ya que considera los dos casos de tanques inyectados desde el fondo denominado GSR por sus siglas en Inglés (Gas Spargin Reactor) mediante la inducción del gas por el impeller denominado GIR por sus siglas en inglés (Gas Inducing Reactor); ver Figura 2.7. Además el autor toma en cuenta las dimensiones del reactor, la distancia del impeller hasta la superficie del fluido, la velocidad de

rotación del impeller, rapidez de flujo del gas de purga y las propiedades fisicoquímicas tanto del líquido como del gas. Las Tablas 5 y 6 muestran las correlaciones utilizadas para el cálculo de kA para cada reactor.

Relación	Unidades
$kA = 1.383 * 10^5 \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \varepsilon^{0.155} d_b^{0.144}}{\rho_{N_2}^{0.060}} \left[\frac{P^*}{V_L} \right]^\delta U_g^\eta \exp(-2.011X_w) \quad (2.36)$	s^{-1}
$\delta = 7.010 * 10^{-6} d_{imp}^{-0.395} d_r^{4.183} N^{2.237} \mu_l^{0.126} H_L^{-0.658} \quad (2.37)$	
$\eta = 0.420 d_{imp}^{-2.385} d_r^{-2.485} N^{-3.338} \sigma_l^{-0.261} H_L^{3.249} \quad (2.38)$	

Tabla 5. Correlaciones para el cálculo de kA para reactores GIR.

En donde $D_{H_2O-O_2}$, representa el coeficiente de difusión de oxígeno en agua, $\left[\frac{P^*}{V_L} \right]$ es la potencia total de entrada (mecánica+gas) por unidad de volumen, U_g es la velocidad superficial del gas de purga, N es la velocidad de rotación del impeller, ε es la fracción de gas retenida, μ_l es la viscosidad del líquido, ρ_{N_2} es la densidad del gas de purga, d_b es el diámetro promedio de la burbuja, H_L es la altura desde el impeller hasta la superficie del baño, d_{imp} es el diámetro del impeller y δ , η son parámetros obtenidos mediante análisis estadístico.

Relación	Unidades
$kA = 2.564 * 10^3 \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \varepsilon^{0.575}}{\rho_{N_2}^{0.060} d_b^{0.402}} \left[\frac{P^*}{V_L} \right]^\delta U_g^\eta \exp(-2.402X_w) \quad (2.39)$	s^{-1}
$\delta = 4.664 * 10^{-4} d_r^{-0.395} N^{0.593} \mu_l^{-0.769} \quad (2.40)$	
$\eta = 9.475 * 10^{-5} d_{imp}^{0.363} d_r^{-2.485} N^{0.967} \rho_l^{-0.470} \mu_l^{-0.884} H_L^{-1.440} \quad (2.41)$	

Tabla 6. Correlaciones para el cálculo de kA para reactores GSR

2.4 Determinación del diámetro promedio de burbuja.

Para el cómputo del diámetro promedio de burbuja se utilizaron las correlaciones propuestas por Lemoine [38], et al, la cuales son mostradas en las Tablas 7 y 8 para los reactores GIR y GSR respectivamente.

Relación	Unidades
$d_b = 2.61 * 10^{-3} U_g^\gamma \varepsilon^\lambda \quad (2.42)$	m^2
$\gamma = 3.980 * 10^{-2} d_{imp}^{1.500} d_r^{-2.020} N^{0.419} \mu_l^{0.102} \quad (2.43)$	
$\lambda = 3.310 * 10^{-2} \rho_l^{0.373} \sigma_l^{-0.044} \rho_g^{-0.093} H_L^{0.070} \exp(-1.180XW) \quad (2.44)$	

Tabla 7. Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GIR.

Relación		Unidad
$d_b = 9.38 * 10^{-3} U_g^Y \varepsilon^\lambda$	(2.45)	m^2
$\gamma = 1.380 * 10^{-2} d_{imp}^{-0.878} d_r^{0.351} N^{0.563} \mu_l^{0.185}$	(2.46)	
$\lambda = 1.300 * 10^{-2} \rho_l^{7.490} \sigma_l^{-0.240} \rho_g^{-0.196} H_L^{0.070} \exp(-8.470XW)$	(2.47)	

Tabla 8. Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GSR

2.5 Método de Solución.

Para el cálculo del modelo propuesto se desarrolló una aplicación de consola en el lenguaje de programación Intel® Visual Fortran Compiler v11.0, en donde es necesario ingresar los datos de operación (temperatura, dimensión del reactor, dimensión y velocidad del impeller, rapidez del flujo del gas de purga, dimensiones del reactor y tipo de reactor). El programa contiene las ecuaciones para el cálculo de los parámetros y propiedades termodinámicas presentadas anteriormente. Por último, el programa escribe un archivo de texto con los resultados correspondientes a la concentración adimensional de oxígeno disuelto en agua *versus* tiempo [s] (ver Figura 2.8).

```

ITERACION:00 AlDegassing.f90 Páginas de inicio
96 REAL, PARAMETER :: PARAMETRO_LEN_CON = 0.3656 !m
97 !REAL, PARAMETER :: R_LAIM = 0.08206 ((L LIM)/(MOL*E)) BERRY
98 REAL, PARAMETER :: PRECION = 3.0 !atm
99
100 REAL, PARAMETER :: F_O2 = 1
101 REAL, PARAMETER :: Ptot= 1 !Unidades [atm] lata = 101325 Pa
102 REAL, PARAMETER :: DIAMETRO_BURBUJA = 0.005 !m
103
104 !-----
105 !----- Decod de trabajo -----
106 !-----
107 REAL, PARAMETER :: Diametro_casque = 0.52 !m
108 REAL, PARAMETER :: altura_tanque = 0.52 !m
109 REAL, PARAMETER :: Diametro_impeller = 0.18 !m
110
111 REAL, PARAMETER :: PCI_O2_in = 7.0 !ppm
112 REAL, PARAMETER :: Q5_LIM = 10.0 !LEM
113 REAL, PARAMETER :: RPM = 280.0 !RPM
114 REAL, PARAMETER :: TEMP_C = 30.0 !°C
115 INTEGER :: TIEMPO
116
117 !-----
118 !----- Caracteras Especiales -----
119 !-----
120 CHARACTER :: out
121 INTEGER :: input *148 !símbolo de grados
122 out = ACHAR(input)
123
124 !-----
125 !----- Datos de entrada -----
126 !-----
127
128
129
130 ! Body of AlDegassing

```

Figura 2.8. Pantalla ilustrativa del programa desarrollado.

La Figura 2.9 muestra un diagrama de flujo simplificado del algoritmo del programa escrito para el cálculo de la concentración de oxígeno disuelto en agua.

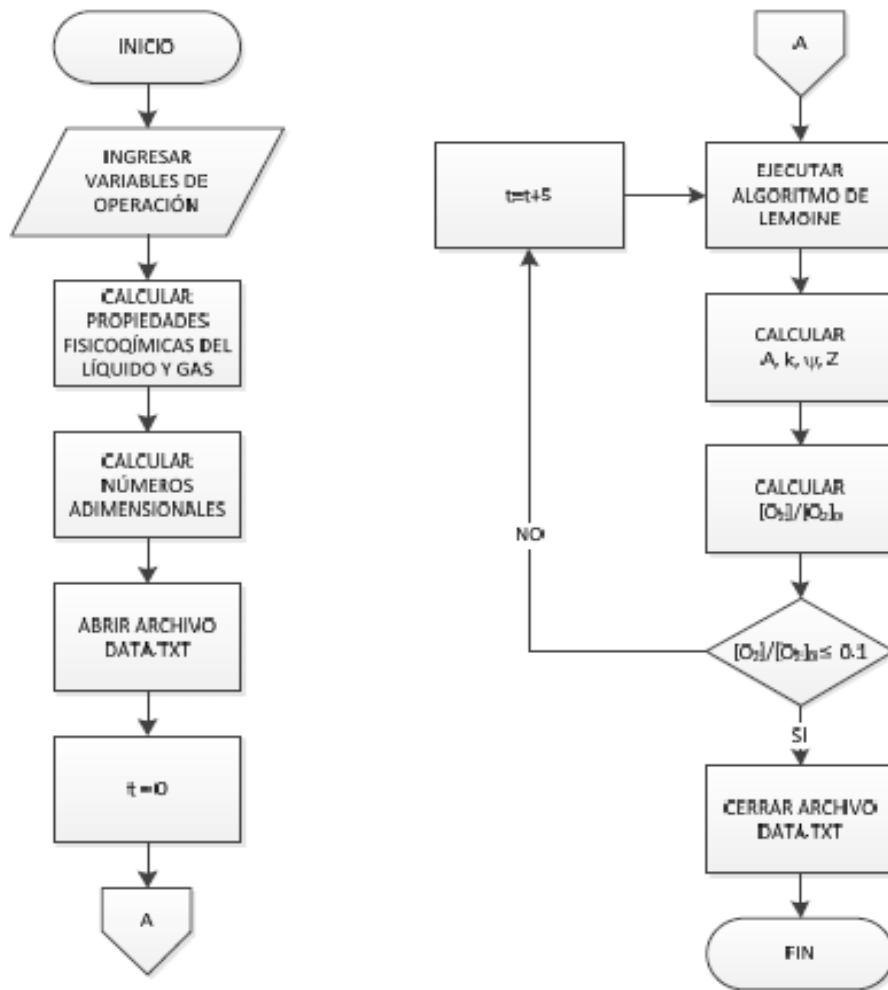


Figura 2.9. Diagrama de flujo del algoritmo propuesto.

Capítulo 3

Resultados y Análisis de Resultados

3.1 Resultados.

Para comprobar la validez del modelo desarrollado en la sección anterior es necesario validar los resultados obtenidos contra datos experimentales, para tal efecto se tomaron los resultados del trabajo realizado por Torres [5] et al. El autor realizó una serie de experimentos, en donde analizó el efecto en el desgasificado de oxígeno, estudiando los siguientes parámetros de operación: la velocidad de agitación N , la rapidez de flujo del gas de purga Q_g , y el modo de inyección del gas de purga (convencional a través del rotor y por el fondo).

Un segundo grupo de datos experimentales proporcionados por Maricruz Hernández estudiante de doctorado de este grupo de trabajo, fueron tomados para validar con el modelo propuesto; el sistema utilizado y las condiciones experimentales son las mismas que utilizó Torres [5] en su trabajo. La Tabla 3.1 y Figura 3.1 describen las condiciones experimentales empleadas y los valores obtenidos por ambos autores. Cabe señalar que parte del trabajo de Maricruz Hernández consiste en estudiar el efecto de cambiar el punto de inyección de gas que convencionalmente se hace a través del rotor inyectando el gas por la flecha. En su trabajo, Hernández realizó experimento en donde se inyectó el gas de purga en el modelo físico por el fondo, y no a través de la flecha-rotor, por lo que en la Tabla 3.1 se aprecia en la cuarta columna una variable extra denominada “forma de inyección”.

Experimento	Velocidad de agitación [rpm]	Rapidez de flujo del gas de purga [lpm]	Forma de inyección	Concentración inicial de O ₂ [ppm]	
				Torres	Hernández
1	573	40	1(convencional)	5,35	6.18
2	573	10	1(convencional)	5.44	6.14
3	290	40	1(convencional)	5.40	5.73
4	290	10	1(convencional)	5.38	6.20
5	573	40	2(fondo)	5.40	6.17
6	573	10	2(fondo)	5.38	6,14
7	290	40	2(fondo)	5.40	5.68
8	290	10	2(fondo)	5.38	5.73

Tabla 3.1. Parámetros experimentales utilizados para la eliminación de oxígeno disuelto en agua, mediante la inyección de N₂ en un modelo físico, realizado por Torres y Hernández.

La Figura 3.1 muestra gráficamente los resultados experimentales de desgasificado reportados por Torres y Hernández respectivamente, en la desoxidación de agua en modelo físico bajo las distintas condiciones de operación de cada experimento que se reportan en la Tabla 3.1. Se aprecia que para flujos altos de gas de purga (40 lpm) y velocidades de rotación altas (573 rpm) se obtiene la cinética de desgasificado más rápida, mientras que a

bajos flujo y velocidades de rotación (290 rpm y 10 lpm) se obtienen las cinéticas más lentas. También se aprecia que el punto de inyección de gas no es tan importante a altas rpm, mientras que a bajas rpms la inyección por el fondo es mejor que la convencional.

Para comparar los resultados calculados con este modelo contra los datos experimentales se obtuvo el cociente $\frac{[O_2]}{[O_2]_0}$, el cual representa la concentración adimensional en el proceso de desgasificado, en donde $[O_2]$ es la concentración de oxígeno disuelto al tiempo t y $[O_2]_0$ es la concentración de oxígeno inicial en el baño.

De la Figura 3.2 a la Figura 3.9 muestran los datos experimentales reportados junto con las predicciones que arroja el modelo teórico desarrollado en este trabajo, así como, los comparativos entre los casos de inyección convencional y por el fondo obtenidos por Torres y Hernández versus el modelo desarrollado, para las mismas condiciones de velocidad de rotación y rapidez de flujo de gas en el modelo propuesto.

Se aprecia en general una muy buena concordancia entre las predicciones de nuestro modelo con los resultados experimentales tanto en tendencia como en valores. Solo el experimento 1 y 3 presentan algunas desviaciones entre las predicciones del modelo y los resultados experimentales. Sin embargo, para los experimentos 2, 4, 6, 7 y 8 la concordancia es muy grande en especial con los resultados experimentales de Hernández, por lo que el modelo puede considerarse validado contra resultados experimentales y por tanto, puede usarse para analizar el proceso de manera confiable.

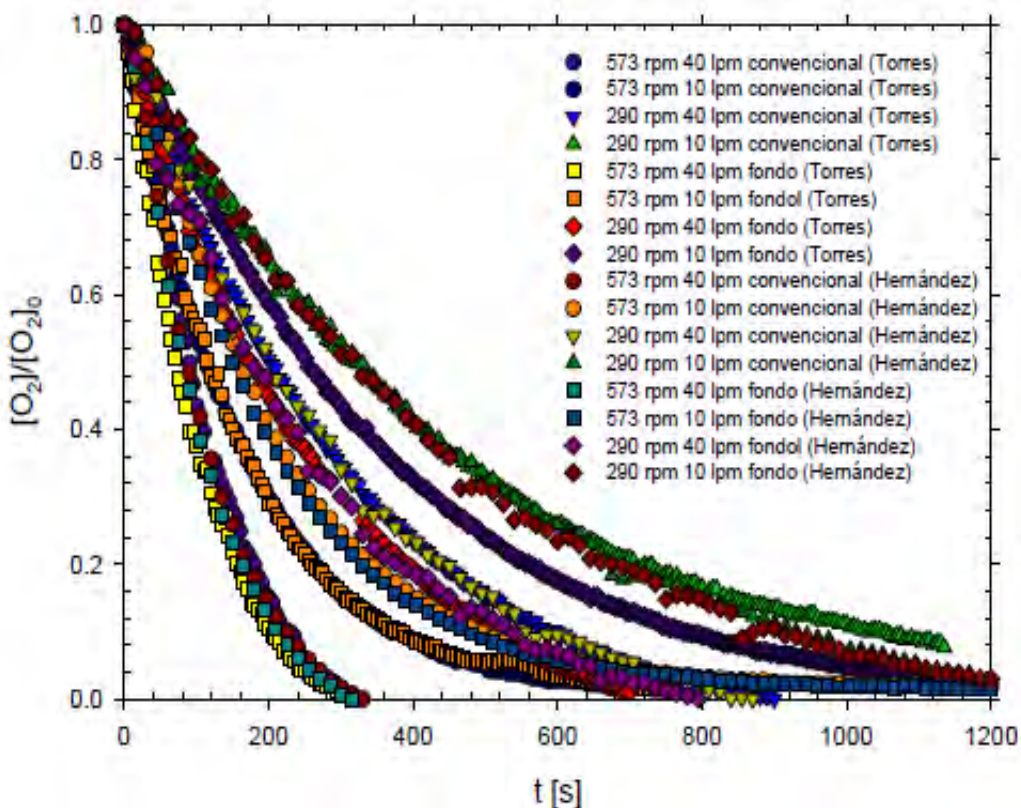


Figura 3.1. Resultados experimentales reportados por integrantes del grupo de trabajo, los resultados corresponden al desgasificado de oxígeno en modelos físicos bajo diferentes condiciones de operación: velocidad de rotación (N), rapidez de inyección del gas de purga (Q_g) y método de inyección del gas de purga.

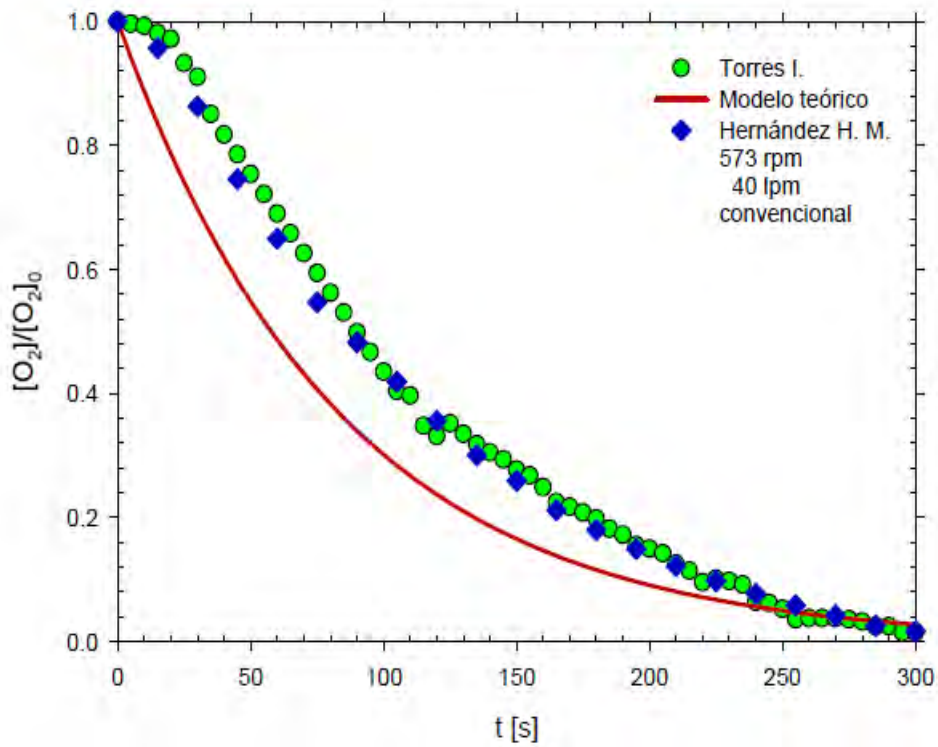


Figura 3.2. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 1, a 573 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional.

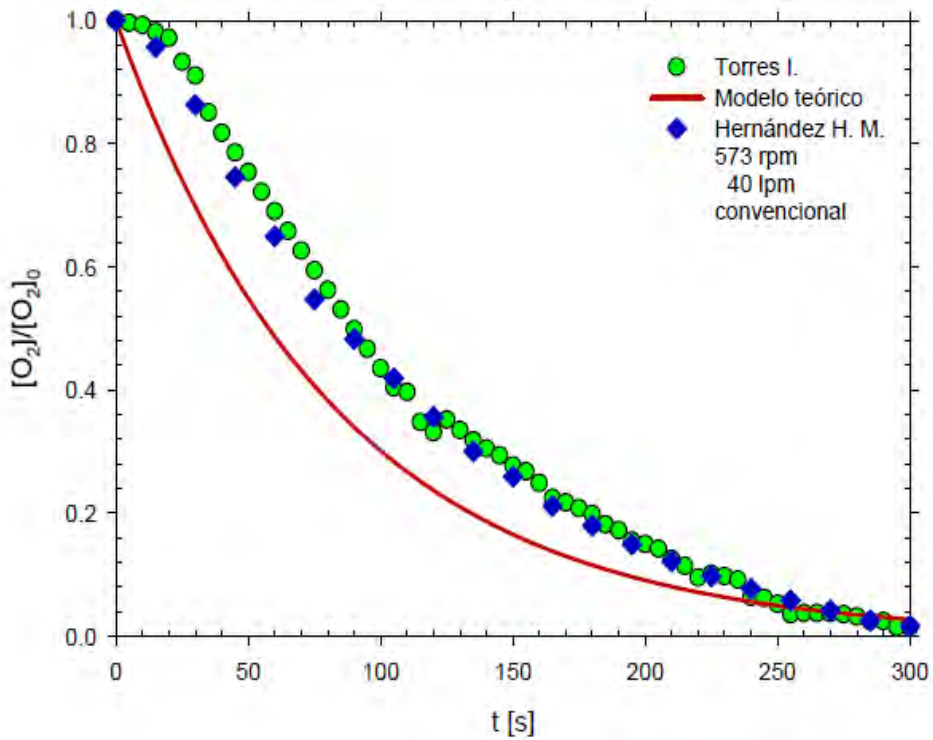


Figura 3.3. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 1, a 536 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo.

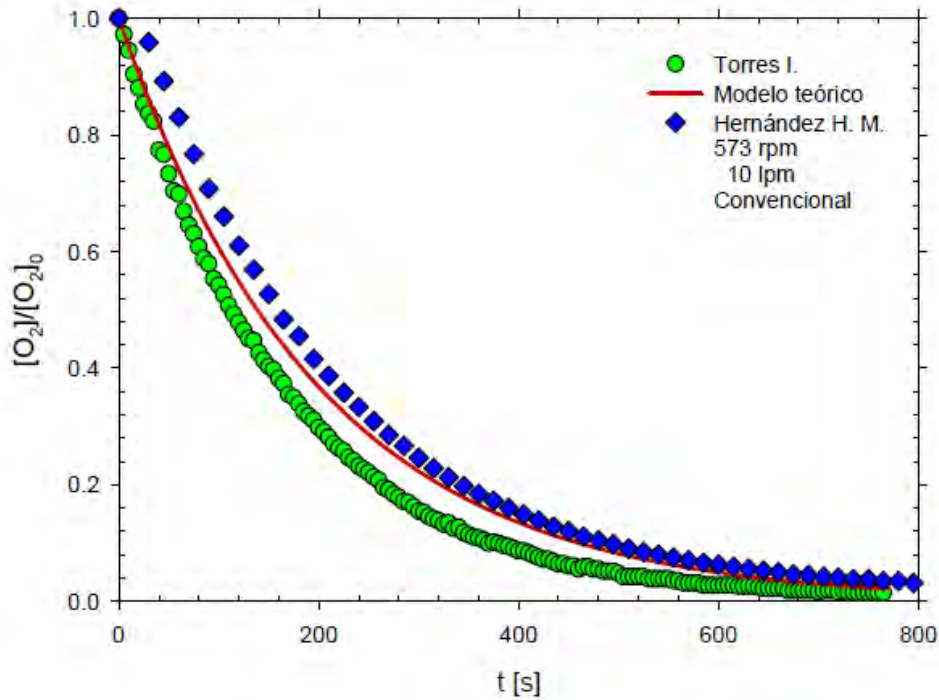


Figura 3.4. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 2, a 536 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional.

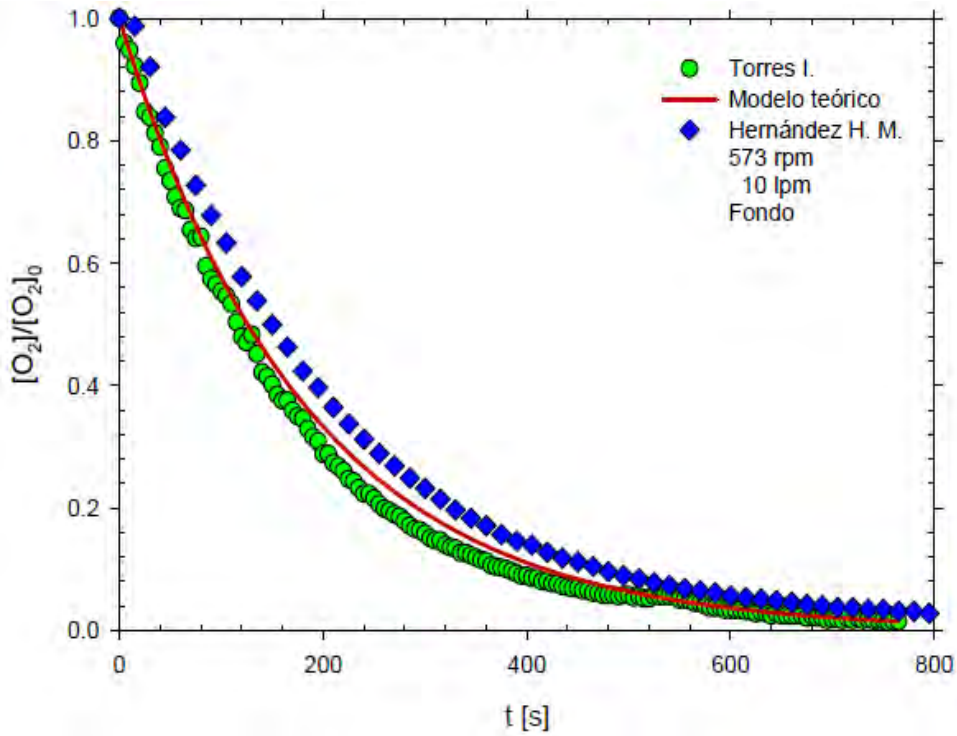


Figura 3.5. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 6, a 536 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo.

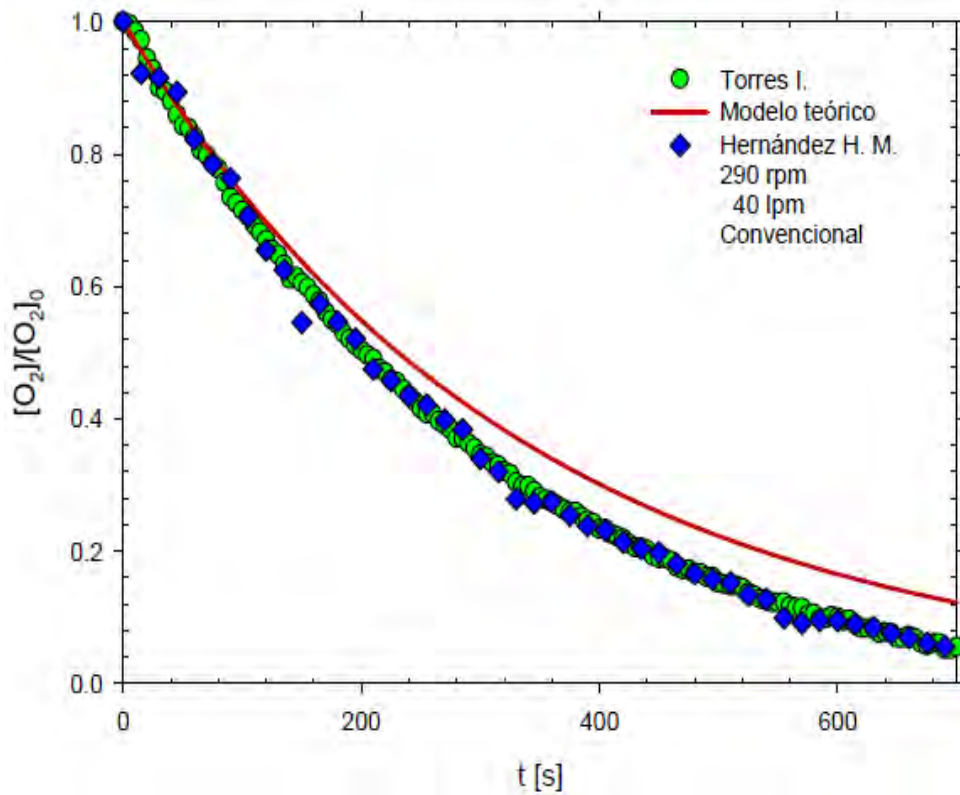


Figura 3.6. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 3, a 290 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional.

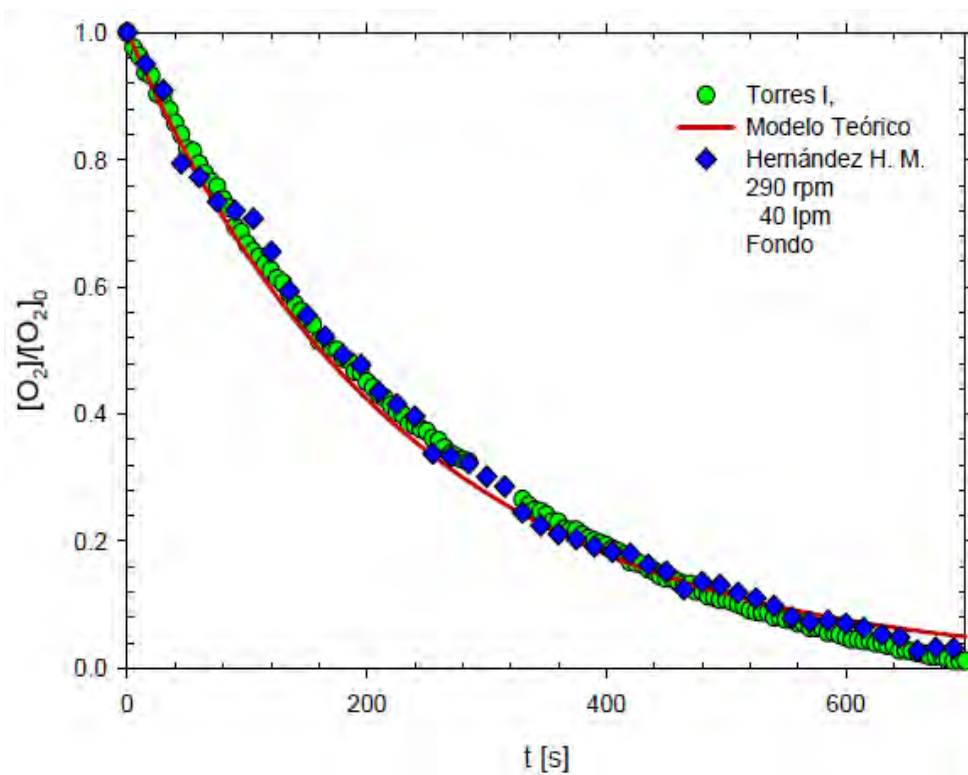


Figura 3.7. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 7, a 290 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo.

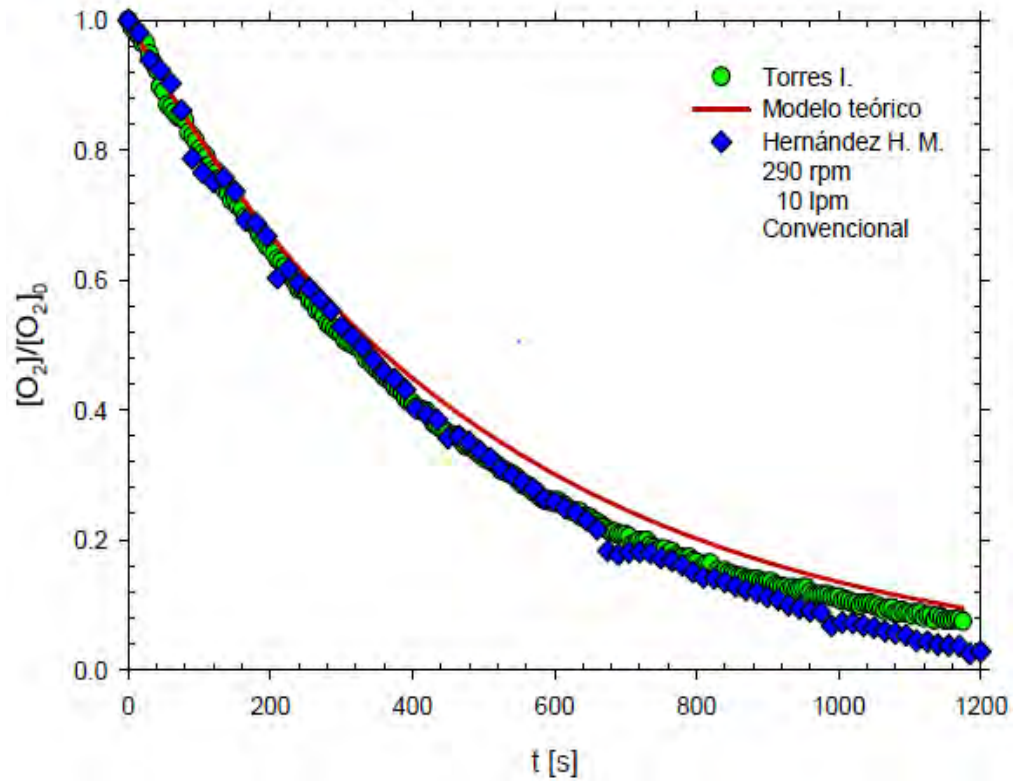


Figura 3.8. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 4, a 290 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional.

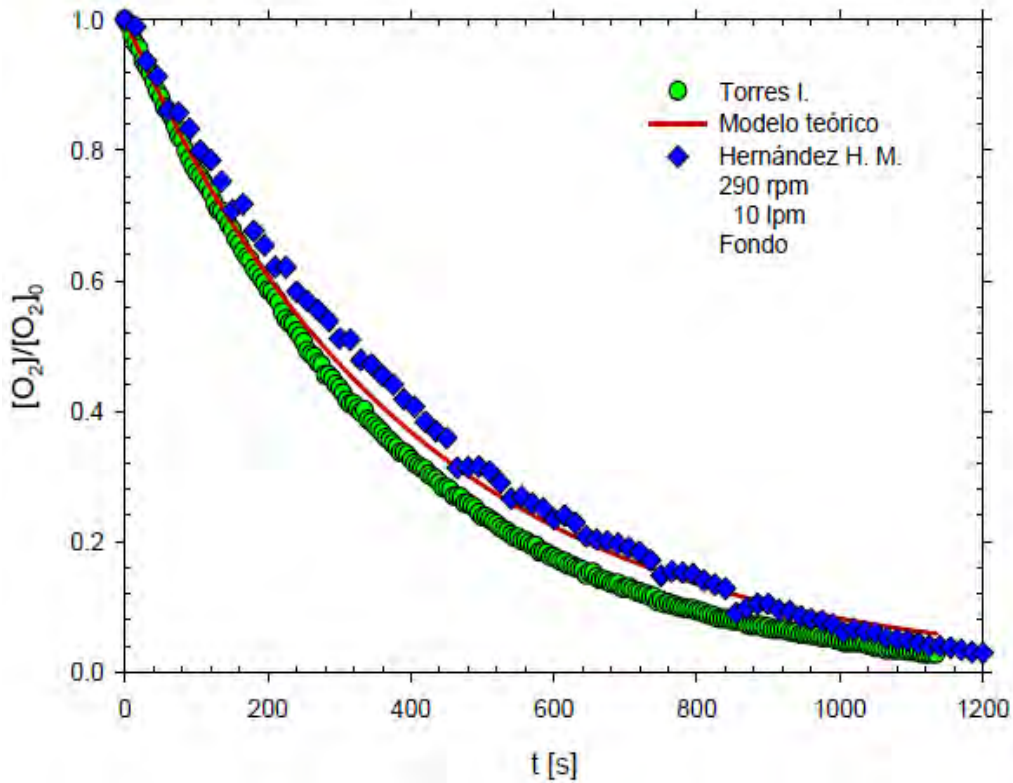


Figura 3.9 Representación del modelo teórico y los datos del experimento 8, a 290 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo.

Para analizar el proceso, definamos la eficiencia del desgasificado e , como la cantidad de oxígeno eliminado por unidad de volumen de nitrógeno inyectado, considerando solamente el volumen necesario para remover el 90% de oxígeno contenido en el baño. Esto implica un cambio de valores de 1 hasta 0.1 para el cociente de $\frac{[O_2]}{[O_2]_0}$, donde el valor de 0.1 representa el 90% de oxígeno eliminado. Expresado en forma matemática se tiene:

$$e = \frac{[O_2]_0 - [O_2]_{0.1}}{V_{N_2}} \quad (3.1)$$

El cambio en la eficiencia de desgasificado con respecto a los valores experimentales se calculó de la siguiente forma:

$$\Delta e = \left\{ \frac{e_{experimental} - e_{teórico}}{e_{experimental}} \right\} \quad (3.2)$$

Donde $e_{experimental}$ corresponde a la eficiencia de desgasificado experimental y $e_{teórico}$ al valor calculado mediante el modelo.

Las Figuras 3.10 y 3.11 muestran los experimentos para inyección convencional y por el fondo junto con los valores determinados por el modelo matemático por separado.

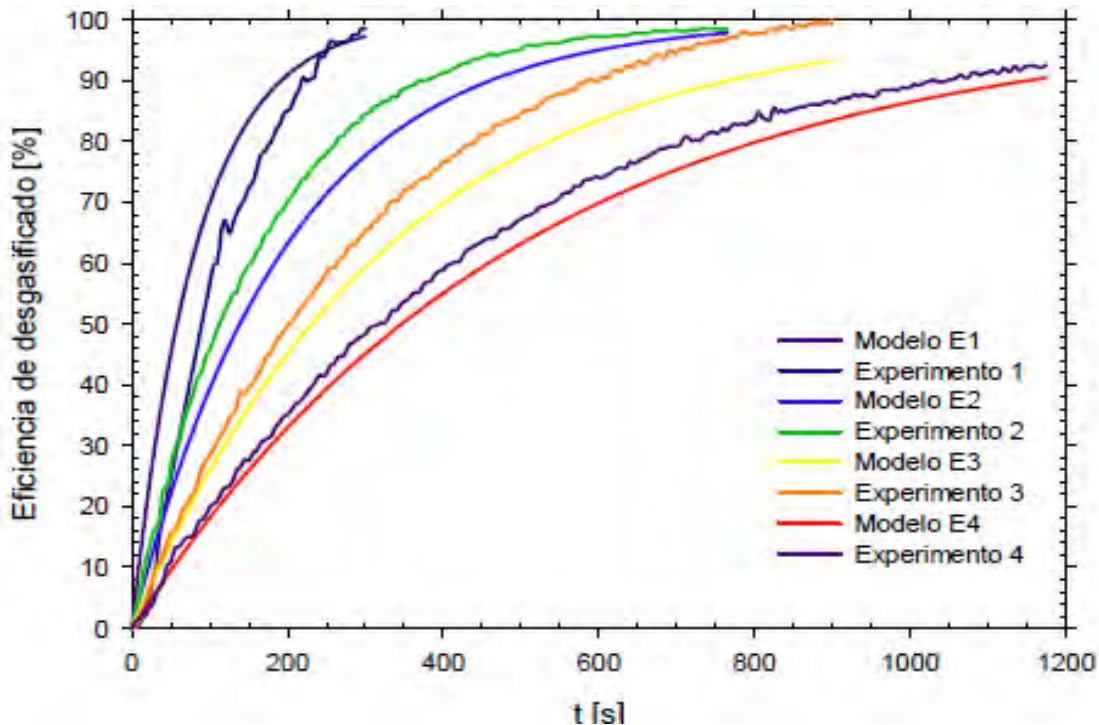


Figura 3.10. Eficiencia de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección de gas convencional.

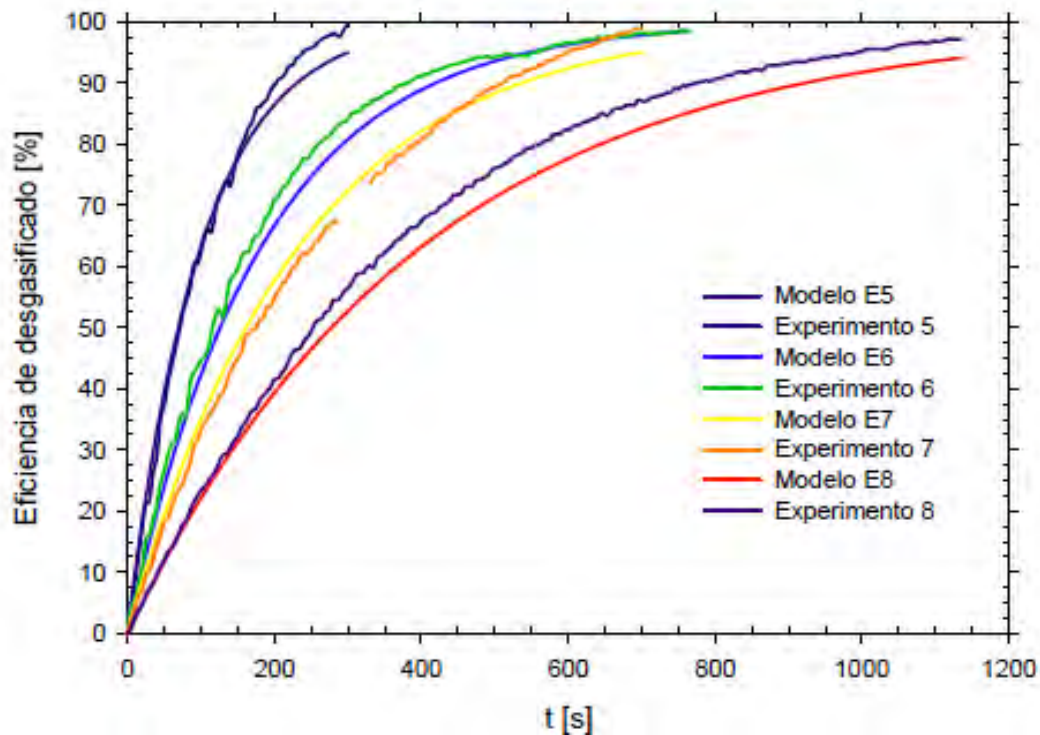


Figura 3.11. . Eficiencias de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección del gas por el fondo.

3.2 Análisis de Resultados.

Las mejores condiciones cinéticas de desgasificado corresponden a una velocidad de rotación alta de 573 rpm, un flujo alto de gas 40 lpm, mismas que proveen una eficiencia de desgasificado óptimas, mientras que las peores condiciones de operación corresponden a un flujo de gas de 10 lpm y a una velocidad de rotación de 290 rpm. Es obvio que al agitar más el baño se aceleran los procesos de transporte de masa y se logró una cinética de desgasificado más rápida. Además, la misma velocidad de agitación alta combinada con un flujo de gas alto promueven la formación de burbujas pequeñas, bien dispersas en todo el baño, lo que ayuda a acelerar el desgasificado, ya que se incrementa el área interfacial gas-líquido y al estar bien dispersas ayudan a que los el gas disuelto encuentre siempre cerca una burbuja de gas, lo que facilita su eliminación. En cuanto al efecto del punto de inyección no se aprecian grandes diferencias.

Para el caso en donde las condiciones de trabajo de velocidad de rotación $N = 573$ rpm, y una rapidez de flujo del gas de purga $Q_g = 40$ lpm (tanto para la inyección convencional como por el fondo) se puede apreciar una desviación notable de los valores determinados por el modelo con respecto a los valores experimentales (ver Figura 3.2), esto puede ser ocasionado porque el modelo propuesto no considera la formación del vórtice formado afectando al coeficiente de transporte de masa, sobre todo en la superficie libre. Con estas mismas condiciones de trabajo ($N = 573$ rpm, y $Q_g = 40$ lpm), se requiere menor tiempo para obtener un 90% de eficiencia de desgasificado que con resto de los valores experimentales probados.

Capítulo 4

Conclusiones

Se desarrolló un modelo matemático algebraico para describir la desgasificación de un sistema agua-oxígeno mediante la técnica de rotor-inyector, a partir de dos balances de materia sencillos, utilizando las correlaciones adecuadas para el cálculo de las propiedades termodinámicas y la elección de sistemas similares en la técnica de inyección del gas de purga para el cálculo del diámetro de burbuja y el coeficiente de transporte de masa. Si bien es cierto que las correlaciones no son para el sistema utilizado, se logró calcular valores aproximados que permiten conocer cómo influyen los parámetros de operación (flujo de gas, velocidad de rotación del impeller y punto de inyección del gas) en la cinética de desgasificado. Las principales conclusiones del trabajo son:

- El modelo se validó de manera satisfactoria al predecir adecuadamente el comportamiento de las cinéticas de desgasificación medidas experimentalmente, salvo en algunos casos en donde por la formación excesiva del vórtice el modelo puede no estar describiendo correctamente la cinética de desgasificado o bien, la correlación empleada para el cálculo del coeficiente de transporte de masa no sea el adecuado en casos con un vórtice grande.
- Las mejores condiciones de proceso son flujos de gas alto y velocidades de rotación altas sin importar el punto de inyección (ya sea convencional o por el fondo), ya que aceleran la cinética de desgasificado y alcanzan una buena eficiencia de desgasificado en menor tiempo, mientras que las peores condiciones de procesamiento involucran flujo de gas bajos y rotaciones del impeller bajas.

BIBLIOGRAFÍA.

1. W. Hufnagel. Manual del aluminio. Ed. Reverte. Barcelona España. 1992.
2. J.E Gruzleski and B.M. Closset . The Treatment of Liquid Aluminium-Silicon Alloys. AFS. USA. 1990.
3. Opie W.R. and N.J. Grant. Hydrogen Solubility in Aluminum and Some Aluminum Alloys. Trans AIME. 188. 1950.
4. Samuel, A.M. and F.H. Samuel, Various aspects involved in the production of low-hydrogen aluminium castings. Journal of Materials Science, 1992.
5. Fang Q.T. and D.A. Gagner. Porosity Formación in Modified and Unmodified A356 Alloys Casting. AFS Transaction 97. (1989)
6. Robles Flores Ivan. Modelado Físico de la Fluidinámica Durante la Desgasificación de Al por la Técnica del Rotor-Inyector . Tesis de licenciatura, UNAM Fac. de Química. Mexico 2009.
7. Torres Patiño Ivan Daniel. Estudio de Una Nueva Técnica de Desgasificación con Rotor-Inyector Asistido por Modelado Físico Matemático. Tesis de licenciatura, UNAM Fac. de Química. Mexico 2010.
8. Camacho-Martínez, J.L., Novel Degasification Design for Aluminum Using an Impeller Degasification Water Physical Model. Materials and Manufacturing Processes, 2012. 27(5): p. 556-560.
9. Sigworth, G.K. and T.A. Engh, Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum. Metallurgical and Materials Transactions B, 1982. 13(3): p. 447-460.
10. Otsuka, R., et al., Hydrogen removal from molten aluminum by inert gas bubbling. Journal of Japan Institute of Light Metals, 1990. 40(4): p. 290-297.
11. Dantzig, J., J. Clumpner, and D. Tyler, Degassing of static melts by insoluble purge gases. Metallurgical and Materials Transactions B, 1980. 11(3): p. 433-438.
12. Saternus, M. and J. Botor, Physical Model of Aluminium Refining Process in the Batch and Continuous Reactors. Materials Science Forum, 2010. 654 - 656: p. 1553-1556.
13. Sigworth, G.K. and T.A. Engh, Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum. Metallurgical and Materials Transactions B, 1982. 13(3): p. 447-460.
14. Johansen, S.T., Applications of computational fluid dynamics in optimization and design of metallurgical processes. Modeling, Identification and Control, 1997. 18(2): p. 101-122.
15. Guo, D. and G. Irons, Modeling of gas-liquid reactions in ladle metallurgy: Part II. Numerical simulation. Metallurgical and Materials Transactions B, 2000. 31(6): p. 1457-1464.
16. Xu, Y. and G. Mc Grath, CFD predictions of stirred tank flows. Chemical Engineering Research and Design, 1996. 74(4): p. 415-504.
17. Dong, L., S.T. Johansen, and T.A. Engh, Flow induced by an impeller in an unbaffled tank—II. Numerical modelling. Chemical Engineering Science, 1994. 49(20): p. 3511-3518.
18. Jones, W.P. and B.E. Launder, The prediction of laminarization with a twoequation model of turbulence. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1972. 15(2): p. 301-314.

19. Camacho-Martinez, J.L., et al., Physical Modelling of an Aluminium Degassing Operation with Rotating Impellers—A Comparative Hydrodynamic Analysis. *Materials and Manufacturing Processes*, 2010. 25(7): p. 581-591.
20. Chen, J.J.J. and J.C. Zhao, Bubble Distribution in a Melt Treatment Water Model, in *Light Metals 1995*, J. Evans, Editor 1995, The Minerals, Metals and Materials Society. p. 1227-1231.
21. Dantzig, J., J. Clumpner, and D. Tyler, Degassing of static melts by insoluble purge gases. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1980. 11(3): p. 433-438.
22. Fu, Q. and J. Evans, Chlorine fluxing for removal of magnesium from molten aluminum: Part II. Mathematical model. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1998. 29(5): p. 979-986.
23. Han, J.W. Effect of Gas Bubbling and Impeller Agitation on Degassing Kinetics during Magnesium Alloy (AZ91D) Melt Recycling – Water Model Approach. *Materials Science Forum*, 2003. 439: p. 192-199.
24. Hu, Z.C., E.L. Zhang, and S.Y. Zeng, Degassing of magnesium alloy by rotating impeller degasser: Part 1 – Mathematical modelling. *Materials Science & Technology*, 2008. 24(11): p. 1304-1308.
25. Warke, V.S., S. Shankar, and M.M. Makhlof, 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*, 2005. 168(1): p. 119-126.
26. Choi, B.S., et al., Residence Time Distributions in a Stirred Tank: Comparison of CFD Predictions with Experiment. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004. 43(20): p. 6548-6556.
27. Mazumdar, D., R.I.L. Guthrie, and Y. Sahai, On mathematical models and numerical solutions of gas stirred ladle systems. *Applied Mathematical Modelling*, 1993. 17(5): p. 255-262.
28. Ramírez-Argáez, M., et al., On the degassing kinetics in a ladle equipped with a rotating impeller assisted through physical modeling. *Roznov pod Radhostem*, 2010.
29. Engh, T.A., C.J. Simensen, and O. Wijk, *Principles of metal refining*. Oxford science publications 1992, Oxford ; New York: Oxford University Press. xxx, 473 p.
30. Lemoine, R. and B.I. Morsi, An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in agitated reactors. *Chemical Engineering Journal*, 2005. 114(1-3): p. 9-31.

ANEXO I

Listado del programa

! Lemoine.f90

! FUNCTIONS:

! DesgMat - Entry point of console application.

!*****

! PROGRAM: DesgMat

! PURPOSE: Entry point for the console application.

!*****

program DesgMat

implicit none

REAL:: AB

REAL:: AWAVE

REAL:: ATOT

REAL:: Ceq

REAL:: DENSIDAD_LIQ

REAL:: DENSIDAD_GAS

REAL:: DIFUSION

REAL:: DS

REAL:: EU, EU1

REAL:: FR,FRC,FRMOD

REAL:: FS

REAL:: IMP_VEL

REAL:: KL

REAL:: KLA

REAL:: N

REAL:: NCR

REAL:: NCRI

!REAL:: NP

REAL:: PGIR

REAL:: P_ASTER

REAL:: P_SAR

REAL:: QG

REAL:: QGI
REAL:: RE
REAL:: S
REAL:: T_AST
REAL:: TEMP_K
REAL:: TEMP_VISC
REAL:: TENSIONSUP_LIQ
REAL:: UG
REAL:: VISC_DIL
REAL:: VISC_RES
REAL:: VISCOSIDAD_CIN
REAL:: VISCOSIDAD_LIQ
REAL:: VISCOSIDAD_GAS
REAL:: VOL_LIQ
REAL:: WE
IREAL:: XW
REAL:: TIEMPO
REAL:: PCTO2
REAL:: PCTO2A
REAL:: Z
REAL:: ALFA
REAL:: BETA
REAL:: DELTA
REAL:: DELTA_GAS
REAL:: EPSILON
REAL:: GAMA
REAL:: LAMBDA
REAL:: OMEGA_T
REAL:: ETA
REAL:: TAU
REAL:: PHI
REAL:: VB
REAL:: NB

REAL:: DENSIDAD_AL
 REAL:: VISCOSIDAD_AL
 REAL:: DIFUSION_H_EN_AL

!***** PARAMETROS DE ENTRADA *****

REAL, PARAMETER:: PCT_O2_IN = 7.00 ![=] ppm = mg/kg
 REAL, PARAMETER:: TEMP_C = 20.0 !TEMPERATURA [=] °C
 REAL, PARAMETER:: RPM = 290.0 !VELOCIDAD DEL IMPELLER [=]RPM
 REAL, PARAMETER:: QG_LPM = 10.0 !RAPIDEZ DE FLUJO DE GAS [=] LPM
 REAL, PARAMETER:: PRESION = 1.0 !PRESION DEL SISTEMA [=]atm CIUDAD DE MEXICO ES 0.769737 atm
 REAL, PARAMETER:: DT = 0.52 !DIAMETRO DEL TANQUE [=] m
 REAL, PARAMETER:: H = DT !ALTURA DEL TANQUE [=] m
 REAL, PARAMETER:: D_IMP = 0.18 !DIAMETRO DEL IMPELLER [=]m
 REAL, PARAMETER:: ANCHO_IMP = 0.05 !DIAMETRO DEL IMPELLER [=]m
 REAL, PARAMETER:: HL = (2.0/3.0)*DT !DISTANCIA POR ENCIMA DEL IMPELLER [=] m

!*****

REAL, PARAMETER:: NP = 5.0
 REAL, PARAMETER:: N_IMP = 1.0
 REAL, PARAMETER:: NUM_IMP = 1.0
 REAL, PARAMETER:: XW = 1
 REAL, PARAMETER:: GRAVEDAD = 9.80665
 REAL, PARAMETER:: PI = 3.14159
 REAL, PARAMETER:: CDO = 22.24
 REAL, PARAMETER:: CDY = 6.71
 IREAL, PARAMETER:: PHI = 0.84
 REAL, PARAMETER:: TAU_RG = 1.767
 REAL, PARAMETER:: DENSIDAD_CRIT_GAS = 11.1839
 REAL, PARAMETER:: ENERGIA_LEN_JON = 98.94
 REAL, PARAMETER:: MM_GAS = 28.01348
 REAL, PARAMETER:: MM_O2 = 0.031999
 REAL, PARAMETER:: MM_LIQ = 0.018015
 REAL, PARAMETER:: f_O2 = 1.0
 REAL, PARAMETER:: PARAMETRO_LEN_JON = 0.3656
 REAL, PARAMETER:: PT = 0.7596715

```

REAL, PARAMETER:: P_Pa           = 101325
REAL, PARAMETER:: R               = 8.31441
REAL, PARAMETER:: R_IATM         = 0.08205
REAL, PARAMETER:: TEMP_CRIT_GAS  = 126.192
REAL, PARAMETER:: TEMP_CRIT_LIQ  = 647.15
REAL, PARAMETER:: VM_O2          = 25.6
REAL, PARAMETER:: D_ORI          = 0.05
REAL, PARAMETER:: D_BOQUILLA     = 0.01

INTEGER:: REACTOR = 1
!CHARACTER:: REACTOR = 'GIR'
!H = DT
QG           = QG_LPM * (1.0/(1000.0 * 60.0))
N           = RPM*(1.0/60.0)
VOL_LIQ     = (PI/4.0) * (DT**2.0) * H
TEMP_K      = TEMP_C + 273.15
TEMP_VISC   = TEMP_K/300.0
DENSIDAD_LIQ = (999.83952 + 16.945176*temp_c - 7.9870401e-3*temp_c**2 - 46.170461e-6*temp_c**3.0 &
               + 105.56302e-9*temp_c**4 - 280.54253e-12*temp_c**5)/&
               (1+16.879850e-3*temp_c)
VISCOSIDAD_LIQ = ( 280.68 * Temp_visc**(-1.9) ) + &
                 511.45 * temp_visc**(-7.7) ) + &
                 61.131 * temp_visc**(-19.6) ) + &
                 0.45903* temp_visc**(-40.0) ) * 1e-6
VISCOSIDAD_CIN = (VISCOSIDAD_LIQ / DENSIDAD_LIQ)!*1E-6![=] !m^2/s
DIFUSION        = 4286.0e-9*exp(-4470.0/(1.987*temp_k))
TENSIONSUP_LIQ = 235.8e-3*(( (temp_crit_LIQ - temp_k) / temp_crit_LIQ)**1.256) * &
                 (1 - 0.625 * ( (temp_crit_LIQ - temp_k) / temp_crit_LIQ) )
Ceq            = exp((0.046*temp_k**2 + 203.357*temp_k*log(temp_k/298.0))&
                 -(299.378+0.092*temp_k)*(temp_k-298.0)-20.591e3)/(R*temp_k)
DENSIDAD_AL     = 2377.23 - 0.311 *(TEMP_K-933.47
VISCOSIDAD_AL   = -0.7324 + (803.49/TEMP_K)
DIFUSION_H_EN_AL= 2.1E-5 *EXP(-45600/(R*TEMP_K))

```

!***** PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL GAS *****

DENSIDAD_GAS = (PRESION) / (R_LATM * TEMP_K) * MM_GAS

TAU = TEMP_CRIT_GAS / TEMP_K

DELTA_GAS = (DENSIDAD_GAS / MM_GAS) / DENSIDAD_CRIT_GAS

T_AST = TEMP_K / ENERGIA_LEN_JON

OMEGA_T = EXP(0.431000 * (LOG(T_AST))**0.0 - 0.4623 * (LOG(T_AST))**1.0 &
+ 0.08406 * (LOG(T_AST))**2.0 + 0.005341 * (LOG(T_AST))**3.0 &
- 0.00331 * (LOG(T_AST))**4.0)

VISC_DIL = (0.0266958 * SQRT(MM_GAS * TEMP_K)) / ((PARAMETRO_LEN_JON**2.0) * OMEGA_T)

VISC_RES = 10.72 * TAU**0.10 * DELTA_GAS**2.0 * EXP(-0.0 * DELTA_GAS**0.0) &
+ 0.03989 * TAU**0.25 * DELTA_GAS**10.0 * EXP(-1.0 * DELTA_GAS**1.0) &
+ 0.001208 * TAU**3.20 * DELTA_GAS**12.0 * EXP(-1.0 * DELTA_GAS**1.0) &
- 7.402 * TAU**0.90 * DELTA_GAS**2.00 * EXP(-1.0 * DELTA_GAS**2.0) &
+ 4.620 * TAU**0.30 * DELTA_GAS**1.00 * EXP(-1.0 * DELTA_GAS**3.0)

VISCOSIDAD_GAS = (1E-6) * (VISC_DIL + VISC_RES)

NCRI = SQRT (0.512 * (HL/DT) * GRAVEDAD / D_IMP)

!***** CALCULO DE NUMEROS ADIMENSIONALES *****

EU = P_Pa / (D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0)

FR = (D_IMP**2.0 * N**2.0) / (GRAVEDAD * HL)

FRC = (D_IMP**2.0 * NCRI**2.0) / (GRAVEDAD * HL)

FRMOD = (D_IMP * N**2.0) / (GRAVEDAD)

IFS = IMP_VEL**2.0 / (2.0 * GRAVEDAD * S)

RE = (D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N) / (VISCOSIDAD_LIQ)

WE = (D_IMP**3.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0) / TENSIONSUP_LIQ

IF (NCRI < N) THEN

QGI = (50.03 * ((NUM_IMP**1.695) * (DT**2.584) * (VISCOSIDAD_LIQ**0.627) * &
(DENSIDAD_LIQ**1.991) * (DENSIDAD_GAS**2.847)) / ((TENSIONSUP_LIQ**4.440) &
* (MM_GAS**3.203)) * EXP (-3.957 * (EU**0.142 * WE**0.174) / &
(RE**0.048 * (FR-FRC)**0.042))) * (N * D_IMP**3.0)

ELSE

QGI=0

```

END IF

P_SAR =(NP * D_IMP**5.0 * DENSIDAD_LIQ * N**3.0) / VOL_LIQ

EU1  = (P_SAR/(D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0))*VOL_LIQ

IF (REACTOR == 1) THEN !Reactor == 1 es GIR Reactor == 2 es GSR

!CASE ('GIR')

  !P_ASTER :: P ASTERISCO/VOL DEL LIQUIDO

  Ug = QG/(PI/4.0 * D_BOQUILLA**2.0)

  P_ASTER = (P_SAR) * (1 - EXP(-0.486 - (0.802/ SQRT (FR)) -5.10E-7 * RE))

  !SARAVANAN

  !P_ASTER = ((DENSIDAD_LIQ * ANCHO_IMP * N**3 *(D_IMP/2)**4)/VOL_LIQ) * (22.24 - 6.71 * (1 - 1/(PHI * FS))**3) +
(1.767 * 2 * PI * N)/VOL_LIQ

  !PASO 4

  ALFA = 3.770E-5 * (DT**-2.540) * (N**0.005) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.012) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.603)
*(DENSIDAD_GAS**-0.122)

  BETA = 0.087 * (D_IMP**-0.819) * (HL**0.617) * (N**-0.854) * (DENSIDAD_LIQ**-0.0369) * (VISCOSIDAD_LIQ**-
0.043) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.560)

  EPSILON = 0.102 *(P_ASTER**ALFA) * (UG**BETA) * EXP(-0.349 * XW)

  !PASO 5

  GAMA = 3.980E-2 * (D_IMP**1.500) * (DT**-2.020) * (N**0.419) * (VISCOSIDAD_LIQ**0.102)

  LAMBDA = 3.310E-2 * (DENSIDAD_LIQ**-0.044) * (DENSIDAD_GAS**-0.093) * (HL**0.070) * EXP(-1.180 * XW)

  DS = 2.61E-3 * (UG**GAMA) * (EPSILON**LAMBDA)

  !PASO 6 CALCULO KLA

  DELTA = 7.010E-6 * (D_IMP**-0.395) * (DT**4.183) * (N**2.237) * (VISCOSIDAD_LIQ**0.126) * (HL**-0.658)

  ETA = 0.420 * (D_IMP**-2.385) * (DT**-2.485) * (N**-3.238) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.261) * (HL**3.249)

  KLA = 1.383E5 * (((DIFUSION**0.500) * (EPSILON**0.155) * (DS**0.414))/(DENSIDAD_GAS**0.060)) *
(P_ASTER**DELTA) * (UG**ETA) * EXP(-2.011 * XW)

  !WRITE(*,*)'ALFA', ALFA

ELSE !(REACTOR == 2) !THEN !Reactor == 1 es GIR Reactor == 2 es GSR

  P_ASTER = (0.706 / VOL_LIQ) * ((P_SAR * N *(D_IMP**3))/(QG**0.56))**0.45

  !PASO 4

  ALFA = 0.190 * (DT**-0.179) * (N**0.043) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.228) * (TENSIONSUP_LIQ**0.261) *
(DENSIDAD_GAS**-0.011)

  BETA = 1.86E12 * (D_IMP**-0.087) * (HL**-0.279) * (N**0.063) * (DENSIDAD_LIQ**-4.270) * (VISCOSIDAD_LIQ**-
0.464) * (TENSIONSUP_LIQ**1.380)

  EPSILON = 9.620E-3 * (P_ASTER**ALFA) * (UG**BETA) * EXP(-0.216 * XW)

  !PASO 5

```



```

GAMA = 1.380E-2 * (D_IMP**-0.878) * (DT**0.351) * (N**0.563) * (HL**0.185)

LAMBDA = 1.300E-20 * (DENSIDAD_LIQ**7.490) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.240) * (DENSIDAD_GAS**-0.196) * EXP(-
8.470 * XW)

DS = 9.380E-3 * (UG**GAMA) * (EPSILON**LAMBDA)

!PASO 6 CALCULO KLA

DELTA = 4.664E-4 * (DT**0.124) * (N**0.593) * (DENSIDAD_LIQ**-0.769)

ETA = 9.475E-5 * (D_IMP**0.363) * (N**0.967) * (DENSIDAD_LIQ**-0.470) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.884) * (HL**-
1.440)

KLA = 2.564E3 * (DIFUSION**0.500 * EPSILON**0.575)/(DENSIDAD_GAS**0.060 * DS**0.402) * (P_ASTER**DELTA)
* (UG**ETA) * EXP(-2.402 * XW)

!WRITE(*,*)'KLA', KLA

!CASE DEFAULT

! REACTOR = 'ELIJA UNA OPCION ADECUADA'

END IF

AWAVE = (1.0/H) + (1.0/HL) * (RE**1.75 * WE**3.00)/EU**3.00 * ((DENSIDAD_LIQ/DENSIDAD_GAS)**-2.67) * EXP((-
12.95 * H) - (0.59 * N))

AB = (6.0 * EPSILON/(1 - EPSILON)) + AWAVE

KL = KLA/AB

OPEN (UNIT = 10, FILE ='CALCULOS.TXT', STATUS = 'UNKNOWN')

WRITE(10, 100)TEMP_C, RPM, N, QG_LPM, QG, UG

100 FORMAT(//, 1X, T25, 'DATOS DE ENTRADA'///, &

1X, 'TEMPERATURA' = ' F14.7,' °C', /, &

1X, 'VELOCIDAD DEL IMPELLER' = ' F14.7,' RPM', /, &

1X, 'VELOCIDAD DEL IMPELLER' = ' F14.7,' RPS', /, &

1X, 'RAPIDEZ DE FLUJO DEL GAS N2' = ' F14.7,' LPM', /, &

1X, 'RAPIDEZ DE FLUJO DEL GAS N2' = ' ES14.7,' m^3/s', /, &

1X, 'VELOCIDAD SUPERFICIAL DEL GAS N2' = ' ES14.7,' m/s', /, /, /, /, /)

WRITE(10, 110)DT, H, HL, VOL_LIQ, VOL_LIQ/H

110 FORMAT(1X, T25, 'DATOS DEL REACTOR'///, &

1X, 'DIAMETRO DEL TANQUE' = ' F14.7,' m', /, &

1X, 'ALTURA DEL TANQUE' = ' F14.7,' m', /, &

1X, 'DISTANCIA DEL IMPELLER A LA SUP' = ' F14.7,' m', /, &

1X, 'VOLUMEN DEL TANQUE' = ' ES14.7,' m^3', /, &

1X, 'AREA DEL TANQUE' = ' ES14.7,' m^2', /, /, /, /, /)

```

```
WRITE(10,120) EU,EU1,FR,FRC,FRMOD,RE,WE
120 FORMAT(", T25, 'NÚMEROS ADIMENSIONALES' ,///,&
```

```
1X,'EULER           = ' F15.7/, &
1X,'EULER1          = ' F15.7/, &
1X,'FROUDE          = ' F15.7/, &
1X,'FROUDE CRITICO  = ' F15.7/, &
1X,'FROUDE MODIFICADO = ' F15.7/, &
1X,'REYNOLDS        = ' ES15.7/, &
1X,'WEBER           = ' F15.7//////// )
```

```
WRITE(10, 130)DENSIDAD_LIQ, VISCOSIDAD_LIQ, VISCOSIDAD_CIN*1e6, &
TENSIONSUP_LIQ*1e3,DENSIDAD_GAS, VISCOSIDAD_GAS, DIFUSION, CEQ, &
T_AST, VISC_DIL,VISC_RES, DELTA_GAS,TAU ,OMEGA_T
```

```
130 FORMAT(1X, T25,'PROPIEDADES DEL H2O Y N2'///,&
1X,'DENSIDAD H2O           = ' F14.7,' kg/m^3',/,&
1X,'VISCOSIDAD H2O         = ' ES14.7,' Pa*s o kg/(m*s)',/,&
1X,'VISCOSIDAD CINEMATICA H2O= ' F14.7,' mm^2/s',/,&
1X,'TENSION SUPERFICIAL H2O = ' F14.7,' 10E-3 N/m',/,&
1X,'DENSIDAD N2           = ' F14.7,' kg/m^3',/,&
1X,'VISCOSIDAD N2         = ' ES14.7,' Pa s o kg/(m*s)',/,&
1X,'COEF. DE DIFUSION O2-H2O = ' ES14.7,' m^2/s',/,&
1X,'CONSTANTE DE EQUILIBRIO = ' ES14.7, /&
1X,'T*'                   = ' ES14.7,' ADIMENSIONAL',/,&
1X,'VISCOSIDAD DILUIDA     = ' ES14.7,' micro Pa s o kg/(m*s)',/,&
1X,'VISCOSIDAD RESIDUAL    = ' ES14.7,' micro Pa s o kg/(m*s)',/,&
1X,'DELTA                 = ' ES14.7,' ADIMENSIONAL',/,&
1X,'TAU                   = ' ES14.7,' ADIMENSIONAL',/,&
1X,'OMEGA                 = ' ES14.7,' ADIMENSIONAL',////////)
```

```
WRITE(10, 140)NCRI, QGI, P_SAR, P_ASTER, ALFA, BETA, EPSILON,&
GAMA, LAMBDA, DS*1000.0, DELTA, ETA, KLA, AWAVE, AB, KL
```

```
140 FORMAT(1X, T25,'RESULTADOS'///,&
```

```

1X,'VELOCIDAD CRITICA DE INDUCCION DE GAS (NCRI) = ' F14.7,' RPS ó s^-1',/,&
1X,'RAPIDEZ DE FLUJO DEL GAS (QGI) = ' ES14.7,' m^3/S',/,&
1X,'P_SAR = ' F14.7,' W/m^3 ó W[=(kg*m^2)/(s^3)],/,&
1X,'P_ASTER = ' F14.7,' W/m^3 ó W[=(kg*m^2)/(s^3)],/,&
1X,'ALFA = ' F14.7,'/,&
1X,'BETA = ' F14.7,'/,&
1X,'EPSILON = ' F14.7,'/,&
1X,'GAMA = ' F14.7,'/,&
1X,'LAMBDA = ' f14.7,'/,&
1X,'DIAMETRO PROMEDIO DE LA BURBUJA (SAUTER) = ' F14.7,' mm',/,&
1X,'DELTA = ' F14.7,'/,&
1X,'ETA = ' F14.7,'/,&
1X,'COEFICIENTE VOLUMETRICO DE TRANSPORTE DE MASA = ' F14.7,' s^-1',/,&
1X,'AWAVE = ' ES14.7,' m^-1',/,&
1X,'AREA DE LA BURBUJA = ' ES14.7,' m^-1',/,&
1X,'COEFICIENTE DE TRANSPORTE DE MASA = ' ES14.7,' m/s',/))

```

NB = QG / VB

ATOT = 0.5 * PI * DS**2 * NB !*GAS_HOLDUP *VOL_LIQ/db ! !6.0 * QG/DB

PHI = (KL *Atot*PRESION*DENSIDAD_LIQ)/(100.0*MM_O2/1000*(QG/22.4*3600)*f_O2*Ceq**-1)

Z = 1-exp(-PHI)

TIEMPO = 0.0

PCTO2A = 0.11

WRITE(10, 160)PHI,Z

160 FORMAT(1X, T25,'RESULTADOS CINÉTICOS',/,&

1X,'PHI = ' F14.7,' adimensional',/,&

1X,'Z = ' F14.7,' adimensional',/))

DO

OPEN (UNIT = 10, FILE ='DATA.TXT', STATUS = 'UNKNOWN')

IF (PCTO2A <= 0.10)EXIT

PCTO2 = PCT_O2_IN * EXP(-(100.0 * F_O2 * ceq * Z * MM_O2 *1000.0* (QG/22.4)) / &

(VOL_LIQ * densidad_LIQ *PRESION)* TIEMPO) !((densidad_H2O_SI * VOL_LIQ) *(PRESION))* TIEMPO)-
0.0055

PCTO2a = PCTO2 / PCT_O2_IN

```
!TIEMPO2 = TIEMPO*10
WRITE (10,*)TIEMPO, PCTO2a, pcto2!, TIEMPO2
!150 FORMAT (1X,T5, I5, 10X, T15, F11.7, 10X, T25, F15.6)

TIEMPO = TIEMPO + 5.0

END DO
!PAUSE
end program DesgMat
```