



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE QUÍMICA

**OPTIMIZACIÓN DE UN DISPOSITIVO DE
ALEACIÓN RÁPIDA A TRAVÉS DE
MODELADO MATEMÁTICO**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO**

PRESENTA:

ARTURO MORALES ANTONIO



MÉXICO, D.F.

2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Prof. Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco

VOCAL: Prof. Carlos González Rivera

SECRETARIO: Prof. Marco Aurelio Ramírez Argáez

1er. SUPLENTE: Prof. Adrián Manuel Amaro Villeda

2° SUPLENTE: Prof. Agustín Gerardo Ruiz Tamayo

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

**Departamento de Ingeniería Química Metalúrgica
Laboratorio de Solidificación y Simulación Matemática
Edificio D, Facultad de Química, UNAM**

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez

SUPERVISOR TÉCNICO

M en I. Agustín Gerardo Ruiz Tamayo

SUSTENTANTE:

Arturo Morales Antonio

Índice

Resumen	7
Capítulo 1 Introducción	8
1.1 Introducción	8
1.1.1 Generalidades	9
1.1.2 Selección de las variables y dispositivo mezclador	10
1.1.3 Evaluación de la eficiencia de los dispositivos mezcladores	13
1.2 Objetivo	14
1.3 Hipótesis	14
Capítulo 2 Modelo matemático	15
2.1 Diseño del dispositivo	15
2.1.1 Estudio paramétrico	16
2.2 Modelo matemático	17
2.2.1 Suposiciones	18
2.2.2 Ecuaciones gobernantes	19
2.2.2.1 Ecuación de conservación cantidad de movimiento	19
2.2.2.2 Modelo VOF (Volume Of Fluid)	20
2.2.2.3 Modelo k-épsilon	21
2.2.2.4 Ecuación de conservación de especies químicas	22
2.2.3 Condiciones de frontera e iniciales	23
2.2.3.1 Fluido dinámica.	23
2.2.3.2 Mezclado del trazador	24
2.3 Propiedades físicas	25
2.4 Obtención de curvas “C”	25
2.4.1 Tiempo medio de residencia	26
2.4.2 Tiempo adimensional	26
2.4.3 Concentración media	26
2.4.4 Concentración adimensional	27
2.5 Obtención de los por porcentajes de volumen pistón, volumen mezclado y volumen muerto	27
2.5.1 Volumen Muerto	28

2.5.2 Volumen Pistón	29
2.5.3 Volumen de Mezclado	29
Capítulo 3 Resultados y análisis de resultados	30
3.1 Mallas de los dispositivos mezcladores	30
3.2 Análisis cualitativo de resultados	32
3.2.1 Vórtice	32
3.2.2 Turbulencia	35
3.2.3 Velocidad y trayectorias de las partículas trazadoras	40
3.2.4 Vectores de velocidad	45
3.3 Análisis cuantitativo de resultados	50
3.3.1 Curvas C	50
3.3.2 Análisis estadístico con base en los porcentajes de volumen mezclado, muerto y pistón	53
Capítulo 4 Conclusiones	58
Bibliografía	59
Listado de figuras	60
Listado de tablas	62
Listado de símbolos	63

Resumen

En este trabajo se realizó el estudio de mezclado de solutos que se adicionan a un baño metálico líquido en un dispositivo mezclador. Se encontró una patente abierta de un dispositivo mezclador que usa el método del vórtice. El estudio se realizó a través de un modelo matemático con el fin de predecir las condiciones de diseño óptimas de mezclado mediante la modificación de 5 variables de diseño del dispositivo mezclador. El modelo matemático consiste en la resolución de las ecuaciones de conservación de masa y momentum en un fluido líquido (continuidad y ecuaciones de Navier-Stokes), además de las ecuaciones del modelo de turbulencia $k-\epsilon$ estándar. Este modelo es resuelto numéricamente en régimen transitorio, con el algoritmo Volume Of Fluid (VOF), el cual permite resolver superficies libres y que se encuentra codificado en el software CFD (Computational Fluid Dynamics) ANSYS FLUENT 14.

El dispositivo de mezclado propuesto funciona a través de un flujo constante de metal líquido, el cual al entrar en la cámara de mezclado de forma tangencial, genera un vórtice de manera natural sin necesidad de agitación mecánica. El tamaño y forma del vórtice dependen de las variables de diseño del dispositivo mezclador. En este trabajo se analizaron 5 variables de diseño que se combinan en 16 experimentos; las variables estudiadas son: el ángulo de la entrada del metal líquido, el ángulo de la sección troncocónica de la cámara de mezclado, el diámetro de la cámara de mezclado, la presencia o ausencia de una barrera física y el gasto volumétrico del metal líquido.

Los resultados de todas las simulaciones fueron analizados mediante curvas RTD para obtener los tiempos de residencia de las partículas así como la habilidad mezcladora del dispositivo, y de esta forma determinar que variables tienen un mayor impacto sobre la fluido dinámica y el mezclado. La variable que más influyó fue la ausencia de la barrera, seguida por un gasto volumétrico alto.

Capítulo 1 Introducción

1.1 Introducción

Los procesos de mezclado en donde se plantea la adición de solutos son muy complejos y abarcan una gran cantidad de aplicaciones en la industria metalúrgica, química, de fabricación de alimentos y en muchas otras. La productividad de las mezclas producidas en estos días requiere procesos cada vez más rápidos, eficientes y eficaces. Por lo cual, la optimización de este tipo de procesos es un tema ampliamente estudiado, donde diversos investigadores proponen soluciones diversas. Uno de los aspectos de mucho interés es lo relativo a la incorporación de aleantes sólidos en baños metálicos para producir todo tipo de aleaciones.

Sea cual sea la mezcla a ser fabricada, la incorporación de solutos para formar una solución debe ser realizada en condiciones que permitan y aceleren una adecuada transferencia de calor y masa, dependiendo del tipo de adición y del tipo de mezcla a fabricar. Existen además factores que pueden afectar en gran medida estas incorporaciones, la menor densidad de algunos solutos con respecto a la densidad del solvente o el chorro de fluido en movimiento es una de ellas, provocando que una porción considerable de él, o, los solutos flote y salga del dispositivo mezclador sin haber tenido la oportunidad de ser incorporados en el solvente líquido. Por otra parte, si la densidad del soluto es similar o mayor a la del líquido solvente, éste se incorporará por gravedad al fondo del solvente líquido y aun así debe permanecer en contacto con el líquido un tiempo suficiente para disolverse por completo y distribuirse de forma homogénea en la masa líquida, que en muchos casos requerirá la presencia de condiciones de agitación adecuada. Otro problema se presenta si el soluto es muy volátil, en tal caso, este se vaporiza rápidamente al entrar en contacto con el líquido, especialmente a altas temperaturas.

1.1.1 Generalidades

Operaciones de mezclado se encuentran ampliamente en la industria productiva en los procesos que implican cambios físicos y químicos. A pesar que mucho de nuestro conocimiento sobre el mezclado se ha desarrollado de la industria química, muchos otros sectores llevan a cabo operaciones de mezclado a una larga escala. Por lo tanto el mezclado es una parte central en varios procesos en la industria alimenticia, farmacéutica, plástica, cerámica y metalúrgica. Como resultado, la inversión financiera sobre el capital y costo de funcionamiento de los procesos de mezclado, cuando se ve a una escala internacional, es bastante considerable. De hecho, se estima que el costo para las industrias de procesos debido a un entendimiento inadecuado de mezclado es de 1 a 100 billones de dólares por año [1].

El mezclado es un proceso fundamental, que influencia en muchos otros procesos de transporte, tales como el transporte de energía, reacciones químicas o procesos de separación. La **Figura 1** muestra una visión general de la escala de longitud de mezclado y situaciones de flujo típicas, representadas por el número de Reynolds (Re) de varios procesos de mezclado y transferencia de masa en la naturaleza y en la ingeniería. El rango de la longitud de escalas va desde longitud molecular hasta dimensiones astrofísicas sobre 18 órdenes de magnitud. Aún más complejo es el número Re que comprende 40 órdenes de magnitud desde flujos laminares hasta condiciones de flujo altamente turbulentos [2].

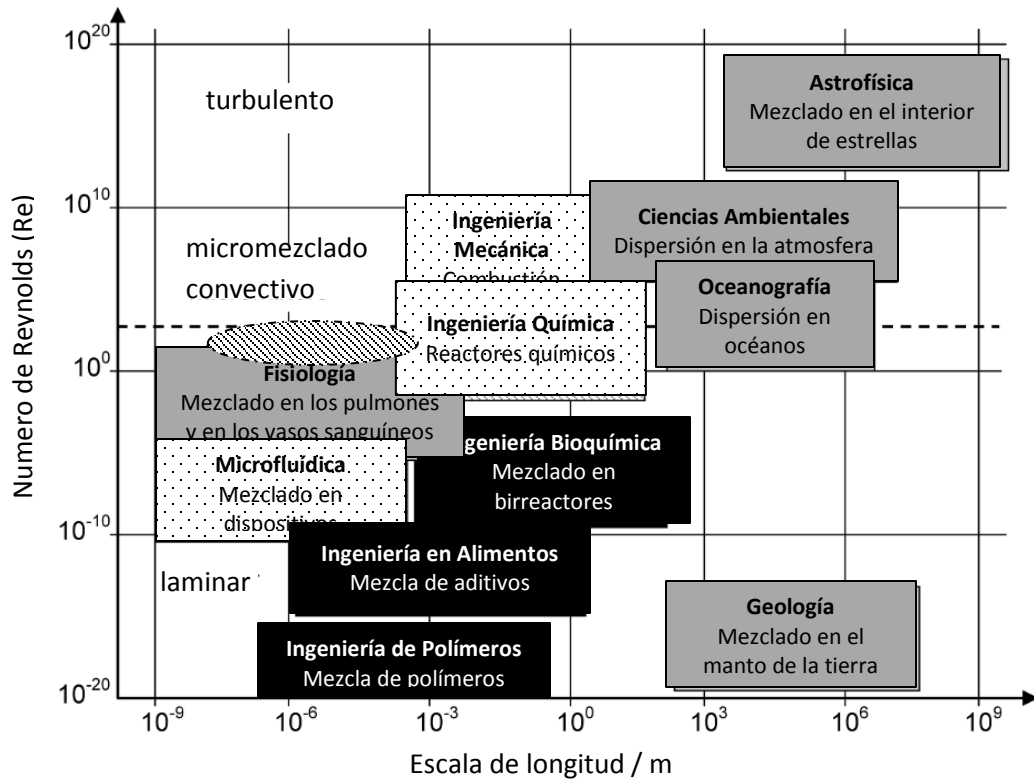


Figura 1. Espectro de problemas de mezclado [2].

1.1.2 Selección de las Variables y Dispositivo Mezclador

Se seleccionó una patente libre de un dispositivo mezclador tipo vórtice mostrado en la **Figura 2**. [3] En dicha figura se muestran todas las características geométricas de diseño y que afectan al mezclado.

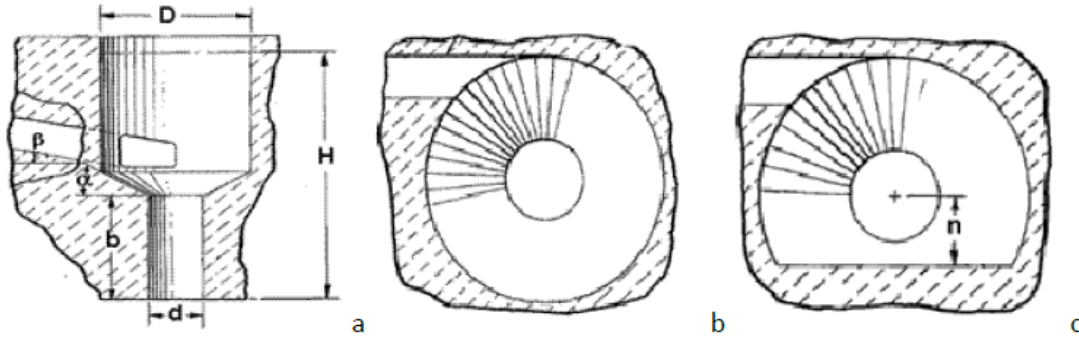


Figura 2.- Dispositivo mezclador seleccionado y sus principales características geométricas. a) Vista lateral, b) Vista superior (sin barrera), c) Vista superior (con barrera). D=diámetro del dispositivo, α =ángulo troncocónico, β =ángulo de entrada, d=diámetro salida, H= altura dispositivo, b=altura tubo salida, n=distancia de barrera a centro.

Esta patentes muestra que la cámara de reacción presenta una geometría cilíndrica, caracterizada por un diámetro de reactor **D**, así como un ducto de salida, de diámetro **d**, la corriente líquida se introduce de manera tangencial con el fin de que las paredes cilíndricas promuevan la formación del vórtice. Esta corriente puede ingresar al reactor con su entrada formando un ángulo de inclinación **Beta (β)**, con respecto a la horizontal. Otra variante es la forma de la base del reactor, que conecta la cámara cilíndrica con el ducto de salida, la cual puede ser plana, o bien puede incluir una zona tronco-cónica que reduce su sección hasta alcanzar el diámetro del ducto de salida. Lo más común es la presencia de una zona troncocónica, caracterizada por un ángulo de inclinación **Alfa (α)** de la base con respecto a la horizontal. También se ha incluido la **presencia de barreras o deflectores** con el propósito de incrementar la turbulencia del disolvente en la cámara y con esto mejorar el mezclado. Finalmente y tomando en cuenta que el tiempo de residencia del soluto en la cámara afectará de manera importante si se alcanza a incorporar o no, el **gasto volumétrico (Q)** involucrado para una cámara de reacción de dimensiones, geometría y volumen dado también es importante ya que de manera general en reactores cerrados el tiempo promedio de residencia es igual al cociente del volumen ocupado por el fluido dividido por el gasto volumétrico.

1.1.3 Evaluación de la Eficiencia de los Dispositivos Mezcladores

Debido a que este trabajo se centra en simular el flujo de fluidos dentro del dispositivo mezclador para incorporar solutos, una forma de saber la eficiencia y comportamiento del mezclado dentro de nuestro dispositivo es mediante la obtención de curvas RTD (Residence Time Distribution) que no es otra cosa que la descripción cuantitativa de la cantidad de tiempo que un paquete de elementos o partículas puede permanecer dentro de un reactor continuo, en este caso, el tiempo que tardaría un paquete de soluto que es inyectado en forma de un pulso a la entrada del dispositivo mezclador hasta que sale de este. En un caso extremo, si el comportamiento de flujo de fluidos que se presenta es de un flujo pistón, no existe mezclado ni zonas donde el fluido se queda estancado denominadas zonas muertas. Por lo que si se mide la concentración a la salida del dispositivo, la concentración de soluto detectada a la salida, sería el mismo pulso de soluto que se inyectó a la entrada, ocurriendo la detección a un tiempo igual al tiempo de residencia promedio del fluido en el reactor. El otro extremo sería el caso en el que el dispositivo mezclara perfectamente todo el soluto instantáneamente con la inyección a la entrada, entonces, la medición de concentración a la salida del dispositivo, presentaría al inicio la concentración promedio obtenida al dividir la masa de soluto entre el volumen de líquido en el reactor y conforme avanzara el tiempo la lectura de concentración indicaría que el soluto estaría diluyendo se hasta agotar el soluto en aproximadamente a un tiempo igual a dos veces el tiempo de residencia. Por ejemplo en la **Figura 3** [4] se ve una gráfica de la concentración a la salida de un reactor continuo en función del tiempo en escalas adimensionales donde θ , es el tiempo adimensional y C_θ es la concentración adimensional y se presentan cinco curvas, tres de ellas representan casos intermedios al flujo totalmente pistón o al flujo totalmente mezclado. También se muestra que un par de curvas presentan zonas muertas que son aquellas curvas donde aún se detecta soluto a tiempos mayores que dos veces el tiempo de residencia del fluido en el reactor (tiempo adimensional igual a uno). El tiempo de residencia promedio se calcula como el cociente entre el volumen del líquido en el



dispositivo entre el flujo de volumen que entra a él. Se puede apreciar que los comportamientos en curvas “RTD” o “C” típicos de un flujo pistón están caracterizados por la presencia de un pico alto de soluto, mientras que las señales de soluto a la salida del reactor RTD que caracterizan a los flujos tipo mezclado presentan curvas asintóticas con mucha dispersión de soluto.

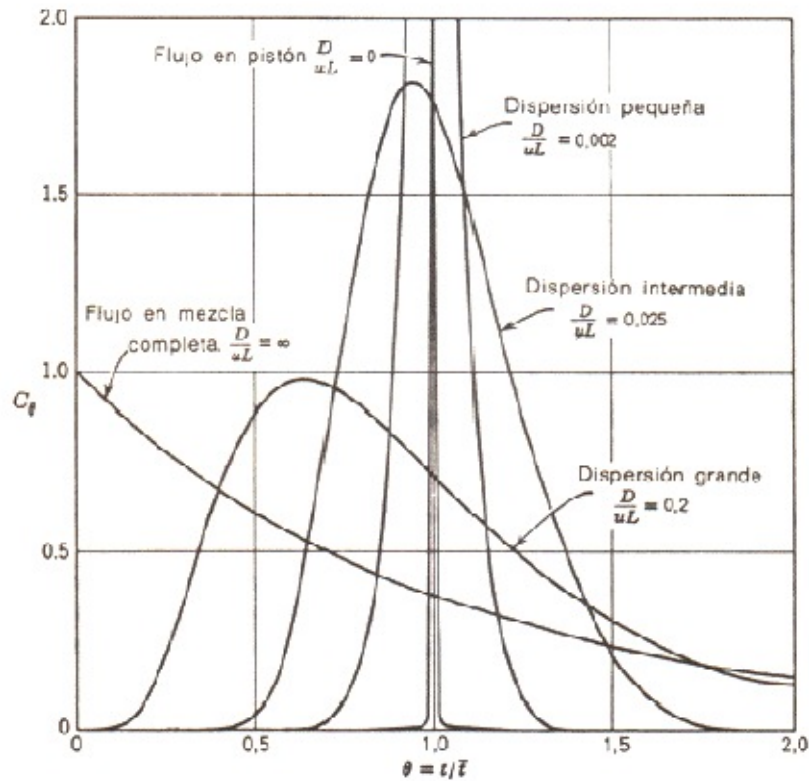


Figura 3. Curvas RTD (Residence Time Distribution) para reactores cerrados y continuos, donde se observa un flujo totalmente mezclado, un flujo totalmente pistón y tres casos intermedios [4].

1.2 Objetivo

Estudiar el efecto de las principales variables de diseño de un dispositivo mezclador a través de simulaciones numéricas del flujo de fluidos y transferencia de masa y usando un diseño de experimentos factorial a dos niveles, con el fin de proponer un diseño óptimo que maximice el mezclado de solutos en baños metálicos líquidos.

1.3 Hipótesis

El desempeño óptimo del dispositivo mezclador que se seleccionó va a depender de las 5 variables de diseño que se plantearon anteriormente, con lo cual se buscará un diseño que tenga tiempos de mezclado grandes para garantizar la correcta incorporación de solutos en el baño metálico.

Dentro de las variables de diseño las que probablemente tengan una mayor importancia para el mezclado son: la presencia o ausencia de una barrera física, porque la presencia de una barrera crearía mucho mayor turbulencia que el mezclador sin barrera; y el diámetro del dispositivo porque esto ayudará a que el líquido permanezca más tiempo en el dispositivo permitiendo un mejor mezclado de los solutos.

Por otro lado, una de las variables que menos afectarán al mezclado será el gasto volumétrico, ya que independientemente del flujo que se use en las simulaciones, los patrones de flujo serán los mismos y la permanencia del metal líquido en el dispositivo dependerán mucho más de otras variables.

De este modo, el dispositivo más promisorio sería aquel con un diámetro grande, para asegurar un buen mezclado, y presencia de una barrera para generar turbulencia y que esto ayude a mezclar mejor.

Capítulo 2 Modelo matemático

2.1 Diseño del dispositivo

El dispositivo final se basó en una patente libre que se encontró en el estudio bibliográfico de las tecnologías y patentes disponibles. El dispositivo cuenta con una entrada continua de metal líquido, el cual entra de forma tangencial a la cámara de mezclado, promoviendo la formación de un vórtice sin la necesidad de ningún tipo de agitación.

El dispositivo mezclador cuenta con 5 variables, 4 de diseño que son: el diámetro del dispositivo (**D**), ángulo de entrada (**β**), ángulo de la sección troncocónica (**α**) y presencia o ausencia de una barrera física; además de una variable de operación que es el gasto volumétrico (**Q**). (Ver **Figura 4** y **Figura 5**)

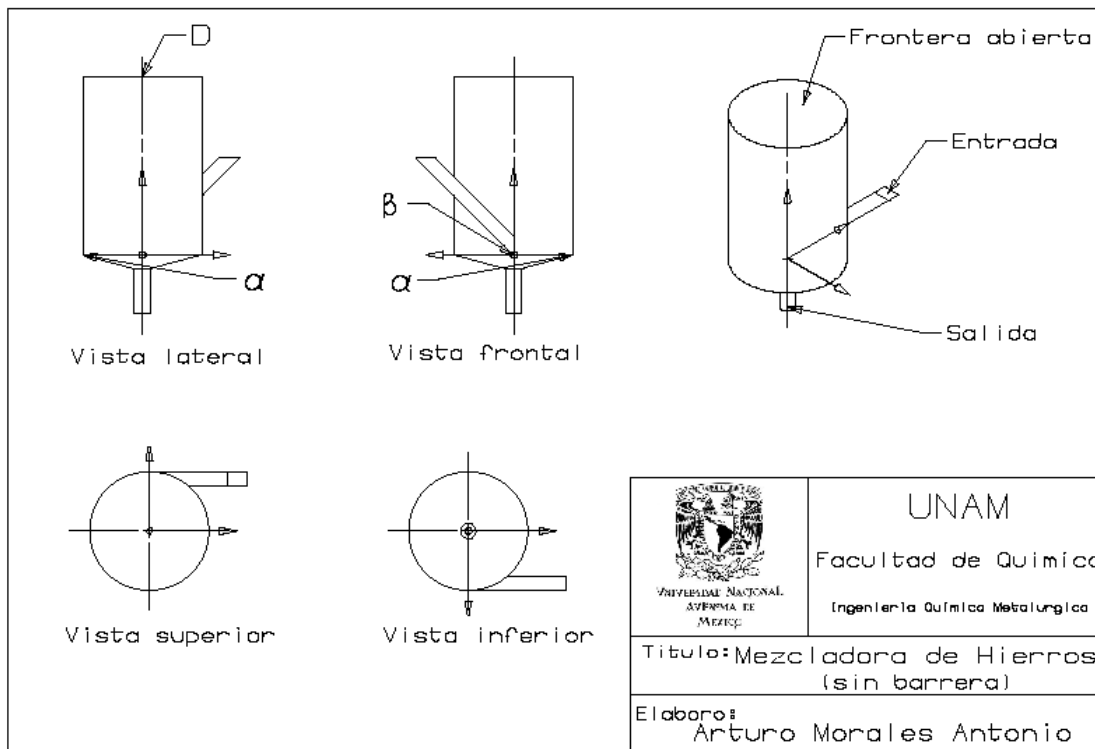


Figura 4. Plano del diseño final de un dispositivo sin barrera (D =Diámetro del dispositivo, β =Ángulo de la entrada y α =Ángulo de la sección troncocónica).

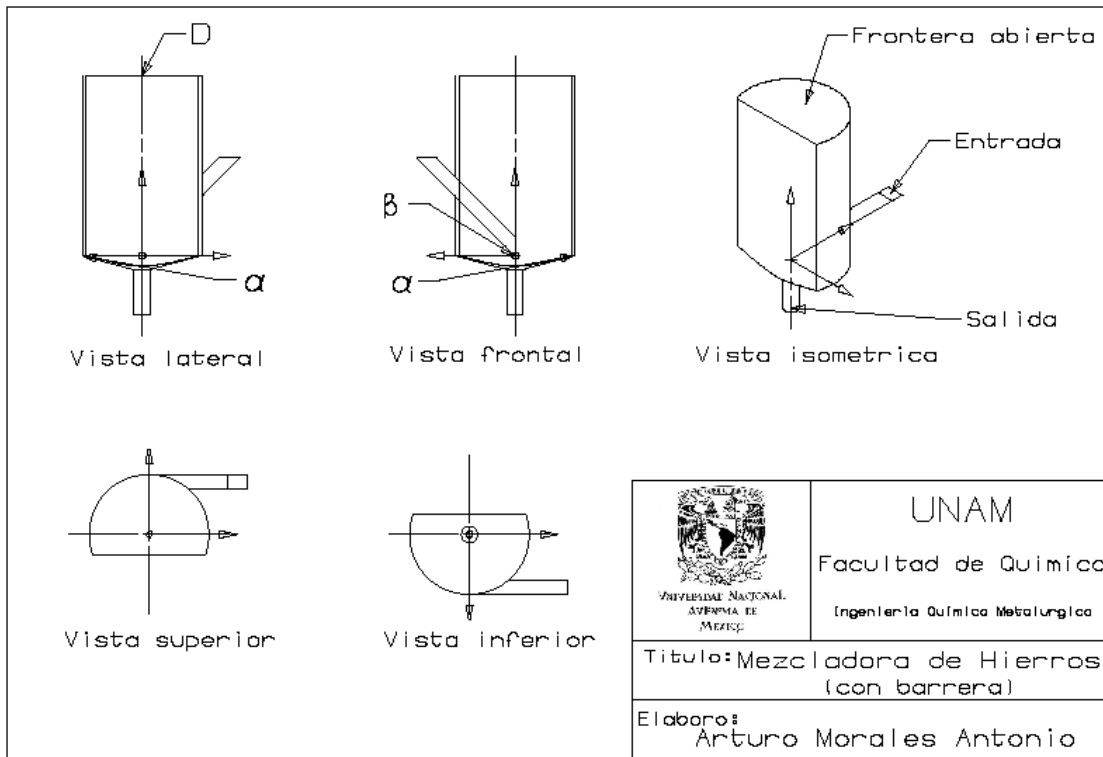


Figura 5. Plano del diseño final de un dispositivo con barrera (D =Diámetro del dispositivo, β =Angulo de la entrada y α =Angulo de la sección troncocónica).

2.1.1 Estudio paramétrico

Con el fin de maximizar el mezclado dentro del dispositivo propuesto, se realizó un diseño de experimentos donde se pretende ver la influencia de las variables de diseño y operación en la forma y tamaño del vórtice, agitación, turbulencia y tiempo de residencia, para determinar bajo que variables el mezclado es mejor.

Una vez definidas las variables a estudiar se fijaron dos valores para cada una de estas variables, los valores máximos (+) y mínimos (-), ya con estos valores establecidos, se diseñó una malla experimental con el fin de explorar todas las posibles combinaciones de las variables para obtener un diseño óptimo que garantice un buen mezclado. La malla consiste en 16 experimentos simulados por

computadora. La **Tabla 1** muestra la malla experimental que se realizó en este trabajo.

Caso	D	α	Barrera	β	Q
1	-	-	-	-	-
2	+	-	-	-	+
3	-	+	-	-	+
4	+	+	-	-	-
5	-	-	+	-	+
6	+	-	+	-	-
7	-	+	+	-	-
8	+	+	+	-	+
9	-	-	-	+	-
10	+	-	-	+	+
11	-	+	-	+	+
12	+	+	-	+	-
13	-	-	+	+	+
14	+	-	+	+	-
15	-	+	+	+	-
16	+	+	+	+	+

Tabla 1. Malla experimental donde (+) representa el valor máximo y (-) el valor mínimo.

2.2 Modelo matemático

El modelo matemático se realizó mediante el software comercial CFD (Computational Fluid Dynamics) ANSYS FLUENT 14 con el fin de resolver el flujo de fluidos en los dispositivos mezcladores y obtener la evolución de la superficie libre, la turbulencia generada, trayectoria y tiempos de residencia de las partículas.

Este modelo matemático se rige por una serie de aspectos que se enlistan a continuación:

- a) Suposiciones. Ayudan a simplificar los fenómenos involucrados.



- b) Ecuaciones gobernantes. Son los principios que rigen los fenómenos a estudiar.
- c) Condiciones de frontera e iniciales. Son aquellas condiciones al inicio del problema y en las fronteras del mismo que hacen que la solución sea particular y única.

2.2.1 Suposiciones

Debido a la complejidad de los fenómenos que se abordan en este trabajo, es de vital importancia establecer ciertas suposiciones y consideraciones con el fin de hacer más fácil la solución numérica del caso de estudio. Las suposiciones que se manejaron son las siguientes:

- 1) Las dos fases presentes, aire y metal líquido, se consideran fluidos isotérmicos, incompresibles y newtonianos. Isotérmicos implica que no se consideraran gradientes de temperatura, cancelando la transferencia de calor, incompresibles supone que la densidad permanecerá constante y no se afecta por cambios de presión y newtonianos porque se consideran fluidos con la viscosidad constante.
- 2) Estado transitorio. Se hará la simulación desde la inyección del metal líquido en la entrada, con el dispositivo vacío, hasta alcanzar un estado cuasi-estable.
- 3) La turbulencia generada será representada por el modelo de turbulencia estándar k-épsilon, ya que este modelo se ha hecho muy común en la ingeniería práctica por su precisión en un amplio rango de fluidos turbulentos.
- 4) El vórtice se simulará con el algoritmo numérico VOF (Volume Of Fluid), ya que sus aplicaciones más típicas incluyen la ruptura de un chorro, el movimiento de grandes burbujas en un líquido y, como es el caso de este trabajo, el seguimiento estable o transitorio de cualquier interfaz líquido-gas.

- 5) Se hará un análisis de mezclado, en donde se inyecta un pulso de un soluto con las mismas propiedades que el metal líquido, y se monitoreará la concentración del soluto (trazador) a la salida del dispositivo mezclador para evaluar los tiempos de residencia generando curvas RTD, también conocidas como curvas “C”.

2.2.2 Ecuaciones gobernantes

Los fenómenos que ocurren en el dispositivo mezclador se buscan modelar con el software ANSYS FLUENT 14. Las ecuaciones que se resolverán para este análisis numérico serán la ecuación de conservación de movimiento en forma vectorial en sus 3 coordenadas, las ecuaciones de conservación de masa correspondientes al algoritmo VOF para la simulación del vórtice [5]. Para describir la turbulencia se resolvieron las dos ecuaciones del modelo k-epsilon y para la obtención de las curvas RTD se tiene que resolver la ecuación de conservación de especies químicas.

2.2.2.1 Ecuación de conservación cantidad de movimiento

La ecuación diferencial de flujo de fluidos para la conservación de la cantidad de movimiento en forma vectorial se puede escribir como (**Ecuación 1**):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v - \nabla \cdot (\rho v) = -\nabla(P) + \nabla[\mu \Delta(v)] + \rho g$$

Ecuación 1

Donde P es la presión, t es el tiempo, v es el vector de velocidad, g la constante de gravedad, ρ es la densidad del fluido y μ la viscosidad.

Esta ecuación vectorial puede plantearse también como 3 ecuaciones, para cada una de sus 3 coordenadas, y aunque nuestro dispositivo presenta una geometría predominantemente cilíndrica, el software que se utilizó para la simulación únicamente resuelve los cálculos en coordenadas rectangulares, las cuales se presentan a continuación para un fluido newtoniano con ρ y μ constantes [6].

Para el componente x

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x$$

Ecuación 2

Para el componente y

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho g_y$$

Ecuación 3

Para el componente z

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z$$

Ecuación 4

Donde P es la presión, t es el tiempo, v es el vector de velocidad, g la constante de gravedad, ρ es la densidad del fluido y μ la viscosidad.

2.2.2.2 Modelo VOF (Volume Of Fluid)

El algoritmo VOF se basa en el hecho que dos o más fluidos (o fases) no están interpenetradas, sino separadas por una interfase bien definida, llamada superficie libre. Por cada fase adicional agregada al sistema, una variable más es introducida al modelo y se determinan las fracciones de volumen de cada fase en cada celda computacional. En cada volumen de control, las fracciones de volumen

de cada fase suman la unidad. La forma de la ecuación de conservación de masa para el marcador o fracción está dada por la **Ecuación 5**.

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + v \cdot \nabla \xi = 0$$

Ecuación 5

Donde ξ es la fracción de volumen. En el caso de un sistema bifásico como es el que se estudia en este trabajo la fracción de volumen para el líquido (metal líquido) se representa como ξ_{liq} , y por lo tanto la fracción de gas (aire) es $1 - \xi_{liq}$, y la suma de todas las fracciones es la unidad. Cuando el valor de ξ_{liq} es uno, entonces la celda computacional contiene únicamente la fase líquida, por otro lado, si el valor de ξ_{liq} es igual a cero entonces la fase presente en ese nodo es la fase gaseosa. De este modo al conocer las fracciones de volumen para cada fase se pueden calcular las propiedades del fluido en cada celda haciendo un promedio por medio de la **Ecuación 6**.

$$\rho = \xi_{liq} \rho_{liq} + \rho_{gas} (1 - \xi_{liq})$$

Ecuación 6

Donde ρ_{liq} es la densidad de la fase líquida y ρ_{gas} es la densidad de la fase gaseosa. Cabe resaltar que no solo la densidad es calculada de esta forma, las demás propiedades del fluido son calculadas de la misma forma, tal es el caso de la viscosidad μ .

2.2.2.3 Modelo k-épsilon

La turbulencia se calculó con el modelo de dos ecuaciones k-épsilon estándar, este modelo está basado en la resolución de una ecuación de conservación para la energía cinética turbulenta (k) y una más para la rapidez de disipación de la energía cinética turbulenta (ϵ). Este modelo asume que flujo es totalmente turbulento, por lo tanto los efectos de la viscosidad molecular son



despreciables. Así pues, este modelo solo es válido para flujos totalmente turbulentos.

La energía cinética turbulenta, k (**Ecuación 7**), y su rapidez de disipación, ε (**Ecuación 8**), se obtienen por medio de las siguientes ecuaciones de conservación [7]:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon$$

Ecuación 7

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{V} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$$

Ecuación 8

Dónde:

$$P_k = -\overline{u_i u_j} (\nabla \cdot \bar{V})$$

Ecuación 9

Donde $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$ son constantes, σ_ε es el número turbulento de Prandtl para ε .

La viscosidad turbulenta (μ_t) es calculada en cada nodo del dominio de cómputo en función de los valores locales de k y ε mediante la **Ecuación 10** [7].

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Ecuación 10

Donde C_μ es una constante.

Las constantes que aparecen en las ecuaciones de turbulencia tienen los valores de la Tabla 2.

$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	C_μ	σ_ε	σ_k
1.44	1.92	0.09	1.3	1.0

Tabla 2. Muestra los valores de las constantes utilizadas en el modelo k-épsilon.

2.2.2.4 Ecuación de conservación de especies químicas

La resolución de esta ecuación para un soluto de concentración C , nos llevará a obtener las curvas RTD, ya que se monitoreará la concentración a la salida del dispositivo del pulso del soluto que se adiciona. La ecuación de conservación de especies químicas es la siguiente (**Ecuación 11**):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{V}C) = \nabla \cdot (D_{C,l} \nabla C) + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{S_{C_t}} \nabla C \right)$$

Ecuación 11

En donde $D_{C,l}$ es el coeficiente de difusión molecular del trazador en la fase líquida y S_{C_t} es número de Schmidt turbulento.

2.2.3 Condiciones de frontera e iniciales

2.2.3.1 Fluodinámica.

Las condiciones iniciales con las que partimos los cálculos de la fluodinámica en este trabajo fueron:

- El dispositivo mezclador se encontraba vacío de metal líquido, en otras palabras, el dispositivo únicamente contenía aire estático en su interior. La fracción de volumen para la fase líquida es $\xi_{liq}=0$ en todas las celdas computacionales.
- Por lo tanto el cálculo se hará en régimen transitorio.
- El flujo del metal líquido es constante y entra de forma normal al plano de entrada del dispositivo.

Las condiciones a la frontera implican las siguientes consideraciones:

- Condición de no deslizamiento e impermeabilidad para las paredes del dispositivo mezclador. Esto quiere decir que los componentes de la velocidad del fluido paralelos y perpendiculares a las paredes son cero [8].
- No es un dispositivo cerrado ya que la frontera superior está abierta a la atmósfera.



- Finalmente, hay una entrada de líquido (inlet) en donde éste entra al dispositivo normal al área de entrada y con una velocidad y parámetros turbulentos calculados de acuerdo al flujo másico y a la intensidad turbulenta y al diámetro hidráulico respectivamente. También hay una salida de líquido (outlet) en un dispositivo que opera de manera continua con el tiempo donde el fluido se descarga al ambiente con presión atmosférica.

2.2.3.2 Mezclado del trazador

Condiciones iniciales serán prácticamente las finales del cálculo de la fluodinámica, estas son:

- Se considera estado estable.
- Al estabilizarse el flujo dentro del dispositivo se omiten los cálculos de las ecuaciones de conservación de movimiento, masa y turbulencia, para dar lugar a la resolución de la ecuación de conservación de especies químicas. Es decir, se usa un patrón de flujo desarrollado o en estado estable que no cambia con el tiempo pero que se usa para describir el movimiento convectivo y turbulento del soluto o la especie química.
- En este caso del mezclado de trazador, todas las paredes sólidas del dispositivo así como la frontera abierta a la atmósfera funcionan como fronteras de no transferencia de masa de soluto (ni convectivo ni difusivo), es decir, los flujo de soluto en todas las paredes sólidas y la frontera abierta a la atmósfera son cero.
- Al inicio, no hay nada de soluto en el dispositivo y en un instante inicial se inyecta un pulso de soluto con una fracción de volumen con respecto al caudal de entrada de 0.0125 por un segundo en el inlet. Después de este segundo en que dura la inyección ya no se inyecta nada de soluto en el inlet.



- Finalmente, en el outlet se permite que salga libremente soluto por convección con el chorro de salida.

2.3 Propiedades físicas

En la **Tabla 3** se muestran los valores de las propiedades físicas de los fluidos involucrados, es decir, en este caso particular se empleó hierro líquido y aire. Además, se presentan algunos datos del soluto usado que es silicio.

Fluido	Densidad (kg/m ³)	Viscosidad (kg/m·s)	Coefficiente de difusión (m ² /s)
Hierro	6530	6.935e-10	----
Aire	1.225	1.7894e-5	----
Silicio (soluto)	2000	1.72e-5	3.5e-9

Tabla 3. Propiedades físicas de los materiales utilizados.

2.4 Obtención de curvas “C”

Con el fin de hacer un análisis del potencial de mezclado en cada uno de los dispositivos mezcladores es necesario obtener las curvas RTD, las cuales se obtienen mediante el monitoreo a la salida del sistema de un pulso de un trazador inyectado a la entrada del dispositivo. En estas curvas se busca graficar en eje de las abscisas el tiempo adimensional (θ) y en el eje de las ordenadas la concentración adimensional (C_θ). Para normalizar los resultados obtenidos se deben hacer los cálculos siguientes.

2.4.1 Tiempo medio de residencia

El tiempo medio de residencia (\bar{t}) se calcula mediante el cociente mostrado en la **Ecuación 12**:

$$\bar{t} = \frac{V}{Q}$$

Ecuación 12

Donde V es el volumen del metal líquido expresado en m³ y Q es el gasto volumétrico aplicado a cada sistema en m³/s.

2.4.2 Tiempo adimensional

Con el fin de normalizar el tiempo es conveniente tener el tiempo en función del tiempo medio residencia, obteniendo así el tiempo adimensional θ mediante la **Ecuación 13**.

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}}$$

Ecuación 13

En donde t es el tiempo al que fue medida la concentración en la salida del dispositivo y \bar{t} es el tiempo medio de residencia.

2.4.3 Concentración media

De igual forma como se hizo con el tiempo, es necesario calcular la concentración media (\bar{C}). La **Ecuación 14** nos muestra cómo obtener la concentración media.

$$\bar{C} = \frac{m_t}{V}$$

Ecuación 14

Donde m_t es la masa del trazador y V el volumen del fluido.



2.4.4 Concentración Adimensional

La concentración adimensional (C_θ) se calcula con la **Ecuación 15** a partir de la concentración media.

$$C_\theta = \frac{C}{\bar{C}}$$

Ecuación 15

Donde C es la concentración de trazador a la salida del dispositivo a cualquier instante de tiempo y \bar{C} es la concentración media.

2.5 Obtención de los porcentajes de volumen pistón, volumen mezclado y volumen muerto.

Una vez obtenidos los valores de tiempo y concentración adimensional se tiene que normalizar la curva RTD haciendo que el área bajo la curva sea igual a la unidad.

Para hacer un mejor análisis de mezclado del fluido se utiliza un procedimiento de cálculo propuesto por Sahai y Emi [9], en donde el volumen del metal líquido y el soluto está distribuido en tres fracciones, volumen pistón, volumen de mezclado y volumen muerto.

Aunque el modelo propuesto está destinado para el uso en distribuidores de colada continua, se considera válido el uso de este modelo para este tipo de mezcladores ya que también es un dispositivo continuo.

El cálculo de las fracciones de volumen pistón, mezclado y muerto, se hace de la siguiente manera: el área bajo la curva debe ser igual a la unidad por lo que se utiliza la **Ecuación 16**.

$$\sum_{\theta=0}^{\infty} C_{\theta i} \Delta\theta = 1$$

Ecuación 16

Donde $C_{\theta i}$ es la concentración adimensional a un tiempo determinado y $\Delta\theta$ es el incremento del tiempo adimensional.

El tiempo medio de residencia adimensional ($\bar{\theta}$) para la curva entera está dado por la **Ecuación 17**.

$$\bar{\theta} = \frac{\sum_{\theta=0}^{\infty} C_{\theta i} \theta_i}{\sum_{\theta=0}^{\infty} C_{\theta i}}$$

Ecuación 17

Donde $C_{\theta i}$ es la concentración adimensional a un tiempo determinado y θ_i es el tiempo adimensional a un tiempo dado.

El tiempo medio de residencia desde $\theta=0$ hasta $\theta=2$ está definido como ($\bar{\theta}_c$), se calcula con la **Ecuación 18**.

$$\bar{\theta}_c = \frac{\sum_{\theta=0}^2 C_{\theta i} \theta_i}{\sum_{\theta=0}^2 C_{\theta i}}$$

Ecuación 18

El área bajo la curva desde $\theta=0$ hasta $\theta=2$ Q_a/Q , que se considera como la fracción de volumen activo que es la suma de las fracciones de volumen pistón con el volumen de mezclado se calcula con la **Ecuación 19**.

$$\frac{Q_a}{Q} = \sum_{\theta=0}^2 C_{\theta i} \Delta\theta$$

Ecuación 19

2.5.1 Volumen Muerto

La fracción de volumen muerto V_d/V se calcula con la **Ecuación 20**.

$$\frac{V_d}{V} = 1 - \frac{Q_a}{Q} \bar{\theta}_c$$

Ecuación 20

Donde V_d es el volumen muerto.

2.5.2 Volumen Pistón

Ya con la fracción de volumen muerto calculada se debe realizar el cálculo de fracción de volumen pistón V_p/V el cual es igual al tiempo adimensional donde aparece la primera concentración del pulso a la salida del mezclador. La **Ecuación 21** muestra lo antes dicho.

$$\frac{V_p}{V} = \theta_{min}$$

Ecuación 21

Donde θ_{min} es el tiempo adimensional donde se registra por primera vez el trazador.

2.5.3 Volumen de Mezclado

Se sabe que la suma de las tres fracciones debe ser igual a uno ya que se trata de cálculo de fracciones, entonces la fracción de volumen de mezclado V_m/V es calculada asumiendo que se conocen las fracciones de volumen muerto y volumen pistón, el cálculo se hace con la **Ecuación 22**.

$$\frac{V_m}{V} = 1 - \left(\frac{V_d}{V} + \frac{V_p}{V} \right)$$

Ecuación 22

Capítulo 3 Resultados y análisis de resultados

Como primer punto se expondrán los resultados de las mallas realizadas, ya que es una parte muy importante para la exactitud de los cálculos que se realizaron y con esto asegurar la confiabilidad de los resultados.

Posteriormente se analizará de forma cualitativa y cuantitativa los resultados obtenidos. Se harán comparaciones de patrones de flujo, turbulencia, velocidad y forma del vórtice para el análisis cualitativo. Para el análisis cualitativo se hará uso de las curvas C para determinar los porcentajes de mezclado en cada uno de los dispositivos. Finalmente, se hará un análisis estadístico para determinar que variables tienen más influencia para un mejor mezclado de solutos en un baño metálico.

3.1 Mallas de los dispositivos mezcladores

La importancia del mallado radica en que el software utilizado realiza cálculos numéricos basados en la cantidad de nodos que se logren hacer en las mallas, donde a menor número de nodos, el error que se tiene en el cálculo es mayor y viceversa, a mayor cantidad de nodos o elementos el cálculo el error disminuirá. De esta forma tener una gran cantidad de nodos nos proporciona una solución muy exacta, el inconveniente es que a mayor cantidad de nodos, el software hace una mayor cantidad de cálculos y el tiempo que se demora en terminar aumenta conforme aumenta la cantidad de nodos.

Después de un extenso estudio de mallado en el módulo correspondiente del software ANSYS 14.0 se consiguió realizar las mallas de los 16 dispositivos mezcladores con un número de elementos que va desde los 150,000 hasta los 200,000 nodos (Ver **Figura 6** y **Figura 7**). Con esta cantidad de nodos y con un equipo de cómputo de 4 núcleos, 4GB de memoria RAM y un procesador Intel® Core™ i3-2100 CPU @ 3.10 GHz, los cálculos para la simulación de la



hidrodinámica tardaban en promedio 4 días sin interrupciones y para el cálculo de mezclado el promedio fue de 2 días.

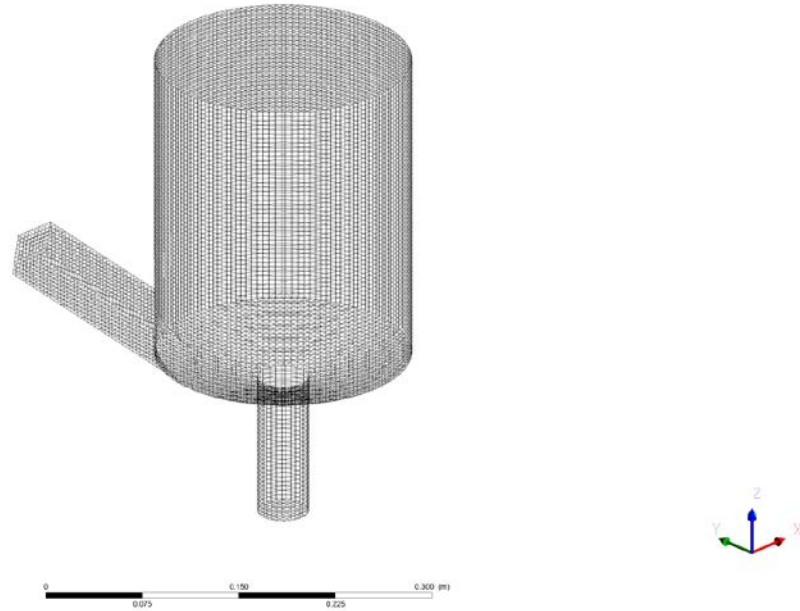


Figura 6. Ilustración del mallado del dispositivo mezclador sin barrera

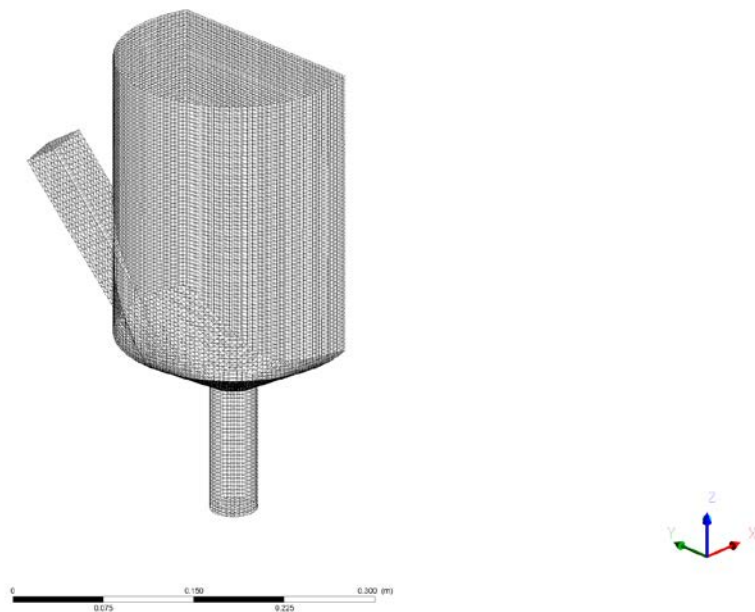


Figura 7. Ilustración del mallado del dispositivo mezclador con una barrera física.

3.2 Análisis cualitativo de resultados.

De acuerdo al entendimiento de los fenómenos de transporte y de flujo de fluidos se hará un análisis cualitativo, el cual consta de una comparación de la forma del vórtice que se creó en cada uno de los casos de estudio, la turbulencia creada, la trayectoria que siguen las partículas dentro del dispositivo y los vectores de velocidad en la cámara de mezclado. Todo esto con el fin de analizar la influencia que tiene cada una de las variables en el comportamiento del metal líquido dentro del dispositivo mezclador y por ende la capacidad de mezclado del dispositivo.

3.2.1 Tamaño y forma del Vórtice

En la **Figura 8** se muestran los 8 casos de estudio que no tiene barrera, mientras que la **Figura 9** muestra los restantes casos de estudio que si presenta una barrera física. Las figuras muestran la forma y tamaño del vórtice a los 15 segundos de iniciado la operación.

Tal y como se aprecia en la **Figura 8**, la ausencia de la barrera física permite un mejor desarrollo del vórtice debido a que el chorro metálico que entra en el dispositivo mezclador no encuentra ningún obstáculo y el flujo sigue una trayectoria angular dentro de la cámara de mezclado formando así un vórtice en cada uno de los experimentos mostrados en esta figura. La formación de este vórtice sugiere un mayor tiempo de residencia de las partículas permitiendo una mejor incorporación de los elementos aleantes o solutos en el metal líquido.

El aumento del diámetro también tiene un efecto claro aunque no en la forma sino en la altura del vórtice, ya que al aumentar el diámetro aumenta también el volumen de la cámara de mezclado disminuyendo la altura del vórtice.

Las variables de diseño restantes, que son: el ángulo de la entrada del metal líquido (α), el ángulo de la sección troncocónica (β) y el flujo (Q) parecen no tener un efecto tan marcado en la forma y altura del vórtice.



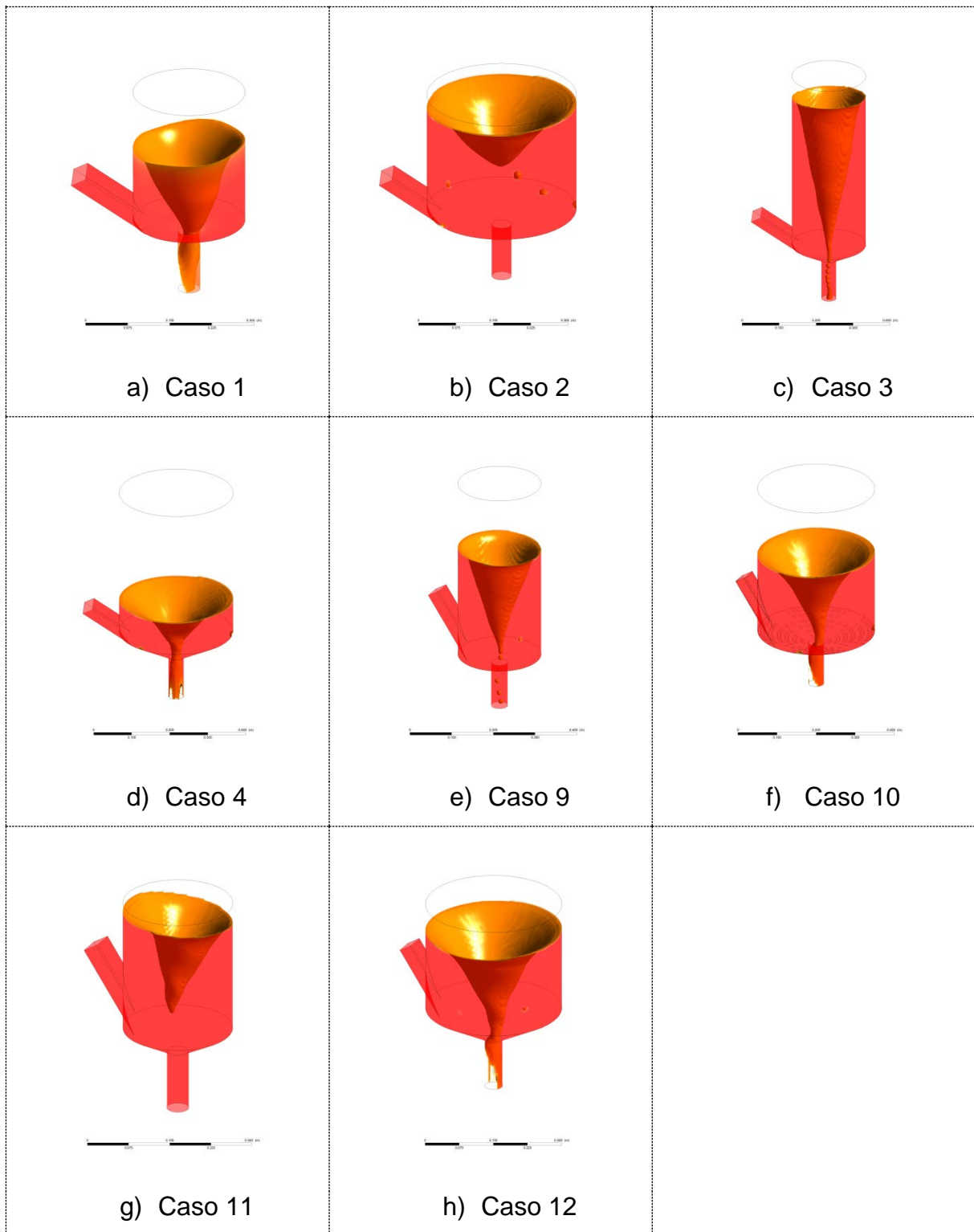


Figura 8. Vórtices generados en los 8 casos que no cuentan con una barrera física a los 15 segundos de iniciada la alimentación líquida.

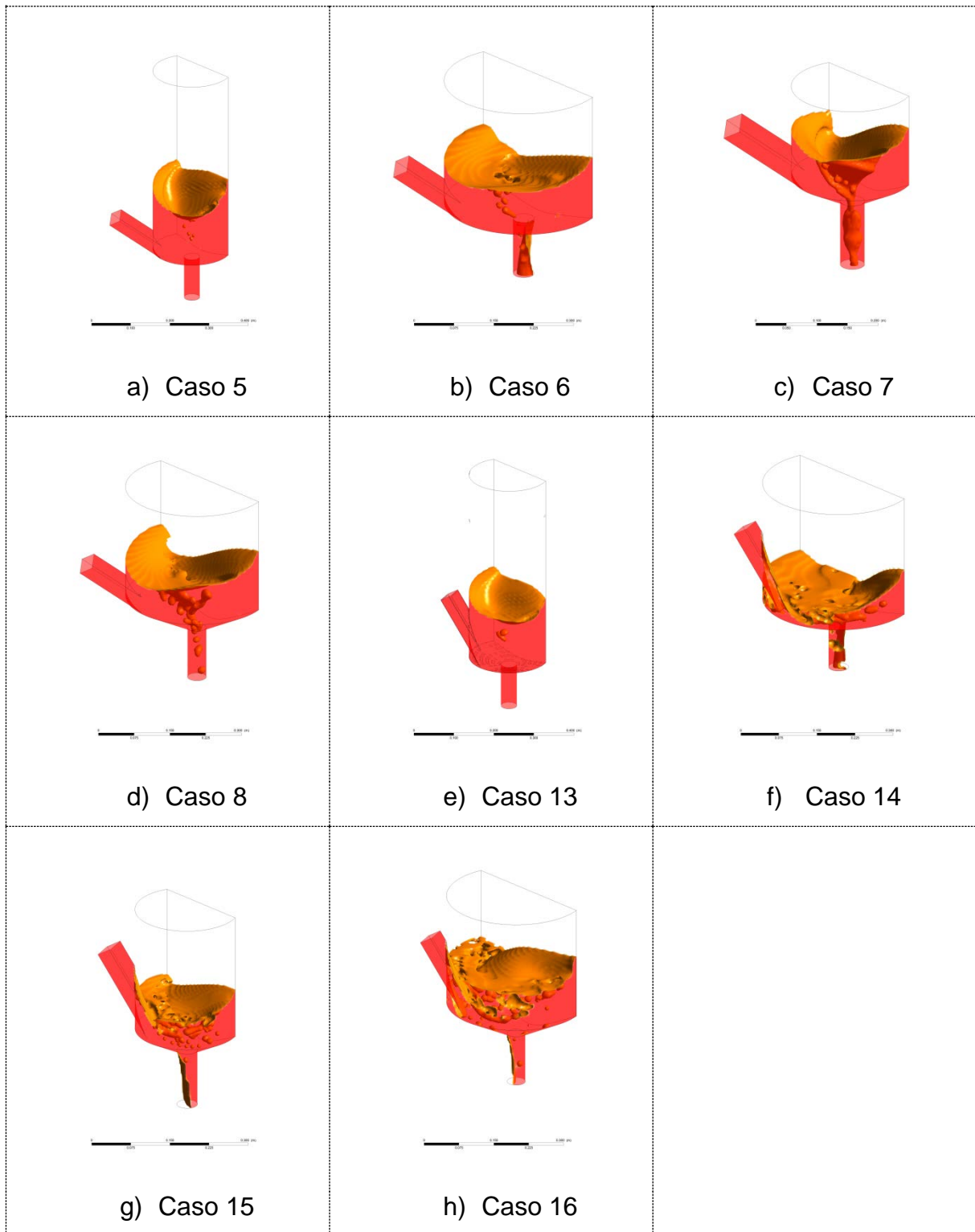


Figura 9. Vórtices generados en los 8 casos que cuentan con una barrera física a los 15 segundos de iniciada la alimentación líquida.

Por otro lado en la **Figura 9** se puede apreciar que la presencia de la barrera impide la formación de un vórtice ya que el chorro metálico que entra al dispositivo choca con la barrera generando una gran turbulencia lo cual provoca varios fenómenos, uno de estos fenómenos es la eliminación del vórtice bien definido, también provoca un aumento del porcentaje del volumen pistón del sistema ya que al chocar con la barrera hay un porcentaje del metal líquido que sale del sistema en los primeros segundos lo cual no garantiza que el mezclado sea correcto en el inicio del mezclado, y finalmente se genera un menor tiempo de residencia en el sistema a causa de que el metal líquido que entra al sistema sea enviado a la salida debido a la agitación y turbulencia presentes en el mezclado.

Entonces la variable de diseño que más afecta formación de un vórtice, y por ende los tiempos de residencia, es la presencia o ausencia de una barrera en el sistema seguida por el diámetro de la cámara de mezclado. Las variables que de nueva cuenta parecen no tener un efecto considerable con el ángulo de entrada (β), ángulo de la sección troncocónica (α) y el flujo del metal líquido (Q).

3.2.2 Turbulencia

Como se describió anteriormente la variable que más afecta la turbulencia es la presencia de una barrera lo cual se confirma en la **Figura 10** y **Figura 11**, las cuales muestran los resultados de turbulencia a los 15 segundos después de introducir el metal líquido en el dispositivo mezclador. Estos resultados se obtienen de la resolución del modelo de turbulencia $k-\epsilon$ estándar y se asocia con la Viscosidad Eddy (Eddy Viscosity en inglés) también llamada Viscosidad turbulenta. La turbulencia está asociada con una mejora en los transportes de calor y masa por mecanismos de difusión turbulenta y en consecuencia mejora el mezclado.



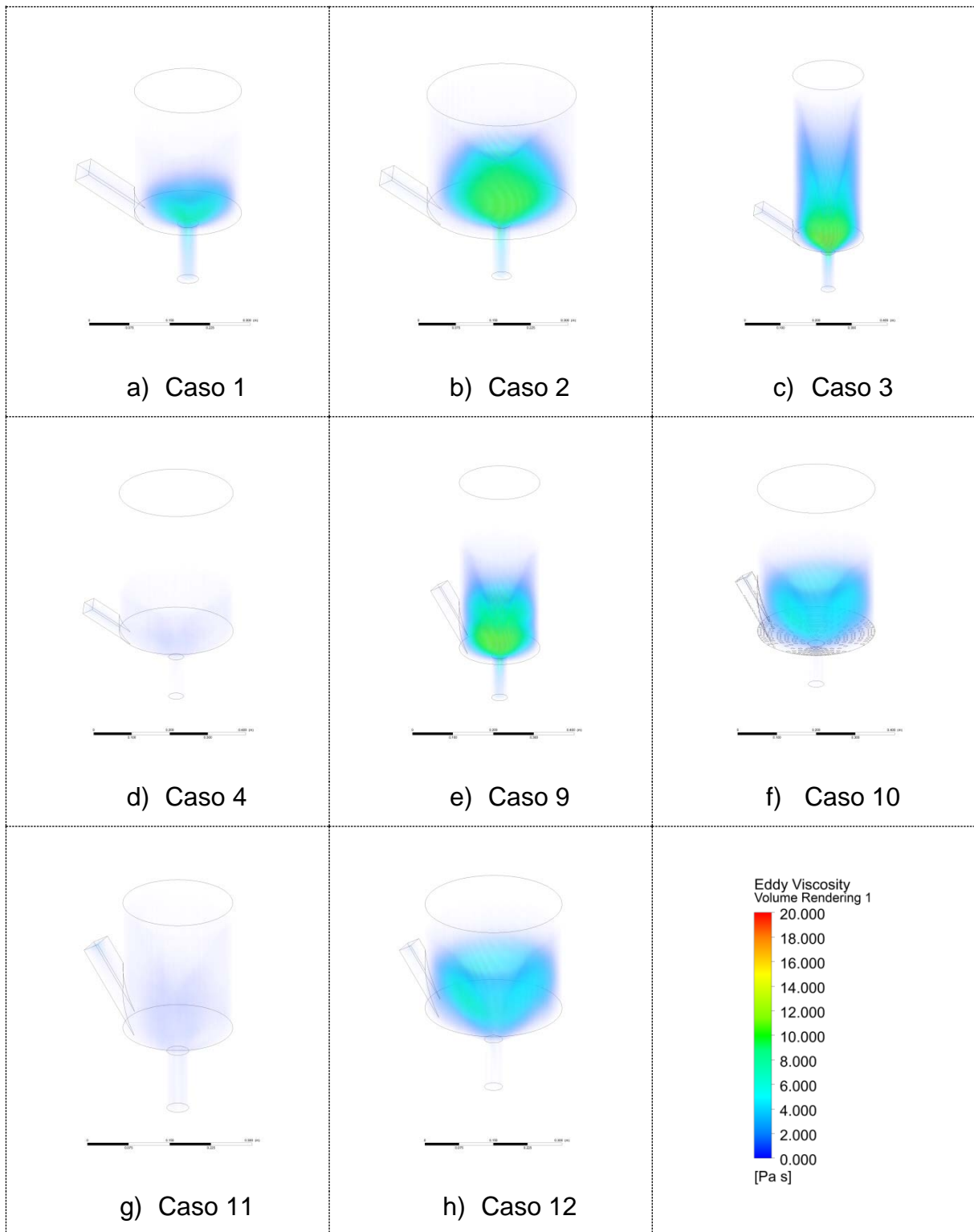


Figura 10. Resultados de turbulencia de los 8 dispositivos que no cuentan con barrera a los 15 segundos de iniciada la alimentación líquida.

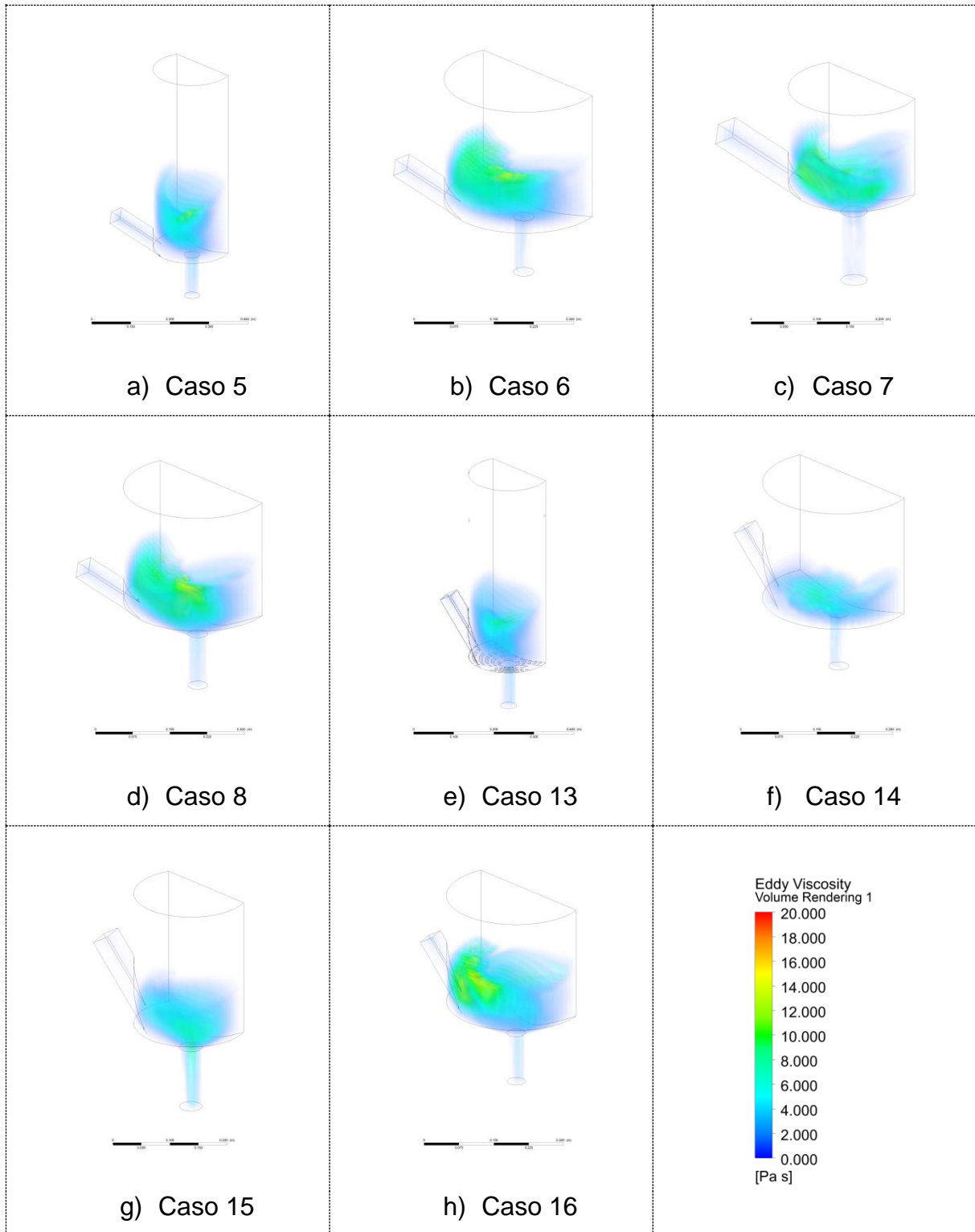


Figura 11. Resultados de turbulencia de los 8 dispositivos que presentan barrera a los 15 segundos de iniciada la alimentación líquida.

Los contornos de turbulencia de los casos sin barrera se muestran en la **Figura 10** donde la turbulencia se hace presente en algunos casos mientras que en otros prácticamente desaparece. Así que las demás variables de diseño juegan un papel importante en la generación o eliminación de la turbulencia.

El efecto general del diámetro de la cámara de mezclado (**D**) se ve reflejado en los diámetros pequeños los cuales generan una mayor turbulencia que aquellos casos con diámetros grandes debido a que la circunferencia es menor provocando que la velocidad del metal líquido dentro de la cámara de mezclado sea más mayor generando una mayor turbulencia. Los Casos 1, 3 y 9 ejemplifican lo dicho anteriormente ya que son los casos que presentan una mayor turbulencia. El ángulo de la sección troncocónica de la cámara de mezclado (**α**) también presenta un gran influencia al momento de generar gran turbulencia, ya que los ángulos pequeños favorecen la generación de la misma, ya que como se puede ver en los Casos 1, 2 y 9 la turbulencia es mayor que aquellos casos con un ángulo **α** mayor como son los Casos 4 y 11. Finalmente la influencia del ángulo de entrada del metal líquido (**β**) presenta el mismo comportamiento que el ángulo de la sección troncocónica (**α**), es decir, ángulos pequeños generan una mayor turbulencia que los ángulos grandes.

En la **Figura 11** se ven plasmados los resultados de la turbulencia generada en los dispositivos con barrera, y como se puede observar en la figura la turbulencia generada es grande en cada uno de los casos, esto se debe a la presencia de la barrera ya que, como se menciona anteriormente, al chocar el metal líquido con dicha barrera, la turbulencia que se genera es muy grande.

Las demás variables de diseño también tienen efecto considerable sobre la turbulencia en los casos de estudio con presencia de una barrera, siendo la más importante el diámetro de la cámara de mezclado (**D**) ya que como se puede ver en la **Figura 11** los casos que presentan una mayor turbulencia son los Casos 6,8 y 16 los cuales tienen un diámetro mayor. El ángulo de la sección troncocónica del dispositivo también juega un papel muy importante en la generación de turbulencia



ya que los ángulos grandes de esta sección, representados en los Casos 7, 8 y 16, también presentan una gran turbulencia.

Haciendo una comparación con los casos donde no existe barrera (**Figura 10**) y aquellos donde si existe (**Figura 11**) la turbulencia generada depende mayoritariamente de esta misma variable, y posteriormente la combinación de las demás variables de diseño ayudara tener una mayor o menor turbulencia, para los casos sin barrera la variable que más influye es un ángulo pequeño de la sección troncocónica (α) seguida del diámetro (**D**) pequeño. Por otro lado, en los casos con barrera sucede el caso contrario, la variable que más afecta es un ángulo α grande seguido de diámetros (**D**) grandes.

Turbulencia [Pa.s]		
Caso	Max	Min
1	14.38990	1.2148E-05
2	16.20460	3.8486E-05
3	19.70660	1.7980E-05
4	1.36525	3.0220E-06
5	13.91740	1.1253E-06
6	16.02630	2.3419E-07
7	16.54610	5.2876E-08
8	16.87450	5.4664E-07
9	18.53580	1.4030E-05
10	6.45357	1.4709E-05
11	2.00807	2.0016E-05
12	7.58787	1.7397E-05
13	10.68900	7.8195E-07
14	9.24054	7.9798E-07
15	10.15840	9.8538E-07
16	17.35190	3.4774E-06

Tabla 4. Valores máximos y mínimos de turbulencia para cada uno de los casos de estudio.

Los valores máximos y mínimos de turbulencia de los dispositivos aparecen en la **Tabla 4** donde se puede ver que los valores de turbulencia de los dispositivos con barrera van desde 9.24 hasta 17.36 Pa-s, mientras que los valores para los dispositivos sin barrera van desde 1.3 a 19.8 Pa-s. Esto nos dice que aunque el resultado de turbulencia más grande fue encontrado en un caso sin

barrera también se encontró el resultado más pequeño dándonos una mayor amplitud en los resultados. Por otro lado, los resultados de los casos con barrera son más cerrados en cuanto a dispersión de resultados pero todos ellos presentaba una alta turbulencia.

Así que los dispositivos sin barrera también son capaces de generar niveles de turbulencia grandes, pero sobre todo generan una estructura turbulenta homogénea en toda la cámara, y en conjunto con los tiempos de residencia largos que aportan estos dispositivos, terminan ofreciendo una vez más, las mejores condiciones de mezclado.

3.2.3 Velocidad y trayectorias de las partículas trazadoras

Para poder hacer un mejor análisis de mezclado se adicionó al sistema partículas inertes con el fin de poder analizar la trayectoria que seguiría el soluto dentro del metal líquido, el propósito de usar partículas inertes fue el de despreocupar los posibles efectos de fusión/disolución que se pudieran presentar, estas partículas las nombraremos partículas trazadoras ya que como su nombre lo indica, estas trazan la ruta que recorre el fluido. La trayectoria de las partículas trazadoras en los dispositivos sin barrera está representado en la **Figura 12** y para los dispositivos con barrera se encuentra en la **Figura 13**; en ambos casos las partículas se mueven con patrones de flujo ya desarrollados y en régimen estable alcanzado a los 15 segundos de iniciada la operación del dispositivo.





Figura 12. Trayectoria y velocidad de las partículas trazadoras dentro del dispositivo mezclador con ausencia de una barrera.

Las trayectorias de las partículas que se pueden observar en la **Figura 12** muestran el movimiento de las mismas dentro del metal líquido siguiendo un movimiento angular en toda la circunferencia de la cámara de mezclado desde la entrada del dispositivo hasta la salida del mismo. La diferencia más importante que se puede alcanzar a ver en estos 8 casos de estudio es en la velocidad de las partículas ya que todos los casos siguen el mismo patrón de movimiento pero la velocidad de las partículas dentro del dispositivo varía entre uno y otro. Esta variación de velocidad debe principalmente a que se manejaron dos velocidades de entrada del metal líquido al variar el flujo de metal. Aunque también influyen otras variables como los ángulos de entrada del metal líquido (β), ya que los ángulos pequeños permiten conservar una mayor velocidad de las partículas ya que el metal entra al dispositivo sin chocar con la base troncocónica, lo cual, si lo hiciera reduciría notablemente la velocidad de entrada del metal líquido. Esto se ven ejemplificado en los Casos 1-4 ya que las magnitudes de velocidad generadas en estos casos son más grandes se las que obtuvieron en los Casos 9-12. Finalmente una variable más que parece tener un efecto importante en la velocidad de las partículas trazadoras dentro del dispositivo mezclador sin una barrera es el diámetro de la cámara de mezclado (D), ya que los diámetros pequeños parecen mantener la velocidad del flujo de entrada del metal líquido, mientras que los dispositivos con diámetros grandes disminuyen la velocidad con la que entra el metal. Los Casos 1(a), 3(c), 9(e) y 11(g) parecen tener una mayor velocidad que aquellos experimentos con diámetros grandes, Casos 2(b), 4(d), 10(f) y 12(h) (Ver **Figura 12**).

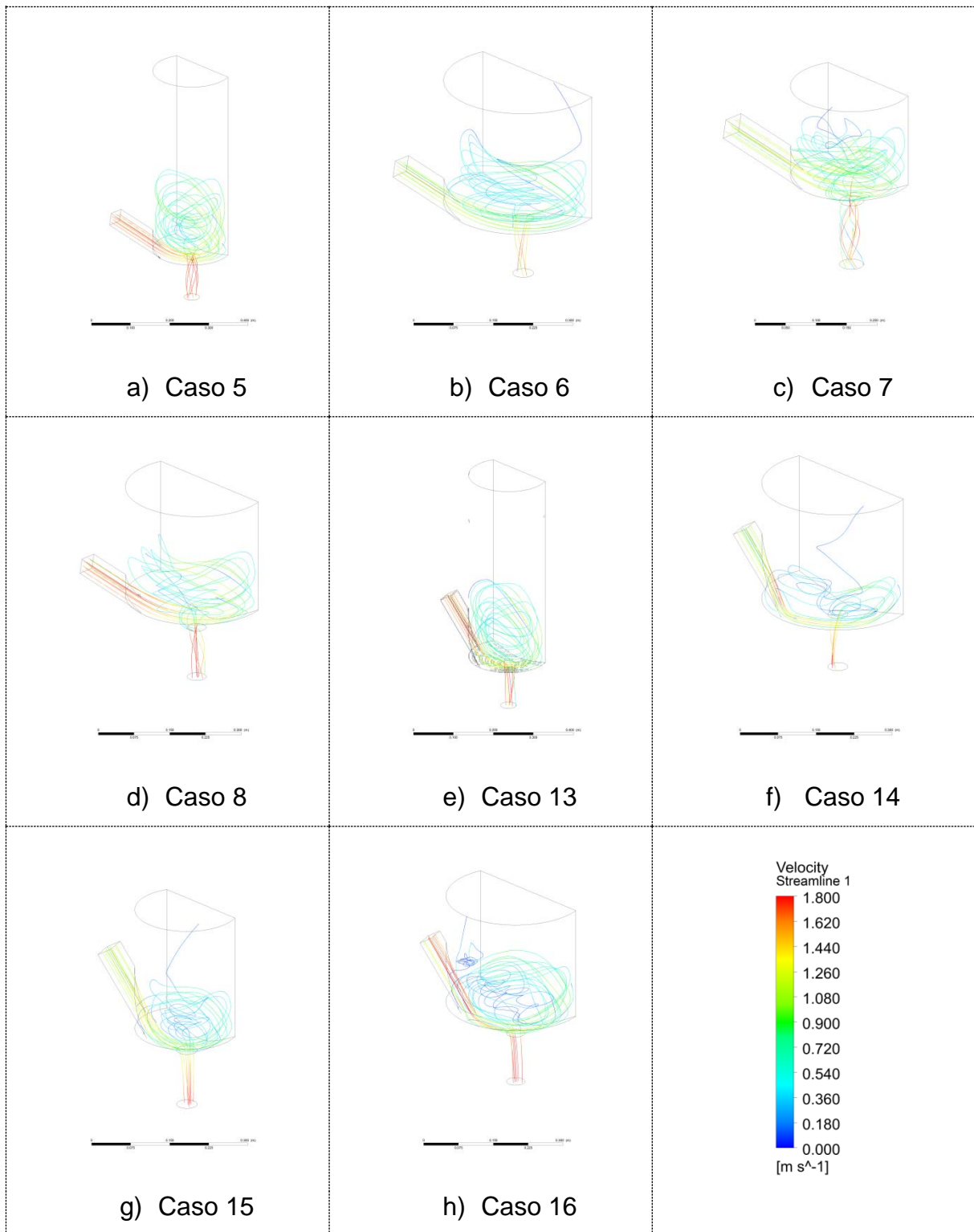


Figura 13. Trayectoria y velocidad de las partículas trazadoras dentro del dispositivo mezclador con presencia de una barrera.

La velocidad en los casos con barrera parecen no variar considerablemente, probablemente debido a que el choque del fluido contra la barrera disminuye la inercia y la velocidad con la que entra este fluido, lo cual provoca que no haya un comportamiento bien definido entre los 8 casos que cuentan con barrera. La única variación en velocidad que se tiene es a la entrada del dispositivo, pero esto se debe a que se manejaron dos gastos volumétricos diferentes, donde los Casos 5, 8, 13 y 16 son los casos que se trabajaron con una velocidad de entrada más alta que el resto de los casos descritos en la **Figura 13**.

Entonces, al momento de hacer la evaluación de la velocidad de las partículas trazadoras la variable más significativa es la presencia de o ausencia de una barrera física. Y dentro de los casos de estudio sin barrera la variable que más afecta la velocidad, aumentándola, es el ángulo de la entrada del metal (β).



3.2.4 Vectores de velocidad

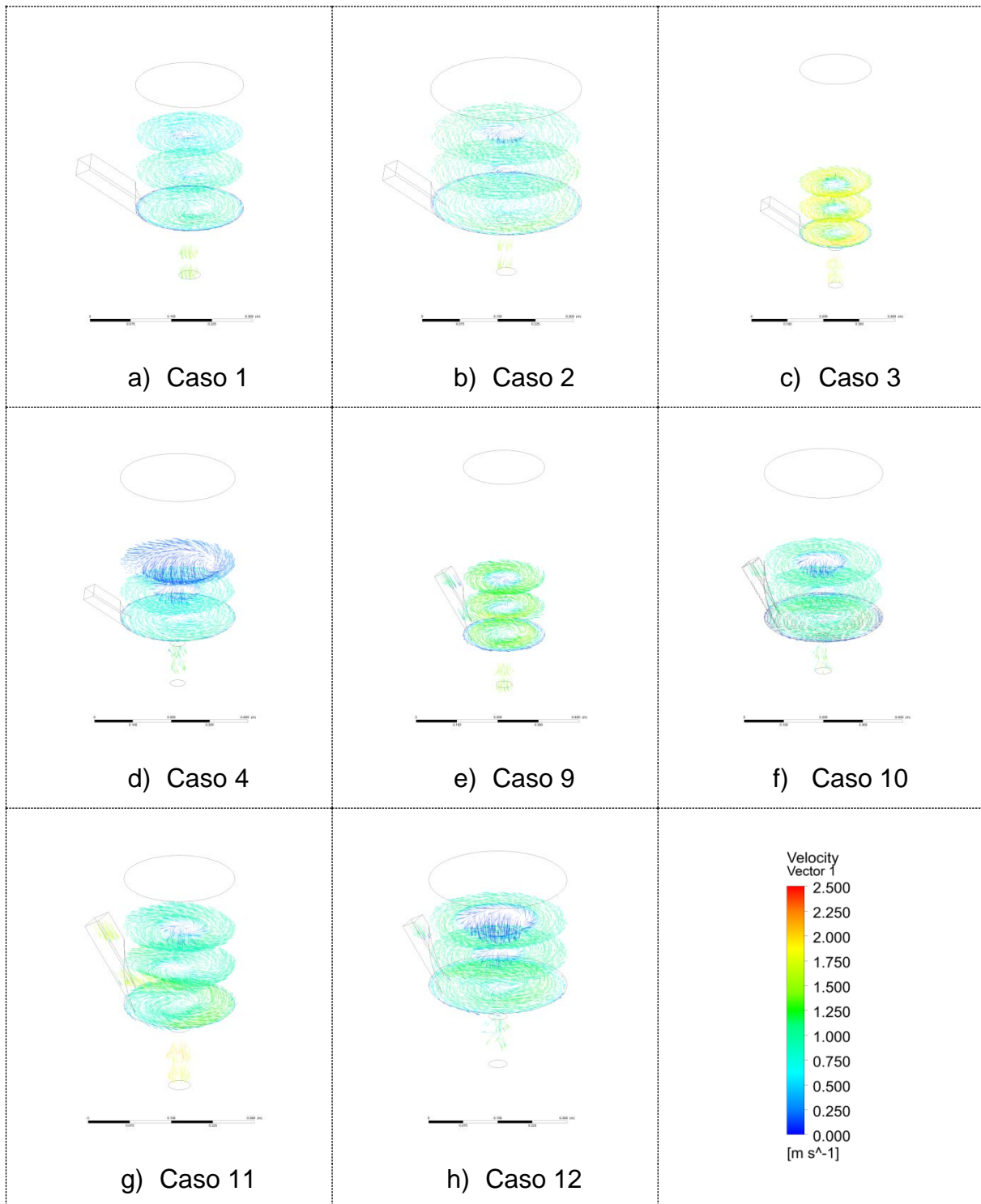


Figura 14. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores sin barrera en planos diferentes dentro de la cámara de mezclado y a la salida del dispositivo.

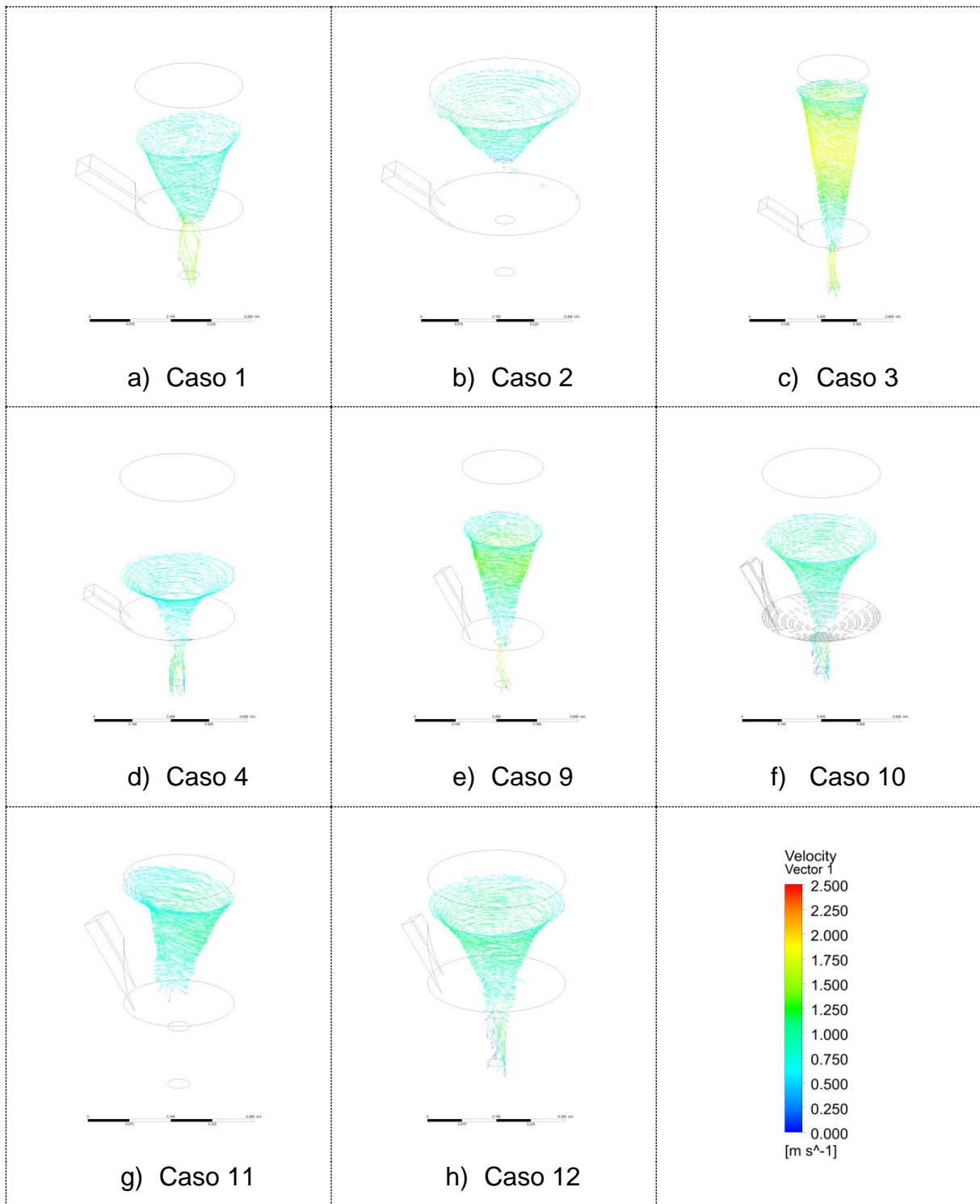


Figura 15. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores sin barrera en la superficie del vórtice.



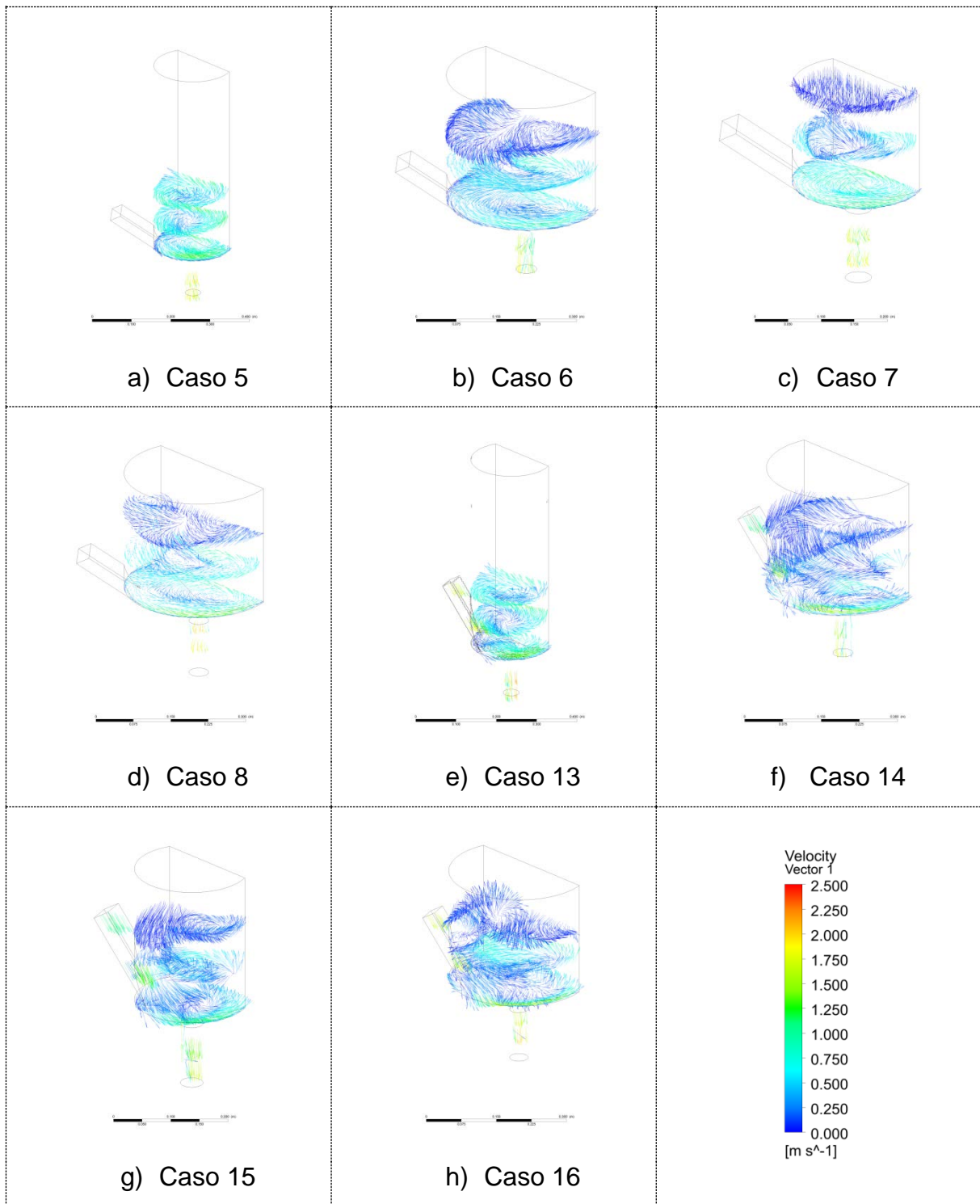


Figura 16. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores con barrera en planos diferentes dentro de la cámara de mezclado y a la salida del dispositivo.

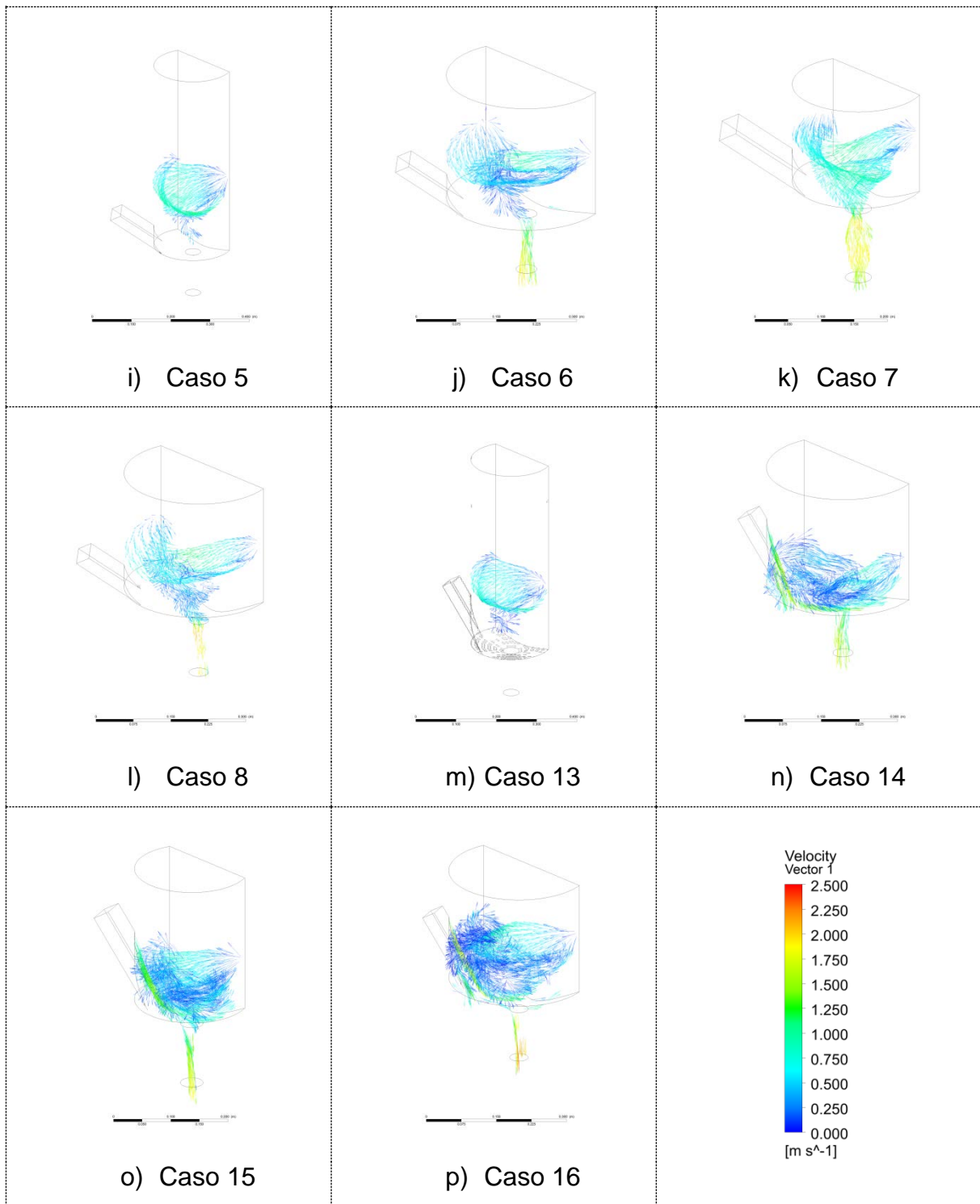


Figura 17. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores con barrera en la superficie del vórtice.



Los vectores de velocidad del metal líquido fueron representados de dos formas para poder comprender de una mejor manera el efecto de las variables de diseño en la velocidad del metal líquido. Se presentan los vectores de velocidad sobre planos paralelos a la base del dispositivo y adicionalmente se trazaron vectores de velocidad sobre la superficie del vórtice. Estas distintas representaciones vectoriales del flujo del fluido se ven plasmadas en la **Figura 14** y **Figura 15** para los casos de los dispositivos sin barrera, mientras que para los dispositivos con barrera se muestran en la **Figura 16** y **Figura 17**.

Nuevamente, la variable con un efecto mayor es la presencia de la barrera, y haciendo una comparación entre la **Figura 14** y la **Figura 16** se puede ver que la eliminación del vórtice modifica los patrones de flujo haciéndolos más caóticos ya que elimina en gran medida la magnitud del movimiento angular haciendo que los vectores tengan diferentes direcciones, preferentemente de arriba hacia abajo. En cambio, en los casos donde no hay barrera se ve un predominio del movimiento angular del metal líquido haciendo un patrón de flujo más suave favoreciendo un aumento de velocidad en comparación con los casos con barrera. Esto también se puede ver en la **Figura 15** y **Figura 17** donde los vectores de velocidad fueron dibujados en los vórtices. Aquí, para los casos sin barrera (**Figura 17**) se confirma que el movimiento es angular mientras que en los casos con barrera el movimiento se hace caótico debido a la turbulencia generada, además, se observa que las velocidades en estos casos son más bajas ya que el metal líquido choca contra la barrera lo cual provoca un decremento en la velocidad.

Además, se puede ver que en todos los casos que la velocidad más grande se encuentra en la salida del dispositivo, lo cual sugiere que estas magnitudes son independientes al flujo de entrada, lo cual implica que se debe ajustar este parámetro para asegurarse que no se llene de más la cámara de mezclado y se corra el riesgo de derramar metal líquido.

De esta forma, una vez más, los dispositivos sin barrera parecen ser la mejor opción para un mejor mezclado, ya que además de ser capaces de generar turbulencias altas combinados con tiempos de residencia más largos, también ofrece patrones de velocidad más estables.



3.3 Análisis cuantitativo de resultados.

Con un análisis cualitativo se ha demostrado que los dispositivos sin barrera ofrecen las mejores condiciones de mezclado así que mediante el uso de curvas C o RTD se calcularon los porcentajes de volúmenes de mezclado, pistón y muertos, que junto con un estudio estadístico se evaluó de forma cuantitativa cuál de los 16 experimentos ofrece el mejor mezclado.

3.3.1 Curvas C

Como se explicó en el **Capítulo 1** estas curvas fueron obtenidas mediante el monitoreo de la concentración a la salida del dispositivo de una pequeña cantidad de un trazador inyectado en los dispositivos y el cálculo empieza con la adición del trazador en la entrada. Las curvas “C” mostradas en la **Figura 18** y **Figura 19** nos arrojan los porcentajes de tres tipos de flujos que son importantes para la evaluación de los dispositivos mezcladores estudiados, estos flujos son: flujo pistón, es aquel sin mezclado; flujo mezclado, es aquel donde el metal líquido y el soluto están mezclados correctamente; y finalmente el flujo muerto, el cual no se debe entender por el volumen estancado en el sistema, sino la fracción del volumen que continua en constante movimiento dentro del dispositivo mezclador y que sale del sistema a un tiempo mucho mayor al tiempo de residencia promedio, lo cual es benéfico porque asegura una mejor incorporación del soluto al metal líquido al tener más tiempo de residencia este volumen muerto. De manera cuantitativa, este flujo es aquel que sale después del tiempo adimensional 2, es decir, aquel que tarda 2 o más veces el tiempo de residencia promedio en salir. Entonces, lo que se busca para la optimización del dispositivo mezclador es disminuir el flujo pistón y aumentar el flujo de mezclado y el flujo muerto.



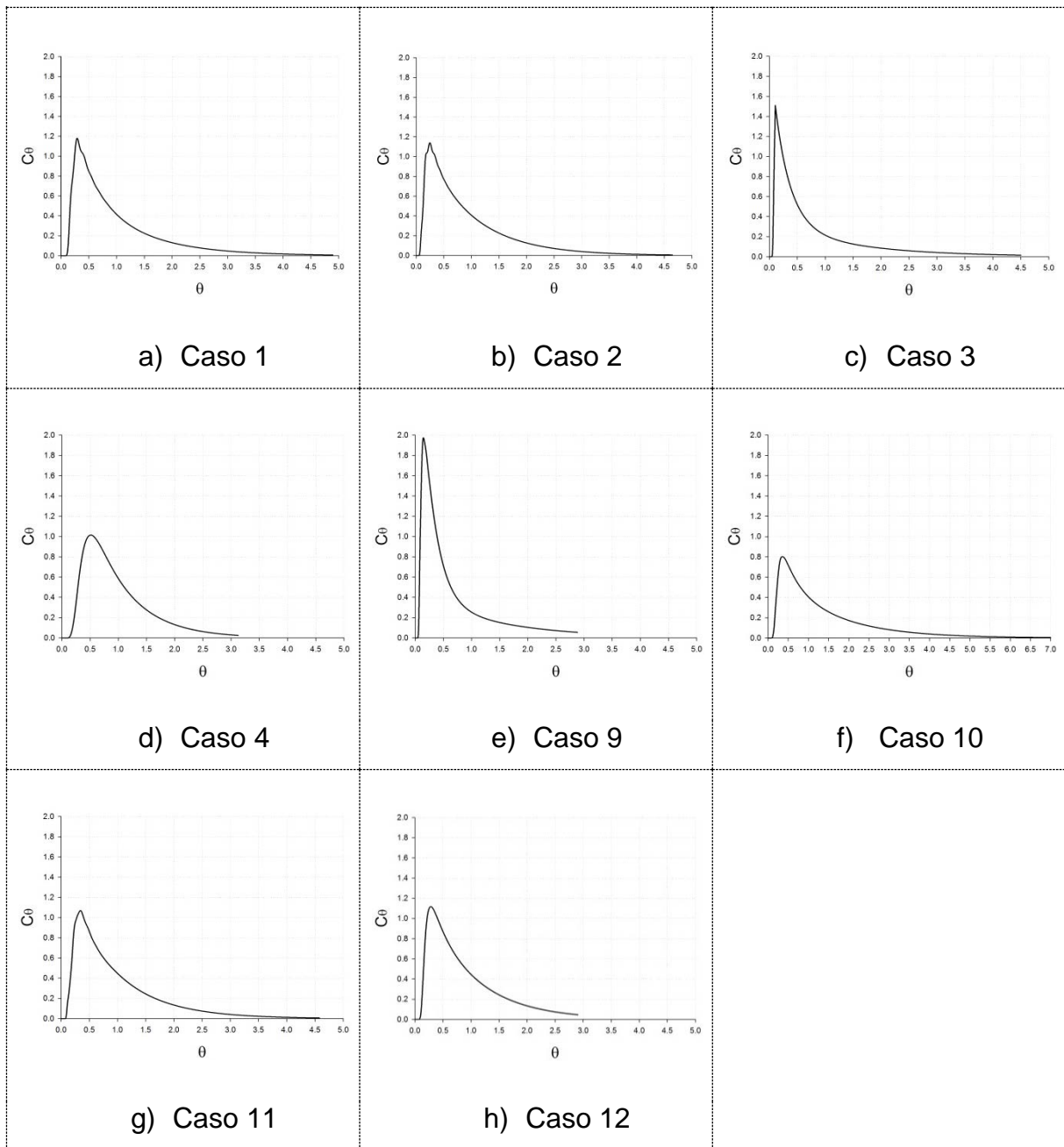


Figura 18. Curvas “C” o Curvas RTD de los casos sin barrera donde θ es el tiempo adimensional y C_θ es la concentración adimensional.

La **Figura 18** muestra las curvas “C” obtenidas para los casos sin barrera, que muestran un comportamiento “común” para curvas con una dispersión grande (Ver **Figura 5**), ya que la concentración adimensional incrementa rápidamente para después bajar exponencialmente con el paso del tiempo. Este tipo de

comportamiento favorece el mezclado entre el soluto y el metal líquido debido a que es muy parecido al flujo en mezcla completa, por lo cual se puede suponer que estos 8 casos de estudio presentan una fracción grande de volumen mezclado y volumen muerto y un pequeño porcentaje de volumen pistón.

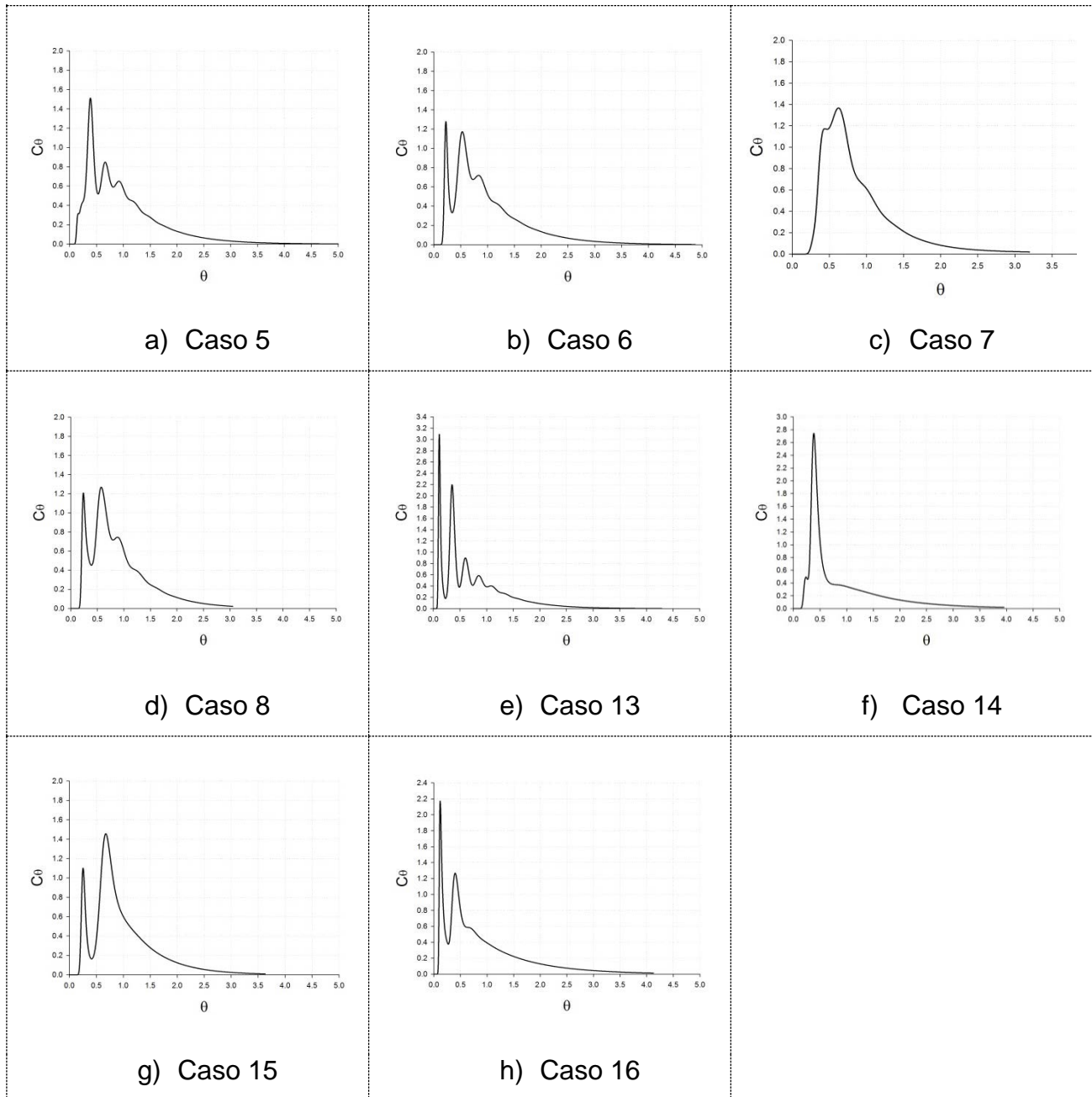


Figura 19. Curvas “C” o Curvas RTD de los casos con barrera donde θ es el tiempo adimensional y C_θ es la concentración adimensional.

La **Figura 19** muestra las curvas “C” de los casos con barrera, y a diferencia de las curvas de los casos con barrera, se puede ver un comportamiento muy diferente ya que en éstas presentan por lo menos 2 máximos, una dispersión más pequeña y no se observa un comportamiento tan “suave” como en las curvas anteriores. Estos picos encontrados nos dicen que la concentración se incrementa rápidamente para desaparecer de la misma forma e incrementar nuevamente, esto se debe a que una fracción del soluto que entra al sistema sale inmediatamente debido al choque que tiene el metal líquido contra la barrera provocando una gran turbulencia y empujando rápidamente el metal líquido junto con el soluto a la salida del sistema. El soluto restante que se queda en el dispositivo para ser mezclado sale de forma no continua, es decir, debido a la misma turbulencia del sistema, pequeños volúmenes del soluto salen del sistema en diferentes tiempos, estos pequeños volúmenes se ven representados en los picos de las curvas “C” para los casos con barrera. Esto no es benéfico ya que se incrementa el porcentaje del volumen pistón y por ende disminuyen los porcentajes de volumen mezclado y volumen muerto, los cuales se tratan de maximizar para un correcto mezclado.

Con el fin de cumplir con un correcto mezclado se debe buscar tener en las curvas máximos pequeños y una dispersión amplia, es decir, curvas que terminen en tiempos adimensionales largos para así garantizar tiempos de residencia largos. Una vez más, los casos que nos dan estas características buscadas son los casos sin barrera.

3.3.2 Análisis estadístico con base en los porcentajes de volumen mezclado, muerto y pistón.

Los resultados obtenidos de los porcentajes de volúmenes pistón, mezclado y muerto son presentados en la **Tabla 5**, adicional a esto, se encuentra el tiempo de residencia promedio y también la suma del porcentaje del volumen mezclado y el volumen muerto, esto se debe a que son los dos tipo de flujo que buscamos



maximizar con el fin de garantizar un correcto mezclado. En este estudio se realizó un análisis estadístico factorial fraccional con el fin de hacer un análisis cuantitativo sobre el efecto que tiene cada una de las variables de forma independiente y combinadas sobre el la suma de los volúmenes de mezclado y muertos que son los que nos interesan en este trabajo.

Caso	Volumen pistón (%)	Volumen mezclado (%)	Volumen muerto (%)	Volumen mezclado + Volumen muerto (%)	Tiempo de residencia promedio (s)
1	9.12	78.6929	12.1871	90.88	3.4986
2	5.03	84.5049	10.4651	94.97	7.2014
3	8.76	88.1340	3.1060	91.24	3.8690
4	11.46	81.3953	7.1447	88.54	6.2743
5	9.19	81.7333	9.0767	90.81	2.0681
6	13.14	77.2858	9.5742	86.86	3.4550
7	18.94	76.3524	4.7076	81.06	1.4629
8	14.79	79.412	5.798	85.21	2.6700
9	4.51	88.7334	6.7566	95.49	6.4521
10	9.31	67.5533	23.1367	90.69	6.0900
11	7.72	81.4773	10.8027	92.28	3.2762
12	7.69	84.8733	7.4367	92.31	8.7471
13	6.23	88.4689	5.3011	93.77	2.6310
14	13.45	75.3672	11.1828	86.55	2.0300
15	15.52	77.4242	7.0558	84.48	1.5850
16	6.6	82.6423	10.7577	93.4	2.8714

Tabla 5. Resultados obtenidos de las curvas “C” del diseño de experimentos de los porcentajes del volumen pistón, mezclado y muerto, además del tiempo de residencia promedio.

De acuerdo a los datos presentes en la **Tabla 5** se puede corroborar cuantitativamente que los dispositivos sin barrera son los que presentan una mejor capacidad para la incorporación de solutos en metal líquido, ya que son los que presentan un porcentaje mayor de volumen de mezclado y volumen muerto, mientras que los dispositivos con barrera aumentan el porcentaje de volumen



pistón presente en el sistema. De esta forma, solo queda determinar el efecto de las demás variables en el mezclado dentro de los dispositivos sin barrera.

	Efecto D	Efecto α	Efecto barrera	Efecto β	Efecto Q
%Volumen mezclado + %Volumen muerto	-0.1850	-2.6875	-4.2825	2.4250	3.2750
Tiempo de residencia promedio	1.8120	-0.3338	-3.3294	0.3979	-0.3535
%Volumen pistón	0.1850	2.6875	4.2825	-2.4250	-3.2750

Tabla 6. Efecto independiente de cada variable sobre la suma de los volúmenes de mezclado y muerto, sobre el tiempo de residencia promedio y sobre el volumen pistón.

En la **Tabla 6** se presentan el efecto de las 5 variables principales de diseño consideradas en este estudio sobre la suma de volúmenes de interés (mezclado y muerto), tiempo de residencia promedio y el volumen pistón. De la tabla, se puede ver que la variable que más afecta el desempeño del dispositivo mezclador es, como ya se ha mencionado a lo largo del trabajo, la presencia o ausencia de una barrera y, por otro lado, la variable que parece tener un menor impacto es el diámetro de la cámara.

Un aumento en el diámetro de la cámara (**D**) disminuye el porcentaje de la suma de volúmenes de interés un 0.185% y aumenta el porcentaje del volumen pistón en el sistema en 0.185%. Con relación al tiempo de residencia promedio el aumento del diámetro aumenta el tiempo de residencia 1.812 segundos. Es decir, los cambios que provoca esta variable son muy pequeños con respecto a los volúmenes de mezclado y muerto, así que se pueden despreciar estos cambios tomando solo en cuenta el aumento de 1.812 segundos en el tiempo de residencia. Por lo tanto, el uso del diámetro mayor es mejor opción para los dispositivos mezcladores.

Incrementar el ángulo de la sección troncocónica (**α**) de la cámara de mezclado disminuye en un 2.6875% la suma del porcentaje de los volúmenes de mezclado y muerto, y también disminuye, aunque en muy poca medida, el tiempo de residencia promedio un 0.3338%. Por otro lado, el uso del ángulo mayor



aumenta el porcentaje del volumen pistón un 2.6875%. De acuerdo con esto, el uso de un ángulo pequeño proporciona mejores condiciones para el mezclado.

Confirmando lo ya dicho con anterioridad, la presencia de una barrera física implica un efecto negativo para el mezclado ya que disminuye el porcentaje de la suma de volúmenes mezclado y muerto y el tiempo de residencia promedio un 4.2825% y 3.3194 segundos respectivamente. Al mismo tiempo, la presencia de una barrera aumenta el porcentaje de volumen pistón un 4.2825%. Así pues, la variable con más impacto es la presencia o ausencia de una barrera, donde los dispositivos sin barrera representan la opción idónea para maximizar el mezclado en los dispositivos mezcladores.

Un aumento en ángulo de la entrada (β) del metal líquido aumenta el volumen de mezclado junto con el volumen muerto y disminuye el volumen pistón sin cambiar significativamente los tiempos de residencia promedio, entonces, aumentar el ángulo β mejoraría el mezclado en los casos de estudio.

Aumentar el gasto volumétrico (Q) del metal líquido modifica ligeramente los tiempos de residencia promedio, disminuye el volumen del flujo pistón, además incrementa significativamente el volumen de mezclado y volumen muerto en el sistema en un 3.275%. Un incremento en el gasto volumétrico mejora las propiedades de mezclado de los dispositivos.

Entonces, el dispositivo mezclador óptimo es aquel que tenga un diámetro grande, sin barrera, con un ángulo de la sección troncocónica pequeño, un ángulo de entrada del metal líquido grande y un gasto volumétrico alto.

	Efecto $D*\beta$	Efecto $D*Q$	Efecto $\beta*Q$	Efecto $\alpha*Barrera$	Efecto $\beta*D*Q$
%Volumen mezclado + %Volumen muerto	-0.5825	-0.7725	-0.4475	-0.7725	0.5600
Tiempo de residencia promedio	-0.3635	-0.0649	-0.6329	-0.0649	0.1435
%Volumen pistón	0.5825	0.7725	0.4475	0.7725	-0.5600

Tabla 7. Efecto de las variables combinadas sobre la suma de los volúmenes de mezclado y muerto, sobre el tiempo de residencia promedio y sobre el volumen pistón

Con el fin de corroborar los resultados obtenidos con el análisis de cada una de las variables de diseño, se realizó un análisis del efecto de las variables combinadas (Ver **Tabla 7**). Se reitera que el dispositivo óptimo para un mejor mezclado implica usar los valores máximos del diámetro, ángulo de la entrada del dispositivo y del gasto volumétrico, así como valores mínimos para el ángulo de la sección troncocónica y el uso de dispositivos sin barrera.

Aumentar entonces, el diámetro y el ángulo de entrada del dispositivo disminuye ligeramente el volumen de mezclado y volumen muerto junto con el tiempo de residencia promedio y aumenta el volumen pistón aunque igualmente en poca medida. Lo mismo pasa al aumentar el diámetro con el gasto volumétrico y el ángulo de entrada con el gasto volumétrico. Entonces analizando la influencia que tiene estas tres variables juntas se puede ver que beneficia al mezclado si aumentamos estas 3 variables que es precisamente lo que se analizó con las variables independientes. También se desprende de los efectos combinados, que estos son mucho menores que los efectos individuales de cada variable.

Capítulo 4 Conclusiones

La optimización de un dispositivo mezclador, tomado de una patente abierta por su diseño sencillo y fácil implementación a gran escala, se llevó a cabo mediante el análisis de la fluodinámica de un fluido metálico desarrollando un modelo matemático para la resolución de una malla de 16 experimental donde se vio la influencia de 5 variables de diseño y operación. El modelo matemático se desarrolló con ayuda del software CFD ANSYS FLUENT 14 usando con el fin de simular la fluodinámica en un sistema bifásico metal líquido-aire dentro del dispositivo mezclador.

El modelo matemático consistió en la resolución de los principios de conservación de masa y momentum estableciendo las suposiciones, ecuaciones gobernantes y condiciones de frontera adecuadas. La estrategia de solución del cálculo consistió en hacer la simulación de los casos en 2 etapas, la primera es la simulación de la hidrodinámica para el análisis de turbulencia y velocidad; y la segunda etapa es la simulación del mezclado con el fin de obtener las curvas RTD.

Las conclusiones obtenidas de las simulaciones son las siguientes:

- Las variables que cuantitativamente presentan una mayor influencia sobre la habilidad de mezclado de los dispositivos mezcladores son la presencia o ausencia de una barrera y el gasto volumétrico del metal líquido (**Q**) que se alimenta al dispositivo.
- Se obtuvo un diseño óptimo, el cual asegura un mezclado correcto, analizando de forma cualitativa y cuantitativa el efecto de cada variable sobre la capacidad de mezclado del dispositivo. Este diseño óptimo no se puede exponer de forma explícita en esta tesis por razones de confidencialidad con la empresa que financió el estudio.



Bibliografía

- [1] N. Harnby, M. F. Edwards, A. W. Nienow, "Mixing in the Process Industries", Segunda edición, Ed. Butterworth Heinemann, 1992.
- [2] N. Kockmann, "Transport Phenomena in Micro Process Engineering", Ed. Springer, 2007.
- [3] Patente US 4034970, "Method and device for nodularizing cast iron", (1977).
- [4] Octave Levenspiel, "Ingeniería de las Reacciones Químicas", Editorial Reverté, Barcelona 1986, pp. 304.
- [5] C. W. Hirt, B. D. Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries", Journal of Computational Physics, Volume 39, 1981
- [6] Julian Szekely, "Fenómenos de Flujo de Fluidos en Procesamiento de Metales", Editorial Limusa, México 1988, pp.100
- [7] Iacovides H., "The computation of turbulent flow through stationary and rotating u-bends with rib-roughened surfaces", International Journal for numerical methods in fluids No. 29, 1999.
- [8] J. Szekely, "Fluid Flow Phenomena in Metal Processing", Ed. Academic Press, New York, 1979.
- [9] Y. Sahai y T. Emi, "Melt flow characterization in continuous casting tundishes", ISIJ International, Vol 36, 1996.



Listado de figuras

Figura 1. Espectro de problemas de mezclado.

Figura 2. Dispositivo mezclador seleccionado y sus principales características geométricas. a) Vista lateral, b) Vista superior (sin barrera), c) Vista superior (con barrera). D =diámetro del dispositivo, α =ángulo troncocónico, β =ángulo de entrada, d =diámetro salida, H = altura dispositivo, b =altura tubo salida, n =distancia de barrera a centro.

Figura 3. Curvas RTD (Residence Time Distribution) para reactores cerrados y continuos, donde se observa un flujo totalmente mezclado, un flujo totalmente pistón y tres casos intermedios.

Figura 4. Plano del diseño final de un dispositivo sin barrera (D =Diámetro del dispositivo, β =Ángulo de la entrada y α =Ángulo de la sección troncocónica).

Figura 5. Plano del diseño final de un dispositivo con barrera (D =Diámetro del dispositivo, β =Ángulo de la entrada y α =Ángulo de la sección troncocónica).

Figura 6. Ilustración del mallado del dispositivo mezclador sin barrera

Figura 7. Ilustración del mallado del dispositivo mezclador con una barrera física.

Figura 8. Vórtices generados en los 8 casos que no cuentan con una barrera física.

Figura 9. Vórtices generados en los 8 casos que cuentan con una barrera física.

Figura 10. Resultados de turbulencia de los 8 dispositivos que no cuentan con barrera.

Figura 11. Resultados de turbulencia de los 8 dispositivos que presentan barrera.

Figura 12. Trayectoria y velocidad de las partículas trazadoras dentro del dispositivo mezclador con ausencia de una barrera.

Figura 13. Trayectoria y velocidad de las partículas trazadoras dentro del dispositivo mezclador con presencia de una barrera.

Figura 14. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores sin barrera en planos diferentes dentro de la cámara de mezclado y a la salida del dispositivo.

Figura 15. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores sin barrera en la superficie del vórtice.



Figura 16. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores con barrera en planos diferentes dentro de la cámara de mezclado y a la salida del dispositivo.

Figura 17. Vectores de velocidad de los dispositivos mezcladores con barrera en la superficie del vórtice.

Figura 18. Curvas "C" o Curvas RTD de los casos sin barrera donde θ es el tiempo adimensional y C_θ es la concentración adimensional.

Figura 19. Curvas "C" o Curvas RTD de los casos con barrera donde θ es el tiempo adimensional y C_θ es la concentración adimensional.

Listado de tablas

Tabla 1. Malla experimental.

Tabla 2. Muestra los valores de las constantes utilizadas en el modelo k-epsilon.

Tabla 3. Propiedades físicas de los materiales utilizados.

Tabla 4. Valores máximos y mínimos de turbulencia para cada uno de los casos de estudio.

Tabla 5. Resultados obtenidos de las curvas “C” del diseño de experimentos de los porcentajes del volumen pistón, mezclado y muerto, además del tiempo de residencia promedio.

Tabla 6. Efecto independiente de cada variable sobre la suma de los volúmenes de mezclado y muerto, sobre el tiempo de residencia promedio y sobre el volumen pistón.

Tabla 7. Efecto de las variables combinadas sobre la suma de los volúmenes de mezclado y muerto, sobre el tiempo de residencia promedio y sobre el volumen pistón

Listado de símbolos

D	Diametro de la camara mezcladora.
d	Diametro de la salida del dispositivo mezclador.
β	Angulo de inclinación de la entrada del metal líquido.
α	Angulo de inclinación de la seccion troncoconica.
Q	Gasto volumetrico del metal liquido.
θ	Tiempo adimensional.
C_θ	Concentración adimensional.
P	Presión
t	Tiempo
v	Vector de velocidad
g	Constante de gravedad
ρ	Densidad
μ	Viscosidad
ξ	Fraccion de volumen
k	Energia cinetica turbulenta
ε	Rapidez de disipación
$D_{C,l}$	Coefficiente de difusión molecular del trazador en la fase líquida
S_{Ct}	Numero de Schmidt turbulento
V	Volumen del metal líquido
\bar{t}	Tiempo medio de residencia
\bar{C}	Concentración media
m_t	Masa del trazador
$C_{\theta i}$	Concentración adimensional a un tiempo determinado
$\Delta\theta$	Incremento del tiempo adimensional.
$\bar{\theta}_c$	Tiempo medio de residencia desde $\theta=0$ hasta $\theta=2$
θ_{min}	Tiempo adimensional donde se registra por primera vez el trazador